

А. С. Поленов (Пермь, Пермский национальный исследовательский политехнический ун-т). **Структура гибридного ДНК-компьютера.**

Истории ДНК-вычислений всего 20 лет. Первые исследования в этой области показали, что используя молекулы ДНК можно построить вычисляющий автомат, обладающий интересным свойством — массовым параллелизмом, благодаря которому можно одновременно рассчитать множество вариантов исходных данных [1]. Это может оказаться особенно полезным при решении задач, требующих полного перебора всех возможных вариантов. Однако сам процесс ДНК-вычислений очень сложен и трудоемок, на сегодняшний день существуют лишь простые прототипы ДНК-компьютеров, обладающие очень малой разрядностью, а скорость выполнения единичных логических операций таких компьютеров не велика по сравнению с бинарными электронными компьютерами.

Хорошей идеей будет создать гибрид ДНК-компьютера с бинарным компьютером, при этом бинарный компьютер сможет хранить константы, участвовать в адресации ДНК-памяти, а также выполнять простые бинарные вычисления в ходе решения задачи, а ДНК-компьютер будет осуществлять полный перебор.

В качестве ДНК составляющей такого гибридного компьютера можно использовать так называемую стикерную модель. Суть очень проста: одиночная ДНК-цепочка мысленно делится на участки равной длины, если к одному из таких участков прикреплена комплементарная цепочка той же длины (стикер), то эта ячейка памяти считается включенной, в противном случае эта ячейка считается выключенной. В таком виде эта модель была представлена в 1996 году. Однако ее недостаток заключался в том, что крайне трудно придумать такой способ, который смог бы отделить один стикер, не задевая остальные, поэтому модель на тот момент требовала усовершенствования [2].

Хорошим дополнением к этой модели будет механизм опорно-опосредованного перемещения цепочек. Суть такова: стикер должен иметь длину чуть большую, чем ячейка памяти. Эти дополнительные базовые основания (опоры) будут просто свисать, когда стикер прикреплен. Однако если в раствор запустить ДНК-цепочку, полностью комплементарную одному из стикеров, она отцепит его, посредством механизма опорно-опосредованного перемещения. Благодаря этому механизму, модель сможет выполнять вычисления при комнатной температуре, раствор не нужно будет нагревать для денатурации запоминающей цепочки и стикеров. Это повышает быстродействие и снижает энергозатраты.

Наилучшая найденная длина стикера для этого механизма — 17 азотистых оснований (10 информационных и 7 опорных) [3]. При этом доля выходного сигнала составляет более 90%, всего лишь менее 10% приходится на шумы согласно данным термодинамического симулятора NUPACK (рис.) [4].

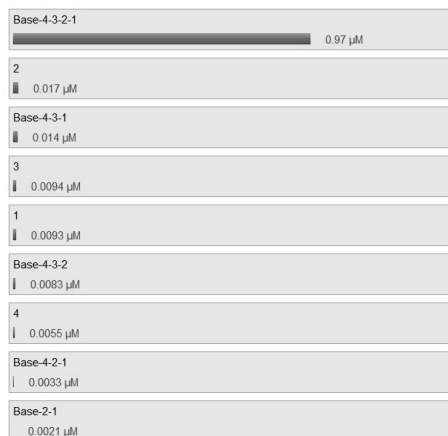


Рис. 1

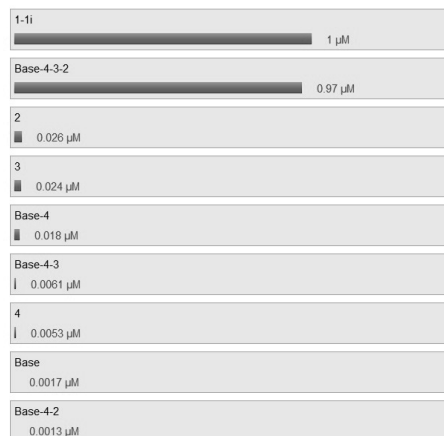


Рис. 2

Рис. Состояние 4-битной стикерной ДНК-модели, когда все 4 стикера подключены (рис. 1) и, когда удален первый стикер (рис. 2). Начальная концентрация всех исходных цепочек в растворе была одинаковой

В стикерной модели можно выполнить 5 разных операций. 1) Операция *слить* объединяет несколько пробирок в одну. 2) Операция *разделить* по данной пробирке N создает 2 пробирки: $+(N, i)$; и $-(N, i)$. Пробирка $+(N, i)$ состоит из всех комплексов исходной пробирки, в которых включена i -я подцепочка. Пробирка $-(N, i)$ состоит из всех комплексов исходной пробирки в которой выключена i -я подцепочка. 3) Операция *включить* создает новую пробирку *включить* (N, i) , в которой включена i -я подцепочка у всех запоминающих комплексов из N . 4) Операция *очистить* создает новую пробирку *очистить* (N, i) , в которой выключена i -я подцепочка у всех запоминающих комплексов из N . 5) Операция *обнаружить* проверяет пробирку на наличие в ней запоминающих комплексов.

Стикерная модель ДНК-логики является полной по Тьюрингу, и с точки зрения формальной логики может вычислить все, что может вычислить современный компьютер, но для повышения ее эффективности, разумно использовать ее в сочетании с традиционным бинарным компьютером. Гибридные компьютеры могут оказаться гораздо эффективнее для решения задач, нежели автономные ДНК-компьютеры.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Paun G., Rozenberg G., Salomaa A. DNA Computing New Computing Paradigms. Berlin etc.: Springer, 2004.
2. Roweis S., Winfree E., Burgoyne R., Chelyapov N., Goodman M., Rothmund P., Adleman L. M. A sticker based model for DNA computation. — J. Comput. Biology, 1998, v. 5, is. 4, p. 615–629.
3. ZHANG Cheng, MA LiNa, DONG YaFei, YANG Jing, XU Jin. Molecular logic computing model based on DNA self-assembly strand branch migration. — Chinese Sci. Bull., 2013, v. 58, № 1, p. 32–38.
4. Zadeh J. N., Steenberg C. D., Bois J. S., Wolfe B. R., Pierce M. B., Khan A. R., Dirks R. M., Pierce N. A. NUPACK: analysis and design of nucleic acid systems. — J. Comput. Chem., 2011, v. 32, № 1, p. 170–173.