

### ∡rí tuê Nhân tao trong Sinh Tin học Artificial Intelligence in BioInformatics

GS.TS. Đỗ Phúc Trường Đại học Công nghệ Thông tin, ĐHQG TP.HCM



GS. TS. Đỗ Phúc hiện dạng làm việc tại Trưởng Đại học Công nghệ Thông tin, ĐHQG TP, HCM. Gắc linh vực nghiên cứu sa GS. bao giản snhị thoọc, xử vự nghĩa cứu sa GS. bao giản snhị thoọc, xử vị vận bản, tự tuệ nhàn tạo, học máy, học sáu, xử lý vận bản, tự tuệ nhàn tạo, học máy, học sáu, xử lý vận bản, thiến the xử dùng đần, và xử lý dữ lệu dìn.
Giáo sư đã tham gia nhiều cử án nghiên cứu trong nhiệu linh vực bao giên sinh tho học, xử lý vận bản việ lập lián trên độ thì ti thức, xử lý vận bản và lập lián trên độ thì ti thức, do thiệu, do thị chu quốc tế và trong nước. GS. là tác giá của Sc cuốn sách tham tháo, giểo trình trong linh vực sinh chuến chiến chiến chiến chiến chiến chiến chiến thiệu, do thị trinh chiến chiến chiến chiến chiến thiệu, do thị trinh chiến chiến



GS.TS. Đỗ Phúc, 2024



# Nội dung

- Giới thiệu về Sinh Tin học
  - Sinh Tin học Mục tiêu của ngành Sinh Tin học
  - Thông tin sinh học Cơ sở dữ liệu NCBI, PDB,

  - Phát triển nghiên cứu ngành sinh tin học Các kỹ thuật Tin học trong sinh tin học
- Các chủ đề nghiên cứu của sinh tin học
  Trí Tuệ Nhân Tạo trong Sinh Tin học
- Trí tuê nhân tao
- Các ứng dụng của TTNT (học máy, học sâu) trong sinh tin học
   Các khóa học mới, các bài toán sinh tin học có độ phức tạp tính toár
- Kết luận
- Tài liệu tham khảo

GS.TS. Đỗ Phúc, 2024



# Cơ thể cấu tạo từ các tế bào

- Cợ thể của chúng ta được cấu tạo từ hàng tỳ tế bào, là những đơn vị cơ bàn của sự sống. Tế bào có các chức năng cơ bàn và đóng vai trò quan trong tròng cấu trúc và chức năng của cơ thể. Dưới đãy là một số điểm chính về câu tạo của tế bào:
- \*\*Màng tế bào (Cell Membrane): \*\* Màng tế bào là lớp màng móng bao bọc tế bào và kiểm soát sự chật lượng của các chật đi vào và ra khỏi tế bào. Nô giữ cho môi trường ngôi bộ của tế bào khác biệt sơ với mội trưởng ngoài vỏ của tế bào, chứa DNA (Acid Dewynhouclec) và chí thần là bộ thần quan trong của tế bào, chứa DNA (Acid Dewynhouclec) và có trách mhiệng dầu khiện các hoạt đồng của tế bào, DNA
- chứa thông tin gen di truyen và hương dan san xuat protein can une. Lino sự sung. 3. \*\*Citoplasma (Cytoplasm): \*\* Citoplasma là chất nhậy nằm giữa màng tế bào và hạt nhận, Nô chứa nhiều cấu trúc nhỏ như ribosome (hạt ribonucleic), mitochondria, và các câu trúc khác thực hiện các chức năng cụ thể trong tế bào.
- 4. \*\*Ribosome:\*\* Là các cấu trúc nhỏ không màng, thực hiện quá trình tổng hợp protein từ mã gen được mã hóa trong DNA.



# Cơ thể chúng ta được cấu tạo từ các tế bào

- 1. **Tế bào da:** Đây là loại tế bào chiếm phần lớn trong lớp biểu bì, bảo vệ cơ thể khỏi các tác nhân bên ngoài như vi khuẩn, virus và tia tử ngoại.
- 2. **Tế bào cơ:** Cơ thể chúng ta có nhiều loại tế bào cơ khác nhau, bao gồm tế bào cơ trơn (cơ bắp không ý thức) và tế bào cơ nhịp tim (cơ bắp tim).
- 3. **Tế bào thần kinh:** Bao gồm tế bào thần kinh trung ương (nắm trong não và tủy sống) và tế bào thần kinh ngoại biên (nắm trong dây thần kinh và cảm
- Tế bào máu: Bao gồm tế bào hồng câu (chuyên chở oxy), tế bào bạch câu (phản ứng với vi khuẩn và virus), và tiểu cầu (tham gia vào quá trình đông

GS.TS. Đỗ Phúc, 2024



# Cơ thể chúng ta được cấu tạo từ các tế bào

- 5. **Tế bào gan**: Có vai trò quan trọng trong quá trình chuyển hóa, lọc độc tố và sản xuất các protein cần thiết cho cơ thể.
- 6. **Tế bào tiêu hóa**: Bao gồm tế bào niêm mạc ruột, tạo ra enzym và hấp thụ dưỡng chất từ thức ăn.
- 7. **Tế bào tuyến nội tiết**: Bao gồm tế bào tuyến giáp, tuyến tạo thái dương, tuyến thượng thận, và nhiều tuyến khác, điều chính các quá trình nội tiết trong
- 8. **Tế bào miễn dịch**: Bao gồm tế bào B (tạo ra kháng thể) và tế bào T (phá hủy các tế bào nhiễm virus hoặc vi khuẩn).
- Các loại tế bào này cùng hoạt động cùng nhau để duy trì sự sống và hoạt động



# DNA và Protein là hai đối tượng nghiên cứu chính của ngành Sinh Tin học

- DNA (Axit Deoxyribonucleic) và protein là hai đối tượng nghiên cứu chính trong Computational Biology
- 1. DNA (Axit Deoxyribonucleic)
- Chức năng: DNA chủ yếu chứa thông tin di truyền và làm nhiệm vụ chính trong việc lưu trữ và truyền đạt thông tin di truyền từ một thế hệ sang thế hệ khác.
- 2. Protein
- Chức năng: Protein thực hiện nhiều chức năng quan trọng trong cơ thể như làm nhiệm vụ của enzym, vận chuyển chất, hỗ trợ cấu trúc tế bào, và tham gia vào nhiều quá trình sinh học khác.



James Watson (trái) và Francis Crick (phải) bên cạnh mô hình mà họ đã xây dựng về cấu trúc của DNA, 1953



https://suckhoedoisong.vn/ai-la-nguoi-dau-tien-tim-ra-chuoi-adn-vat-lieu-di-truyen-cua-tat-ca-sinh-the-169221007100600715.htm

GS.TS. Đỗ Phúc, 2024

4

# Giải Nobel Y học vinh danh người tạo ra công nghệ vắc xin COVID-19

TPO - Chú nhân giải Nobel lĩnh vực Y/Sinh học năm nay vừa được công bố, thuộc về hai nhà khoa học Katalin Karikó và Drew Weisaman vì nghiên cứu về công nghệ mRNA, tạo nên công cự quan trọng để hạn chế sự lấy lan của



Prof. Dr. Do Phuc



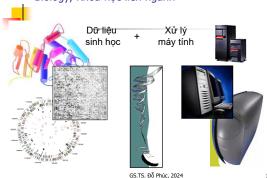
## mRNA: "messenger RNA"

- mRNA là viết tắt của "messenger RNA" trong tiếng Anh, hay "RNA trình bày". Nó là một loại RNA (ribonucleic) đặc biệt trong tế bào, chịu trách nhiệm trình bày thông tin di truyền từ gen đến ribosome để tổ chức việc tổng hợp protein.
- Khi một gen được "đọc" để sản xuất protein, thông tin di truyền trong gen đó được sao chép thành một chuỗi mRNA tượng ứng. Chuỗi mRNA này sau đó di chuyển ra khỏi hạt nhân của tế bào và nhập vào ribosome, nơi mà protein được tổng hợp dựa trên thông tin chứa trong mRNA.
- Điều quan trọng để lưu ý là mRNA chủ yếu chứa thông tin về thứ tự của các nucleotide (A, U, G, C) được xếp theo cặp với thứ tự các nucleotide trong DNA. Điều này đảm bảo rằng protein được sản xuất theo đúng chuỗi amino acid mà gen đã mã hóa.
- mRNA đóng vai trò quan trọng trong quá trình di truyền thông tin gen để tạo ra các sản phẩm protein cần thiết cho sự sống sót và hoạt động của tế bào.

GS.TS. Đỗ Phúc, 2024

10

# Sinh tin học Bioinformatics, Computational Biology, Khoa học liên ngành





# Tin học?

- Xuất phát từ tiếng Pháp *informatique là tin học*
- Định nghĩa:
   Tin học (informatics) khoa học xử lý thông tin
- Liên hệ đến các lĩnh vực khác
  - Y tin hoc (medical informatics)
  - Sinh tin hoc (bio-informatics)

### Sinh tin học xuất phát từ đâu?



Dữ liệu từ đề án bộ gene người đã thúc đẩy phát triển ngành Sinh tin học SSTS, Đỗ Phúc 2024

# Sinh tin học?



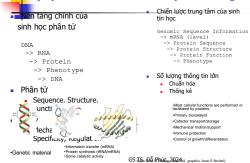
- (Phân tử) **Bio** informatics
- Ý tưởng định nghĩa?
   Sinh tin học hiểu sinh học theo phân tử ( nghĩa hóa lý), dùng các kỹ thuật tin học để hiểu và tổ chức thông tin sinh học trên quy mô lớn
- Khoa học liên ngành với Toán, Tin, Sinh, Hóa, Lý.

GS.TS. Đỗ Phúc, 2024

. . .

### Thông tin?

### Sinh học phân tử như là khoa học về thông tin



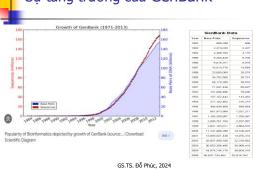
# Sự tăng trưởng của dữ liệu sinh học

- GenBank dã phát triển nhanh chóng trong những năm gần đây với tốc độ tăng gấp đôi khoảng mỗi 18 tháng. Phiên bản 250.0, được công bố vào tháng 6 năm 2022, chứa hơn 17 nghìn tỷ cơ sở nucleotide trong hơn 2,45 tỷ trình tự.
- CSDL PDB (Cơ sở dữ liệu Protein) có 214,111 mục PDB và bao gồm 14,482 cấu trúc protein tính đến năm 2023.
- Mục tiêu chính của Dự án Gen người (HGP), diễn ra từ năm 1990 đến năm 2003, là xác định cả hai chuỗi DNA và "vị trí của khoàng 100,000 gen của con người."
- Nhiều dự án nghiên cứu gen, xác định cấu trúc protein được mã hóa trong bộ gen... đã tạo ran ột lượng lớn thông tin sinh học, và thông tin này ngày càng trở nên đa dạng và phong phú.

GS.TS. Đỗ Phúc, 2024

16

### Thông tin quy mô lớn: Sự tăng trưởng của GenBank



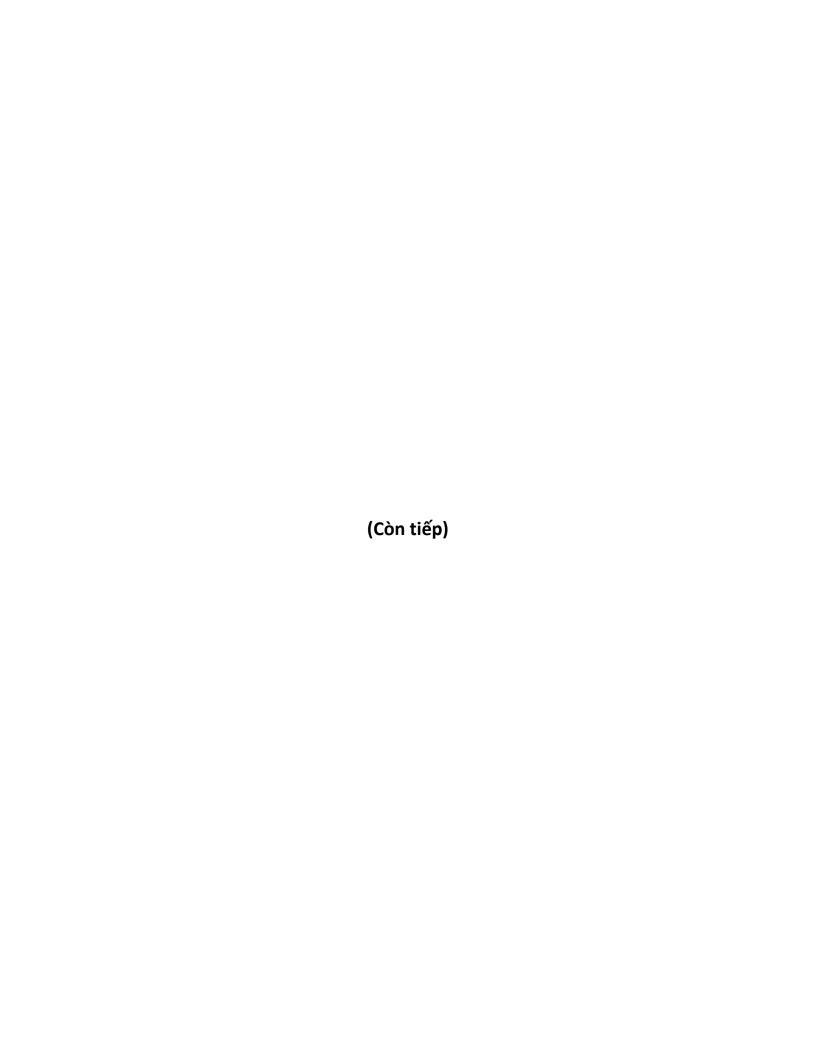
# Bi

# Đinh nghĩa sinh tin học Bioinformatics

- Do dữ liệu sinh học tăng trưởng mạnh mẽ nên công cụ tin học đã trở thành một phương tiện không thể thiếu trong phân tích xử lý dữ liệu sinh học.
- CNTT có thể quản lý nguồn dữ liệu khổng lô, phân tích các dữ liệu đa dạng và luôn biến đổi trong thế giới tự nhiên.
- Ngành Sinh tin học được xem là lĩnh vực nghiên cứu liên ngành nhằm kết hợp các kỹ thuật xử lý, tính toán và tổ chức thông tin bằng thiết bị Tin học tác kỹ thuật, công cụ phổ biến trong ngành sinh học phần tử.
- Sư hợp nhất ngoài mong đợi giữa hai ngành khoa học là CNTT và CHSH đã thúc dấy các nghiên cứu mạnh mẽ về công nghệ Sinh học đặc biệt là các nghiên cứu sinh lý học của một cơ phận ở mức độ gen.

GS.TS. Đỗ Phúc, 2024

18





Đề tài: Xây dựng mô hình và công cụ tin học để xử lý thông tin về gen hỗ trợ nghiên cứu ứng dụng trong CNSH tại Việt Nam. CN GS.TS. Hoàng Kiếm PGS.TS. Nguyễn Văn Uyển. 2001



- Xây dựng Web Site CNSH Xây dực phần mềm xử lý trình tự
- SH GENESYS2000 Thiết kế Plasmid, chuyển nạp Gen vào cây thuốc lá, nâng cao khả năng kháng bện



GS.TS. Đỗ Phúc, 2024



# Bản đồ plasmid vẽ từ phần mềm GENESYS2000





GS.TS. Đỗ Phúc, 2024



### Đề tài: Nghiên cứu ứng dụng Tin Sinh học trong việc thiết kế và phát triển thuốc. CN. PGS TS Bùi Văn Lệ,

- Thiết kế Vaccine và thuốc
- Nghiên cứu các chương trình dự đoán Epitope từ kháng nguyên virus
- Epitope tế bào T là những đoan peptide mạnh thẳng gắn với MHC (Major Histocompatability
- Dùng HMM, ANN, SVM dự báo các peptide gần MHC lớp I



GS.TS. Đỗ Phúc, 2024

124



#### Một ví dụ về việc chữa bệnh bằng liệu pháp gen là việc sử dụng liệu pháp gen để điều trị ung thư.

- Một trong những phương pháp phổ biến là sử dụng vectơ virus để chuyển giao gene vào các tế bào ung thư, giúp chúng tự phá hủy hoặc kích thích hệ miền dịch nhận biết và tấn công tế bào ung thư.
- Ví dụ cụ thể, một liệu pháp gen được sử dụng trong điều trị ung thư là CAR-T cell therapy. Trong liệu pháp này, các tế bào cơ bản của hệ thống miễn dịch dược thư thập từ bệnh nhân, sau đó được "nap" với một gen được thiết kế để nhân điện và tấn công tế bào ung thự. Các tế bào CAR-T được trở lại vào cơ thể bệnh nhân, nơi chúng tiếp tực hoạt động và tấn công tế bào ung thư mà khống gây tấn thương đến các tế bào khé mạnh. Điều này có thể dẫn đến giảm kích thước của khối u hoặc thậm chí là hủy diệt hoàn toàn nó.

GS.TS. Đỗ Phúc, 2024

125



### **Profile HMM**



GS.TS. Đỗ Phúc, 2024



Tính toán phân tán trên Apache Spark có thể được áp dụng cho bài toán Multiple Sequence Alignment (MSA), nhưng có một số thách thức và cân nhắc cần xem xét.

### 1. Phân chia dữ liệu:

- MSA thường đòi hỏi sự tương tác giữa các chuỗi, điều này có thể tạo ra thách thức trong việc phân chia dữ liệu cho các nút tính toán khác nhau. Phân chia không tốt có thể dẫn đến việc mất mát thông tin và làm giảm chất lượng của alignment.
- 2. Giao tiếp giữa các nút:
- Việc thực hiện MSA trên nhiều nút đòi hỏi sự truyền thông tin giữa các nút tính toán. Điều này đôi khi có thể làm tăng độ trễ do chi phí của việc truyền thông và đồng bộ dữ liệu giữa các nút.
- 3.Thách thức về bộ nhớ:
- Bài toán MSA đôi khi đòi hỏi lượng lớn bộ nhớ, đặc biệt là khi đối mặt với số lượng và độ dài lớn của chuỗi. Việc quản lý bộ nhớ trên nhiều nút có thể trở thành một vấn đề, và bạn cần đảm bảo rằng hệ thống của bạn có đủ tài

GS.TS. Đỗ Phúc, 2024

127



Tính toán phân tán trên Apache Spark có thể được áp dụng cho bài toán Multiple Sequence Alignment (MSA), nhưng có một số thách thức và cân nhắc cần xem xét.

#### 4. Hiệu suất:

- Tùy thuộc vào cách bạn phân chia công việc và tận dụng tính toán đa nút của Spark, hiệu suất có thể thay đổi. Cân kiểm soát và tôi ưu hóa phương pháp tính toán để đảm bào hiệu suất tốt nhất.

#### 5. Thư viện và công cụ hỗ trợ:

- Cân xem xét việc sử dụng các thư viện hoặc công cụ hỗ trợ đã được xây dựng trên nền tảng Apache Spark để giảm bớt gánh nặng việc triển khai và quản lý.

#### 6. Các phương pháp tiếp cận:

- Có thể cần thay đổi hoặc tinh chỉnh các phương pháp tiếp cận MSA để phù hợp với môi trường tính toán phân tán.

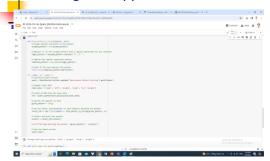
 Mặc dù có những thách thức, nhưng việc sử dụng Apache Spark có thể mang lại lợi ích về khả năng mở rông và tăng cường hiệu suất đối với bài toán MSA, đặc biệt là khi bạn đối mặt với dữ liệu lớn và phức tạp.

GS.TS. Đỗ Phúc, 2024

# PySpark for finding the motiform of DNA squences



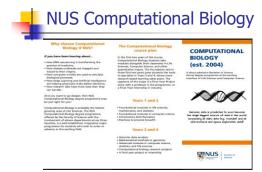
### Finding The approximate motifs

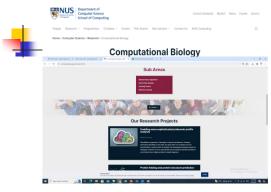


GS.TS. Đỗ Phúc, 2024



WNUS |







Prof. Ian Witton (University of Waikato), Prof. Wong Lim Soon (NUS), Prof. Phuc Do (UIT)



GS.TS. Đỗ Phúc, 2024

# Khóa học mới: AI and **Bioinformatics**



136

GS.TS. Đỗ Phúc, 2024



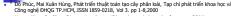
- Với dữ liệu tràn ngập hiện nay, phương pháp tính toán trở nên rất cần thiết đối với nghiên cứu sinh
- Trí tuệ nhân tạo (AI) giúp giải quyết các bài toán khó của sinh học dựa trên nguồn dữ liệu sinh học khổng

GS.TS. Đỗ Phúc, 2024

- Ứng dụng AI trong sinh học như dự đoán cấu trúc bậc 2, Metagenomic Analysis, thiết kế thuốc, ....
- Tính toán hiệu suất cao cho Sinh Tin họ
- Môn học mới: Artificial Intelligence in Bio Informatics:

GS.TS. Đỗ Phúc, 2024 137

# Một số bài báo Sinh Tin Học đã xuất bản



- Dỗ Phúc, Mai Xuấn Hùng, Phát triển thuật toán tạo cây phân loài, Tạp chí phát triển khoa học và Công nghệ ĐHQG TP.HCM, ISSN 1859-0218, Vol 3, ap 1-8,2000 thoang kiem, Do Phúc, Discovering the motif based association rules from set of DNA sequences, canada, pp. 368-390, 2000

  Do Phuc, Hoang kiem, Developing a motif based clustering algorithm for supporting the similarity cure yir a database of DNA sequences, Journal of Science and Technology VNU-HCM, ISSN 1859-0218, Vol 4+5,pp. 83-89, 2001

  Nguyễn Thanh Thuộc, Đỗ Phúc, Pediction of protein secondary structure based in SCOP folds using Hidden MarkowModel (HMM) and decision tree, Journal of BioTecnology Vethamese Academy of Science and Technology, ISSN: 1811-989, Vol 2, Issue 4, pp. 407-414, 2004

  Phúc, Hoàng Kiệm, Using MTREE Structure for similarity search in biological sequence
- 414,2004

  36 Phúc, Nhang Kiểm, Using MTREE structure for similarity search in biological sequence databases, Sinh học, Viện Hàn Lậm Khoa học và Công nghệ Việt Nam, ISSN: 1811-4989, Vol 4, pp 151-158, 2006

  Đỗ Phúc, Nguyễn thị Kim Phung, Using Spectral Vectors and M-Tree for Graph Clustering and Searching in Graph Databases of Protein Structures, International Journal of Computer, Electrical, Automation, Control and Information Engineering ISSN: 2010-3778, Vol 3, no.8, 2008

  Phạm Quốc Đàm, Đỗ Phúc, Lễ Thị Thanh Mại, Dự đoán phân loại của Enzime bằng cách áp dụng kỹ thuật khai thác đữ liệu, Tạp chi Phát triển KHRON ĐHYG TPHCM, ISSN 1859-0218, vol 11, issue 5,pp 247-252,2008



GS.TS. Đỗ Phúc, 2024 GS.TS. Đỗ Phúc, 2024

23





- PatrickNg,dna2vec:Consistentvectorrepresentations of variable-lengthk-mers, arXiv:1701.06279v1 [q-bio.QM] 23 Jan 2017
- Lea Mathias, Deep Learning Approaches in Bioinformatics: Challenges and Opportunities , Department of Computer Science, University of Cambridge, 2020

  Seonwoo Min, Byunghan Lee, and Sungroh Yoon, Deep Learning in Bioinformatics, Interdisciplinary Program in Bioinformatics, Seoul National University, Seoul 151-747, Korea , 2020

- , 2020
  Yu Li et al., Deep learning in bioinformatics: introduction, application, and perspective in big data era, <a href="https://loi.org/10.1101/563601">https://loi.org/10.1101/563601</a> (Broward Keedwell. Ajit Narayana, Intelligent Bio Informatics, the application of Artificial Intelligence to BioInformatics Problems, Wiley, 2005
  Jacques Nicolas, Artificial Intelligence and Bioinformatics, HAL Id: hal-01850570 2020
  Christof Angermueller et al., Deep learning for computational biology, European Molecular Biology Laboratory, European Bioinformatics Institute, Wellcome Trust Genome Campus, Hintoto, Cambridge, UK, 2016.

GS.TS. Đỗ Phúc, 2024 141

# Future of bio informatics powered By AI



GS.TS. Đỗ Phúc, 2024

Q&A

Thank you for your kind attention!