

Motywację do rozpoczęcia niniejszego projektu stanowi chęć poznania początków życia na Ziemi, które są jedną z największych zagadek ludzkości. Rozważania tego zagadnienia mogą doprowadzić do zrozumienia nie tylko sposobu powstania pierwszych organizmów żywych, ale i procesów ewolucji które miały wpływ na kształtowanie się życia na naszej planecie. Badania mogą dostarczyć także wskazówek dotyczących życia we Wszechświecie. Obecnie najbardziej uznaną hipotezą wyjaśniającą to zagadnienie jest hipoteza Świata RNA sięgająca lat 60 XX wieku. Zakłada ona, że to właśnie samoreplikujące się cząsteczki RNA, a nie białka były prekursorem życia na Ziemi. RNA jest niezwykle w swych właściwościach, może zarówno służyć jako bank informacji, analogicznie do cząsteczek DNA, jak i pełnić funkcje enzymatyczne, podobnie do białek. Istnieje wiele dowodów na poparcie hipotezy Świata RNA, wśród nich takie jak odkrycie autokatalitycznych właściwości cząsteczek RNA, nazywanych rybozymami, czy pokazanie że rybosom, kluczowa fabryka budująca białka we wszystkich komórkach organizmów żywych, jest w rzeczywistości rybozymem z rozbudowanym szkieletem białkowym. Pomimo znacznych postępów w dziedzinie nauk eksperymentalnych, wciąż jednak jesteśmy dalecy od znalezienia kompleksowej odpowiedzi na pytanie o początki życia.

W zrozumieniu kluczowych aspektów pierwotnej ewolucji, pomocne może być opracowanie modeli opartych o posiadaną wiedzę dotyczącą tego zagadnienia. Modele takie mają za zadanie w precyzyjny sposób opisywać skomplikowane systemy biologiczne i procesy w nich zachodzące. Umożliwiają też analizę zachowania systemu w zależności od zmian wprowadzanych w modelu lub wartości parametrów. Sam proces modelowania jest jednak skomplikowany, wymaga nie tylko dokładnej wiedzy na temat modelowanego zagadnienia, ale i zastosowania odpowiednich metod modelowania, które pozwolą na właściwe odwzorowanie kluczowych aspektów problemu. Przykładowo popularna metoda modelowania i analizy systemów za pomocą równań różniczkowych niesie ze sobą problem wynikający z ciągłości analizowanych wartości oraz nie bierze pod uwagę struktury przestrzennej populacji. Tymczasem analizowany problem, jak i wiele innych problemów biologicznych, jest z natury swej dyskretny, niedeterministyczny, a struktura przestrzenna oddziałujących cząstek ma znaczący wpływ na zachowanie systemu. Istnieje wiele potencjalnych podejść, które pozwalają na ominięcie tych ograniczeń. Różnią się one szczegółowością potraktowania problemu, od poziomu subatomowego jaki oferują metody dynamiki molekularnej do systemów modelujących reakcje i dyfuzję na wyższych poziomach organizacji, takich jak makrocząsteczki. Poziom szczegółowości wpływa jednak znacząco na wielkość systemu jaka może być w praktyce poddana symulacji, wiąże się bowiem z czasem wykonywania obliczeń. W najbardziej skrajnym przypadku, takim jak potrzeba zamodelowania dużych i skomplikowanych systemów złożonych z kilkuset tysięcy makrocząsteczek, zastosowanie metod o rozdzielczości subatomowej jest w praktyce niemożliwe, ponieważ wymagałoby zasobów obliczeniowych przekraczających te dostępne na całym świecie.

Do modelowania i symulacji systemów replikatorowych będących przedmiotem niniejszego projektu wykorzystane są automaty komórkowe oraz systemy wieloagentowe. Pozwala to na uwzględnienie aspektu przestrzennego modelowanego zagadnienia. Cząsteczki RNA potraktowane są jako jednostki, w przypadku systemów wieloagentowych zwane agentami, o zadanych właściwościach takich jak np. zdolność do powielenia innej cząsteczki. W przypadku automatów komórkowych, tworzona jest siatka, której pola odwzorowują rozmieszczenie poszczególnych cząstek. Siatka pozwala uwzględnić strukturę przestrzenną populacji agentów i w odpowiedni sposób je przemieszczać. Modele wieloagentowe pozbawione są ograniczenia jakie nakłada siatka, przestrzeń w nich jest traktowana w sposób ciągły. Pozwalają dzięki temu na bardziej realistyczne potraktowanie ruchu (ruchy Browna) i interakcji pomiędzy cząsteczkami (kinetyka reakcji). Ponieważ jednak sposób w jaki zaproponowane reguły, czyli model, zostają wcielane w życie ma wpływ na czasochłonność obliczeń, w szczególności w przypadku tak dużych problemów, kluczowa staje się odpowiednia architektura algorytmu zapewniająca jego efektywność. W celu usprawnienia działania algorytmów można zastosować odpowiednie techniki optymalizacji komputerowej, które znacząco skracają czasochłonność oczekiwania na rezultaty.

Projekt ten ma na celu opracowanie bioinformatycznych metod modelowania wczesnych systemów replikatorowych i ich weryfikację poprzez opracowanie konkretnych modeli systemów replikatorowych. Zakłada także implementację modelu replikujących cząsteczek RNA obrazujących początki życia na Ziemi oraz wykonanie symulacji w oparciu o ten model. Symulacje pomogą odpowiedzieć m.in. na pytanie jak cząsteczki RNA o właściwościach replikaz mogły przetrwać w pierwotnym środowisku. Pomimo swej pozornej odległości od biologii zajmującej się tym co żywe, informatyka ma szansę przybliżyć nas o jeden krok do zrozumienia zagadki powstania życia na Ziemi.