

Umelá chémia a teória chemickej organizácie

Juraj Laca

Ústav aplikovanej informatiky
Fakulta informatiky a informačných technológií
Slovenská technická univerzita v Bratislave

9.3.2009

Čo je to umelá chémia?

- **molekuly**: čísla, abstraktné symboly, binárne reťazce, postupnosti znakov, lambda výrazy, dátové štruktúry, . . .
- **reakčné pravidlá**: aritmetické operácie, spájanie reťazcov, lambda výpočty, maticové operácie, Turingové stroje, . . .
- **algoritmus**: stochastické molekulové zrážky, diferenciálne a diferenčné rovnice, symbolická analýza rovníc, metadynamika, zmiešaný prístup

Aplikácie umelej chémie

- **modelovanie:** zložité metabolické a reakčné siete, molekulárne princípy vzniku života, paralelné výpočty, ekologické systémy, sociálne systémy
- **spracovanie informácií:**
 1. skutočné chemické výpočty: výpočty na báze DNA
 2. umelé chemické výpočty: riadenie robota, automatické dokazovanie viet, kontrola rastu umelých neurónových sietí
- **optimalizácia:** riešenie rôznych kombinatoriálnych úloh, problém obchodného cestujúceho, evolučné algoritmy

Vlastnosti chemických reakčných systémov

- založené na prírodnej analógii
- nesequenčné
- asynchrónne
- decentralizované
- odolné voči chybám
- adaptabilné
- zložité
- je ťažké porozumieť a predpovedať ich správanie

Hľadanie maximálneho prvku množiny

- množina molekúl $\mathcal{M} = \{1, 2, \dots, 1000\}$
- populáciu molekúl $\mathcal{P} \subset \mathcal{M}$ tvorí množina obsahujúca 100 rôznych molekúl náhodne vybraných z množiny \mathcal{M}
- reakčné pravidlá sú zadané predpismi:

$$x + y \rightarrow x, \quad \text{ak } x > y$$

$$x + y \rightarrow y, \quad \text{ak } x < y$$

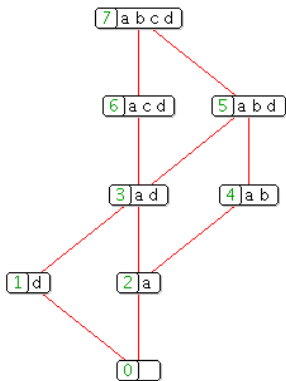
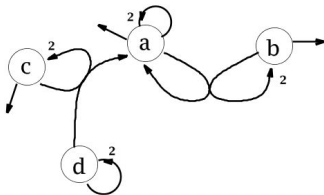
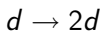
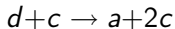
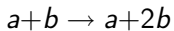
- dynamika je určená algoritmom \mathcal{A} :
 1. náhodne z \mathcal{P} vyber dve molekuly x a y
 2. nahraď ich väčšou z nich
 3. opakuj kroky 1. a 2. pokým neostane len jedna molekula
 4. táto molekula predstavuje maximálny prvok množiny \mathcal{P}

Teória chemickej organizácie

- navrhli ju Dittrich a Speroni di Fenizio
- umožňuje teoreticky analyzovať a lepšie pochopiť chemické výpočtové systémy
- kľúčovým pojmom tejto teórie je pojem organizácie
- organizácia je uzavretá a samoudržiavajúca množina komponentov (molekúl)
- pomocou tohto konceptu môžeme zobraziť zložitú reakčnú sieť ako hierarchiu organizácií
- pohyb v stavovom priestore vysvetľuje ako presun medzi organizáciami
- oprávnenosť tohto konceptu sa opiera o vetu, ktorá tvrdí, že ak je daná diferenciálna rovnica popisujúca dynamiku systému, tak potom každý pevný bod tejto rovnice zodpovedá nejakej organizácii

Príklad

Množina molekúl je $\mathcal{M} = \{a, b, c, d\}$ a množina reakčných pravidiel \mathcal{R} pozostáva zo siedmych reakcií.



Algoritmy na výpočet organizací

- metoda hrubej sily
- konstruktívny prístup
- prístup založený na vektoroch reakčných rýchlostí
- heuristický prístup

Chemické XOR

- množina molekúl je $\mathcal{M}_{XOR} = \{a, A, b, B, c, C\}$
- množina reakčných pravidiel \mathcal{R} je zložená z dvoch druhov pravidiel

$$\mathcal{R}_{XOR} = \mathcal{L}_{XOR} \cup \mathcal{D}_{XOR}$$

$$\mathcal{L}_{XOR} = \{a + b \rightarrow c, a + B \rightarrow C, A + b \rightarrow C, A + B \rightarrow c\}$$

$$\mathcal{D}_{XOR} = \{a + A \rightarrow \emptyset, b + B \rightarrow \emptyset, c + C \rightarrow \emptyset\}$$

- možné zovšeobecniť na ľubovoľnú Boolovu funkciu

Hľadanie maximálnej nezávislej množiny vrcholov grafu

- množina molekúl je $\mathcal{M} = \{s_1^0, s_1^1, s_2^0, s_2^1, \dots, s_N^0, s_N^1\}$
- množina reakčných pravidiel \mathcal{R} je zložená z troch druhov pravidiel

$$\mathcal{R} = \bigcup_{i=1}^N \mathcal{R}_i = \bigcup_{i=1}^N \mathcal{V}_i \cup \mathcal{N}_i \cup \mathcal{D}_i.$$

$$\mathcal{V}_i = \{s_{j_1}^0 + s_{j_2}^0 + \dots + s_{j_{n_i}}^0 \rightarrow n_i s_i^1\}$$

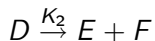
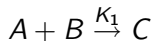
$$\mathcal{N}_i = \{s_j^1 \rightarrow s_i^0 \mid (v_j, v_i) \in E\}$$

$$\mathcal{D}_i = \{s_i^0 + s_i^1 \rightarrow \emptyset\}$$

- najväčšie organizácie predstavujú požadované maximálne nezávislé množiny vrcholov

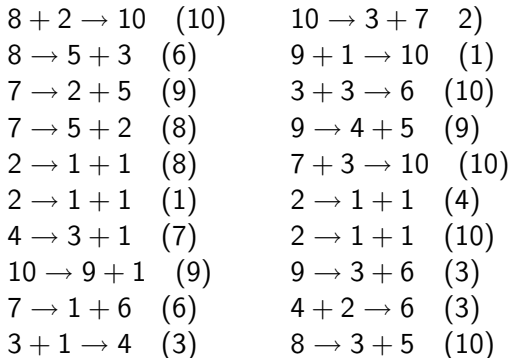
Náhodná katalytická reakčná sieť

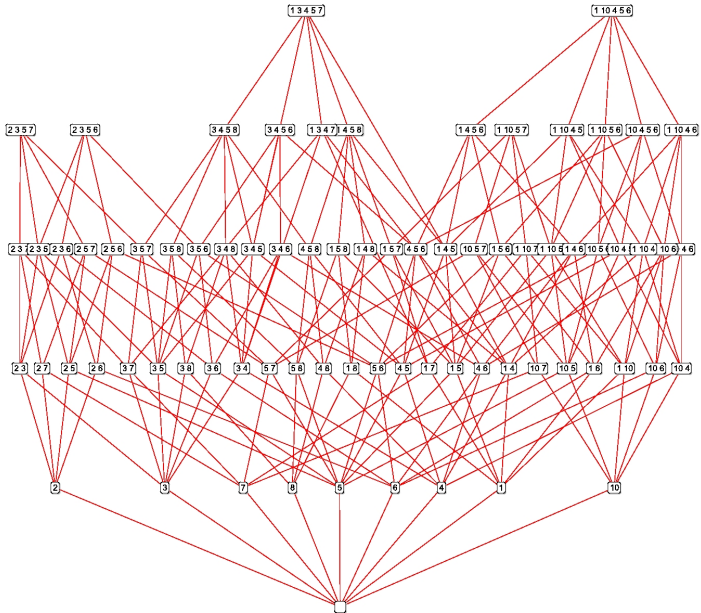
- množina molekúl je $\mathcal{M} = \{1, 2, \dots, n\}$
- množina reakčných pravidiel \mathcal{R} zložená z dvoch typov reakcií:



Náhodná katalytická reakčná sieť

náhodne vygenerovaná reakčná sieť z 10 molekúl a 20 reakčných pravidiel:





Ďakujem za pozornosť.