

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
2	DNA-Computing – Entwicklung des interdisziplinären Wissensgebietes	5
3	Mathematische Grundlagen des DNA-Computing	17
3.1	Grundbegriffe	22
3.1.1	Mengen	22
3.1.2	Funktionen	25
3.1.3	Multimengen	27
3.1.4	Graphen	29
3.1.5	Algebraische Strukturen	30
3.1.6	Formale Sprachen	31
3.1.7	Endliche Automaten	34
3.2	Ausgewählte konventionelle universelle Berechnungsmodelle	36
3.2.1	Deterministische und nichtdeterministische Turingmaschine	36
3.2.2	Klasse der μ -rekursiven Funktionen	42
3.2.3	Klasse der WHILE-Programme	47
3.2.4	Chomsky-Grammatiken zur Beschreibung rekursiv aufzählbarer Sprachen	51
3.2.5	Ungetypter λ -Kalkül	57
3.3	Zusammenhänge zwischen universellen Berechnungsmodellen	65
3.3.1	Transformation von Turingmaschinen in Chomsky-Grammatiken vom Typ 0 ...	65
3.3.2	Transformation von Chomsky-Grammatiken vom Typ 0 in Turingmaschinen ...	66
3.3.3	Transformation von Turingmaschinen in WHILE-Programme	68
3.3.4	Transformation von WHILE-Programmen in Turingmaschinen	72
3.3.5	Transformation von μ -rekursiven Funktionen in WHILE-Programme	74
3.3.6	Transformation von WHILE-Programmen in μ -rekursive Funktionen	76
3.3.7	Transformation von μ -rekursiven Funktionen in λ -Terme	79
3.3.8	Transformation von λ -Termen in μ -rekursive Funktionen	84
3.4	Algorithmus- und Berechenbarkeitsbegriff	86
3.5	Ausgewählte komplexitätstheoretische Grundlagen	90
3.5.1	Komplexitätsmaße für Algorithmen	90
3.5.2	Komplexitätsklassen \mathcal{P} und \mathcal{NP}	92
3.5.3	Ausgewählte NP-vollständige Probleme	94

4	Molekularbiologische Grundlagen des DNA-Computing	97
4.1	DNA als Datenträger – Struktur und Eigenschaften	99
4.1.1	DNA-Einzelstränge und ihre Primärstruktur	99
4.1.2	DNA-Doppelstränge und ihre Sekundärstruktur	102
4.1.3	DNA-Konformationen und Tertiärstruktur	105
4.1.4	Eigenschaften von DNA-Strängen	107
4.2	Allgemeine Grundsätze zum laborpraktischen Umgang mit DNA	108
4.3	Gewinnen von DNA	110
4.3.1	DNA-Einzelstrangsynthese	111
4.3.2	DNA-Isolation aus Organismen	113
4.4	Mischen und Aufteilen von DNA in wässriger Lösung	114
4.4.1	Vereinigung	114
4.4.2	Aliquotierung	115
4.5	Knüpfen und Aufbrechen von Wasserstoffbrückenbindungen	116
4.5.1	Hybridisierung	117
4.5.2	Denaturierung	118
4.6	Enzymatische Reaktionen	119
4.6.1	Ligation	122
4.6.2	Restriktionsspaltung	124
4.6.3	Strangendenmodifikation	126
4.6.4	Polymerisation	128
4.6.5	Polymerase-Kettenreaktion	129
4.7	Separieren und Analysieren von DNA-Strängen	132
4.7.1	Avidin-Biotin-Separation	132
4.7.2	Gel-Elektrophorese	134
4.7.3	Sequenzierung	137
4.8	Systematisierung von DNA-Operationen und ihrer Seiteneffekte	139
5	Labornahe Simulation molekularbiologischer Prozesse auf DNA	143
5.1	Von realen Vorgängen aus Physik und Chemie zum mathematischen Modell ...	145
5.1.1	Grundlagen der Modellierung molekülbasierter Vorgänge	145
5.1.2	Parametrisierung molekülbasierter Vorgänge	149
5.1.3	Belegung der Parameter mit Anfangswerten	152
5.1.4	Dynamische Anpassung der Parameter	153
5.1.5	Behandlung von Kollisionen	155
5.1.6	Reaktionskinetik	157
5.2	Allgemeine Simulationsmethoden für molekülbasierte Vorgänge	161
5.2.1	Simulationsmethoden – Klassifikation und Eigenschaften	161
5.2.2	Erzeugung von Zufallszahlen für stochastische Simulationen	164
5.2.3	Ausgewählte Kombinationen von Simulationsmethoden im Detail	169
5.3	Parametrisierung der Primär- und Sekundärstruktur von DNA	179

5.3.1	Erfassung der Primärstruktur durch Zeichenketten	179
5.3.2	Erfassung der Sekundärstruktur durch Bindungsmatrizen	181
5.4	Labornahe Simulation von DNA-Operationen	186
5.4.1	Statisch simulierbare DNA-Operationen	186
5.4.2	Dynamisch diskret simulierbare DNA-Operationen	195
5.4.3	Dynamisch kontinuierlich simulierbare DNA-Operationen	202
5.4.4	Systematisierung der Simulationen von DNA-Operationen	205
5.5	Konstruktion und Simulation eines DNA-Algorithmus	206
6	Abstrakte Modelle und formale Sprachen des DNA-Computing	209
6.1	Eigenschaften von Modellen des DNA-Computing	211
6.2	Filtering-Modelle nach Adleman, Lipton, Amos	212
6.2.1	Adleman-Experiment	214
6.2.2	Modellbeschreibung	218
6.2.3	Universalität	220
6.2.4	Beispielalgorithmus zur Lösung des Rucksackproblems	221
6.3	Das Modell Parallel Associative Memory (PAM)	223
6.3.1	Modellbeschreibung	224
6.3.2	Universalität	226
6.3.3	Beispielalgorithmus zur Lösung des Rucksackproblems	226
6.4	DNA-Pascal	229
6.4.1	Modellbeschreibung	229
6.4.2	Universalität	231
6.4.3	Beispielalgorithmus zur Lösung des Rucksackproblems	231
6.5	DNA Equality Checking	232
6.5.1	Modellbeschreibung	233
6.5.2	Universalität	235
6.5.3	Beispielalgorithmus zur Lösung des Rucksackproblems	235
6.6	Insertion-Deletion-Systeme	236
6.6.1	Modellbeschreibung	237
6.6.2	Universalität	238
6.6.3	Beispielalgorithmus zur Lösung des Rucksackproblems	239
6.7	Watson-Crick DOL-Systeme	241
6.7.1	Modellbeschreibung	241
6.7.2	Universalität	243
6.7.3	Beispielalgorithmus zur Lösung des Rucksackproblems	249
6.8	Splicing-Systeme (H-Systeme, EH-Systeme)	251
6.8.1	Modellbeschreibung	252
6.8.2	Universalität	256
6.8.3	Beispielalgorithmus zur Lösung des Rucksackproblems	256
6.9	Systematisierung von Modellen des DNA-Computing	259

7	Ein Weg zum praktisch nutzbaren universellen DNA-Computer	261
7.1	Ziele der Modellentwicklung	263
7.2	Bekannte universelle Splicing-Systeme mit endlichen Komponenten	264
7.2.1	Splicing-Systeme mit modifizierter Splicing-Operation	264
7.2.2	Splicing-Systeme mit dynamischen Splicing-Regeln	265
7.2.3	Splicing-Systeme auf Basis nichtlinearer DNA-Strukturen	266
7.2.4	Splicing-Systeme auf Basis von Multimengen	266
7.2.5	Verteilte Splicing-Systeme	267
7.3	TT6 – ein anwendungsorientiertes universelles verteiltes Splicing-System	270
7.3.1	Modellbeschreibung	271
7.3.2	Universalität	272
7.3.3	Beispielalgorithmus zur Lösung des Rucksackproblems	275
7.3.4	Labornahe Simulation des TT6	279
7.3.5	Prinzipskizze einer möglichen praktischen Implementierung	284
8	Ausgewählte DNA-Algorithmen in praxisrelevanter Anwendung	287
8.1	DNA-Chips	288
8.2	DNA-Computer in der Genanalyse	290
8.3	Molecular Programming	290
8.4	DNA-Computer in der Informatik	292
9	Zukunftspotenzial	297
	Literaturverzeichnis	299
	Index	311