

Stefan WĘGRZYN, Lech ZNAMIROWSKI
Politechnika Śląska, Instytut Informatyki
Instytut Informatyki Teoretycznej i Stosowanej PAN

MOLEKULARNE SYSTEMY INFORMATYKI

Streszczenie. Dwa najczęściej omawiane systemy informatyki to techniczne systemy informatyki, umożliwiające automatyczną realizację procesów obliczeniowych oraz biologiczne systemy informatyki, będące podstawą istnienia rozwoju organizmów żywych. W pracy przeprowadzono analizę i porównanie struktur tych obu systemów pod kątem możliwości technicznej realizacji molekularnych systemów informatyki wzorowanych na biologicznych systemach informatyki umożliwiających syntezę potrzebnych materiałów i produktów jako podstawę generacji sztucznego życia.

Słowa kluczowe: informatyka, nanoinformatyka, molekularne systemy informatyki

MOLECULAR SYSTEMS OF INFORMATICS

Summary. The two most frequently discussed systems of informatics are the technical systems of informatics, that allow for an automatic realization of computational processes, and the biological systems of informatics, that are the foundation of existence and development of living organisms. In this paper, an analysis and a comparison of these two systems are carried out in the context of the possibility of a technical realization of molecular systems of informatics, that are patterned after biological systems of informatics, and that allow for the synthesis of needed materials and products, as the basis of the generation of an artificial life.

Keywords: informatics, nanoinformatics, molecular systems of informatics

1. Wprowadzenie

Informatykę [1] określamy jako dziedzinę nauki o procesach gromadzenia, przechowywania, przetwarzania i przekazywania informacji.

Organizacji tych procesów służą systemy informatyki. Dwoma najczęściej omawianymi systemami informatyki są techniczne systemy informatyki i biologiczne systemy informatyki.

Z technicznych systemów informatyki korzystamy np. wtedy, gdy wykonujemy obliczenia przy pomocy komputerów elektronicznych budowanych przez ludzi od około siedemdziesięciu lat.

Biologiczne systemy informatyki, istniejące we wszystkich organizmach żywych, rozwijały się i rozwijają w naturze od miliardów lat, stanowiąc podstawę istnienia, powielania się i rozwoju organizmów żywych.

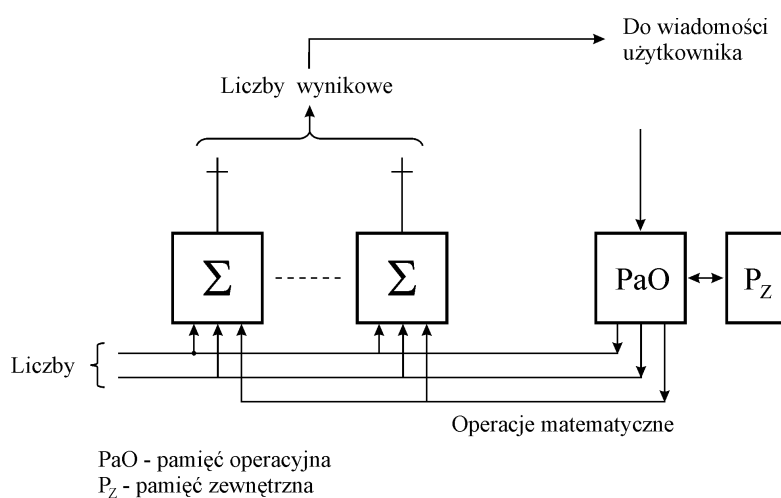
Te biologiczne systemy informatyki mogą być w wielu przypadkach wzorem dla takiego dalszego rozwoju technicznych systemów informatyki, aby te mogły, nie tylko jak dotąd, realizować operacje na liczbach, ale aby podobnie jak biologiczne systemy informatyki mogły również realizować operacje na molekułach i atomach, tworząc zaprojektowane przez nas produkty i obiekty.

Ogólnie można powiedzieć, że struktury realizowanych dotąd technicznych systemów informatyki można określić jako struktury makro, a struktury biologicznego systemu informatyki można określić jako struktury nano.

2. Biologiczne i techniczne systemy informatyki

2.1. Techniczne systemy informatyki

Struktura technicznego systemu informatyki przeznaczonego do automatycznej realizacji zadanych procesów obliczeniowych przedstawiona jest na rys. 1.



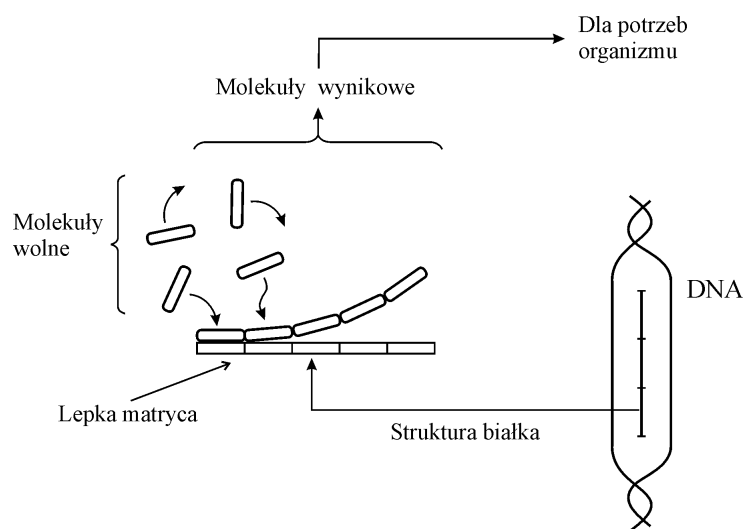
Rys. 1. Struktura technicznych systemów informatyki umożliwiającą automatyczną realizację zadanych procesów obliczeniowych

Fig. 1. The structure of technical systems of informatics, that allows for an automatic realization of given computational processes

Działanie tych systemów polega na kolejnym, według ustalonego umieszczonego w pamięci operacyjnej PaO programu, wykonywaniu operacji matematycznych na danych liczbowych.

2.2. Biologiczne systemy informatyki

Struktura biologicznego systemu informatyki katalizującego w organizmach żywych procesy syntezy białek w zadanej strukturze molekularnej przedstawiona jest na rys. 2.



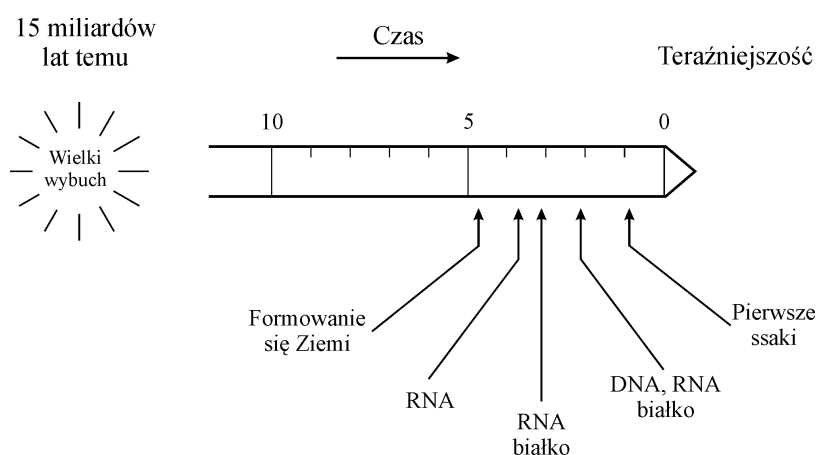
Rys. 2. Struktura biologicznych systemów informatyki umożliwiających syntezę potrzebnych organizmowi produktów

Fig. 2. The structure of biological systems of informatics, that allows for synthesis of products needed by an organism

W DNA zawarte są programy (geny) sterujące i programy (geny) o wyróżnionych początkach i końcach. Działanie tych systemów polega na tym, że na podstawie sygnałów odbieranych z organizmu geny sterujące inicjują pracę genów strukturalnych, a te inicjują wytwarzanie i przekazywanie dla potrzeb organizmu odpowiednich produktów – białek.

2.3. Historia rozwoju komórki biologicznej

Rzeczony rozwój komórki biologicznej jako nośnika informacji kształtował się przez miliardy lat, tak jak to ilustruje rys. 3.

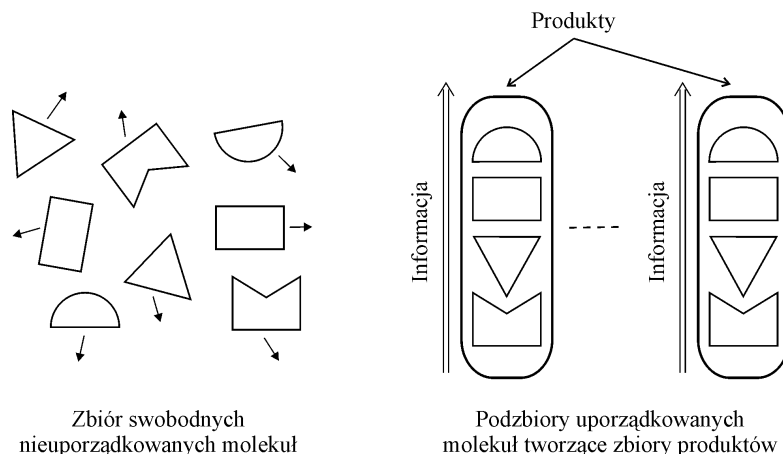


Rys. 3. Ilustracja historii rozwoju komórek biologicznych jako nośników informacji

Fig. 3. Illustration of the history of development of biological cells as carriers of information

2.4. Jak molekułom przekazywać informacje?

Przez produkty będziemy w tym opracowaniu rozumieć uporządkowane zbiory odpowiednio połączonych molekuł i atomów wykazujące określone własności. Problemem centralnym jest tu zagadnienie sposobu doprowadzenia do takiego uporządkowania i wzajemnego połączenia molekuł, tak jak to ilustruje rys. 4.

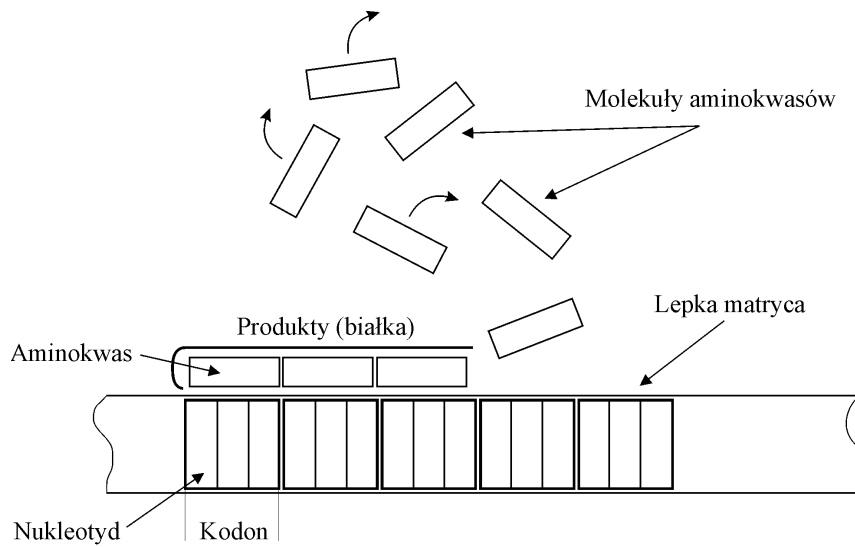


Rys. 4. Ilustracja roli, którą powinna spełniać informacja w procesie powstawania tak uporządkowanych różnych molekuł, aby łączyły się w zbiory potrzebnych organizmowi produktów

Fig. 4. Illustration of the role, that information should play in a process of creation of various molecules ordered in such a way, that they would merge into sets of products needed by an organism

2.5. Biologiczna technologia lepkiej matrycy

Jednym ze sposobów przekazywania zbiorom molekuł informacji o ich oczekiwanym uporządkowaniu jest technologia lepkiej matrycy, którą ilustruje rys. 5.



KODON ::= NUKLEOTYD | NUKLEOTYD | NUKLEOTYD

NUKLEOTYD ::= A (adenina) | T (tymina) lub U (uracyl) | G (guanina) | C (cytozyna)

Rys. 5. Ilustracja technologii lepkiej matrycy

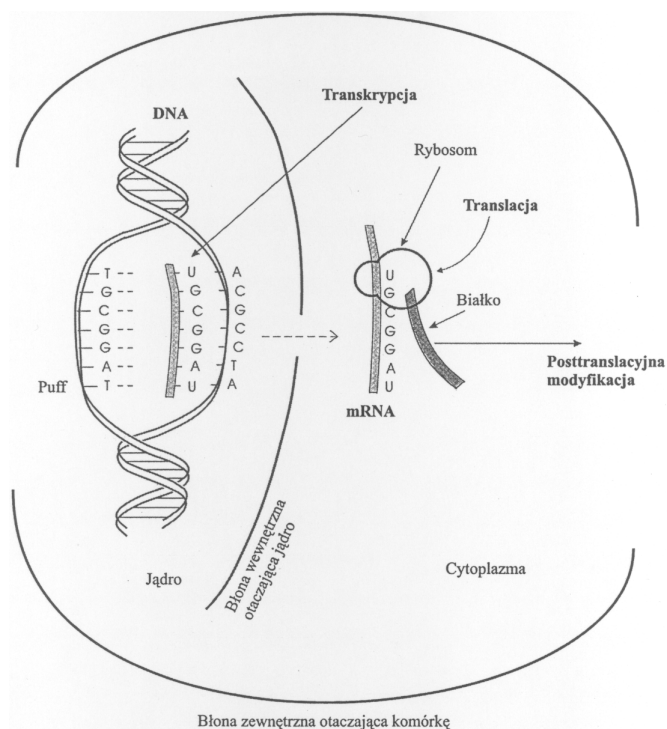
Fig. 5. Illustration of the technology of sticky matrix

Matrycę tworzy ciąg kodonów, czyli trójek nukleotydów tak dobranych, aby tworzyły powierzchnie łatwego przyklejania odpowiednich aminokwasów.

3. Co oprócz DNA stoi u podstaw procesów życia?

3.1. Struktura komórki biologicznej

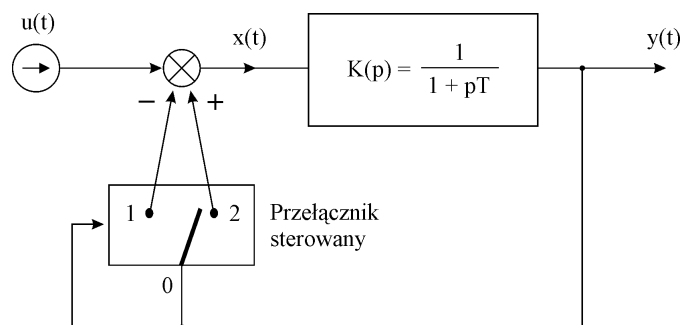
Struktura komórki eukariotycznej, czyli komórki biologicznej zawierającej jądro, jest przedstawiona na rys. 6.



Rys. 6. Struktura komórki biologicznej zawierającej jądro (eukariot)
 Fig. 6. Structure of a biological cell, that contains a nucleus (eukaryote)

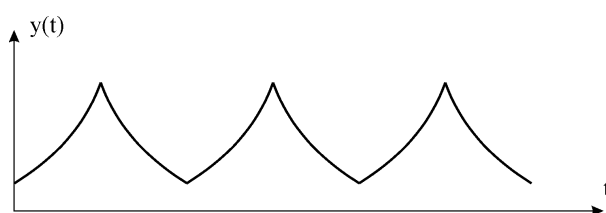
3.2. Sterowane przełączniki

Sterowane przełączniki mogą w zależności od wielkości sygnału sterującego zmieniać strukturę układu, np. dodatnie sprzężenie zwrotne na ujemne lub odwrotnie, tak jak to ilustruje rys. 7.



Rys. 7. Przykład układu ze sterowanym przełącznikiem
 Fig. 7. Example of a circuit with a controlled switch

Po odpowiednio dobranych wartościach sygnałów sterujących przełącznikiem sygnał $y(t)$ będzie miał taki przebieg, jak to ilustruje rys. 8.

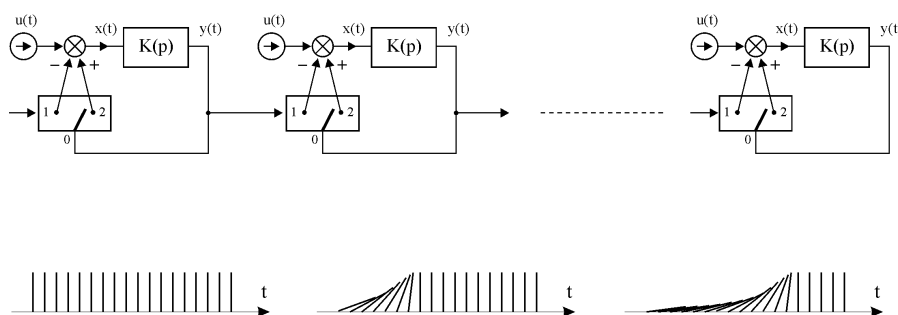


Rys. 8. Przebieg sygnału $y(t)$ w układzie z przełącznikiem sterowanym
 Fig. 8. Signal $y(t)$ in a circuit with a controlled switch

3.3. Molekularne motory

Molekularne motory zmieniają energię chemiczną na efekt krokowego ruchu liniowego lub rotacyjnego, tak jak to ilustruje rys. 9.

Liniowe lub kołowe molekularne motory odgrywają centralną rolę w biologicznych procesach, zapewniając konieczny ruch cząstek z zapisanymi tekstami informacji, czyli ruch informacji, można powiedzieć życie informacji.



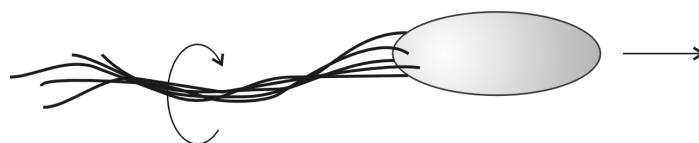
Rys. 9. Ilustracja modelu struktury molekularnego motoru i ruchu stanu Δ
 Fig. 9. Illustration of a model of the structure of a molecular motor, and of the movement of the state Δ

3.4. Ruch i powielanie informacji

Ogólnie można powiedzieć, że omówione poprzednio molekularne motory działają na zasadzie zmiany konformacji, np. białek na ich ukierunkowany ruch.

Takie zakodowanie informacji, dzięki któremu może nastąpić jej ruch i samopowielenie, może być podstawą czegoś bardziej ogólnego, np. powstawania, rozwoju i ruchu obiektów, których struktura jest w tej informacji zapisana.

Warto dodać, że bakteriom, w których zakodowane są informacje w stosunku do komórek pasożytnicze, ruch zapewniają pęczki wici (rotory wici), tak jak to ilustruje rys. 10.



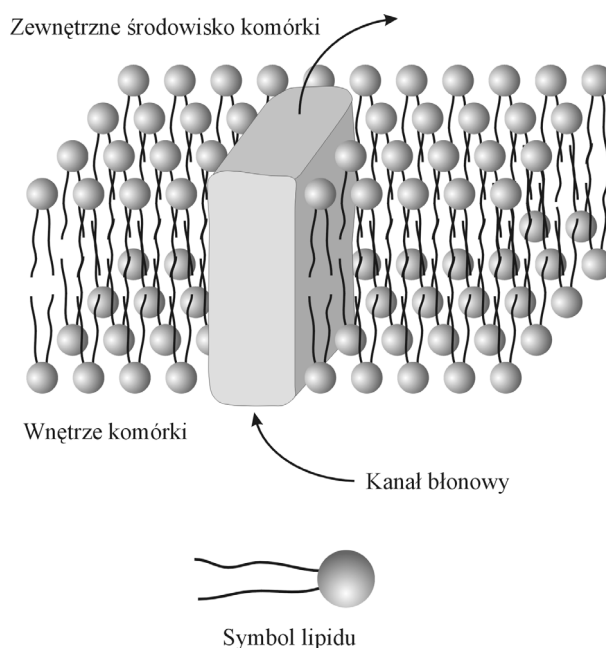
Rys. 10. Symboliczna ilustracja bakterii wraz z pęczkiem wici i ich rotorem, dzięki czemu bakteria znajduje się w ruchu

Fig. 10. Symbolic illustration of a bacteria with a bundle of filaments and their rotor, thanks to which the bacteria can move

3.5. Błony komórkowe

Błony biologiczne pełnią rolę barier oddzielających wnętrza komórek od ich środowisk zewnętrznych. Zapobiegają uchodzeniu na zewnątrz komórek produktów wytworzonych w ich wnętrzu oraz zapobiegają dyfuzji niepożądanych cząsteczek z zewnątrz komórek do ich wnętrza.

Poniższy rysunek 11. ilustruje biologiczną błonę dwuwarstwową oraz symbol cząsteczki biologicznej zwanej lipidem, na której struktura błony jest oparta.



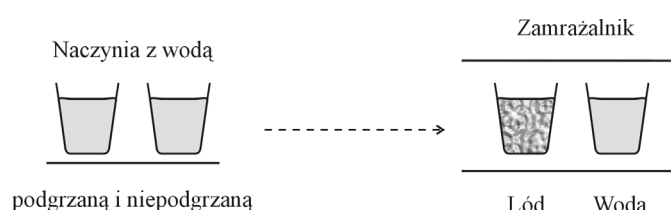
Rys. 11. Fragment dwuwarstwowej błony biologicznej opartej na cząsteczkach biologicznych zwanych lipidami i symbol tej cząsteczki

Fig. 11. A fragment of a bilateral biological membrane, that is based on biological molecules called lipids, and a symbol of such a molecule

4. Procesy wewnątrzcząsteczkowe (nanonauka)

4.1. Efekt Mpemby

W 1969 roku uczeń jednej ze szkół w Tanzanii przygotowując porcje lodu zauważył, że w pewnych przypadkach woda doprowadzona do wyższej temperatury następnie szybciej się zamraża. Przypuszcza się, że przyczyną tego zjawiska może być to, że w pewnych temperaturach następuje w molekułach zmiana wewnętrznych powiązań strukturalnych, w tym przypadku między atomami wodoru i tlenu, a to z kolei może wpływać na jej temperaturę krzepnięcia. Ilustracja tego efektu Mpemby jest przedstawiona na rys. 12.

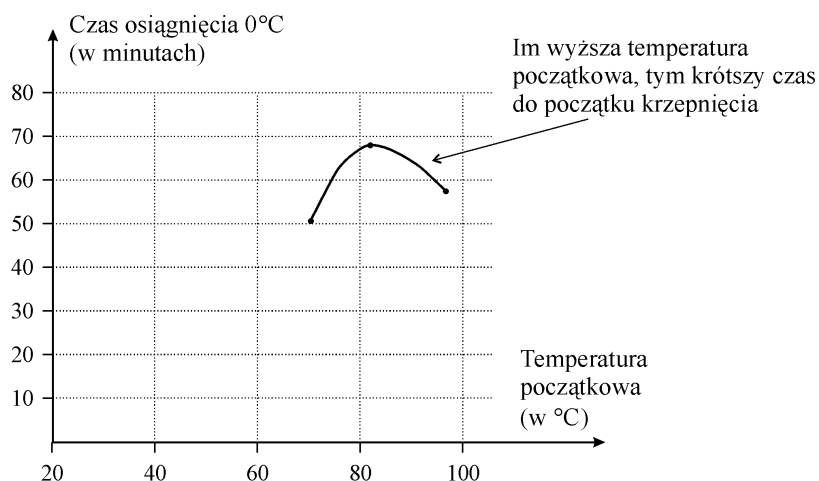


Rys. 12. Efekt Mpemby, woda podgrzana może szybciej się zamrozić
Fig. 12. The Mpemba effect, a warmed water can freeze faster

Na zjawisko to zwrócił już uwagę około 350 BC Arystoteles [5], notując, że woda uprzednio wystawiona na słońce może się szybciej zamrozić.

4.2. Pomiary efektu Mpemby

Spostrzeżenie Mpemby potwierdziły późniejsze badania, np. Philip Ball: Does hot water freeze first? Physics World, Vol. 19, No. 9, 2006 przedstawione na rys. 13.



Rys. 13. Efekt Mpemby
Fig. 13. The Mpemba effect

4.3. Nano, femto i attochemia

Badania nad strukturami przestrzennymi molekuł i nad mającymi w nich miejsce procesami dynamicznymi dały początek rozwoju takich działów nauki, jak nanochemia, femtochemia i attochemia. Określenie nanochemia pochodzi od nazwy jednostki długości

nanometr = 10^{-9} m,

a określenia femtochemia i attochemia od nazw

femtosek = 10^{-15} s,

attosek = 10^{-18} s.

Przykładem podanym w [1] konsekwencji błędów w strukturze mogą być mutacje polegające np. na błędnym umiejscowieniu tyminy (T) w miejscu molekuly adeniny (A). Wtedy zamiast poprawnego tekstu

CCTGAGGAG

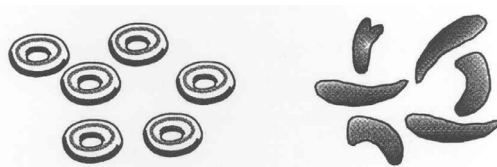
oznaczającego sekwencję aminokwasów: prolina, kwasu glutaminowego, kwasu glutaminowego pojawi się tekst

mutacja A na T



CCTG(T)GGAG

oznaczającego sekwencję aminokwasów: prolina, walina, kwas glutaminowy, co po translacji zmieni w organizmie kształt i liczbę czerwonych ciałek krwi, tak jak to ilustruje rys. 14. i spowoduje stan chorobowy zwany anemią sierpowato-komórkową.

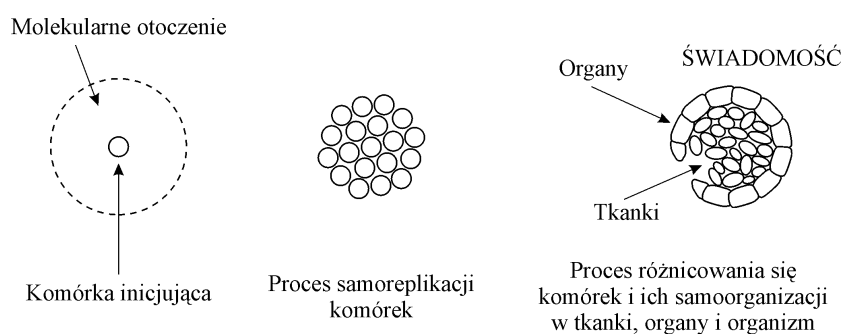


Rys. 14. Kształty: a) normalnych czerwonych ciałek krwi, b) czerwonych ciałek krwi w przypadku anemii sierpowato-komórkowej

Fig. 14. Shapes of: (a) normal red blood cells, (b) the red blood cells in the case of sickle cell disease

4.4. Cykl embrionalny

Początek rozwoju organizmu żywego stanowi cykl embrionalny, którego struktura jest przedstawiona na rys. 15.



Rys. 15. Struktura cyklu embrionalnego
 Fig. 15. Structure of an embryonic cycle

Na cykl embrionalny składa się faza szybkiego namnażania się komórek, a następnie faza ich różnicowania się i samoorganizowanie dające początek tworzenia się tkanek i organów przyszłego organizmu.

5. Molekularna inżynieria genetyczna

5.1. Struktury molekularne

Strukturami molekularnymi produktów i obiektów będziemy nazywali powiązania między tworzącymi je molekułami.

Struktury mają istotny wpływ na parametry i własności produktów i obiektów. Dlatego dążymy do tego, aby nowo powstające struktury miały pożądaną kształt lub dążymy do tego, aby w istniejących już strukturach, jeżeli to potrzebne, przeprowadzić odpowiednie zmiany.

5.2. Inżynieria genetyczna

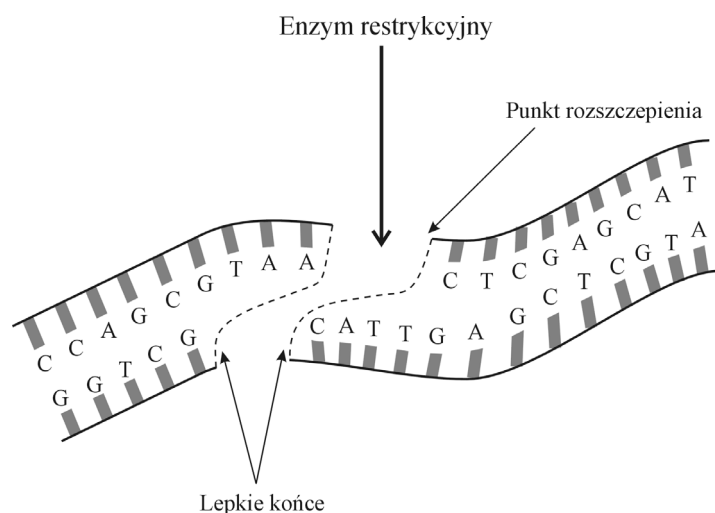
Inżynieria genetyczna polega na opracowywaniu i wprowadzaniu do DNA takich programów, które prowadziłyby do pożądanego kształtowania się struktur, które mają być wytwarzane w produktach czy obiektach. Odpowiedni dział nauki nosi nazwę *Inżynierii Genetycznej*.

Metody inżynierii genetycznej można podzielić na:

- a) metody oparte na dobieraniu i łączeniu genów wydzielonych z istniejących łańcuchów DNA,
- b) metody oparte na wprowadzaniu zmian w tekstach istniejących genów, a podejmowanych w próbach laboratoryjnego opracowania i wykonania łańcuchów DNA.

5.3. Rozcinanie łańcuchów DNA

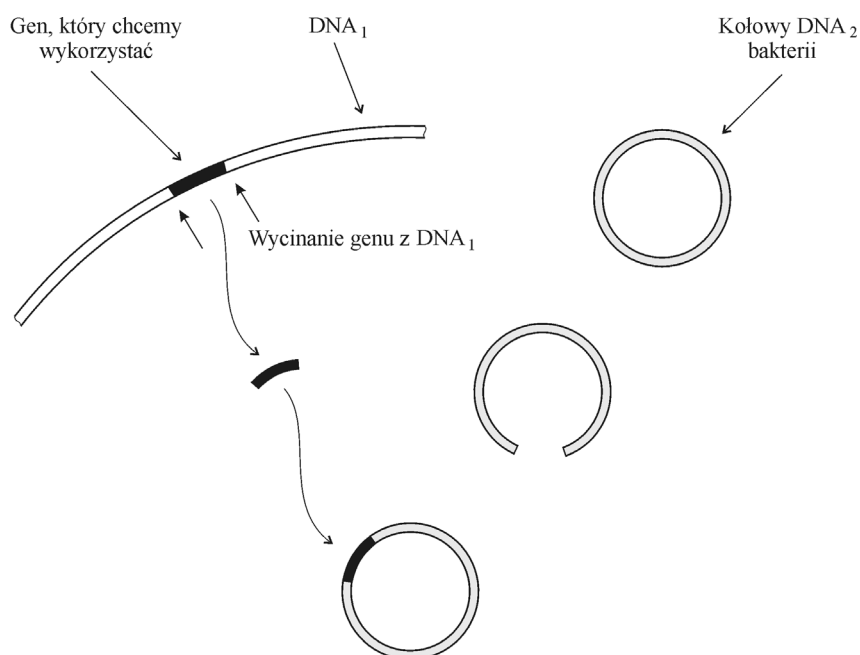
Na łańcuch DNA składa się wiele genów. Wycięcie genu z łańcucha DNA jest możliwe środkami technicznymi za pomocą tak zwanych enzymów restrykcyjnych, tak jak to ilustruje rys. 16.



Rys. 16. Ilustracja rozcinańcia łańcucha DNA
Fig. 16. Illustration of a cut of a DNA strand

5.4. Klonowanie genu

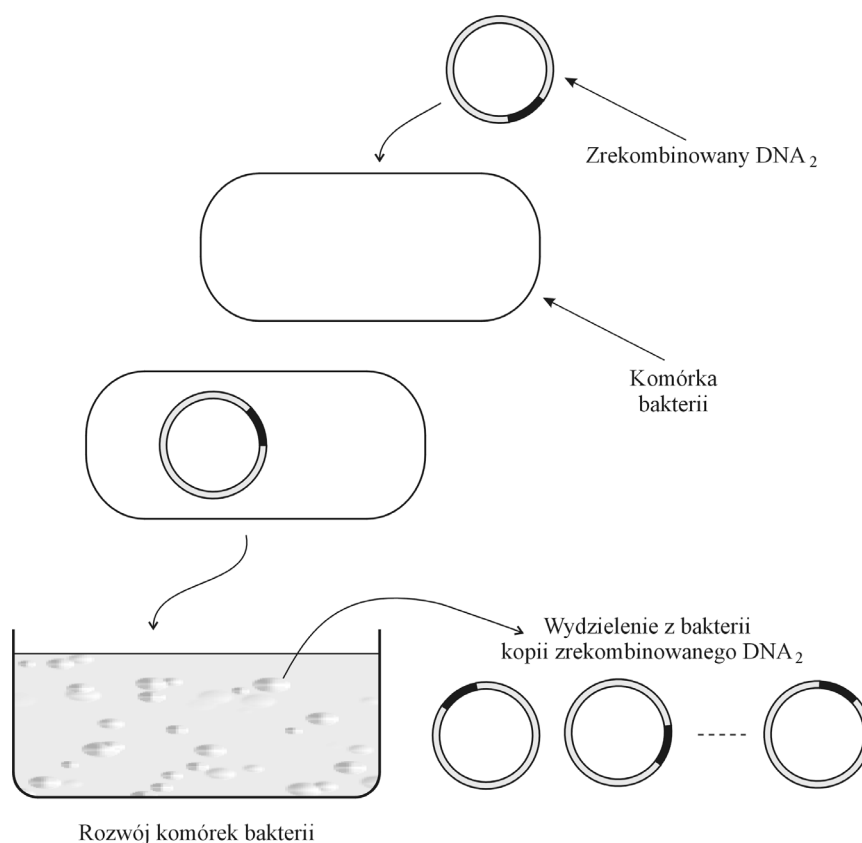
Po rozcięciu łańcucha DNA₁ można do niego wprowadzić dodatkowy gen, którego uprzednio w danym DNA₁ nie było, tak jak to ilustruje rys. 17.



Rys. 17. Klonowanie w DNA₂ genu wyciętego z DNA₁
Fig. 17. Cloning within DNA₂ of a gene cut out of DNA₁

5.5. Klonowanie genu w komórkach gościnnych

Procedura klonowania genów strukturalnych w komórkach gościnnych jest przedstawiona na rys. 18.



Rys. 18. Klonowanie obcych genów strukturalnych w komórkach gościnnych

Fig. 18. Cloning of alien structural genes in guest cells

5.6. Tajemnice procesów życia

W niniejszym opracowaniu zostały przedstawione dwa najczęściej omawiane systemy informatyki, a mianowicie:

1. Techniczne systemy informatyki budowane przez ludzi od około 70 lat. Mają one zapewnić możliwość automatycznej realizacji liczbowych procesów obliczeniowych. Elementarnymi jednostkami informacji w tych systemach są dwuwartościowe bity reprezentowane stanami wybranych układów, jak np. stanami przerzutników elektronicznych czy stanami pól magnetycznych.
2. Biologiczne systemy informatyki, które powstawały, powstają i rozwijają się w naturze od miliardów lat. Dzięki nim powstają różne produkty, powstają, powielają się różne żywe organizmy. Jednostkami informacji w tych systemach są nanobity, a ich symbolami są wybrane molekuly. Tekstami zapisów są w tym przypadku ciągi tych wybranych molekuł.

Oba systemy różnią się więc strukturą i wielkością obszaru, który zajmują.

Aby zbudować molekularne systemy informatyki o strukturach podobnych do struktur biologicznych systemów informatyki, należałoby w strukturach obecnych technicznych systemów informatyki wprowadzić następujące zmiany:

- elementarną jednostkę informacji, bit, bardzo wygodną do realizacji procesów obliczeniowych zastąpić przez czterowartościową lub więcejwartościowe nanobity w zależności od sposobu kodowania struktur produktów, które mają być wytwarzane,
- w miejsce jednostki arytmetyczno-logicznej istniejącej obecnie w technicznych systemach informatyki należałoby wprowadzić układ działający na zasadzie lepkiej matrycy, umożliwiający zbliżanie się do siebie, a w konsekwencji łączenie prostych molekuł w molekuly złożone, będące podstawowymi elementami produktów, które mają być wytworzone,
- przyjąć jako symbole podstawowych elementarnych jednostek informacji nie stany pewnych układów, lecz jako symbole przyjąć bezpośrednio obecność wybranych molekuł.

Po wprowadzeniu tych zmian uzyskano by w lokalnych fragmentach technicznych systemów informatyki podobne przebiegi procesów jak te, które mają miejsce w lokalnych fragmentach biologicznych systemów informatyki.

Ale pozostałby problem fundamentalny, a mianowicie czy zbiór tych fragmentów lokalnych połączonych w jednorodną, globalną całość spełniałby te funkcje, które są obecnie realizowane przez biologiczne systemy informatyki?

Odpowiadając na to pytanie, można odpowiedzieć, że zależy to od sposobu, w jaki te fragmenty zostaną połączone i czy będą również odtworzone środki komunikowania się zarówno połączonych fragmentów między sobą, jak też tych fragmentów z otoczeniem, tak jak to ma miejsce w biologicznych systemach informatyki.

Jest to problem tak trudny, że niektórzy biolodzy są skłonni przyjąć jako pewnik twierdzenie, że komórka żywa może pochodzić tylko od komórki żywej i że techniczna jej realizacja jest niemożliwa.

Lecz są i tacy genetycy, którzy uważają, że taka techniczna realizacja komórki jest możliwa i podają nawet liczbę technicznie utworzonych genów, które są do tego potrzebne.

Problem nie jest ostatecznie wyjaśniony.

Sprawą niewyjaśnioną pozostaje też sprawa zjawiska świadomości, mającego miejsce w biologicznych systemach informatyki. Czy można będzie podać wyjaśnienie zjawiska świadomości, opierając się na prawach fizyki i chemii?

BIBLIOGRAFIA

1. Watson J. D., Berry A.: DNA tajemnica życia. Wydawnictwo CIS, Wydawnictwo W.A.B., Warszawa 2005.
2. Zewail A. H.: The Birth of Molecules. Scientific American, Vol. 262, No. 12, December 1990, s. 76÷82.
3. Węgrzyn S.: Nanosystems of Informatics. International Journal of Systems Sciences, Vol. 32, No. 12, 2001, s. 1389÷1397.
4. Ball P.: Does hot water freeze first? Physics World, Vol. 19, No. 4, April 2006.
5. Aristoteles: Meteorologica. 350 B.C.
6. Znamirowski L., Zukowska E. D.: Parallel Nano-modeling of Ribosomal Translation Processes. Proceedings of the ICSEE '2002, 2002 Western MultiConference, The Society for Computer Simulation Intern., San Antonio, Texas, January 27-31, 2002, s. 111÷116.
7. Nanonauka i Nanotechnologia. Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego, Raport, Warszawa 2006.
8. Znamirowski L.: Non-gradient, Sequential Algorithm for Simulation of Nascent Polypeptide Folding. Computational Science -ICCS 2005, 5th International Conference, Proceedings, Part I (Eds.: v.s. Sunderam et al.), Atlanta, Georgia, May 2005. LNCS 3514, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg 2005, ISBN 3-540-26032-3, s. 766÷774.
9. Znamirowski L.: SWITCHING. VLSI Structures, Reprogrammable FPAA Structures, Nanostructures, STUDIA INFORMATICA, Vol. 25, No. 4A(60), Gliwice 2004.
10. Węgrzyn S., Gille J. Ch., Vidal P.: Matematyczne modele procesów rozwoju. Kosmos. 1988,87 (1), s. 3÷46.
11. Berg M., Tymoczko J. L., Stryer L.: Biochemistry. Fifth Edition, W. H. Freeman and Company, New York and Basstoke 2002.

Recenzent: Prof. dr hab. inż. Andrzej Grzywak

Wpłynęło do Redakcji 7 stycznia 2009 r.

Abstract

The two most frequently discussed systems of informatics are the technical systems of informatics, that allow for an automatic realization of computational processes, and the biological systems of informatics, that are the foundation of existence and development of living organisms. In this paper, an analysis and a comparison of these two systems are carried

out in the context of the possibility of a technical realization of molecular systems of informatics, that are patterned after biological systems of informatics, and that allow for synthesis of needed materials and products, as the basis of the generation of an artificial life.

Structures of the molecular systems of informatics are based directly on molecules, on molecular structures and on inter-molecular communication. A structure of such a system, based on biological systems of informatics, is illustrated in Fig. 6. The problems of molecular genetic engineering are presented in Fig. 17 and Fig. 18.

Adres

Stefan WĘGRZYN: Politechnika Śląska, Instytut Informatyki, ul. Akademicka 16,
44-101 Gliwice, Polska.