

Informatik aktuell

Herausgeber: W. Brauer
im Auftrag der Gesellschaft für Informatik (GI)



R. Hofestädt F. Krückeberg T. Lengauer (Hrsg.)

Informatik in den Biowissenschaften

1. Fachtagung der GI-FG 4.0.2
„Informatik in den Biowissenschaften“
Bonn, 15./16. Februar 1993



Springer-Verlag
Berlin Heidelberg New York
London Paris Tokyo
Hong Kong Barcelona
Budapest

Herausgeber

Ralf Hofestädt

Universität Koblenz/Landau, Fachbereich Informatik

Rheinau 3-4, W-5400 Koblenz

Fritz Krückeberg

Thomas Lengauer

GMD St. Augustin und Universität Bonn, GMD-II

Schloß Birlinghoven, W-5205 St. Augustin 1

CR Subject Classification (1992): A.0, F.4.2, G.1.2, H.1.1, H.2.8, I.2.1, I.2.9, I.3.2, J.3

ISBN-13: 978-3-540-56456-0

e-ISBN-13: 978-3-642-78072-1

DOI: 10.1007/978-3-642-78072-1

Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt. Die dadurch begründeten Rechte, insbesondere die der Übersetzung, des Nachdrucks, des Vortrags, der Entnahme von Abbildungen und Tabellen, der Funksendung, der Mikroverfilmung oder der Vervielfältigung auf anderen Wegen und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen, bleiben, auch bei nur auszugsweiser Verwertung, vorbehalten. Eine Vervielfältigung dieses Werkes oder von Teilen dieses Werkes ist auch im Einzelfall nur in den Grenzen der gesetzlichen Bestimmungen des Urheberrechtsgesetzes der Bundesrepublik Deutschland vom 9. September 1965 in der jeweils geltenden Fassung zulässig. Sie ist grundsätzlich vergütungspflichtig. Zuwiderhandlungen unterliegen den Strafbestimmungen des Urheberrechtsgesetzes.

© Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1993

Reprint of the original edition 1993

Satz: Reproduktionsfertige Vorlage vom Autor/Herausgeber

Druck- u. Bindearbeiten: Weihert-Druck GmbH, Darmstadt

33/3140-543210 – Gedruckt auf säurefreiem Papier

Vorwort

Die Fachtagung Bioinformatik Bonn (BIB'93) war die erste Fachtagung der Fachgruppe 4.0.2 'Informatik in den Biowissenschaften' in der Gesellschaft für Informatik e.V. Die Fachgruppe wurde zu Beginn des Jahres 1992 gegründet mit dem Ziel, die von der Bundesregierung im Programm "Biotechnologie 2000" angesprochene Lücke im Bereich Informatik und Biowissenschaften zu schließen. Die Aufgaben der Fachgruppe liegen in der Verknüpfung von Informatik und Biologie mit folgenden Schwerpunkten:

- Verflechtung moderner biotechnologischer Forschung mit anwendungsorientierter Entwicklung von Methoden und rechnergestützten Verfahren der Informatik,
- Entwicklung neuer Grundlagen, Methoden und Werkzeuge durch die Informatik, um den wachsenden, heute bei weitem noch nicht erfüllbaren Ansprüchen der Biologie besser gerecht zu werden (z.B. in der Molekulargenetik) und
- Intensivierung der innovativen Wechselwirkung beider Gebiete.

Unter dieser Zielsetzung fand die erste Fachtagung in Bonn statt. Die Fachtagung diente der Vorstellung eines Gebietes, das wir mit dem Begriff "Bioinformatik" belegen möchten. Zu dem Gebiet der "Bioinformatik" zählen zum einen Beiträge, die den Einsatz der Methoden der Informatik zur Rechnerunterstützung im Bereich der Biowissenschaften umfassen. Hier sind vor allem die rechnergestützte Analyse sowie der Entwurf von Biomolekülen oder auch biotechnologischen Prozessen zu nennen. Außerdem zählt die Modellierung und Simulation von biologischen Systemen zu diesem Gebiet. Auf der anderen Seite gehören der "Bioinformatik" Untersuchungen an, die auf der Basis von Erkenntnissen über die Informationsverarbeitung in biologischen Systemen neuartige algorithmische, rechnerarchitektonische oder allgemein informationstechnische Konzepte für eine technische Realisierung entwickeln. In diesen Bereich gehören auch Forschungen über neuronale Netze, genetische Algorithmen oder allgemeine parallele Informationsverarbeitung, die der Biologie abgesehen werden.

Die Tagung war zweitägig und setzte sich aus eingeladenen Hauptvorträgen sowie Beiträgen zusammen, die von einem Programmkomitee aus einer Menge von 41 eingereichten Beiträgen ausgewählt wurden. Dem Programmkomitee gehörten Prof. Dr. W. Ebeling (Humboldt Universität Berlin), Dr. R. Hofestädt (Universität Koblenz-Landau), Prof. Dr. F. Krückeberg, Prof. Dr. T. Lengauer (beide GMD, Sankt Augustin / Universität Bonn), Prof. Dr. H.P. Müller (Universität Bonn), Dr. J. Selbig (GMD, Sankt Augustin), Prof. Dr. B. Schürmann, Prof. Dr. D. Schütt (beide ZFE, Siemens AG, München), Dr. K. Stüber (MPI für Züchtungsforschung Köln) und Prof. Dr. G. Veenker (Universität Bonn) an.

Zu den Hauptvorträgen wurden sieben Gäste eingeladen, die neben den Schwerpunktgebieten der Bioinformatik auch Randgebiete vorstellten. Dr. W. Stöffler (BMFT, Bonn) präsentierte einen Strategievortrag zur Molekularen Bioinformatik. Die Molekulare Bioinformatik, die in den Jahren von 1993-1997 durch ein Strategiekonzept des BMFT gefördert wird, wurde durch die Vorträge von Prof. Dr. D. Schomburg (GBF, Braunschweig) und Dr. C. Sander (EMBL, Heidelberg) vorgestellt. Andere interessante Aspekte der Bioinformatik wurden in den Vorträgen von Prof. Dr. H. Bossel (Umweltinformatik - GH Kassel) und Dr. K. Adlassnig (Medizinische Informatik - Universität Wien) präsentiert. Außerdem hielten Dr. N. Hampp (Universität München) und Prof. Dr. W. Ebeling (Humboldt Universität Berlin) je einen Vortrag zum Thema 'Biologische Paradigmen in der Informatik'.

An dieser Stelle möchten wir uns bei allen bedanken, die zum Gelingen der Fachtagung beigetragen haben. Hier ist, neben dem Programmkomitee und den Gutachtern, Frau Mariele Knepper und dem Institut für Informatik I (Universität Bonn) ein besonderer Dank für die Organisation der Tagung zu entrichten.

Bonn, im Februar 1993

R. Hofestädt
F. Krückeberg
T. Lengauer

INHALTSVERZEICHNIS

1. Gastvorträge

W. Stöffler (BMFT Bonn) Bioinformatik - ein Beitrag zu der Technologie des 21. Jahrhunderts	1
D. Schomburg (GBF Braunschweig) Computer Aided Protein Design: Methods and Applications	11
C. Sander (EMBL Heidelberg) The prediction and design of protein structures	21
H. Bossel (Gesamthochschule Kassel) Modellbildung, Simulation und Umweltsystemanalyse: Beispiel Waldwachstum	23
K.-P. Adlassnig (Universität Wien) Wissensbasierte Entscheidungsunterstützung in der Medizin.....	31
N. Hampp, C. Bräuchle (Universität München), D. Oesterhelt (MPI Martinsried) Gentechnologisch modifizierte Bakteriorhodopsine als neue Materialien für die optische Informationsverarbeitung	43
W. Ebeling (Humboldt Universität Berlin) Chaos, Entropie und Sequenzanalyse	51

2. Molekulare Bioinformatik

P. Bork (EMBL Heidelberg) Entschlüsselung von Proteinfunktionen mit Hilfe des Computers: Erkennung und Interpretation entfernter Sequenzähnlichkeiten	67
K.-E. Großpietsch (GMD Sankt Augustin) Ein assoziatives System zur Unterstützung der DNS-Sequenzanalyse	79
I. Muegge (FU Berlin), A. Irgens-Defregger (Physik Dept. Garching), E.W. Knapp (FU Berlin) Model Calculations of Protein-Water Systems and of Long Time Dynamics of Proteins	89
J.M. Köhler, K.-D. Weller, R.-D. Recknagel (Universität Jena) Verwandtschaftsbeziehungen in E. Coli Promotorsequenzen dargestellt durch Dubletthäufigkeiten	101

3. Biologische Paradigmen in der Informatik

J. Sprave (Universität Dortmund)	
Zelluläre evolutionäre Algorithmen zur Parameteroptimierung	111
W. Schiffmann (Universität Koblenz)	
Evolutionäres Design von neuronalen Netzen	121
K. Möller (Universität Bonn)	
Das Lernen von mehrdeutigen Abbildungen mit fehlergesteuerter Zerlegung	133

4. Modellierung biotechnologischer Prozesse

B. Goldschmidt, B. Mathisik (Universität Halle/Saale)	
Globale Prozeßmodelle in der Bioprozeßtechnik	145
W. Wiechert, R. Wittig, T. Höner, M. Möllney, C. Hausmann (KFA Jülich)	
Probleme der Software-Entwicklung für die Steuerung und Auswertung biologischer Experimente	157
K.D. Bettenhausen (TU Darmstadt)	
BioX ⁺⁺ - Erweiterte lernende Regelung biotechnologischer Prozesse	169

5. Modellierung und Simulation

A. Deutsch (Universität Bonn)	
Zelluläre Automaten als Modelle von Musterbildungsprozessen in biologischen Systemen	181
P. Hamilton (Universität Bonn)	
Zum Stand der fraktalen Nervenzellsimulation	193
O. Wendel (Universität Kaiserslautern)	
MOBIS - ein wissensbasiertes Experimentiersystem zur Simulation biologisch orientierter neuronaler Netze	203