1.6.1. Generación de permutaciones en el modelo débil

Definición: Dado un número natural, $n \geq 1$, una permutación de orden n es una aplicación biyectiva del conjunto finito $\{1, \dots, n\}$ en sí mismo.

Problema: Dado un número natural, $n \geq 2$, generar todas las permutaciones de orden n .

Para resolver este problema en el modelo débil, consideremos el siguiente alfabeto: $\Sigma = \{(p_i, c_j) : 1 \leq i, j \leq n\}$, en donde p_i es un oligo que codificará la posición i -ésima en la permutación, y c_j es un oligo que codificará el número j . Para cada i, j ($1 \leq i, j \leq n$) notaremos $p_i c_j = (p_i, c_j)$, y lo interpretaremos como sigue: el número j está en la posición i -ésima de la permutación.

El tubo de entrada, T_0 , es el siguiente:

$$T_0 = \{\{\sigma \in \Sigma^n : \exists x_1 \dots \exists x_n (\sigma = (p_1, x_1)(p_2, x_2) \dots (p_n, x_n))\}\}$$

Es decir, el tubo de entrada es un multiconjunto finito de moléculas que codifican todas las posibles sucesiones de longitud n de elementos del conjunto $\{1, \dots, n\}$.

Este tubo se puede preparar siguiendo las ideas del experimento de Lipton, como hemos explicitado en la elaboración del tubo de ensayo inicial para el programa molecular que resolvía el problema **3-COL** en el modelo no restringido (basta considerar ahora $\{c_1, \dots, c_n\}$ en lugar de $\{c_1, c_2, c_3\}$).

Notación: Sea $\sigma = p_1 x_1 \dots p_n x_n \in T_0$. Para cada r ($1 \leq r \leq n$) notaremos $(\sigma)_r = x_r$; es decir, $(\sigma)_r$ representa el número que ocupa la posición r -ésima en la sucesión de longitud n codificada por σ .

1.6.1.1. Diseño del programa molecular

La idea de un programa molecular en el modelo débil para generar todas las permutaciones del conjunto $\{1, \dots, n\}$ es la siguiente: a partir del tubo de ensayo inicial, T_0 , que codifica todas las posibles sucesiones de longitud n del conjunto $\{1, \dots, n\}$ se procede como sigue:

- Se seleccionan las moléculas, σ , que codifican sucesiones tales que

$$\forall r > 1 ((\sigma)_1 \neq (\sigma)_r)$$

- De éstas se seleccionan las moléculas, σ , que codifican sucesiones de longitud n del conjunto $\{1, \dots, n\}$ tales que

$$\forall r > 2 ((\sigma)_1 \neq (\sigma)_r \wedge (\sigma)_2 \neq (\sigma)_r)$$

- Y se reitera el proceso $n - 1$ veces.

Estas ideas sugieren el diseño del siguiente programa molecular en el modelo débil que genera todas las permutaciones de orden n :

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 $(T_i, \{p_{jr} : r \neq i\} \cup \{p_{ki} : j + 1 \leq k \leq n\})$
     unión $(\{T_1, \dots, T_n\}, T_0)$
 Salida: T_0

El número de operaciones moleculares que realiza el programa es el siguiente: $n - 1$ operaciones copiar, $n - 1$ operaciones unión, y $n(n - 1)$ operaciones quitar. En total, el número de operaciones moleculares es cuadrático en n .

1.6.1.2. Verificación formal del programa molecular

A efectos de establecer la verificación formal del programa molecular, etiquetamos los tubos que se obtienen a lo largo de la ejecución, reescribiendo el programa molecular como sigue:

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
      $\bar{T}_i^j \leftarrow$ quitar $(T_i^j, \{p_{jr} : r \neq i\} \cup \{p_{ki} : j + 1 \leq k \leq n\})$
     unión $(\{\bar{T}_1^j, \dots, \bar{T}_n^j\}, T^j)$
 Salida: T^{n-1}

Notación: Para cada $\sigma \in T_0$ y cada j ($1 \leq j \leq n$) notaremos por $A_{\sigma,j}$ el conjunto $\{(\sigma)_1, \dots, (\sigma)_j\}$.

Para establecer la corrección del programa molecular diseñado, consideremos la siguiente fórmula:

$$\theta(j) \equiv \forall \sigma \in T^j (|A_{\sigma,j}| = j \wedge \forall r (j + 1 \leq r \leq n \longrightarrow (\sigma)_r \notin A_{\sigma,j}))$$

Es decir, la fórmula $\theta(j)$ expresa que toda molécula del tubo T^j codifica una sucesión de longitud n de $\{1, \dots, n\}$ tal que los j primeros términos son distintos entre sí y, además, distintos de los restantes términos de la sucesión.

Teorema 6.1. $\forall j$ ($1 \leq j \leq n - 1 \longrightarrow \theta(j)$). Es decir, la fórmula θ es un invariante del bucle principal.

Demostración: Por inducción débil sobre j .

Sea $\sigma \in T^1$. Existe $x \in \{1, \dots, n\}$ tal que

$$\sigma \in \overline{T}_x^1 = \text{quitar}(T_x^1, \{p_1 r : r \neq x\} \cup \{p_k x : 2 \leq k \leq n\})$$

Entonces $A_{\sigma,1} = \{(\sigma)_1\} = \{x\}$; es decir, $|A_{\sigma,1}| = 1$. Además, si $2 \leq k \leq n$,

entonces $\sigma \in \overline{T}_x^1 \implies (\sigma)_1 = x \wedge (\sigma)_k \neq x \implies (\sigma)_k \notin A_{\sigma,1}$.

Sea $j < n - 1$ ($j \geq 1$) y supongamos que el resultado es cierto para j . Sea $\sigma \in T^{j+1}$. Sea $x \in \{1, \dots, n\}$ tal que

$$\sigma \in \overline{T}_x^{j+1} = \text{quitar}(T_x^{j+1}, \{p_{j+1} r : r \neq x\} \cup \{p_k x : j + 2 \leq k \leq n\})$$

Entonces se verifica que

$$\sigma \in T_x^{j+1} = T^j \wedge (\sigma)_{j+1} = x \wedge \forall k (j + 2 \leq k \leq n \longrightarrow (\sigma)_k \neq x)$$

De la hipótesis de inducción se tiene que

$$|A_{\sigma,j}| = j \wedge \forall r (j + 1 \leq r \leq n \longrightarrow (\sigma)_r \notin A_{\sigma,j})$$

Teniendo presente que $A_{\sigma,j+1} = A_{\sigma,j} \cup \{(\sigma)_{j+1}\}$ y que $(\sigma)_{j+1} \notin A_{\sigma,j}$, resulta que $|A_{\sigma,j+1}| = j + 1$. Finalmente si $j + 2 \leq k \leq n$, entonces $(\sigma)_k \notin A_{\sigma,j}$ y $(\sigma)_k \neq x = (\sigma)_{j+1}$. Por tanto, $(\sigma)_k \notin A_{\sigma,j+1}$. ■

Corolario 6.2. (*Corrección del programa*) Toda molécula del tubo de salida codifica una permutación de orden n .

Demostración: Sea $\sigma \in T^{n-1}$. Puesto que la fórmula $\theta(n-1)$ es verdadera resulta que $|A_{\sigma,n-1}| = n - 1 \wedge \forall r (n - 1 + 1 \leq r \leq n \longrightarrow (\sigma)_r \notin A_{\sigma,n-1})$. Como $A_{\sigma,n} = A_{\sigma,n-1} \cup \{(\sigma)_n\}$, concluimos que $|A_{\sigma,n}| = n$. Por tanto, la molécula σ codifica una permutación de orden n . ■

Para establecer la completitud del programa molecular diseñado, consideremos la siguiente fórmula:

$$\delta(j) \equiv \forall \sigma \in T^0 (|A_{\sigma,n}| = n \longrightarrow \sigma \in T^j)$$

Es decir, la fórmula $\delta(j)$ expresa que toda molécula del tubo T^i codifica una sucesión de longitud n de $\{1, \dots, n\}$ tal que los j primeros términos son distintos entre sí y, además, distintos de los restantes términos de la sucesión.

Teorema 6.3. $\forall j (1 \leq j \leq n - 1 \longrightarrow \delta(j))$. Es decir, la fórmula δ es un invariante del bucle principal.

Demostración: Por inducción débil sobre j .

Sea $\sigma \in T^0$ tal que $|A_{\sigma,n}| = n$. Entonces la molécula σ codifica una permutación de orden n . Se tiene que $\sigma \in T_{(\sigma)_1}^1$ y $\forall r (2 \leq r \leq n \longrightarrow (\sigma)_r \neq (\sigma)_1)$. ■

Luego, $\sigma \in \text{quitar}(T_{(\sigma)_1}^1, \{p_1 r : r \neq (\sigma)_1\} \cup \{p_k(\sigma)_1 : 2 \leq k \leq n\})$. Por tanto, $\sigma \in \overline{T}_{(\sigma)_1}^1 \subseteq T^1$.

Sea $j < n - 1$ ($j \geq 1$) y supongamos que el resultado es cierto para j . Sea $\sigma \in T^0$ tal que $|A_{\sigma,n}| = n$. De la hipótesis de inducción resulta que $\sigma \in T^j$. Luego, $\sigma \in T_{(\sigma)_{j+1}}^{j+1}$ y $\forall r$ ($j + 2 \leq r \leq n \rightarrow (\sigma)_r \neq (\sigma)_{j+1}$). De donde se deduce que $\sigma \in \overline{T}_{(\sigma)_{j+1}}^{j+1} \subseteq T^{j+1}$. ■

Corolario 6.4. (*Complejidad del programa*) *Toda molécula del tubo de ensayo inicial que codifica una permutación de orden n , está en el tubo de salida.*

Demostración: Basta tener presente que tras la ejecución del programa molecular, la fórmula $\delta(n - 1)$ es verdadera, y que el tubo de salida del programa es T^{n-1} . ■

1.6.2. El problema del camino hamiltoniano sin nodos distinguidos

Problema del camino hamiltoniano en su versión dirigida y sin nodos distinguidos: *dado un grafo dirigido, determinar si existe un camino simple que pasa por todos los nodos del grafo (es decir, determinar si el grafo posee un camino hamiltoniano).*

Vamos a dar una solución molecular a este problema en el modelo débil. Sea $G = (V, E)$ un grafo dirigido, con $V = \{1, \dots, n\}$. Consideremos el siguiente alfabeto $\Sigma = \{(p_i, c_j) : 1 \leq i, j \leq n\}$, en donde p_i es un oligo que codificará la posición i -ésima del camino, y c_j es un oligo que codificará el nodo j . Para cada i, j ($1 \leq i, j \leq n$) notaremos $p_i c_j = (p_i, c_j)$, y lo interpretaremos como sigue: el nodo j está en la posición i -ésima del camino.

El tubo de ensayo inicial, T_0 , es un multiconjunto finito de moléculas que codifican todas las posibles permutaciones de orden n . Por tanto, dicho tubo puede ser elaborado como tubo de salida de un programa molecular que genere todas las permutaciones de orden n (por ejemplo, el programa que hemos presentado en 1.6.1.1).

Notación: Si $\sigma = p_1 x_1 p_2 x_2 \dots p_n x_n \in T_0$, entonces para cada r ($1 \leq r \leq n$) notaremos $(\sigma)_r = x_r$ y $\sigma_r = ((\sigma)_1, (\sigma)_2, \dots, (\sigma)_r)$; es decir, $\sigma_r = (x_1, x_2, \dots, x_r)$. Además, interpretaremos la molécula σ de esta manera: si σ codifica un camino del grafo, entonces x_1 será el primer nodo del camino, x_2 el segundo, y así sucesivamente. Téngase presente que la molécula σ codifica una permutación de orden n ; en consecuencia si, además, codifica

un camino del grafo, éste será hamiltoniano.

La idea que nos va a permitir resolver en el modelo débil, el problema del camino hamiltoniano en su versión dirigida y sin nodos distinguidos, es la siguiente: a partir del tubo de ensayo inicial, T_0 , que codifica todas las posibles permutaciones de orden n :

- Se seleccionan las moléculas, σ , tales que σ_2 es un camino de G ;
- De éstas, se seleccionan las moléculas, σ , tales que σ_3 es un camino de G (para lo cual, teniendo presente que σ_2 es un camino de G basta que se verifique la condición $((\sigma)_2, (\sigma)_3) \in E$).
- Y se reitera el proceso $n - 1$ veces.

Estas ideas sugieren el diseño del siguiente programa molecular en el modelo débil que resuelve el problema del camino hamiltoniano citado:

Entrada: T_0 (multiconjunto que contiene todas las
permutaciones de orden n)
para $i \leftarrow 1$ hasta $n - 1$ hacer
 $T_0 \leftarrow$ quitar $(T_0, \{jp_{i+1}k : (j, k) \notin E\})$
seleccionar (T_0)

El programa realiza $n - 1$ operaciones quitar y 1 operación seleccionar. Luego el número de operaciones moleculares es lineal en el tamaño del grafo.

1.6.2.1. Verificación formal del programa molecular

Para establecer la verificación formal del programa, procedemos al etiquetado de los tubos que aparecen a lo largo de la ejecución, reescribiendo el programa molecular como sigue:

Entrada: T_0
para $i \leftarrow 1$ hasta $n - 1$ hacer
 $T_i \leftarrow$ quitar $(T_{i-1}, \{jp_{i+1}k : (j, k) \notin E\})$
seleccionar (T_{n-1})

Para establecer la corrección del programa molecular diseñado, consideremos la siguiente fórmula:

$$\theta(i) \equiv \forall \sigma \in T_{i-1} \forall r (1 \leq r < i \longrightarrow ((\sigma)_r, (\sigma)_{r+1}) \in E)$$

Es decir, la fórmula $\theta(i)$ expresa que toda molécula, σ , del tubo T_{i-1} verifica que σ_i es un camino del grafo G .

Teorema 6.5. $\forall i (2 \leq i \leq n \longrightarrow \theta(i))$. Es decir, la fórmula θ es un invariante del bucle principal.

Demostración: Por inducción débil sobre i .

Sea $\sigma \in T_1$. Puesto que $T_1 = \text{quitar}(T_0, \{jp_2k : (j, k) \notin E\})$, se deduce que $((\sigma)_1, (\sigma)_2) \in E$.

Sea i tal que $2 \leq i < n$ y supongamos cierto el resultado para i . Sea $\sigma \in T_i$. Teniendo presente que $T_i = \text{quitar}(T_{i-1}, \{jp_{i+1}k : (j, k) \notin E\})$, resulta que $\sigma \in T_{i-1}$ y $((\sigma)_i, (\sigma)_{i+1}) \in E$. De la hipótesis de inducción se deduce que $\forall r (1 \leq r < i \rightarrow ((\sigma)_r, (\sigma)_{r+1}) \in E)$. Por tanto, σ_{i+1} es un camino del grafo G . ■

Corolario 6.6. (*Corrección del programa*) Toda molécula del tubo de salida codifica un camino hamiltoniano del grafo G .

Demostración: Sea $\sigma \in T_{n-1}$. Como la fórmula $\theta(n)$ es verdadera resulta que $\forall r (1 \leq r < n \rightarrow ((\sigma)_r, (\sigma)_{r+1}) \in E)$. Por tanto, σ_n es un camino de G . Teniendo presente que la molécula σ codifica una permutación de orden n , concluimos que σ codifica un camino hamiltoniano del grafo G . ■

Para establecer la completitud del programa molecular diseñado, consideremos la siguiente fórmula

$$\delta(i) \equiv \forall \sigma \in T_0 ([\forall r (1 \leq r < n \rightarrow ((\sigma)_r, (\sigma)_{r+1}) \in E]) \rightarrow \sigma \in T_{i-1})$$

Es decir, la fórmula $\delta(i)$ expresa que toda molécula del tubo inicial que codifica un camino hamiltoniano de G pertenece al tubo T_{i-1} .

Teorema 6.7. $\forall i (2 \leq i \leq n \rightarrow \delta(i))$. Es decir, la fórmula δ es un invariante del bucle principal.

Demostración: Por inducción débil sobre i .

Sea $\sigma \in T_0$ tal que σ codifica un camino hamiltoniano de G . Entonces $\forall r (1 \leq r < n \rightarrow ((\sigma)_r, (\sigma)_{r+1}) \in E)$. Luego,

$$\sigma \in \text{quitar}(T_0, \{jp_2k : (j, k) \notin E\}) = T_1$$

Sea i tal que $2 \leq i < n$ y supongamos cierto el resultado para i . Sea $\sigma \in T_0$ tal que σ codifica un camino hamiltoniano de G . Por hipótesis de inducción se tiene que $\sigma \in T_{i-1}$. Luego, $\sigma \in \text{quitar}(T_{i-1}, \{jp_{i+1}k : (j, k) \notin E\}) = T_i$. ■

Corolario 6.8. (*Completitud del programa*) Toda molécula del tubo de ensayo inicial que codifica un camino hamiltoniano de G , está en el tubo de salida.

Demostración: Basta tener presente que la fórmula $\delta(n)$ es verdadera y que el tubo de salida del programa es T_{n-1} . ■