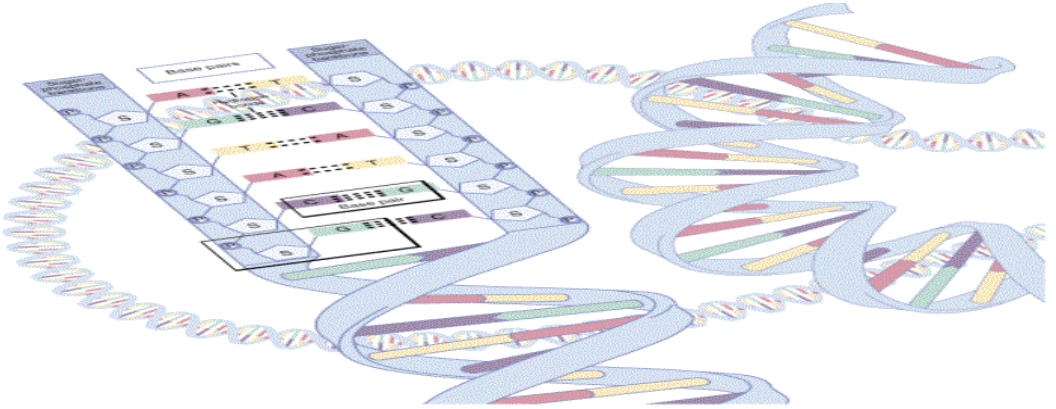
Computação na Biologia Molecular e Bionanotecnologia:

Computação Biológica

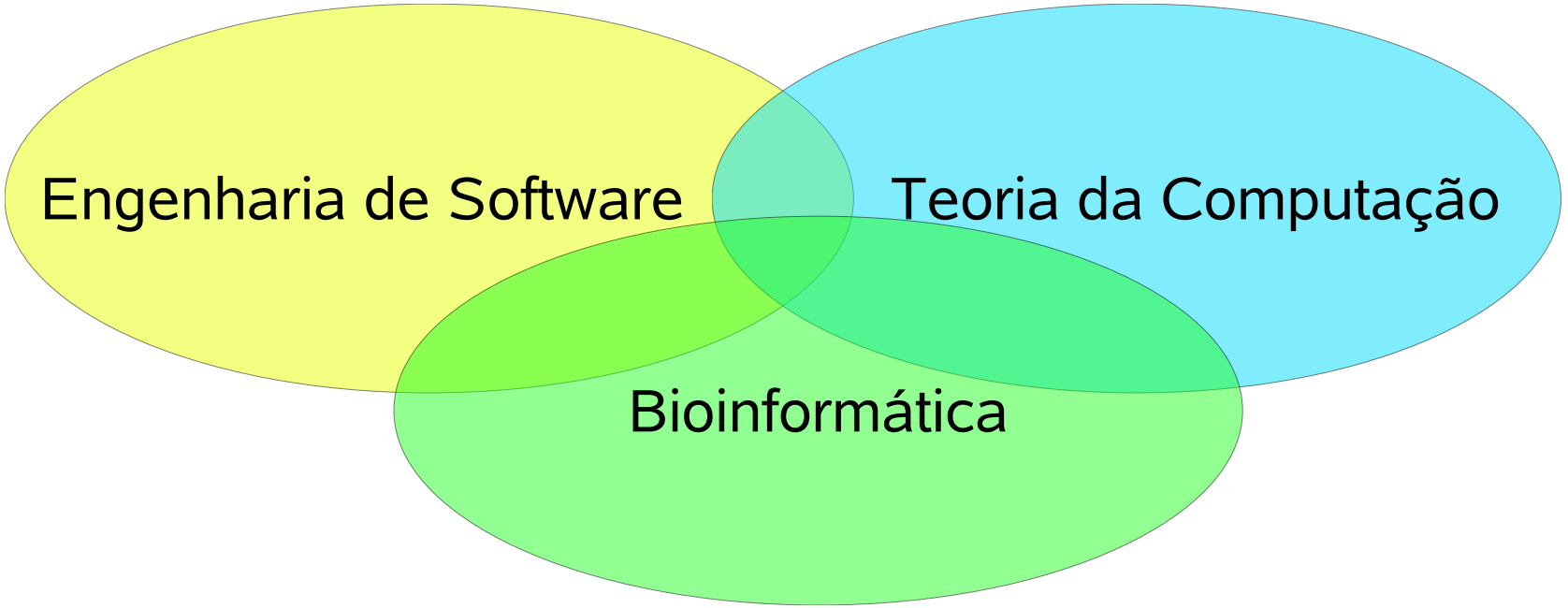


Leila Ribeiro
Instituto de Informática -UFRGS

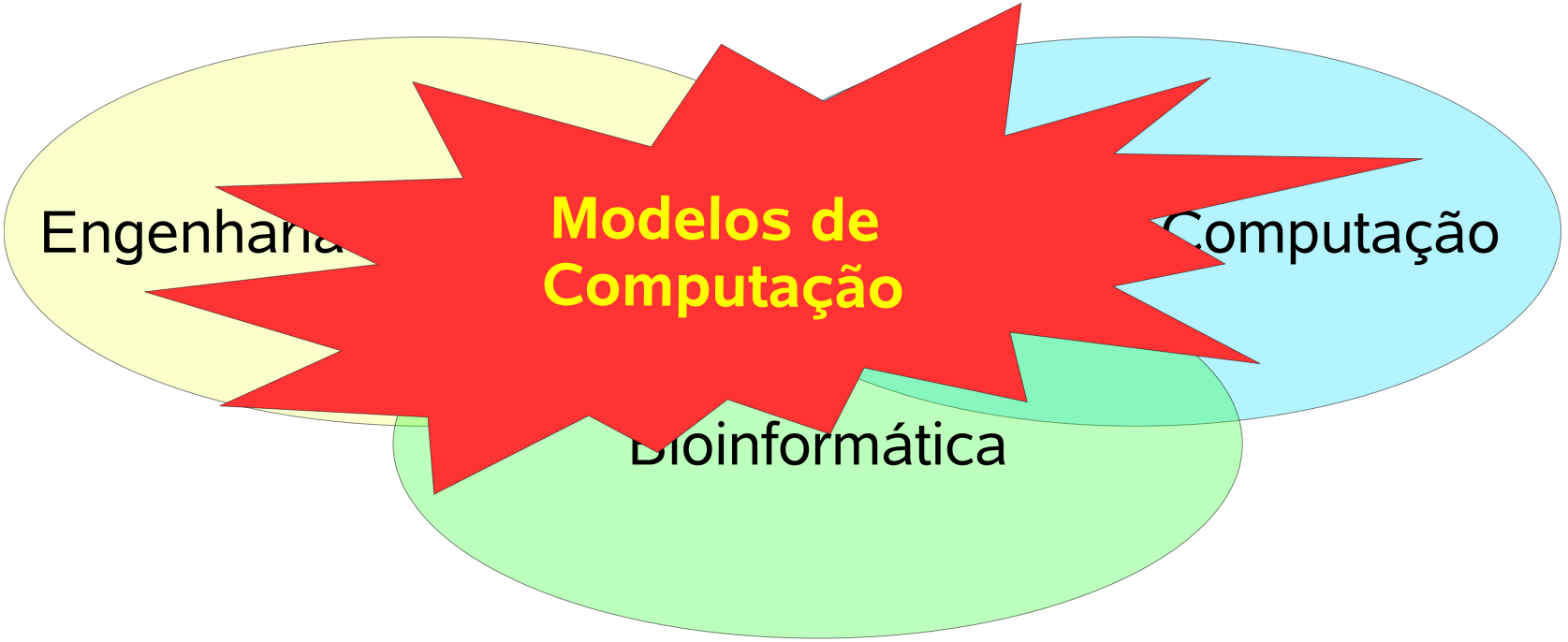
Roteiro

- Minhas áreas de interesse...
- Evolução da Ciência da Computação
- Biologia Molecular
- O computador biológico
- O que tem sido feito na Computação
- Perspectivas

Áreas de Interesse...

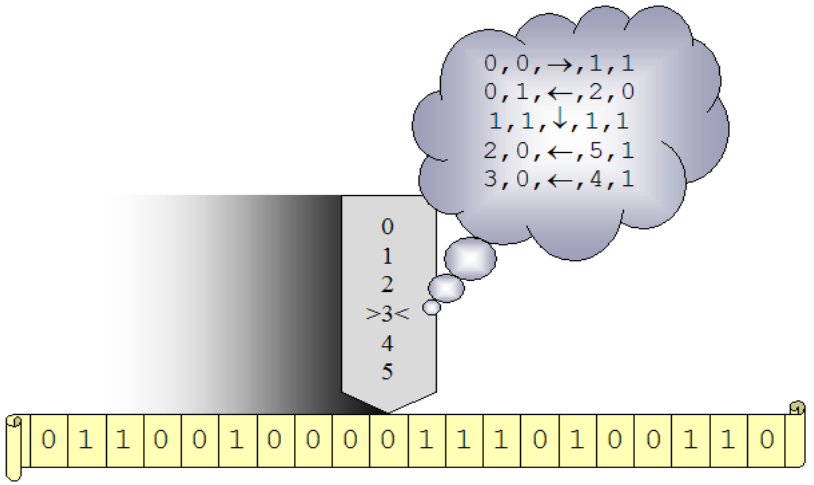


Áreas de Interesse...



Evolução da Ciência da Computação

Década de 1930: Modelo Teórico



Máquina de Turing

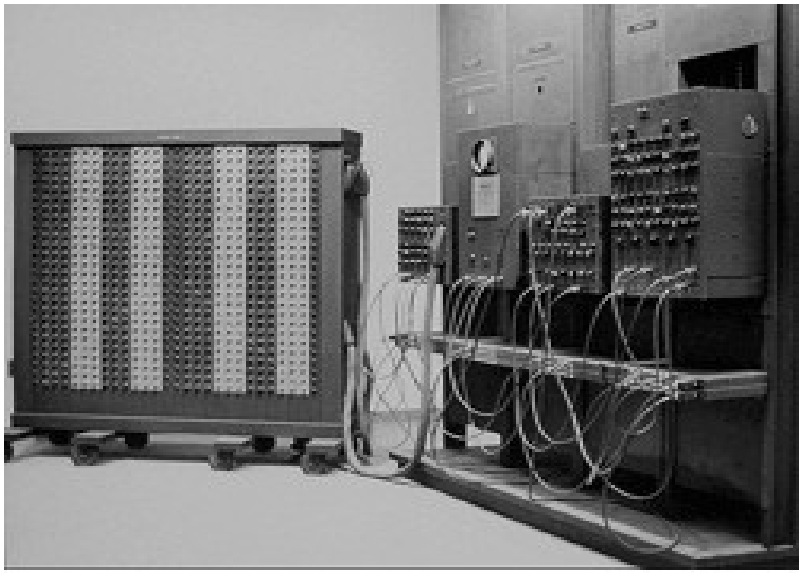
"papel + lápis + pensamento"

- Independente de "implementação"
- "Programas" podem ser vistos como "dados"

Máquina Universal

Evolução da Ciência da Computação

Décadas de 1950-1960: Computadores baseados em circuitos eletrônicos



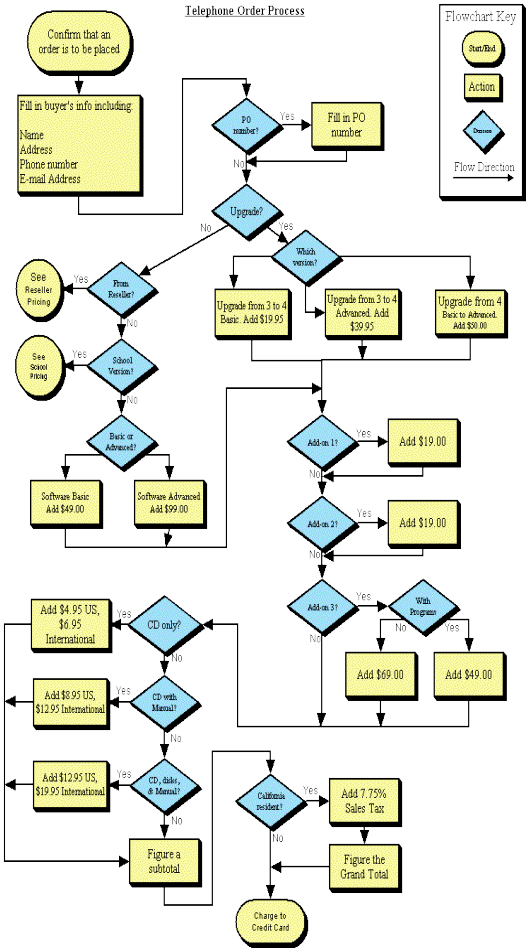
The ENIAC Today

- Basicamente computavam funções
- Inicialmente a "*programação*" era manual
- Mais tarde, "*programa armazenado*"

Evolução da Ciência da Computação

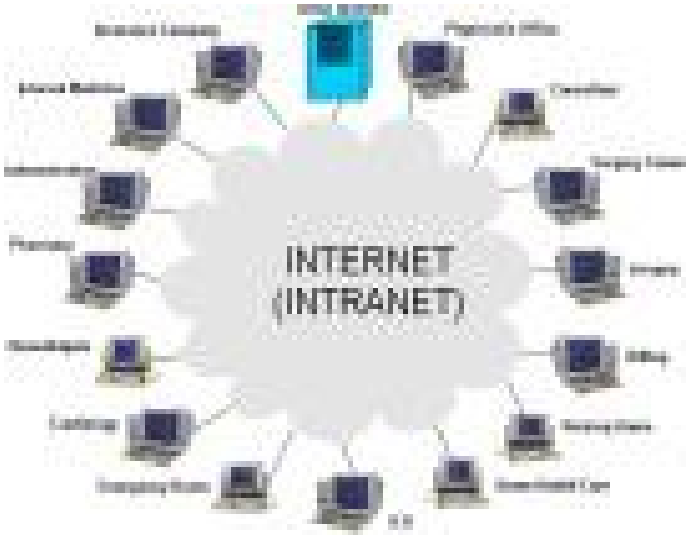
Décadas de 1970-1980: Software...

- Complexidade do software aumenta
- Novas linguagens...
- Novas técnicas para construir programas: Engenharia de Software (modularização, refinamento, ...)
- Pouca independência do hardware



Evolução da Ciência da Computação

Décadas de 1990-2000: Redes...

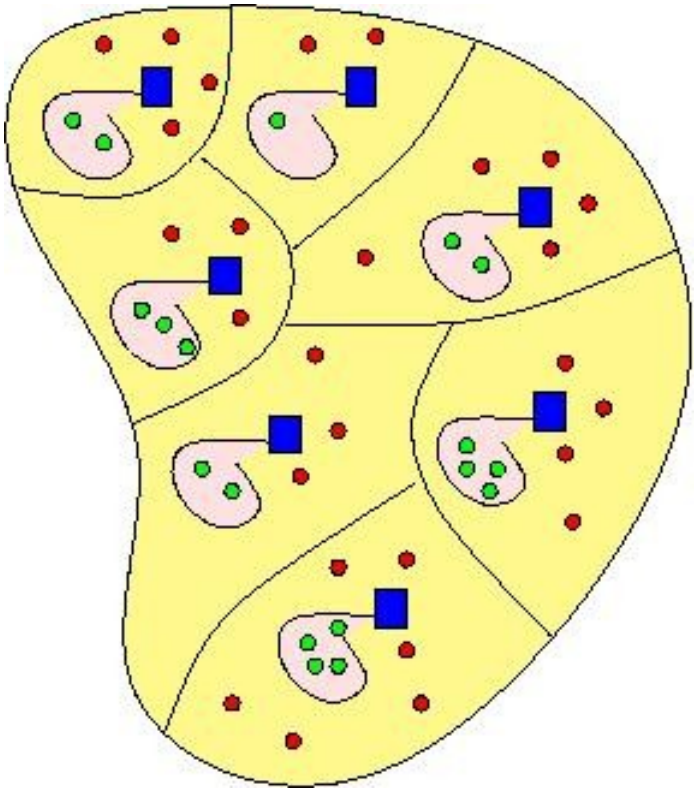


- Complexidade do software aumenta ainda mais
- Sistemas baseados em componentes
- Redes de computadores: comunicação, falhas, ...
- Middleware
- Mais independência do hardware

Evolução da Ciência da Computação

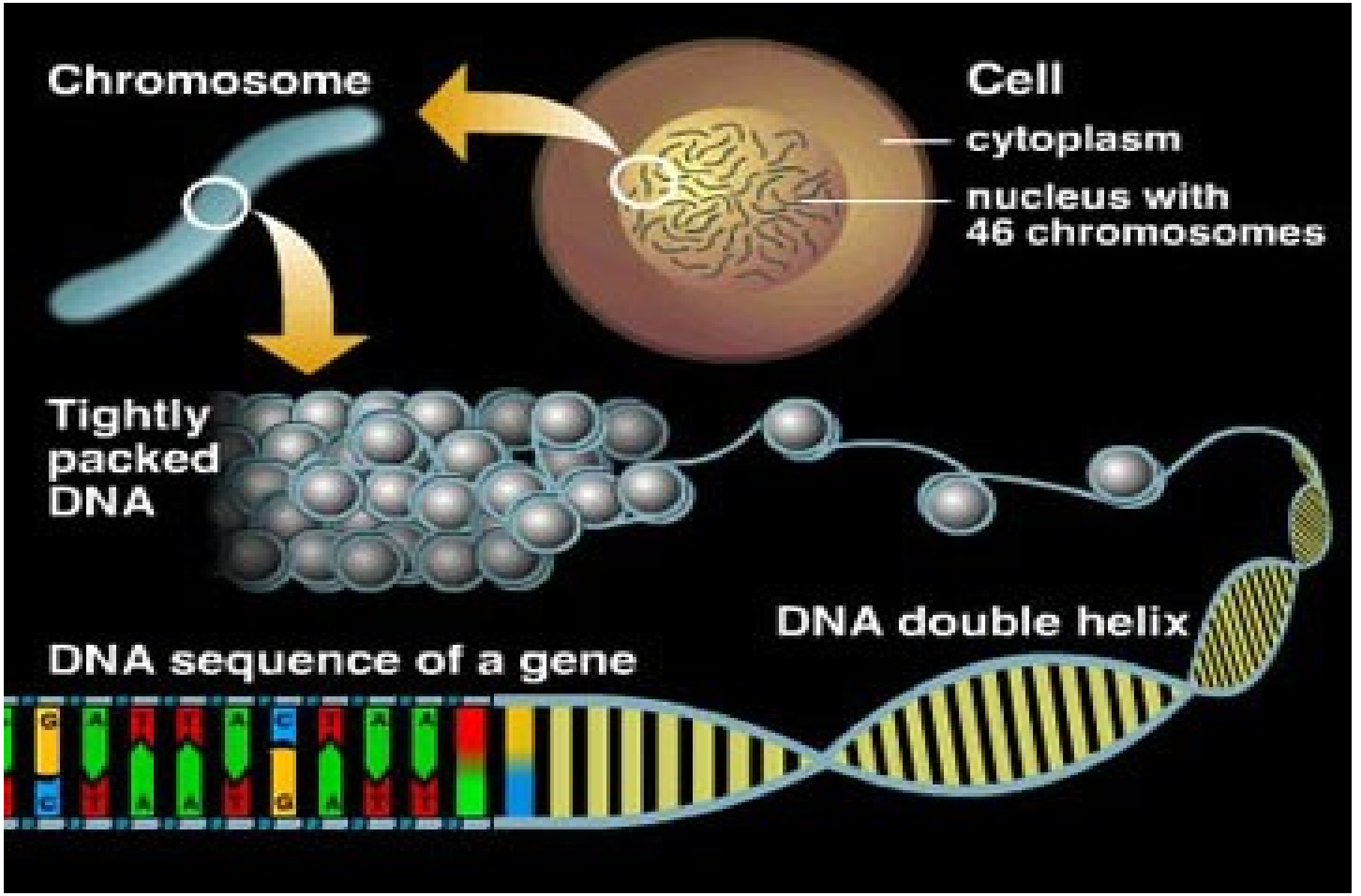
A partir de 2000...: Sistemas mais complexos:

- Sistemas mais complexos:
  - * sistemas cooperativos
  - * sistemas reativos
  - * paralelismo maciço
  - * mobilidade (software, hardware)
  - * falhas
- Lei de Moore vai falhar...



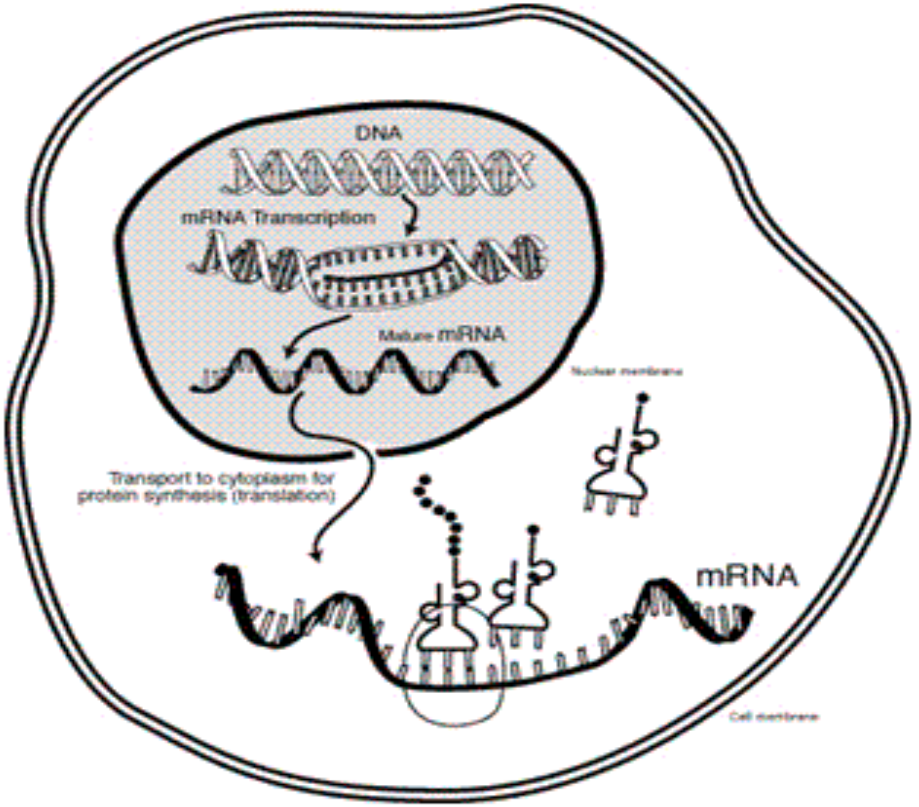
Precisamos de novas "máquinas" para "computar"!

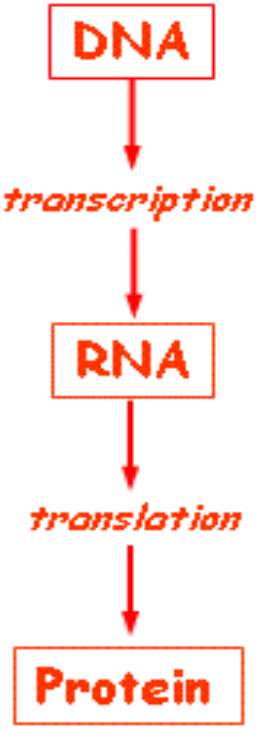
Crash course em Biologia Molecular...



- Objetivo do DNA: controlar processos biológicos
- *Dogma central da Biologia Molecular...*

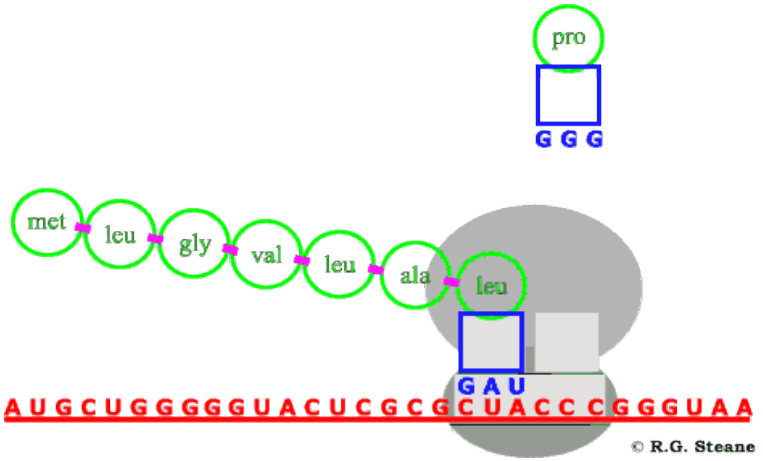
Dogma Central da Biologia Molecular

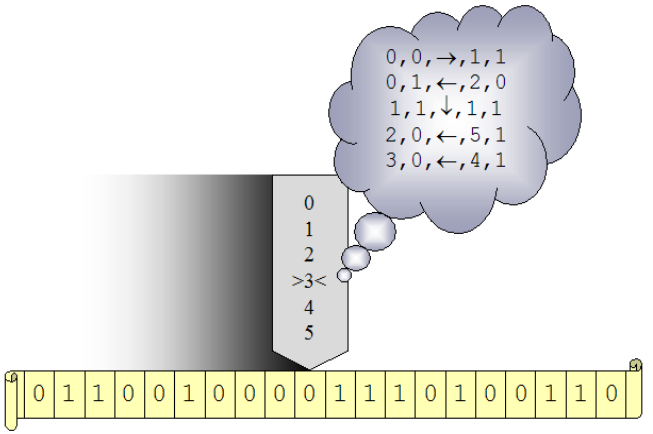




Explica como o DNA é transformado em *proteínas,*
ou seja, os *agentes do processo biológico*

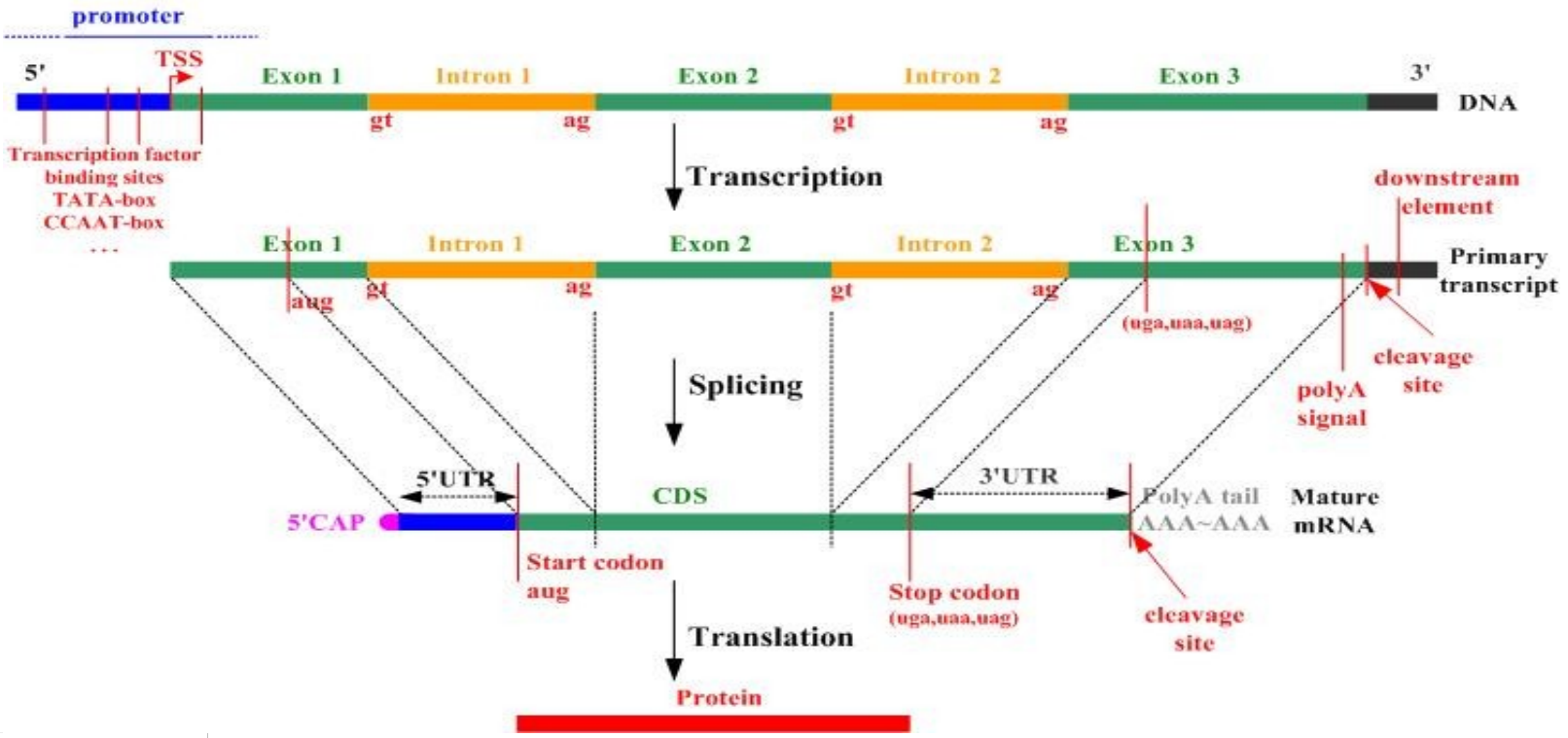
Processamento de DNA x Máquinas de Turing



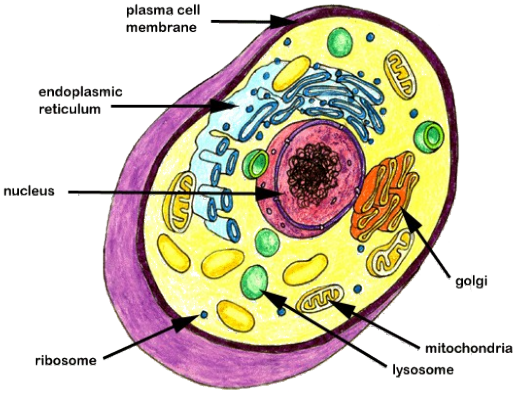


- processamento de *sequências de símbolos*
- processamento *movendo-se sobre a sequência*
- modificações ocorrem de acordo com *regras*
- *programas e dados* podem ser codificados da mesma forma

- existem sequências específicas que marcam o início e o fim do código de uma proteína em uma sequência de DNA



O Computador Biológico...



Máquina — Célula

Programa e dados: — DNA

Sistema operacional: — ? (*DNA lixo...*)

Sistema de arquivos: — ?

Bionanotecnologia: Construção de novos agentes (proteínas), *programados* para agir dentro da célula, interagindo com os processos existentes...

Mas, como programar essa máquina???

Precisamos

- Entender a máquina biológica
- Linguagens adequadas
- Métodos para construção de sistemas complexos
  - * sistemas cooperativos
  - * sistemas reativos
  - * paralelismo maciço
  - * mobilidade
  - * falhas

Precisamos

- Entender a máquina biológica
- Linguagens adequadas → ***Linguagens formais***
- Métodos para construção de sistemas complexos
  - * sistemas cooperativos
  - * sistemas reativos
  - * paralelismo maciço
  - * mobilidade
  - * falhas

→ ***Engenharia de software***

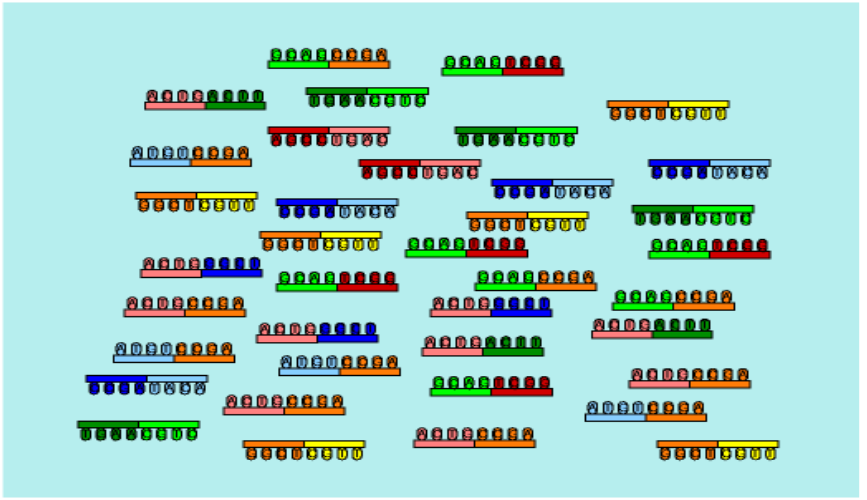
- ***Trabalho cooperativo interdisciplinar...***

O que tem sido realizado...

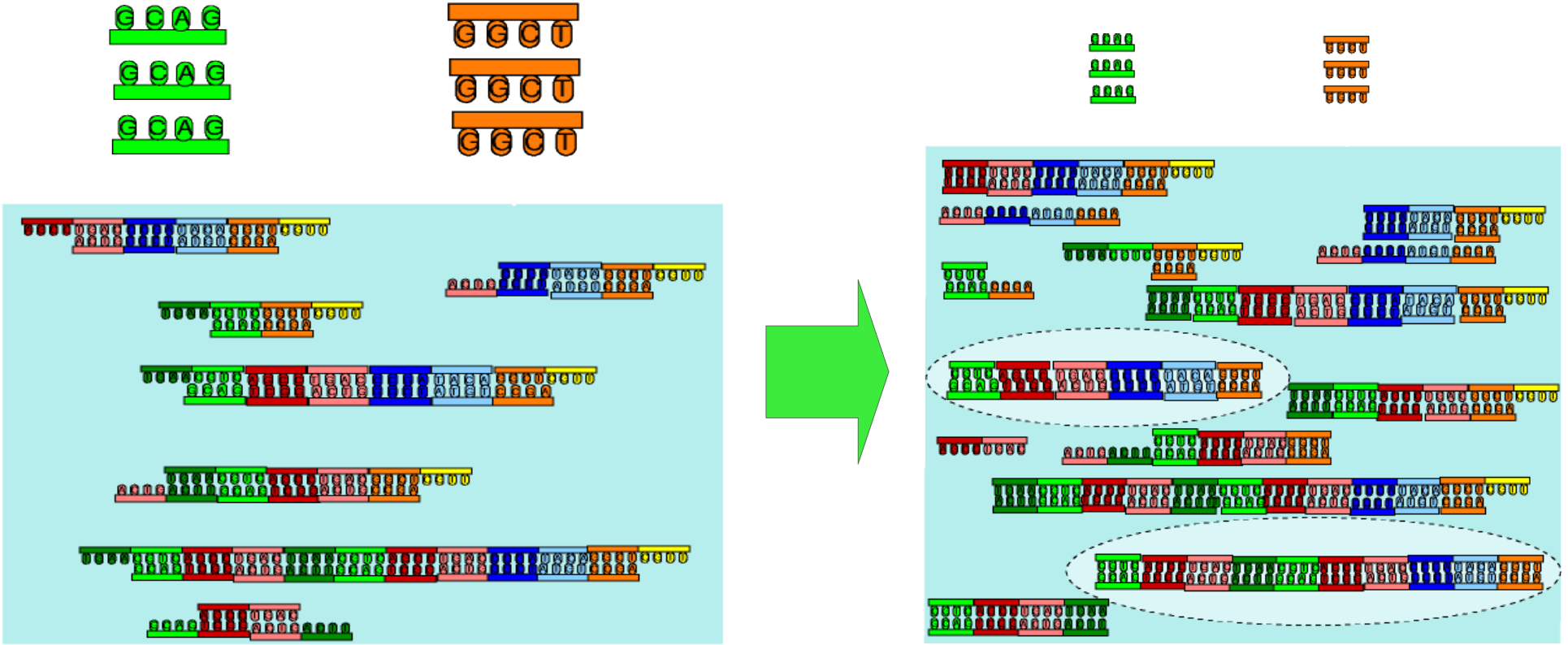
- *Leonard Adleman 1994*: Computação com DNA
- *Ehud Shapiro 2004:* Computador biomolecular
- *BioFab Group 2006* : Engenharia biomolecular

DNA Computing

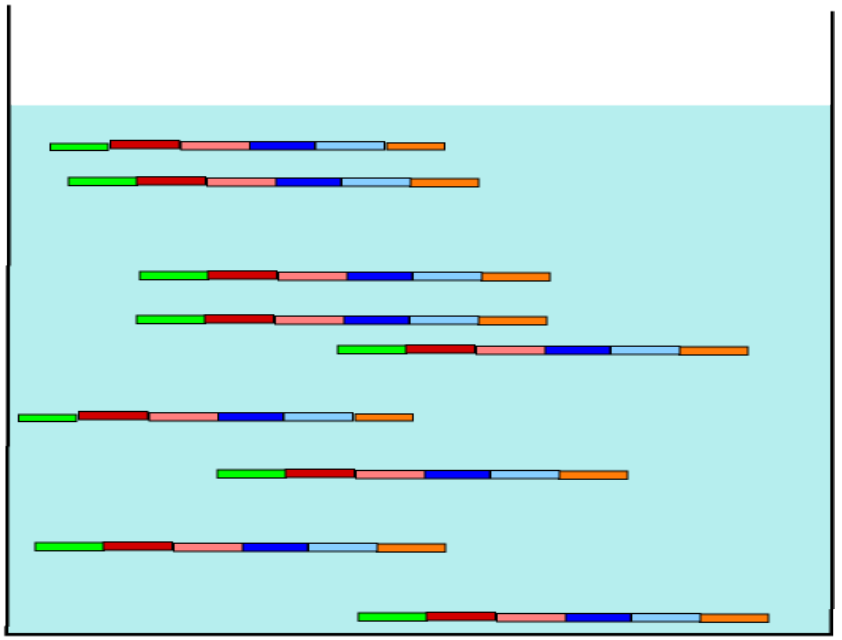
- Solução do Problema do Caminho Hamiltoniano (NP-completo) usando DNA
  * codificação de dados em fitas de DNA
  * programa era uma sequência de operações sobre essas fitas (realizadas manualmente)



Passo 1: Selecionar sequencias que começam e terminam nas cidades certas...



Outros passos: selecionar sequências que possuam todas as cidades, selecionar sequências que tem um certo tamanho



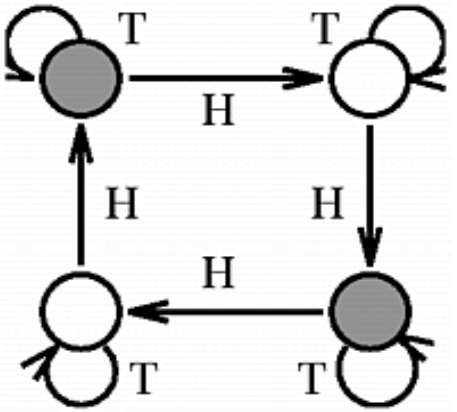
Finalmente, verificar se restou alguma sequência no tubo...

DNA Computing

- Solução do Problema do Caminho Hamiltoniano (NP-completo) usando DNA
  * codificação de dados em fitas de DNA
  * programa era uma sequência de operações sobre essas fitas (realizadas manualmente)

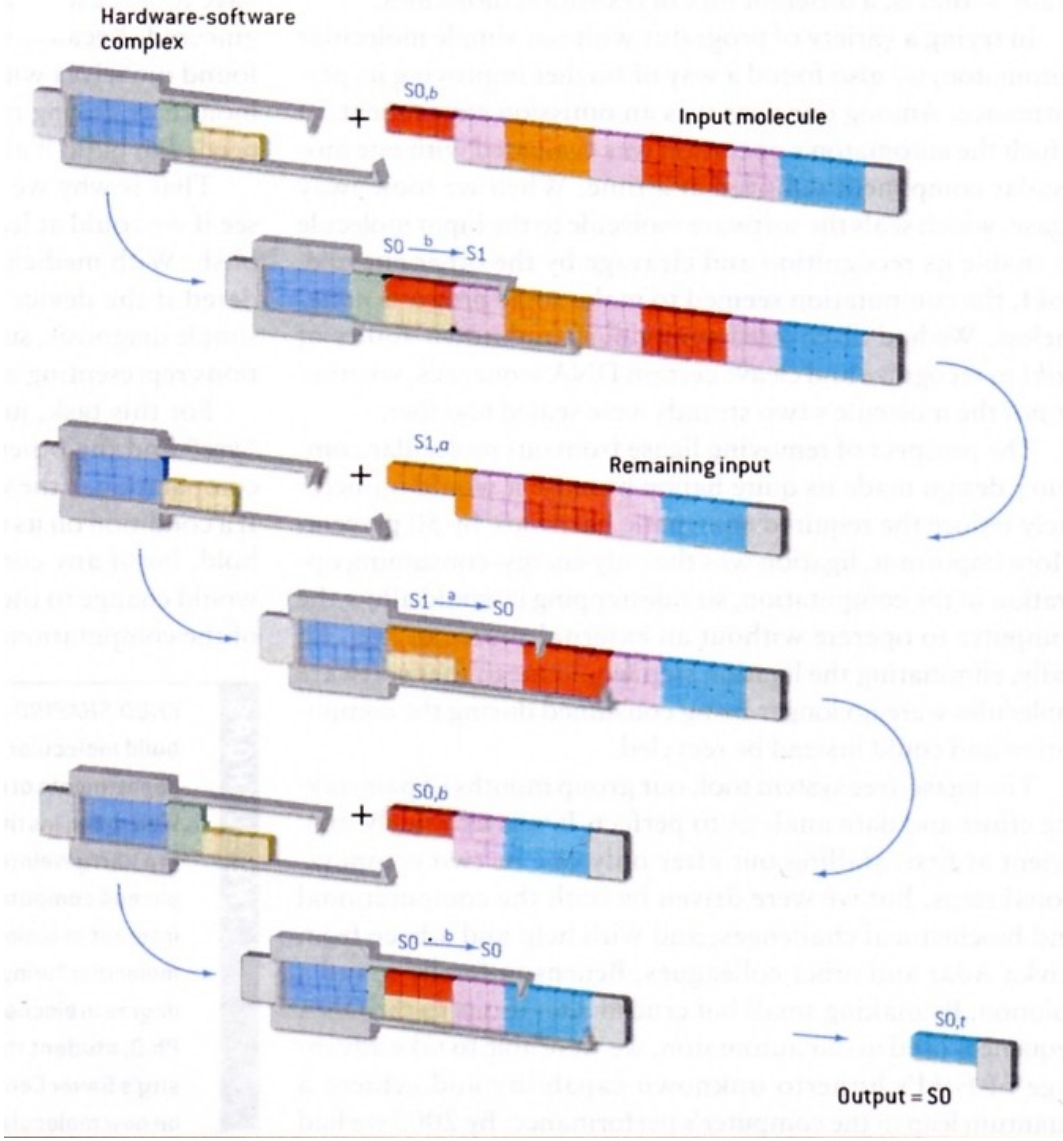
- Qualquer programa de computador pode ser resolvido usando DNA...
- Mas a construção do *"máquina DNA universal"* é um problema

Computador Biomolecular

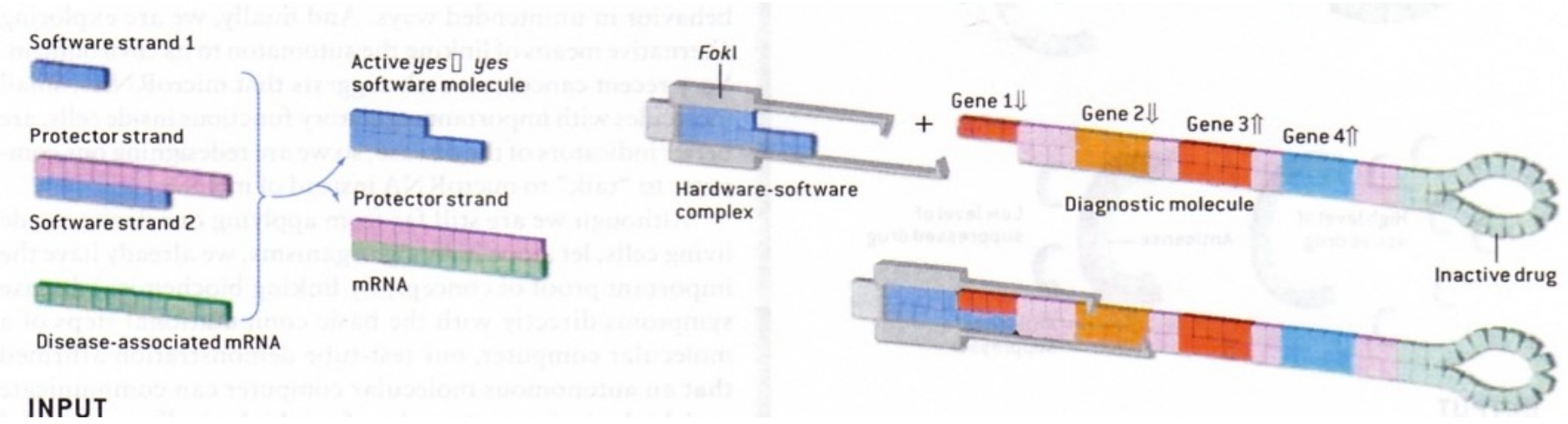


- Um autômato finito implementado com DNA
  - * 1 enzima apenas (FokI)
  - * transições e entrada codificadas como fitas de DNA
  - * processo totalmente automático!

Computador Biomolecular



Computador Biomolecular



- DNA Doctor: detecta a presença de proteínas relacionadas a doença e, caso as encontre, gera um sinal (droga).
- Sistema auto-regulável (as transições do automato existem se o sinal correspondente existir).
- Testado in vitro...

Meu trabalho...

- ***DNA computing:*** definir sintaxe e semântica de linguagens para permitir a prova de correção de programas biológicos

- ***Modelagem de sistemas biológicos:*** usar métodos formais para modelar vias regulatórias e metabólicas (ajudar a entender a "máquina biológica" e a construir programas)

Computação Biológica

- *Pesquisa básica em Ciência da Computação* (modelos computacionais para sistemas reativos, distribuídos, móveis, sujeitos a falhas, envolvendo redundância e paralelismo maciço, ...; novas técnicas de ES, BD; novos modelos de HW, etc.)
- *Projeto fortemente interdisciplinar*
- 10 anos talvez seja pouco tempo para entendermos como a natureza computa, mas é estratégico para o Brasil investir em pesquisa nessa área, e os *resultados intermediários podem ter grande relevância, tanto para a Biologia e Medicina quanto para a Computação.*
- *A Ciência da Computação pode e deve dar sua contribuição nessa área, que quiser colaborar é bem-vindo...*