

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

Biologicky motivované výpočtové modely

Mgr. Michal Kováč

Univerzita Pavla Dobšinského, Praha

17.1.2018

Vážení přítomní, volám sa Michal Kováč a chcel by som vám prezentovať výsledky mojej dizertačnej práce s názvom Biologicky motivované výpočtové modely.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

V úvode prezentácie vám predstavím rôzne výpočtové modely motivované biológiou. Najviac sme sa venovali P systémom, preto budem pokračovať formálnou definíciou a prehľadom rôznych variantov P systémov.

V druhej časti predstavím 4 témy nášho výskumu, z čoho 3 články boli publikované. V našej práci sme skúmali viaceré varianty P systémov a to konkrétne Sekvenčné P systémy s inhibítormi, Sekvenčné P systémy s aktívnymi membránami, Sekvenčné P systémy s množinami namiesto multimnožín, z čoho všetky spomenuté témy boli publikované. Dalším variantom P systémov, ktorým sme sa zaoberali bola Detekcia prázdnoty membrán.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

Prehľad problematiky

Prehľad modelov

Biologicky motivované výpočtové modely

Biologicky motivované výpočtové modely majú dvojaké uplatnenie. Jednak v rámci biológie môžu slúžiť ako reálne modely správania sa živých systémov, na ktorých môžeme robiť rôzne virtuálne biologické experimenty, prípadne verifikovať správnosť nášho chápania ich biologickej činnosti.

Na druhej strane môžu slúžiť ako modely na popis aj iných ako biologických systémov, čo otvára rad teoretických informatických otázok, napr. výpočtová sila alebo analýza behaviorálnych vlastností.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

Prehľad problematiky

Prehľad modelov

Biologicky motivované výpočtové modely

Dlho skúmané modely ako neurónové siete, celulórne automaty, evolučné algoritmy, L systémy, či swarm intelligence, si už našli svoje uplatnenie v praxi, kým membránové systémy sú ešte len v začiatkoch svojho vývoja.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

Prehľad problematiky

P systémy

Membránová štruktúra

Membránové systémy sú inšpirované bunkami. Základom je preto membránová štruktúra, ktorá pozostáva z regiónov, ktoré sú oddelené membránami. Tvorí to hierarchickú štruktúru, ktorá sa dá zobraziť aj ako strom.

NEXT SLIDE

Obsahom regionov je multimnožina objektov, ktoré v realite predstavujú napr. molekuly, vírusy, enzýmy alebo proteíny.

NEXT SLIDE

Objekty medzi sebou môžu interagovať. Táto interakcia je definovaná prepisovacími pravidlami.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

Prehľad problematiky

P systémy

Prepisovacie pravidlá

Prepisovacie pravidlá majú ľavú a pravú stranu. Na ľavej strane sú reaktanty, čo je multimnožina objektov.

NEXT SLIDE

Na pravej strane sú produkty, čo je multimnožina objektov, pričom pre každý objekt sa definuje, či ostáva v aktuálnom regióne, alebo ide cez membránu do vonkajšieho regionu alebo cez membránu s daný označením do vnútorného regionu.

Delta je špeciálny symbol, ktorý nepatrí abecede, ktorý keď je prítomný, tak po aplikovaní pravidla sa rozpustí membrána, v ktorej sa pravidlo aplikovalo a obsah membrány sa vyleje von.

Pravidlo je aplikovateľné v danom regióne, ak sú reaktanty obsiahnuté v multimnožine objektov, ktorá sa aktuálne nachádza v danom regióne.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

Prehľad problematiky

P systémy

Varianty pravidiel

Literatúra spomína rôzne spôsoby definovania prepisovacieho pravidla. Pôvodná definícia, ktorú uvádza Paun, používa kooperatívne pravidlá v znení, ako som uviedol. Takto definované P systémy sú Turingovsky úplné.

NEXT SLIDE

Nekooperatívne pravidlá neumožňujú interakciu medzi objektami, takže na ľavej strane je vždy iba jeden objekt. Takto definované P systémy sú ekvivalentné Parikhovmu zobrazeniu bezkontextových jazykov.

NEXT SLIDE

Pravidlá s inhibítormi umožňujú špecifikovať množinu objektov, inhibítorov, z ktorých ak aspoň jeden je prítomný v regióne, tak dané pravidlo sa nemôže uplatniť. Takto definované P systémy sú ekvivalentné Parikhovmu zobrazeniu triedy jazykov ETOL.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

Prehľad problematiky

P systémy

Varianty pravidiel

Katalytické pravidlá umožňujú objektom interagovať iba s objektom z množiny katalyzátorov. Dva katalyzátory stačia na Turingovskú úplnosť. Výpočtovú silu P systémov s jedným katalyzátorom nevieme zaradiť, je to otvorený problém. Ak ale umožníme pravidlá s inhibítormi, dosiahneme Turingovskú úplnosť.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

- Skúmané varianty P systémov
- Sekvenčné P systémy s aktívnymi membránami
- Problém zastavenia

Problém zastavenia

- Problém zastavenia je definovaný pre deterministické modely
- Zodpovednosť: Existencia (ne)končného výpočtu

Problém zastavenia je definovaný iba pre deterministické modely.

NEXT SLIDE

Kedže pre netedermistické modely môže výpočet zastaviť aj nezastaviť, má zmysel pýtať sa dve rôzne otázky: či existuje konečný výpočet a či existuje nekonečný výpočet.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

- Skúmané varianty P systémov
- Sekvenčné P systémy s aktívnymi membránami
- Aktívny P systém

Aktívny P systém

- Membránna konfigurácia (T, i, c) , kde
 - T je stromová štruktúra
 - $i \in V(T) = \{1, \dots, n\}$
 - $c \in V(T) = \{1, \dots, m\}$
- Modely P systému je $(E, C_0, R_0, R_1, \dots, R_n)$, kde
 - E je abeceda
 - C_0 je počiatočná membránna konfigurácia
 - R_i je množina pravidiel

Aktívny P systém je $m+2$ tica, kde Σ je abeceda, C_0 je počiatočná membránová konfigurácia a R_i je množina pravidiel asociovaná s označením membrány i . Okrem pôvodne definovaných typov pravidiel máme aj pravidlo na vytvorenie membrány s daným označením a daným obsahom.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

- Skúmané varianty P systémov
- Sekvenčné P systémy s aktívnymi membránami
- Existencia nekonečného výpočtu

Existencia nekonečného výpočtu

- Pracovateľnosť problému
- Existencia na počítaní membrány
- Graf dosiahnuteľnosti

Skúmali sme aj opačný problém - existenciu nekonečného výpočtu. Podarilo sa nám dokázať opačný výsledok - je to rozhodnuteľný problém.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

- Skúmané varianty P systémov
- Sekvenčné P systémy s aktívnymi membránami
- Existencia nekonečného výpočtu

Existencia nekonečného výpočtu

- Existencia nepostupnosti
 - $C_1 \leq C_2$ a $C_2 \leq C_1$
 - $C_1 \leq C_2$ a $C_2 \leq C_1$ implikuje $C_1 = C_2$ (ale nie vždy)
- Existencia nekonečného výpočtu
 - $C_1 \leq C_2$ a $C_2 \leq C_1$ implikuje $C_1 = C_2$ (ale nie vždy)

Vo všeobecnosti potrebujeme ale rozšíriť definíciu čiastočného usporiadania konfigurácií.

NEXT SLIDE

Majme konfigurácie C_1 a C_2 .

NEXT SLIDE

C_1 je menšia ako C_2 (C_2 pokrýva C_1), ak existuje izomorfizmus f , ktorý pre každú membránu:

NEXT SLIDE

zachováva označenia $I_1(d) = I_2(f(d))$

NEXT SLIDE

a zachováva obsah: $c_1(d) \subseteq c_2(f(d))$

NEXT SLIDE

Táto definícia nám umožňuje tvrdiť, že ak C_2 pokrýva C_1 , potom každé pravidlo aplikovateľné v C_1 je aplikovateľné v C_2 .

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

- Skúmané varianty P systémov
- Sekvenčné P systémy s aktívnymi membránami
- Aktívny P systém

Aktívny P systém

- Membránna konfigurácia (T, i, c) , kde
 - T je stromová štruktúra
 - $i \in V(T) = \{1, \dots, n\}$
 - $c \in V(T) = \{1, \dots, m\}$
- Modely P systému je $(E, C_0, R_0, R_1, \dots, R_n)$, kde
 - E je abeceda
 - C_0 je počiatočná membránna konfigurácia
 - R_i je množina pravidiel

Aby sa pri dôkazoch lepšie manipulovalo s konfiguráciou, upravili sme definíciu aktívneho P systému, kde sme izolovali pojem membránová konfigurácia.

Je to trojica (T, I, c) , kde T je stromová štruktúra

NEXT SLIDE

I je označenie membrán - zobrazenie vrcholov na čísla

NEXT SLIDE

c je zobrazenie vrcholov stromu T na multimnožinu symbolov, čo predstavuje obsah membrány.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

- Skúmané varianty P systémov
- Sekvenčné P systémy s aktívnymi membránami
- Existencia konečného výpočtu

Existencia konečného výpočtu

- Pracovateľnosť problému
- Existencia na počítaní membrány
- Graf dosiahnuteľnosti

Podarilo sa nám dokázať, že existencia konečného výpočtu pre sekvenčné P systémy s aktívnymi membránami je nerozhodnuteľný problém.

NEXT SLIDE

Dôkaz je pomocou redukcie. Ibarra v článku uvádza simuláciu, vďaka ktorej môžeme tvrdiť, že ak by sme vedeli rozhodovať existenciu konečného výpočtu pre sekvenčné P systémy s aktívnymi membránami, potom by sme vedeli rozhodovať existenciu konečného výpočtu pre registrové stroje, čo je už známy nerozhodnuteľný problém.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

- Skúmané varianty P systémov
- Sekvenčné P systémy s aktívnymi membránami
- Existencia nekonečného výpočtu

Existencia nekonečného výpočtu

- Pracovateľnosť problému
- Existencia na počítaní membrány
- Graf dosiahnuteľnosti

Dôkaz uvádzame iba pre obmedzenie na počet membrán, ktoré sa nachádzajú v ľubovoľnej konfigurácii. Veríme, že to platí aj bez tohto obmedzenia, rozšíriť dôkaz sa ale napriek snahe nepodarilo.

Obmedzenie na počet membrán vynútiť upravenou definíciou, pravidlo na vytvorenie membrány je aplikovateľné, iba ak je počet membrán v konfigurácii menší ako stanovený limit. Aj keď toto obmedzenie nie je veľmi realistické z biologického hľadiska, výsledok je zaujímavý, lebo sekvenčné P systémy s aktívnymi membránami sú Turingovsky úplné aj s týmto obmedzením - pri simulácii registrového stroja sa v každej konfigurácii nachádzajú najviac tri membrány.

Dôkaz využíva graf dosiahnuteľnosti. V prípade jednej membrány konfigurácia obsahuje iba multimnožinu objektov, preto sa dá použiť štandardná konštrukcia grafu dosiahnuteľnosti pre Petriho siete.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

- Skúmané varianty P systémov
- Sekvenčné P systémy s aktívnymi membránami
- Existencia nekonečného výpočtu

Existencia nekonečného výpočtu

- Existencia nepostupnosti
 - $C_1 \leq C_2$ a $C_2 \leq C_1$
 - $C_1 \leq C_2$ a $C_2 \leq C_1$ implikuje $C_1 = C_2$ (ale nie vždy)
- Existencia nekonečného výpočtu
 - $C_1 \leq C_2$ a $C_2 \leq C_1$ implikuje $C_1 = C_2$ (ale nie vždy)

Na tomto mieste by som chcel spomenúť Dicksonovu lemu. Tá tvrdí, že pre každú nekonečnú postupnosť n -tíc nad $\mathbb{N} \setminus \{a_i\}_{i=0}^{\infty}$ existujú $i < j$: $a_i \leq a_j$.

NEXT SLIDE

Dokážeme nasledovné tvrdenie: Pre každú nekonečnú postupnosť konfigurácií existuje C_1, C_2 : $C_1 \rightarrow^* C_2$ a $C_1 \leq C_2$.

NEXT SLIDE

Definujeme kodovanie konfigurácií do n -tíc s vlastnosťou, že ak $enc(C_1) \leq enc(C_2)$, potom $C_1 \leq C_2$. Vďaka tomuto kodovaniu a pomocou Dicksonovej lemy dokážeme aj pôvodnú vetu, že pre každú nekonečnú postupnosť konfigurácií existuje C_1, C_2 :

$C_1 \rightarrow^* C_2$ a $C_1 \leq C_2$.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

Skúmané varianty P systémov

Sekvenčné P systémy s aktívnymi membránami

Algoritmus rozhodujúci existenciu nekonečného výpočtu

Algoritmus, ktorý rozhoduje existenciu nekonečného výpočtu je teda nasledovný:

Traverzuj graf dosiahnuteľnosti.

Ak sa dosiahne konfigurácia C_2 , taká, že na ceste z počiatočnej konfigurácie existuje C_1 taká, že C_2 pokrýva C_1 , tak nekonečný výpočet existuje. Ak traverzovanie skončilo, tak nekonečný výpočet neexistuje.

Dokazali sme, že existencia nekonečného výpočtu sa pri sekvenčných P systémov s aktívnymi membránami s obmedzením na počet membrán dá rozhodovať. Výskum môže pokračovať úpravou dôkazu, kde sa odstráni toto obmedzenie.

Algoritmus rozhodujúci existenciu nekonečného výpočtu

- Traversa graf dosiahnuteľnosti
- Dosiahnuteľ konfigurácia C_1 taká, že na ceste z počiatočnej konfigurácie existuje $C_1 \leq C_2 \Rightarrow YES$
- Ak traverzovanie skončilo $\Rightarrow NO$

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

Skúmané varianty P systémov

Sekvenčné P systémy s množinami namiesto multimnožín

Nevýhody používania multimnožín

K tomuto rozhodnutiu nás viedli dve otázky.

Nakofko realistické je reprezentovať presný počet objektov?

Niekedy nás zaujíma iba výskyt, napríklad či sa v membráne nachádza vírus, alebo nie.

NEXT SLIDE

Ak uvažujeme multimnožiny, máme problém explozie stavového priestoru, ktorý sa potom neprakticky analyzuje. V prípade množín je stavový priestor menší, čo umožňuje jednoduchšiu analýzu.

Nevýhody používania multimnožín

- Skutočnosť je reprezentovať presný počet objektov
- Nepraktická analýza kvôli veľkosti stavového priestoru

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

Skúmané varianty P systémov

Sekvenčné P systémy s množinami namiesto multimnožín

P systémy s množinami objektov

Kleijn a Koutny v roku 2011 skúmali rôzne mody výpočtu pre P systémy pracujúce s množinami a sekvenčný bol tiež spomenutý pod názvom "min-enabled".

NEXT SLIDE

Ukázala sa ekvivalencia s konečnostavovými automatmi.

NEXT SLIDE

Sekvenčné P systémy pracujúce s množinami majú tieto vlastnosti:

Pravidlá sú bez konfliktu, lebo objekty sa môžu zúčastniť ako reaktanty súčasne vo viacerých pravidlách. Ak je objekt použitý aspoň v jednom pravidle ako reaktant, bude spotrebovaný.

P systémy s množinami objektov

- Príjty objektov sa ignoruje
 - Konečné pravidlá sú deterministické
 - Existencia s konečnostavovými automatmi
 - Existencia automatizácie pre modelovanie
- Príjty "non-enabled" computational step \Rightarrow sekvenčný
- Vlastnosti
 - Pravidlá bez konfliktu (objekty sa môžu zúčastniť ako reaktanty súčasne vo viacerých pravidlách)
 - Ak je objekt použitý aspoň v jednom pravidle ako reaktant, bude spotrebovaný

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

Skúmané varianty P systémov

Sekvenčné P systémy s množinami namiesto multimnožín

Iné spôsoby vytvárania membrány

Pravidlá, ktoré vytvárajú nové membrány, majú isté problémy.

Napríklad, čo sa stane, ak sa dva krát po sebe vytvorí membrána s tým istým označením? Tu máme dve možnosti. Bud vytvorenie druhej membrány v definícii nejakým spôsobom zakážeme, aby sme zachovali invariant, kde existuje iba jedna membrána s daným označením. Alebo povolíme dve susedné membrány s rovnakým označením, ale potom treba riešiť situáciu, keď sa posíla objekt do membrány, či sa pošle do jednej, alebo do oboidvoch.

Podľa pôvodnej definície je pravidlo neaplikovateľné aj v prípade, keď sa posíla objekt do membrány s označením, ktoré sa v aktuálnom regione nenachádza.

Iné spôsoby vytvárania membrány

- Príjemný globálny definície
 - Vytváranie membrány, ktoré sú súbory
 - Príjemný objekt do existujúcej membrány
- Inject or create
- Wrap or create

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

Skúmané varianty P systémov

Sekvenčné P systémy s množinami namiesto multimnožín

Sekvenčné P systémy s množinami

Skúmali sme aj varianty inšpirované formalizmom Reaction Systems, konkrétne, nahradili sme obsah membrány, namiesto multimnožín uvažujeme množiny objektov.

Sekvenčné P systémy s množinami namiesto multimnožín

- Príjty objektov sa ignoruje
 - Konečné pravidlá sú deterministické
 - Existencia s konečnostavovými automatmi
 - Existencia automatizácie pre modelovanie
- Príjty "non-enabled" computational step \Rightarrow sekvenčný
- Vlastnosti
 - Pravidlá s konečnosťou (objekty sa môžu zúčastniť ako reaktanty súčasne vo viacerých pravidlách)
 - Ak je objekt použitý aspoň v jednom pravidle ako reaktant, bude spotrebovaný

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

Skúmané varianty P systémov

Sekvenčné P systémy s množinami namiesto multimnožín

P systémy s množinami objektov

Alhazov v roku 2005 uvažoval o P systémoch, kde sa ignorovali počty objektov. Pri maximálnom paralelizme je výpočet deterministický, lebo pravidlá nie sú navzájom konfliktné a maximálna multimnožina simultánne aplikovateľných pravidiel je v každej konfigurácii iba jedna.

NEXT SLIDE

Takto definované P systémy sú ekvivalentné s konečnostavovými automatmi, čo sa týka výpočtovej sily.

NEXT SLIDE

S aktívnymi membránami je model univerzálny.

P systémy s množinami objektov

- Príjty objektov sa ignoruje
 - Konečné pravidlá sú deterministické
 - Existencia s konečnostavovými automatmi
 - Existencia automatizácie pre modelovanie
- Príjty "non-enabled" computational step \Rightarrow sekvenčný
- Vlastnosti
 - Pravidlá s konečnosťou (objekty sa môžu zúčastniť ako reaktanty súčasne vo viacerých pravidlách)
 - Ak je objekt použitý aspoň v jednom pravidle ako reaktant, bude spotrebovaný

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

Skúmané varianty P systémov

Sekvenčné P systémy s množinami namiesto multimnožín

Aktívny P systém

Na tomto mieste by som chcel znovu pripomenúť definíciu aktívneho P systému.

Aktívny P systém

- Membránna konfigurácia (T, i, c) , kde
 - T je množina tvarov
 - $i = \{1, 2, \dots, n\}$
- Relácia P systému je $\{(E, C, R, R_1, \dots, R_n)\}$, kde
 - E je množina tvarov
 - C je množina tvarov
 - R je množina tvarov

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

Skúmané varianty P systémov

Sekvenčné P systémy s množinami namiesto multimnožín

Iné spôsoby vytvárania membrány

Preto sme vymysleli alternatívne definície vytvárania membrány.

Inject or create zjednocuje pravidlo pre posielanie a pravidlo pre vytváranie membrány. V prípade, ak membrána s daným označením existuje, tak sa daný objekt do nej pošle. Ak neexistuje, tak sa daný objekt zabalí do novej membrány.

NEXT SLIDE

Wrap or create ponecháva explicitné pravidlo na vytvorenie novej membrány, ale ak membrána s daným označením už existuje, tak ju zabalí do novej membrány s tým istým označením.

Iné spôsoby vytvárania membrány

- Príjemný globálny definície
 - Vytváranie membrány, ktoré sú súbory
 - Príjemný objekt do existujúcej membrány
- Inject or create
- Wrap or create

