

# DE LA FISICA A LA BIOLOGIA: UN RETO DEL SIGLO XXI

**Luis Vázquez Martínez**

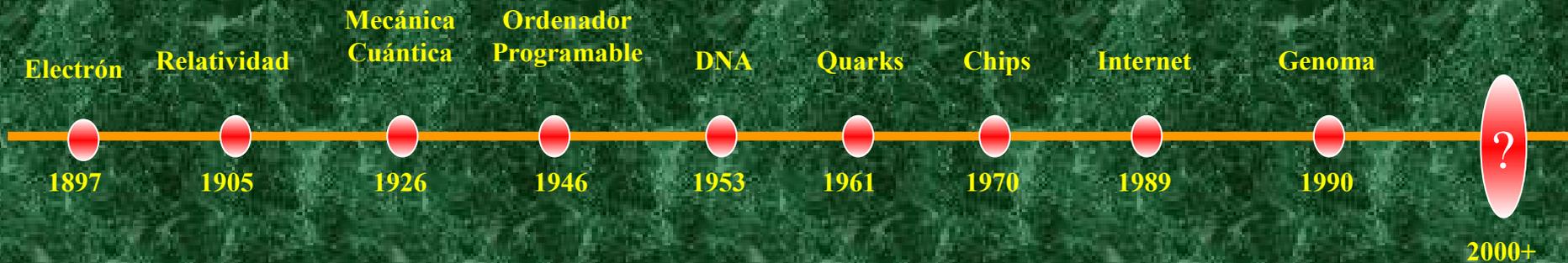
Departamento de Matemática Aplicada

Facultad de Informática /Universidad Complutense de Madrid

28040-Madrid

[www.fdi.ucm.es/profesor/lvazquez](http://www.fdi.ucm.es/profesor/lvazquez)

[lvazquez@fdi.ucm.es](mailto:lvazquez@fdi.ucm.es)



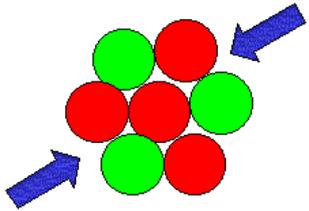
***"La Investigación Básica es lo que hago cuando no conozco lo que estoy haciendo"***  
***Werner Von Braun (Investigador Aplicado)***

MATEMATICAS +FISICA  $\xrightarrow{(1800)}$  QUIMICA

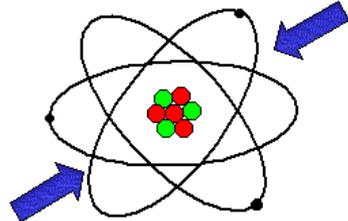
- Estaban ampliamente separadas.
- Métodos diferentes de investigación.
- Conceptos de Química no tenían contrapartida en Física: Valencia, Actividad, Solubilidad y Volatilidad (Carácter más cualitativo).
- Las leyes de de la Química no podían ser explicadas en el contexto de la Mecánica Newtoniana.
- Clasificación de los Elementos Químicos: Regularidad y Estabilidad.

# MECANICA CUANTICA (1900-1930)

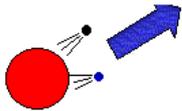
- Proporciona una descripción cuantitativa de las leyes de la Química.
- Los conceptos de Química son en parte complementarios de los mecánicos.
- La estabilidad de los elementos químicos se explica mediante los estados estacionarios cuánticos.



La interacción fuerte mantiene unido el núcleo



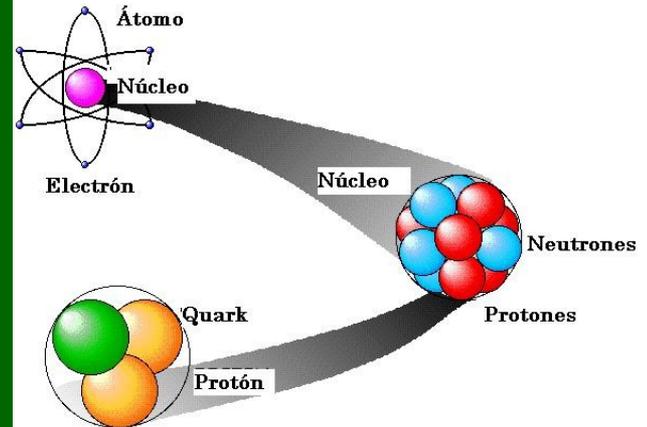
Las fuerzas electromagnéticas mantienen unido el átomo



La fuerza débil en la desintegración radiactiva



La fuerza gravitatoria mantiene unido el sistema solar



# MATEMATICAS+FISICA+QUIMICA $\xrightarrow{(2000)}$ BIOLOGIA

- La aplicación de las Matemáticas, Física y la Química al estudio de los organismos vivos ha generado progresos en Biología.
- Los típicos conceptos biológicos son de carácter más cualitativo que los de la Física y Química.
- Conceptos como Vida, Función de un Órgano, Percepción no tienen contrapartida en Física y Química. *¿Modelización Matemática?*
- Estudios a diferentes escalas espaciales:
  - (1) *Sistema Solar* → *Molécula* → *Átomo* → *Núcleo* → *Partícula Elemental* → *Quark*
  - (2) *Ser Vivo* → *Célula* → *Núcleo* → *ADN*

# ORGANISMOS VIVOS

- Manifiestan grados relevantes de Estabilidad.
- **Estructuras Complejas** compuestas de diferentes tipos de moléculas.
- El Fenómeno Biológico no es completamente entendido en términos de las leyes de la Física y la Química.

# LA VIDA

- **METABOLISMO:** Conversión de Energía.
- **REPRODUCCION:** Sistema de autorreplicación.
- **INFORMACION:** Transmisión y procesado de la Información. Generar “Orden” a costa de la Energía.
- **EVOLUCION:** Adaptación. Simbiosis. Parasitismo. Interacción con el Medio.
- **SE NECESITAN:**
  - (1) Elementos “Estructurales”:  
C,H,,N,O,S,P,Fe,...
  - (2) Energía, Agua.
  - (3) Zonas Habitables.

# Contexto Conceptual

- Sistemas Complejos
- Sistemas Lineales, No Lineales y Caos
- ¿Cuál es el tamaño mínimo de un Ser Vivo?
  - Genoma mínimo

# SISTEMAS COMPLEJOS

- Sistemas con muchos elementos que interaccionan entre ellos de muy diferentes formas tal que el sistema global resultante manifiesta PROPIEDADES COLECTIVAS EMERGENTES con características universales.
- Agregados de Materia, Energía e Información que manifiestan.
  - (1) Aprendizaje, Adaptación y Organización.
  - (2) Mutación y Evolución.
  - (3) Desarrollo de la Variedad.
  - (4) Exploración de Opciones.
  - (5) Reacciones frente al Control Externo y Vecinos.
  - (6) Replicación.
  - (7) Organización de Jerarquías de Estructuras de Orden Superior

<b><i>Escalas de Tiempo</i></b>	<b><i>Tiempos de Movimientos Internos y sus Amplitudes</i></b>
Picosegundo	Movimientos ( $\tau=10^{-12}$ ) y oscilaciones de átomos con amplitudes $A=10^{-1}$ Å
Nanosegundo	Movimientos limitados; oscilaciones de pequeños grupos de átomos: azúcar, fosfatos, bases; movimientos asociados al doblamiento y retorcimiento de la cadena doble con amplitudes del orden de $A=5-7$ Å
Microsegundo	Movimientos asociados a la doble hélice; movimientos de las bases del DNA
Milisegundo	Disociación de la doble hélice; cambio de la helicidad; rotación del conjunto
Segundo	Amplitudes del movimiento $A=23/\mu\text{m}$ ; isomerización, división de bacteria
<b><i>Escalas de Tiempo</i></b>	<b><i>Energía de activación: Fuentes de energía</i></b>
Picosegundo	$E=0,6$ kcal/mol; Fuente: energía térmica externa
Nanosegundo	$E=2-5$ kcal/mol; Fuente: colisiones con moléculas de la solución
Microsegundo	$E=5-20$ kcal/mol; Fuentes: cambios de pH, aumento de la temperatura, acción de agentes desnaturalizadores
Milisegundo	$E=10-50$ kcal/mol; Fuentes: interacciones con proteínas y otras componentes
Segundo	
<b><i>Escalas de Tiempo</i></b>	<b><i>Métodos Experimentales</i></b>
Picosegundo	NMR, IRS, espectroscopía Raman, rayos X
Nanosegundo	NMR, EPR, espectroscopía Raman fluorescente
Microsegundo	NMR, EPR, reacción óptica anisótropa
Milisegundo	NMR, intercambio de hidrógeno, reacción con formaldehído, dispersión cuasielástica de la luz, métodos hidrodinámicos
Segundo	
<b><i>Escalas de Tiempo</i></b>	<b><i>Métodos Teóricos</i></b>
Picosegundo	Análisis armónico, modelos discretos, métodos de dinámica molecular
Nanosegundo	Análisis armónico, modelos de barras, métodos de dinámica molecular
Microsegundo	Teoría de transiciones de hélice
Milisegundo	Métodos mecánicos y topológicos
Segundo	

# ORGANISMOS VIVOS

MEDIO AMBIENTE

ESPECIES

ORGANISMOS

FISIOLOGÍA

CITOLOGÍA

REPLICACIÓN DE BIOMOLÉCULAS

TRANSCRIPCIÓN GENÉTICA

CICLOS BIOQUÍMICOS

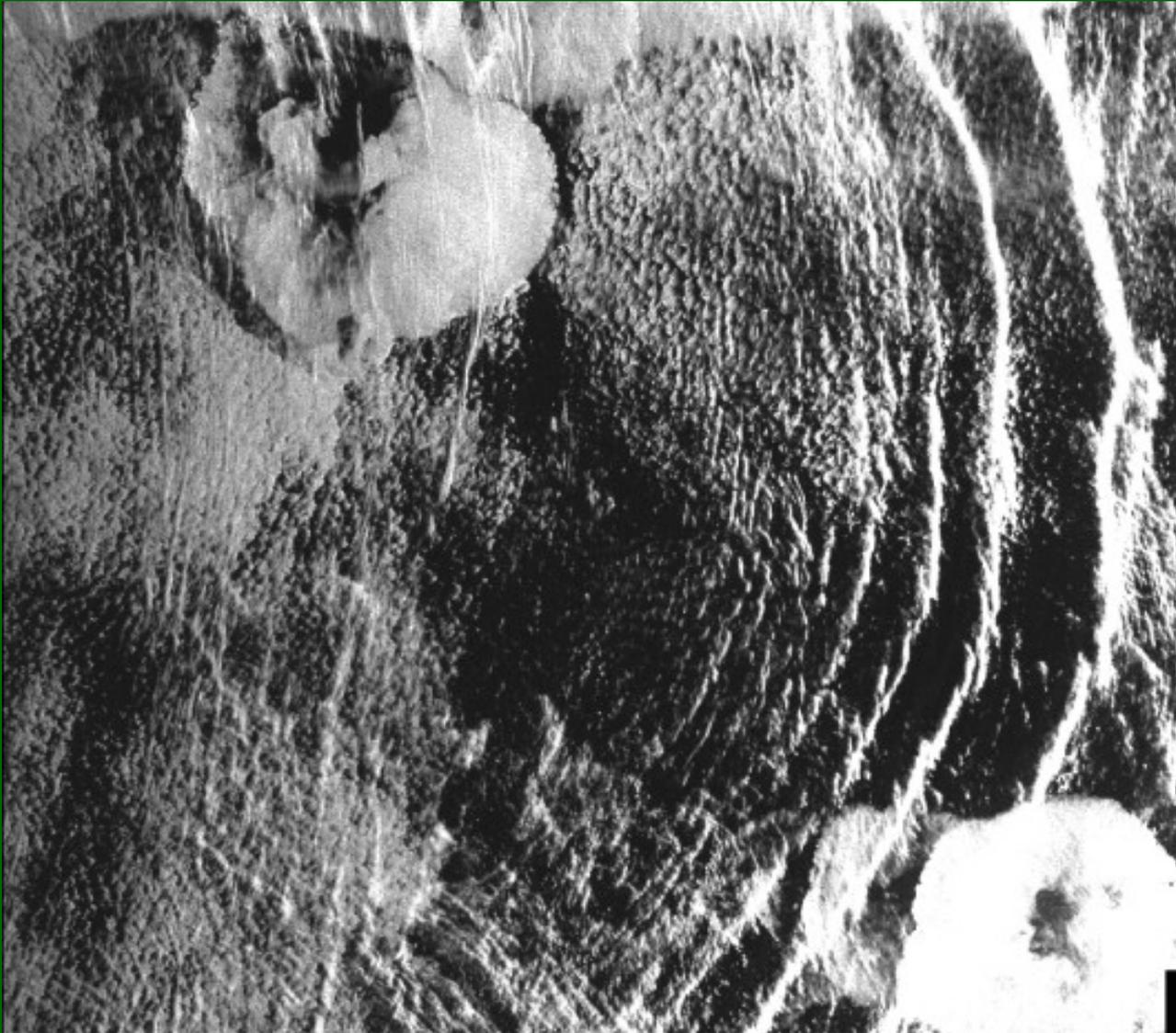
DINÁMICA BIOMOLECULAR

QUÍMICA

FÍSICA ATÓMICA



MANCHA ROJA de Júpiter. Observada desde el Siglo XVII, manifiesta una gran estabilidad en la atmósfera de Júpiter y su escala es  $4 \times 10^8$  metros, aproximadamente la distancia entre la Tierra y la Luna.



ONDAS INTERNAS en el Mar de Andaman (Sumatra):  
Anchura de 150 Km. Separadas  $10^5$  m y velocidad 2 m/s.

# Sistemas Lineales, No Lineales y Caos

- **Sistemas Lineales:** “El conjunto es igual a suma de las partes”.
- **Sistemas No Lineales:** “El conjunto NO es igual a la suma de las partes”.
- **Caos:**
  - Fenómeno No Lineal
  - Sensibilidad a las condiciones iniciales
  - Henry Poincare (1900)
  - Computación (1960)
- Ecuaciones básicas no son conocidas. Bancos de Datos.

Enrico Fermi. John Pasta. Stan Ulam  
Tech. Rep. LA-1940 (1955)

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = (x_{i+1} + x_{i-1} - 2x_i) + \alpha((x_{i+1} - x_i)^2 - (x_i - x_{i-1})^2)$$

- Estudio del comportamiento de  $i = 64$  partículas.



- Actualmente se pueden estudiar sistemas de  $10^9$  partículas.
- Modelos de nuevos materiales, diferentes modelos biológicos (ADN), ...

# Herramientas

- Supercomputación
- Grid
- Comunicaciones
- Astrobiología
- Misiones Antártida
- Misiones Espaciales

# Supercomputación

- “Término flotante”
  - Tecnología asociada en constante evolución
- PC actual de 1000 Euros más potente que CDC-7600 de \$10 Millones de hace 20 años
- Situación similar a CRIPTOGRAFIA
  - “Invulnerable con tecnología presente”
  - 1970 – DES (Clave Simétrica)
  - Ahora:
    - RSA (Clave Asimétrica)
    - 3-DES (Clave Simétrica)

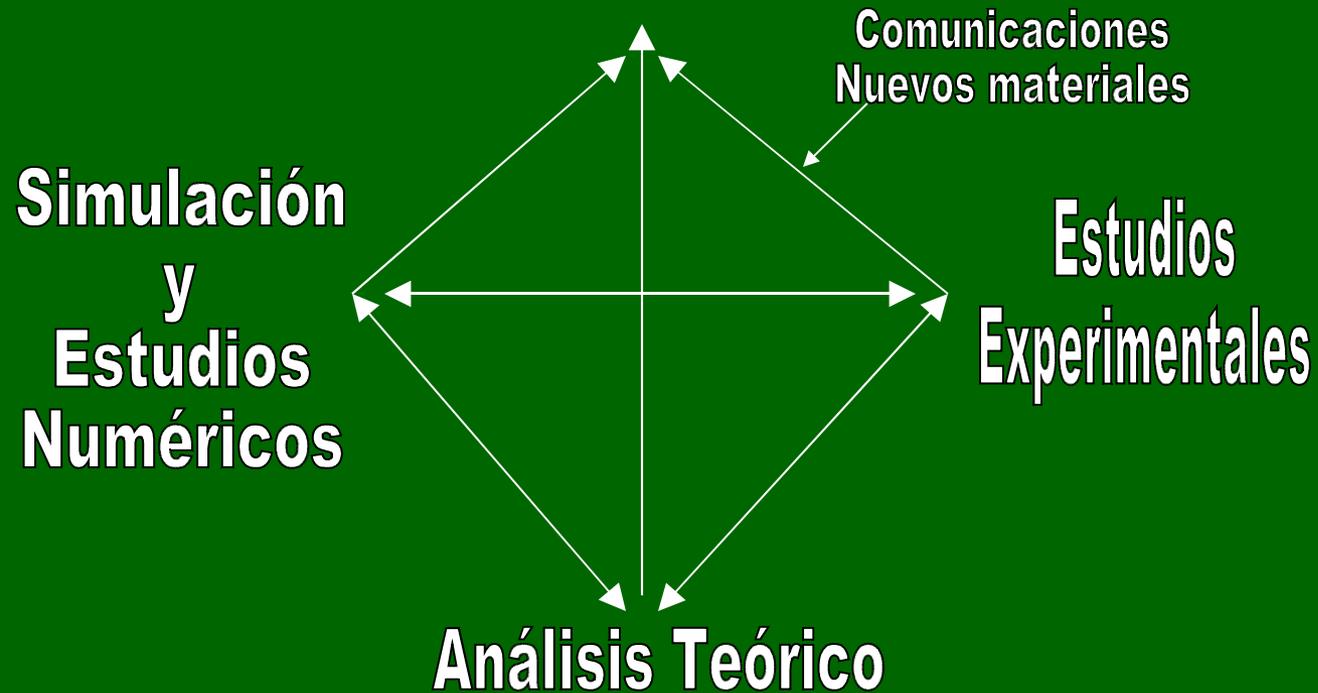
## Nuevas Tecnologías de la Información y la Comunicación

- Transportar ideas, conceptos e información a grandes velocidades
- Silicon Valley (USA)
- Nuevos instrumentos para todos los sectores económicos
- Nuevas posibilidades para la organización económica

## La Revolución Industrial

- Desplazar grandes masas
- Manchester (Inglaterra), Detroit (USA)
- Se generan sectores dominantes de la economía:
  - Ferrocarriles (1870)
  - Compuestos orgánicos (1890)
  - Producción en cadena del automóvil (1920)
  - Televisión (1950)
  - Transporte aéreo (1960)

# Estudio y Solución de Problemas en Tiempo Real



## ALGUNOS ENTORNOS ACTUALES QUE ACTUAN COMO ARRASTRE CIENTIFICO Y TECNOLOGICO

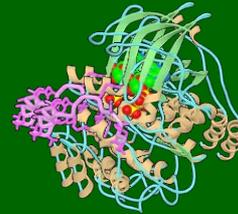
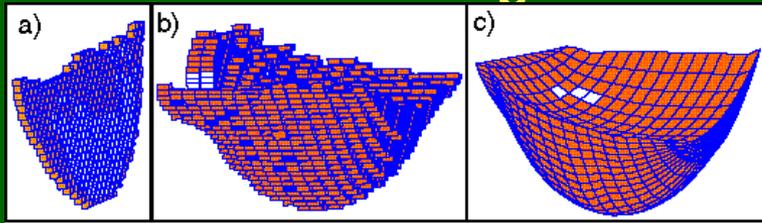
- BIOINFORMÁTICA: GENOMICA Y PROTEOMICA
- TECNOLOGIA GRID
- INVESTIGACIÓN ESPACIAL: EXPLORACIÓN DE MARTE
  - » ANALISIS DE DATOS (IMÁGENES,..)
  - » ESTUDIO DE REDES
  - » LEYES DE POTENCIA: CALCULO FRACCIONARIO
  - » PROPAGACIÓN DE ONDAS

***¡¡ LOS LIMITES EXISTEN EN LA IMAGINACION !!***

# Aplicaciones en Biomedicina y Biotecnología

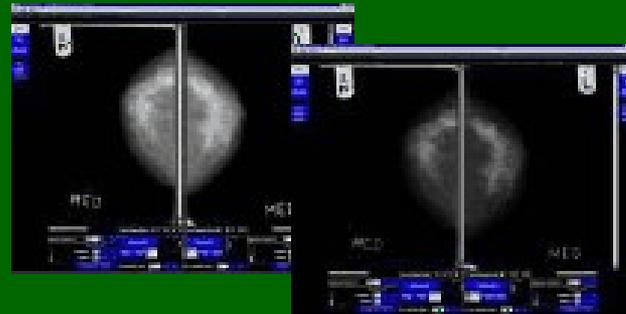
## Simulaciones de fármacos contra el SIDA, Anthrax...

### Tratamiento de imágenes



## Acceso a bases de datos distribuidas para realizar el mejor diagnóstico

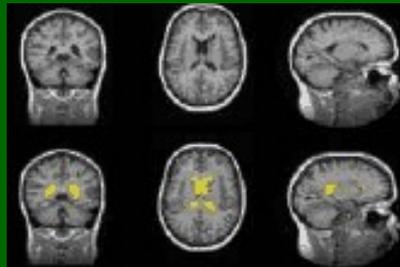
### Comparación de secuencias



### Visualización

### Telemedicina

### Entornos de colaboración



## El Grid como Plataforma Futura

- ⇒ Nueva tecnología cuyo objetivo es la **compartición de recursos en Internet** de forma uniforme, transparente, segura, eficiente y fiable
  
- ⇒ Análoga a las **redes de suministro eléctrico**:
  - Ofrecen un único punto de acceso a un conjunto de recursos distribuidos geográficamente **en diferentes dominios de administración** (supercomputadores, clusters, almacenamiento, fuentes de información, instrumentos, personal, bases de datos...)
  
- ⇒ **La tecnología Grid es complementaria a las anteriores**
  - Permite interconectar recursos en diferentes dominios de administración respetando sus políticas internas de seguridad y su software de gestión de recursos en la Intranet
  - **Acceso a grandes bases de datos distribuidas, recursos de cálculo y visualización**

# ASTROBIOLOGIA

- Se trata de una Ciencia Orientada a la Investigación sobre el Origen, Existencia, Evolución e Influencia de la Vida en el Universo.
- ¿Cómo surgió la Vida sobre la Tierra?
- ¿Existe o Existió Vida en otros lugares del Universo?
- Relación entre el origen de la Vida y la Evolución del Universo.
- “La búsqueda de la Vida en otros Mundos podría ser el nuevo elemento unificador para la Investigación Espacial” (Daniel Goldin, Ex-Director NASA).
- *Revista Española de Física, Vol. 19 nº 2 y 3 (2005). Sección especial dedicada a la Astrobiología.*

# RESULTADOS RECIENTES

- Nuevos Sistema Planetarios.
- Moléculas Complejas en Medios Interestelares: Aminoácidos, Fullerenos,...
- Agua en el Universo
- La Vida en el Extremo: Rio Tinto, Antártida, Desierto de Atacama (Chile), Fondos Oceánicos,...
- Meteoritos: ALH84001