Bioinformatik I, WS00/01
Übungsblatt 10

Besprechung am 8.02.2001

1 Sampling von Self-Avoding Walks

Die Algorithmen *Myopic Self Awoiding Walk (MSAW)* und *Elementary Simple Sampling (ESS)* generieren beide zufällige *Self-Avoiding Walks*. Nur die zweite Methode erzeugt die Walks gleichverteilt. Die erstere liefert dagegen bevorzugt kompakte Walks. Implementieren Sie beide Verfahren für Walks im kubischen Gitter Z^3. Erzeugen Sie dann mit beiden Verfahren jeweils N zufällige Walks $W = w_1, \ldots, w_n$ der Länge n und schätzen Sie aus diesem Sampling den Erwartungswert und die Varianz der euklidischen Distanz von Anfangspunkt w_1 und Endpunkt w_n, wobei $w_i = (w_i^x, w_i^y, w_i^z)$ den i-ten Punkt des Walks W bezeichnet. Berechnen Sie diese Werte für genügend grosse N und einige n. Interpretieren Sie Ihre Ergebnisse.

Algorithmen

```
Myopic Self-Avoiding Walk (MSAW)
 1: w(0) := (0,0,0); i := 0;
 2: i := i+1;
    if i = N then return(w);
    else NB = {neigbours of w(i-1)}\{w(0) ... w(i-1)};
         if NB = {} then goto 1;
         else w(i) := Random(NB);
              goto 2;
         endif
    endif

Elementary Simple Sampling (ESS)
 1: w(0) := (0,0,0); i := 0;
 2: i := i+1;
    if i = N then return(w)
    else w(i) := Random({neighbours of w(i-1)});
         if w(i) = w(j) for some j<i then goto 1;
         else goto 2; endif
    endif
```