

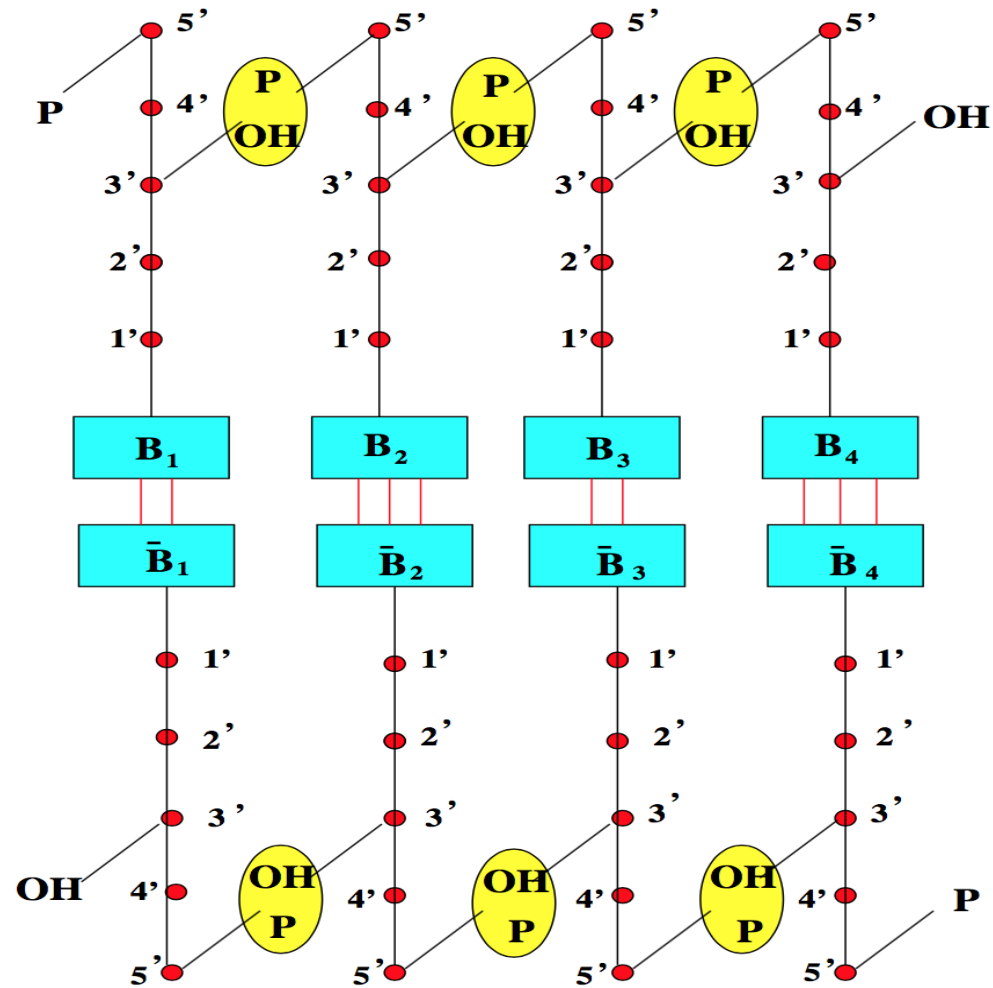
Computación molecular sin memoria basada en ADN

Problemas de generación de permutaciones y camino hamiltoniano

Sergio Rodríguez Calvo, Septiembre 2017.

Computación Bioinspirada (MULCIA), Universidad de Sevilla.

ADN



Computación Molecular

- Tubo de ensayo contiene una solución con cadenas simples de ADN (oligos).
- Automatización de procesos sobre los tubos que realizan operaciones abstractas, tales como, medir, sumar, etc.
- Necesario un modelado y representación del problema adecuado para este tipo de computación.

Operaciones con moléculas de ADN

Algunos ejemplos de operaciones son:

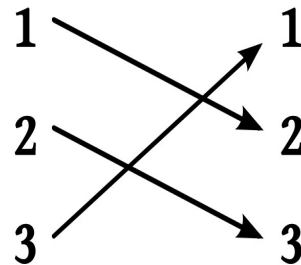
- Desnaturalización: separar doble hebra calentando solución hasta un rango de 85°C - 95°C.
- Extracción: extraer de un tubo todas las moléculas que contienen una determinada subcadena, utilizando el método de las sondas metálicas.
- Cortar cadenas: uso de enzimas endonucleasas que cortan cadenas (simples o dobles) por cualquier sitio.

Modelo débil de Amos

- Tubo de ensayo con un multiconjunto finito de cadenas con alfabeto $\{A, C, G, T\}$.
- Operaciones en el modelo débil de Amos (primitivas) son:
 - $\text{Quitar}(T, \{s_1, \dots, s_n\})$.
 - $\text{Copiar}(T, \{T_1, \dots, T_n\})$.
 - $\text{Unión}(\{T_1, \dots, T_n\})$.
 - $\text{Selección}(T)$.

Problema de la generación de permutaciones

- Permutación:



- Problema: *dado un numero natural n mayor o igual que 2, generar todas las permutaciones de orden n .*

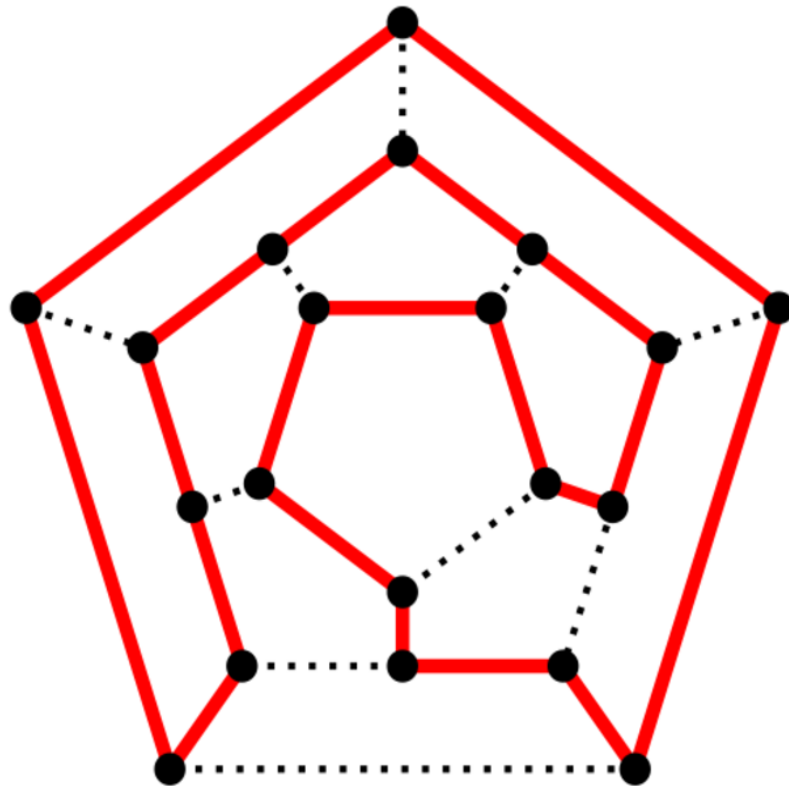
Diseño molecular

- Alfabeto (p_i, c_j) para todo i, j entre $[1, n]$.
- Dado un tubo de entrada T_0 que contiene todas las posibles sucesiones:

```
PARA j = 1 hasta n - 1 HACER:  
  copiar( $T_0$ ,  $\{T_1, \dots, T_n\}$ )  
  PARA i = 1 hasta n HACER:  
    quitar( $T_i$ ,  $\{\}$ )  
  union( $\{T_1, \dots, T_n\}$ ,  $T_0$ )  
DEVOLVER  $T_0$ 
```

Verificación formal

Problema del camino hamiltoniano



Diseño molecular

- Alfabeto (p_i, c_j) para todo i, j entre $[1, n]$.
- Dado un tubo de entrada T_0 que contiene todas las posibles sucesiones:

```
PARA  $i = 1$  hasta  $n - 1$  HACER:  
     $T_0 = \text{quitar}(T_0, \{\})$   
DEVOLVER seleccionar( $T_0$ )
```

Verificación formal

Gracias



