

Jak Symulować Życie – Motywacja i Zestawienie Kluczowych Pojęć

Marcin Kuropatwiński

1 Wstęp

Technologie informacyjne przenikają do wszystkich dziedzin ludzkiej działalności i stanowią już niezbywalny element naszej kultury. Zrewolucjonizowały one sposób w jaki ludzie komunikują się na co dzień, wytwarzają dobra i, co może najważniejsze, rozszerzają granice poznania.

Z nimi też wiąże się nadzieję na zapanowanie nad biologią i tym samym nadanie nowej jakości naszemu życiu. Ray Kurzweil, głosiciel teorii o wykładniczym postępie dziedzin nauki posługujących się technologiami informacyjnymi, twierdzi, że moment kiedy będziemy w stanie wyleczyć każdą chorobę i przedłużyć życie w nieskończoność jest bliski (nadał on temu przełomowemu momentowi nazwę Singularity/Osobliwość). Można takiemu pogładowi zarzucić zbyt daleko idący optymizm, jednak, niezaprzeczalnie, co potwierdza codzienna praktyka, wspomniane technologie informacyjne, obejmujące techniki obliczeniowe, wydają się być niezwykle pomocne podczas modelowania, przewidywania i kontrolowania zjawisk naturalnych na coraz szerszą skalę. Można też z całą pewnością stwierdzić, że jeżeli Osobliwość w rozumieniu Ray Kurzweil’a ma się ziścić to stanie się to poprzez postęp związany z rosnącą mocą obliczeniową komputerów jak też, nie należy o tym zapomnieć, postęp w formułowaniu algorytmów.

2 Motywacja

Ten artykuł ma przedstawić jak autor wyobraża sobie utworzenie spójnego, kompleksowego modelu organizmu, takiego modelu, który pozwoli na głębsze, wspomagane komputerowo, wniknięcie we wszystkie mechanizmy leżące u podstaw zdrowia, dobrostanu czy choroby, przetestowanie z pewnym wynikiem każdej terapii czy dobranej terapii ściśle zindywidualizowanej. Umożliwi on także odczytanie wszelkich parametrów, w tym wnioskowanie do jakich doznań czy wręcz uczuć prowadzi działanie lecznicze.

Wydaje się, że wysiłki idące w kierunku utworzenia takiego modelu, ze wszystkimi tego pożądanymi konsekwencjami, są uzasadnione, choćby dlatego, że w krajach rozwiniętych poziom zadłużenia publicznego związanego z opieką medyczną sięga bilionów USD (19 bilionów w Stanach Zjednoczonych) i ciągle rośnie. Ponadto gros tych wydatków jest związany z opieką nad ludźmi, którzy najprawdopodobniej umrą w przeciągu kilku miesięcy¹. Bezradność wobec tego rodzącego smutek stanu rzeczy dokumentuje choćby fakt wprowadzenia eutanazji dla dzieci w Belgii.

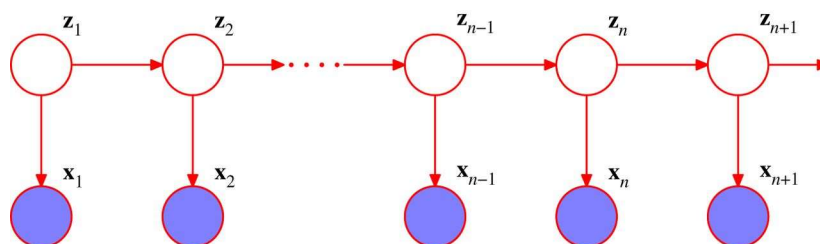
W dalszej części, unikając formalizmu matematycznego, autor spróbuje przedstawić elementy takiego modelu. Prezentacja będzie polegała na zestawieniu pojęć obecnych w teorii obliczeń i systemów dynamicznych, matematyce, w tym statystyce i teorii informacji, chemii i fizyce kwantowej oraz

¹ Scitovsky, A. A. (2005). "The High Cost of Dying": What Do the Data Show? *The Milbank Quarterly*, 83(4), 825–841. <http://doi.org/10.1111/j.1468-0009.2005.00402.x>

biologii. Pojęcia te zostaną uszeregowane tak by dać wyobrażenie o całokształcie proponowanego modelu.

3 Od obserwacji do modelu w skali atomowej

Obserwacje, czy pomiary, to w statystyce zmienne dostępne jawnie, które są oznaczone na Rysunek 1 jako x_n . Kontrastują one ze zmiennymi, bądź stanami ukrytymi, oznaczonymi na tymże rysunku jako z_n . Dla potrzeb tego opisu, by zobrazować pojęcie obserwacji, przyjmujemy, że obserwacje to to, co można zaobserwować przy pomocy naszych zmysłów, kamer CCD, mikroskopów świetlnych bądź elektronowych, tomografów czy mikromacierzy DNA. Oczywiście te wyliczenie nie obejmuje wszystkich metod eksperymentalnych dostępnych biologii, metod, które generują pomiary w postaci cyfrowej.



Rysunek 1 Czasowo uporządkowane stany ukryte i obserwacje

Obserwacje takie mogą być postrzegane jako emisje ukrytego modelu stanowego. Czyli stan A wytwarza obserwację B, przy czym może być to zależność stochastyczna, czyli stan A o prawdopodobieństwie P1 wytwarza obserwację B z prawdopodobieństwem P2.

Pożądany model to model przestrzenny w skali atomowej taki który obejmuje położenia jąder atomowych i możliwość ewolucji w czasie tych położzeń. Jak wiadomo, odczytanie struktury elektronowej nie stanowi problemu gdy położenia jąder są znane. Wydaje się także uzasadnione użycie atomów jako jednostek modelu gdyż jądra są na tyle masywne, że efekty falowo-kwantowe mogą być w ich przypadku pominięte, a model przestrzenny (np. model białek) pozwala na wyciągnięcie ważnych wniosków. Nie można tu nie wspomnieć tego jakim przełomem było określenie atomowej struktury przestrzennej DNA. Wydaje się, że nadszedł czas by podjąć próbę określenia takiej struktury en masse: dla tkanek, organów i organizmu.

Naczelne pryncypium jest następujące. Model ma być uzyskany przez zmienianie, wariowanie, optymalizowanie stanu początkowego tak długo aż, także uczona, optymalizowana, trenowana, ewolucja (odpowiednik operatora ewolucji w mechanice kwantowej) doprowadzi do symulowanych obserwacji (in silico) zgodnych z obserwacjami pobranymi z eksperymentów mokrych (in vivo). Warto tu nadmienić, że bardzo duża ilość danych eksperymentalnych znajduje się w literaturze i bazach danych, np. bazach protein. Dane te mogą być użyte w pracach nad modelem atomowym.

4 Zestawienie pojęć

4.1 Niejawne łańcuchy Markowa

Stochastyczny system dynamiczny może być modelowany przy pomocy Niejawnych łańcuchów Markowa (NLM). Na NLM składają się następujące elementy:

- Miara prawdopodobieństwa nad zbiorem możliwych stanów początkowych,

- Stochastyczna macierz, (zazwyczaj rzadka - stochastyczna czyli zawierająca prawdopodobieństwa) prawdopodobieństw przejść między stanami,
- Miara prawdopodobieństwa nad przestrzenią obserwacji przy zadanym stanie, bądź koszt związany z danym stanem.

Należy nadmienić, że deterministyczny system dynamiczny odpowiada macierzy przejść między stanami, w której entropia każdego jej wiersza jest zerowa, czyli każdy wiersz zawiera jeden wpis równy jedności.

W proponowanej metodzie, stan konstelacji atomów² ma być złożony i składać się z położenia jąder atomów (bądź jonu atomu, bądź wolnego elektronu) i kodu stanu kwantowego. Stan przestrzenny-położeń będzie elementem przestrzeni metrycznej zaś stan kwantowy będzie elementem dyskretnej przestrzeni topologicznej. Stany kwantowe będą rozszerzone o stany odpowiadające doznaniom, które w oczywisty sposób są elementami dyskretnej przestrzeni topologicznej (możemy rozróżnić pomiędzy bólem a rozkoszą jednak próba określenia miary odległości pomiędzy tymi doznaniem wydaje się być bezzasadna). Stany te będą więc określone liczbami naturalnymi, czyli, w terminologii teorii informacji, będą słowami bitowymi.

Zgodnie z postulatami mechaniki kwantowej transformacja stanu opisanego przez funkcję falową jest bijekcją, czyli odwzorowaniem wzajemnie jednoznacznym. Położenie atomu, czy znajomość całej konstelacji, nie wystarcza jednak do jednoznacznego wnioskowania o konstelacji chwilę później, dopiero uwzględnienie zarówno położenia jak i stanu kwantowego na takie wnioskowanie pozwala.

Bijekcja operatora ewolucji odpowiada deterministycznemu systemowi dynamicznemu. Wydaje się jednak, że pożądane jest rozpatrywanie w każdym momencie symulacji całej wiązki stanów, wraz z kosztem związanym z każdym elementem wiązki. Można to zilustrować w ten sposób: wystrzelony pojedynczy pocisk może chybić, jeżeli jednak wystrzelimy wiązkę pocisków to szansa na to, że choć jeden a nich trafi jest większa. Koszt byłby kosztem złożonym; ze składnikiem związanym z tym jak dana konstelacja zgodna jest z obserwacjami i składnikiem związanym z tym, na ile konstelacja i jej czasowa ewolucja spełnia równanie Schroedingera.

Z programowaniem dynamicznym, czyli zasobnikiem algorytmów związanych z użyciem NLM, łączy się pojęcie obcinania, czy szerokości wiązki. Bez tej operacji NLM prowadzą do niewielomianowej złożoności. Obcinanie odbywałoby się przy zastosowaniu hierarchii modeli kwantowych, począwszy od mało złożonych obliczeniowo modeli elektronowych funkcji wodorowych i energii Hartree-Focka do optymalizacji uwzględniających korelacje międzyelektronowe.

4.2 Równanie Schroedingera

Równanie Schroedingera występuje w postaci stacjonarnej, niezależnej od czasu i w postaci zmiennej czasowo. Jego rozwiązywanie stanowi trudny problem, którym zajmuje się chemia kwantowa. Redukcjonizm to postawa poznawcza, która uznaje, że wszystkie procesy chemiczne mogą być sprowadzone do rozwiązywania tego równania.

Innowacja proponowana w tym artykule, mająca na celu usprawnienie rozwiązywania tego równania, polega na wykorzystaniu, na sposób dotychczas niepraktykowany, lokalności oddziaływań. Czyli każde ciało (jądro atomu, czy też elektron/fermion) oddziałuje z innymi ciałami tylko wtedy gdy są one blisko siebie. Ponieważ, zgodnie z postulatami mechaniki kwantowej, nie jest znane położenie a jedynie jego prawdopodobieństwo, to można powiedzieć, że z danym prawdopodobieństwem w danym miejscu i

² Konstelacja atomów to atom centralny wraz z pewną liczbą atomów sąsiadujących

chwili czasu ciało oddziałuje z niewielką liczbą blisko położonych ciał. Sprowadza to się do zastosowania reguły łańcuchowej i warunkowej niezależności rozkładów prawdopodobieństwa. Efekt tej operacji jest taki, że złożoność rosnąca wykładniczo rośnie już tylko liniowo wraz z liczbą symulowanych ciał.

4.3 Złożoność Kołmogorowa

Pojęciem dobrze opisującym złożoność jest złożoność Kołmogorowa. Pokróćce, jej definicja jest następująca: złożoność ciągu bitów jest równa najkrótszemu programowi komputerowemu, który może ten ciąg bitów wygenerować. Wadą takiej definicji jest to, że obliczanie tak zdefiniowanej złożoności jest niemożliwe. Bardziej odpowiednie jest więc stosowanie jako miary złożoności entropii. Entropia ciągu symboli jest dolnym, osiągalnym ograniczeniem na liczbę bitów potrzebnych do zakodowania tego ciągu symboli. Największą z możliwych entropię mają ciągi, w których każdy symbol występuje jednakowo często (na przykład ciąg orła i reszki w serii rzutów doskonałą monetą). Ważnym osiągnięciem teorii informacji było sformułowanie stochastycznych zależności między entropią i złożonością Kołmogorowa. Tymi zależnościami są:

- oczekiwana wartość złożoności Kołmogorowa jest równa entropii,
- Prawdopodobieństwo, że istnieje program o długości K bitów generujący ciąg bitów o entropii M , przy czym $K < M$, jest równe $2^{(K-M)}$.

Zależności te mają ważną implikację praktyczną. Otóż, szukanie algorytmu „wyjaśniającego” ciąg bitów w sposób „lepszy”, w sensie jego złożoności Kołmogorowa, niż kodowanie entropii, gdy prawdopodobieństwo istnienia takiego algorytmu jest tak mało prawdopodobne, jest nieekonomiczne. Stosowanie tablicy przyporządkowań jest z przeogromnym prawdopodobieństwem najoszczędniejszym i najwydajniejszym pamięciowo rozwiązaniem.

Dalej, entropia może być postrzegana jako miara niepewności co do stanu systemu (konstelacji). Ogólną zasadą modelowania matematycznego, która jest stosowana z powodzeniem, jest użycie hierarchii modeli o malejącej entropii. Wiąże się to z regułą, że modele o dużej entropii pozwalają na znalezienie aproksymacji, która dalej pozwala na zastosowanie lepszych, dokładniejszych modeli korzystając z dobrodziejstwa zredukowanej złożoności obliczeniowej.

4.4 Redukcja złożoności poprzez wykorzystanie punktowości oddziaływań

Jak wspomniano stan konstelacji atomów składałby się z położenia jąder i stanu kwantowego będącego elementem dyskretnej przestrzeni topologicznej.

Każdy atom rozpatrywany byłby w danej chwili w kontekście niewielkiej liczby atomów sąsiadujących, przy czym liczba atomów sąsiadujących byłaby nazwana szerokością kontekstu. Górne ograniczenie na wielkość macierzy przejścia stanów jest równe mocy zbioru będącego iloczynem Kartezjańskim wszystkich (złożonych) stanów atomowych. Jest to oczywiście nieakceptowalne. Redukcja złożoności wiąże się z klasami równoważności ze względu na rotacje konstelacji atomów względem położenia atomu środkowego. Dalej, znacząca większość konstelacji jest niefizyczna, czyli da się wyeliminować na gruncie równania Schrodingera.

4.5 Wymiar

Wymiar jest pojęciem o wielu definicjach, przy czym najogólniejsza jest topologiczna definicja wymiaru, której formalizm jest jednak mało intuicyjny - wiąże się on z pojęciem pokrycia. Na potrzeby proponowanego projektu wymiar będzie tożsamy z:

- Liczbą punktów reprezentujących nieliniową podprzestrzeń z transparentną, przeźroczystą dokładnością,

- Objętością $N < K$, N wymiarowej podprzestrzeni zanurzonej w przestrzeni K wymiarowej,
- Gdy jest zdefiniowana miara prawdopodobieństwa nad podprzestrzenią to wymiar jest zdefiniowany entropią, która redukuje się do logarytmu objętości podprzestrzeni gdy rozkład prawdopodobieństwa jest równomierny.

4.6 Automatyzacja odkrywania

Odkrycie będzie zdefiniowane poprzez powtarzalność. Konstelacja stanowi więc odkrycie tylko jeżeli pojawia się ona wielokrotnie na osi czasu. Efemerydy, czyli konstelacje przejściowe, nie stanowią odkrycia, dlatego właśnie, że nie są powtarzalne. Jest to ogólna zasada przyświecająca nauce, której jednym z zadań jest szukanie kompleksów zależności pozwalających na predykcję, która jest możliwa tylko dla systemów rekurencyjnych, powtarzalnych. Stąd można się pokusić na następującą definicję odkrycia:

Odkryciem jest nazwane powtórzenie w czasie wystąpienia konstelacji o dużej entropii, przy czym entropią konstelacji będzie nazwana najmniejsza liczba bitów potrzebna by opisać przejście od stanu maksymalnie nieuporządkowanego do uporządkowanego.

Wbudowanie w algorytm symulacji mechanizmu detekcji odkryć miałyby zaletę automatyzacji szukania konstelacji, substancji ważnych z naukowego punktu widzenia.

5 Ujęcie matematyczne

W tym rozdziale przedstawiona zostanie wstępna analiza matematyczna proponowanego modelu, oparta o pojęcia mechaniki kwantowej i dwa najczęściej stosowane przybliżenia:

- przybliżenie Borna-Oppenheimera (Piela 2013),
- przybliżenie adiabatyczne (Kato 1950).

We wstępnej analizie nie zostaną uwzględnione hipotetyczne stany odpowiadających doznaniom. Celem tej analizy jest wprowadzenie pewnych definicji oraz oszacowanie wielkości macierzy przejść stanów oraz górnych ograniczeń na liczbę stanów początkowych.

5.1 Położenia atomów

Proponowana symulacja ma obejmować czasową ewolucję położenia atomów (jąder atomowych). Położenia te będziemy oznaczać R_j - są to położenia klasyczne (wektor trzech koordynat przestrzennych), które umożliwiają generowanie większości symulowanych obserwacji makro, patrz na przykład metody generowania symulowanych obserwacji mikroskopu elektronowego (Rullgård, Öfverstedt et al. 2011).

By uwzględnić istnienie efektów związanych z falową naturą jąder, które w pewnych przypadkach nie są pomijalne, przyjmiemy dalej bardziej ogólną definicję położenia atomu.

Załóżmy, że mamy daną funkcję falową nad przestrzenią położenia wszystkich cząstek biorących udział w symulacji:

$$\psi = \psi(R_0, \dots, R_\bullet, r_0, \dots, r_\bullet), \quad (1)$$

gdzie kulki oznaczają nieznane liczby naturalne zaś r_j to położenia elektronów. Uogólnione definicja położenia atomu jest następująca:

$$\langle R_j \rangle = \int_{\Omega_V} \psi^* R_j \psi dV = \langle \psi | R_j | \psi \rangle, \quad (2)$$

gdzie V to zbiór wszystkich koordynat cząstek zaś ostatnia zależność to zastosowanie notacji bra-ket znanej z mechaniki kwantowej. Przyjmiemy dalej, dla uproszczenia notacji:

$$R_j = \langle R_j \rangle. \quad (3)$$

Należy zauważyć, iż można wprowadzić zależność od czasu, zarówno funkcji falowej jak i położeń atomów.

5.2 Norma funkcyjna

Norma funkcyjna będzie zdefiniowana następująco:

$$\|\psi\|_2^2 = \int |\psi|^2 dV = \langle \psi | \psi \rangle, \quad (4)$$

gdzie V to zbiór wszystkich współrzędnych od których zależy ψ .

5.3 Warunkowa funkcja falowa

By umożliwić dalsze rozważania wprowadzimy pojęcie *warunkowej funkcji falowej* (WFF). Definicja WFF jest następująca:

$$\psi(D_j | D_{j+1}, \dots, D_\bullet) = \frac{\psi(D_j, D_{j+1}, \dots, D_\bullet)}{\psi(D_{j+1}, \dots, D_\bullet)}, \quad (5)$$

gdzie D_j to zbiorcze położenie jądra i elektronów przynależących do danego atomu.

Następnie sprawdzimy czy przyjęta definicja WFF jest w zgodzie z *warunkiem normalizacyjnym funkcji falowej*:

$$\int |\psi(D_j | D_{j+1}, \dots, D_\bullet)|^2 dD_j = 1 \text{ dla } \forall D_{j+1}, \dots, D_\bullet, \quad (6)$$

zauważmy że:

$$|\psi(D_j | D_{j+1}, \dots, D_\bullet)|^2 = \frac{|\psi(D_j, D_{j+1}, \dots, D_\bullet)|^2}{|\psi(D_{j+1}, \dots, D_\bullet)|^2}, \quad (7)$$

dalej:

$$\int |\psi(D_j, D_{j+1}, \dots, D_\bullet)|^2 dD_j = |\psi(D_{j+1}, \dots, D_\bullet)|^2, \quad (8)$$

z czego wynika, że warunek (6) jest spełniony.

Następnie zdefiniujemy operację *marginalizacji*, która będzie polegała na wyciąkowaniu współrzędnych i renormalizacji.

Marginalizacja ze względu na D_j zdefiniowana jest następująco:

$$\psi(D_{j+1}, \dots, D_{\bullet}) = \frac{\int \psi(D_j, D_{j+1}, \dots, D_{\bullet}) dD_j}{\left\| \int \psi(D_j, D_{j+1}, \dots, D_{\bullet}) dD_j \right\|_2^2}, \quad (9)$$

łatwo sprawdzić, że tak uzyskana *marginalna funkcja falowa* spełnia warunek normalizacyjny.

5.4 Kwantyzacja funkcji falowej

Funkcja falowa czy WFF jest reprezentowana jest poprzez *parametry wariacyjne* (rzeczywiste współczynniki bazy względem której dokonujemy rozkładu funkcji) te zaś, jako wektor liczb rzeczywistych mogą być poddane kwantyzacji wektorowej (Gray 1984). W dalszej części artykułu poprzez kwantyzację funkcji falowej będziemy rozumieć kwantyzację jej parametrów wariacyjnych. Niech E^3 będzie koderem, który przypisuje liczbę naturalną pewnej WFF:

$$E : \psi(D_j \mid D_{j+1}, \dots, D_{\bullet}) \rightarrow v_j \in \mathbb{N} \quad (10)$$

Liczby v_j będą nazywane *kodami kwantowymi*.

5.5 Kontekst i kontekst rozszerzony

Kontekstem nazwany będzie atom centralny wraz z pewną liczbą (zwaną szerokością kontekstu) atomów położonych najbliżej atomu centralnego.

Atom to dwójka zawierająca informację jaki to atom oraz jego położenie:

$$A_j = (\text{id}_j, R_j). \quad (11)$$

Kontekst zaś to trójka zawierająca numer atomu centralnego, zbiór indeksów atomów sąsiadujących i kod kwantowy:

$$K_j = (j, S_j, v_j), \quad (12)$$

$$S_j = (i_1^{(j)}, \dots, i_{S_K}^{(j)}). \quad (13)$$

gdzie S_K to szerokość kontekstu. Przez $V_j = \{j\} \cup S_j$ będziemy oznaczać sumę atomu centralnego i atomów należących do kontekstu.

Kod kwantowy to wynik kwantyzacji funkcji falowej, formalnie:

$$v_j = E \left(\psi(D_j \mid D_{i_1^{(j)}}, \dots, D_{i_{S_K}^{(j)}}) \right) \quad (14)$$

Przyjmujemy dalej, że mówimy iż kontekst j należy do kontekstu m jeżeli $j \in S_m$ i notujemy:

³ E pochodzi od angielskiego encoder

$$K_j \in K_m \text{ jeżeli } j \in S_m, \quad (15)$$

będąc wyposażonymi w powyższą notację możemy zdefiniować kontekst rozszerzony F_j :

$$F_j = \{K_j\} \cup \{K_i : K_i \in K_j\}. \quad (16)$$

5.6 Ewolucja czasowa

Na początek przypomnimy równanie Schroedingera w postaci zależnej od czasu (w jednostkach atomowych (Piela 2013)):

$$i \frac{\partial \psi(V, t)}{\partial t} = H \psi(V, t), \quad (17)$$

gdzie V to zbiorcze koordynaty wszystkich cząstek biorących udział w symulacji zaś H to Hamiltonian (np. Hamiltonian molekularny (Piela 2013)).

Pokażemy jak można obliczyć funkcję falową w chwili $t + \Delta t$ znając jej postać w chwili t . Najpierw zapiszmy równanie Schroedingera w postaci dyskretnej:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} i \frac{\psi(V, t + \Delta t) - \psi(V, t)}{\Delta t} = H \psi(V, t), \quad (18)$$

wówczas poszukiwana funkcja falowa może być wyznaczona w procesie optymalizacji:

$$\hat{\psi}(V, t + \Delta t) = \arg \min_{\psi(V, t + \Delta t)} \|i\psi(V, t + \Delta t) - i\psi(V, t) - H\psi(V, t)\Delta t\|_2^2, \quad (19)$$

gdzie Δt jest bardzo małe, rzędu nano, pico sekund. Dalej, dla uproszczenia notacji czas będzie czasem dyskretnym z okresem próbkowania $\Delta t = 1$.

Mając na uwadze powyższe definiujemy operator ewolucji czasowej jako:

$$U(t, t + 1) : \psi(V, t) \rightarrow \psi(V, t + 1). \quad (20)$$

Wprowadzimy WFF kontekstu:

$$\psi_K^{(j)} = \psi \left(D_j \mid D_{i_1^{(j)}}, \dots, D_{i_{S_K}^{(j)}} \right) \quad (21)$$

i następnie definicję WFF rozszerzonego kontekstu:

$$\psi_S^{(j)} = \prod_{k \in \{j\} \cup \{S_j\}} \psi_K^{(k)}. \quad (22)$$

Operator ewolucji działa na WFF rozszerzonego kontekstu w chwili t i zwraca WFF rozszerzonego kontekstu w chwili $t+1$:

$$\psi_S^{(j)}(t + 1) = U \psi_S^{(j)}(t). \quad (23)$$

Następnie, wprowadzimy zredukowany operator ewolucji w czasie T , który działa na WFF rozszerzonego kontekstu w chwili t i zwraca funkcję kontekstu w chwili $t+1$:

$$\psi_K^{(j)}(t+1) = T \psi_S^{(j)}(t). \quad (24)$$

Ponieważ funkcjom falowym można przypisać kody kwantowe to operator ewolucji może działać na kontekst rozszerzony i zwracać kontekst:

$$K_j(t+1) = T F_j(t). \quad (25)$$

Ostatnia definicja tego podrozdziału to definicja *atomów podlegających wymianie*:

$$W_j(t+1) = Z_j(t+1) \setminus Z_j(t), \quad (26)$$

przy czym $Z_j = \bigcup_{\{i: K_i \in F_j\}} V_i$ jest zbiorem wszystkich atomów przynależących do rozszerzonego kontekstu.

5.7 Określanie struktury wiązań chemicznych

By w trakcie symulacji móc określić strukturę wiązań chemicznych oprzemy się na WFF. Założmy iż chcemy stwierdzić czy atomy i i j są związane. Przyjmijmy funkcje falowe i ich faktoryzację na WFF:

$$\psi_{ZW}(D_i, D_j, D_k) = \psi(D_i | D_j, D_k) \psi(D_j | D_k) \psi(D_k), \quad (27)$$

$$\psi_{BW}(D_i, D_j, D_k) = \psi(D_i | D_k) \psi(D_j | D_k) \psi(D_k). \quad (28)$$

Jeżeli energia, zdefiniowana jako:

$$E[\psi] = \langle \psi | H | \psi \rangle, \quad (29)$$

gdzie H to Hamiltonian, funkcji falowej $E[\psi_{ZW}]$ jest mniejsza od $E[\psi_{BW}]$ wówczas atomy i i j są połączone wiązaniem chemicznym o energii równej różnicy $E[\psi_{BW}] - E[\psi_{ZW}]$.

5.8 Szacunki co do rozmiaru tablicy przejść między stanami kwantowymi

W tym podrozdziale spróbujemy oszacować rozmiar tablicy przejść stanów kwantowych. Zaczniemy od przywołania faktu, że organizmy żywe, w tym rośliny, składają się z pewnej niewielkiej ilości pierwiastków. Dla przykładu w Tabeli 1 wyliczone są siedem podstawowych pierwiastków, z których zbudowane są organizmy żywe wraz procentem ich występowania w 'standardowym' organizmie człowieka i ich promieniami van der Walsa (ang. *atomic radii*) (Haynes 2014).

Tabela 1 Podstawowe dane co do składu organizmów żywych i właściwości atomów

Atom	procent [%]	promień van der Walsa [Å]
Tlen	61	1,52
Węgiel	23	1,70
Wodór	10	1,10
Azot	2,6	1,55
Wapń	1,4	2,31
Fosfor	1,1	1,80
Siarka	0,2	1,80

W świetle przyjętych założeń rozszerzone konteksty pozostają w stanach będących stanami własnymi Hamiltonianu określonego przez ich atomy składowe. Stąd płynie wniosek, że liczba tych stanów równa się K (K - szerokości rozszerzonego kontekstu, przyjmujemy że jest ona równa 30) elementowych kombinacji z powtórzeniami z siedmiu elementów (liczba dominujących pierwiastków):

$$\binom{30 + 7 - 1}{30} = 1947792. \quad (30)$$

Jest to szacunkowa liczba wierszy macierzy przejść między stanami. Liczba kolumn zaś zależy od górnego ograniczenia na liczbę atomów podlegających wymianie w każdym kroku czasu. Ponieważ zakładamy wolnozmienną procesy to na potrzeby wstępnych szacunków przyjmujemy że liczba ta jest równa pięć, stąd liczba kolumn macierzy przejścia stanów jest równa:

$$\binom{5 + 7 - 1}{5} = 462. \quad (31)$$

Liczba bitów potrzebna na zapamiętanie takiej tablicy, przy założeniu systemu deterministycznego (każdy wiersz zawiera jeden wpis równy jedności) jest równa:

$$1947792 \cdot \log_2(462) = 17241365 \text{ bitów}. \quad (32)$$

5.9 Szacunki co do liczby możliwych stanów początkowych

Liczba ta determinuje trudność problemu optymalizacyjnego mającego na celu określenie stanu początkowego i tablicy przejść między stanami. Zgodnie z Tabelą 1 średnia objętość zajmowana przez atom jest równa:

$$1.571 \times 10^{-36} \text{ m}^3. \quad (33)$$

Przyjmując, że przykładowe nasiono rośliny ma średnicę $10 \mu\text{m}$ to jego objętość jest równa:

$$4.1888 \times 10^{-15} \text{ m}^3, \quad (34)$$

a maksymalna liczba bitów potrzebna by zakodować wszystkie możliwe konfiguracje atomów i jednocześnie całkowita niepewność co do stanu systemu:

$$7.485 \times 10^{21} \text{ bitów}, \quad (35)$$

widać, że ta niepewność (entropia) jest znacznie większa od tej przypisanej do tablicy przejść między stanami.

5.10 Całkowita entropia obserwacji

Szacując, że obraz byłby pozyskiwany z ośmiu kamer CCD o rozdzielczości 4000×3000 pikseli z kolorem 24 bitowym i 120 klatek na sekundę na przestrzeni roku to ilość informacji o wzroście rośliny pozyskana z tych kamer byłaby równa:

$$8 \times 120 \times 3600 \times 24 \times 365 \times 4000 \times 3000 \times 24 = 8.71907328 \times 10^{18} \text{ bitów}, \quad (36)$$

jest to około stukrotnie mniej niż całkowita niepewność co do stanu systemu – jednak są to wielkości porównywalne. Można też oczekiwać, że analiza danych co do budowy nasienia przyniesie na tyle dużo okazji do wprowadzania uproszczeń, że niepewność będzie mogła być drastycznie zredukowana.

6 Podsumowanie

W artykule podjęta została próba wyjaśnienia elementów proponowanej symulacji mającej na celu zrozumienie życia poprzez utworzenie wyczerpującego, przestrzennego modelu atomowego o dotychczas nie osiągniętej precyzji, szczegółowości i zdolności predykcyjnej⁴ - ze wszystkimi tego pożądanymi konsekwencjami. Przedstawiona została też wstępna analiza matematyczna proponowanego modelu.

7 Bibliografia

Gray, R. (1984). "Vector quantization." IEEE ASSP Magazine **1**(2): 4-29.

Haynes, W. M. (2014). CRC handbook of chemistry and physics, CRC press.

Kato, T. (1950). "On the Adiabatic Theorem of Quantum Mechanics." Journal of the Physical Society of Japan **5**(6): 435-439.

Piela, L. (2013). Ideas of quantum chemistry, Elsevier.

Rullgård, H., et al. (2011). "Simulation of transmission electron microscope images of biological specimens." Journal of microscopy **243**(3): 234-256.

⁴ Predykcja umożliwia kontrolę