

Computación Bio–inspirada

Tema 2: Computación Natural Bio–inspirada

David Orellana Martín
Mario de J. Pérez Jiménez

Grupo de Investigación en Computación Natural
Dpto. Ciencias de la Computación e Inteligencia Artificial
Universidad de Sevilla

dorellana@us.es (<http://www.cs.us.es/~dorellana/>)

marper@us.es (<http://www.cs.us.es/~marper/>)

Máster Universitario en Lógica, Computación e Inteligencia Artificial
Curso 2023-2024



Índice

- ★ Limitaciones de las máquinas electrónicas.
- ★ La Naturaleza viva: una fuente de inspiración computacional.
- ★ Paradigma de la **computación molecular** basada en ADN.
 - * Primeras ideas.
- ★ Paradigma de la **computación celular** con membranas.
 - * Primeras ideas.

Premio Nobel de Química de 2016

- * Jean Pierre Sauvage, Universidad de Estrasburgo (Francia),
- * James Fraser Stoddart, Universidad de Northwestern (EEUU)
- * Bernard L. Feringa, Universidad de Groningen (Holanda).

Por el diseño y la síntesis de **máquinas moleculares**.

(las **máquinas más pequeñas del mundo**: ~ 1.000 veces más pequeñas que el ancho de un cabello)

Limitaciones de las máquinas electrónicas

- Máquinas: dispositivos finitos.
- Limitaciones en **espacio** (memoria) y en **tiempo**.
 - * **Espacio**: miniaturización (**R. Feymann, 1959**).
 - * **Tiempo**: velocidad de cálculo de los **procesadores electrónicos** (**R. Churchhouse, 1983**).
- **Consecuencia**:
 - * Existen problemas relevantes de la vida real que **nunca** podrán ser resueltos por ordenadores electrónicos (**a menos que ...**)

Computación no convencional

- Dispositivos de un modelo de computación: **máquinas**
- Máquinas universales:
 - ★ **Convencionales**: soporte electrónico.
 - ★ **No convencionales**: otro soporte distinto.
- Búsqueda de nuevos paradigmas computacionales ...
 - ★ para implementar máquinas no convencionales de propósito general.
- Huida hacia adelante:
 - ★ La Naturaleza como una fuente de **inspiración computacional**.

La Naturaleza viva: Una alternativa

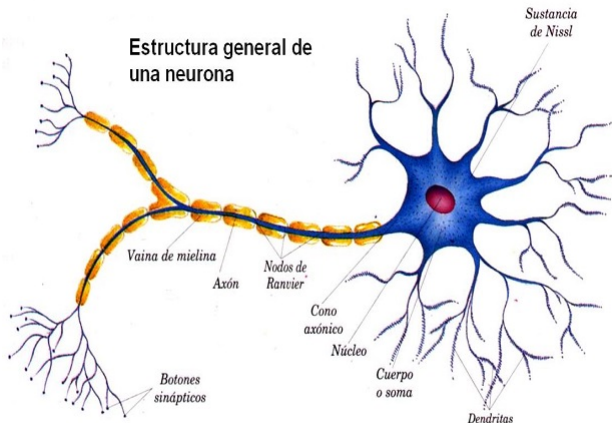
Paradigma computacional inspirado en la Naturaleza viva.

Computación Natural: Disciplina que trata de capturar la forma en que la Naturaleza lleva realizando procesos de cálculo desde hace millones de años.

- * **Redes neuronales artificiales:** W.S. McCulloch y W.H. Pitts (1943).
- * **Teoría de la comunicación en el sistema nervioso humano:** J. von Neumann, H. Aiken, N. Wiener (1946).
- * **Sistemas complejos auto-reproductivos:** J. von Neumann (1947).
- * **Autómatas celulares:** J. von Neumann, S. Ulam (1951).

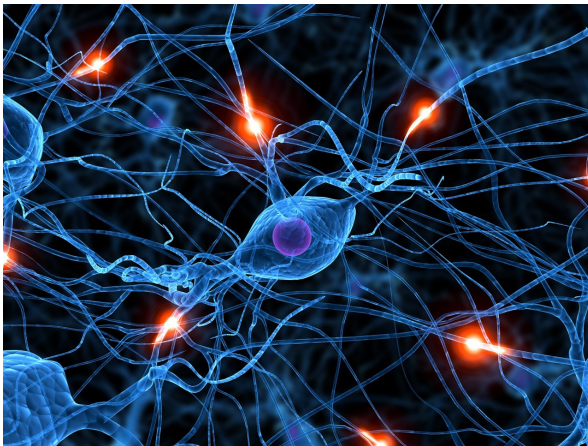
- * Teoría de **patrones**: A. Turing (1952).
- * Algoritmos **genéticos**: J. Holland (1975).
- * Modelo **Splicing**: T. Head (1987).
- * Paradigma de la **computación molecular** basada en ADN: L. Adleman (1994).
- * Paradigma de la **computación celular**: Gh. Păun (1998).

Neuronas



El cerebro humano contiene aproximadamente 10^{11} neuronas (cien mil millones).

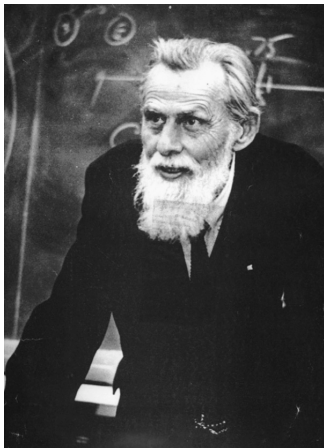
Sinapsis



En el sistema nervioso humano existen, aproximadamente, 10^{14} sinapsis que comunican las neuronas (de cada una, entran y salen unas 1000 conexiones).

Redes neuronales artificiales

Fueron introducidas por **W.S. McCulloch, W.H. Pitts** en 1943¹.



¹ W.S. McCulloch, W.H. Pitts. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. **Bulletin of Mathematical Biophysics**, 5, 1943, 115-133.

Redes neuronales artificiales

Inspiradas en el sistema complejo de redes neuronales del cerebro humano (simulación del sistema nervioso).

- ★ Conjunto de unidades de proceso conectadas entre sí, a modo de **neuronas**.
- ★ Capacidades básicas: aprendizaje, generalización y abstracción.
- ★ Procesamiento en paralelo, memoria distribuida y adaptabilidad.
- ★ Elaboración de un **modelo de comportamiento** a partir de una base de ejemplos.
 - Inicialmente la red es *ignorante* y tiene la habilidad de “aprender” a partir de ejemplos.
 - **Capacidad para aprender** aquello que tenga cierto sentido (*aproximador universal*): concepto formalizado (**Kolmogorov**).

Redes neuronales artificiales

- ★ Objetivo inicial: mejorar el rendimiento de programas ejecutados sobre **máquinas electrónicas**.
- ★ Aplicaciones a disciplinas muy diversas
 - ★ Robótica.
 - ★ Diagnóstico médica.
 - ★ Reconocimiento de señales y de imágenes.
 - ★ Procesamiento del lenguaje natural.
 - ★ Economía y finanzas.
 - ★ Etc.

Teoría de la comunicación en el sistema nervioso humano

Interés suscitado en J. von Neumann por las redes neuronales artificiales.

Estudio de los sistemas de comunicación y regulación automática de los seres vivos, a través del sistema nervioso (aplicados a sistemas electromecánicos).

- * Elementos básicos de las máquinas de propósito general: inspirados en estructuras y funcionalidades de los organismos vivos.
- * Paralelismo entre la memoria humana y la de una máquina de propósito general.

Nacimiento de la cibernética².

² N. Wiener. **Cybernetics or control and communication in the animal and the machine**, Actualités Scientifiques et Industrielles 1053, The Technology Press-John Wiley and Sons, Inc, Paris, 1948.

Sistemas complejos auto-reproductivos

A partir de 1947, J. von Neumann se interesó por la capacidad de las máquinas para “reproducirse”.

- * Analizó el diseño de dispositivos computacionales **tolerante a fallos**.
- * Estudió la complejidad computacional requerida para que un sistema complejo fuese auto-reproductivo.
- * Trató de diseñar un **autómata auto-reproductivo** basado en ecuaciones en derivadas parciales (alta complejidad computacional).
- * Intentó diseñar un tal autómata a través de células artificiales.

Autómatas celulares

Interés suscitado en J. von Neumann por las ideas sobre autómatas desarrolladas por Post y Turing (1936).

El diseño de autómatas auto-reproductivos a través de células artificiales (S. Ulam), condujeron de manera natural a los **autómatas celulares** (1947)³.

- * Incorporación del procesamiento paralelo.

Un paradigmático autómata celular: el **juego de la vida** (J.H. Conway, 1970), difundido por M. Gardner⁴.

S. Wolfram estudió el comportamiento de los autómatas celulares, justificando que, a partir de un escenario inicial, puede exhibir conductas diferentes⁵.

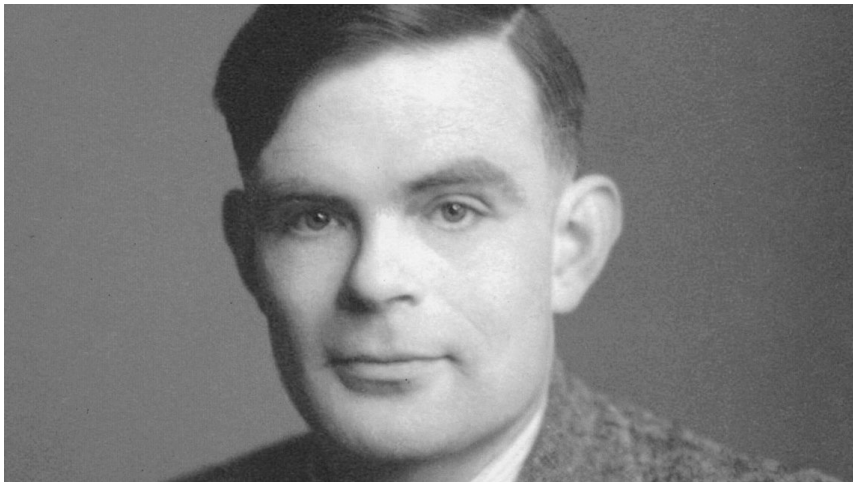
³ J. von Neumann. **Theory of Self-reproducing Automata**. Edited and completed by A.W. Burks, University of Illinois Press, Urbana and London, 1966.

⁴ M. Gardner. **Mathematical Games: The fantastic combinations of John Conway's new solitaire game "Life"**, Scientific American. 1970.

⁵ S. Wolfram. **Theory and Application of Cellular Automata**, World Scientific, Singapur, 1986.

Teoría de patrones

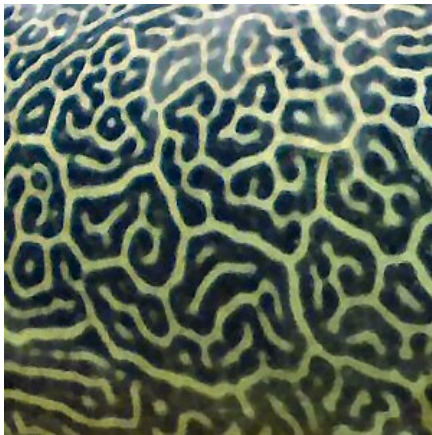
A partir de 1952, A.Turing se centró en el estudio de la **teoría de patrones**, aplicada al mecanismo de desarrollo de la forma (**morfogénesis**)⁶.



⁶ A. Turing. The Chemical Basis of Morphogenesis. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series B, Biological Sciences**, Vol. 237, No 641. (Aug. 14, 1952), pp. 37-72.

Teoría de patrones

A. Turing conjeturó la existencia de **patrones regulares** en el sistema biológico animal, a la hora de implementar la morfogénesis⁷.



⁷ A. Turing. The Chemical Basis of Morphogenesis. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series B, Biological Sciences**, Vol. 237, No 641. (Aug. 14, 1952), pp. 37-72.

Teoría de patrones

- ★ Las células se organizan entre ellas para crear las diferentes estructuras y formas en los animales.
- ★ Las estructuras resultantes son consecuencia de la **difusión** de moléculas por el espacio y las **reacciones** químicas que se produce entre ellas.
- ★ La combinación de los procesos de difusión/reacción produce la creación de patrones periódicos, en lugar de homogéneos.
- ★ La pigmentación de los animales (i.e. las rayas que aparecen regularmente en ciertos animales) eran causadas por un par de sustancias químicas (morfógenos) que trabajaban, a la vez, como activadores e inhibidores.
- ★ Esta conjetura fue corroborada experimentalmente, en 2012, por unos investigadores del King's College, en Cambridge.



Algoritmos Genéticos

Introducidos por **J.H. Holland** en 1975⁸



“Se pueden encontrar soluciones aproximadas a problemas de gran complejidad computacional mediante un proceso de evolución simulada”

⁸ J. Holland. **Adaptation in Natural and Artificial Systems An Introductory Analysis with Applications to Biology, Control, and Artificial Intelligence**. Ann Arbor, The University of Michigan Press, December 1, 1975.

Algoritmos Genéticos

Inspiración: proceso observado en la evolución natural de los seres vivos.

- * **Problema de la supervivencia** para un ser vivo (uso de su material genético).
- * **Adaptarse** más y mejor a un entorno cambiante y, eventualmente, hostil.
- * **Adquirir conocimiento** de su experiencia, siendo “consciente” de ella.

Se rigen por los **principios de selección natural**:

- * La evolución se da a nivel de los cromosomas.
- * La evolución se implementa a través de la combinación de los cromosomas de los progenitores.
- * Los individuos con **mejores cromosomas** tendrán mayor probabilidad de reproducirse y sobrevivir.
- * En cada nueva generación sólo se considera la información presente en sus progenitores.

Algoritmos Genéticos

- ★ Objetivo inicial: mejorar el rendimiento de programas ejecutados sobre **máquinas electrónicas**.
- ★ Aplicaciones a disciplinas muy diversas
 - ★ Soluciones aproximadas de problemas de búsqueda y de optimización computacionalmente duros.
 - ★ Teoría de juegos.
 - ★ Planificación de rutas logísticas.
 - ★ Reconocimiento de señales y de imágenes.
 - ★ Optimización de cortes de material.
 - ★ Etc.

Modelo Splicing

Es el primer **modelo computacional abstracto** basado en la manipulación de moléculas de ADN.

Fue desarrollado por **T. Head** en 1987⁹.



Posteriormente, sería “completado” por Gh. Păun, G. Rozenberg y A. Salomaa en 1996¹⁰.

⁹ T. Head. Formal language theory and DNA: an analysis of the generative capacity of specific recombinant behaviours. **Bulletin of Mathematical Biology**, **49**, 1987, 737-759.

¹⁰ Gh. Păun, G. Rozenberg, A. Salomaa. Computing by Splicing. **Theoretical Computer Science**, **168**, 2 (1996), 321-336 (1996).

Modelo Splicing

- ★ La información es almacenada en cadenas de caracteres, simulando el modo en que lo hacen las moléculas de ADN.
- ★ Las operaciones sobre dichas cadenas son similares a las que realizan ciertas enzimas sobre el ADN.

Se considera el precursor de la **Computación Molecular basada en ADN**.

Computación molecular basada en ADN

Paradigma computacional introducido por **L.M. Adleman** en noviembre de 1994¹¹.



¹¹ L.M. Adleman. Molecular computation of solutions to combinatorial problems. **Science**, New Series. Volume 266, Issue 5187 (Nov. 11, 1994), 1021-1024.

Computación molecular basada en ADN

- **R. Feymann**, 1959: Posibilidad de realizar computaciones a nivel molecular
 - * L. Adleman materializó el sueño de Feymann (noviembre de 1994).
- Analogía: procedimientos matemáticos y procesos biológicos.
 - * L. Adleman concretó esa similitud.
- El experimento de Adleman **no es una implementación práctica** del modelo splicing pero ...
 - * el tipo de sustrato (moléculas de ADN) y las operaciones realizadas sobre el mismo, son similares a las propuestas que se hicieron en dicho modelo.

Computación molecular basada en ADN

- Cromosomas:
 - ★ Descritos por [Holfmeister, 1848](#).
 - ★ *Codifican* la información genética (Principios del s. XX).
 - ★ Proteínas + **ADN** ([Claude, Porter, 1943](#) y [Mirsky, 1947](#)).
- Conjetura de la comunidad científica.
- **ADN** (J. Watson y F. Crick, 1951–1953)
 - ★ Descifran la estructura.
 - ★ Descubren el principio de complementariedad.
 - ★ Demuestran que las moléculas de ADN codifican toda la información genética.
 - ★ Justifican el uso de ciertas técnicas para su manipulación.

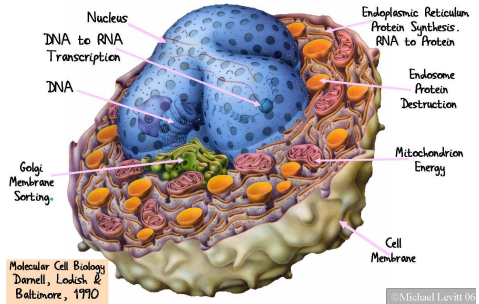
Computación molecular basada en ADN

- Transistor (J. Bardeen, W. Shockley y W. Brattain, 1948).
 - * Manipulación electrónica silicio.
- L. Adleman (1994): manipulación bioquímica del carbono.
 - * Sueño de Adleman: simular una MT manipulando moléculas de ADN.
- Julio de 2000: interruptor a partir de una molécula.
 - * Sustituye la luz por una reacción química.
 - * Dispone de más de mil procesadores en el espacio ocupado hoy día por un procesador.
 - * Aumenta la velocidad de cálculo unas cien mil millones de veces.
 - * Puede reproducir cien ordenadores convencionales en el tamaño de un grano de sal fina.
- Simulación bioquímica de una MT (E. Shapiro, nov. 2001)

Computación molecular basada en ADN

- Paradigma de computación molecular basada en ADN:
 - * Modelos **orientados a programas**.
 - * Modelos **universales**.
 - * Modelos **eficientes** (intercambio tiempo/espacio).
 - * Modelos **deterministas** y masivamente paralelos.
 - Las moléculas de ADN están **direccionadas**
 - en función de los grupos químicos que están listos para nuevos enlaces.
 - Hay modelos de computación molecular que usan moléculas sin orientación.
- ¿Un **ordenador molecular de propósito general**?

¿Saben sumar las células?



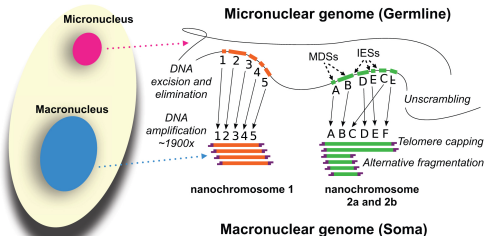
pues ...

Aritmética

- ★ Saben contar (hasta un cierto umbral): *quorum sensing*
- ★ Saben repartir/dividir: *mitosis*

Punteros de memoria:

- ★ Auto-montaje de genes en los Ciliados



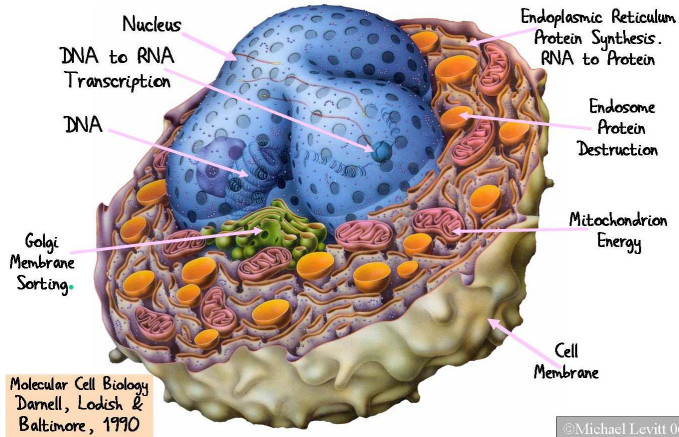
La célula

Unidad fundamental de todo organismo vivo.

- Estructura compleja y, a la vez, muy organizada.
- Permite la ejecución simultánea de reacciones químicas.

Realiza unos procesos esenciales que caracterizan la **VIDA**:

- **Replicación** del material genético (DNA, RNA, ...).
- Síntesis de **proteínas**.
- Producción de **energía**.
- Realización de procesos **metabólicos**.

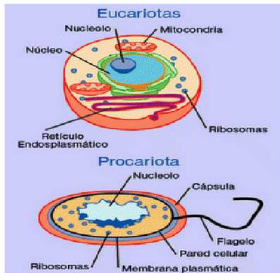


Células procariotas vs células eucariotas

Existen dos tipos de células:

- * **Procariotas:** carecen de un núcleo bien definido (organismos unicelulares).
- * **Eucariotas:** núcleo protegido por una doble membrana (animales y plantas).

La célula: procariota vs eucariota



Células procariotas vs células eucariotas

Células procariotas:

- ★ No tienen un núcleo bien definido.
- ★ El DNA está disperso por el citoplasma.
- ★ Pueden vivir en estado de simbiosis con otros organismos (i.e. E. coli).
- ★ Algunas producen enfermedades.
- ★

Células eucariotas:

- ★ Tienen un núcleo bien definido con membrana nuclear.
- ★ El núcleo contiene los cromosomas que, en su interior, contiene el DNA.
- ★ No viven en estado de simbiosis con otros organismos (salvo los líquenes).
- ★ No producen enfermedades.
- ★

Células procariotas vs células eucariotas

En el “paso” de células procariotas a eucariotas:

- ★ Aumentó en cientos de veces la cantidad de ADN.
- ★ El DNA se distribuyó en varios “segmentos” (**cromosomas**).
- ★ El DNA se compactificó en unión de unas proteínas (histonas).
- ★ Se constituyó un nucleo bien definido para manejar esa ingente cantidad de información.

Computación Celular con Membranas

Paradigma computacional introducido por **Gh. Păun** en octubre de 1998¹².



¹²Gh. Păun. Membrane Computing. **Journal of Computer and System Sciences**, 61, 1 (2000), 108–143, and **Turku Center for Computer Science-TUCS Report** Nr. 208, 1998

Computación Celular con Membranas

Computación Celular con Membranas

- * Paradigma inspirado en la estructura y el funcionamiento de la célula como organismo vivo capaz de **procesar** y **generar información**, así como en su organización en estructuras “superiores” (tejidos, órganos, etc.).
- * El artículo fundacional¹³ fue designado por el ISI Thomson Reuters como *Fast Breaking Paper* (febrero de 2003).
- * Declarada por el ISI Thomson Reuters como *Fast Emerging Research Front in Computer Science* (noviembre 2003).

¹³Gh. Păun. Membrane Computing. *Journal of Computer and System Sciences*, 61, 1 (2000), 108–143, and *Turku Center for Computer Science-TUCS Report* Nr. 208, 1998

Computación Celular con Membranas

- Paradigma de computación celular:
 - * Modelos **orientados a máquinas**.
 - * Modelos **universales**.
 - * Modelos **eficientes** (intercambio tiempo/espacio).
 - * Modelos **no deterministas** de tipo distribuido, paralelo y maximal.
- Rama emergente de la Computación Natural.
- No existe implementación real ni en medio bioquímico ni en medio electrónico.

Computación Molecular versus Computación Celular

Computación molecular basada en ADN

- ★ Modelos orientados a **programas**.
- ★ Modelos universales.
- ★ Modelos eficientes.
- ★ Modelos **deterministas**.

Computación celular con membranas

- ★ Modelos orientados a **máquinas**.
- ★ Modelos universales.
- ★ Modelos eficientes.
- ★ Modelos **no deterministas**.