Hamilton-körök és DNS molekulák

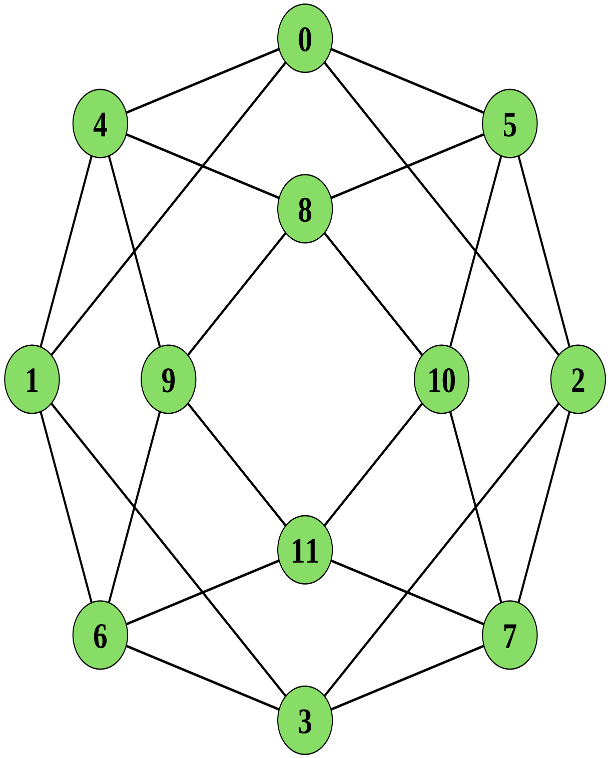
Tengely Szabolcs

2005. november 4

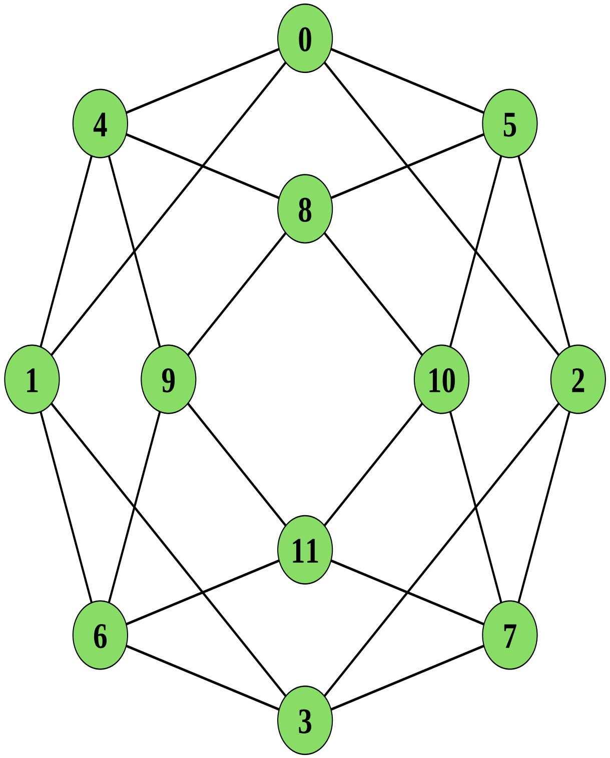
Gráfok

- $G = (V, E)$ egyszerű gráf, ha V egy véges halmaz és $E \subseteq \binom{V}{2}$,
- V elemei a G gráf csúcsai,
- E elemei a G gráf élei,
- (a, b)-út: $a = x_0, e_1, x_1, \ldots, e_n, x_n = b$ sorozat, ahol $x_i \neq x_j, i \neq j$ esetén,
- kör: $a = x_0, e_1, x_1, \ldots, e_n, x_0 = a$ sorozat, ahol az $x_0, x_1, \ldots, x_{n-1}$ csúcsok és az $e_1, e_2, \ldots, e_n$ élek páronként különbözőek,
- Hamilton-út: olyan G-beli út, amely G minden pontját tartalmazza,
- Hamilton-kör: olyan G-beli kör, amely G minden pontját tartalmazza.

Példa

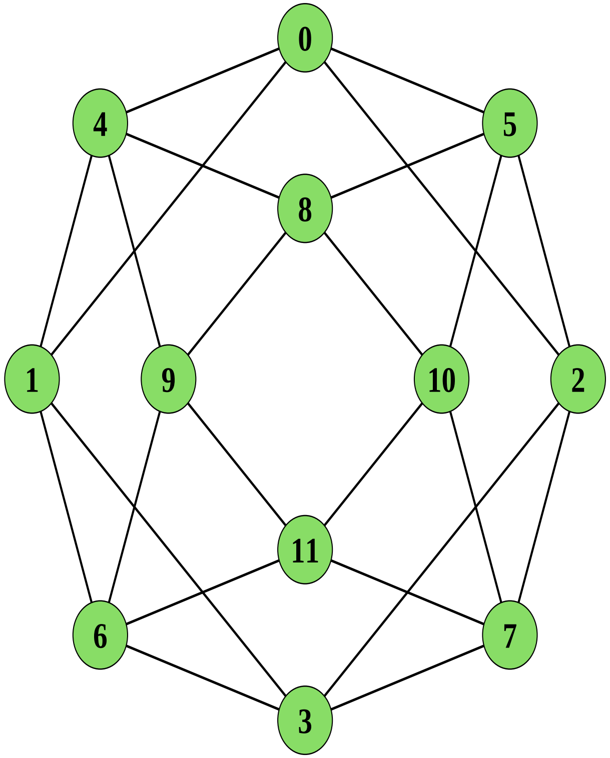


Példa



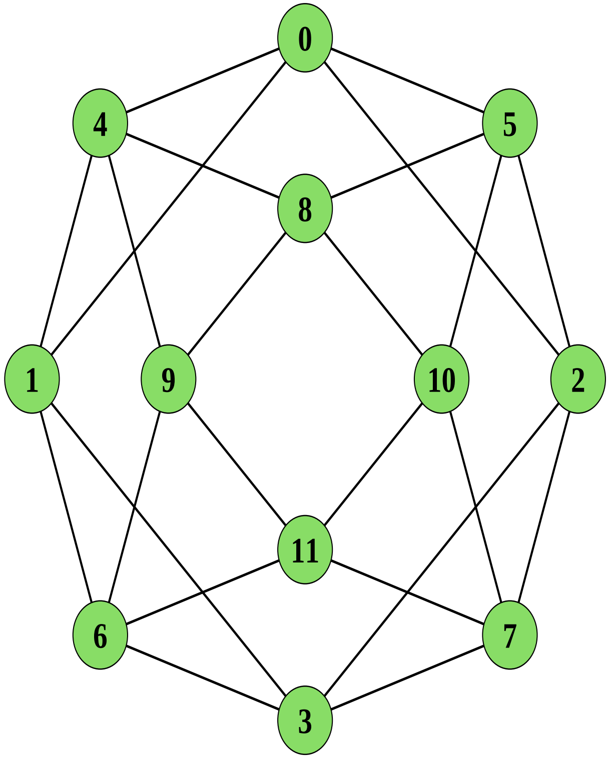
- csúcsok halmaza: $\{0, 1, \ldots, 11\}$

Példa



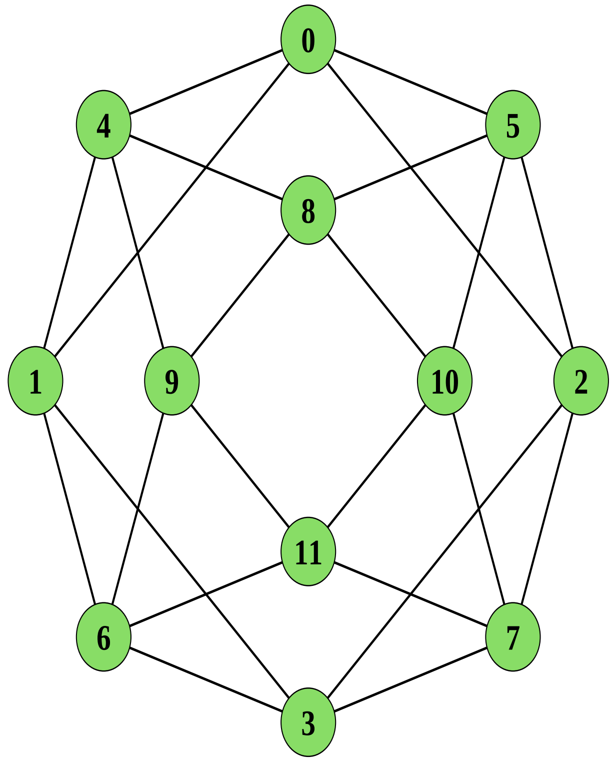
- csúcsok halmaza: $\{0, 1, \ldots, 11\}$
- élek halmaza: $\{(0,1), (0,2), \ldots, (10,11)\}$

Példa



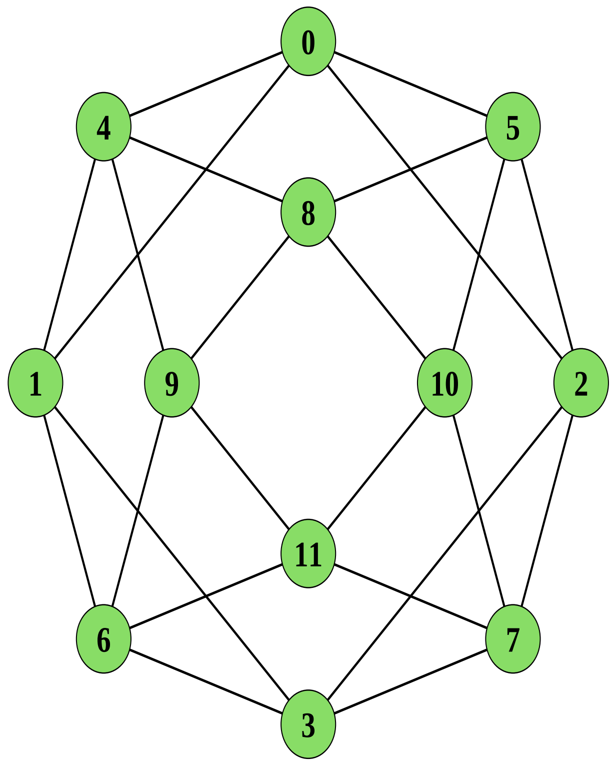
- csúcsok halmaza: $\{0, 1, \ldots, 11\}$
- élek halmaza: $\{(0,1), (0,2), \ldots, (10, 11)\}$
- $(0, 11)$-út: $0 - 4 - 1 - 6 - 11$

Példa



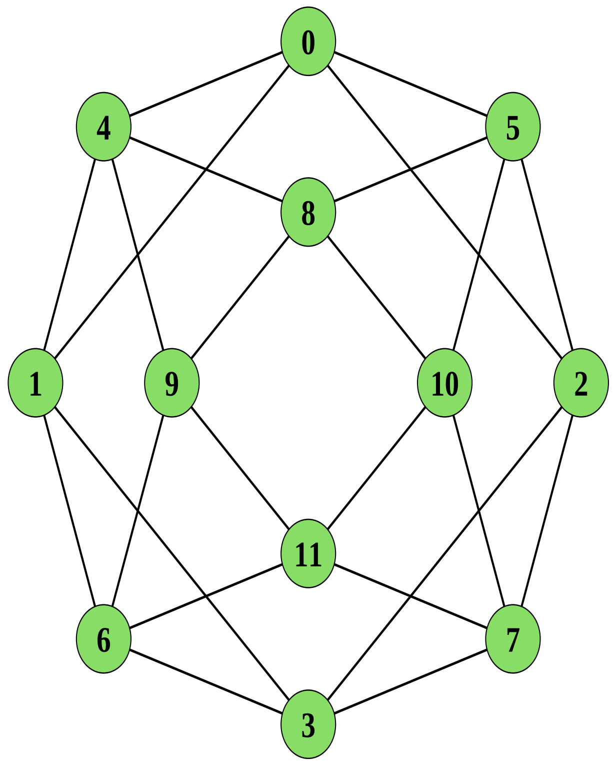
- csúcsok halmaza: $\{0, 1, \ldots, 11\}$
- élek halmaza: $\{(0,1), (0,2), \ldots, (10,11)\}$
- $(0, 11)$-út: $0 - 4 - 1 - 6 - 11$
- kör: $0 - 1 - 3 - 2 - 0$

Példa



- csúcsok halmaza: $\{0, 1, \ldots, 11\}$
- élek halmaza: $\{(0,1), (0,2), \ldots, (10,11)\}$
- $(0,11)$-út: $0 - 4 - 1 - 6 - 11$
- kör: $0 - 1 - 3 - 2 - 0$
- Hamilton-út: $0 - 4 - 1 - 6 - 3 - 7 - 2 - 5 - 8 - 9 - 11 - 10$

Példa



- csúcsok halmaza: $\{0, 1, \ldots, 11\}$
- élek halmaza: $\{(0,1), (0,2), \ldots, (10,11)\}$
- $(0,11)$-út: $0 - 4 - 1 - 6 - 11$
- kör: $0 - 1 - 3 - 2 - 0$
- Hamilton-út: $0 - 4 - 1 - 6 - 3 - 7 - 2 - 5 - 8 - 9 - 11 - 10$
- Hamilton-kör: $8 - 10 - 11 - 9 - 4 - 0 - 1 - 6 - 3 - 7 - 2 - 5 - 8$

Tétel.(Dirac, 1952) Legyen G n-pontú egyszerű gráf, ahol $n \geq 3$. Ha G-ben minden pont foka legalább $n/2$, akkor G-ben van Hamilton-kör.

Nehéz dió

Nem létezik effektív algoritmus Hamilton-út keresésére.

Adott egy G gráf n csúccsal.

Nehéz dió

Nem létezik effektív algoritmus Hamilton-út keresésére.

Adott egy G gráf n csúccsal.

1. Generáljunk utakat G-ben,

Nehéz dió

Nem létezik effektív algoritmus Hamilton-út keresésére.

Adott egy G gráf n csúccsal.

1. Generáljunk utakat G-ben,
2. minden út esetében vizsgáljuk meg:

Nehéz dió

Nem létezik effektív algoritmus Hamilton-út keresésére.

Adott egy G gráf n csúccsal.

1. Generáljunk utakat G-ben,
2. minden út esetében vizsgáljuk meg:
   a. az út a megfelelő ponttal kezdődik és a megfelelő pontban végződik, ha nem, hagyjuk ki az utat a halmazból,

Nehéz dió

Nem létezik effektív algoritmus Hamilton-út keresésére.

Adott egy G gráf n csúccsal.

1. Generáljunk utakat G-ben,
2. minden út esetében vizsgáljuk meg:
   a az út a megfelelő ponttal kezdődik és a megfelelő pontban végződik, ha nem, hagyjuk ki az utat a halmazból,

   b az út pontosan n csúcson megy át, ha nem, hagyjuk ki az utat a halmazból,

Nehéz dió

Nem létezik effektív algoritmus Hamilton-út keresésére.

Adott egy G gráf n csúccsal.

1. Generáljunk utakat G-ben,
2. minden út esetében vizsgáljuk meg:
   - a az út a megfelelő ponttal kezdődik és a megfelelő pontban végződik, ha nem, hagyjuk ki az utat a halmazból,
   - b az út pontosan n csúcson megy át, ha nem, hagyjuk ki az utat a halmazból,
   - c minden csúcson átmegy, ha nem, hagyjuk ki az utat a halmazból,

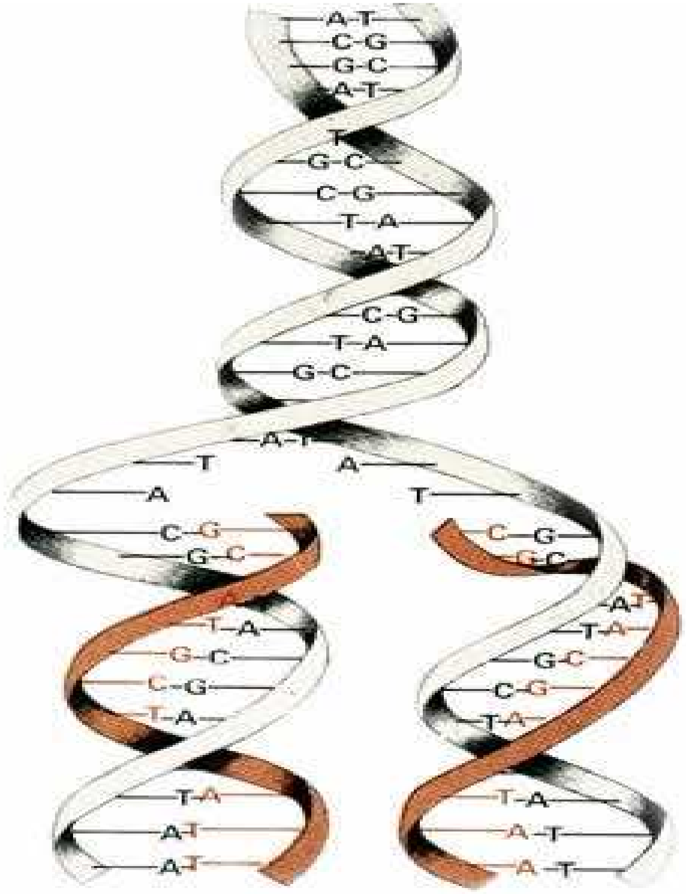
Nehéz dió

Nem létezik effektív algoritmus Hamilton-út keresésére.

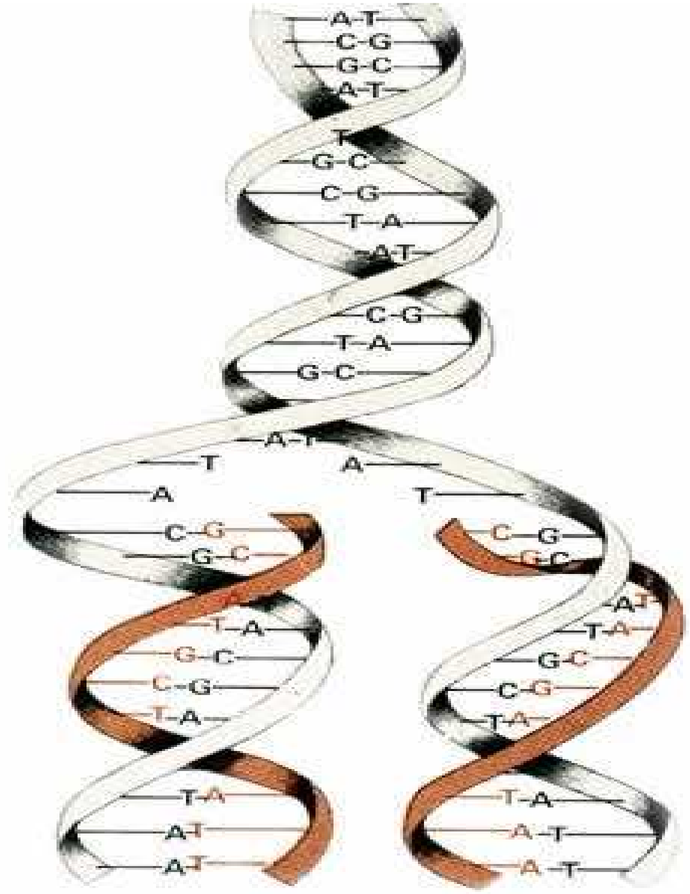
Adott egy G gráf n csúccsal.

1. Generáljunk utakat G-ben,
2. minden út esetében vizsgáljuk meg:
   - a az út a megfelelő ponttal kezdődik és a megfelelő pontban végződik, ha nem, hagyjuk ki az utat a halmazból,
   - b az út pontosan n csúcson megy át, ha nem, hagyjuk ki az utat a halmazból,
   - c minden csúcson átmegy, ha nem, hagyjuk ki az utat a halmazból,
3. ha maradt út, akkor létezik Hamilton-út G-ben.

DNS molekulák



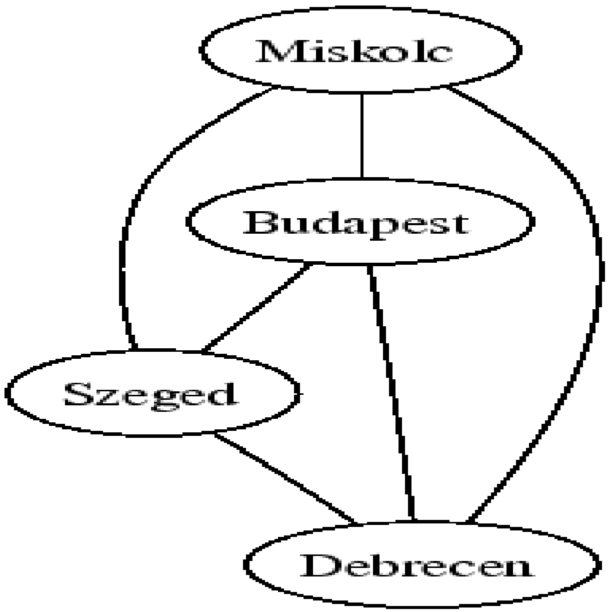
DNS molekulák



Adenine(A), Cytosine(C), Guanine(G), Thymine(T)

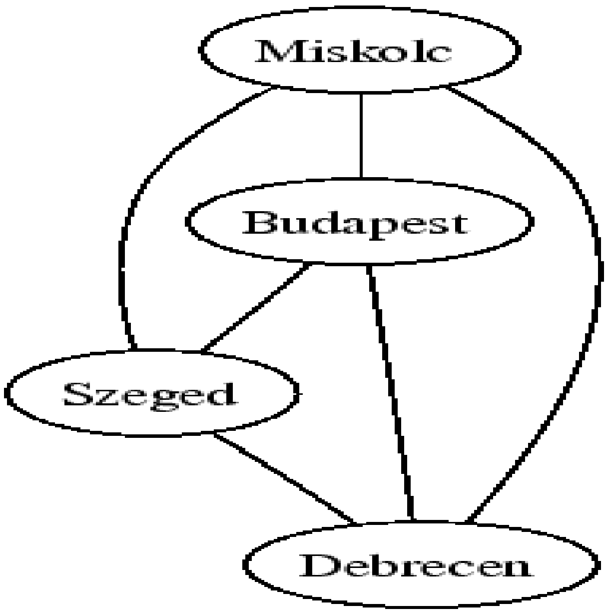
csak A-T, C-G kapcsolódások fordulnak elő

Kódolás



Adleman, 1994: 7 csúcs, 14 él, 20 hosszú DNS láncok.

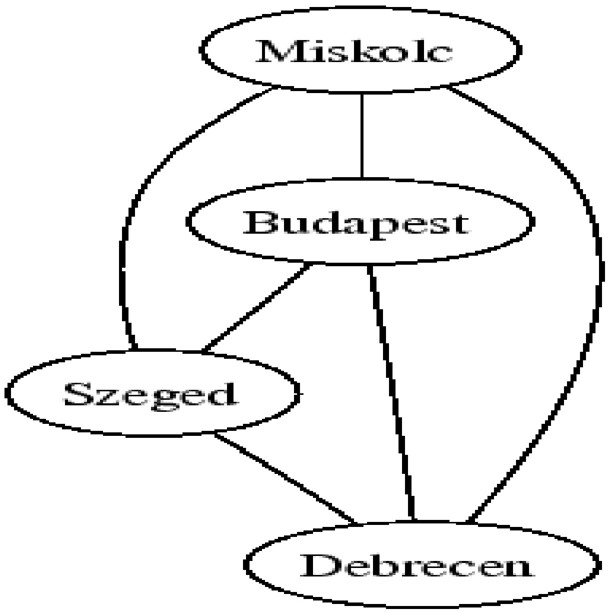
Kódolás



Adleman, 1994: 7 csúcs, 14 él, 20 hosszú DNS láncok. A mi leegyszerűsített példánkban:

- Miskolc: AAAAGGGG
- Budapest: CCCCTTTT
- Szeged: AGAGCTCT
- Debrecen: GAGATCTC

Kódolás



Adleman, 1994: 7 csúcs, 14 él, 20 hosszú DNS láncok. A mi leegyszerűsített példánkban:

- Miskolc: AAAAGGGG
- Budapest: CCCCTTTT
- Szeged: AGAGCTCT
- Debrecen: GAGATCTC
- Miskolc-Budapest él: CCCCGGGG
- Miskolc-Szeged él: CCCCTCTC
- Miskolc-Debrecen él: CCCCCTCT

Megoldás molekulák

Miskolcról kiindulva keresünk Hamilton-kört, minden kódoló molekula hossza 8, így 40 hosszú molekulákat keresünk.

Megoldás molekulák

❖ Gráfok
❖ Példa
❖ Nehéz dió
❖ DNS molekulák
❖ Kódolás
❖ Megoldás molekulák
❖ Hossz - megoldhatóság
❖ S_n^1 halmazok
❖ $S_n^1 \neq \emptyset$
❖ G_n alkalmazása
❖

Miskolcról kiindulva keresünk Hamilton-kört, minden kódoló molekula hossza 8, így 40 hosszú molekulákat keresünk. Egy megoldást meghatározó molekula:

	CCCC	CTCT	AGAG	TTTT	CCCC	CTCT	AGAG	TTTT	
AAAA	GGGG	GAGA	TCTC	AAAA	GGGG	GAGA	TCTC	AAAA	GGGG

Miskolc-Debrecen-Budapest-Szeged-Miskolc.

Megoldás molekulák

Miskolcról kiindulva keresünk Hamilton-kört, minden kódoló molekula hossza 8, így 40 hosszú molekulákat keresünk. Egy megoldást meghatározó molekula:

	CCCC	CTCT	AGAG	TTTT	CCCC	CTCT	AGAG	TTTT	
AAAA	GGGG	GAGA	TCTC	AAAA	GGGG	GAGA	TCTC	AAAA	GGGG

Miskolc-Debrecen-Budapest-Szeged-Miskolc.

Nem megoldás, de megfelelő hosszúságú:

	CCCC	CTCT	AGAG	GGGG	AAAA	TCTC	GAGA	TTTT	
AAAA	GGGG	GAGA	TCTC	CCCC	TTTT	AGAG	CTCT	AAAA	GGGG

Miskolc-Debrecen-Miskolc-Debrecen-Miskolc

Hossz - megoldhatóság

Adlemannak meg kellett határoznia a sorozatokat, hogy eldöntse a Hamilton-út létezésének kérdését. (Időigényes)
Viszont pozitív válasz esetén konstruktív eljárás!

Hossz - megoldhatóság

Adlemannak meg kellett határoznia a sorozatokat, hogy eldöntse a Hamilton-út létezésének kérdését. (Időigényes)
Viszont pozitív válasz esetén konstruktív eljárás!

Frisco, Henkel, Tengely (2004): Hamilton-út létezésének eldöntése megfelelő hosszúságú DNS lánc jelenléte alapján.

Hossz - megoldhatóság

Adlemannak meg kellett határoznia a sorozatokat, hogy eldöntse a Hamilton-út létezésének kérdését. (Időigényes)
Viszont pozitív válasz esetén konstruktív eljárás!

Frisco, Henkel, Tengely (2004): Hamilton-út létezésének eldöntése megfelelő hosszúságú DNS lánc jelenléte alapján.

Kódolás megváltoztatása, azonos hosszúságú molekulák helyett speciálisan megválasztott DNS láncok.

S_n^1 halmazok

Az S_n^1 halmaz olyan $\{a_1, \ldots, a_n\}$ halmazokból áll, amelyekre teljesül, hogy az

$$a_1x_1 + a_2x_2 + \ldots + a_nx_n = a_1 + a_2 + \ldots + a_n$$

egyenletnek csak a triviális $x_i = 1$ megoldása van, ahol $x_i \geq 0$ egész.

S_n^1 halmazok

Az S_n^1 halmaz olyan $\{a_1, \ldots, a_n\}$ halmazokból áll, amelyekre teljesül, hogy az

$$a_1x_1 + a_2x_2 + \ldots + a_nx_n = a_1 + a_2 + \ldots + a_n$$

egyenletnek csak a triviális $x_i = 1$ megoldása van, ahol $x_i \geq 0$ egész.

$\{4, 6, 7\} \in S_3^1$, mert a $4x_1 + 6x_2 + 7x_3 = 17$ egyenlet egyetlen megoldása az $x_1 = x_2 = x_3 = 1$,

S_n^1 halmazok

Az S_n^1 halmaz olyan $\{a_1, \ldots, a_n\}$ halmazokból áll, amelyekre teljesül, hogy az

$$a_1x_1 + a_2x_2 + \ldots + a_nx_n = a_1 + a_2 + \ldots + a_n$$

egyenletnek csak a triviális $x_i = 1$ megoldása van, ahol $x_i \geq 0$ egész.

$\{4, 6, 7\} \in S_3^1$, mert a $4x_1 + 6x_2 + 7x_3 = 17$ egyenlet egyetlen megoldása az $x_1 = x_2 = x_3 = 1$,

$\{3, 5, 7\} \notin S_3^1$, mert $x_1 = 0, x_2 = 3, x_3 = 0$ is megoldás.

$S_n^1 \neq \emptyset$

Tétel. Ha $h \in H \in S_n^1$, akkor $n \leq h/2 + 1$.

$S_n^1 \neq \emptyset$

Tétel. Ha $h \in H \in S_n^1$, akkor $n \leq h/2 + 1$.

Bizonyítás. Tegyük fel, hogy $n > h/2 + 1$. Ekkor a skatulyaelv miatt léteznek $h_i, h_j \in H, h_i \neq h_j$, amelyekre $h_i + h_j \equiv 0 \bmod h$. Ellentmondás.

$S_n^1 \neq \emptyset$

Tétel. Ha $h \in H \in S_n^1$, akkor $n \leq h/2 + 1$.

Bizonyítás. Tegyük fel, hogy $n > h/2 + 1$. Ekkor a skatulyaelv miatt léteznek $h_i, h_j \in H, h_i \neq h_j$, amelyekre $h_i + h_j \equiv 0 \bmod h$. Ellentmondás.

Legyen $G_n = \bigcup_{i=1}^{n} \{2^n - 2^{n-i}\}$.

$S_n^1 \neq \emptyset$

Tétel. Ha $h \in H \in S_n^1$, akkor $n \leq h/2 + 1$.

Bizonyítás. Tegyük fel, hogy $n > h/2 + 1$. Ekkor a skatulyaelv miatt léteznek $h_i, h_j \in H, h_i \neq h_j$, amelyekre $h_i + h_j \equiv 0 \bmod h$. Ellentmondás.

Legyen $G_n = \bigcup_{i=1}^n \{2^n - 2^{n-i}\}$.

- $G_1 = \{1\}$

$S_n^1 \neq \emptyset$

Tétel. Ha $h \in H \in S_n^1$, akkor $n \leq h/2 + 1$.

Bizonyítás. Tegyük fel, hogy $n > h/2 + 1$. Ekkor a skatulyaelv miatt léteznek $h_i, h_j \in H, h_i \neq h_j$, amelyekre $h_i + h_j \equiv 0 \bmod h$. Ellentmondás.

Legyen $G_n = \bigcup_{i=1}^{n} \{2^n - 2^{n-i}\}$.

- $G_1 = \{1\}$
- $G_2 = \{2, 3\}$

$S_n^1 \neq \emptyset$

Tétel. Ha $h \in H \in S_n^1$, akkor $n \leq h/2 + 1$.

Bizonyítás. Tegyük fel, hogy $n > h/2 + 1$. Ekkor a skatulyaelv miatt léteznek $h_i, h_j \in H, h_i \neq h_j$, amelyekre $h_i + h_j \equiv 0 \mod h$. Ellentmondás.

Legyen $G_n = \bigcup_{i=1}^n \{2^n - 2^{n-i}\}$.

- $G_1 = \{1\}$
- $G_2 = \{2, 3\}$
- $G_3 = \{4, 6, 7\}$

$S_n^1 \neq \emptyset$

Tétel. Ha $h \in H \in S_n^1$, akkor $n \leq h/2 + 1$.

Bizonyítás. Tegyük fel, hogy $n > h/2 + 1$. Ekkor a skatulyaelv miatt léteznek $h_i, h_j \in H, h_i \neq h_j$, amelyekre $h_i + h_j \equiv 0 \mod h$. Ellentmondás.

Legyen $G_n = \bigcup_{i=1}^{n} \{2^n - 2^{n-i}\}$.

- $G_1 = \{1\}$
- $G_2 = \{2, 3\}$
- $G_3 = \{4, 6, 7\}$
- $G_4 = \{8, 12, 14, 15\}$

$S_n^1 \neq \emptyset$

Tétel. Ha $h \in H \in S_n^1$, akkor $n \leq h/2 + 1$.

Bizonyítás. Tegyük fel, hogy $n > h/2 + 1$. Ekkor a skatulyaelv miatt léteznek $h_i, h_j \in H, h_i \neq h_j$, amelyekre $h_i + h_j \equiv 0 \bmod h$. Ellentmondás.

Legyen $G_n = \bigcup_{i=1}^{n} \{2^n - 2^{n-i}\}$.

- $G_1 = \{1\}$
- $G_2 = \{2, 3\}$
- $G_3 = \{4, 6, 7\}$
- $G_4 = \{8, 12, 14, 15\}$

Tétel. Minden pozitív egész n-re $G_n \in S_n^1$.

G_n alkalmazása

Az egyszerű Budapest-Debrecen-Miskolc-Szeged példánkban Debrecen-Szeged Hamilton-út létezésének kérdése esetén használhatjuk G_n elemeit, mint a csúcsok kódjait:

G_n alkalmazása

Az egyszerű Budapest-Debrecen-Miskolc-Szeged példánkban Debrecen-Szeged Hamilton-út létezésének kérdése esetén használhatjuk G_n elemeit, mint a csúcsok kódjait:

- Budapest - 8
- Debrecen - 12
- Miskolc - 14
- Szeged - 15

Egy Hamilton-utat reprezentáló molekula hossza 49 lenne, ha létezik ilyen hosszú molekula, akkor létezik Debrecen-Szeged Hamilton-út és **nem szükséges "dekódolni" a DNS láncokat.**

Köszönöm a figyelmet!