

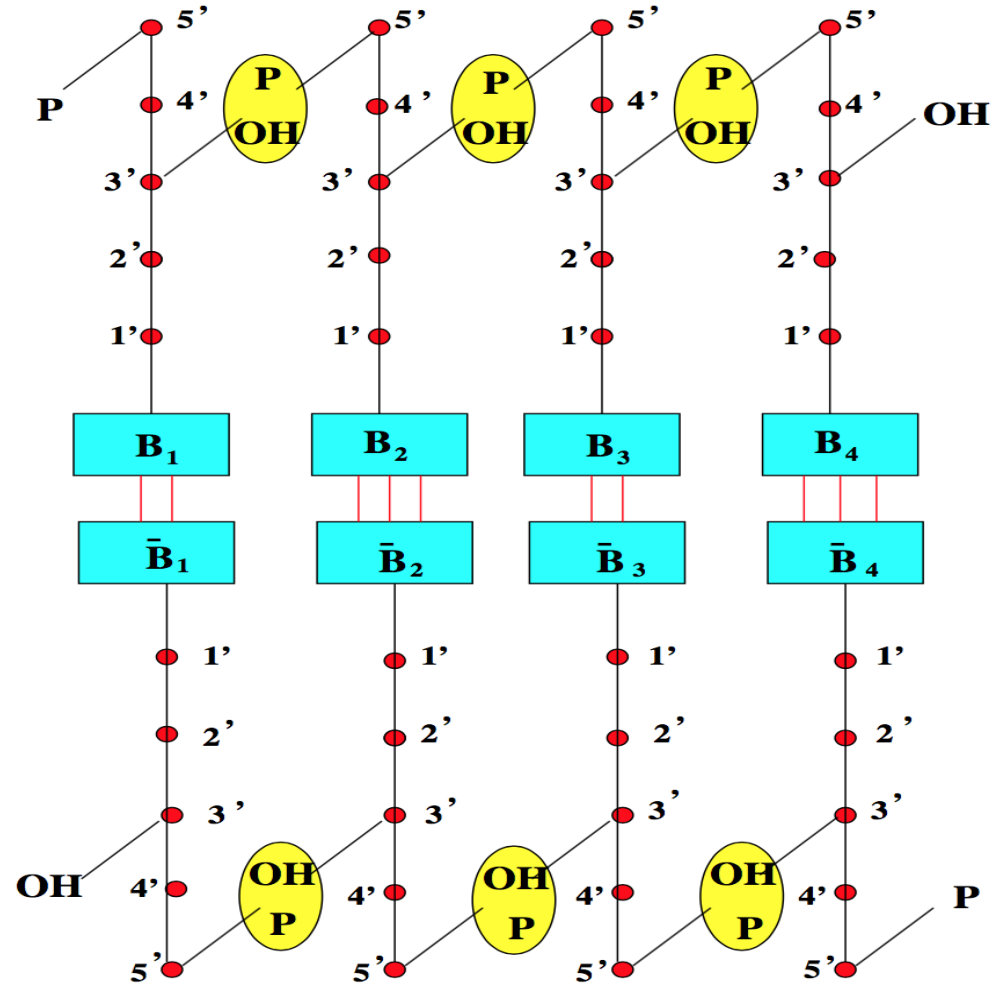
Computación molecular sin memoria basada en ADN

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:

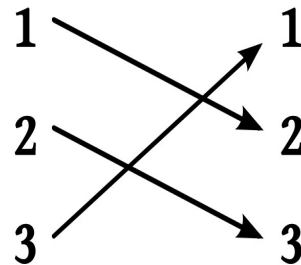
- Desnaturalización: separar doble hebra calentando solución hasta un rango de 85°C - 95°C.
- Extracción: extraer de un tubo todas las moléculas que contienen una determinada subcadena, utilizando el método de las sondas metálicas.
- Cortar cadenas: uso de enzimas endonucleasas que cortan cadenas (simples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

Entrada: T_0

para $j \leftarrow 1$ hasta $n - 1$ hacer

copiar $(T_0, \{T_1, \dots, T_n\})$

para $i \leftarrow 1$ hasta n hacer

quitar $(T_i, \{p_j r : r \neq i\} \cup \{p_k i : j + 1 \leq k \leq n\})$

unión $(\{T_1, \dots, T_n\}, T_0)$

Salida: T_0

Verificación formal

- Se reescribe el código para enumerar los tubos:

Entrada: T^0

para $j \leftarrow 1$ hasta $n - 1$ hacer

copiar $(T^{j-1}, \{T_1^j, \dots, T_n^j\})$

para $i \leftarrow 1$ hasta n hacer

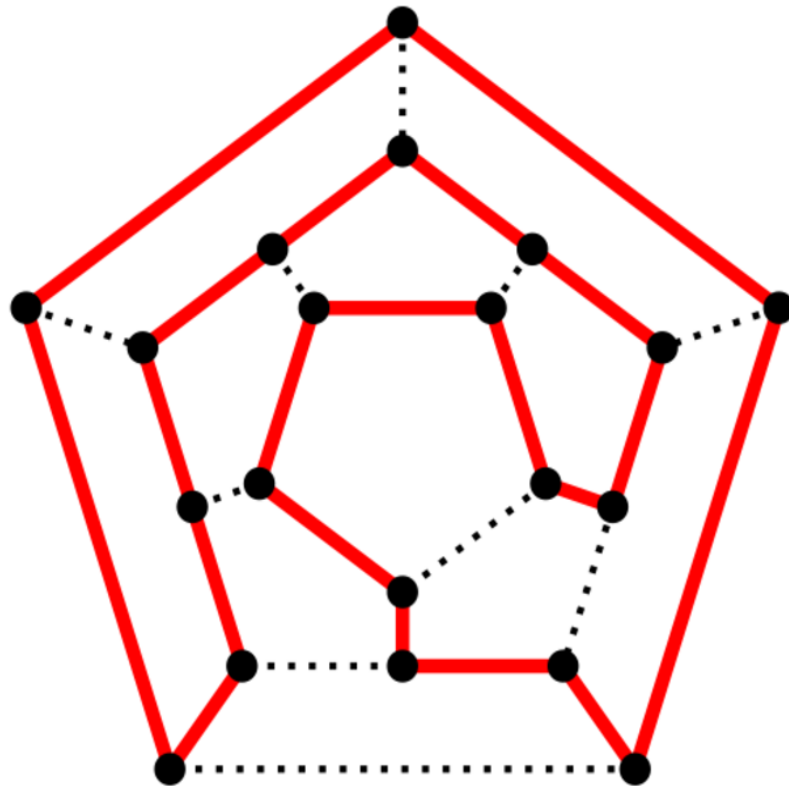
$\bar{T}_i^j \leftarrow \text{quitar } (T_i^j, \{p_j r : r \neq i\} \cup \{p_k i : j + 1 \leq k \leq n\})$

unión $(\{\bar{T}_1^j, \dots, \bar{T}_n^j\}, T^j)$

Salida: T^{n-1}

- *Ver documento.*

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:

Entrada: T_0 (multiconjunto que contiene todas las permutaciones de orden n)

para $i \leftarrow 1$ hasta $n - 1$ hacer

$T_0 \leftarrow \text{quitar}(T_0, \{jp_{i+1}k : (j, k) \notin E\})$

seleccionar(T_0)

Verificación formal

- Se reescribe el código para enumerar los tubos:

Entrada: T_0

para $i \leftarrow 1$ hasta $n - 1$ hacer

$T_i \leftarrow \text{quitar } (T_{i-1}, \{jp_{i+1}k : (j, k) \notin E\})$

seleccionar(T_{n-1})

- *Ver documento.*

Gracias



