DNS számítási modellek

Irodalom :

G. Păun, G. Rozenberg, A. Salomaa :
DNA Computing (New Computing Paradigms),
Springer, 2005.

Martyn Amos : Theorethical and Experimental DNA
Computation (New Computing Series),
Springer, 2005.

N. Jonoska, G. Păun, G. Rozenberg (eds.): Aspect of Molecular
Computing (LNCS 2950), Springer, 2004
(Essays Dedicated to Tom Head on the Occasion
of his 70th Birthday)

C. Martín-Vide, V. Mitrana (eds.): Where Mathematics,
Computer Science, Linguistics and Biology Meet,
Kluwer Academic Publishers, 2001.
(Essays in honour of Gheorghe Păun)

DNS számítási modellek

DNS (dezoxiribonukleinsav rövidítése)

DNS molekula az élő sejtekben (in vivo) van.

1944 Avery, McLeod, McCarthy:

DNS szerepe az átöröklődésben

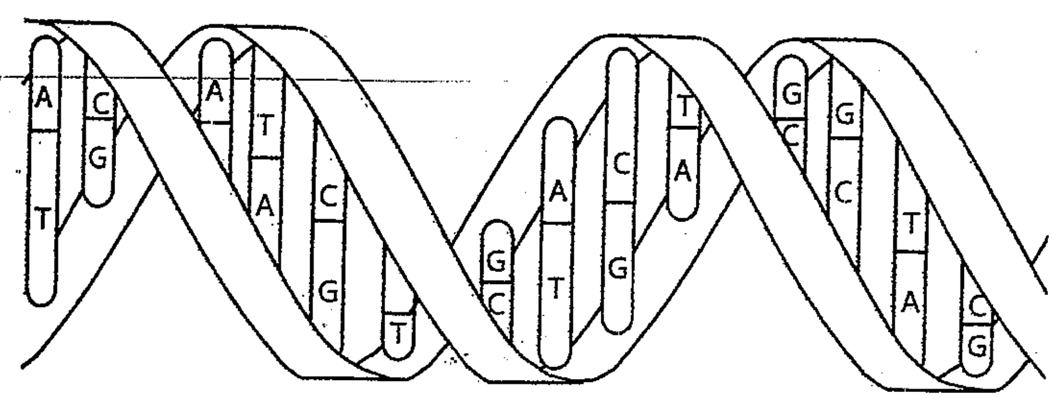
1953 James Watson, Francis Crick:

DNS térszerkezet leírása

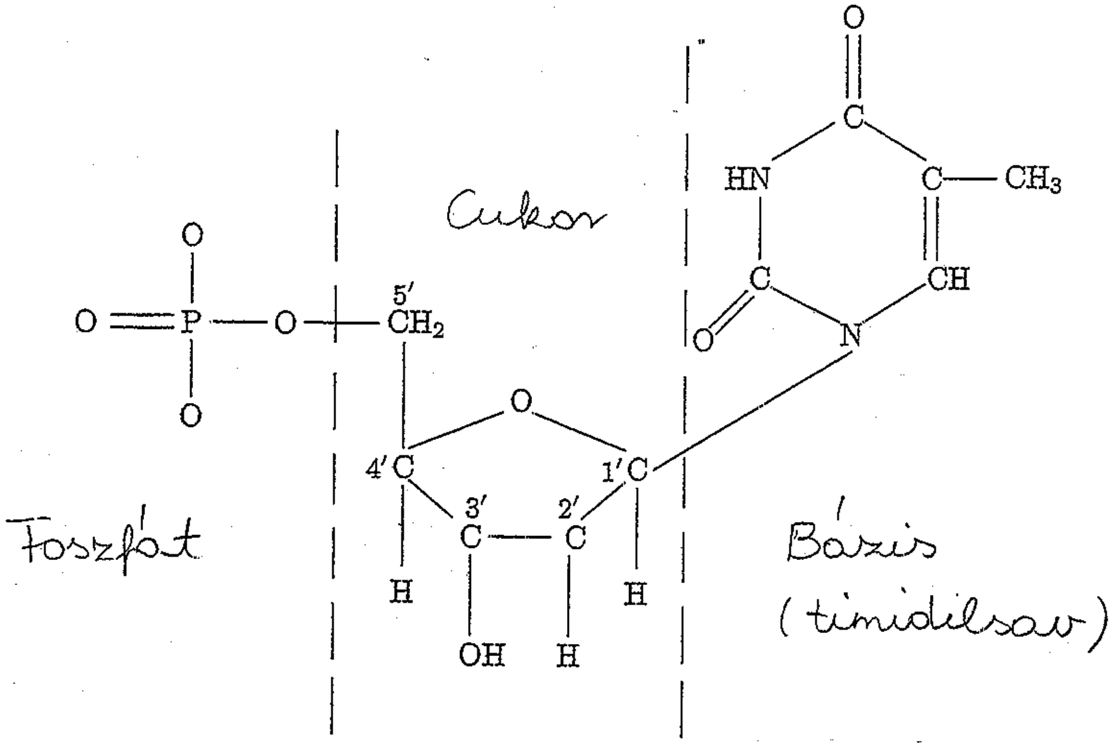
kettős-helix (double-helix):

két nukleotid sorozatból álló lánc csigavonalban helyezkedik el;

a nukleotidok közötti kémiai kötések biztosítják az adott szerkezetet;



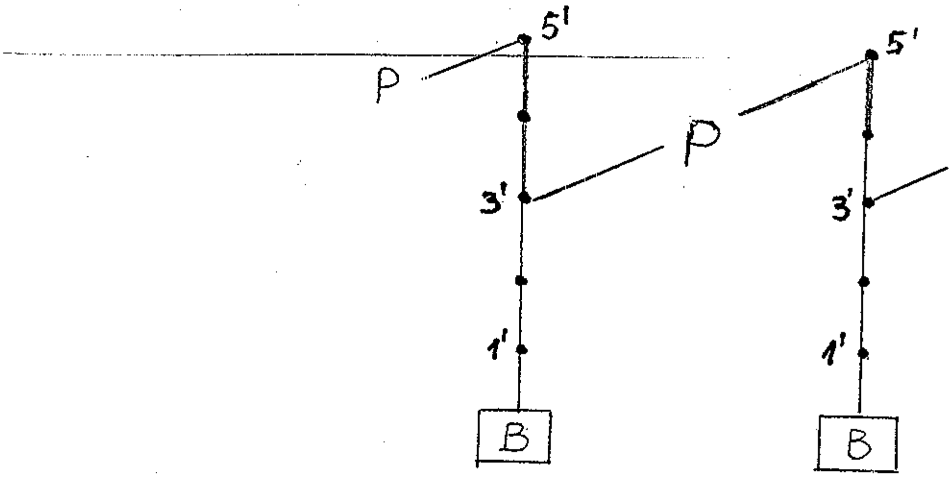
Nukleotid szerkezete :



Bázisok :

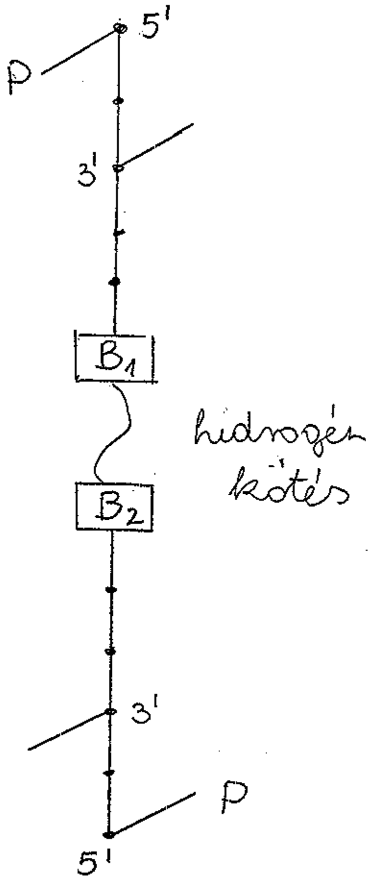
A adenilsav
C citidilsav
G guanilsav
T timidilsav

láncon belül a nukleotidok kapcsolódása



5' ⟶ 3' a lánc iránya

Watson - Crick komplementaritás a láncok között



$B_1 = T$ és $B_2 = A$ (gyengébb)

vagy

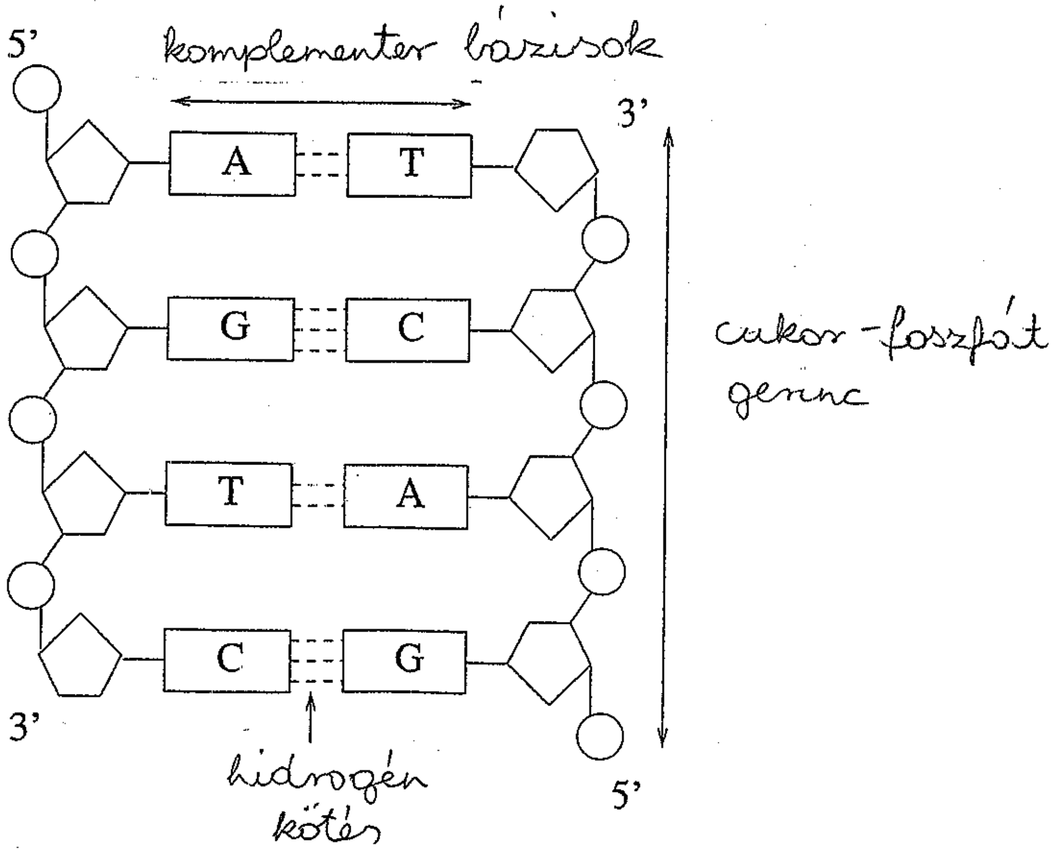
$B_1 = C$ és $B_2 = G$ (erősebb)

5' ⟶ 3

A G T C

T C A G

3' ⟵ 5'



1978. Arber, Smith, Nathans
restrikciós endonukleáz felfedezése

↓

lehetőség nyílik a DNS molekulák jól-definiált kisebb méretű szakaszokra bontására

↓

génsebészet kialakulása (in vitro)

1980. Gilbert, Sanger
DNS nukleotidsorrendjének meghatározása

70-es években a DNS mesterséges kémiai szintézise (tetszőleges nukleotidsorrenddel rendelkező DNS-szakaszok előállítása).
DNS-ben nukleotidok kicserélése egy másikra.

1985. Kary Mullis
PCR (Polymerase Chain Reaction) módszer:
kémcsőben (in vitro) a DNS molekula egy adott hosszúságú szakaszának megsokszorozása (néhány óra alatt többezerszeresre növelhető egy adott DNS-szakasz példányszáma)

⇓

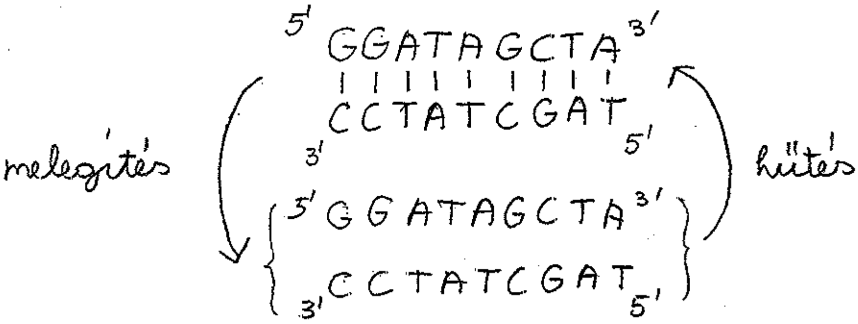
Nincs mennyiségi akadály a DNS-el kapcsolatban.

⇓

Ezek az eredmények alapozták meg a DNS számítás kialakulásának.

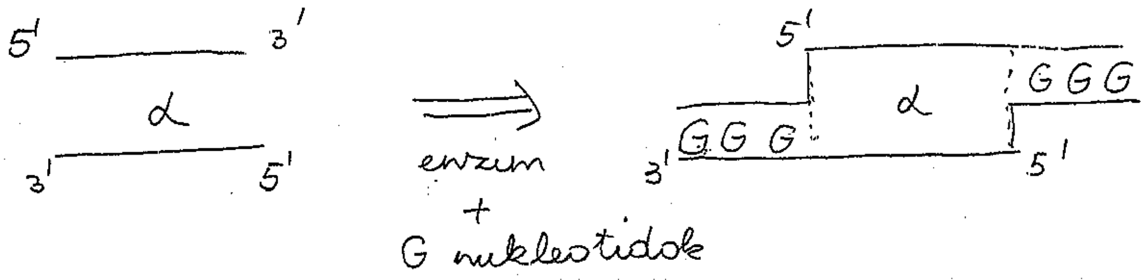
Műveletek DNS molekulákon

- kettős láncból egyszerű láncokra bontás és fordítva.



- nem-teljes DNS molekula nukleotidokkal való kiegészítése (szükséges nukleotid jelenlét mellett enzimekkel)

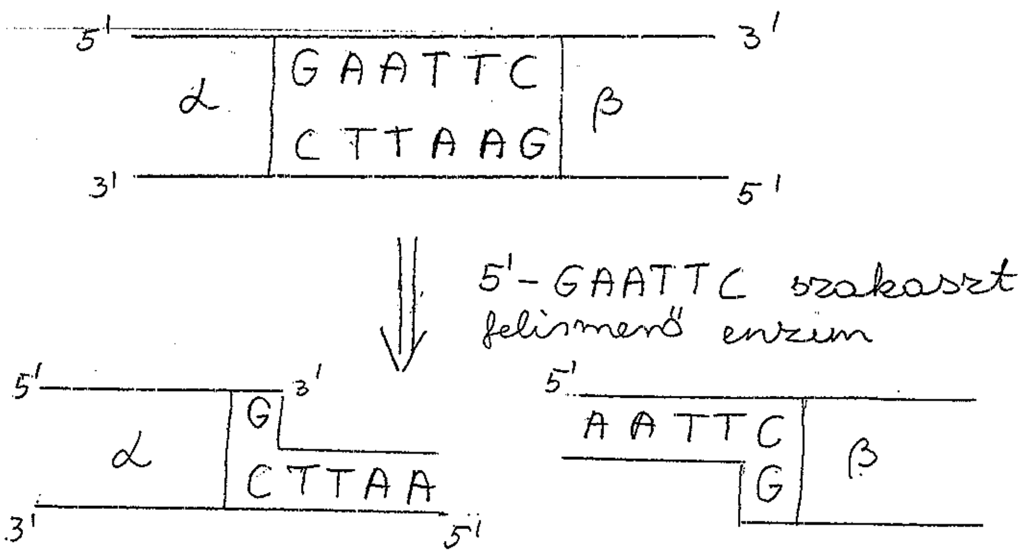
- DNS lánc hosszabbítása



- DNS lánc rövidítése (enzimekkel)

- DNS lánc szétvágása

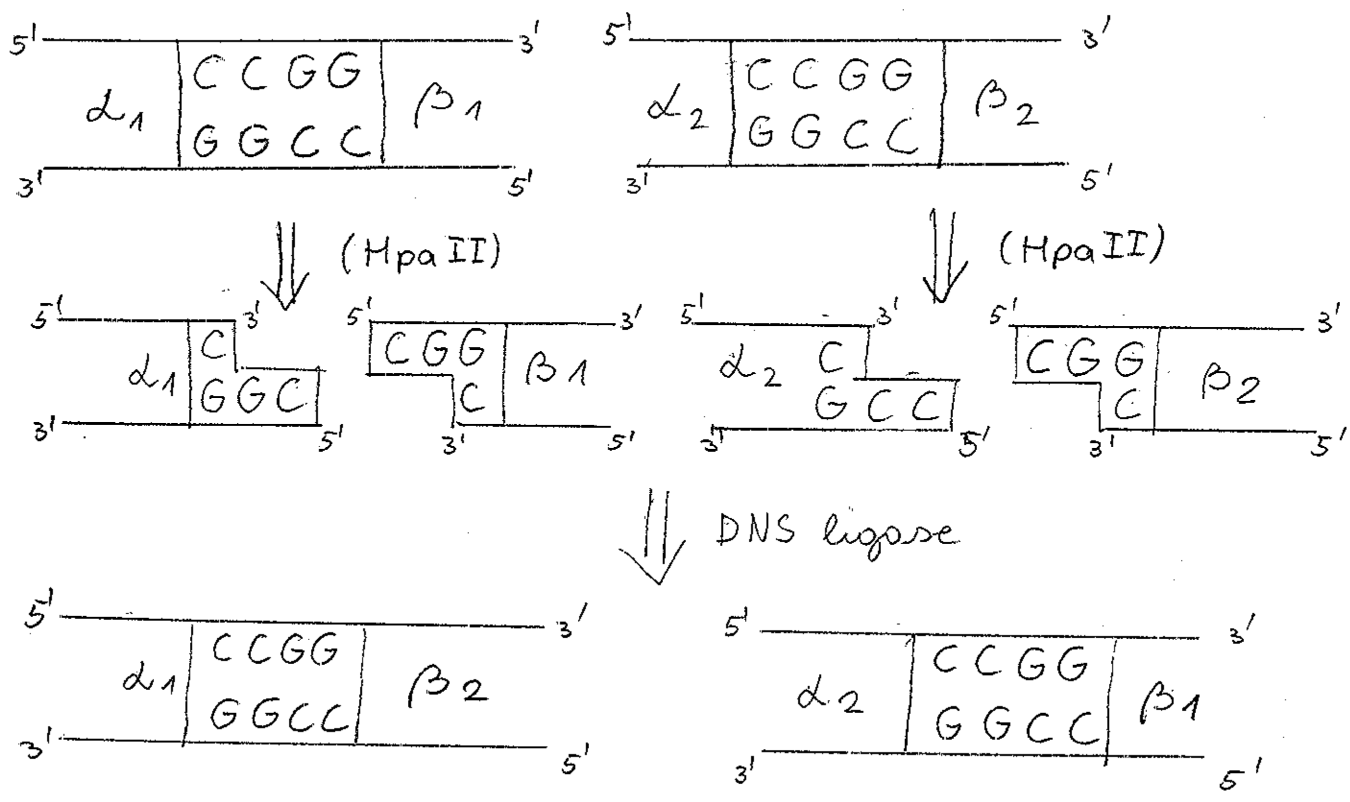
  eltérő hatású enzimek: egyszerű láncon, kettős láncon egyenes vágás vagy lépcsőzetes vágás



– DNS láncok összekapcsolódása

- egyszerű láncok egyszerű lánccá kapcsolódása
- kettős láncok lineáris kapcsolódása
- egymáshoz illeszkedő nyúlványú láncok kapcsolódása

hibrid molekulák kialakulása



– DNS lánc adott ponton való bővítése adott lánc-szakasszal

– DNS láncból adott helyen egy lánc-szakasz törlése

– DNS molekulák többszörözése (PCR)

- DNS molekulákat tartalmazó keverékből adott tulajdonságú molekulák szűrése
- DNS molekulák kiválasztása hossz alapján egy keverékből
- DNS molekulák olvasása

DNS műveleteket alkalmazó modellek

V ábécé

V^* a V feletti szavak halmaza

$\rho \subseteq V \times V$ szimmetrikus reláció (a komplementaritás adható meg)

$(x, y) \in V^* \times V^*$ jelölés helyett $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \in \begin{pmatrix} V^* \\ V^* \end{pmatrix}$ jelölés

konkatenáció a $V^* \times V^*$ elemei között:

$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} \in \begin{pmatrix} V^* \\ V^* \end{pmatrix}$ akkor $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 y_1 \\ x_2 y_2 \end{pmatrix}$

0 hosszúságú szó: λ

$$\begin{bmatrix} V \\ V \end{bmatrix}_\rho = \left\{ \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \;\middle|\; a, b \in V,\ (a, b) \in \rho \right\}$$

$WK_\rho(V) = \begin{bmatrix} V \\ V \end{bmatrix}_\rho^*$ Watson – Crick domain a V ábécé és ρ reláció felett

$w_1 = a_1 \dots a_n$, $w_2 = b_1 \dots b_n$, $a_i, b_i \in V$, $\begin{bmatrix} a_i \\ b_i \end{bmatrix} \in \begin{bmatrix} V \\ V \end{bmatrix}$

$\begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix} \dots \begin{bmatrix} a_n \\ b_n \end{bmatrix} \in WK_\rho(V)$ helyett $\begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix}$ jelölés, ahol w_1 felső lánc, w_2 alsó lánc

$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} \in WK_\rho(V)$, akkor $\begin{bmatrix} x_1 y_1 \\ x_2 y_2 \end{bmatrix} \in WK_\rho(V)$

$WK_\rho(V)$ monoid, egységeleme $\begin{bmatrix} \lambda \\ \lambda \end{bmatrix}$

(teljes DNS kettős láncok)

$W_\varrho(V)$ – tetszőleges DNS láncokat tartalmazza

$$L_\varrho(V) = \left(\binom{\lambda}{V^*} \cup \binom{V^*}{\lambda}\right) \begin{bmatrix} V \\ V \end{bmatrix}_\varrho^*$$

$$R_\varrho(V) = \begin{bmatrix} V \\ V \end{bmatrix}_\varrho^* \left(\binom{\lambda}{V^*} \cup \binom{V^*}{\lambda}\right)$$

$$LR_\varrho(V) = \left(\binom{\lambda}{V^*} \cup \binom{V^*}{\lambda}\right) \begin{bmatrix} V \\ V \end{bmatrix}_\varrho^+ \left(\binom{\lambda}{V^*} \cup \binom{V^*}{\lambda}\right)$$

$W_\varrho(V) = L_\varrho(V) \cup R_\varrho(V) \cup LR_\varrho(V)$ — dominók

$LR_\varrho(V)$ elemei jól-induló kettős láncok

Legyen $x, y \in W_\varrho(V)$, x jól-induló kettős lánc.

μ egy parciális művelet a $W_\varrho(V)$ elemei között

(DNS láncok összekapcsolódását és tapadását modellezi)

x egyértelműen felbontható

$x = x_1 x_2 x_3$, ahol $x_1, x_3 \in \binom{V^*}{\lambda} \cup \binom{\lambda}{V^*}$, $x_2 \in WK_\varrho(V) - \left\{\begin{bmatrix} \lambda \\ \lambda \end{bmatrix}\right\}$

$\mu(x, y)$ definíciója :

1. $x_3 = \binom{u}{\lambda}$, $y = \binom{\lambda}{v} y'$, $u, v \in V^*$, $\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} \in WK_\varrho(V)$, $y' \in R_\varrho(V)$ akkor

$$\mu(x, y) = x_1 x_2 \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} y'$$

x y

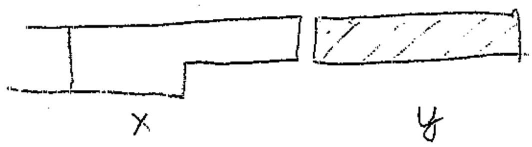
2. $x_3 = \binom{\lambda}{v}$, $y = \binom{u}{\lambda} y'$, $u, v \in V^*$, $\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} \in WK_\varrho(V)$, $y' \in R_\varrho(V)$ akkor

$$\mu(x, y) = x_1 x_2 \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} y'$$

x y

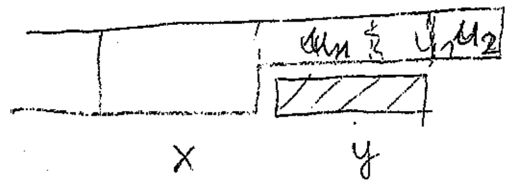
3. $x_3 = \begin{pmatrix} u_1 \\ \lambda \end{pmatrix}$, $y = \begin{pmatrix} u_2 \\ \lambda \end{pmatrix}$, $u_1, u_2 \in V^*$ akkor

$$\mu(x, y) = x_1 \, x_2 \begin{pmatrix} u_1 u_2 \\ \lambda \end{pmatrix}$$



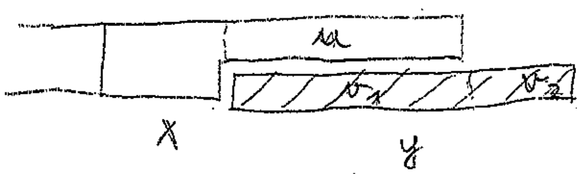
4. $x_3 = \begin{pmatrix} u_1 u_2 \\ \lambda \end{pmatrix}$, $y = \begin{pmatrix} \lambda \\ v \end{pmatrix}$, $u_1, u_2, v \in V^*$, $\begin{bmatrix} u_1 \\ v \end{bmatrix} \in WK_\varrho(V)$ akkor

$$\mu(x, y) = x_1 \, x_2 \begin{bmatrix} u_1 \\ v \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_2 \\ \lambda \end{pmatrix}$$



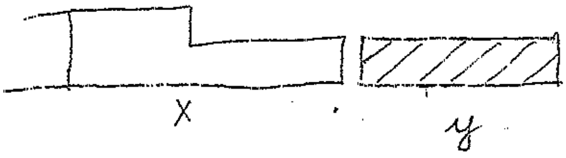
5. $x_3 = \begin{pmatrix} u \\ \lambda \end{pmatrix}$, $y = \begin{pmatrix} \lambda \\ v_1 v_2 \end{pmatrix}$, $u, v_1, v_2 \in V^*$, $\begin{bmatrix} u \\ v_1 \end{bmatrix} \in WK_\varrho(V)$ akkor

$$\mu(x, y) = x_1 \, x_2 \begin{bmatrix} u \\ v_1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \lambda \\ v_2 \end{pmatrix}$$



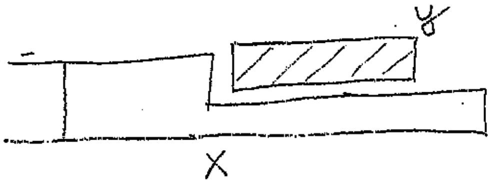
6. $x_3 = \begin{pmatrix} \lambda \\ v_1 \end{pmatrix}$, $y = \begin{pmatrix} \lambda \\ v_2 \end{pmatrix}$, $v_1, v_2 \in V^*$ akkor

$$\mu(x, y) = x_1 \, x_2 \begin{pmatrix} \lambda \\ v_1 v_2 \end{pmatrix}$$



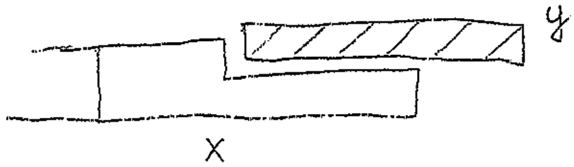
7. $x_3 = \begin{pmatrix} \lambda \\ v_1 v_2 \end{pmatrix}$, $y = \begin{pmatrix} u \\ \lambda \end{pmatrix}$, $u, v_1, v_2 \in V^*$, $\begin{bmatrix} u \\ v_1 \end{bmatrix} \in WK_\rho(V)$ akkor

$$\mu(x,y) = x_1 x_2 \begin{bmatrix} u \\ v_1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \lambda \\ v_2 \end{pmatrix}$$



8. $x_3 = \begin{pmatrix} \lambda \\ v \end{pmatrix}$, $y = \begin{pmatrix} u_1 u_2 \\ \lambda \end{pmatrix}$, $u_1, u_2, v \in V^*$, $\begin{bmatrix} u_1 \\ v \end{bmatrix} \in WK_\rho(V)$ akkor

$$\mu(x,y) = x_1 x_2 \begin{bmatrix} u_1 \\ v \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_2 \\ \lambda \end{pmatrix}$$



$\mu(y,x)$ definiálása szimmetrikusan a $\mu(x,y)$-hoz, vegyük ez egy jól-induló kettős láncot (x) a bal végén bővít dominóval (y).

A jobbról, illetve balról történő bővítés jelölésben nincs megkülönböztetve, viszont minden esetben a μ-nek legalább az egyik argumentumának jól-induló kettős láncnak kell lenni

~~Minden eset tartalmazza~~ a nem tapadós végű x jól-induló kettős lánc bővítését is

$\mu'(x,y)$: korlátozott tapadós művelet
azonos a $\mu(x,y)$ definícióval, kivéve a 3 és 6. esetet nem tartalmazza

$\gamma = (V, \rho, A, D)$ egy sticker rendszer, ahol

V: egy ábécé

$\rho \subseteq V \times V$ szimmetrikus reláció

$A \subseteq LR_\rho(V)$ véges halmaz, elemei az axiómák

$D \subseteq W_\rho(V) \times W_\rho(V)$ véges halmaz, elemei a dominó-párok

Legyen $x, y \in LR_\rho(V)$

$$x \Rightarrow y \iff \exists (u, v) \in D,\ y = \mu(u, \mu(x, v))$$

$$(\mu(u, \mu(x, v)) = \mu(\mu(u, x), v))$$

Kiszámítás γ-ban: $x_1 \Rightarrow \ldots \Rightarrow x_k$, $x_1 \in A$

Teljes kiszámítás γ-ban: $x_1 \overset{*}{\Rightarrow} x_k$, $x_k \in WK_\rho(V)$

$$LM_n(\gamma) = \{ w \in WK_\rho(V) \mid x \overset{*}{\Rightarrow} w,\ x \in A \}$$

(LM – language of molecules, n – non-restricted)

γ által generált nyelv:

$$L_n(\gamma) = \{ w \in V^* \mid \exists w' \in V^*, \begin{bmatrix} w \\ w' \end{bmatrix} \in LM_n(\gamma) \}$$

Megszorított kiszámítások:

egy $x_1 \Rightarrow x_2 \Rightarrow \ldots \Rightarrow x_k$ teljes kiszámítás a γ-ban

– primitív, ha $\forall\ 1 \leq i < k$ esetén $x_i \notin WK_\rho(V)$

– d késleltetésű, ha $\forall\ 1 \leq i < k$ esetén $d(x_i) \leq d$

$d(x)$ az x nyúlványának hossza

D elemeinek tulajdonsége alapján megszorított $\gamma = (V, \rho, A, D)$ sticker rendszer:

- egyoldalú, ha $\forall (u,v) \in D$ esetén vagy $u = \lambda$ vagy $v = \lambda$
- reguláris, ha $\forall (u,v) \in D$ esetén $u = \lambda$
- egyszerű, ha vagy $\forall (u,v) \in D$ esetén $u, v \in \binom{V^*}{\lambda}$,

  vagy $\forall (u,v) \in D$ esetén $u, v \in \binom{\lambda}{V^*}$

<u>Nyelvcsaládok</u> jelölése:

Legyen $\alpha \in \{n, p, b\}$,

$ASL(\alpha) = \{ L_\alpha(\gamma) \mid \gamma$ tetszőleges sticker rendszer$\}$

pl.:

$ASL(b)$ a korlátos késleltetésű sticker rendszerek által generált nyelvek családja.

$OSL(\alpha)$ – egyoldalú rendszerek

$RSL(\alpha)$ – reguláris rendszerek

$SSL(\alpha)$ – egyszerű rendszerek

Néhány nyelvcsaládokra vonatkozó állítás.

$REG = OSL(b) = RSL(b) = OSL(n) = RSL(n)$

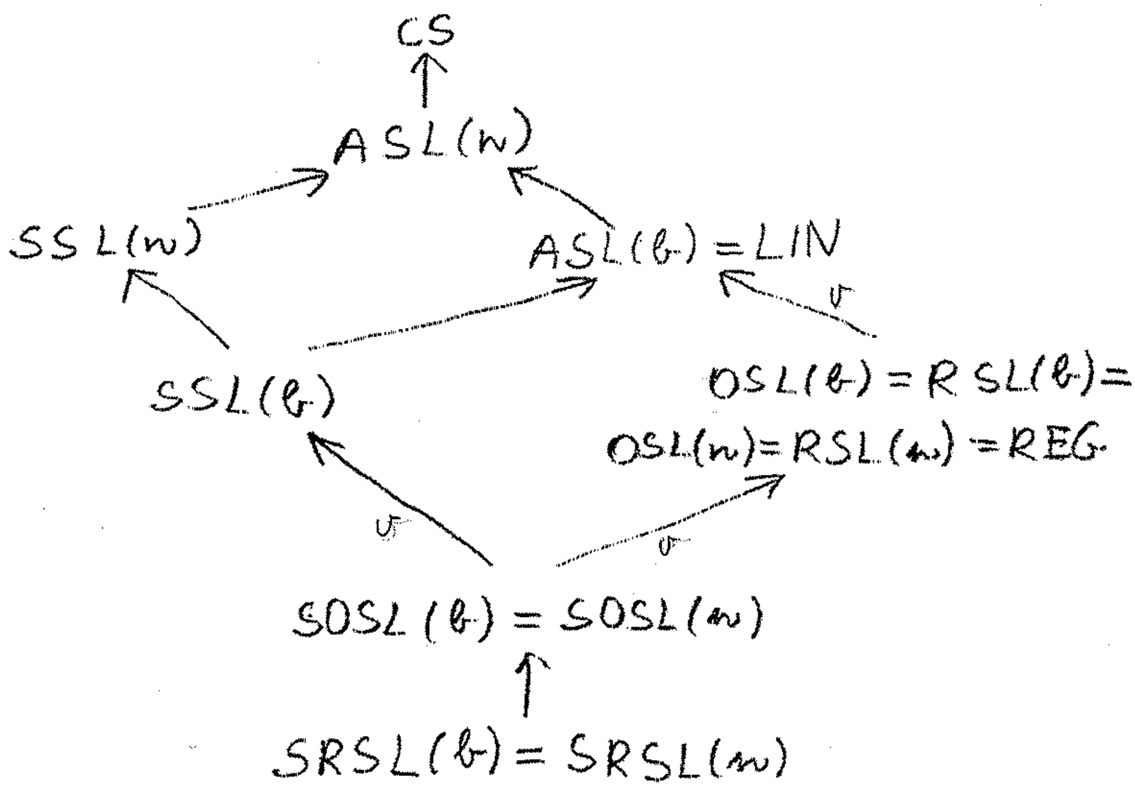
(egy lépésben csak egy oldalon illeszt dominót)

$LIN = ASL(b)$

$ASL(n) \supset LIN$

$XSL(\alpha) \subseteq CS$ minden $X \in \{A, O, R, S, SO, SR\}$

(nincs törlés)


CS
ASL(w)
SSL(w)
ASL(b) = LIN
SSL(b)
OSL(b) = RSL(b) =
OSL(w) = RSL(w) = REG
SOSL(b) = SOSL(w)
SRSL(b) = SRSL(w)

Példa 1.

Egyszerű sticker rendszer

$\gamma_1 = (V, \rho, A, D)$

$V = \{a, b, c\}$

$\rho = \{(a,a), (b,b), (c,c)\}$

$A = \{ \begin{bmatrix} a \\ a \end{bmatrix} \}$

$D = \{ (\binom{b}{\lambda}, \binom{b}{\lambda}), (\binom{c}{\lambda}, \binom{\lambda}{\lambda}), (\binom{\lambda}{b}, \binom{\lambda}{\lambda}), (\binom{\lambda}{c}, \binom{\lambda}{b}) \}$

$WK_\rho(V) = \{ \begin{bmatrix} a \\ a \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} b \\ b \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} c \\ c \end{bmatrix} \}$

$$LM_n(\gamma_1) = \{ w \in WK_\rho(V) \mid w = x \begin{bmatrix} a \\ a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b \\ b \end{bmatrix}^m, m \geq 0, \; x \in \{ \begin{bmatrix} b \\ b \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} c \\ c \end{bmatrix} \}^*, \; |x|_{\begin{bmatrix} b \\ b \end{bmatrix}} = |x|_{\begin{bmatrix} c \\ c \end{bmatrix}} = m \}$$

$$\underbrace{L_n(\gamma_1) \cap \underset{\in REG}{c^+ b^+ a b^+} = \underset{\notin CF}{\{ c^m b^m a b^m \mid m \geq 1 \}}}_{L_n(\gamma_1) \text{ nem } CF}$$

Teljesül

$L_p(\gamma_1) = L_n(\gamma_1)$ (először a felső lánc kialakítás, utána az alsó)

de

$L_d(\gamma_1) \subset L_n(\gamma_1)$ minden $d \geq 1$ esetén

($\begin{bmatrix} c \\ c \end{bmatrix}^m \begin{bmatrix} b \\ b \end{bmatrix}^m \begin{bmatrix} a \\ a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b \\ b \end{bmatrix}^m$ nem állítható elő m-nél kisebb korlátú késleltetésű kiszámítással.

Példa 2.

$\gamma_2 = (V, \varrho, A, D)$

$V = U \cup \bar{U} \cup U'$ ahol U egy ábécé

$\varrho = \{(a,a), (\bar{a},\bar{a}), (a', a') \mid a \in U\}$

$A = \{ \begin{bmatrix} a_0' \\ a_0' \end{bmatrix} \}$, ahol $a_0 \in U$ és rögzített elem

$D = \{ (\binom{a'}{\lambda}, \begin{bmatrix} a \\ a \end{bmatrix}), (\binom{\lambda}{a'}, \begin{bmatrix} \bar{a} \\ \bar{a} \end{bmatrix}) \mid a \in U \}$

$LM_n(\gamma_2) = \{ \begin{bmatrix} x' \\ x' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0' \\ a_0' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w \\ w \end{bmatrix} \mid x \in U^*, mi(w) \in x \sqcup\!\sqcup \bar{x} \}$,

$L_n(\gamma_2) = \{ x' a_0' w \mid x \in U^*, mi(w) \in x \sqcup\!\sqcup \bar{x} \}$

(ha $x = a_1 \dots a_n$, $a_i \in V$, $1 \le i \le n$, akkor

$mi(x) = a_n \dots a_1$

$mi(L) = \{ mi(x) \mid x \in L \}$, $L \subseteq V^*$,

$\bar{x} = \bar{a}_1 \dots \bar{a}_n$

$x \sqcup\!\sqcup \bar{x} = \{ w \in \{a_1, \dots, a_n, \bar{a}_1, \dots, \bar{a}_n\}^* \mid$ w-ben x betűinek sorrendje és $\bar{x}$ betűinek sorrendje változatlan $\}$

$TS_V = \bigcup_{x \in V^*} (x \sqcup\!\sqcup \bar{x})$)

Legyen

$h : U \cup \bar{U} \cup U' \to U \cup \bar{U} \cup \{\lambda\}$ morfizmus, ahol

$h(u') = \lambda$, $h(u) = u$, $h(\bar{u}) = \bar{u}$, $u \in U, u' \in U', \bar{u} \in \bar{U}$

h egy gyenge kódolás

Ekkor

$h(L_n(\gamma_2)) = TS_U$