



EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM

INFORMATIKAI KAR

ALGORITMUSOK ÉS ALKALMAZÁSAIK TANSZÉK

Membránrendszerek vizualizációja és szimulálása

Témavezető:

Kolonits Gábor

egyetemi tanársegéd

Szerző:

Buzga Levente

programtervező informatikus BSc

Budapest, 2022

A membránrendszer vagy más néven P-rendszer olyan biológiailag inspirált számítási modell, amely képes a biokémiai folyamatok törvényszerűségeinek modellezésére. A rendszer több belső térből, úgynevezett régióból áll, amelyek hierarchikus membránstruktúrát alkotnak. Ez lehetővé teszi a sejten belüli és a sejtek közötti információáramlás formális modellezését.

Az egyes régiókban különböző nyersanyagok fordulhatnak elő, amelyek egymással reakcióba léphetnek. A reakció következtében ezek a nyersanyagok átalakulhatnak, régiók között átvándorolhatnak, illetve membránok is feloldódhatnak. Ezeket a reakciókat evolúciós szabályoknak hívjuk. A felépítésükből adódóan a membránrendszerek nagy mértékű párhuzamosításra is alkalmasak. A membránrendszer számítása közben kialakuló állapotát egy konfigurációja írja le, amelyet minden membrán esetén objektumokból álló multihalmaz reprezentál.

A számítás eredményét többféleképpen is definiálhatjuk, alapértelmezetten egy kitüntetett membránban a megálláskor jelen lévő objektumok mennyiségét jelenti.

Szakdolgozatom célja egy olyan szoftver elkészítése, amely képes különböző típusú membránrendszerek grafikus megjelenítésére, betöltésére és exportálására, illetve egy megadott szabályrendszer mentén történő számításaik szimulálására. A felhasználónak lehetősége van a membránstruktúra vizuális megkonstruálására, illetve egy megadott formátum segítségével szabályok rögzítésére. A számítás végrehajtásánál támogatott a lépésenkénti futtatás.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	2
1.1. Membránrendszerek	2
1.2. Megvalósítandó feladat	4
2. Felhasználói dokumentáció	5
2.1. Követelmények	5
2.2. Futtatás	5
3. Fejlesztői dokumentáció	6
3.1. Tételtek, definíciók, megjegyzések	6
3.1.1. Egyenletek, matematika	7
3.2. Forráskódok	8
3.2.1. Algoritmusok	8
4. Összegzés	9
A. Szimulációs eredmények	10
Irodalomjegyzék	12
Ábrajegyzék	13
Táblázatjegyzék	14
Algoritmusjegyzék	15
Forráskódjegyzék	16

1. fejezet

Bevezetés

1.1. Membránrendszerek

A 20. század második felében egyre nagyobb figyelmet kaptak az olyan számítások, amely a természetben vagy valamilyen természeti jelenséghez kapcsolódóan mennek végbe. Ezen megfigyelések eredményeképpen számos új módszert és algoritmust köszönhetünk ennek az időszaknak. Ide tartoznak például a genetikai algoritmusok (általánosabban véve az evolúciós algoritmusok), illetve a neurális hálók. Ezen irányvonal kiterjesztésének tekinthető az 21.század legelején kibontakozó területek mint a membránszámítások és a DNS számítások, amelyet a molekuláris biológia alapjaira modelleztek.

A membránszámítások legnagyobb inspirációját a biológiai sejtek jelentik, amelyek az élet legelemibb építőelemei. A sejtek működésében és struktúrájában pedig elengedhetetlenek a membránok, amelyek a sejten belüli rétegződést határozzák meg. Egy sejtet a környezetétől a legkülső membránja (úgynevezett skin) határol el, a rétegződésért pedig a belső membránok felelősek. Egy-egy ilyen membrán pedig egy saját belső teret, ún. régiót határol el. Ezen régiókban pedig kémiai reakciók mehetnek végbe, amely hatására különböző molekulák átvándorolhatnak a membránokon keresztül új régiókba. Ezzel a térbeli struktúráltsággal egészítik ki a membránszámítások a DNS számításokat. Tehát a membránszámítás motivációja, hogy egy olyan modellt tudjunk konstruálni, amely képes a sejtek közötti és sejten belüli molekulák által közvetített információáramlás mechanizmusának leírására, szemléltetésére.

Ezen célkitűzéssel vezette be Gheorge Paun a membránrendszereket 2000-ben. Később az ilyen modelleket P-rendszereknek nevezték el az ő tiszteletére. Ahhoz, hogy a biokémiai folyamatokat modellezni tudja, figyelembe vette ezen folyamatok törvényszerűségeit. Nevezetesen, hogy az ilyen reakciók végbemeneteléhez kellő számban szükség van a reakcióhoz szükséges kezdeti molekulákra és ha ezek rendelkezésre állnak, akkor a reakció biztosan meg is fog történni. Emellett egyszerre több reakció (vagy akár egy reakció többször) is végbemehet, ha van hozzá(juk) elegendő nyersanyag. Speciális esetekben reakció hatására membránok feloldódhatnak, ilyen a benne rejlő molekulák és belső régiók az őt körülvevő régióba kerülnek, illetve az is előfordulhat, hogy a reakciók között valamilyen prioritási sorrend is fennállhat; azaz az egyik reakció nem hajthat végre, amíg egy a másik reakciónak lehetősége van rá. Ezen reakciók úgynevezett evolúciós lépésekbe szerveződnek, amelyek során a régiók molekulái és a membránrendszer struktúrája is átalakul.

A számítás központi szereplői az előbbi tulajdonságokkal rendelkező reakciók, amelyek a membránrendszerekben szabályoknak neveznek, a résztvevő molekulákat pedig objektumoknak. Ezek a szabályok régiókhoz vannak rendelve. A szabályok alkalmazására a maximális párhuzamosság elve érvényes, azaz ha a jelenleg alkalmazott szabályok után még alkalmazható lenne egy újabb vagy egy eddig már alkalmazott szabály, akkor az a szabály végre is lesz hajtva abban evolúciós lépésben. Ennek megfelelően a membránrendszer evolúciós lépések sorozatán megy keresztül, egészen addig, amíg már nincsen egyetlen alkalmazható szabály sem. Ilyenkor a számítás eredményét alapértelmezetten a környezetbe kijutó objektumok számának tekintik, de ez egyes rendszerekben másképpen is megadható (például egy kijelölt kimeneti régió objektumainak számával).

Érdeklődésemet a téma iránt az SAT eldöntési probléma aktív P-rendszerekkel (amelyek típusát a dolgozatban nem részletezem) való lineáris időben történő megoldása keltette fel. Ez elsőre egy hihetetlen eredmény, hiszen ez volt a legelső probléma, amiről bebizonyították, hogy NP-teljes. Az ellentmondást a membránrendszerek masszív párhuzamosítási képességével lehet megmagyarázni, amelynek segítségével a változók és a klókok számának függvényében igaz, hogy lineáris időben megoldható, viszont ezt a membránrendszert szimuláló Turing gép már nem tudna minden bemeneti példányra lineáris időben leállni. Ezután kezdtem el foglalkozni membránrendszerekkel és úgy éreztem, hogy egy szimulációs szoftver hasznosnak bizonyulna

kutatási és oktatási célokra egyaránt.

1.2. Megvalósítandó feladat

A dolgozatom célja egy olyan szoftver elkészítése, amely lehetővé teszi a felhasználó számára különböző felépítésű membránrendszerek megkonstruálását, grafikus módon való megjelenítését, illetve számításainak végrehajtását. A támogatott számítási modellek magukba foglalják a membránrendszerek alapmodelljét (amelyben egyes régiók feloldódhatnak, illetve a szabályok között lehet prioritási sorrend) és a szimport-antiport rendszereket. A membránrendszer létrehozását a felhasználó egy (megfelelő formátumú) karakterlánc megadásával kezdeményezheti, ami egyszerűen és szemléletesen írja le a membránrendszer struktúráját és opcionálisan tartalmazhatja regionra bontva a benne található objektumokat. A megalkotott membránrendszer ilyenkor még nem rendelkezik evolúciós szabályokkal, azokat egy külön menü segítségével tudja beállítani. Ilyenkor a kiválasztott régió objektumai is szerkeszthetők.

A szoftver különösen hasznos tud lenni oktatási célokra, hiszen biztosítja a szabályok elemzésének lehetőségét a lépésenkénti futtatás funkcióval, illetve a teljes szimuláció során megkapott eredmények segítségével tanulmányozható, hogy a létrehozott modell a kívánt nyelvet generálja-e, ezzel segítve a helyes és helytelen működés (nem teljeskörű) kiszűrését. A program biztosít a felhasználó számára egy használati útmutatót, melyben megtalálja a legfontosabb információkat ahhoz, hogy korábbi ismeretek nélkül is képes legyen egy működő membránrendszert megalkotni és számítását szimulálni.

Lehetőség van a membránrendszer aktuális állapotának lementésére, illetve egy korábbi mentés betöltésére. A membránrendszer *JSON* formátumban kerül mentésre, így azt a felhasználónak lehetősége nyílik arra, hogy a fájlban is módosítson, majd a módosított állapotot töltsse be. Ezáltal a szoftver biztosítani tudja azt, hogy egy bonyolult vagy gyakran vizsgált membránrendszert nem kell mindig a kezdetektől megalkotni, elegendő egyszer a kívánt konfigurációját előállítani, majd később betölteni a már elmentett verziót.

A feladatot *Python* programozási nyelven, a *Qt* keretrendszer felhasználásával valósítottam meg.

2. fejezet

Felhasználói dokumentáció

2.1. Követelmények

A szoftver futtatásához Linux környezetre van szükség, amelynek támogatja kell a *.bin* kiterjesztésű fájlok értelmezését. A program teljes funkcionalitásának kihasználásához a felhasználó számítógépének a bemeneti perifériák közül egérrel és billentyűzettel kell rendelkeznie. A szoftver hardverigénye nem igényel részletes specifikációt.

2.2. Futtatás

Mivel a program futtatható állományban kerül a felhasználóhoz, ezért annak elindításához elegendő megnyitnia a fájlt tartalmazó mappát, majd duplán kattintania a fájlhoz tartozó ikonra. Ugyanezt parancssori környezetben is megteheti, ilyenkor a terminálban a megfelelő mappához való elnavigálás után a **./MembraneSimulator.bin** parancs megadásával tudja futtatni a programot.

3. fejezet

Fejlesztői dokumentáció

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Duis nibh leo, dapibus in elementum nec, aliquet id sem. Suspendisse potenti. Nullam sit amet consectetur nibh. Donec scelerisque varius turpis at tincidunt.

3.1. Tételek, definíciók, megjegyzések

1. Definíció. Mauris tristique sollicitudin ultrices. Etiam tristique quam sit amet metus dictum imperdiet. Nunc id lorem sed nisl pulvinar aliquet vitae quis arcu. Morbi iaculis eleifend porttitor.

Maecenas rutrum eros sem, pharetra interdum nulla porttitor sit amet. In vitae viverra ante. Maecenas sit amet placerat orci, sed tincidunt velit. Vivamus mattis, enim vel suscipit elementum, quam odio venenatis elit, et mollis nulla nunc a risus. Praesent purus magna, tristique sed lacus sit amet, convallis malesuada magna. Phasellus faucibus varius purus, nec tristique enim porta vitae.

1. Tétel. *Nulla finibus ante vel arcu tincidunt, ut consectetur ligula finibus. Mauris mollis lectus sed ipsum bibendum, ac ultrices erat dictum. Suspendisse faucibus euismod lacinia. Etiam vel odio ante.*

Bizonyítás. Etiam pulvinar nibh quis massa auctor congue. Pellentesque quis odio vitae sapien molestie vestibulum sit amet et quam. Pellentesque vel dui eget enim hendrerit finibus at sit amet libero. Quisque sollicitudin ultrices enim, nec porta magna imperdiet vitae. Cras condimentum nunc dui. □

Donec dapibus sodales ante, at scelerisque nunc laoreet sit amet. Mauris porttitor tincidunt neque, vel ullamcorper neque pulvinar et. Integer eu lorem euismod, faucibus lectus sed, accumsan felis.

Emlékeztető. Nunc ornare mi at augue vulputate, eu venenatis magna mollis. Nunc sed posuere dui, et varius nulla. Sed mollis nibh augue, eget scelerisque eros ornare nec. Praesent porta, metus eget eleifend consequat, eros ligula eleifend ex, a pellentesque mi est vitae urna. Vivamus turpis nunc, iaculis non leo eget, mattis vulputate tellus.

Fusce in aliquet neque, in pretium sem. Donec tincidunt tellus id lectus pretium fringilla. Nunc faucibus, erat pretium tempus tempor, tortor mi fringilla neque, ac congue ex dui vitae mauris. Donec pretium et quam a cursus.

Megjegyzés. Aliquam vehicula luctus mi a pretium. Nulla quam neque, maximus nec velit in, aliquam mollis tortor. Aliquam erat volutpat. Curabitur vitae laoreet turpis. Integer id diam ligula.

Ut sollicitudin tempus urna et mollis. Aliquam et aliquam turpis, sed fermentum mauris. Nulla eget ex diam. Donec eget tellus pharetra, semper neque eget, rutrum diam.

3.1.1. Egyenletek, matematika

Duis suscipit ipsum nec urna blandit, $2 + 2 = 4$ pellentesque vehicula quam fringilla. Vivamus euismod, lectus sit amet euismod viverra, dolor metus consequat sapien, ut hendrerit nisl nulla id nisi. Nam in leo eu quam sollicitudin semper a quis velit.

$$a^2 + b^2 = c^2$$

Phasellus mollis, elit sed convallis feugiat, dolor quam dapibus nibh, suscipit consectetur lacus risus quis sem. Vivamus scelerisque porta odio, vitae euismod dolor accumsan ut.

In mathematica, identitatem Euleri (equation est scriptor vti etiam notum) sit aequalitatem 3.1. egyenlet:

$$e^{i \times \pi} + 1 = 0 \tag{3.1}$$

3.2. Forráskódok

Nulla sodales purus id mi consequat, eu venenatis odio pharetra. Cras a arcu quam. Suspendisse augue risus, pulvinar a turpis et, commodo aliquet turpis. Nulla aliquam scelerisque mi eget pharetra. Mauris sed posuere elit, ac lobortis metus. Proin lacinia sit amet diam sed auctor. Nam viverra orci id sapien sollicitudin, a aliquam lacus suscipit. Quisque ac tincidunt leo 3.1. és 3.2. forráskód:

```
1 #include <stdio>
2
3 int main()
4 {
5     int c;
6     std::cout << "Hello World!" << std::endl;
7
8     std::cout << "Press any key to exit." << std::endl;
9     std::cin >> c;
10
11     return 0;
12 }
```

3.1. forráskód. Hello World in C++

```
1 using System;
2 namespace HelloWorld
3 {
4     class Hello
5     {
6         static void Main()
7         {
8             Console.WriteLine("Hello World!");
9
10            Console.WriteLine("Press any key to exit.");
11            Console.ReadKey();
12        }
13    }
14 }
```

3.2. forráskód. Hello World in C#

3.2.1. Algoritmusok

Az 1. algoritmus egy általános elágazás és korlátozás algoritmust (*Branch and Bound algorithm*) mutat be. A 3. lépésben egy megfelelő kiválasztási szabályt kell alkalmazni. Példa forrása: Acta Cybernetica (ez egy hiperlink).

1. algoritmus A general interval B&B algorithm

Funct IBB(S, f)

```

1: Set the working list  $\mathcal{L}_W := \{S\}$  and the final list  $\mathcal{L}_Q := \{\}$ 
2: while (  $\mathcal{L}_W \neq \emptyset$  ) do
3:   Select an interval  $X$  from  $\mathcal{L}_W$                                 ▷ Selection rule
4:   Compute  $lb f(X)$                                               ▷ Bounding rule
5:   if  $X$  cannot be eliminated then                                ▷ Elimination rule
6:     Divide  $X$  into  $X^j$ ,  $j = 1, \dots, p$ , subintervals          ▷ Division rule
7:     for  $j = 1, \dots, p$  do
8:       if  $X^j$  satisfies the termination criterion then          ▷ Termination rule
9:         Store  $X^j$  in  $\mathcal{L}_W$ 
10:      else
11:        Store  $X^j$  in  $\mathcal{L}_W$ 
12:      end if
13:    end for
14:  end if
15: end while
16: return  $\mathcal{L}_Q$ 

```

4. fejezet

Összegzés

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. In eu egestas mauris. Quisque nisl elit, varius in erat eu, dictum commodo lorem. Sed commodo libero et sem laoreet consectetur. Fusce ligula arcu, vestibulum et sodales vel, venenatis at velit. Aliquam erat volutpat. Proin condimentum accumsan velit id hendrerit. Cras egestas arcu quis felis placerat, ut sodales velit malesuada. Maecenas et turpis eu turpis placerat euismod. Maecenas a urna viverra, scelerisque nibh ut, malesuada ex.

Aliquam suscipit dignissim tempor. Praesent tortor libero, feugiat et tellus portitor, malesuada eleifend felis. Orci varius natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus. Nullam eleifend imperdiet lorem, sit amet imperdiet metus pellentesque vitae. Donec nec ligula urna. Aliquam bibendum tempor diam, sed lacinia eros dapibus id. Donec sed vehicula turpis. Aliquam hendrerit sed nulla vitae convallis. Etiam libero quam, pharetra ac est nec, sodales placerat augue. Praesent eu consequat purus.

A. függelék

Szimulációs eredmények

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Pellentesque facilisis in nibh auctor molestie. Donec porta tortor mauris. Cras in lacus in purus ultricies blandit. Proin dolor erat, pulvinar posuere orci ac, eleifend ultrices libero. Donec elementum et elit a ullamcorper. Nunc tincidunt, lorem et consectetur tincidunt, ante sapien scelerisque neque, eu bibendum felis augue non est. Maecenas nibh arcu, ultrices et libero id, egestas tempus mauris. Etiam iaculis dui nec augue venenatis, fermentum posuere justo congue. Nullam sit amet porttitor sem, at porttitor augue. Proin bibendum justo at ornare efficitur. Donec tempor turpis ligula, vitae viverra felis finibus eu. Curabitur sed libero ac urna condimentum gravida. Donec tincidunt neque sit amet neque luctus auctor vel eget tortor. Integer dignissim, urna ut lobortis volutpat, justo nunc convallis diam, sit amet vulputate erat eros eu velit. Mauris porttitor dictum ante, commodo facilisis ex suscipit sed.

Sed egestas dapibus nisl, vitae fringilla justo. Donec eget condimentum lectus, molestie mattis nunc. Nulla ac faucibus dui. Nullam a congue erat. Ut accumsan sed sapien quis porttitor. Ut pellentesque, est ac posuere pulvinar, tortor mauris fermentum nulla, sit amet fringilla sapien sapien quis velit. Integer accumsan placerat lorem, eu aliquam urna consectetur eget. In ligula orci, dignissim sed consequat ac, porta at metus. Phasellus ipsum tellus, molestie ut lacus tempus, rutrum convallis elit. Suspendisse arcu orci, luctus vitae ultricies quis, bibendum sed elit. Vivamus at sem maximus leo placerat gravida semper vel mi. Etiam hendrerit sed massa ut lacinia. Morbi varius libero odio, sit amet auctor nunc interdum sit amet.

Aenean non mauris accumsan, rutrum nisi non, porttitor enim. Maecenas vel

tortor ex. Proin vulputate tellus luctus egestas fermentum. In nec lobortis risus, sit amet tincidunt purus. Nam id turpis venenatis, vehicula nisl sed, ultricies nibh. Suspendisse in libero nec nisi tempor vestibulum. Integer eu dui congue enim venenatis lobortis. Donec sed elementum nunc. Nulla facilisi. Maecenas cursus id lorem et finibus. Sed fermentum molestie erat, nec tempor lorem facilisis cursus. In vel nulla id orci fringilla facilisis. Cras non bibendum odio, ac vestibulum ex. Donec turpis urna, tincidunt ut mi eu, finibus facilisis lorem. Praesent posuere nisl nec dui accumsan, sed interdum odio malesuada.

Irodalomjegyzék

- [1] O. J. Dahl, E. W. Dijkstra és C. A. R. Hoare, szerk. *Structured Programming*. London, UK, UK: Academic Press Ltd., 1972. ISBN: 0-12-200550-3.
- [2] Thomas H. Cormen és tsai. *Introduction to Algorithms, Third Edition*. 3rd. The MIT Press, 2009. ISBN: 0262033844, 9780262033848.
- [3] Glenn E. Krasner és Stephen T. Pope. „A Cookbook for Using the Model-View-Controller User Interface Paradigm in Smalltalk-80”. *J. Object Oriented Program.* 1.3 (1988. aug.), 26–49. old. ISSN: 0896-8438. URL: <http://dl.acm.org/citation.cfm?id=50757.50759>.
- [4] E. Dijkstra. „Classics in Software Engineering”. Szerk. Edward Nash Yourdon. Upper Saddle River, NJ, USA: Yourdon Press, 1979. Go to Statement Considered Harmful fejez., 27–33. old. ISBN: 0-917072-14-6. URL: <http://dl.acm.org/citation.cfm?id=1241515.1241518>.

Ábrák jegyzéke

Táblázatok jegyzéke

Algoritmusjegyzék

1.	A general interval B&B algorithm	8
----	--	---

Forráskódjegyzék

3.1. Hello World in C++	8
3.2. Hello World in C#	8