

Análise do Circuito de Conversão Digital-Analógico (DAC) implementado em Circuito Molecular de Deslocamento de Cadeias de DNA

Mateus O. Sposo¹, Renan A. Marks¹

¹Faculdade de Computação
Universidade Federal de Mato Grosso do Sul (UFMS) – Campo Grande, MS

{mateus.sposo, renan.marks}@ufms.br

Abstract. *DNA computing is regarded as one of the most promising candidates for the next generation of molecular computers. Molecular circuits can utilize DNA species concentrations as both analog and digital signals. This article analyzes the translation of a 4-bit binary-weighted Digital-to-Analog Converter (DAC) into DNA Strand Displacement (DSD) chemical reaction networks, highlighting the advantages of analog molecular computing.*

Resumo. *A computação em DNA é considerada uma das candidatas mais promissoras para a próxima geração de computadores moleculares. Circuitos moleculares podem utilizar concentrações de espécies de DNA como sinais analógicos e digitais. Este artigo analisa a tradução de um Conversor Digital-Analógico (DAC) de 4 bits com resistores ponderados para redes de reações químicas baseadas em Deslocamento de Fita de DNA (DSD), destacando as vantagens da computação molecular analógica.*

1. Introdução

A união entre a arquitetura eletrônica clássica e a nanocomputação molecular abre portas para o processamento complexo de informações e operações de lógica booleana utilizando moléculas de DNA [Benenson 2012]. Dependendo da arquitetura projetada, a concentração de espécies químicas de DNA em uma solução pode simular um sinal analógico ou digital [Oliveira et al. 2023]. O objetivo deste trabalho é descrever o funcionamento de um Conversor Digital-Analógico (DAC) clássico de resistores ponderados sob a perspectiva das Redes de Reações Químicas (CRNs) e do Deslocamento de Fita de DNA (DSD), utilizando bibliotecas do DNAr [Vieira et al. 2020] na Linguagem R para simular as reações.

2. Trabalhos Relacionados

Conversores digital-analógicos (DAC) traduzem um código binário em uma grandeza física contínua, tipicamente uma tensão elétrica. Entre as arquiteturas clássicas da eletrônica analógica, o DAC de resistores ponderados (*binary-weighted resistor DAC*) destaca-se pela simplicidade conceitual, onde cada bit da palavra de entrada controla uma corrente cujo valor é definido por um resistor específico, e essas correntes são somadas por um amplificador operacional para produzir a tensão de saída.

Nesta adaptação molecular, a lógica por trás dos “pesos” dos resistores e do amplificador somador pode ser traduzida pelo mecanismo de Deslocamento de Fita de DNA

(DSD) [Zhang et al. 2007]. Esse mecanismo se aproveita da interação reversível entre fitas sintéticas de DNA, em que pontes de hidrogênio são ligações químicas fracas a ponto de serem reversíveis, unindo ou liberando fitas com base no pareamento complementar de Watson-Crick. Ferramentas como a biblioteca DNAr-Analog [Oliveira et al. 2023], fornecem módulos de portas analógicas para facilitar a simulação dos circuitos. No caso dos resistores ponderados foram utilizados as portas de Buffer (que atuariam aplicando os pesos aos sinais de entrada) e Adição (que executariam o papel do somador).

3. Metodologia, Simulação e Discussão

Para validar a eficácia dessa arquitetura molecular, simulações computacionais de um DAC de 4 bits foram realizadas utilizando a biblioteca DNAr em ambiente R. O circuito foi construído conectando quatro unidades de buffer (baseadas no modelo de Lakin [Lakin and Stefanovic 2016]) a uma unidade somadora de quatro entradas (modelo de Song [Song et al. 2016]). A rede de reações químicas para o circuito completo é composta de 21 espécies e 12 reações químicas. Cada buffer foi configurado com taxas e pesos exponencialmente escalonados (1×10^{-3} , 2×10^{-3} , 4×10^{-3} , 8×10^{-3}), atuando de forma análoga aos resistores ponderados para traduzir os bits de entrada em concentrações específicas antes da soma. Os resultados obtidos na Tabela 1 demonstram o desempenho e estabilidade do circuito molecular. Ao longo de 16 combinações de teste (representando os valores de 0000 a 1111), a concentração de saída observada (Vout) acompanhou de forma precisa a saída analógica esperada (Vout Esperado). A acurácia do sistema manteve-se excepcionalmente alta, superando 99% na maioria dos casos, com margens de erro tipicamente inferiores a 1% (destacando-se a exatidão de praticamente 100% no acionamento exclusivo do bit mais significativo). Tais dados comprovam que as CRNs projetadas via DSD conseguem realizar conversões digitais-analógicas ponderadas com ótima confiabilidade.

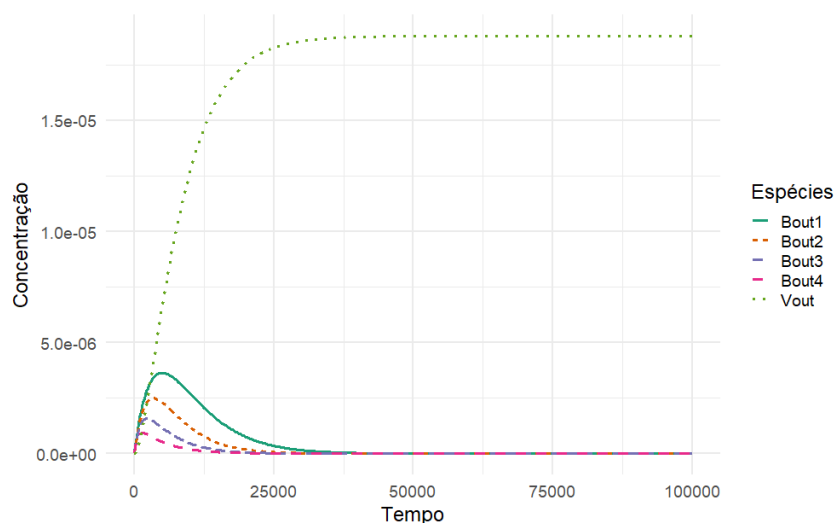


Figura 1. Resultado da simulação de entrada binária 1111 obtendo saída analógica com concentração 1.88×10^{-5} .

Bit	Bout1	Bout2	Bout3	Bout4	Vout Esperado	Vout	Acurácia	Erro
0000	0	0	0	0	0	0	-	-
0001	0	0	0	1,25E-6	1,25E-6	1,26E-6	99,11%	0,89%
0010	0	0	2,5E-6	0	2,5E-6	2,52E-6	99,26%	0,74%
0011	0	0	2,5E-6	1,25E-6	3,75E-6	3,72E-6	99,20%	0,80%
0100	0	5,0E-6	0	0	5,0E-6	5,02E-6	99,50%	0,50%
0101	0	5,0E-6	0	1,25E-6	6,25E-6	6,29E-6	99,42%	0,58%
0110	0	5,0E-6	2,5E-6	0	7,5E-6	7,54E-6	99,42%	0,58%
0111	0	5,0E-6	2,5E-6	1,25E-6	8,75E-6	8,81E-6	99,37%	0,63%
1000	1,0E-5	0	0	0	1,0E-5	1,0E-5	100,00%	-0,00%
1001	1,0E-5	0	0	1,25E-6	1,13E-5	1,13E-5	99,90%	0,10%
1010	1,0E-5	0	2,5E-6	0	1,25E-5	1,25E-5	99,85%	0,15%
1011	1,0E-5	0	2,5E-6	1,25E-6	1,38E-5	1,38E-5	99,78%	0,22%
1100	1,0E-5	5,0E-6	0	0	1,5E-5	1,5E-5	99,83%	0,17%
1101	1,0E-5	5,0E-6	0	1,25E-6	1,63E-5	1,63E-5	99,78%	0,22%
1110	1,0E-5	5,0E-6	2,5E-6	0	1,75E-5	1,75E-5	99,75%	0,25%
1111	1,0E-5	5,0E-6	2,5E-6	1,25E-6	1,88E-5	1,88E-5	99,71%	0,29%

Tabela 1. Resultado de acurácia e erro das simulações com entradas binárias variando de 0000 a 1111.

4. Conclusão

Os resultados da simulação em CRNs atestam que circuitos moleculares analógicos podem alcançar índices de precisão superiores a 99% na conversão de concentrações que codificam sinais digitais para concentrações que codificam valores analógicos. Ao valer-se dessa codificação analógica, otimiza-se as redes de reações químicas ao reduzir drasticamente o número de espécies e reações necessárias em comparação com circuitos moleculares puramente digitais [Oliveira et al. 2020].

Referências

- [Benenson 2012] Benenson, Y. (2012). Biomolecular computing systems: principles, progress and potential. *Nature Reviews Genetics*, 13(7):455–468.
- [Lakin and Stefanovic 2016] Lakin, M. R. and Stefanovic, D. (2016). Supervised Learning in Adaptive DNA Strand Displacement Networks. *ACS Synthetic Biology*, 5(8):885–897.
- [Oliveira et al. 2020] Oliveira, P. A. C., Fonte Boa, M. C. O., Marks, R. A., Guterres, M. V., and Vilela Neto, O. P. (2020). Analysis of single-module and cascade molecular analog circuits for approximate computing based on DNA Strand Displacement. In *2020 33rd Symposium on Integrated Circuits and Systems Design (SBCCI)*, page 1–6. IEEE.
- [Oliveira et al. 2023] Oliveira, P. A. C., Marks, R. A., Teixeira, J. V. C., Guterres, M. V., and Neto, O. P. V. (2023). DNAr-Analog: A Library With a Multiplexer to Easily Design, Program, and Simulate Dsd Analog Circuits. In *2023 IEEE 14th Latin America Symposium on Circuits and Systems (LASCAS)*, page 1–4. IEEE.
- [Song et al. 2016] Song, T., Garg, S., Mokhtar, R., Bui, H., and Reif, J. (2016). Analog Computation by DNA Strand Displacement Circuits. *ACS Synthetic Biology*, 5(8):898–912.
- [Vieira et al. 2020] Vieira, D. K. S., Guterres, M. V., Marks, R. A., Oliveira, P. A. C., Fonte Boa, M. C. O., and Vilela Neto, O. P. (2020). DNAr: An R Package to Simulate and Analyze CRN and DSD Networks. *ACS Synthetic Biology*, 9(12):3416–3421.
- [Zhang et al. 2007] Zhang, D. Y., Turberfield, A. J., Yurke, B., and Winfree, E. (2007). Engineering Entropy-Driven Reactions and Networks Catalyzed by DNA. *Science*, 318(5853):1121–1125.