

ממן 14 חישוביות ביולוגית

שאלה 1

נראה שאפשר לקחת גרף ולבנות נוסחה בפורמט 3CNF שהשמה שמספקת אותה, תפתור את בעיית 3coloring בגרף שלנו (במילים אחרות, נראה סוג של רדוקציה מבעיית 3coloring לבעיית 3SAT - אבל אין צורך להקפיד על כך שיהיו בדיוק 3 משתנים ב-clause).

כל צומת בגרף יסומן x_i , וצביעה של צומת בצבע מסוים תסומן עם האות הראשונה של הצבע הזה - למשל צביעה של צומת 1 באדום תסומן x_{1r} . עבור כל שני צמתים x_i, x_j , אם הם מחוברים בקשת צריך להוסיף clause-ים של

$$(x_{ir}' \vee x_{jr}')$$

$$(x_{ib}' \vee x_{jb}')$$

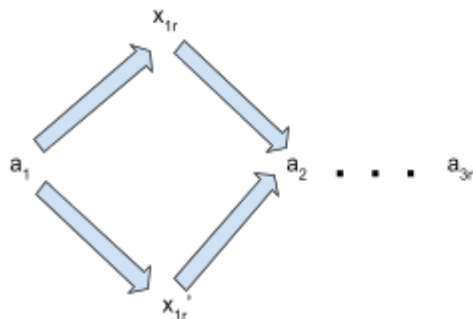
$$(x_{ig}' \vee x_{jg}')$$

כלומר, עבור כל צבע בדיוק אחד מהם יכול להיות True.

אבל אם כל הצמתים הם False - כלומר חסרי צבע - נקבל שהנוסחה מסופקת! לכן עלינו להוסיף clause נוסף שיודא שכל צומת מקבל לפחות צבע אחד (יותר מצבע אחד - ניתן פשוט לבחור אחד מהם).

$$(x_{jb}' \vee x_{jr}' \vee x_{jg}')$$

עכשיו ניתן לעשות דבר מאוד דומה לאלגוריתם המולקולרי שנכתב עבור נוסחת 3SAT.
נבנה את הגרף:



שלב 1:

כל צומת וכל שלילה של צומת מקבלים רצף של 20 נוקלאוטידים שמייצגים אותם.

שלב 2:

נג'רט מולקולות עבור הצמתים ועבור הקשתות.
כל צומת יקבל את הרצף המשלים לרצף שמייצג אותם.
כל קשת תורכב מ-10 האחרונים של הצומת שממנו יוצאת ו-10 הראשונים של הצומת שאליו הקשת נכנסת (אלא אם כן הקשת יוצאת מהצומת הראשון - a_1 , שאז תקבל את כל ה-20 של צומת a_1 ואחריהן את ה-10 הראשונות של הצומת שאליו נכנסת הקשת, או אם הקשת נכנסת לצומת האחרון a_{3n} שאז תקבל את ה-10 האחרונות של הצומת שממנו היא יוצאת ואת כל ה-20 של הצומת האחרון).

שלב 3:

בעזרת תגובת לגיאציה, גדילי ה-DNA יתאחדו לסילי DNA כפולים.
בגלל הצורה שבה קידדנו, נקבל מולקולות שמייצגות מסלולים בגרף.

שלב 4:

נבצע PCR על מולקולות שמעניינות אותנו במטרה להגדיל את הכמות שלהן:
אלו מולקולות שמתחילות ב- a_1 ומסתיימות ב- a_{3n} .

שלב 5:

נבצע אלקטרופורזה בג'ל כדי לסנן את המולקולות שאינן באורך 120n:
אם מספר הצמתים בגרף המקורי הוא n, בגרף שלנו יש 3n עבור כל צבע של צומת בגרף המקורי וגם 3n שהם השלילה, ועוד 3n צמתים מקשרים.
מסלול אמור לעבור בכל צומת של צבע או שלילתו (אף פעם לא שניהם!), וכמובן בכל הצמתים המקשרים. סה"כ זה 6n צמתים, ואורך כל קידוד של צומת הוא 20 בסיסים. ולכן אורך המולקולה צריך להיות 120n בסיסים.

שלב 6:

נרצה לסנן מולקולות שלא מתאימות ל clauses.
נעשה זאת בעזרת הפרדה מגנטית.
עבור כל clause:
עבור כל צומת שמופיע ב clause:
נבצע עליו הפרדה מגנטית כדי לחלץ מולקולות שמכילות אותו.
נאחד את כל המולקולות שהתקבלו ב clause.
אלו הן מולקולות שעבורן יש השמה חיובית ל clause.
המשך את האלגוריתם איתן.

מכיוון שבין כל ה clauses יש AND, זה נכון לבצע את ההפרדה המגנטית רק על המולקולות שעברו את כל ה clauses שהיו עד עכשיו.

שאלה 2

הבדלים בין מעבדה אמיתית לוירטואלית:

- זמן ריצה - אין באמת מקביליות כמו עם מולוקולות, למשל בלגיაცיה. זהו כנראה ההבדל החשוב ביותר, כי אם באמת היה אפשר להריץ את האלגוריתם בקוד ביעילות של תגובות כימיות אמיתיות (כלומר פולינומיאלית) אז אפשר היה להראות ש $NP=P$.
- ההסתברות לכישלון נקבעת על ידינו ואיננה באמת כמו במעבדה.
- תגובות כימיות פשוט מתרחשות: אנחנו לא מכינים את האנזימים והטמפרטורה וכל מה שנדרש כמו במעבדה אמיתית.
- כנ"ל לגבי קידוד המולקולות: אין לנו צורך להסתבך עם מה שזה לא יהיה שעושים במעבדה כדי לקודד מולקולה עם בסיסים ספציפיים.