

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

Biologicky motivované výpočtové modely

Mgr. Michal Kováč

Štefánikova 48, 852 01 Bratislava, Slovensko

17.1.2018

Vážení prítomní, 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

Dvojité systémy

• Následné modely dvojitého systému

• Následné biologické systémy

• Následné systémy s interakciou s okolím

• Následné systémy s interakciou s okolím

Biologicky motivované výpočtové modely majú dvojité 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

Biologicky motivované výpočtové modely

• Neurónové siete (od 1985)

• Celulárne automaty (od 1985)

• Evolučné algoritmy (od 1985)

• L systémy (od 1985)

• Swarm intelligence (od 1985)

• P systémy (od 1985) [1]

• ...

Dlho skúmané modely ako neurónové siete, celulárne 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

Membránová štruktúra

• Multimnožiny

• Pravidlá

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

$a \rightarrow b$

$a \rightarrow b \text{ when } c \in E$

$a \rightarrow b \text{ when } c \in E \text{ and } d \in E$

$a \rightarrow b \text{ when } c \in E \text{ and } d \in E$

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 daným 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

Varianty pravidiel

$a \rightarrow b$

• Kooperatívne ($a \in P$) (PAIR [1])

• Kooperatívne ($a \in E$) (PACF [1])

• Kooperatívne a inhibičné ($a \in P$ and $b \in E$) (PAIR [1])

• Kooperatívne a inhibičné ($a \in E$ and $b \in E$) (PAIR [1])

• Kooperatívne a inhibičné ($a \in P$ and $b \in E$) (PAIR [1])

• Kooperatívne a inhibičné ($a \in E$ and $b \in E$) (PAIR [1])

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

Varianty pravidiel

$a \rightarrow b$

• Kooperatívne ($a \in P$) (PAIR [1])

• Kooperatívne ($a \in E$) (PACF [1])

• Kooperatívne a inhibičné ($a \in P$ and $b \in E$) (PAIR [1])

• Kooperatívne a inhibičné ($a \in E$ and $b \in E$) (PAIR [1])

• Kooperatívne a inhibičné ($a \in P$ and $b \in E$) (PAIR [1])

• Kooperatívne a inhibičné ($a \in E$ and $b \in E$) (PAIR [1])

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 inhibítormi
- Prehľad simulácie pre akceptačný mód

Prehľad simulácie pre akceptačný mód

- Regulovaný stroj $M = (A, P, I, B, Lab)$
- P systém (E, a, w, R)
- $E = Lab \cup A \cup I \cup B \cup O$
- $A = \{a \in Lab \mid \exists i \in I, a \text{ je priradené k hodnotu regionu } i\}$
- $a \rightarrow a^* \in P$
- $a \rightarrow a^* \in I$
- $\forall i \in I, \exists a \in A, a \in P$
- $a \rightarrow a^* \in B$
- $h_0 \rightarrow h_0 \in B$
- $B \rightarrow B \in B$

Ked uvažujeme registrové stroje, kde musia byť všetky registre prázdne, aby sa výpočet korektne ukončil, máme pravidlá, ktoré pri dosiahnutí koncovej inštrukcie h , ak je niektorý register neprázdny, vytvorí sa špeciálny symbol, ktorý tam už ostane navždy, a vďaka poslednému pravidlu sa dosiahne, že výpočet nezastaví. Dokázali sme, že pre každý registrový stroj vieme zostrojiť sekvenčný P systém s inhibítormi, ktorý v akceptačnom mode zastaví na rovnakých vstupoch ako registrový stroj.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

- Skúmané varianty P systémov
- Sekvenčné P systémy s inhibítormi
- Prehľad simulácie pre generatívny mód

Prehľad simulácie pre generatívny mód

- Simulácia maximálne paralelného P systému Π , pomocou sekvenčného P systému s inhibítormi Π_s
- Každý maximálne paralelný krok Π , simulujeme sekvenčným krokom Π_s
- Maximálne paralelný krok realizujeme na 4 fázy:
 - Run
 - Synchronize
 - Senddown
 - Restore

Kedže pravidlá sa uplatňujú simultánne vo všetkých membránach, tento proces treba synchronizovať. Maximálne paralelný krok rozdeľujeme na 4 fázy. Fáza je reprezentovaná špeciálnym objektom a všetky pravidlá sú kooperatívne, na ľavej strane každého pravidla je fáza, ku ktorej sa pravidlo viaže.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

- Skúmané varianty P systémov
- Sekvenčné P systémy s inhibítormi
- Prehľad simulácie pre generatívny mód

Prehľad simulácie pre generatívny mód

- Simulácia maximálne paralelného P systému Π , pomocou sekvenčného P systému s inhibítormi Π_s
- Každý maximálne paralelný krok Π , simulujeme sekvenčným krokom Π_s
- Maximálne paralelný krok realizujeme na 4 fázy:
 - Run
 - Synchronize
 - Senddown
 - Restore

V druhej fáze SYNCHRONIZE sa v každom regióne čaká na ostatné regióny, aby sa spustil ďalší maximálne paralelný krok. Pošle sa synchronizačný token do vonkajšej membrány. V nej, keď sa pozbierajú tokeny zo všetkých membrán, tak vonkajšia membrána pošle signál všetkým membránam, aby mohli začať ďalší maximálne paralelný krok.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

- Skúmané varianty P systémov
- Sekvenčné P systémy s inhibítormi
- Zhrnutie výsledkov pre sekvenčné P systémy s inhibítormi

Zhrnutie výsledkov pre sekvenčné P systémy s inhibítormi

- Simulácia P systému s inhibítormi na Turingovsky úplný
- Publikácia výsledkov na Petriho sieti
- Regulované, synchronizované, pravidla a prístroje
- Výsledok iných obmedzení pravidla

Ukázali sme, že v akceptačnom aj v generatívnom mode sú sekvenčné P systémy s inhibítormi Turingovsky úplné. NEXT SLIDE Hoci tieto výsledky nie sú veľmi prekvapivé, nakoľko podobné výsledky s inhibítormi už boli ukázané pre Petriho siete, prínos týchto simulácií je aj v ukázaní spôsobu konverzie medzi rôznymi modelmi, čo môže pomôcť v ďalšom výskume. NEXT SLIDE Ďalší výskum môže nadviazať a doplniť simuláciu o iné aspekty P systémov, napríklad rozpúšťanie, vytváranie membrán, pravidlá s prioritami, ako aj skúsiť iné obmedzenie pravidiel, napríklad obmedzenie kooperácie alebo obmedzenie sily inhibítorov.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

- Skúmané varianty P systémov
- Sekvenčné P systémy s inhibítormi
- Prehľad simulácie pre generatívny mód

Prehľad simulácie pre generatívny mód

- Simulácia maximálne paralelného P systému Π , pomocou sekvenčného P systému s inhibítormi Π_s
- Každý maximálne paralelný krok Π , simulujeme sekvenčným krokom Π_s
- Maximálne paralelný krok realizujeme na 4 fázy:
 - Run
 - Synchronize
 - Senddown
 - Restore

V generatívnom mode sme sa rozhodli pre simuláciu maximálne paralelného P systému Π pomocou sekvenčného P systému s inhibítormi Π_s . NEXT SLIDE Každý maximálne paralelný krok Π simulujeme pomocou niekoľkých sekvenčných krokov Π_s .

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

- Skúmané varianty P systémov
- Sekvenčné P systémy s inhibítormi
- Prehľad simulácie pre generatívny mód

Prehľad simulácie pre generatívny mód

- Simulácia maximálne paralelného P systému Π , pomocou sekvenčného P systému s inhibítormi Π_s
- Každý maximálne paralelný krok Π , simulujeme sekvenčným krokom Π_s
- Maximálne paralelný krok realizujeme na 4 fázy:
 - Run
 - Synchronize
 - Senddown
 - Restore

V prvej fáze RUN v Π po jednom prepisujeme symboly pomocou pravidiel zodpovedajúcim pravidlám v Π_s , akurát produkty si označujeme, aby neboli znovu použité, kým neskončí simulácia jedného maximálne paralelného kroku. Pomocou inhibítorov zistíme moment, kedy sa už v Π nedá aplikovať žiadne ďalšie pravidlo, ktoré by sa mohlo zahrnúť do multimnožiny pravidiel aplikovaných v Π . To nám zaručí, že aplikované pravidlá sú maximálnou multimnožinou a môžeme prejsť do simulácie ďalšieho maximálne paralelného kroku.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

- Skúmané varianty P systémov
- Sekvenčné P systémy s inhibítormi
- Prehľad simulácie pre generatívny mód

Prehľad simulácie pre generatívny mód

- Simulácia maximálne paralelného P systému Π , pomocou sekvenčného P systému s inhibítormi Π_s
- Každý maximálne paralelný krok Π , simulujeme sekvenčným krokom Π_s
- Maximálne paralelný krok realizujeme na 4 fázy:
 - Run
 - Synchronize
 - Senddown
 - Restore

Po synchronizácii treba označené objekty odznačiť, aby boli pripravené na ďalší maximálne paralelný krok. To sa deje vo fáze RESTORE. Posielanie objektov cez membránu do obaľujúcej membrány sa môže vykonať vo fáze RUN. Ale ak by sme poslali objekt do vnútornej membrány, tá ešte môže byť vo fáze RESTORE predchádzajúceho maximálne paralelného kroku. V tom prípade by sa stihli poslané objekty ešte odznačiť a mohli by sa uplatniť pravidlá toho istého maximálne paralelného kroku. Preto musíme počkať na synchronizáciu a posielanie objektov nadol vykonávať medzi fázou SYNCHRONIZE a fázou RESTORE. Túto fázu sme nazvali SENDDOWN.

2018-01-08

Biologicky motivované výpočtové modely

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

Sekvenčné P systémy s aktívnymi membránami

- Bez toho, aby bolo splnené pravidlo na systéme membra (PABE)

Druhá publikácia tiež súvisí so sekvenčnými P systémami, ale namiesto inhibítorov sme uvažovali rozšírenie, ktoré je unikátne pre P systémy, a to sú aktívne membrány. Ak povolíme pravidlá, ktoré vytvárajú nové membrány, a nestanovíme žiadny limit na počet aplikovaných takýchto pravidiel, dosiahneme Turingovskú úplnosť, ako ukázal Ibarra v roku 2005. Ukázal aj, že pri obmedzení počtu aplikovaných takýchto pravidiel je to ekvivalentné variantu bez takýchto pravidiel. NEXT SLIDE Analyzovali sme rozhodnuteľnosť niektorých behaviorálnych vlastností a výsledky sme prezentovali a boli publikované v zborníku z konferencie Computability in Europe 2015 v Bukurešti.

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
 - $i \in \{0^k1^k \mid k \geq 1\}$
 - $c \in \{0^k1^k \mid k \geq 1\}$
- Modely P systému na $(\Sigma, C_0, R_1, R_2, \dots, R_m)$, kde
 - Σ 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

- Príslušnosť problému
- Existencia nekonečného výpočtu
- 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 nekonečného výpočtu
 - $C_1 \leq C_2$ ak C_1 pokrýva C_2
 - $C_1 \leq C_2$ ak C_1 pokrýva C_2
 - $C_1 \leq C_2$ ak C_1 pokrýva C_2
- $C_1 \leq C_2$ ak C_1 pokrýva C_2

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
 - $i \in \{0^k1^k \mid k \geq 1\}$
 - $c \in \{0^k1^k \mid k \geq 1\}$
- Modely P systému na $(\Sigma, C_0, R_1, R_2, \dots, R_m)$, kde
 - Σ 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, kde označenie koreňa je 1

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

- Príslušnosť problému
- Existencia konečného výpočtu
- 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

- Príslušnosť problému
- Existencia nekonečného výpočtu
- 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 nekonečného výpočtu
 - $C_1 \leq C_2$ ak C_1 pokrýva C_2
 - $C_1 \leq C_2$ ak C_1 pokrýva C_2
 - $C_1 \leq C_2$ ak C_1 pokrýva C_2
- $C_1 \leq C_2$ ak C_1 pokrýva C_2

Na tomto mieste by som chcel spomenúť Dicksonovu lemu. Tá tvrdí, že pre každú nekonečnú postupnosť n -tíc nad \mathbb{N} $\{a_i\}_{i=0}^{\infty}$ 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 $C_1 \leq C_2$.

