DNS számítási modellek

Jordaloma:

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

J. Amos: Theoretical and Experimental DNA
Computation (New Computing Series),

N. Jonoska, G. Păun, G. Rozenberg (eds.): Aspects of Molecular
( Essays Dedicated to Tom Head on the Occasion
of his 70th Birthday )

C. Martín-Vide, V. Mitrane (eds.): Where Mathematics,
Computer Science, Linguistics and Biology Meet,
( Essays in Honour of Gheorghe Păun )
DNS számítási modellek

DNS (dezoksinbonukleinsav rövidítése)
DNS molekula az 'elő sejtkeben (in vivo) van.
1944. Avery, McLeod, McCarty:
DNS szerepe az átöröklődésben
1953. James Watson, Francis Crick:
DNS térszerkezet leírása

kettős - helix (double - helix):
 két nukleotid sorozattól álló lánc
 csigavonalban helyezkedik el;
 a nukleotidok közötti kémiai kötések
 biztosítják az adott szerkezeted;
Nukleotid szerkezete:

Foszfat

Cukor

Bázis (timidilsav)

Bázisok:

A adenilsav
C citidilsav
G guanilisav
T timidilsav

láncon belül a nukleotidok kapcsolódása

5' P 3'

1' 3'

B 5'

a lánc iránya 3' → 5'
Watson-Crick komplementaritás a láncok között

$B_1 = T \text{ és } B_2 = A$ (gyengébb)

vagy

$B_1 = C \text{ és } B_2 = G$ (emberi)

cukor-foszfát géninc

$5' \rightarrow 3$
AGTC
T CAG
$3' \leftarrow 5'$
1978. Arber, Smith, Nathans
restrikciós endonukleáz felfedezése

↓

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

↓

génszemenet kialakulása (in vitro)

1980. Gilbert, Sanger
DNS nukleotid sorrendjét meghatározza

70-es években a DNS mesterséges kémiai szintézise
(tetszőleges nukleotid sorrenddel rendelkező DNS-
szakaszok elsőállítása).

DNS-ben nukleotidok kicsereése egy másikra

1985. Kary Mullis
PCR (Polymerase Chain Reaction) módszer:

kémésőben (in vitro) a DNS molekula egy
adott hosszúságú szakaszának megsokszorozása
(néhány óra alatt többzérszeresre
növelhető egy adott DNS-szakasz példány-
száma)

↓

Nincs mennyiségi akadály a DNS-el
kapcsolatban.

↓

Ezek az eredmények alaposíták meg a
DNS számítógépes kialakulásának.
Különböző DNS molekulákának

- Kettős láncból egyszerű láncokra bontás és fordítás.

\[
\begin{align*}
5' & \text{GGATAGCTA} \\
3' & \text{CCTATCGAT} \\
\end{align*}
\]

melegítés

\[
\begin{align*}
3' & \text{GGATAGCTA} \\
5' & \text{CCTATCGAT} \\
\end{align*}
\]

hűtés

- Nem-teljes DNS molekula nukleotidokból való kiegészítése (szükséges nukleotid jelenlét mellett enzimekkel)

- DNS lánc hosszabbítása

\[
\begin{align*}
5' & \text{GGG} \\
3' & \text{GGG} \\
\end{align*}
\]

\[
\begin{align*}
\text{enzim} & + \\
\text{G nukleotidok} \\
\end{align*}
\]

- DNS lánc merődítése (enzimekkel)

- DNS lánc szétvágása

Eltérő hatású enzimek: egyszerű láncok, kettős láncok egyenes végés vagy lépcsőztes végés

\[
\begin{align*}
5' & \text{GAATTC} \\
3' & \text{CTTAAAG} \\
\end{align*}
\]

\[
\begin{align*}
\text{enzim} & \\
\end{align*}
\]

\[
\begin{align*}
5' & \text{GAATTC szakasz felismerő enzim} \\
\end{align*}
\]

\[
\begin{align*}
5' & \text{GAATTC} \\
3' & \text{CTTAA} \\
\end{align*}
\]

\[
\begin{align*}
\text{enzim} & \\
\end{align*}
\]
- DNS lánkok összekapcsolódása
  - egyszenű lánkok egyszenű lánccso kapcsolódása
  - kettős lánkok lineáris kapcsolódása
  - egymáshoz illeszkedő nyúlványú lánkok kapcsolódása

Képnyi molekulák kialakulása

\[
\begin{align*}
5' & \quad d_1 \quad \text{CCGG} \quad d_2 \quad \text{CCGG} \\
3' & \quad \text{GGCC} \quad \text{GGCC} \\
\downarrow \quad \text{(HpaII)} \\
5' & \quad d_1 \quad \text{CGGC} \quad d_2 \quad \text{CGGC} \\
3' & \quad \text{GGCG} \quad \text{GGCG} \\
\downarrow \quad \text{DNS ligase} \\
5' & \quad d_1 \quad \text{CCGG} \quad d_2 \quad \text{CCGG} \\
3' & \quad \text{GGCC} \quad \text{GGCC}
\end{align*}
\]

- DNS lánccal adott ponton való bővítése adott lánccso sakadással
- DNS lánccal adott helyen egy lánccso sakadás
  törlése
- DNS molekulák többszörözése \((PCR)\)
- DNS molekulákat tartalmazó keverék ből adott tulajdonsági molekulák szűrésé
- DNS molekulák kiválasztása hossz alapján egy keverék ből
- DNS molekulák oldasára
DNS műveleteket alkalmazó modellek

V ábécé

$V^*$ a $V$ felett szavak halmaza

$S \subseteq V \times V$ szimmetrikus reláció (a komplementáris adható meg)

$(x, y) \in V^* \times V^*$ jelölés helyett $(x^*) \in (V^*)^*$ jelölés;

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

\[
\begin{pmatrix}
(x_1) : (y_1) \\
(x_2) : (y_2)
\end{pmatrix} \in \left(\begin{pmatrix} V \end{pmatrix}\right)^* \quad \text{akkor} \quad \begin{pmatrix} x_1 \cdot y_1 \\
X
\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \cdot y_1 \\
x_2 \cdot y_2
\end{pmatrix}
\]

O hosszúsága orvosi: $\lambda$

\[
\begin{pmatrix} V \end{pmatrix} = \left\{ \begin{pmatrix} a \end{pmatrix} : a, b \in V, (a, b) \in S \right\}
\]

\[
WK_S(V) = \left[ V \right]^* \quad \text{Watson-Crick domain a V ábécé}
\]

és $S$ reláció felett

\[
\begin{pmatrix} a_1 \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} a_n \end{pmatrix} \in WK_S(V) \quad \text{helyett} \quad \begin{pmatrix} [a_i] \end{pmatrix} \in \left[ V \right]
\]

\[
\begin{pmatrix} b_1 \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} b_n \end{pmatrix} \in WK_S(V) \quad \text{jelölés, ahonél w₁ felől lánc, w₂ őlső lánc}
\]

\[
\begin{pmatrix} x_1 \end{pmatrix} : \begin{pmatrix} y_1 \end{pmatrix} \in WK_S(V), \text{akkor} \begin{pmatrix} x_1 y_1 \\
x_2 y_2
\end{pmatrix} \in WK_S(V)
\]

\[
WK_S(V) \text{ monoid, egységeleme } \begin{pmatrix} \lambda \end{pmatrix}
\]

(teljes DNS kettős láncok)
$W_8(V) -$ tetszőleges DNS láncokat tartalmazó

$L_8(V) = \left( \left[ \frac{\lambda}{V^*} \right] \cup \left[ \frac{\lambda}{V*} \right] \right) \left[ V \right]_{*}$

$R_8(V) = \left[ V \right]_{*} \left( \left[ \frac{\lambda}{V*} \right] \cup \left[ \frac{\lambda}{V*} \right] \right)$

$LR_8(V) = \left( \left[ \frac{\lambda}{V*} \right] \cup \left[ \frac{\lambda}{V*} \right] \right) \left[ V \right]_{*} \left( \left[ \frac{\lambda}{V*} \right] \cup \left[ \frac{\lambda}{V*} \right] \right)$

$W_8(V) = L_8(V) \cup R_8(V) \cup LR_8(V) -$ domínók

$LR_8(V)$ elemei pól-induló kettős láncok

Legyen $x, y \in W_8(V)$, $x$ pól-induló kettős lénc.

$m :$ egy parcialis művelet a $W_8(V)$ elemei között

(DNS láncok összekapcsolódását és tapadását modellíza)

$x$ egyértelműen felbontatható

$x = x_1 x_2 x_3$, ahol $x_1, x_3 \in \left[ \frac{\lambda}{V*} \right] \cup \left[ \frac{\lambda}{V*} \right], x_2 \in \mathcal{W}_8(V) \setminus \left[ \frac{\lambda}{V*} \right]$,

$m(x, y)$ definíciója:

1. $x = \left( \frac{u}{\lambda} \right), y = \left( \frac{u}{V} \right), u, v \in V^*, \left[ \frac{u}{v} \right] \in \mathcal{W}_8(V), y' \in R_8(V)$ akkor

   $m(x, y) = x_1 x_2 \left[ \frac{u}{v} \right] y'$

   ![Diagram 1](image)

2. $x = \left( \frac{u}{V} \right), y = \left( \frac{u}{\lambda} \right), u, v \in V^*, \left[ \frac{u}{v} \right] \in \mathcal{W}_8(V), y' \in R_8(V)$ akkor

   $m(x, y) = x_1 x_2 \left[ \frac{u}{v} \right] y'$

   ![Diagram 2](image)
3. \( x_3 = \left( \begin{array}{c} u_1 \\ \lambda \end{array} \right), \quad y = \left( \begin{array}{c} u_2 \\ \lambda \end{array} \right), \quad u_1, u_2 \in V^* \) \\
\( \mathcal{M}(x, y) = x_1 x_2 \left( \begin{array}{c} u_1 u_2 \\ \lambda \end{array} \right) \)

4. \( x_3 = \left( \begin{array}{c} u_1 u_2 \\ \lambda \end{array} \right), \quad y = \left( \begin{array}{c} \lambda \\ v \end{array} \right), \quad u_1, u_2, v \in V^*, \quad \left[ \begin{array}{c} u_1 \\ v \end{array} \right] \in \mathcal{WK}_S(V) \) \\
\( \mathcal{M}(x, y) = x_1 x_2 \left[ \begin{array}{c} u_1 \\ v \end{array} \right] \left( \begin{array}{c} u_2 \\ \lambda \end{array} \right) \)

5. \( x_3 = \left( \begin{array}{c} u \\ \lambda \end{array} \right), \quad y = \left( \begin{array}{c} \lambda \\ v_1 v_2 \end{array} \right), \quad u_1, u_2, v \in V^*, \quad \left[ \begin{array}{c} u \\ v_1 \\ v_2 \end{array} \right] \in \mathcal{WK}_S(V) \) \\
\( \mathcal{M}(x, y) = x_1 x_2 \left[ \begin{array}{c} u \\ v_1 \\ v_2 \end{array} \right] \left( \begin{array}{c} \lambda \\ \\ \end{array} \right) \)

6. \( x_3 = \left( \begin{array}{c} \lambda \\ v_1 v_2 \end{array} \right), \quad y = \left( \begin{array}{c} \lambda \\ v_1 v_2 \end{array} \right), \quad u_1, u_2 \in V^* \) \\
\( \mathcal{M}(x, y) = x_1 x_2 \left( \begin{array}{c} \lambda \\ v_1 v_2 \end{array} \right) \)
7. \[ x_3 = \begin{pmatrix} \lambda \\ u_1, u_2 \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} u_1 \\ \lambda \end{pmatrix}, \quad u_1, u_2, v \in V^* : \begin{bmatrix} u_1 \\ v \end{bmatrix} \in WK_3(V) \text{ elektor} \]
\[ m(x_1, y) = x_1 x_2 \begin{bmatrix} u_1 \\ v \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \lambda \\ u_2 \end{pmatrix} \]

3. \[ x_3 = \begin{pmatrix} \lambda \\ u_1, u_2 \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} u_1, u_2 \\ \lambda \end{pmatrix}, \quad u_1, u_2, v \in V^* : \begin{bmatrix} u_1 \\ v \end{bmatrix} \in WK_3(V) \text{ elektor} \]
\[ m(x_1, y) = x_1 x_2 \begin{bmatrix} u_1 \\ v \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_2 \\ \lambda \end{pmatrix} \]

\( m(y, x) \) definíciójára szimmetriával a \( m(x_1, y) \)-hoz.

Vegyük észre, hogy ez egy jól-induló kettős láncot \( x \) a bal végén bővít dominoval \( y \).

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

Mindennél esetén társoljuk a nem tepedő végi \( x \) jól-induló kettős lánc bővítését is.

\( m'(x_1, y) \): korlátozott tepedés művelet

azonos a \( m(x_1, y) \) definícióval, kevésbé a 3 és 6.

esetet nem társoljuk.
\( \delta = (V, \sigma, A, D) \) egy sticker rendszer, ahol

V: egy \( \sigma \)-üvék

\( \delta \subseteq V \times V \) szimmetrikus reláció

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

D \( \subseteq W_\delta(V) \times W_\delta(V) \) véges halmaz, elemei a domináns

Legyen \( x, y \in LR_\delta(V) \)

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

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

Kiszámítás \( \delta \)-ben: \( x_1 \Rightarrow \ldots \Rightarrow x_k \), \( x_1 \in A \)

Teljes kiszámítás \( \delta \)-ban: \( x_1 \Rightarrow x_k \), \( x_k \in WK_\delta(V) \)

\[ LM_n(\delta) = \{ w \in WK_\delta(V) \mid x \Rightarrow w, x \in A \} \]

(\( LM \) - language of molecules; \( n \) - non-restricted)

\( \delta \) által generált nyelv:

\[ L_n(\delta) = \{ w \in V^* \mid \exists w' \in V^*, \left[ \frac{w}{w'} \right] \in LM_n(\delta) \} \]

Négszökött kiszámítások:

- egy \( x_1 \Rightarrow x_2 \Rightarrow \ldots \Rightarrow x_k \) teljes kiszámítás a \( \delta \)-ben
- primitív, ha \( \forall 1 \leq i < k \) esetén \( x_i \notin WK_\delta(V) \)
- d készletű, ha \( \forall 1 \leq i < k \) esetén \( d(x_i) \leq d \)
- \( d(x) \) az \( x \) nyúlványának hossza
D elemeirek tulajdonsága alapján megszöntött
\[ \delta = (V, \delta, A, I, D) \]

- 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 \( u, v \in \left( V^* \right) \),
  vagy \( \forall (u, v) \in D \) esetén \( u, v \in \left( V^* \right) \)

**Nyelvcsaládok jelölése:**

Legyen \( \lambda \in I \cup \{w, p, b, y, \} \),

\[ ASL(\lambda) = \{ L_\lambda(x) | \lambda \text{ tetszőleges sticker rendszer} \} \]

pl.:

- \( ASL(b) \) a korlátozott készletetésű sticker rendszernek által generált nyelvek családja,
- \( OSL(\lambda) \) - egyoldalú rendszerek
- \( RSL(\lambda) \) - reguláris rendszerek
- \( SSL(\lambda) \) - egyszerű rendszerek

Néhány nyelvcsaládokra vonatkozó állítás:

\[ REG = OSL(b) = RSL(b) = OSL(w) = RSL(w) \]

(egy lépésben csak egy oldalon illeszt dominót)

\[ LIN = ASL(b) \]
\[ ASL(w) \supset LIN \]
\[ XSL(\lambda) \subseteq CS \text{ minden } x \in \{A, O, R, S, SO, SR\} \]

(minos törles)
Példa 1.

Egyenszámú sticker rendszer

\[ \Sigma_1 = (V, \delta, A, D) \]

\[ V = \{ a, b, c \} \]

\[ \delta = \{ (a, a), (b, b), (c, c) \} \]

\[ A = \{ a \} \]

\[ D = \{ (b, a), (b, c), (c, c), (b, b), (b, a), (c, c), (c, a), (c, b) \} \]

\[ WK_2(V) = \{ [a], [b], [c] \} \]

\[ LM_n(\Sigma_1) = \{ w \in WK_2(V) \mid w = x [a][b]^m, m \geq 0, x \in [b][c] \} \]

\[ L_n(\Sigma_1) \cap C^+b^+a^+b^+ = \{ c^m b^m a b^m \mid m \geq 1 \} \in \text{REG} \subseteq \text{CF} \]

\[ L_n(\Sigma_1) \text{ nem CF} \]

Tehát

\[ L_p(\Sigma_1) = L_n(\Sigma_1) \text{ (előbb a felső lánc kialakítás, utána az alsó)} \]

de

\[ L_d(\Sigma_1) \subseteq L_n(\Sigma_1) \text{ minden } d \geq 1 \text{ esetén} \]

\[ ([c]^m [b]^m [a] [b]^m) \text{ nem állítható elő } m-vel kisebb korlátú készlettel kiskészletésszel kiszámítás-} \]

sak.
Feladat 2.

\( \sigma_2 = (V, \delta_1, A, D) \)

\( V = U \cup \bar{U} \cup U' \) ahonkívül egy altéteke

\( \delta = \{(a, \bar{a}, a, \bar{a}) | a \in U \} \)

\( A = \{ \left[ \begin{array}{c} a_0 \\ a_1 \end{array} \right] \} \), ahonkívül \( a_0 \in U \) és nöpszített elem

\( D = \{(\alpha_1), [\alpha], ((\alpha), \left[ \begin{array}{c} \bar{\alpha} \\ \bar{\alpha} \end{array} \right]) | \alpha \in U \} \)

\( L_N(\delta_2) = \{ \left[ \begin{array}{c} x' \\ \bar{x}' \end{array} \right] \left[ \begin{array}{c} a_{0} \\ a_{1} \end{array} \right] \left[ \begin{array}{c} \bar{w} \\ w \end{array} \right] | x \in U^*, m_i(w) \in x \cup \bar{x} \} \)

\( L_N(\delta_2) = \{ x' a_0' w | w \in U^*, m_i(w) \in x \cup \bar{x} \} \)

ahonkívül \( x = a_1, \ldots, a_n, a_i \in V, 1 \leq i \leq n \), akkor

\( m_i(x) = a_n, \ldots, a_1 \)

\( m_i(L) = \left\{ m_i(x) | x \in L \right\}, \{ L \subseteq V^* \} \)

\( \bar{x} = \bar{a}_1, \ldots, \bar{a}_n \)

\( x \cup \bar{x} = \{ w \in \{a_1, \ldots, a_n, \bar{a}_1, \ldots, \bar{a}_n\}^* | \bar{w} \text{-ben } x \)

betűnövek sorrendje és \( \bar{x} \) betűnövek sorrendje

változatlan. \( y \)

\( T_{S,v} = \cup_{x \in V^*} \{ x \cup \bar{x} \} \)

degyezen

\( h : U \cup \bar{U} \cup U' \rightarrow U \cup \bar{U} \cup U \times \forall y \) morfizmus, ahonkívül

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

\( h \) egy egyszerű kördolás

Ekkor

\( h(L_N(\delta_2)) = T_{S,u} \)