Számítási modellek

8. előadás

Membránrendszerek

G. Paun 2000-ben vezette be a később róla elnevezett biológialag inspirált számítási modelljét, a P-rendszereket (membránrendszereket).

Az eukarióta sejtek sejtplazmája több, membránnal határolt sejtalkotót tartalmaz, így belső terekre, ún. régiókra különül. Általánosabban, a többsejtű organizmusok sejtek közötti tere is tekinthető régiónak. A membránok (bizonyos) kémiai molekulák számára átjárhatóak. Az egyes régiókban kémiai reakciók mehetnek végbe, melyek eredményéül kapott (bizonyos) molekulák a régiót határoló membránon áthaladhatnak.

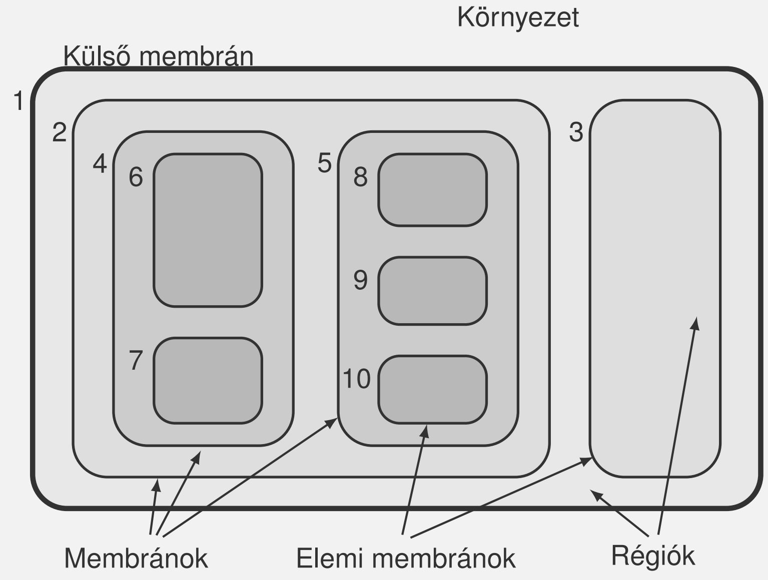
Olyan absztrakt számítási modellt szeretnénk adni, amely alkalmas a molekulák átlal közvetített sejten belüli és sejtközi információáramlás folyamatának jobb megértésére.

Membránrendszerek

A membránrendszerek tehát biokémiai folyamatok alapvető törvényszerűségeit szeretnénk modellezni. Ezek közül néhány:

- Az egyes kémiai reakciókhoz szükséges a reakció bemeneti molekuláinak kellő számú jelenléte a régióban.
- Ha a megfelelő mennyiségű nyersanyag rendelkezésre áll, a reakció (vagy ha több reakció lehetséges, ezek bármelyike) végbe is megy.
- Egyszerre több reakció (és/vagy egy reakció többször) is végbemehet ha van mindhez elegendő nyersanyag.
- Bizonyos reakciókhoz szükséges katalizátor molekulák jelenléte a régióban.
- A sejtmembránok feloldódhatnak, ilyenkor a régió tartalma az őt övező régióba kerül.
- ENéha két reakció közül biokémiai okok miatt mindig az egyik hajtódik végre, holott az erőforrások mindkét reakcióhoz rendelkezésre állnának.

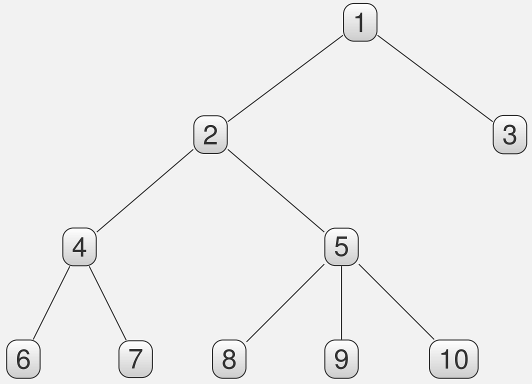
Membránrendszerek



A membránstruktúra: $[_1 [_2 [_4 [_6]_6 [_7]_7]_4 [_5 [_8]_8 [_9]_9 [_{10}]_{10}]_5]_2 [_3]_3]_1$.

Membránrendszerek

A membránok hierarchiáját fa alakban is ábrázolhatjuk.



$[_1\, [_2\, [_4\, [_6\,]_6\, [_7\,]_7\,]_4\, [_5\, [_8\,]_8\, [_9\,]_9\, [_{10}\,]_{10}\,]_5\,]_2\, [_3\,]_3\,]_1$.

Multihalmazok

Definíció

Legyen O egy ábécé. Elemeit **objektumoknak** nevezzük. Egy $M : O \to \mathbb{N}$ leképezést az objektumok egy **multihalmazának** nevezünk. Ha $a \in O$, akkor $M(a)$ az a objektum **multiplicitása**.

Egy multihalmaz üres, ha $\forall a \in O : M(a) = 0$. Egy M multihalmazt egy olyan w szóval reprezentálhatunk, melyre $\forall a \in O : |w|_a = M(a)$. Az üres multihalmazt ε reprezentálja.

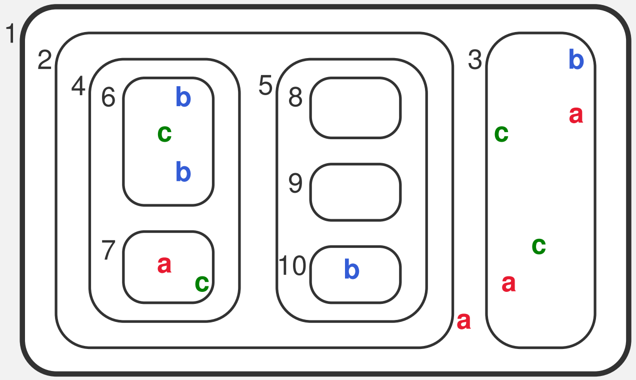
Észrevétel: *aaabab* és a^4b^2 ugyanazt a multihalmazt reprezentálja.

Legyenek $M_1, M_2 : O \to \mathbb{N}$ két multihalmaz, azt mondjuk, hogy $M_1 \subseteq M_2$, ha $\forall a \in O : M_1(a) \leq M_2(a)$. M_1 és M_2 uniója: $\forall a \in O : (M_1 \cup M_2)(a) := M_1(a) + M_2(a)$. Ha $M_1 \subseteq M_2$, akkor M_1 és M_2 különbsége: $\forall a \in O : (M_2 - M_1)(a) := M_2(a) - M_1(a)$.

Példa: $b^4c^2 \subseteq a^3b^5c^3$, de $a^2b \not\subseteq ab^7c^3$.
$b^4c^2 \cup a^3b^5c^3 = a^3b^9c^5$.
$a^3b^5c^3 - b^4c^2 = a^3bc$, viszont $ab^7c^3 - a^2b$ nem értelmezett.

A membránrendszerek konfigurációi

Az egyes régiók objektumok multihalmazait tartalmazhatják.



Az ábrához tartozó konfiguráció:
$[_1\, \mathbf{a}\, [_2\, [_4\, [_6\, \mathbf{bbc}\,]_6\, [_7\, \mathbf{ac}\,]_7\,]_4\, [_5\, [_8\,]_8\, [_9\,]_9\, [_{10}\, \mathbf{b}\,]_{10}\,]_5\,]_2\, [_3\, \mathbf{aabcc}\,]_3\,]_1$.

Vagy $(a, \varepsilon, a^2bc^2, \varepsilon, \varepsilon, b^2c, ac, \varepsilon, \varepsilon, b)$, ahol az i. komponens az i. régió tartalma.

Evolúciós szabályok

Legyenek $\{1, \ldots, m\}$ a régiók címkéi. Minden régióhoz tartoznak $u \to v$ alakú **evolúciós szabályok**, ahol $u \in O^+$ és $v \in (O \times \text{TAR})^*$, ahol TAR=$\{\text{here}, \text{out}\} \cup \{\text{in}_j \mid 1 \leq j \leq m\}$.

Egy $u \to v$ evolúciós szabály akkor alkalmazható, ha az u által reprezentált M_1 multihalmazra és a régió M tartalmára, ha $M_1 \subseteq M$ teljesül. A szabály alkalmazása a következőt jelenti:

- Vegyük azt a konfigurációt, melyre a szabály régiójának tartalma $M - M_1$, a többi régió tartalma változatlan.
- v minden $(a, \text{tar}) \in O \times \text{TAR}$ betűjére adjuk egy a-t
  - tar=here esetén a régióhoz,
  - tar=out esetén a szülő régióhoz (ha gyökér: környezethez),
  - tar=in$_j$ esetén a j címkéjű gyerek régióhoz.

Előfordulhat, hogy in-nek nincs indexe, ilyenkor nemdeterminisztikusan választunk egy gyereket.

Szabálytípusok

A szabályok kompaktabb reprezentációi:

Példa: $a^2b \to (a, \mathrm{in})(a, \mathrm{here})(b, \mathrm{here})(b, \mathrm{here})(a, \mathrm{out})(c, \mathrm{out})$ helyett:

$a^2b \to ab^2(a, \mathrm{in})(ac, \mathrm{out})$ vagy

$a^2b \to ab^2a_{\mathrm{in}}(ac)_{\mathrm{out}}$

Definíció

Egy $u \to v$ szabály **súlya** alatt $|u|$-t értjük.

Az 1 súlyú szabályokat **nemkooperatívaknak**, a legalább kettő súlyú szabályokat **kooperatívnak** hívjuk.

Észrevétel: a szabályok párhuzamos alkalmazása nem okoz konfliktust (amíg a régióban van elég nyersanyag).

Maximális párhuzamosság

A szabályok alkalmazása **maximális párhuzamossággal**, nemdeterminisztikusan történik, ami a következőket jelenti.

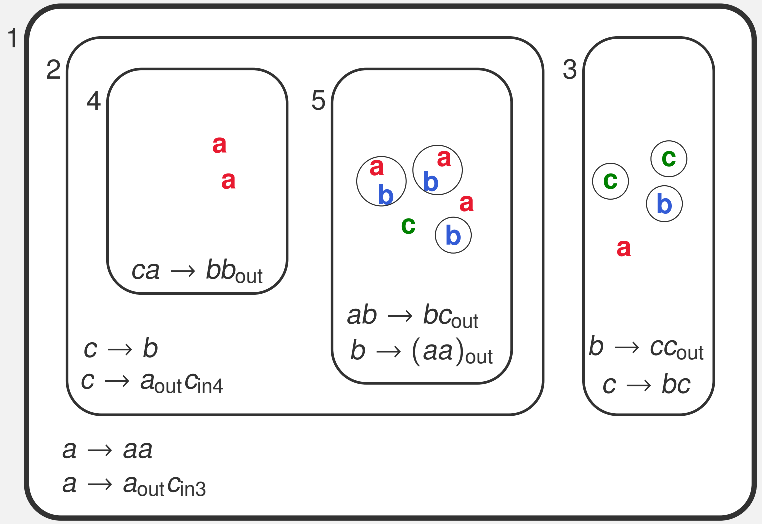
Az evolúció egy lépése alatt azt értjük, hogy minden régióban (nemdeterminisztikusan) kiválasztjuk az adott régióhoz tartozó szabályok egy olyan multihalmazát, hogy a szabálybaloldalok által reprezentált $M_1, \ldots, M_r$ multihalmazokra és a régió M tartalmára a következő két feltétel teljesül:

(1) $\bigcup_{i=1}^{r} M_i \subseteq M$, (azaz a kiválasztott szabályok multihalmaza alkalmazható)

(2) ha M' a régió egy tetszőleges szabályának baloldala által reprezentált multihalmaz, akkor $M' \not\subseteq M - \bigcup_{i=1}^{r} M_i$. (azaz a kiválasztott szabályokon felül további szabály már nem alkalmazható a régióra)

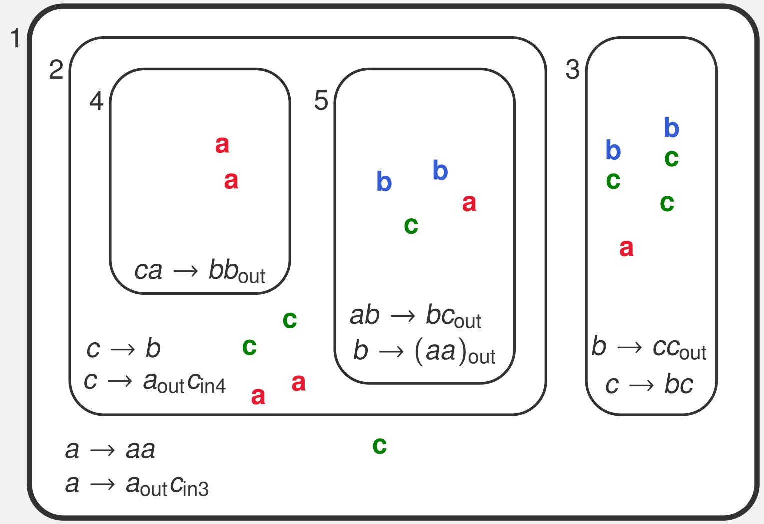
Ezek után minden kiválasztott szabályra párhuzamosan kivonjuk ezen szabályok baloldalát ka megfelelő régiókból, majd a szabályok jobboldalán szereplő objektumokat a szabályok utasítása szerinti megfelelő régiókhoz hozzáadjuk.

Konfigurációátmenet – példa



$(\varepsilon, \varepsilon, abc^2, a^2, a^3b^3c)$

Konfigurációátmenet – példa



$(\varepsilon, \varepsilon, abc^2, a^2, a^3b^3c) \Rightarrow (c, a^2c^2, ab^2c^3, a^2, ab^2c)$

Szimbólum-objektum alapú membránrendszer (P rendszer)

Definíció

A **P-rendszer** egy $\Pi = \langle O, \mu, \omega_1, \ldots, \omega_m, R_1, \ldots, R_m, i_o \rangle$, ahol

- O egy ábécé (elemeit objektumoknak nevezzük).
- μ egy m membránból álló hierarchikus membránstruktúra. A membránok (és így a régiók is) $\{1, 2, \ldots, m\}$ elemeivel injektív módon vannak címkézve. m-et Π *fokának* nevezzük.
- $\omega_1, \ldots, \omega_m$ O feletti multihalmazokat reprezentáló sztringek, ezek rendre az $1, 2, \ldots, m$ címkéjű régióhoz vannak rendelve.
- $R_i, 1 \leq i \leq m$ μ i-edik membránjához rendelt O feletti *evolúciós szabályok* véges halmaza. A szabályok $u \rightarrow v$ alakúak, $u \in O^+$, $v \in (O \times \mathrm{TAR})^*$, ahol $\mathrm{TAR}=\{\mathrm{here}, \mathrm{out}\} \cup \{\mathrm{in}_j \,|\, 1 \leq j \leq m\}$.
- $i_o \in \{1, 2, \ldots, m\}$ egy elemi membrán címkéje (*kimeneti membrán*)

A P-rendszer konfigurációi

$C = (v_1, \ldots v_m)$ a $\Pi = \langle O, \mu, \omega_1, \ldots, \omega_m, R_1, \ldots, R_m, i_o \rangle$ P-rendszer **konfigurációja**, ha $v_i \in O^*$ és v_i az i-edik régióban lévő objektum-multihalmaz sztring reprezentációja.

C **kezdőkonfiguráció**, ha $\forall$ $1 \leq i \leq m$ esetén $v_i = \omega_i$. (Az i-edik régió kezdeti tartalma az ω_i által reprezentált multihalmaz.)

Megállási konfiguráció: Olyan konfiguráció, melyre nem lehet már evolúciós szabályt alkalmazni.

(Egylépéses) **konfigurációátmenet:** $C_1 \Rightarrow_\Pi C_2$, ha C_1-ből egy ütemben megkapható C_2 a fent definiált maximális párhuzamos evolúciós átírással.

A többlépéses **konfigurációátmenet** a szokásos módon definiáluk, a $\Rightarrow_\Pi$ reláció $\Rightarrow_\Pi^*$-al jelölt reflexív tranzitív lezártjaként.

A P-rendszer számításának eredménye

A P-rendszer egy **számítása** alatt egy a kezdőkonfigurációból egy megállási konfigurációba történő (többlépéses) konfigurációátmenet-sorozatot értünk

Észrevétel: A környezetbe kijutó objektumok a további számítások számára elvesznek, mivel a környezetnek nincsenek szabályai.

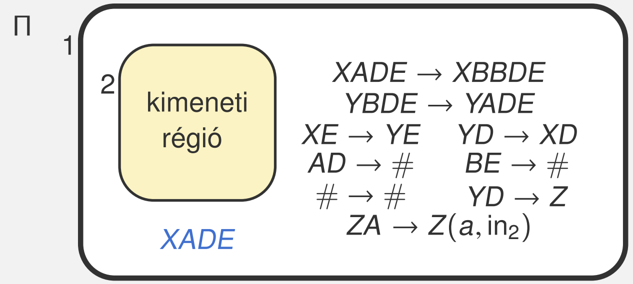
Ha a P-rendszer megállási konfigurációba kerül a **számítás eredménye** a modelltől függően lehet:

- a kimeneti régióban a megálláskor jelen lévő objektumok száma
- a kimeneti régióban a megálláskor jelen lévő objektumok vektora. Ha például $O = \{a, b, c\}$ és 2 a, 5 b és 1 c jutott ki, akkor az eredmény (2,5,1), míg az előbb 8 lett volna.
- a rendszert elhagyó objektumok száma
- a rendszert elhagyó objektumok vektora

A Π által **generált nyelv**: A számítások lehetséges eredményeinek a halmaza. Jelölés: $N(\Pi)$.

A P-rendszer számításának eredménye – példa

Ezt az előadáson rosszul magyaráztam!



A 2-es membrán határolja a kimeneti régiót.

Egy A-ból két A:

$(XADE, \varepsilon) \Rightarrow (XBBDE, \varepsilon) \Rightarrow (YBBDE, \varepsilon) \Rightarrow (YABDE, \varepsilon) \Rightarrow (YAADE, \varepsilon) \Rightarrow (XAADE, \varepsilon)$.

Az A-k megduplázása, majd kiküldésük a 2-es régióba:

$(XA^mDE, \varepsilon) \Rightarrow^* (XB^{2m}DE, \varepsilon) \Rightarrow (YB^{2m}DE, \varepsilon) \Rightarrow^* (YA^{2m}DE, \varepsilon) \Rightarrow (XA^{2m}DE, \varepsilon) \Rightarrow (YA^{2m}DE, \varepsilon) \Rightarrow (ZA^{2m}E, \varepsilon) \Rightarrow^* (ZE, a^{2m})$.

A P-rendszer számításának eredménye – példa

Ezt az előadáson rosszul magyaráztam!

Tehát $N(\Pi) \supseteq \{2^n \mid n \geq 0\}$.

$\#$ egy „csapdajel". Mivel $\#$ egyedül a $\# \to \#$ szabály baloldalán szerepel, ezért $\#$-et ha egyszer behozzuk nem tudunk tőle megszabadulni, ráadásul a $\# \to \#$ szabály végtelen ciklusba küldi a membránrendszert, így ilyen számítási ág nem eredményezhet $N(\Pi)$-beli szót.

Ha az XA^mDE $XB^{2m}DE$-re való átírásánál az $XE \to YE$ szabályt még A jelenlétténél alkalmaznánk, akkor a maximális párhuzamosság elve és az $AD \to \#$ szabály miatt $\#$ bejönne.

Ha az $YB^{2m}DE$ $YA^{2m}DE$-re való átírásánál az $YD \to Z$ szabályt még B jelenléténél alkalmaznánk, akkor a maximális párhuzamosság elve és a $BE \to \#$ szabály miatt $\#$ bejönne.

Tehát csak teljes duplázási ütemek után tudjuk az a-kat 2-be küldeni, így $N(\Pi) \subseteq \{2^n \mid n \geq 0\}$, azaz Π a 2-hatványokat generálja.

Katalitikus P-rendszerek

Definíció

$\Pi = \langle O, K, \mu, \omega_1, \ldots, \omega_m, R_1, \ldots, R_m, i_o \rangle$ **katalitikus P-rendszer** ha

- $\emptyset \neq K \subset O$ az ún. *katalizátorok* halmaza
- $\Pi' := \langle O, \mu, \omega_1, \ldots, \omega_m, R_1, \ldots, R_m, i_o \rangle$ P-rendszer
- Π szabályainak alakja

  (a) vagy $a \to v$ *(nemkooperatív szabályok),*

  (b) vagy $ca \to cv$ *(katalitikus szabályok),*

  ahol $c \in K, a \in O \setminus K, v \in (O \setminus K)^*$.

A P-rendszerek számítási ereje

Definíció

$\mathrm{NOP}_m(\alpha) = \{A \subseteq \mathbb{N} \mid A = N(\Pi)$ valamely Π m-edfokú P-rendszerre α típusú szabályokkal$\}$.

α=ncoo: minden szabály nemkooperatív,

α=cat: a P-rendszer katalitikus

α=coo: kooperatív szabályok is megengedettek,

$\mathrm{NOP}_*(\alpha) := \cup_{m=1}^{\infty} \mathrm{NOP}_m(\alpha)$

A P-rendszerek számítási ereje

Jelölés: Jelölje a NRE, NCS, illetve NCF azon $A \subseteq \mathbb{N}$ számhalmazok osztályát, melyre A rendre RE, CS illetve CF-beli.

Észrevételek:

- $\mathrm{NOP}_m(\alpha) \subseteq \mathrm{NOP}_{m+1}(\alpha)$, minden $\alpha \in \{$coo, ncoo, cat$\}$-ra és $m \geq 1$-re.
- $\mathrm{NOP}_m(\mathrm{ncoo}) \subseteq \mathrm{NOP}_m(\mathrm{cat}) \subseteq \mathrm{NOP}_m(\mathrm{coo})$, minden $m \geq 1$-re.
- $\mathrm{NOP}_*(\mathrm{ncoo}) \subseteq \mathrm{NOP}_*(\mathrm{cat}) \subseteq \mathrm{NOP}_*(\mathrm{coo})$.
- $\mathrm{NOP}_*(\mathrm{coo}) \subseteq \mathrm{NRE}$.

A P-rendszerek számítási ereje

Tétel

NOP$_m(\alpha)$ =NOP$_*(\alpha)$ minden $\alpha \in$ {coo, ncoo, cat}-ra és $m \geq 2$-re.

Bizonyítás: (vázlat)

Legyen $\Pi = \langle O, \mu, \omega_1, \ldots, \omega_m, R_1, \ldots, R_m, i_o \rangle$, ahol $R_i = \{r_{i,1}, \ldots r_{i,t_i}\}$ és ha α =cat, akkor K a katalizátorok halmaza.

Konstruálunk egy $\Pi' = \langle O', [_1 [_{i_o}]_{i_o}]_1, \omega, \omega_{i_o}, R_1', R_{i_o}', i_o \rangle$ 2-fokú P-rendszert (ha α =cat, akkor K' katalizátor halmazzal), melyre $N(\Pi') = N(\Pi)$.

$O' := O \cup \{a_i \mid a \in O, 1 \leq i \leq m\}$

$K' = \{c_i \mid c \in K, 1 \leq i \leq m\}$.

$h_i : O^* \rightarrow (O')^*$ homomorfizmus, melyre $h_i(a) := a_i$ ($a \in O, 1 \leq i \leq m$).

$\omega := h_1(w_1) \cdots h_{i_o-1}(w_{i_o-1}) w_{i_o} h_{i_o+1}(w_{i_o+1}) \cdots h_m(w_m)$.

A P-rendszerek számítási ereje

$R_1' = \{r_{i,j}' : h(u) \rightarrow v' \mid r_{i,j} : u \rightarrow v \in R_i, 1 \leq i \leq m, i \neq i_o\}$, ahol v'-t úgy kapjuk, hogy minden $b \in O$ esetén

- $(b$, here)-t b_i-vel helyettesítjük,
- $(b$, out)-ot b_j-vel helyettesítjük (ahol j közvetlenül tartalmazza i-t),
- $(b$, in$_s$)-t b_s-sel helyettesítjük (kivéve az $s = i_o$ esetet, akkor b-vel).

$R_{i_o}' = \{r_{i_o,j}' : u \rightarrow v' \mid r_{i_o,j} : u \rightarrow v \in R_{i_o}, 1 \leq j \leq t_{i_o}\}$, ahol v'-t úgy kapjuk, hogy

- $(b$, here) változatlan,
- $(b$, out)-ot $(b_j$, out)-tal helyettesítjük, ahol j i_o szülő membránja.

Meggondolható, hogy $N(\Pi') = N(\Pi)$ és nemkooperatív rendszer képe nemkooperatív, katalitikus képe katalitikus.

A P-rendszerek számítási ereje

Tétel

NOP$_*$(ncoo) = NOP$_m$(ncoo) = NCF, minden $m \geq 1$-re.

Tétel

NOP$_*$(coo) = NOP$_m$(coo) = NRE , minden $m \geq 1$-re.

(Bizonyítások nélkül.)

Feloldódás

Megengedünk a szabályok között $a \rightarrow b\delta$ alakú szabályokat, ahol δ egy speciális szimbólum. Ha ilyen szabályt alkalmazunk, akkor a membrán feloldódik, a határolt régió tartalma (a szabályok nem!) a párhuzamos szabályalkalmazások után a szülő régióba kerül.

Ilyenkor i_o nem feltétlenül kell elemi membrán legyen.

Mivel a membránstruktúra változhat, ezért most a konfigurációk első komponense legyen maga az aktuális membránstruktúra, például $([_1 [_4]_4]_1, a^2b, ca)$

Alternatív jelölés: maradjon az eredeti rendezett m-es, ahol m a P-rendszer foka. Az eredeti membránstruktúra hiányzó membránjai helyére írjunk egy speciális szimbólumot, például δ-t.

Feloldásos P-rendszerek számítási ereje

Jelölje $\mathrm{NOP}_m(\alpha, \delta)$ a természetes számok halmazainak családját, amelyeket egy legfeljebb m-edfokú ($m \geq 1$) feloldással kiegészített szimbólum-objektum alapú membránrendszer generál, $\alpha \in \{coo, cat, ncoo\}$ típusú szabályokat használva.

A feloldással kiegészített P-rendszernek megnő a számítási ereje a nemkooperatív esetben.

Tétel

NCF = $\mathrm{NOP}_*(\mathrm{ncoo}) \subset \mathrm{NOP}_2(\mathrm{ncoo},\delta) \subseteq \mathrm{NOP}_*(\mathrm{ncoo},\delta) \subset$ NCS.

(Bizonyítás nélkül.)

P-rendszer prioritással

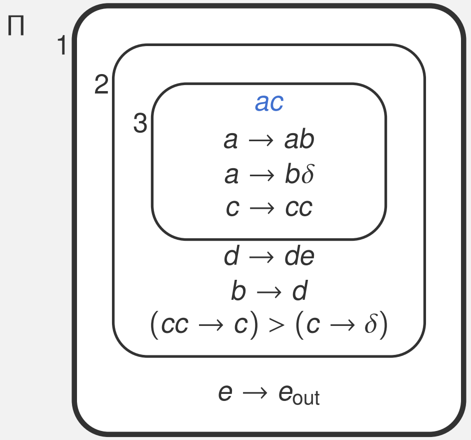
Definíció

$\Pi = \langle O, \mu, \omega_1, \ldots, \omega_m, (R_1, \rho_1), \ldots, (R_m, \rho_m), i_o \rangle$ egy **P-rendszer prioritással**, ha $\langle O, \mu, \omega_1, \ldots, \omega_m, R_1, \ldots, R_m, i_o \rangle$ P-rendszer és ρ_i részbenrendezés R_i-n ($1 \leq i \leq m$).

$(r_1, r_2) \in \rho_i$, helyett gyakran írunk $r_1 < r_2$-t.

A szabályok alkalmazása: Ha $r_1 < r_2$ akkor az r_1 szabály csak olyan esetben alkalmazható, ha r_2 már nem.

P-rendszer feloldódással és prioritással– példa



Négyzetszámokat a környezetbe generáló P-rendszer $N(\Pi) = \{n^2 \mid n \geq 1\}$

$(\varepsilon, \varepsilon, ac) \Rightarrow (\varepsilon, \varepsilon, abc^2) \Rightarrow (\varepsilon, b^2c^4, \ ) \Rightarrow (\varepsilon, d^2c^2, \delta) \Rightarrow$ $(\varepsilon, d^2e^2c, \delta) \Rightarrow (d^2e^4, \delta, \delta) \Rightarrow (d^2, \delta, \delta)$, környezetbe: 4 objektum.

$(\varepsilon, \varepsilon, ac) \Rightarrow (\varepsilon, \varepsilon, abc^2) \Rightarrow (\varepsilon, \varepsilon, ab^2c^4) \Rightarrow (\varepsilon, b^3c^8, \delta) \Rightarrow$ $(\varepsilon, d^3c^4, \delta) \Rightarrow (\varepsilon, d^3e^3c^2, \delta) \Rightarrow (\varepsilon, d^3e^6c, \delta) \Rightarrow (d^3e^9, \delta, \delta) \Rightarrow$ (d^3, δ, δ), környezetbe: 9 objektum.

Prioritásos P-rendszerek számítási ereje

Jelölje $\mathrm{NOP}_m(\alpha, \delta, \mathrm{pri})$ a természetes számok halmazainak családját, amelyeket egy legfeljebb m-edfokú ($m \geq 1$) feloldással és prioritással kiegészített szimbólum-objektum alapú membránrendszer generál, $\alpha \in \{coo, cat, ncoo\}$ típusú szabályokat használva.

Tétel

$\mathrm{NOP}_2(\mathrm{cat}, \mathrm{pri}) =$NRE.

(Bizonyítás nélkül.)