

Enzima electrónico con sitio activo reconfigurable para el reconocimiento de una señal digital de entrada y su procesamiento en otra de salida

Breve descripción

Circuito electrónico digital que emula la función y configuración del sitio activo de un catalizador biológico o enzima, caracterizado porque se configura por un procedimiento que es un algoritmo genético, seleccionando las puertas electrónicas y los estados de los interruptores deslizantes que lo componen. Se resuelve así el diseño de un mecanismo inspirado en la bioquímica cuya función emula a una cerradura configurable por un algoritmo de optimización. Se trata de un circuito electrónico bioinspirado y configurable aplicando métodos evolutivos.

¿Cómo funciona?

La transformación de una señal de entrada (S_{nm}) en otra de salida (P_{nm}), ambas previamente establecidas por el usuario del dispositivo (Figura 1), requiere de la configuración del sitio activo del enzima (C_{nm} y O_{nm}) que simula el circuito electrónico. La configuración se realiza aplicando un algoritmo genético no convencional o procedimiento SDS, en abreviatura de "simulated DNA shuffling", método que elimina los inconvenientes característicos de los algoritmos genéticos convencionales en el diseño de circuitos electrónicos y otros dispositivos.

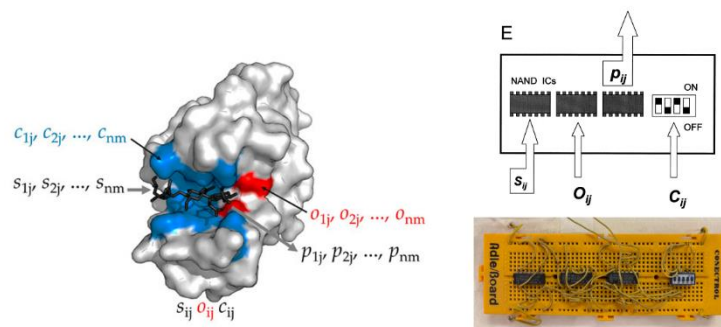


Figura 1. (Izquierda). Organización de un enzima E , la lisozima, mostrando el centro activo: en azul el sitio de unión (C_{nm}) del sustrato S_{nm} , un peptidoglicano, y del sitio catalítico en rojo (O_{nm}). El producto P_{nm} de la reacción $S + E \rightarrow P$ es el resultado de realizar la operación Booleana $S_{ij} O_{ij} C_{ij}$ en el centro activo.

(Derecha). Circuito y esquema del enzima electrónico mostrando sus componentes. La figura izquierda está modificada de Thomas Shafee, 2015. (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Enzyme_structure.svg).

¿Qué problema resuelve?

El dispositivo y el procedimiento de configuración se caracterizan por la economía de los componentes, eficacia del sistema de reconocimiento de la señal de entrada y el carácter reconfigurable del dispositivo por el algoritmo SDS, emulando a un enzima cuyo sitio activo evoluciona en función de las señales de entrada/salida.

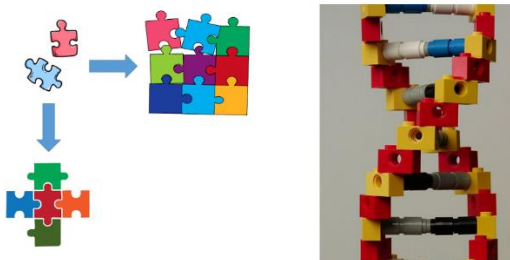


Figura 2. (Izq.) Ensamblaje de unidades aplicando un modelo llave-cerradura, y cuya unión está mediada por enzimas electrónicas.

(Der.) Modelo de ADN con LEGO, tomado de https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Lego_DNA.jpg.



El reconocimiento de señales digitales basado en el uso de enzimas electrónicos tiene utilidad en el reconocimiento inteligente entre unidades, por ejemplo máquinas o sus piezas, que han de reconocerse entre sí de forma similar a como hacen una llave y cerradura (Figura 2). Las unidades se unen según cierto programa o protocolo de ensamblaje.

¿Qué productos futuros resultarán?

Un 'enzima electrónico' puede ser, entre otros, aplicado con fines industriales o en biotecnología. En la industria una máquina compuesta está formada por la combinación de varias máquinas simples que se unen en serie. Por ejemplo, una grúa, un coche o un reloj. En ocasiones, y fuera de esta definición, es preciso ensamblar distintas unidades con un fin común de forma similar a una máquina compuesta. Por ejemplo, la maquinaria en una cadena de montaje, el enganche entre vagones de un tren o las piezas en un juego de construcciones. En estos casos es posible incluir en las unidades a ensamblar el correspondiente enzima electrónico, logrando así un acoplamiento entre unidades que esté programado de antemano. El resultado de un reconocimiento llave-cerradura entre las unidades a ensamblar puede ser lineal o en anillo, admitiendo otros acoplamientos o ensamblajes posibles.

Otra aplicación es en biotecnología, pudiéndose simular con ordenador la evolución de las rutas metabólicas en los organismos, tal es el caso de las fermentaciones con interés industrial.

Ventajas competitivas frente a otras investigaciones

El enzima electrónico aquí descrito es un ejemplo de hardware bioinspirado cuyo coste está muy por debajo de otras plataformas comerciales. Su configuración con un algoritmo genético SDS se realiza con una rutina en Python no requiriendo un ordenador de altas prestaciones.

¿Dónde se ha desarrollado?

En el grupo de investigación 971006 - MADMIB - MODELIZACIÓN, ANÁLISIS DE DATOS Y MÉTODOS INFORMÁTICOS EN BIOLOGÍA, ha acumulado una larga experiencia en la aplicación de la teoría de autómatas finitos y moleculares a la modelización de moléculas relevantes en Biología, hoy llamadas biomoléculas.

La línea de investigación descrita en esta ficha fue recuperada, y actualizada, en 2023. En esta ocasión se introdujo un método novedoso que combinando la teoría de grafos con la de autómatas, permite simular la evolución de las rutas metabólicas en los organismos. Su utilidad fue ilustrada con la simulación de la evolución de la glucólisis y el ciclo de Krebs (<https://doi.org/10.3390/computation11060107>), incluyéndose por su interés la fermentación alcohólica.

Y además...

Este grupo de investigación puede prestar los siguientes servicios:

- Asesoramiento y consultoría sobre problemas específicos en los que se precisa una metodología metaheurística.
- Colaboración, estudio, diseño y desarrollo sobre posibles aplicaciones tecnológicas de los enzimas electrónicos o de otras tecnologías cuyo desarrollo y aplicación requieran soluciones bioinspiradas.

Responsable de la investigación

Rafael Lahoz-Beltra, lahozraf@ucm.es

Departamento: **Biodiversidad, Ecología y Evolución (Biomatemática)**

Facultad: **Biología**