Θεωρία και Εφαρμογές των Κυψελιδωτών Αυτομάτων στη Βιολογία

Διάλεξη 1
Ιστορία των Κυψελιδωτών Αυτόματων,
1-d Κυψελιδωτά Αυτόματα,
1-d Κυψελιδωτά Αυτόματα στη Βιολογία,
2-d Κυψελιδωτά Αυτόματα στη Βιολογία
1-d DNA Κυψελιδωτά Αυτόματα

Κυψελιδωτά Αυτόματα (Κ.Α.)

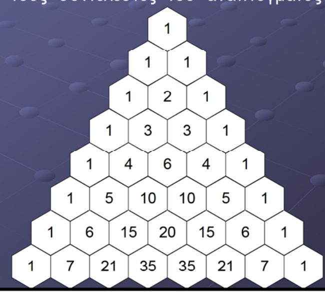
- Τα **Κυψελιδωτά Αυτόματα (Κ.Α.)** αποτελούν μοντέλα φυσικών συστημάτων, στα οποία ο χώρος και ο χρόνος είναι διακριτοί και τα φυσικά μεγέθη μπορούν να λάβουν τιμές από ένα πεπερασμένο σύνολο τιμών.
- Ένα **Κυψελιδωτό Αυτόματο** αποτελείται από ένα πλέγμα κελιών, καθένα από τα οποία μπορεί να βρίσκεται σε μία (από ένα πεπερασμένο σύνολο καταστάσεων) κατάσταση.
- Όλα τα κελιά ***ανανεώνονται συγχρόνως*** σε διακριτά χρονικά βήματα, σύμφωνα με ένα τοπικό κανόνα αλληλεπίδρασης.
- ***Η κατάσταση κάθε κελιού*** την επόμενη χρονική στιγμή καθορίζεται από τις τρέχουσες καταστάσεις των γειτονικών κελιών καθώς και του κελιού αναφοράς.

Κυψελιδωτά Αυτόματα (Κ.Α.)
(συνέχεια)

- Τα **Κυψελιδωτά Αυτόματα** παρουσιάζουν τρεις χαρακτηριστικές ιδιότητες:
  - ***Μαζική παραλληλία,***
  - ***Τοπικές αλληλεπιδράσεις,***
  - ***Απλοποιημένα δομικά στοιχεία (κελιά).***
- Τα Κ.Α. αποτελούν μία αξιόπιστη αριθμητική μέθοδο προσέγγισης πολύπλοκων, μη γραμμικών προβλημάτων.
- ***Αναδυόμενος Υπολογισμός (emergent computation)***: εμφάνιση γενικευμένων ιδιοτήτων ενός συστήματος Κ.Α., οι οποίες δεν αναμένονταν με βάση την αρχική παραμετροποίηση των δομικών στοιχείων ή των τοπικών αλληλεπιδράσεων ***(αυτό-οργάνωση).***

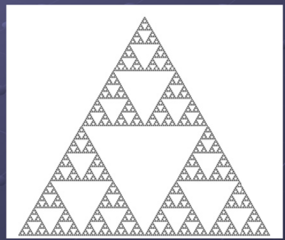
Ιστορικά στοιχεία για τα Κ.Α.

- Ο Blaise Pascal (1623-1662), μεγάλος μαθηματικός και επιστήμονας, στην ηλικία των είκοσι ετών, υλοποίησε δέκα μηχανές, για την πρόσθεση ακεραίων αριθμών, δημιουργώντας, έτσι, έναν προάγγελο των σύγχρονων υπολογιστών.
- Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζονται οι οκτώ πρώτες σειρές του τριγώνου του Pascal, που είναι ο τριγωνικός πίνακας των αριθμών, ο οποίος απαρτίζεται από τους συντελεστές του αναπτύγματος του πολυωνύμου $(1+x)^n$.



Ιστορικά στοιχεία για τα Κ.Α. (συνέχεια)

- Η τοπική αλληλεπίδραση των κυψελίδων απεικονίζεται και στο σχήμα κάτω αριστερά.
- Στην περίπτωση που χρωματιστούν μόνο οι περιττοί αριθμοί στο τρίγωνο του Pascal, προκύπτει το τρίγωνο του Sierpinski που είναι ένα fractal (θα το δούμε και στις επόμενες διαφάνειες ως μονοδιάστατο Κ.Α.) και απεικονίζεται αντίστοιχα στο κάτω δεξιά σχήμα.



Ιστορικά στοιχεία για τα Κ.Α. (συνέχεια)

- Παρότι, τα Κ.Α. έχουν επανεφευρεθεί αρκετές φορές, συνήθως με διαφορετικές ονομασίες, η σύλληψή τους στη σημερινή μορφή ανάγεται στο τέλος της δεκαετίας του 1940.
- Ο σκαπανέας των Κ.Α. είναι μετά βεβαιότητας ο John von Neumann, ούγγρος μαθηματικός (1903-1957), ο οποίος, στα τέλη της δεκαετίας του 1940, ασχολούνταν με το σχεδιασμό των πρώτων ψηφιακών υπολογιστών.
  - Επιπρόσθετα εργαζόταν την εποχή εκείνη πάνω στο πρόβλημα της αυτο-αναπαραγωγής (self-reproduction), ουσιαστικά σκεφτόταν την ιδέα ενός ρομπότ να «δημιουργεί» ένα άλλο ρομπότ (κινηματικό μοντέλο).
- Η σύλληψη των Κ.Α. από μέρους του, αποτελεί επίσης και το πρώτο εφαρμόσιμο μοντέλο μαζικού παράλληλου υπολογισμού[1].

1. J. von Neumann, "Theory of Self-Producing Automata", University of Illinois, Urbana, 1966.

Ιστορικά στοιχεία για τα Κ.Α. (συνέχεια)

- Ο von Neumann προσπαθούσε να μιμηθεί τη συμπεριφορά του ανθρώπινου εγκεφάλου, προκειμένου να κατασκευάσει μία μηχανή ικανή να επιλύει εξαιρετικά πολύπλοκα προβλήματα.
- Είχε υπόψη του μία μηχανή τέτοιας πολυπλοκότητας, ίδιας με αυτής του ανθρώπινου εγκεφάλου, που θα περιείχε μηχανισμούς ίδιου ελέγχου και ιδίας επισκευής.
- Η σκέψη αυτή τον οδήγησε να οραματιστεί μία μηχανή ικανή να κατασκευάζεται από μόνη της, από κάποιο διαθέσιμο υλικό.
- Αρκετά γρήγορα, μελέτησε το πρόβλημα αυτό από μία πιο θεωρητική σκοπιά και προσπάθησε να προσδιορίσει τις παραμέτρους εκείνες που πρέπει να έχει ένα σύστημα, ώστε να αναπαράγεται από μόνο του (αυτο-αντιγραφόμενο, self-replicated).
- Ενδιαφερόταν περισσότερο να βρει μία λογική θεώρηση του μηχανισμού αυτο-αναπαραγωγής (self-reproduction) χωρίς άμεση αναφορά στις συνεπαγόμενες βιολογικές διαδικασίες.

Ιστορικά στοιχεία για τα Κ.Α. (συνέχεια)

- Ακολουθώντας τις προτάσεις του S. Ulam[1], ο von Neumann επαναπροσδιόρισε τον παραπάνω προβληματισμό του στο πλαίσιο ενός πλήρως διακριτού κόσμου αποτελούμενου από κυψελίδες (cells).
- Κάθε *κυψελίδα* (*cell*) χαρακτηρίζεται από μία *εσωτερική κατάσταση* (*internal state*), που συμβολίζεται από ένα πεπερασμένο αριθμό δυαδικών ψηφίων (bits) πληροφορίας.
- Ο von Neumann πρότεινε αυτό το σύστημα των κυψελίδων να εξελίσσεται σε διακριτά χρονικά βήματα, όπως τα απλά αυτόματα που χρησιμοποιούν μόνον έναν απλό τρόπο για τον υπολογισμό της επόμενης εσωτερικής τους κατάστασης.

1. S. Ulam, "Random processes and transformations" in Proceedings of the International Congress on Mathematicians (2):264–275, 1952.

Ιστορικά στοιχεία για τα Κ.Α. (συνέχεια)

- Ο *κανόνας* (*rule*) που προσδιορίζει την εξέλιξη του συγκεκριμένου συστήματος είναι ίδιος για όλες τις κυψελίδες και είναι συνάρτηση των καταστάσεων των γειτονικών κυψελίδων.
- Όπως συμβαίνει και σε κάθε βιολογικό σύστημα, η δραστηριότητα των κυψελίδων λαμβάνει χώρα ταυτόχρονα. Ωστόσο, το ίδιο ρολόι οδηγεί την εξέλιξη σε κάθε κυψελίδα, και η ανανέωση της εσωτερικής κατάστασης της κάθε κυψελίδας γίνεται ταυτόχρονα.
- Αυτά τα πλήρως διακριτά δυναμικά συστήματα που εφευρέθηκαν από τον von Neumann αναφέρονται τώρα ως Κ.Α.

Ιστορικά στοιχεία για τα Κ.Α. (συνέχεια)

- Το πρώτο αυτο-αντιγραφόμενο Κ.Α. που προτάθηκε από τον von Neumann αποτελούνταν από ένα δισδιάστατο τετραγωνικό πίνακα και η αυτοαναπαραγόμενη δομή του από μερικές εκατοντάδες στοιχειώδεις κυψελίδες.
  - Είναι γνωστό ως von Neumann universal constructor (δείτε μεθεπόμενη διαφάνεια…)
- Καθεμία από τις κυψελίδες αυτές μπορούσε να τεθεί σε οποιαδήποτε από 29 πιθανές καταστάσεις.
- Ο κανόνας εξέλιξης (evolution rule) απαιτούσε την κατάσταση της κάθε υπό εξέταση κυψελίδας και επιπρόσθετα τους τέσσερις κοντινότερους γείτονές της, που εντοπίζονται βόρεια, νότια, δυτικά και ανατολικά από τη συγκεκριμένη κυψελίδα.

Ιστορικά στοιχεία για τα Κ.Α. (συνέχεια)

- Ο von Neumann πέτυχε με αυτόν τον τρόπο να βρει μία διακριτή δομή από κυψελίδες που έχουν ενσωματωμένη τη δυνατότητα να παράγουν νέα πανομοιότυπα "άτομα".
- Παρόλο που το εν λόγω αποτέλεσμα δύσκολα μπορεί να θεωρηθεί ως μία έστω και πολύ αρχέγονη μορφή ζωής, εντούτοις αυτό παρουσιάζει εξαιρετικά μεγάλο ενδιαφέρον αφού από μία μηχανή είναι αναμενόμενο να μπορεί να κατασκευάσει αντικείμενα μικρότερης πολυπλοκότητας από την ίδια.
- Μέσω των αυτο-αντιγραφόμενων Κ.Α., είναι δυνατόν να κατασκευαστεί μία μηχανή ικανή να δημιουργήσει νέες μηχανές πανομοιότυπης πολυπλοκότητας και ικανοτήτων!

Ιστορικά στοιχεία για τα Κ.Α. (συνέχεια)

- Ο κανόνας von Neumann εμπεριέχει την ιδιότητα του καθολικού υπολογισμού (universal computing), όπως αποκαλείται.
- Αυτό σημαίνει ότι υπάρχει μία αρχική διαμόρφωση (initial configuration) που οδηγεί στη λύση κάθε υπολογιστικού αλγορίθμου.
- Κάτι τέτοιο ακούγεται σε πρώτη φάση ως εκπληκτική δήλωση: πώς θα μπορέσει μία τέτοια διακριτή δυναμική να επιλύσει κάθε φυσικό πρόβλημα;
- Αποδεικνύεται τελικά ότι, προς το παρόν, μία τέτοια ιδιότητα είναι μάλλον θεωρητικού παρά πρακτικού ενδιαφέροντος.
- Πράγματι, η ιδιότητα του καθολικού υπολογισμού σημαίνει ότι κάθε κύκλωμα υπολογιστή (με λογικές πύλες) μπορεί να προσομοιωθεί από τον κανόνα του Κ.Α.
- **Τα παραπάνω αποτελούν σαφέστατες ενδείξεις ότι εξαιρετικά πολύπλοκες και αναπάντεχες συμπεριφορές μπορούν να προκύψουν από την εφαρμογή του κανόνα ενός Κ.Α.**

Ιστορικά στοιχεία για τα Κ.Α. (συνέχεια)

- Μετά από τη δουλειά του von Neumann, άλλοι ερευνητές ακολούθησαν την ίδια ερευνητική πορεία και το πρόβλημα μέχρι και σήμερα παραμένει υψηλού ερευνητικού ενδιαφέροντος.
- Πιο συγκεκριμένα, ο E.F. Codd το 1968 και, αρκετά αργότερα, οι C.G Langton και Byl πρότειναν αρκετά απλούστερους κανόνες Κ.Α., προικισμένους με την ικανότητα της αυτο-αντιγραφής, χρησιμοποιώντας μόνο οκτώ καταστάσεις.
- Η απλούστευση αυτή κατέστη δυνατή, αφενός εγκαταλείποντας την ιδιότητα του καθολικού υπολογισμού, αφετέρου διατηρώντας μία χωροταξικά κατανεμημένη ακολουθία οδηγιών (σαν ένα κυψελιδωτό DNA), η οποία εκτελείται, ώστε να δημιουργηθεί η νέα δομή, και κατόπιν αντιγράφεται σε αυτήν τη νέα δομή.
- Τα Κ.Α. αποτελούν μία πρώιμη προσπάθεια για την κατανόηση της αληθινής ζωής και της συμπεριφοράς των ζωντανών οργανισμών, με τη βοήθεια υπολογιστικών μοντέλων (τεχνητή ζωή), και μπορούν να συνεχίσουν να προσφέρουν στο συγκεκριμένο ερευνητικό αντικείμενο.

Ιστορικά στοιχεία για τα Κ.Α. (συνέχεια)

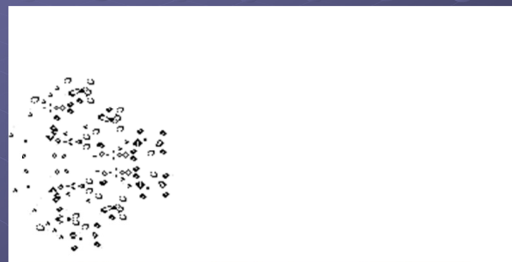
- Το 1970, ο μαθηματικός John Conway πρότεινε το διάσημο, πλέον, Παιχνίδι της Ζωής (Game of Life).
- Θεωρούταν μέχρι το 1990, το πρόγραμμα που είχε «τρέξει» περισσότερες φορές από οποιοδήποτε άλλο, πλην λειτουργικού συστήματος σε όλους τους υπολογιστές του πλανήτη.
- Η δημοτικότητά του του μεταξύ των πρώιμων κομπουτεράδων οφειλόταν εν μέρει και στο γεγονός ότι δημοσιεύτηκε στο περιοδικό του Scientific American, στη στήλη του Martin Gardner που ασχολούταν με παιχνίδια και μαθηματικές σπαζοκεφαλιές.
- Σκοπός του ήταν να βρεθεί ένας απλός κανόνας που θα οδηγούσε σε πολύπλοκες συμπεριφορές…

Ιστορικά στοιχεία για τα Κ.Α. (συνέχεια)

- Συνέλαβε, λοιπόν, ένα δισδιάστατο τετραγωνικό πίνακα, στον οποίον η κάθε κυψελίδα θα μπορούσε να είναι είτε "ζωντανή" (κατάσταση ένα, 1) είτε "νεκρή" (κατάσταση μηδέν, 0).
- Ο κανόνας εξέλιξης του Παιχνιδιού της Ζωής είναι ο ακόλουθος:
  1. Μία "ζωντανή" κυψελίδα που περιβάλλεται από δύο ή τρεις γείτονες παραμένει "ζωντανή"
  2. Μία "νεκρή" κυψελίδα που περιβάλλεται από τρεις ακριβώς "ζωντανούς" γείτονες επανέρχεται στη ζωή.
  3. Από την άλλη μεριά, μία "ζωντανή" κυψελίδα που περιβάλλεται από λιγότερους από δύο ή περισσότερους από τρεις γείτονες πεθαίνει είτε από απομόνωση είτε από υπερπληθυσμό, αντίστοιχα.

Ιστορικά στοιχεία για τα Κ.Α. (συνέχεια)

- Το Παιχνίδι της Ζωής (Game of Life).



Ιστορικά στοιχεία για τα Κ.Α. (συνέχεια)

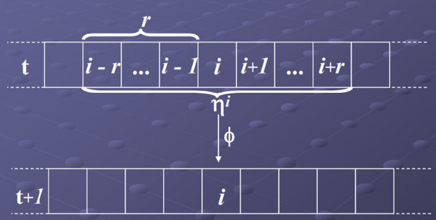
- Στην αρχή της δεκαετίας του 1980, το 1983, ο S. Wolfram[1] μελέτησε διεξοδικά μία οικογένεια απλών μονοδιάστατων κανόνων Κ.Α., οι οποίοι είναι τώρα γνωστοί ως κανόνες Wolfram.
- Παρατήρησε ότι ένα Κ.Α. είναι ένα διακριτό δυναμικό σύστημα και, ως τέτοιο, μπορεί να επιδείξει πολλές από τις συμπεριφορές που συναντώνται σε ένα συνεχές σύστημα, στηριζόμενο ωστόσο σε πολύ απλούστερη λογική.
- Για παράδειγμα, η αρχή της πολυπλοκότητας μπορεί να ανακαλυφθεί στο μαθηματικό μοντέλο ενός Κ.Α., επιτρέποντας έναν ακριβή αριθμητικό υπολογισμό, εξαιτίας της δυαδικής φύσης του Κ.Α., αποφεύγοντας τυχόν αριθμητικά λάθη ή στρογγυλοποιήσεις, σε αντίθεση με ότι συμβαίνει στα παραδοσιακά μοντέλα.
- Τα αποτελέσματα της δουλειάς του Wolfram συνέβαλαν στην απόδειξη του ισχυρισμού ότι τα Κ.Α. είναι σημαντικά εργαλεία για τη μελέτη της στατιστικής μηχανικής και βοήθησαν ώστε οι κανόνες Wolfram να βρίσκονται στο επίκεντρο του ενδιαφέροντος αρκετών ερευνητών, ακόμα και σήμερα.

1. S. Wolfram, "Theory and Applications of Cellular Automata" World Scientific: Singapore, 1986.

Ιστορικά στοιχεία για τα 1-d Κ.Α.

- Ο Stephen Wolfram γεννήθηκε στο Λονδίνο το 1959.
- Η πρώτη του δημοσίευση έγινε στην ηλικία των 15 ετών ενώ ολοκλήρωσε τη διδακτορική του διατριβή στην ηλικία των 20 ετών.
- Έχει υπάρξει ο νεότερος επιστήμονας που του απονεμήθηκε το βραβείο MacArthur "young genius".
- Έχει εργαστεί ως ακαδημαϊκός στα πανεπιστήμια του Caltech και Princeton.
- Είναι δημιουργός και ιδιοκτήτης του προγράμματος Mathematica (Wolfram Research).
- Διέθετε ένα αξιομνημόνευτο ρεκόρ δημοσιεύσεων αναλογικά με την ηλικία του μέχρι το 1988 οπότε και σταμάτησε να δημοσιεύει εργασίες σε επιστημονικά περιοδικά.
- Έκτοτε η πιο σημαντική ερευνητική του προσπάθεια σχετίζεται με τη συγγραφή του βιβλίου "A new kind of science".
- Take a look at http://blog.wolfram.com/
- "The Man Who Cracked The Code to Everything". Interview of Stephen Wolfram (by Steve Levy) in Wired, 10, 2006.

Μαθηματική Περιγραφή των 1-d Κ.Α.



Μαθηματική Περιγραφή των 1-d Κ.Α. (συνέχεια)

- Ουσιαστικά τα 1-d Κ.Α. αποτελούνται από ένα γραμμικό 1-d πίνακα πανομοιότυπων κυψελίδων (κελιών) [που αποκαλείται συνήθως πλέγμα κυψελίδων (*lattice*)], κάθε μία από τις οποίες μπορεί να βρεθεί σε *k* καταστάσεις.
- Η (τοπική) *κατάσταση* της κυψελίδας *i* τη χρονική στιγμή *t* δίνεται:

$$s_t^i \in \Sigma = \{0,1,\ldots,k-1\}$$

- Η (συνολική) κατάσταση s_t κατά τη χρονική στιγμή *t* είναι η διαμόρφωση (*configuration*) του συνολικού πίνακα,

$$s_t = (s_t^0, s_t^1, \ldots, s_t^{N-1}) \in \Sigma^N$$

όπου *N* είναι (πιθανώς άπειρο) το μέγεθος-μήκος του μονοδιάστατου (1-d) πίνακα.

Μαθηματική Περιγραφή των 1-d Κ.Α.
(συνέχεια)

- Σε κάθε χρονική στιγμή όλες οι κυψελίδες του μονοδιάστατου πίνακα ανανεώνουν **ταυτόχρονα** την κατάστασή τους σύμφωνα με κάποιον *τοπικό* ***κανόνα*** *ανανέωσης* $\phi : \eta \rightarrow s$.
- Αυτός ο κανόνας λαμβάνει ως είσοδο την *τοπική διαμόρφωση* ***γειτονιάς*** της κυψελίδας *η*.
- Μία τοπική διαμόρφωση γειτονιάς *η* αποτελείται από την κατάσταση της κυψελίδας s_i και τις 2*r* κοντινότερες γειτονικές κυψελίδες (*r* κυψελίδες σε κάθε πλευρά):

  $$\eta_i = (s^{i-r},\ldots,s,\ldots,s^{i+r})$$

  όπου το *r* καλείται *ακτίνα* του Κ.Α.
- Ο τοπικός κανόνας ανανέωσης *φ*, είναι ο ίδιος για κάθε κυψελίδα στον πίνακα και μπορεί να απεικονιστεί με έναν πίνακα αναφοράς (lookup table), που παραθέτει όλες τις πιθανές διαμορφώσεις της γειτονιάς $(|\eta| = k^{2r+1})$.

$$s^i_{t+1} = \phi(\eta^i_t)$$

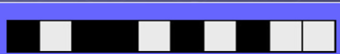
Μαθηματική Περιγραφή των 1-d Κ.Α.
(συνέχεια)

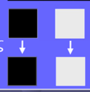
Κανόνας Wolfram
Sum to 0 --> 0
1 --> 1
2 --> 1
3 --> 0
0110 = 'rule 6'
Προκύπτουν: k(2r+1) κανόνες (??)
(k-1)(2r+1) +1

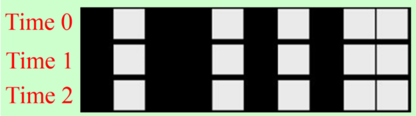
$C_{i-1}(t)$	$C_i(t)$	$C_{i+1}(t)$	$C_i(t+1)$
0	0	0	0
0	0	1	1
0	1	0	1
0	1	1	1
1	0	0	1
1	0	1	1
1	1	0	1
1	1	1	0

Περιγραφή των 1-d Κ.Α. (συνέχεια)

- Ένα μονοδιάστατο Κ.Α. αποτελείται από μία σειρά από κελιά – κυψελίδες καθένα από τα οποία μπορεί να είναι σε μία από δύο πιθανές καταστάσεις 0 ή 1, που τις συμβολίζουμε συνήθως με χρώματα, λευκό ή μαύρο καθώς και από έναν κανόνα που προδιαγράφει πως εξελίσσονται οι καταστάσεις από τη μία χρονική στιγμή στην επόμενη.

Γραμμή  Η πρώτη γραμμή του Κ.Α. δίνεται και αποκαλείται «αρχική κατάσταση».

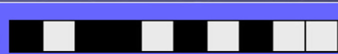
Κανόνας  Ο παραπάνω κανόνας είναι αρκετά εύκολος. Σημαίνει ότι τα μαύρα κελιά παραμένουν μαύρα και τα λευκά παραμένουν λευκά.

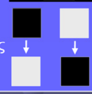


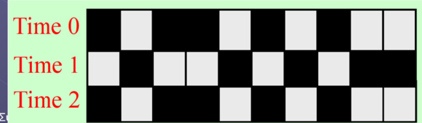
Αυτή είναι η χρονική εξέλιξη του 1-d Κ.Α.

Περιγραφή των 1-d Κ.Α. (συνέχεια)

- Ένα μονοδιάστατο Κ.Α. αποτελείται από μία σειρά από κελιά – κυψελίδες καθένα από τα οποία μπορεί να είναι σε μία από δύο πιθανές καταστάσεις 0 ή 1, που τις συμβολίζουμε συνήθως με χρώματα, λευκό ή μαύρο καθώς και από έναν κανόνα που προδιαγράφει πως εξελίσσονται οι καταστάσεις από τη μία χρονική στιγμή στην επόμενη.

Γραμμή  Η πρώτη γραμμή του Κ.Α. δίνεται και αποκαλείται «αρχική κατάσταση».

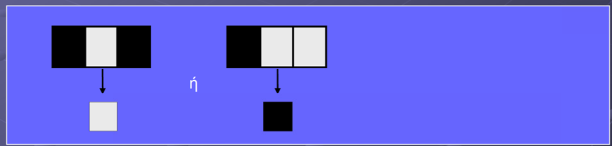
Κανόνας  Ο διπλανός κανόνας είναι λίγο διαφορετικός. Σημαίνει ότι τα μαύρα κελιά γίνονται λευκά και τα λευκά αλλάζουν σε μαύρα, αντίστοιχα.



Αυτή είναι η χρονική εξέλιξη του 1-d Κ.Α.

Περιγραφή των 1-d Κ.Α. (συνέχεια)

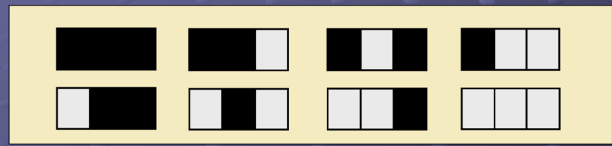
- Αντιλαμβάνεται κανείς ότι οι παραπάνω κανόνες δεν έχουν και τόσο έντονο «ενδιαφέρον»…
- Αυτό οφείλεται καταρχήν στο γεγονός ότι οι καταστάσεις των κελιών δεν εξαρτώνται καθόλου από τις καταστάσεις των γειτονικών κυψελίδων.
- Για να δούμε στη συνέχεια κανόνες που λαμβάνουν υπόψη τις καταστάσεις των γειτονικών κυψελίδων.



- Λαμβάνοντας υπόψη τρεις (3) γειτονικές κυψελίδες (την κεντρική, τη δεξιά της γειτονική και την αριστερή της γειτονική) προκύπτουν οκτώ (8) πιθανοί συνδυασμοί καταστάσεων.

Περιγραφή των 1-d Κ.Α. (συνέχεια)

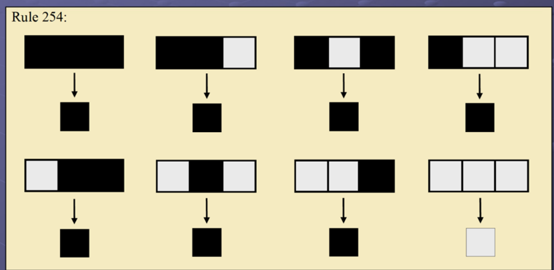
- Οι 8 πιθανοί συνδυασμοί καταστάσεων για τις τρεις γειτονικές κυψελίδες παρουσιάζονται παρακάτω.



- Φυσικά το επόμενο βήμα είναι να προσδιορίσουμε ποια θα είναι η επόμενη κατάσταση της κυψελίδας την ακριβώς επόμενη χρονική στιγμή.
- Για το λόγο αυτό και για να οπτικοποιήσουμε την αναζήτησή μας ας εξετάσουμε τον περίφημο κανόνα Wolfram 1-d Κ.Α. 254 (το όνομά του θα το εξετάσουμε στη συνέχεια).

Περιγραφή των 1-d Κ.Α. (συνέχεια)

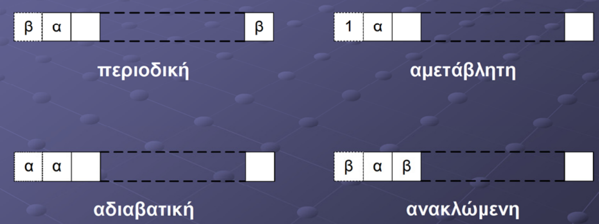
- Ο κανόνας (rule) 254.



- Μπορούμε τώρα να εφαρμόσουμε τον παραπάνω κανόνα στην προηγούμενη αρχική κατάσταση που δείξαμε αλλά το ερώτημα είναι τι γίνεται στα όρια των κυψελίδων (boundary conditions);

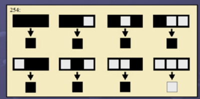
Οριακές Συνθήκες 1-d Κ.Α.

Οριακές Συνθήκες Μονοδιάστατων Κ.Α.:

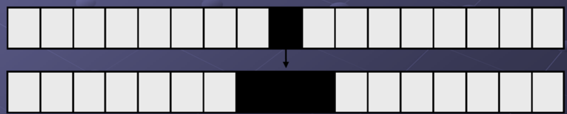


Περιγραφή των 1-d K.A. (συνέχεια)

•Συνηθίζεται να λαμβάνεται μία γραμμή από κυψελίδες που στο μέσο τους έχει μία με κατάσταση 1 και εκατέρωθεν όλες οι άλλες είναι μηδενικές (εώς το άπειρο).

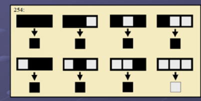


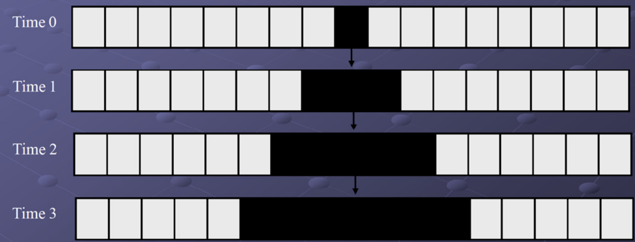
Εάν τώρα εφαρμόσουμε τον προηγούμενο κανόνα 254 στο παραπάνω πλέγμα αντιλαμβάνεται κανείς ότι θα οδηγηθούμε σε τρία νέα μαύρα κελιά την επόμενη χρονική στιγμή.



Περιγραφή των 1-d K.A. (συνέχεια)

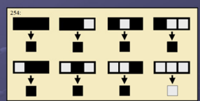
- Η συνέχεια της εξέλιξης του κανόνα 254.

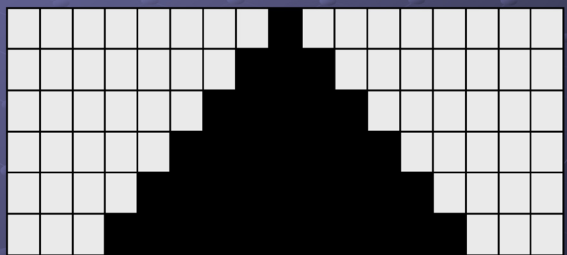




Περιγραφή των 1-d K.A. (συνέχεια)

- Εάν παραστήσουμε την εξέλιξη του 1-d πλέγματος (οριζόντιος άξονας) ως προς τον χρόνο t (κάθετος άξονας) τελικά προκύπτει για την προηγούμενη εφαρμογή του κανόνα 254 το παρακάτω σχήμα.





Παράδειγμα Λειτουργίας 1-d K.A.

- Ο αριθμός των καταστάσεων, *k*=2.
- Το αλφάβητο $\Sigma = \{0,1\}$ $|\Sigma| = k$
- Το μέγεθος του πίνακα, N=11.
- Ο χώρος καταστάσεων *η*

$$\Sigma^N = \{(0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0), (0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,1), ...\}$$

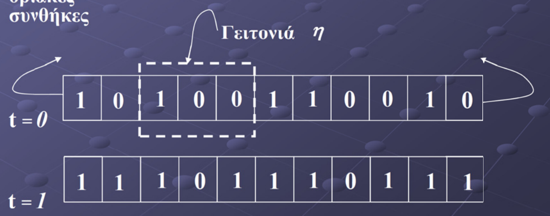
- Η ακτίνα *r* = 1.
- Ο πίνακας κανόνων: $s_{i+1}^{t} = \phi(\eta_i^{t})$
  - Πιθανές γειτονιές: 000 001 010 011 100 101 110 111
  - Εξέλιξη κανόνα *φ*: 0 1 1 1 0 1 1 0
- Αυτός είναι ο κανόνας $110_{(10)}$ γιατί οι καταστάσεις εξόδου είναι αντίστοιχα: $01101110_{(2)}$. Προσοχή, διαβάζεται από τα δεξιά προς τα αριστερά. Είναι ευρύτερα γνωστός ως σύμβαση - κανόνας Wolfram.
- Ο κανόνας 110 υποστηρίζει τον καθολικό υπολογισμό.

Παράδειγμα Λειτουργίας 1-d Κ.Α.
(συνέχεια)

Κανόνας ϕ:

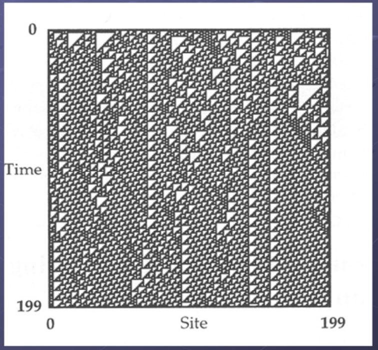
Γειτονιά:	000	001	010	011	100	101	110	111
Bit εξόδου:	0	1	1	1	0	1	1	0

Πίνακας:



Παράδειγμα Λειτουργίας 1-d Κ.Α.
(συνέχεια)

- Διάγραμμα χώρου – χρόνου για τον κανόνα 110.



1. Cook, Matthew (2004) "Universality in Elementary Cellular Automata", *Complex Systems 15*: 1-40.

Παράδειγμα Λειτουργίας 1-d Κ.Α.
(συνέχεια)

- Παράδειγμα εφαρμογής του «γνωστού» κανόνα 90:

$C(i,t+1) = C(i-1,t) \oplus C(i+1,t)$

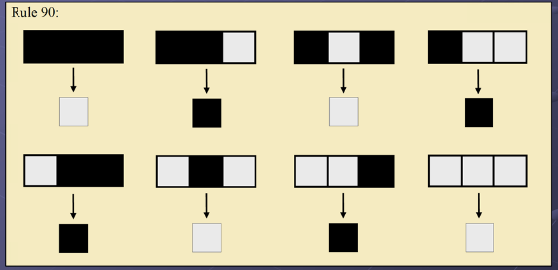
για την εξέλιξη ενός μονοδιάστατου Κ.Α. δέκα (10) κυψελίδων με περιοδικές οριακές συνθήκες.

111	110	101	100	011	010	001	000	Πιθανοί Συνδυασμοί
0	1	0	1	1	0	1	0	Κανόνας mod2 (δεκαδικός 90)

0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	Κ.Α. για t=0
0	0	0	1	1	1	1	0	0	0	Κ.Α. για t=1
0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	Κ.Α. για t=2
0	1	1	1	1	1	1	1	1	0	Κ.Α. για t=3
1	1	0	0	0	0	0	0	1	1	Κ.Α. για t=4
0	1	1	0	0	0	0	1	1	0	Κ.Α. για t=5

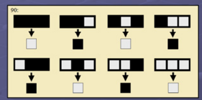
Παράδειγμα Λειτουργίας 1-d Κ.Α.
(συνέχεια)

- Για να δούμε πως οπτικοποιείται βάσει των προηγουμένων η εξέλιξη του κανόνα 90.



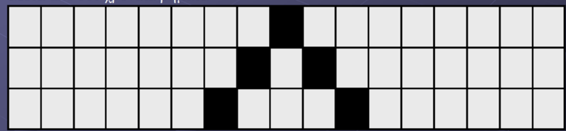
Παράδειγμα Λειτουργίας 1-d Κ.Α.
(συνέχεια)

Εφαρμογή του κανόνα 90.

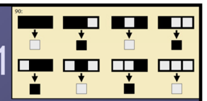


Μετά από ένα χρονικό βήμα:

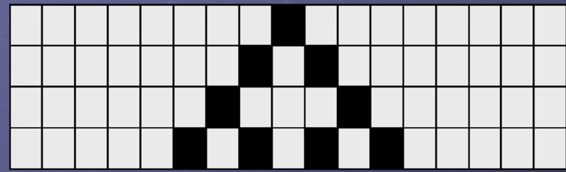
Μετά από δύο χρονικά βήματα



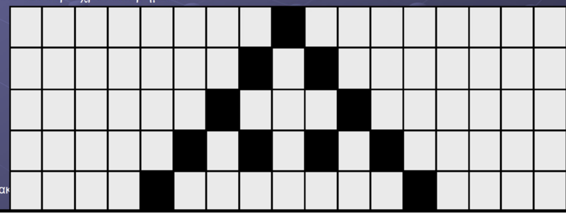
Παράδειγμα Λειτουργίας 1-d Κ.Α.
(συνέχεια)



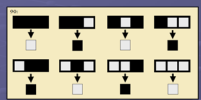
Μετά από τρία χρονικό βήμα:

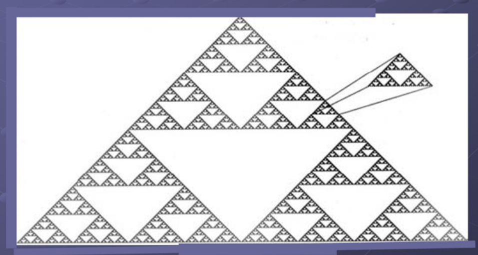


Μετά από τέσσερα χρονικά βήματα:



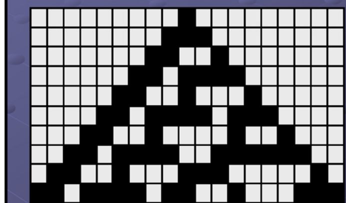
Παράδειγμα Λειτουργίας 1-d Κ.Α.
(συνέχεια)

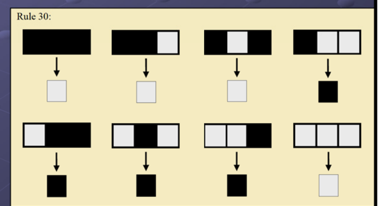




Παράδειγμα Λειτουργίας 1-d Κ.Α.
(συνέχεια)

- Εφαρμογή του κανόνα 30*.
- Οι μέχρι τώρα κανόνες που εξετάσαμε παρουσίασαν μεγάλη κανονικότητα, συμμετρία (εξαίρεση ο κανόνας 110 :ο). Υπάρχει η δυνατότητα να παράγουμε πρότυπα με μεγάλη μη κανονικότητα, ασυμμετρία;

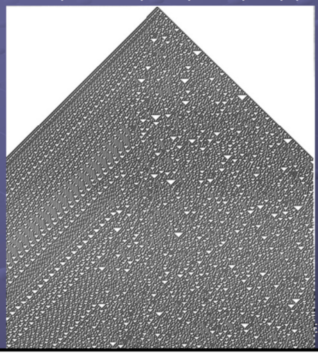


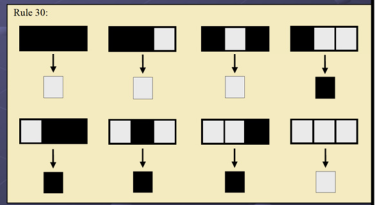


1. Wolfram, S. (1985). "Cryptography with cellular automata". Proceedings of Advances in Cryptology - CRYPTO '85. Lecture Notes in Computer Science 218, Springer-Verlag. pp. 429.

Παράδειγμα Λειτουργίας 1-d Κ.Α.
(συνέχεια)

- Εφαρμογή του κανόνα 30.
- Όπως παρατηρεί κανείς ενώ η μία πλευρά έχει επαναλαμβανόμενα πρότυπα η άλλη πλευρά εμφανίζει εντελώς τυχαία πρότυπα…

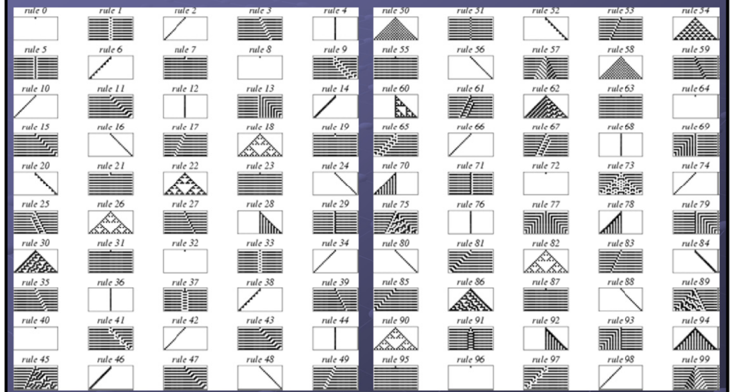




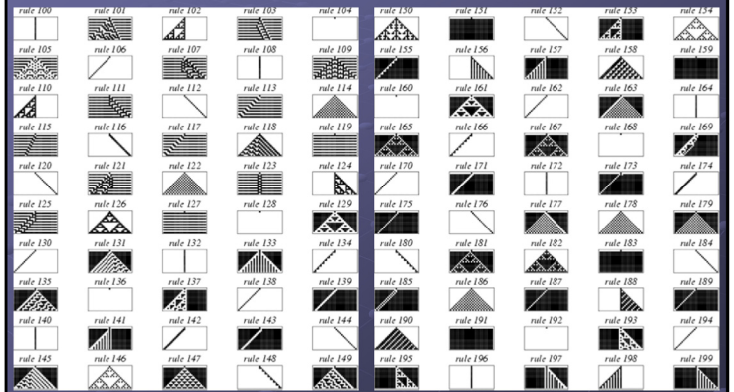
Παράδειγμα Λειτουργίας 1-d Κ.Α.
(συνέχεια)

- Μερικά σχόλια για τον κανόνα 30…
- Το πιο σημαντικό στοιχείο του είναι ότι παρουσιάζει εγγενή τυχαιότητα παρά το γεγονός ότι είναι πεπερασμένος.
- Ο Wolfram σε σχετικό του άρθρο πρότεινε τη χρήση της κεντρικής στήλης του διαγράμματος χώρου χρόνου ως γεννήτρια ψευδοτυχαίων αριθμών.
- Σημειώνεται ότι περνάει τις δοκιμές από αρκετές στατιστικές σουίτες, αλλά αρκετές είσοδοι παράγουν κανονικά και όχι ψευδοτυχαία πρότυπα:
  - Π.χ. Όλα μηδενικά,
  - 0000100011100 επαναλαμβάνεται συνεχώς (δοκιμάστε χωριστά 6 1s)
- Τέλος χρησιμοποιείται στο Mathematica ως γεννήτρια τυχαίων ακεραίων.
  - (http://reference.wolfram.com/mathematica/tutorial/RandomNumberGeneration.html).

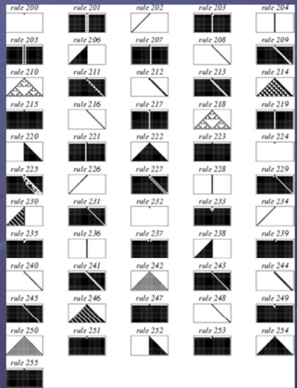
Σύνολο κανόνων Wolfram



Σύνολο κανόνων Wolfram (συνέχεια)

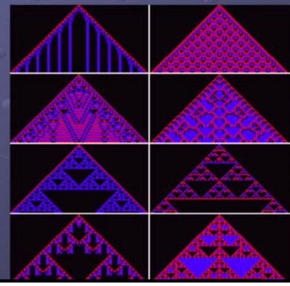


Σύνολο κανόνων Wolfram (συνέχεια)

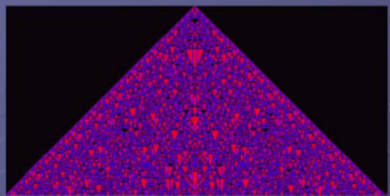


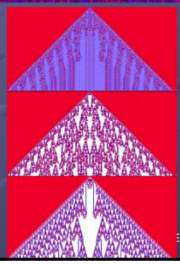
Ολιστικά 1-d Κ.Α.

- Στα ολιστικά Κ.Α. (totalistic CA), οι μεταβάσεις των καταστάσεων των κυψελίδων μέσω των κανόνων εξαρτώνται:
  - Από το μέσο όρο όλης της γειτονιάς, παρά από τις συγκεκριμένες καταστάσεις των κυψελίδων, όπως εμφανίζονταν μέχρι τώρα.
- Ας θεωρήσουμε για παράδειγμα ένα ολιστικό 1-d Κ.Α. τριών καταστάσεων και κατά συνέπεια τριών χρωμάτων με τρεις γείτονες.



Ολιστικά 1-d Κ.Α. (συνέχεια)





Ταξινόμηση των 1-d Κ.Α.

- Ο Wolfram ταξινόμησε τους 256 κανόνες σε τέσσερεις διαφορετικές κλάσεις[1].
- Κλάση Ι: Τελικά κάθε κυψελίδα στο πίνακα του 1-d Κ.Α. «ηρεμεί» σε μία μόνο κατάσταση που δεν πρόκειται να αλλάξει ποτέ ξανά.
  - Κατά αναλογία των προγραμμάτων υπολογιστών που σταματούν μετά από μερικά χρονικά βήματα καθώς και των δυναμικών συστημάτων που έχουν καθορισμένου-σημείου ατράκτορες (fixed-point attractors).
- Κλάση ΙΙ: Τελικά ο πίνακας του 1-d Κ.Α. «εγκαθίσταται» σε έναν περιοδικό κύκλο καταστάσεων (ο οποίος καλείται limit cycle).
  - Κατά αναλογία των προγραμμάτων υπολογιστών που «πέφτουν» σε συνεχείς λούπες καθώς και των δυναμικών συστημάτων που «πέφτουν» σε περιορισμένης περιοδικότητας κύκλους.
- Κλάση ΙΙΙ: Ο πίνακας του 1-d Κ.Α. σχηματίζει “απεριοδικά” σχεδόν τυχαία πρότυπα.
  - Κατά αναλογία των προγραμμάτων υπολογιστών που παράγουν ψευδοτυχαίους αριθμούς («περνάνε» τις περισσότερες δοκιμές τυχαιότητας, αλλά είναι εξαιρετικά ευαίσθητα στις αρχικές συνθήκες).
  - Κατά αναλογία των χαοτικών δυναμικών συστημάτων. Δεν επαναλαμβάνουν σχεδόν ποτέ τους εαυτούς τους, αλλά είναι ευαίσθητα στις αρχικές συνθήκες και έχουν ενσωματωμένους ασταθείς κύκλους περιορισμένης περιοδικότητας.

1. S. Wolfram, *Statistical Mechanics of Cellular Automata*. Reviews of Modern Physics, vol. 55, no. 3, 1983.

Ταξινόμηση των 1-d Κ.Α. (συνέχεια)

- Ο Wolfram ταξινόμησε τους 256 κανόνες σε τέσσερεις διαφορετικές κλάσεις…
- Κλάση IV: Ο πίνακας του 1-d Κ.Α. σχηματίζει πολύπλοκα πρότυπα με τοπικές δομές που κινούνται στο χώρο και στο χρόνο:
  - Είναι αρκετά δύσκολα να περιγραφούν μιας και δεν είναι κανονικά, ούτε περιοδικά ούτε τυχαία.
  - Μπορεί να υποθέσει κανείς ότι δυνητικά αποτελούν παράδειγμα ενδιαφέροντος υπολογισμού.
- Υπόθεση: Η πιο ενδιαφέρουσα και πολύπλοκη συμπεριφορά συμβαίνει στην Κλάση IV των Κ.Α.
- Παράδειγμα: Ο κανόνας 110.

Ταξινόμηση των 1-d Κ.Α. (συνέχεια)

- Παράδειγμα Κλάσης I[1]:

Figure 15.5 Examples of Wolfram's Class I

1. Gary William Flake, *The Computational Beauty of Nature: Computer Explorations of Fractals, Chaos, Complex Systems, and Adaptation*, MIT Press, 1998.

Ταξινόμηση των 1-d Κ.Α. (συνέχεια)

- Παράδειγμα Κλάσης II:

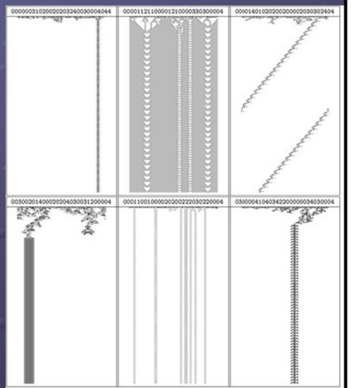


Figure 15.6 Examples of Wolfram's Class II

Ταξινόμηση των 1-d Κ.Α. (συνέχεια)

- Παράδειγμα Κλάσης III:

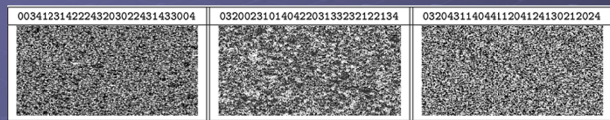


Figure 15.7 Examples of Wolfram's Class III

Ταξινόμηση των 1-d Κ.Α. (συνέχεια)

- Παράδειγμα Κλάσης IV:

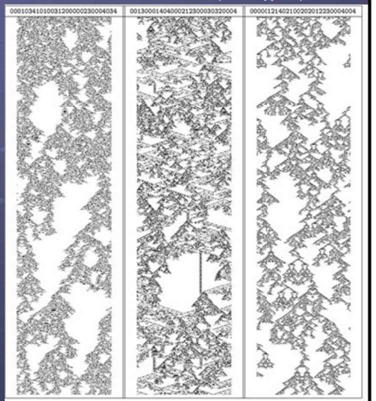


Figure 15.8 Examples of Wolfram's Class IV

Ταξινόμηση κατά Langton (συνέχεια)

- Η πρόταση του Wolfram's για την ταξινόμηση των κανόνων είναι ***φαινομενική*** (*phenomenological*) (προκύπτει από την παρατήρηση των διαγραμμάτων χώρου-χρόνου).
- Ο Chris Langton (1986) πρότεινε την ταξινόμηση των διαγραμμάτων με τη χρήση της παραμέτρου λάμδα *λ*.
- Η παράμετρος *λ* είναι μία στατιστική παράμετρος των καταστάσεων που προκύπτουν ως έξοδοι στον πίνακα κανόνα του Κ.Α. (CA lookup table), και προσδιορίζεται ως το ποσοστό των καταστάσεων που δεν είναι αδρανείς στον εν λόγω πίνακα.
- Η κατάσταση αδράνειας είναι μία τυχαία επιλεγμένη κατάσταση:

  $s \in \Sigma$
- Παράδειγμα: Για ένα 2-καταστάσεων CA ($\Sigma = \{0,1\}$), και κατάσταση αδρανείας *s*=0, η παράμετρος λάμδα *λ* είναι το ποσοστό των 1s στις εξόδους του κανόνα *φ*.

$$\lambda = \frac{|\eta| - n_q}{|\eta|} \qquad 0 \le \lambda \le 1.0 - \frac{1}{k}$$

Ταξινόμηση κατά Langton (συνέχεια)

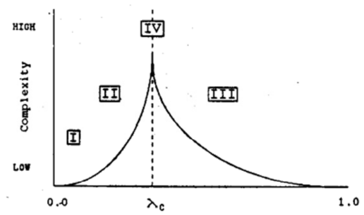
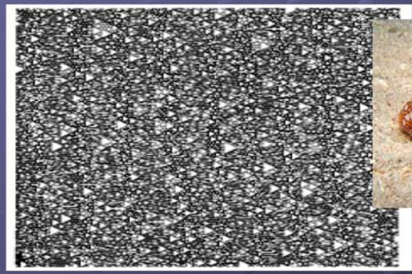


Fig. 16. Location of the Wolfram classes in λ space.

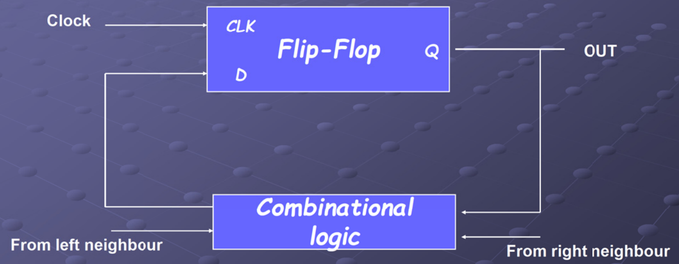
1. Chris G. Langton, *"Computation at the edge of chaos: Phase Transitions and Emergent Computation"* in Physica D, pp. 12-37, 1990.

Μονοδιάστατα Κ.Α. στη φύση;



Ψηφιακή Υλοποίηση Κ.Α.

- **Υλοποίηση με Ψηφιακά Κυκλώματα Τυπικής Κυψελίδας (κελιού) ενός Κ.Α.**



Τα Κ.Α. ως μοντέλα φυσικών διεργασιών

- Τα Κ.Α. έχουν εφαρμοστεί με επιτυχία στην *προσομοίωση αρκετών φυσικών συστημάτων, διεργασιών και επιστημονικών προβλημάτων*, όπου υπεισέρχονται οι *τοπικές αλληλεπιδράσεις*. Ενδεικτικά αναφέρουμε:
  - διάχυση ρευστών
  - προβλήματα μεταφοράς (οδικής, αεροπορικής κ.α.)
  - διεργασίες αντίδρασης - διάχυσης
  - συστήματα μεγάλης κλίμακας (διάδοση φωτιάς, ασθενειών, πετρελαιοκηλίδων)
  - γεωλογικές διεργασίες
  - διεργασίες κατασκευής ολοκληρωμένων κυκλωμάτων
  - βιολογικά συστήματα κ.α.

Τα Κ.Α. ως αρχιτεκτονική ψηφιακών συστημάτων

- ***Τα Κυψελιδωτά Αυτόματα*** έχουν επίσης χρησιμοποιηθεί ***ως αρχιτεκτονική ψηφιακών συστημάτων*** και έχουν εφαρμοστεί μεταξύ άλλων στην:

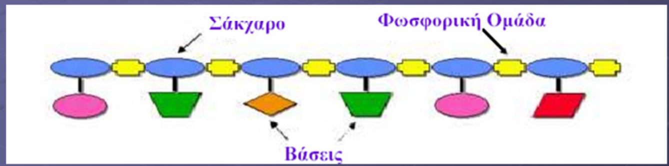
  - επεξεργασία εικόνας, ταξινόμηση προτύπων, σχεδιασμό αριθμητικών μονάδων, παραγωγή μηχανών πεπερασμένων καταστάσεων, υπολογισμό απόκρισης, κρυπτογραφία, παραγωγή κωδίκων διόρθωσης σφαλμάτων, παραγωγή ψευδοτυχαίων προτύπων, ως γεννήτριες ψευδοτυχαίων αριθμών, ως δομές BIST, ως νανοδιατάξεις (Κβαντικά Κυψελιδωτά Αυτόματα) κ.α.

  - ***Τα Κβαντικά Κυψελιδωτά Αυτόματα (Κ.Κ.Α.)*** είναι η πιθανότερη νανοηλεκτρονική τεχνολογία και επομένως η αρχιτεκτονική των επεξεργαστών Κ.Α. και οι αλγόριθμοι Κ.Α. θα μπορέσουν να χρησιμοποιηθούν, με κάποιες τροποποιήσεις, και στα νανοηλεκτρονικά ολοκληρωμένα κυκλώματα.

Βιοτεχνολογία

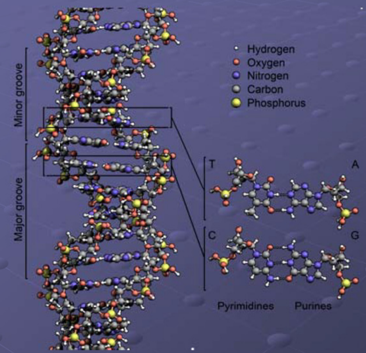
- Η βιοτεχνολογία έχει ως αντικείμενο τη μελέτη και το χειρισμό των βιοσυστημάτων και των βιοϋλικών. Η Βιοπληροφορική είναι κλάδος της επιστήμης της βιοτεχνολογίας και έχει ως κύριο αντικείμενο τη μελέτη των βιολογικών μακρομορίων, όπως το DNA, το RNA και οι πρωτεΐνες. Η βιοπληροφορική μπορεί να οριστεί ως ο επιστημονικός κλάδος που παράγει τα κατάλληλα υπολογιστικά εργαλεία, τις βάσεις δεδομένων, το υλικό (hardware), τους αλγορίθμους και τις μεθόδους για να υποστηρίξει τη γονιδιακή (genomic) και μετα- γονιδιακή (post-genomic) έρευνα.
- Περιλαμβάνει τη μελέτη της δομής DNA, της λειτουργίας και της εξέλιξης, του γονιδίου και της έκφρασης του, της παραγωγής πρωτεϊνών, της δομής και της λειτουργίας των γενετικών ρυθμιστικών συστημάτων και των κλινικών εφαρμογών.
- Για να μελετηθεί η δομή του DNA και να προσομοιωθεί η εξέλιξή του έχουν χρησιμοποιηθεί μέθοδοι από την επιστήμη και την τεχνολογία των υπολογιστών. Λόγω του μεγάλου όγκου πληροφοριών που αποθηκεύονται στη δομή του DNA αναμένεται να αναπτυχθούν σύντομα νέα μοντέλα, αλγόριθμοι και εξειδικευμένοι επεξεργαστές.

Δομή του DNA



Το *Δεσοξυριβοζονουκλεϊκού Οξύ [Deoxyribose Nucleic Acid, (DNA)]* είναι ένα πολυμερές νουκλεϊκό οξύ που αποτελείται από μία αζωτούχο βάση ενωμένη με ένα σάκχαρο, τη δεοξυριβόζη, και μια φωσφορική ομάδα (ένα έως τρία μόρια φωσφορικού οξέος). Οι βάσεις είναι δύο τύπων, οι Πυριμιδίνες – *Θυμίνη (Τ)* και *Κυτοσίνη (C)* - και οι Πουρίνες - *Αδενίνη (Α)* και *Γουανίνη (G)*.

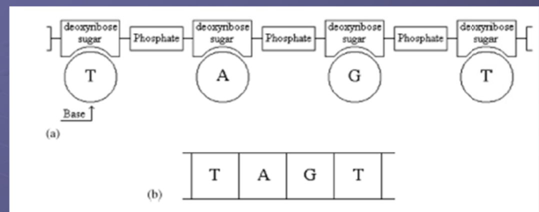
Δομή του DNA



Δομή του DNA (συνέχεια)

- Ο σκελετός σακχάρων – φωσφορικών ομάδων αναγκάζει κάθε αλυσίδα DNA να τυλίγεται γύρω από το εξωτερικό μέρος των συνδεδεμένων Βάσεων, όπως μία σπειροειδής σκάλα.
- Οι σχηματιζόμενοι *δεσμοί Υδρογόνου* ανάμεσα στις Πουρίνες και τις Πυραμιδίνες αναγκάζουν δύο αλυσίδες DNA να συνδέονται μεταξύ τους και να σχηματίζουν μία διπλή έλικα.
- Η κάθε βάση επιδιώκει να σχηματίσει δύο ή τρεις δεσμούς υδρογόνου με συνέπεια μόνο συγκεκριμένες βάσεις να σχηματίζουν δεσμούς.
- Η σύνδεση γίνεται πάντα ως ακολούθως:
  Αδενίνη – Θυμίνη (Α – Τ)
  Γουανίνη – Κυτοσύνη (G – C)
- Οι δύο αλυσίδες ενός μορίου DNA είναι συμπληρωματικές και αυτό υποδηλώνει ότι η αλληλουχία της μιας καθορίζει και την αλληλουχία της άλλης.

Το DNA ως μοντέλο Κ.Α.



(a) Δομή του DNA, (b) Μοντέλο Κ.Α.

- Το DNA μπορεί να μοντελοποιηθεί ως μονοδιάστατο Κ.Α., όπου η αλυσίδα φωσφορικού οξέος αντιστοιχεί στην επαναλαμβανόμενη (πλεγματική) δομή του Κ.Α. και τα σάκχαρα στις κυψελίδες του Κ.Α.
- Σε κάθε μόριο σακχάρου μπορεί να αντιστοιχηθεί μια από τις τέσσερις βάσεις Αδενίνη (Α), Κυτοσίνη (C), Θυμίνη (Τ) και Γουανίνη (G).
- Αυτές οι τέσσερις βάσεις αντιστοιχούν στις τέσσερις πιθανές καταστάσεις του Κ.Α.

Το DNA ως μοντέλο Κ.Α. (συνέχεια)

Η κατάσταση της κυψελίδας i παίρνει τιμές από το σύνολο [1] :

$$C_i \in \{A, C, T, G\}$$

Υποθέτουμε ότι εμφανίζεται μια αλλαγή στη κατάσταση της κυψελίδας *i* κατά την χρονική στιγμή *t+1*. Υποθέτουμε ότι η κατάσταση αυτής της κυψελίδας έχει αλλάξει ως αποτέλεσμα της επίδρασης των καταστάσεων των γειτόνων της κατά την χρονική στιγμή *t*. Η νέα κατάσταση της κυψελίδας *i* αυτή τη χρονική στιγμή (που είναι το *t+1* βήμα) δίνεται από την εξίσωση:

$$C^{t+1}{}_i = \hat{M}\left(C^t{}_{i-r,\dots,}C^t{}_{i-3}, C^t{}_{i-2}, C^t{}_{i-1}, C^t{}_i, C^t{}_{i+1}, C^t{}_{i+2}, C^t{}_{i+3,\dots,}C^t{}_{i+r}\right)$$

Όπου $\hat{M}$ είναι ένας μαθηματικός τελεστής μια μαθηματική συνάρτηση, μία λογική συνάρτηση, ένας πίνακας, κ.λπ.

[1] G. Ch. Sirakoulis, I. Karafyllidis, Ch. Mizas, V. Mardiris, A. Thanailakis, and Ph. Tsalides, "A cellular automaton model for the study of DNA sequence evolution," Computers in Biology and Medicine, vol. 33, no. 5, pp. 439-453, 2003.

Το DNA ως μοντέλο Κ.Α. (συνέχεια)

Αντιστοιχούμε στις βάσεις τους αριθμούς ως εξής:

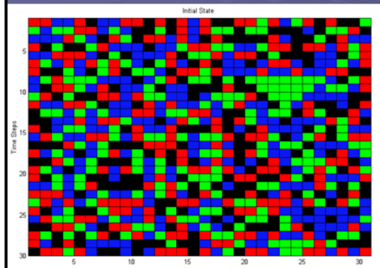
$$A \to 0 \qquad C \to 1 \qquad T \to 2 \qquad G \to 3$$

Επιλέχθηκε για τις προσομοιώσεις ένας κανόνας εξέλιξης που ενσωματώνει μόνο την αλληλεπίδραση των πλησιέστερων γειτόνων και δίνεται από τον ακόλουθο πίνακα:

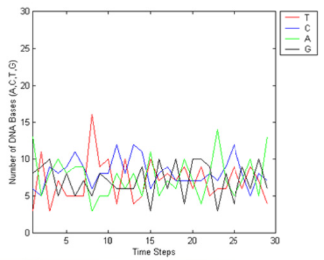
$$M = \begin{bmatrix} \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & \cdots \\ \cdots & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & \cdots \\ \cdots & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}$$

η κατάσταση της κυψελίδας *i* κατά τη χρονική στιγμή *t+1* θα είναι η modulo 4 πρόσθεση της κατάσταση της με τις καταστάσεις του αριστερού και δεξιού γείτονα της (κυψελίδα *i-1* και *i+1*, αντίστοιχα) κατά το χρονικό βήμα *t*.

Προσομοίωσης της εξέλιξης μίας ακολουθίας DNA



Προσομοίωση εξέλιξης μιας τυχαίας ακολουθίας DNA (A: πράσινο, C: μπλε, T: κόκκινο, G: μαύρο).



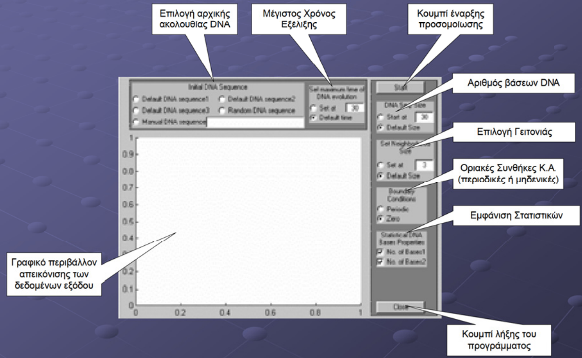
Ο αριθμός των κυψελίδων με την ίδια βάση DNA σε διάφορα χρονικά βήματα.

Σύστημα προσομοίωσης της εξέλιξης μίας ακολουθίας DNA

Προκειμένου να μοντελοποιηθούν οι ακολουθίες DNA με ακρίβεια και να καταστεί δυνατή η προσομοίωση της εξέλιξης, αναπτύχθηκε και υλοποιήθηκε ένα εργαλείο, που βασίζεται στα Κ.Α., σε κώδικα γλώσσας προγραμματισμού υψηλού επιπέδου.

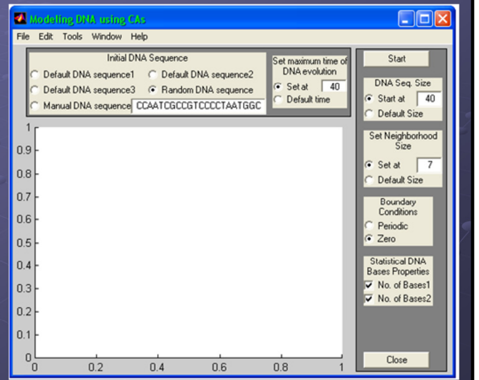
Το εργαλείο περιλαμβάνει το διαδραστικό (interactive) γραφικό περιβάλλον χρήστη [Graphical User Interface, (GUI)], που υλοποιήθηκε χρησιμοποιώντας τις ενσωματωμένες δυνατότητες της εφαρμογής GUI του προγράμματος Matlab και που υποστηρίζει την αλληλεπίδραση με το χρήστη κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης. Περιλαμβάνει επίσης και τις απαραίτητες συναρτήσεις που υλοποιούν το μοντέλο που παρουσιάστηκε και οι οποίες "γράφτηκαν" στη γλώσσα προγραμματισμού Matlab.

Σύστημα προσομοίωσης της εξέλιξης μίας ακολουθίας DNA (συνέχεια)



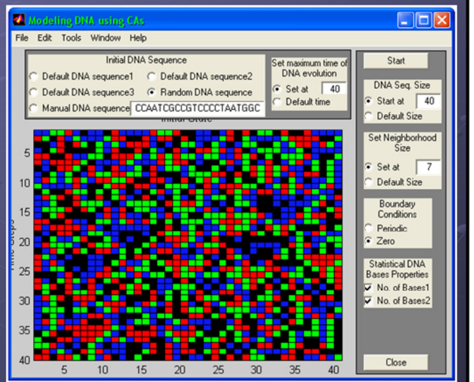
Σύστημα προσομοίωσης της εξέλιξης μίας ακολουθίας DNA (συνέχεια)

Οθόνη του συστήματος πριν την έναρξη λειτουργίας.



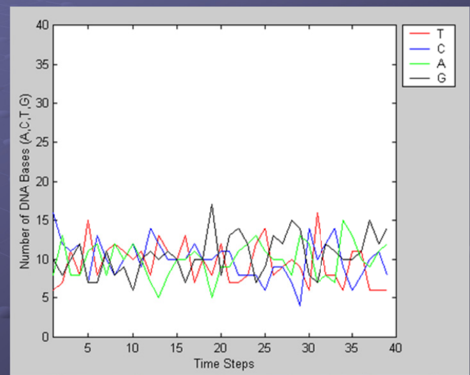
Παράδειγμα χρήσης συστήματος προσομοίωσης της εξέλιξης μίας ακολουθίας DNA (συνέχεια)

Αποτέλεσμα προσομοίωσης της εξέλιξης μίας τυχαίας ακολουθίας DNA.



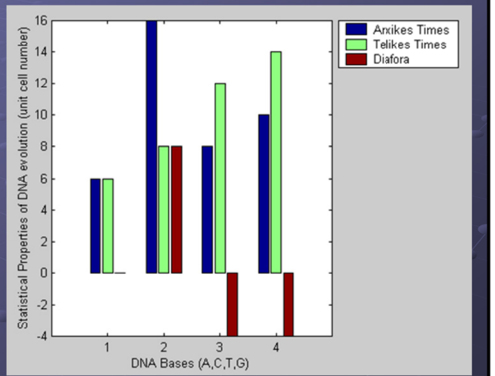
Παράδειγμα χρήσης συστήματος προσομοίωσης της εξέλιξης μίας ακολουθίας DNA (συνέχεια)

Ο αριθμός των κυψελίδων που έχουν την ίδια βάση DNA σε διάφορα χρονικά βήματα.



Παράδειγμα χρήσης συστήματος προσομοίωσης της εξέλιξης μίας ακολουθίας DNA (συνέχεια)

Ο αρχικός και τελικός αριθμός κάθε βάσης καθώς και η διαφορά τους.



Εφαρμογές των Κ.Α. στην Ανίχνευση της εξέλιξης των Ακολουθιών DNA (συνέχεια)

Στα στοιχειώδη Κ.Α., εάν δοθεί μία αρχική και μία τελική κατάσταση μπορεί να καθοριστεί ο κανόνας εξέλιξης που παρήγαγε αυτή την τελική κατάσταση.

Είναι πολύ πιθανό επομένως μια τέτοια μέθοδος να υπάρχει και για τα Κ.Α. που μοντελοποιούν το DNA. Σε αυτήν την περίπτωση εάν δίνεται η εξέλιξη μιας ακολουθίας DNA σε διάφορα χρονικά βήματα, είναι δυνατό να καθοριστεί ο κανόνας εξέλιξης (ή οι κανόνες) που παρήγαγαν αυτή την εξέλιξη.

Στη συνέχεια, δεδομένου ότι ο κανόνας εξέλιξης και η ακολουθία του DNA αυτή τη στιγμή είναι γνωστοί, μπορεί να είναι δυνατό να προβλεφθεί το επόμενο γεγονός εξέλιξης (ή τα γεγονότα) και, επομένως, η ακολουθία DNA στο επόμενο χρονικό βήμα [2].

[2] Ch. Mizas, G. Ch. Sirakoulis, V. Mardiris, I. Karafyllidis, N. Glykos and R. Sandaltzopoulos, "Reconstruction of DNA sequences using Genetic Algorithms and Cellular Automata: towards mutation prediction?," Biosystems, vol. 92, no. 1, pp. 61-68, 2003.

Κανόνας Εξέλιξης Κ.Α. με 4 Καταστάσεις (συνέχεια)

Το Κ.Α. που μοντελοποιεί το DNA είναι ένα Κ.Α. με τέσσερις καταστάσεις (οι τέσσερις βάσεις του DNA: A, C, T και G). Οι μεταβλητές σε κάθε κυψελίδα παίρνουν τις τιμές 0, 1, 2 ή 3, όπου ο κάθε αριθμός αντιστοιχεί σε μία βάση του DNA:

$$A \rightarrow 0 \qquad C \rightarrow 1 \qquad T \rightarrow 2 \qquad G \rightarrow 3$$

Επομένως οι κανόνες εξέλιξης αυτού του Κ.Α. είναι διαφορετικοί σε σχέση με τους κανόνες εξέλιξης ενός Κ.Α. με δύο καταστάσεις. Έτσι ενώ στα κλασικά μονοδιάστατα Κ.Α. δύο καταστάσεων υπάρχουν 2^8= 256 κανόνες εξέλιξης, στο Κ.Α. τεσσάρων καταστάσεων υπάρχουν 2^{64} κανόνες εξέλιξης.

Κανόνας Εξέλιξης Κ.Α. με 4 Καταστάσεις (συνέχεια)

333	...	013	012	011	010	003	002	001	000	Πιθανοί Συνδυασμοί
r_{63}	...	r_7	r_6	r_5	r_4	r_3	r_2	r_1	r_0	Στοιχεία του Κανόνα
2^{63}	...	2^7	2^6	2^5	2^4	2^3	2^2	2^1	2^0	Συντελεστής

Στη 1η γραμμή εμφανίζονται όλες οι πιθανές καταστάσεις της κυψελίδας με τους γείτονές της.
Στη 2η γραμμή εμφανίζονται τα συστατικά στοιχεία του κανόνα, τα οποία παίρνουν τις τιμές 0, 1, 2 και 3.
Στη 3η γραμμή παρουσιάζονται οι συντελεστές που συνδέονται με τα στοιχεία του κανόνα.

Κανόνας Εξέλιξης Κ.Α. με 4 Καταστάσεις (συνέχεια)

Ο κανόνας R ορίζεται ως: $R = (r_0, r_1, r_2, \ldots, r_{63})$

και ο δεκαδικός αριθμός D που αντιστοιχεί στον κανόνα R είναι:

$$D(R) = \sum_{s=0}^{2^{64}-1} r_s 2^s$$

<u>Παράδειγμα</u>

$R = 0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000010230$

Ο δεκαδικός αριθμός που αντιστοιχεί στον κανόνα R:

$$D = 1 * 2^4 + 2 * 2^2 + 3 * 2^1 = 30$$

Παράδειγμα Εξέλιξης Κ.Α. με 4 Καταστάσεις (συνέχεια)

Εξέλιξη ενός μονοδιάστατου Κ.Α. τεσσάρων καταστάσεων 10 κυψελίδων με μηδενικές οριακές συνθήκες .

	r_{63}	r_{62}	r_{61}	…	r_7	r_6	r_5	r_4	r_3	r_2	r_1	r_0
Πιθανοί Συνδυασμοί	333	332	331	...	013	012	011	010	003	002	001	000
Κανόνας	1	0	0	...	0	1	0	1	2	1	1	3

0	0	0	0	1	1	0	0	2	0	Κ.Α. για t=0
3	3	3	1	0	0	0	1	0	0	Κ.Α. για t=1
0	1	0	0	0	3	1	1	0	3	Κ.Α. για t=2
1	1	0	3	0	0	0	0	0	0	Κ.Α. για t=3
0	0	0	0	0	3	3	3	3	3	Κ.Α. για t=4
3	3	3	3	0	0	1	1	1	0	Κ.Α. για t=5

Αλγόριθμος Εύρεσης Κανόνων Εξέλιξης Κ.Α. με 4 Καταστάσεις (συνέχεια)

1. Ορίζεται με τυχαίο τρόπο ένας πληθυσμός P που περιέχει n πιθανές λύσεις, δηλαδή, n κανόνες εξέλιξης Κ.Α. τεσσάρων καταστάσεων.

2. Υπολογίζεται η *συνάρτηση λάθους (error function)* για κάθε πιθανή λύση i:
$$Mer(i) = \sum_{r}^{SET} | y(i,j) - \hat{y}(i,j) |$$

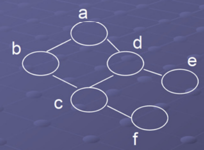
3. Στη συνέχεια οι n πιθανές λύσεις ταξινομούνται σύμφωνα με το αποτέλεσμα *Mer* της συνάρτησης λάθους. Η λύση με την μικρότερη τιμή *Mer* καταλαμβάνει την πρώτη θέση, η λύση με την επόμενη μικρότερη τιμή *Mer* καταλαμβάνει την δεύτερη θέση και ανάλογα ταξινομούνται όλες οι n πιθανές λύσεις. Οι λύσεις με την ίδια τιμή *Mer* καταλαμβάνουν την ίδια θέση.

Αλγόριθμος Εύρεσης Κανόνων Εξέλιξης Κ.Α. με 4 Καταστάσεις (συνέχεια)

4. Υπολογίζεται η *συνάρτηση ευρωστίας (fitness function)* για κάθε λύση i:
$$fit(i) = \frac{MAX(rank(i)) - rank(i)}{MAX(rank(i)) - MIN(rank(i))}$$

Η τιμή της συνάρτησης ευρωστίας καθορίζει τελικά πόσο καλή είναι η προτεινόμενη λύση σχετικά με τις υπόλοιπες λύσεις που απαρτίζουν τον υπό εξέταση πληθυσμό. Κατά συνέπεια, όσο υψηλότερη είναι αυτή η τιμή ευρωστίας ενός ατόμου (λύσης), τόσο μεγαλύτερες είναι οι πιθανότητες για επιβίωση και αναπαραγωγή του εν λόγω ατόμου και τόσο ενισχύεται, τελικά, η παρουσία του ατόμου στη συγκεκριμένη γενιά.

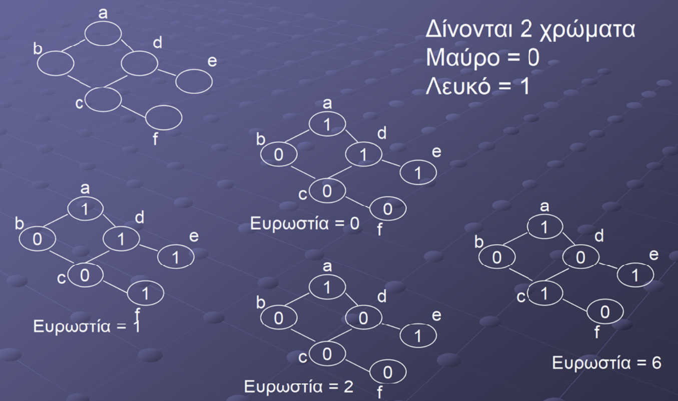
Παράδειγμα: Το πρόβλημα χρωματισμού γράφων



Δεδομένου ενός συνόλου χρωμάτων το πρόβλημα χρωματισμού γράφων (GCP) είναι η προσπάθεια απόδοσης χρώματος σε κάθε κόμβο, με τέτοιο τρόπο ώστε οι γειτονικοί κόμβοι δεν θα έχουν το ίδιο χρώμα.

Εύρεση Λύσης και Ευρωστίας Λύσης

Δίνονται 2 χρώματα
Μαύρο = 0
Λευκό = 1

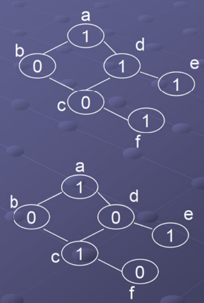


Πρόβλημα Χρωματισμού Γράφων (GCP) συνέχεια…

- Το πρόβλημα GCP φαίνεται αρχικά εξαιρετικά απλό.
- Καθώς το μέγεθος του γράφου μεγαλώνει, το πρόβλημα γίνεται εξαιρετικά δύσκολο.
- Πάρα πολλά διαφορετικά προβλήματα μπορούν να ειδωθούν όπως το GCP.
- Μία πιθανή προσέγγιση επίλυσης του προβλήματος GCP είναι η χρήση Γενετικών Αλγορίθμων (ΓΑ)

Απεικόνιση του Προβλήματος σε ΓΑ

- Η λύση αντιπροσωπεύεται συνήθως από μία ακολουθία δυαδικών ψηφίων (bit string) και αποκαλείται χρωμόσωμα (chromosome).



a	b	c	d	e	f	Ευρωστία
1	0	0	1	1	1	1
1	0	1	0	1	0	6

Διάγραμμα Ροής του ΓΑ

1. Αρχικοποίηση του πληθυσμού προγόνων (parent population)
2. Κατάταξη (Evaluation) βάσει ευρωστίας
3. Επιλογή (Selection)
4. Διασταύρωση (Crossover)
5. Μετάλλαξη (Mutation)
6. Κατάταξη των απογόνων επανάληψη των βημάτων από το 3 και μετά έως ότου ικανοποιηθούν τα κριτήρια τερματισμού του αλγορίθμου.

Αρχικοποίηση του πληθυσμού προγόνων

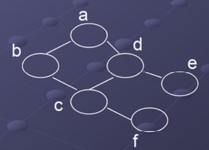
- Παραγωγή ενός *M* αριθμού πιθανών λύσεων που καλείται αρχικός πληθυσμός ή πληθυσμός προγόνων.
- Σημειώνεται ότι όπως τέθηκε και νωρίτερα η επιλογή γίνεται κυρίως τυχαία.

1	0	1	0	0	1
0	0	1	0	1	1
1	0	1	0	1	1
0	1	0	0	1	1

Υπολογισμός Ευρωστίας

- Εύρεση ευρωστίας της κάθε λύσης

Αρχικός Πληθυσμός						Ευρωστία
1	0	1	1	0	1	2
0	0	1	0	1	1	2
1	0	1	0	1	1	4
0	1	0	0	1	1	3



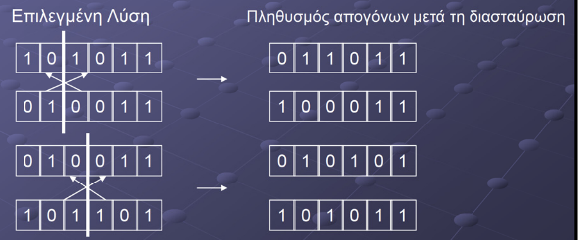
Επιλογή

- Κατά κανόνα οι εύρωστες λύσεις είναι πιθανότερο να επιζήσουν έναντι των λιγότερο εύρωστων ή «κακών» λύσεων που πρόκειται να πεθάνουν.
- Επιλέγουμε κάποια από τα πιο εύρωστα χρωμοσώματα (best fit chromosomes) από τον αρχικό πληθυσμό βάσει κάποιων κριτηρίων επιλογής (π.χ. ελιτιστική στρατηγική επιλογής).

Αρχικός Πληθυσμός						Ευρωστία		Επιλογή					
1	0	1	1	0	1	2		1	0	1	0	1	1
0	0	1	0	1	1	2	→	0	1	0	0	1	1
1	0	1	0	1	1	4		0	1	0	0	1	1
0	1	0	0	1	1	3		1	0	1	1	0	1

Διασταύρωση (Crossover)

- Ανταλλαγή μερών – κομματιών λύσεων μεταξύ επιλεγμένων ζευγαριών λύσεων με κάποια πιθανότητα, σχετικά υψηλή, π.χ. 70%.



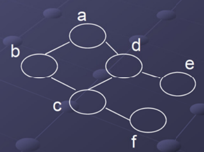
Διασταύρωση (Mutation)

- Αλλαγή της τιμής ενός στοιχείου (allele) του χρωμοσώματος μίας λύσης με κάποια πιθανότητα, πάρα πολύ μικρή, π.χ. 1%.
- Σκοπός της διασταύρωσης είναι η εξερεύνηση νέων σημείων στο διάστημα λύσεων, ή αλλιώς ο απεγκλωβισμός του ΓΑ από κάποιο τοπικό μέγιστο και η ανακατεύθυνση του προς το ολικό μέγιστο.

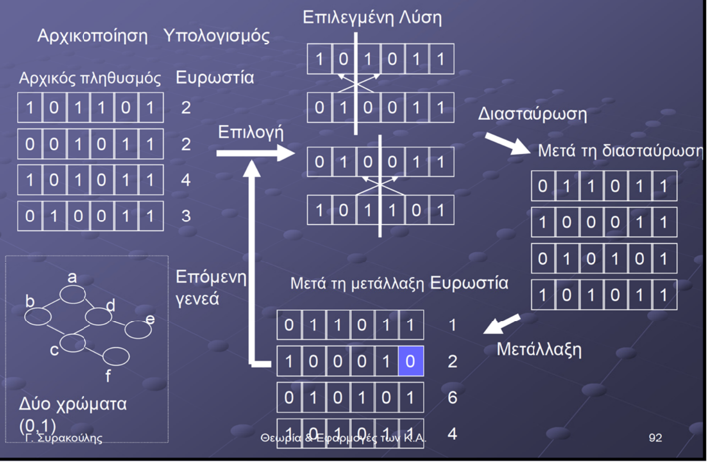
Αντικατάσταση χρωμοσωμάτων στον αρχικό πληθυσμό και επαναληπτικότητα

- Αξιολόγηση – κατάταξη του πληθυσμού των απογόνων και αντικατάσταση του αρχικού πληθυσμού, των προγόνων.
- Ανακατεύθυνση του ΓΑ στο βήμα επιλογής και επανάληψης της όλης διαδικασίας μέχρι να ικανοποιηθούν τα κριτήρια τερματισμού του ΓΑ.
- Κριτήριο τερματισμού του ΓΑ μπορεί να είναι ένας δεδομένος αριθμός επαναλήψεων.

Αντικατεστημένος πληθυσμός	Ευρωστία
0 1 1 0 1 1	1
1 0 0 0 1 0	2
0 1 0 1 0 1	6
1 0 1 0 1 1	4



Τελικό Διάγραμμα Λειτουργίας του ΓΑ



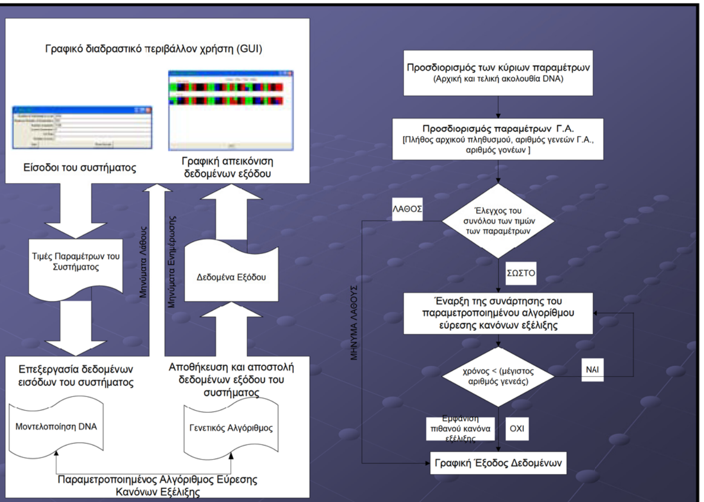
Συμπεράσματα Παραδείγματος

- Στη διεθνή βιβλιογραφία απαντώνται διαφορετικοί τελεστές επιλογής, διασταύρωσης και μετάλλαξης.
- Πάρα πολλοί ΓΑ έχουν σχεδιαστεί για διάφορα προβλήματα.
- Υπάρχει η δυνατότητα επιμιξίας των ΓΑ με άλλες τεχνικές – αλγορίθμους αναζήτησης
- Π.χ. Γενετικοί Αλγόριθμοι Πιθανοκρατικού Μοντέλου [Probabilistic Model Building Genetic Algorithms (PMBGAs)].

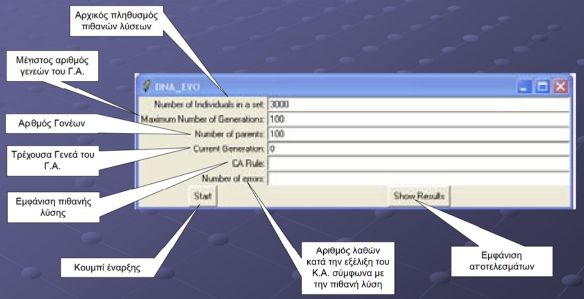
GUI Εύρεσης Κανόνων Εξέλιξης Κ.Α. με 4 Καταστάσεις (συνέχεια)

Βασιζόμενοι στον αλγόριθμο εύρεσης κανόνων μονοδιάστατων Κ.Α. με τη χρήση Γενετικών Αλγορίθμων, αναπτύχθηκε, με τη βοήθεια της γλώσσας προγραμματισμού υψηλού επιπέδου Tcl/Tk, ένα σύστημα, το οποίο ονομάστηκε DNA_EVO.

Το σύστημα αυτό βρίσκει τον κανόνα εξέλιξης του Κ.Α. που μοντελοποιεί μία ακολουθία DNA και την εξέλιξή της. Με τη βοήθεια αυτού του συστήματος εάν δίνεται η κατάσταση μιας ακολουθίας DNA σε διάφορα χρονικά βήματα της εξέλιξής της, είναι δυνατό να καθοριστεί ο κανόνας εξέλιξης (ή οι κανόνες) που την παρήγαγαν. Στη συνέχεια, δεδομένου ότι ο κανόνας εξέλιξης και η ακολουθία του DNA μία δεδομένη χρονική στιγμή είναι γνωστοί, μπορεί να είναι δυνατό να προβλεφθεί το επόμενο γεγονός εξέλιξης (ή τα γεγονότα) και, επομένως, η ακολουθία DNA στο επόμενο χρονικό βήμα.



GUI Εύρεσης Κανόνων Εξέλιξης Κ.Α. με 4 Καταστάσεις (συνέχεια)



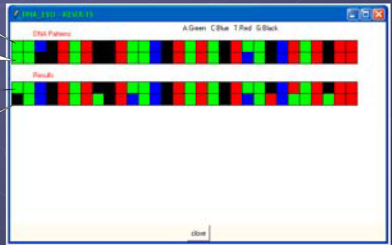
GUI Εύρεσης Κανόνων Εξέλιξης Κ.Α. με 4 Καταστάσεις (συνέχεια)

Αρχική ακολουθία DNA

Τελική ακολουθία DNA

Αρχική ακολουθία DNA

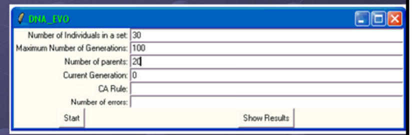
Εξέλιξη της αρχικής ακολουθίας DNA σύμφωνα με τον κανόνα εξέλιξης που προέκυψε ως αποτέλεσμα του συστήματος DNA_EVO



Παράδειγμα GUI Εύρεσης Κανόνων Εξέλιξης Κ.Α. με 4 Καταστάσεις (συνέχεια)

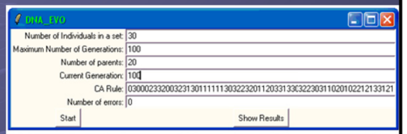
Αρχική ακολουθία DNA	A A C T G A A G C C
Τελική ακολουθία DNA	A G G T G C A G A C

Οθόνη του συστήματος DNA_EVO πριν την έναρξη λειτουργίας.

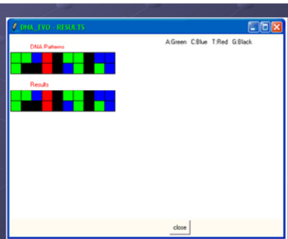


Παράδειγμα GUI Εύρεσης Κανόνων Εξέλιξης Κ.Α. με 4 Καταστάσεις (συνέχεια)

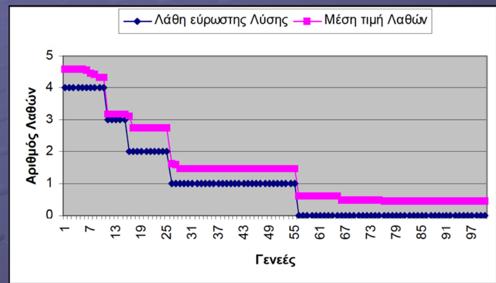
Οθόνη του συστήματος DNA_EVO μετά την εκτέλεση του αλγορίθμου εύρεσης του κανόνα.



Εμφάνιση αρχικής και τελικής ακολουθίας DNA, όπως αυτές δίνονται. Καθώς, επίσης, και εμφάνιση της αρχικής ακολουθίας DNA και η εξέλιξή της σύμφωνα με τον κανόνα που προέκυψε ως αποτέλεσμα του συστήματος DNA_EVO.



Παράδειγμα GUI Εύρεσης Κανόνων Εξέλιξης Κ.Α. με 4 Καταστάσεις (συνέχεια)



Γραφική παράσταση των αποτελεσμάτων του αλγορίθμου εύρεσης για ακολουθία DNA με 10 βάσεις για 100 γενεές.

Ορισμός 2-d Κυψελιδωτών Αυτομάτων

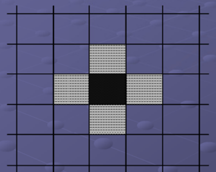
Ένα 2-d Κ.Α. ορίζεται από:

- Μία ***συμμετρική διάταξη κελιών*** που καλύπτει ένα τμήμα ενός 2-διάστατου χώρου.
- Τη **γειτονιά** που περιγράφεται από ένα σύνολο $c(r,t)=\{c_1(r,t), c_2(r,t),\ldots,c_m(r,t)\}$, μεταβλητών Boole, οι οποίες συνδέονται με κάθε θέση της διάταξης και αποδίδουν την τοπική κατάσταση της κάθε κυψελίδας κατά τη χρονική στιγμή t = 0, 1, 2, …
- Έναν ***κανόνα*** $R=\{R_1, R_2, \ldots, R_m\}$ που καθορίζει τη χρονική εξέλιξη των καταστάσεων $c(r,t)$ σύμφωνα με την εξίσωση :
  $$C_j(r,t+1) = R_j(c(r,t), c(r+\delta_1,t), c(r+\delta_2,t) \ldots c(r+\delta_q,t)),$$
  όπου $r + \delta_k$ υποδεικνύει το σύνολο των κυψελίδων που ορίζουν τη γειτονιά της κυψελίδας r.
- ***Ομοιόμορφα Κ.Α.:*** κανόνας ανανέωσης κοινός για όλα τα κελιά.
- ***Μη-ομοιόμορφα Κ.Α.:*** μη – ταυτόσημοι κανόνες ανανέωσης.

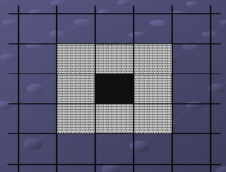
Ορισμός 2-d Κ.Α. (συνέχεια)

- Όπως αναφέρθηκε, στον παραπάνω ορισμό, ο κανόνας R είναι ίδιος για όλες τις κυψελίδες και εφαρμόζεται ταυτόχρονα σε καθεμία από αυτές, συντελώντας έτσι σε ένα σύγχρονο σύστημα.
  - Είναι σημαντικό να σημειωθεί ότι ο κανόνας, όπως περιγράφτηκε παραπάνω, είναι ομογενής, με άλλα λόγια, αυτός δεν εξαρτάται από τη θέση r της κυψελίδας.
  - Ωστόσο, χωρικές, ή ακόμα και προσωρινές, ανομοιογένειες μπορούν να εισαχθούν με την εφαρμογή διαφορετικού κανόνα σε επιλεγμένες κυψελίδες.
- Οι οριακές κυψελίδες (boundary cells) αποτελούν ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα χωρικής ανομοιογένειας.
  - Κατά τον ίδιο τρόπο, είναι εύκολο να επιτυγχάνεται εναλλαγή μεταξύ δύο κανόνων, με τη βοήθεια ενός δυαδικού ψηφίου που ισούται με την μονάδα (1) στα ζυγά χρονικά βήματα και με το μηδέν (0) στα μονά χρονικά βήματα.
- Στον παραπάνω ορισμό, η νέα κατάσταση κατά τη χρονική στιγμή $t+1$ είναι συνάρτηση μόνο της προηγούμενης κατάστασης, κατά τη χρονική στιγμή t.
  - Είναι ωστόσο, ορισμένες φορές, απαραίτητο να υπάρχει μεγαλύτερη μνήμη, ώστε να υπάρξει εξάρτηση και από τις καταστάσεις κατά τις χρονικές στιγμές t-1, t-2, …, t-k.
  - Μία τέτοια περίπτωση συμπεριλαμβάνεται ήδη στον πιο πάνω ορισμό, εφόσον η τιμή της προηγούμενης κατάστασης μεταφέρεται στην παρούσα κατάσταση.

Γειτονιές 2-d Κ.Α.



Γειτονιά Von Neumann



Γειτονιά Moore

$C = (C_{i,j} , C_{i-1,j} , C_{i+1,j} , C_{i,j-1} , C_{i,j+1})$

$C = (C_{i,j} , C_{i-1,j} , C_{i+1,j} , C_{i,j-1} , C_{i,j+1}, C_{i+1,j+1}, C_{i+1,j-1}, C_{i-1,j+1}, C_{i-1,j-1},)$

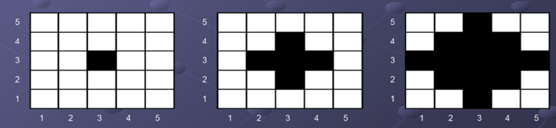
Παράδειγμα Λειτουργίας 2-d Κ. Α.

- Παράδειγμα εφαρμογής του κανόνα OR για την εξέλιξη ενός δισδιάστατου 5×5=25 κυψελίδων Κ.Α. με περιοδικές οριακές συνθήκες.
- Ο τοπικός κανόνας της εξέλιξης του Κ.Α. είναι:

$$C_{i,j}(t+1) = C_{i,j}(t) + C_{i-1,j}(t) + C_{i,j-1}(t) + C_{i,j+1}(t) + C_{i+1,j}(t)$$

$+ \longrightarrow$ *logic OR*

Κυψελίδα με τιμή 1 Κυψελίδα με τιμή 0



Κ.Α. για t=0 Κ.Α. για t=1 Κ.Α. για t=2

Το πιο γνωστό 2-d Κ.Α. – Game of Life

- Το 1970, ο μαθηματικός John Conway[1] πρότεινε το διάσημο, πλέον, Παιχνίδι της Ζωής (Game of Life).
- Θεωρούταν μέχρι το 1990, το πρόγραμμα που είχε «τρέξει» περισσότερες φορές από οποιοδήποτε άλλο, πλην λειτουργικού συστήματος σε όλους τους υπολογιστές του πλανήτη.
- Η δημοτικότητά του μεταξύ των πρώιμων κομπουτεράδων οφειλόταν εν μέρει και στο γεγονός ότι δημοσιεύτηκε στο περιοδικό του Scientific American, στη στήλη του Martin Gardner[2] που ασχολούταν με παιχνίδια και μαθηματικές σπαζοκεφαλιές.
- Σκοπός του ήταν να βρεθεί ένας απλός κανόνας που θα οδηγούσε σε πολύπλοκες συμπεριφορές…

1. http://www.youtube.com/watch?v=FdMzngWchDk
2. Gardner, Martin (October 1970). "Mathematical Games: The fantastic combinations of John Conway's new solitaire game "Life"". *Scientific American* **223**: 120–123.

Μοντελοποίηση Μετάδοσης Επιδημιών με τη χρήση Κ.Α.

Το SIR μοντέλο των Kemack - McKemdrick για την εξάπλωση επιδημιών

$$\dot{S} = -aSI\ ,\quad \dot{I} = aSI - bI\ ,\quad \dot{R} = bI\ .$$

όπου *S* είναι το πλήθος των ατόμων που ανήκουν στην ευπαθή ομάδα (susceptible part), *I* είναι το πλήθος των ατόμων που ανήκουν στη μολυσμένη ομάδα, και *R* είναι το πλήθος των ατόμων που ανήκουν στη θεραπευμένη ομάδα του πληθυσμού, τα οποία έχουν ανοσία για περιορισμένο χρόνο.

Όταν λαμβάνεται υπόψη η περίοδος επώασης της επιδημίας:

$$S(\infty) = S(0)\exp\left(-a\int_0^{\sigma} I_0(u)du - a\sigma[S(0) - S(\infty)]\right)$$

όπου $I_0(t)$ είναι ο αριθμός των αρχικά μολυσμένων ατόμων, που παραμένουν μολυσμένα για χρόνο *t*.

Αλγόριθμος Κ.Α.

Η κατάσταση $C^t_{i,j}$ της κυψελίδας (*i*, *j*) κατά τη χρονική στιγμή *t* είναι:

$$C^t_{i,j} = \left\{P^t_{i,j}, INF^t_{i,j}, IMF^t_{i,j}\right\}$$

όπου $INF^t_{i,j}$ είναι μία σημαία που αποκαλείται σημαία μόλυνσης και υποδηλώνει εάν κάποια από τα άτομα που διαβιώνουν στην κυψελίδα είναι μολυσμένα από την ασθένεια κατά τη χρονική στιγμή *t*. Η χρονική διάρκεια της ασθένειας προσδιορίζεται από το χρήστη και μπορεί να υποτεθεί ότι ισούται με το χρόνο t_{in}. Εάν $INF^t_{i,j}=1$, τότε $P^t_{i,j}$ είναι το κλάσμα του αριθμού των ατόμων στην κυψελίδα (*i*, *j*) που μολύνθηκαν από την ασθένεια, κατά τη χρονική στιγμή *t*, δηλαδή:

$P^t_{i,j} = \frac{S^t_{i,j}}{T^t_{i,t}}$ όπου $S^t_{i,j}$ είναι το μολυσμένο μέρος του πληθυσμού και $T^t_{i,j}$ είναι ο συνολικός πληθυσμός στην κυψελίδα (*i*, *j*), αντίστοιχα. Η παράμετρος $P^t_{i,j}$ μπορεί να πάρει 11 διακριτές τιμές και, πιο συγκεκριμένα:

Αλγόριθμος Κ.Α. (συνέχεια)

$$\text{Αν}\quad 0{,}0 < P^t_{i,j} < 0{,}1\quad ,\quad \text{τότε}\quad P^t_{i,j} = 0{,}1$$

……………………………………………………

$$\text{Αν}\quad 0{,}9 \le P^t_{i,j} \le 1{,}0\quad ,\quad \text{τότε}\quad P^t_{i,j} = 1{,}0$$

Τέλος, η σημαία $IMF^t_{i,j}=1$ αποκαλείται σημαία ανοσίας και δείχνει εάν ο πληθυσμός που εντοπίζεται στην κυψελίδα (*i*, *j*) παρουσιάζει ανοσία στην ασθένεια ή όχι. Η χρονική διάρκεια ανοσίας t_{im} προσδιορίζεται επίσης από το χρήστη.

- Εάν $INF^t_{i,j}=0$ και $IMF^t_{i,j}=0$, τότε ο πληθυσμός στην κυψελίδα (i, j) είναι ευπαθής στην ασθένεια.
- Εάν $INF^t_{i,j}=1$, $IMF^t_{i,j}=0$ και $0<P^t_{i,j}\le 1$, τότε ο πληθυσμός στην κυψελίδα (*i*, *j*) είναι μολυσμένος από την ασθένεια.
- Εάν $INF^t_{i,j}=0$, $IMF^t_{i,j}=1$, τότε ο πληθυσμός στην κυψελίδα (*i*, *j*) έχει ανοσία στην ασθένεια.

$$C^{t+1}{}_{i,j} = C^t{}_{i,j} + F_1\left(C^t{}_{i-1,j}, C^t{}_{i,j-1}, C^t{}_{i,j+1}, C^t{}_{i+1,j}\right)$$
$$+ F_2\left(C^t{}_{i-1,j-1}, C^t{}_{i-1,j+1}, C^t{}_{i+1,j-1}, C^t{}_{i+1,j+1}\right)$$

Ψευδοκώδικας Αλγορίθμου Κ.Α.

1). Έναρξη αλγορίθμου.

2). Θέσε το χρόνο t=1.

3). Διάβασε τις αρχικές ιδιότητες του πληθυσμού.

4). Θέσε το χρόνο t=t+1.

5). Προσδιόρισε ποιες κυψελίδες του Κ.Α. περιλαμβάνουν άτομα που έχουν μολυνθεί, και ποιες κυψελίδες περιλαμβάνουν άτομα που δεν έχουν μολυνθεί, δηλαδή προσδιόρισε τα $INF^t_{i,j}$ και $IMF^t_{i,j}$.

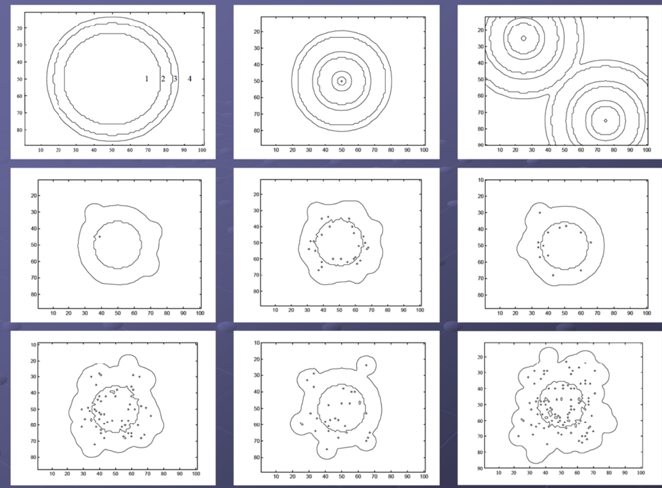
6). Εάν $IMF^t_{i,j}$=1, πήγαινε στο βήμα 8, διαφορετικά πήγαινε στο βήμα 7.

7). Υπολόγισε το ποσοστό των ατόμων κάθε κυψελίδας του Κ.Α. που μολύνθηκαν, με τη χρήση του τοπικού κανόνα.

8). Εάν ο χρόνος t είναι μικρότερος από T_e πήγαινε στο βήμα 4, διαφορετικά να παράγεις την έξοδο.

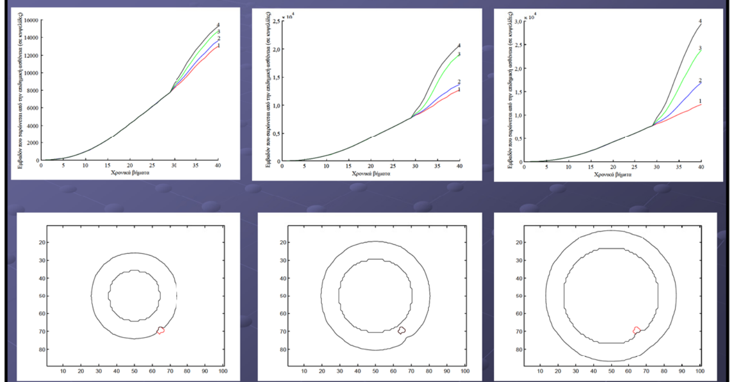
9). Τέλος αλγορίθμου.

1. G. Ch. Sirakoulis, I. Karafyllidis, and A. Thanailakis, "A cellular automaton model for the effect of population movement on epidemic propagation," Ecological Modelling, vol. 133, no. 3, pp. 209-223, 2000



Αποτελέσματα Αλγορίθμου Κ.Α.

(συνέχεια)



Ευχαριστώ πολύ!
Ερωτήσεις;

http://gsirak.ee.duth.gr