Technische Universität Darmstadt
Fachbereich Mathematik
Prof. Dr. Alexander Martin
Agnes Dittel
17. Mai 2006

4. Übungsblatt

Gruppenübungen

G10 Gegeben seien die Ungleichungssysteme

$$(1)\ \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \leq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad (2)\ \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \leq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

mit $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$.

Begründen Sie, warum diese beiden Systeme das selbe Polyeder definieren.

Sind die Systeme jeweils TDI?

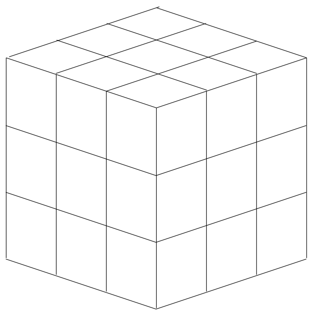
G11 Sei $a \in \mathbb{Z}^n$, $\alpha \in \mathbb{Z}$ und $P_I := \operatorname{conv}(\{x \in \mathbb{Z}^n \mid a^{\mathrm{T}} x \leq \alpha\})$. Weiterhin sei $k = \gcd(a_1, ..., a_n)$ der größte gemeinsame Teiler der Komponenten von a.

Zeigen Sie mit Hilfe des ganzzahligen Analogon des Farkas-Lemma (Satz 2.27), dass

$$P_I = \left\{ x \in \mathbb{R}^n \mid \sum_{i=1}^{n} \frac{a_i}{k} x_i \leq \left\lfloor \frac{\alpha}{k} \right\rfloor \right\}.$$

G12 27 kleine Würfel sollen zu einem großen $3 \times 3 \times 3$-Würfel (siehe Abbildung) zusammengesetzt werden. In dem großen Würfel nennen wir drei kleine Würfel eine *Linie*, falls sie parallel zu einer Kante des großen Würfels aufgereiht liegen, eine Diagonale parallel zu einer der Seitenflächen des großen Würfels bilden, oder eine Raumdiagonale in dem großen Würfel bilden.

(*Tipp:* Es gibt hier insgesamt 49 Linien.)



Wir suchen nun eine Anordnung von 13 kleinen weißen und 14 kleinen schwarzen Würfeln mit möglichst wenigen Linien, welche aus gleichfarbigen Würfeln bestehen.

Formulieren Sie ein ganzzahliges Programm zur Lösung dieses Problems.

Hausübungen

H10 (5 Punkte)

Sei A eine ganzzahlige $m \times n$-Matrix und b ein ganzzahliger Vektor.

Zeigen Sie:

Das Polyeder $P = \{x \mid Ax \le b,\ x \ge 0\}$ ist ganzzahlig genau dann, wenn das Polyeder $\tilde{P} = \{((x,z)^{\mathrm{T}} \mid [A\ I](x,z)^{\mathrm{T}} = b,\ x, z \ge 0\}$ ganzzahlig ist.

H11 (5 Punkte)

Sei $G = (V, E)$ ein Graph und C ein ungerader Kreis in G. Betrachte das lineare Programm

$$\max\{c^{\mathrm{T}}x \mid 0 \le x,\ x_i + x_j \le 1\ \forall \{i,j\} \in E\}$$

mit $c = \chi^{V(C)}$.

Zeigen Sie:

a) $x_i^* = \frac{1}{2}$ für alle Knoten $i \in V(C)$, $x_i^* = 0$ für $i \notin V(C)$, löst das lineare Programm.

b) x^* ist keine Konvexkombination von Inzidenzvektoren von stabilen Mengen in G.

H12 (5 Punkte)

Eines der bedeutendsten offenen Probleme der Biochemie ist die Bestimmung der dreidimensionalen Struktur eines Proteins aus seiner Aminosäuresequenz, da diese die Funktionalität des Proteins bestimmt. Die klassischen Methoden zur Bestimmung räumlicher Konformationen, wie Röntgenkristallographie und NMR-Spektroskopie, haben sich als zu aufwändig und zeitintensiv erwiesen. Im Gegensatz dazu ist heutzutage die Sequenzierung von Proteinen bereits sehr schnell und einfach durchführbar und es wird allgemein angenommen, dass die räumliche Struktur eines Proteins bereits in seiner Aminosäuresequenz kodiert ist.

Zur kombinatorischen Modellierung des Proteinfaltungsproblems existieren vielfältige Ansätze. Ein sehr bekanntes und viel studiertes Modell ist das sogenannte *HP-Modell* von Ken A. Dill.

Dabei wird die Aminosäuresequenz als eine Kette von äquidistant aufgereihten schwarzen und weißen Kugeln aufgefasst, wobei eine schwarze Kugel einer hydrophoben (H) und eine weiße Kugel einer polaren (P) Aminosäure entspricht. Diese Kette wird als „HP-String" kodiert, d. h. als ein Wort über dem Alphabet $\{H, P\}$.

Weiterhin ist ein Gitter gegeben, welches durch einen ungerichteten Graphen (V, E) repräsentiert wird, gegeben. Die Kette soll nun überschneidungsfrei auf das Gitter gelegt werden, so dass jede Kugel auf einem Gitterpunkt liegt und möglichst viele schwarze Kugeln (H) auf benachbarten Gitterpunkten liegen, d. h. die Anzahl der Kanten von G, auf deren beiden Endknoten jeweils eine schwarze Kugel liegt, soll maximal sein.

Gängige Gittertypen sind Rechteck- bzw. Dreieckgitter (siehe Abbildung).

a) Formulieren Sie ein ganzzahliges Programm, welches die Problemstellung modelliert.

b) Implementieren Sie Ihr Modell in ZIMPL, und bestimmen Sie mit SCIP jeweils optimale Faltungen für folgende Probleminstanzen:

   (i) HPPHHPPHPPHP auf einem 4×4-Rechteckgitter

   (ii) HPPHHPPHPPHP auf einem 4×4-Dreieckgitter

   (iii) HPHPHPHHPHPH auf einem 4×4-Rechteckgitter

   (iv) HPHPHPHHPHPH auf einem 4×4-Dreieckgitter