

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 D0L-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 |