

Önszerveződő rendszerek tanulmányozása a Kauffman-hálózatok segítségével

Szerző:

Deritei Dávid Babeş–Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár, Fizika Kar, Fizika
szak, alapképzés, III. év

Témavezető:

Dr. Lázár Zsolt, egyetemi adjunktus

Babeş–Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár, Fizika Kar

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	8
2. A Kauffman modell	11
2.1. A Kauffman-hálózat felépítése	11
2.2. A Kauffman hálózatok dinamikája	13
2.3. Attraktorok	14
2.4. Különböző sajátos estek	16
2.5. Rendparaméterek	18
2.6. A modell alkalmazásai	19
3. A dinamika analitikus vizsgálata	21
3.1. Adott fokszámú (homogén) Kauffman háló	21
3.2. Változó fokszámú (heterogén) háló	23
3.2.1. Poisson-féle fokszámeloszlás	27
3.2.2. Skálafüggetlen fokszámeloszlás	28
3.3. A függvények és a bemenő fokszám korelálása	30
4. A modell implementációja	32
4.1. Változó fokszámú háló implementációja	33
4.2. A rendparaméterek vizsgálata	34
4.2.1. Hamming távolság	34

4.2.2. Normált átfedés	35
4.3. Az attraktorok hosszának vizsgálata	36
4.4. A frissítés-késleltetés	37
4.4.1. Paraméter mentes fokszám-periódus kapcsolat	38
4.4.2. A véletlenszerű frissítés	41
5. Következtetések	43
6. Kitekintés	45

Kivonat

Kauffman-modell egyszerű matematikai alapokon nyugvó véletlenszerű, bool-féle hálózati modell (másnéven NK hálózat, a két fő paramétere alapján), amelyet elsősorban génszabályozó rendszerek tanulmányozására és evolúcióbiológiai kutatásokban alkalmaztak. Kutatásunk során analitikusan és számítógépes implementációk segítségével is feltérképeztük a Kauffman-hálózatok számos tulajdonságát, és behatóan vizsgáltuk a kritikus viselkedést (átmenet a rendezett és kaotikus dinamika között). Továbbá a szigorú értelemben vett Kauffman által bevezetett rögzített fokszerű (homogén) hálózat helyett heterogén hálózatokat tanulmányoztunk, úgy analitikus megközelítésben, mint számítógépes szimulációk segítségével. Analitikus úton kimutattuk, hogy megfelelő lokális kapcsolatot teremtve a csomópontok dinamikájáért felelős függvény és az illető csomópont fokszáma között a rendszer jó közelítéssel mindig kritikus állapotba kerül, a foksámelosztástól függetlenül. Egy a valós rendszerekre jellemző tulajdonság figyelembevétele alapján egy fejlesztést eszközöltünk, mely szerint az egyidejű léptetés helyett a csomópontokhoz egy-egy saját frissítési periódust rendelünk, amelyet koreláltunk a bemenő foksámmal. Gyakorlatilag a sok bemenettel rendelkező (fontos) csomópontoknak megnöveltük a relatív frissítési frekvenciáját. Egy figyelemreméltó eredmény, hogy az időbeni léptetés során kialakuló csomópontokra vonatkoztatott attraktorok (evolúciós periódusok) hossza átlagban ugyan megnő, a szinkron léptetéshez képest, ugyanarra a hálózatra, azonban a végtelen periódusok száma a kritikus pontokban lecsökken. Azaz a frissítéseknél

kialakított hierarchia egyfajta rendező hatással van a rendszerre.

A dolgozat bevezető fejezetében áttekintem az önszerveződő rendszerek alapvető tulajdonságait és előfordulásait a természetben. Bemutásra kerülnek a Kauffman modellel kapcsolatos legfontosabb tudnivalók. A dolgozat további részeiben kitérek arra, hogy a kritikus viselkedés hogyan nyilvánul meg a Kauffman hálózatok dinamikájában. A következő két fejezetben áthatóan ismertetem a Kauffman hálózatokat, az általam fellelt eddigi kapcsolódó kutatásokat és eredményeket. Továbbá kitérek a modell jelentőségére és néhány alkalmazására. A harmadik részben bemutatom analitikus megközelítésünket, és eredményeinket, majd a negyedik fejezetben saját számítógépes implementációinkat, előnyeiket, hátrányaikat és bizonyos esetekben röviden az algoritmusokat is. Az ötödik fejezetben részletezem a különböző szimulációkkal kapott eredményeket, illetve a Kauffman modell néhány általunk továbbgondolt változatát, és az ezekkel kapott érdekes illetve várt eredményeket. Végül pedig néhány gondolatban kitérek a további, távlati tervekre, amelyeket kitűztünk, majd igyekszem röviden összefoglalni a fő gondolatokat és következtetéseket.

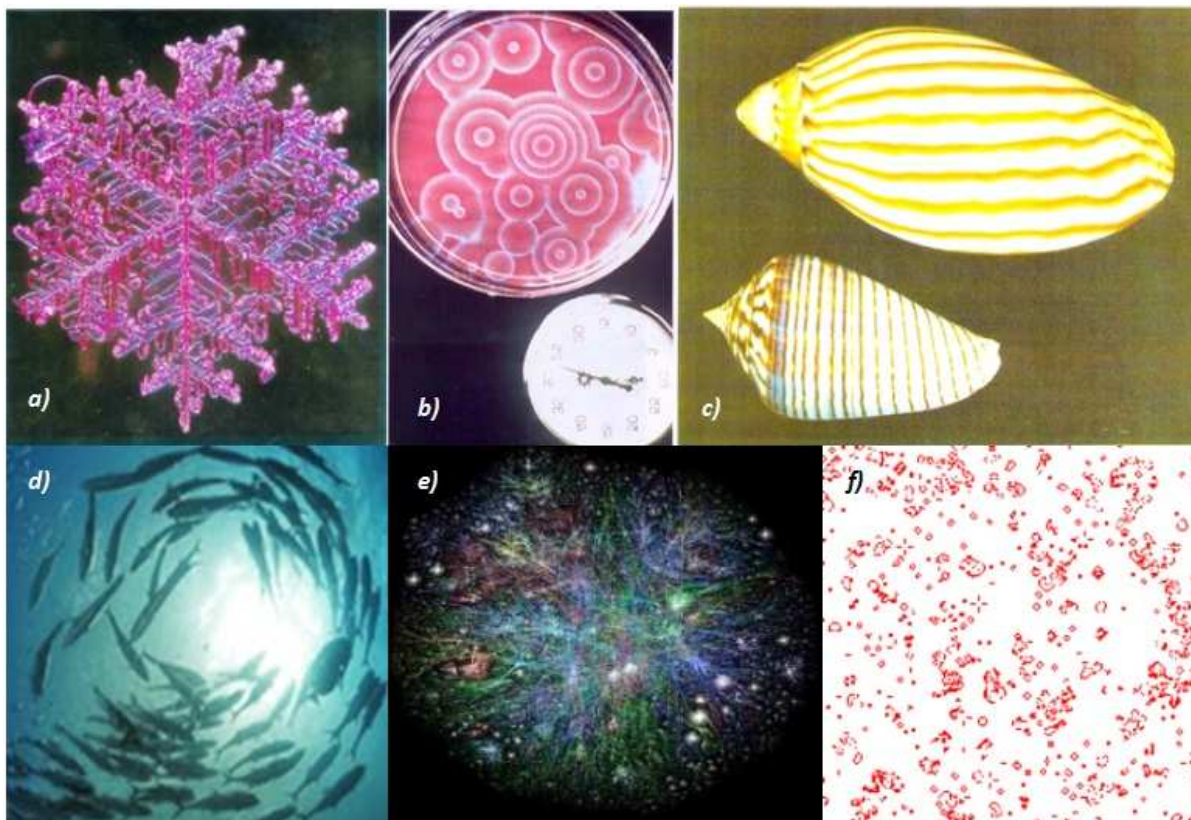
1. fejezet

Bevezetés

Az önszerveződés egy rendkívül gyakori jelenség, amely a nano-struktúráktól kezdve a bonyolult biológiai, szociológiai rendszeken keresztül, egészen a galaxisokig, szinte mindenütt felfedezhető [1]. Több definíciót találhatunk az önszerveződésre, de talán a legpontosabb a következő: *Az önszerveződő rendszerek olyan rendszerek, amelyekben globális szinten valamilyen rend alakul ki kizárólag a rendszert felépítő elemek közötti kölcsönhatás következtében. A kölcsönhatások szabályai csakis a lokális információ felhasználásával működnek, a globális rend befolyása nélkül.*[2] A rend fogalma alatt érthetünk úgy térbeli mint időbeli struktúrák kialakulását, szerveződését. A kialakuló rend a rendszernek egy tulajdonsága, amely minden külső tényező befolyása nélkül jön létre. A dolog szépsége, hogy nagyon egyszerű kölcsönhatási szabályok mellett is kialakul az önszerveződés (látsd: sejtautomaták).

Rengeteg példát találhatunk a tudományterületek széles skáláján, ezek közül néhány szemléletes példa az 1.1 ábrán látható.

Egyes önszerveződő rendszerekre jellemző egy bizonyos kritikus fázis, amely komplex viselkedést eredményez. Ez a komplex viselkedés érdekelt minket is a kutatásunk során. Ezt az átmeneti fázist gyakran nevezik a káosz peremének (Edge of chaos). Ennek egyszerű magyarázata van, mégpedig az, hogy kis változtatással be-



1.1. ábra. a) a hópehely struktúrájának kialakulása b) a Belousov-Zhabotinsky reakció c) a tengeri kagylók mintázata [1] d) halrajok szervezett mozgása e) az internet topológiája f) a Conway féle Game of life sejtautomata [ingyenesen elérhető internetes forrásból]

letolhatjuk a rendszert a kaotikus viselkedésbe, vagy a rendezett, úgymondt fagyott fázisba. Kiváló analógia erre a termodinamikában ismeretes fázisátalakulás, ahol a molekulák a fagyott állapotban rendezett struktúrát vesznek fel, folyékony vagy gáz halmazállapotban pedig kaotikus összevisszaságban mozognak a hőmozgás miatt. A hőmérséklet kis változtatásával bármelyik fázis elérhető. A kritikus fázisban megjelennek a hatványfüggvény eloszlások is.

A dolgozat további részeiben kitérek arra, hogy ez a viselkedés hogyan nyilvánul meg a Kauffman hálózatok dinamikájában. A következő két fejezetben áthatóan ismertetem a Kauffman hálózatokat, az általam fellelt eddigi kapcsolódó kutatásokat és eredményeket. Továbbá kitérek a modell jelentőségére és néhány alkalmazására. A harmadik részben bemutatom analitikus megközelítésünket, és eredményeinket,

majd a negyedik fejezetben saját számítógépes implementációinkatmat, előnyeiket, hátrányaikat és bizonyos esetekben röviden az algoritmusokat is. Az ötödik fejezetben részletezem a különböző szimulációkkal kapott eredményeket, illetve a Kauffman modell néhány általunk továbbgondolt változatát, és az ezekkel kapott érdekes illetve várt eredményeket. Végül pedig néhány gondolatban kitérek a további, távlati tervekre, amelyeket kitűztünk, majd igyekszem röviden összefoglalni a fő gondolatokat és következtetéseket.

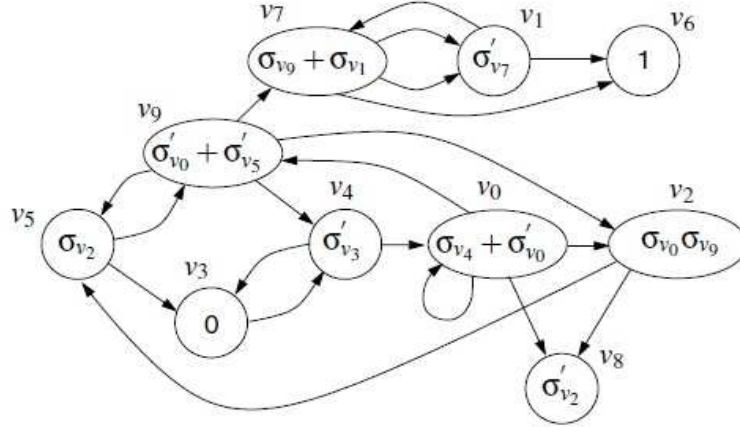
2. fejezet

A Kauffman modell

1969-ben Stuart A. Kauffman biológus alkotta meg a róla elnevezett véletlenszerű bool féle hálózat (másik nevén NK hálózat) elméletét. Az NK hálózatokat biológiai, azon belül többek között genetikai és evolúció-biológiai kutatásokra használta fel. Kauffman meggyőződése, amely a nagy sikerű *The Origins of Order: Self-Organization and Selection in Evolution* című könyvének alaptézise, hogy az evolúció nem csak a Darwin féle természetes szelekció eredménye, hanem nagyrészt az önszerveződésé is [3].

2.1. A Kauffman-hálózat felépítése

A Kauffman hálózat egy bool-hálózat és két fontos paramétere van, N , a hálózatban szereplő csomópontok száma és K , az egy csomópontra jutó bejövő (input) élek száma. Innen az NK hálózat elnevezés. Egy csomópontnak két értéke lehet, 1 vagy 0, és kötelező módon kapcsolódik hozzá (hat rá) K darab másik csomópont, véletlenszerűen kiválasztva. Az egészet jól modellezhetjük egy irányított gráffal. A hálózat időben fejlődik és minden egyes csomópont új értékét a rá ható csomópontok értéke határozza meg egy véletlenszerű függvény szerint. A véletlenszerű függvény, illetve a kapcsolatok időben állandóak minden csomópontnál [4, 5].



2.1. ábra. Példa Kauffman hálózatra: $N = 10$ és $K = 2$ esetre. A ν_i csomópont értéke a $t + 1$ időpillanatban $\sigma_{\nu_i}(t + 1) = f_{\nu_i}(\sigma_{\nu_l}(t), \sigma_{\nu_r}(t))$ ahol ν_l és ν_r a ν_i csomópont bementei (ősei), az f_{ν_i} pedig a ν_i -hez rendelt véletlenszerű függvény [5]

f_{ν_i} , egy adott K esetén, a lehetséges $N_f = 2^{2^K}$ darab függvény bármelyike lehet.

A 2.2 és 2.3 ábra segít megérteni a függvények működését és azt hogy mit értünk lehetséges függvények alatt.

σ_{v_l}	f_{v_1}	f_{v_2}	f_{v_3}	f_{v_4}
0	0	0	1	1
1	0	1	0	1
BE	KI			

2.2. ábra. A $K = 1$ eset függvénytáblázata az összes lehetséges függvénnyel

A csúcsponatok kezdeti értékét is véletlenszerűen generáljuk le. A Kauffman hálózatokat úgy is értelmezhetjük mint egyfajta sejtautomata típus, de belátható, hogy a hálózati felépítés és a nagymértékű véletlenszerűség jóval nagyobb komplexitást eredményez, mint amit az átlag sejtautomatáknál tapasztalunk.

		F		C1				C2								R	
σ_{v_l}	σ_{v_r}	f_{v_1}	f_{v_2}	f_{v_3}	f_{v_4}	f_{v_5}	f_{v_6}	f_{v_7}	f_{v_8}	f_{v_9}	$f_{v_{10}}$	$f_{v_{11}}$	$f_{v_{12}}$	$f_{v_{13}}$	$f_{v_{14}}$	$f_{v_{15}}$	$f_{v_{16}}$
0	0	1	0	0	1	1	0	1	0	0	0	0	1	1	1	1	0
0	1	1	0	0	1	0	1	0	1	0	0	1	0	1	1	0	1
1	0	1	0	1	0	1	0	0	0	1	0	1	1	0	1	0	1
1	1	1	0	1	0	0	1	0	0	0	1	1	1	1	0	1	0
BE		KI															

2.3. ábra. A $K = 2$ eset függvénytáblázata a 16 lehetséges függvénnel, négy kategóriába osztályozva, a dinamikára való befolyásuk szerint

2.2. A Kauffman hálózatok dinamikája

Most, hogy felépítettük a hálózatunkat, vizsgáljuk meg hogyan viselkedik ha időben evoluáltatjuk a csomópontok értékeit. A hálózatot párhuzamos frissítéssel léptetjük a 2.1 ábrán megadott képlet szerint. Egy léptetés számít egy időegységnek. Szigorúan véve, könnyen belátható, hogy a rendszer $\Omega = 2^N$ lehetséges állapotba kerülhet (az állapottér nagysága), ami nagy rendszereknél egy gigantikus szám. Viszont meg látjuk, hogy a rendszer a különböző K értékekre különbözőképpen fog viselkedni és távolról sem veszi fel az összes lehetséges állapotot.

A különböző függvények befolyása a dinamikára

Értelemszerű, hogy a csúcspontokhoz rendelt függvények közvetlenül befolyásolják a dinamikát. Röviden vizsgáljuk meg, hogy hogyan tudjuk a dinamikára történő befolyásuk szerint osztályozni a különböző függvényeket. Ez azért fontos, mert a komplex viselkedés kialakításában csak bizonyos függvények játszanak szerepet. Konkrétan a $K = 2$ esetet fogjuk megvizsgálni de a logika alkalmazható a többi esetre is. A 2.3 ábrán látható függvénytáblázatban már kategorizáltuk a függvényeket négy csoportba. Az első kategória az F azaz a „fagyott”. Ezeknél az bemenő adattól függetlenül a kimenő adat mindig ugyanaz. A C_1 osztály tartalmazza azokat a függ-

vényeket, amelyeknél a kimenő adat gyakorlatilag csak egyik argumentumtól függ, a másiktól nem. A C_2 tartalmazza a maradék irányító (canalizing) függvényeket, amelyeknél a bemenő adatoknak egy állapota rögzíti a kimenő adatot. Az utolsó R osztály tartalmazza a két reverzibilis frissítési függvényt, amelyeknél a kimenet mindig változik ha egyike a bemenő adatoknak változik. Ezek az úgynevezett releváns függvények. Az F osztályba tartozó függvényekkel rendelkező csomópontok, azok csomópontok amelyeknek mindkét bemenete fagyott, illetve azok amelyek a C_1 vagy C_2 kategóriába tartoznak és a megfelelő bemenetük szintén fagyott alakítják ki a hálózat fagyott magját. Ez a mag nem befolyásolja a dinamikát. Egy definíció szerint az a rendszer tekinthető kritikusnak, amelyben egy változtatás átlagosan egy csúcspontnyit terjed [6]. Ha megnézzük ezt a függvények szempontjából, belátható hogy egy perturbáció ha egy F -es függvényű csomóponthoz érkezik a továbbterjedés esélye 0, egy C -s függvényű csomópontnál $1/2$, míg egy releváns függvényűnél egységnyi. Fontos itt megemlíteni, hogy vannak olyan Kauffman hálózatok, ahol a különböző függvényeknek a hálózat létrehozásánál különböző a valószínűségük. Ezeknél a rendszereknél a K kritikus értéke is eltolódik. Ha úgy választjuk ki a függvényeket, hogy p és $1 - p$ valószínűséggel térítenek vissza 1-est vagy 0-ást a K kritikus értéke [5]:

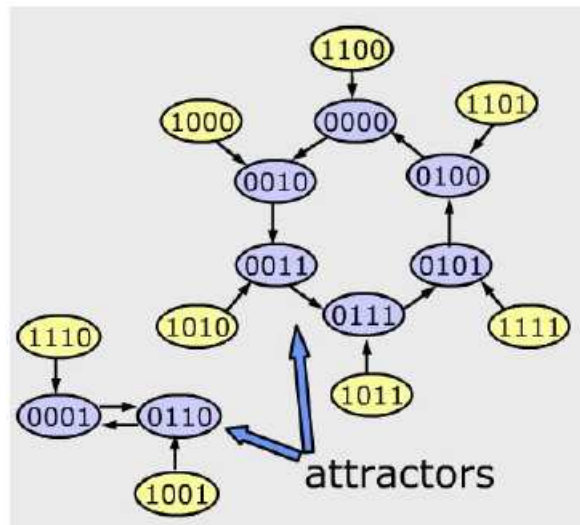
$$K_c = \frac{1}{2p(1-p)} \quad (2.1)$$

Mi egyelőre csak azokkal a rendszerekkel foglalkozunk, amelyeknél minden lehetséges függvénynek azonos a valószínűsége. Ez azt jelenti hogy a $p = 0,5$, ha ezt behelyettesítjük a fenti egyenletbe $K_c = 2$ -t kapunk.

2.3. Attraktorok

Ahhoz hogy a dinamikát tanulmányozzuk érdemes előbb tisztázni az attraktorok fogalmát. Az attraktort értelemezhetjük mint egy a rendszer által preferált állapot-

halmaza a fázistérnek, amelybe idővel bekonvergál, és külső hatás hiányában ott is marad. Többféle attraktort értelmezhetünk, ezeket egyszerű példákkal nagyon jól lehet érzékeltetni. Beszélhetünk *pontszerű* attraktorról (pl. egy tál alján megálló golyó), *ciklikus* attraktorokról (pl. az égitestek pályája), vagy *kaotikus* attraktorokról, amelyek kaotikusan bolyongnak a fázistérben egy végtelen sorozatot képeznek (ún. strange attractor). A Kauffman hálózatok esetén is találkozunk mindhárom attraktor típussal. Az 2.4 ábra szemléletesen mutatja hogyan konvergálhat bele a rendszer különböző attraktorokba. Vigyázzunk az ábra értelmezésénél, ez nem a hálózati topológia, hanem 4 csúcspont időbeli evolúciójának a különböző fázisai (Állapot Átmeneti Gráf).



2.4. ábra. Példa *Állapot Átmeneti Gráfra*, avagy STG -re (State Transition Graph). Látható hogy itt $N = 4$, ami $\Omega = 2^4 = 16$ lehetséges állapotot jelent. Az ábrán látható rendszer két, egy hat meg egy két állapotú attraktorral rendelkezik. Nagy rendszereknél lehetetlen ilyen teljességgel kielemezni az állapotteret [5].

A különböző rendszereknek különböző számú, típusú és hosszúságú attraktora lehet. Ezekkel számos tanulmány és cikk foglalkozik, néhányat érinteni fogunk a teljesség igénye nélkül. Az attraktorok jelentőségével és tulajdonságaival a továbbiakban még sokat foglalkozunk.

2.4. Különböző sajátos estek

A Kauffman háló a K foksám függvényében minőségileg különböző dinamikát mutat. Vizsgáljuk meg ezt a viselkedést a különböző bemenő foksám értékekre.

$K = 0$ eset

A legtriviálisabb rendszer, nincsenek kapcsolatok, így nincsen evolúció sem, a rendszer a kezdeti állapotában marad (ún. globális optimumban). Ez az abszolút fagyott állapot, a perturbációkra a lehető legkevésbé érzékeny. Ha visszatérünk a termodinamikai analógiánkhoz, ez felelne meg az abszolút 0 hőmérsékletnek.

$K = 1$ eset

A viselkedés már valamivel bonyolultabb, kialakulhatnak kisebb ciklikusságok, de az attraktorok jellemzően rövidek (lásd 2.5 ábra). Az attraktorok számának átlagértéke az N -el exponenciálisan nő. A rendszer már valamivel érzékenyebb a perturbációkra és könnyen vált az attraktorok között.

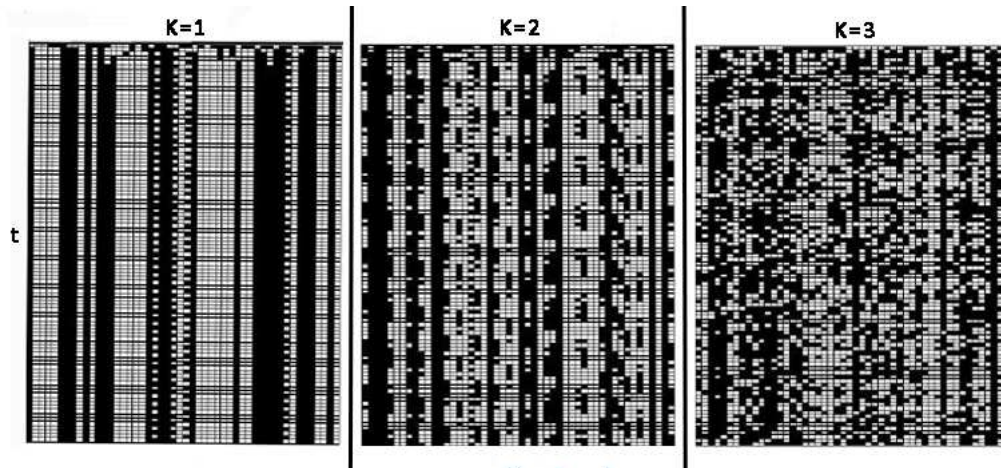
$K = 2$ eset

A legtöbbet tanulmányozott és vitatott eset, mivel ennél a K értéknél jelentkezik a kritikus fázis és itt jelenik meg a komplex viselkedés. Egyes kutatások szerint a rendszerben kialakuló attraktok hosszának és számának az átlagértéke $\sqrt{N}$ -el arányos [7, 4]. Nagyon vonzó analógiának bizonyult, hogy a természetben létrejövő fázisátalakulásoknál jellemző hatványfüggvények itt is megjelennek. Azonban több probléma is felmerül. Ahhoz hogy relevánsak legyenek a hatványfüggvényeket igazoló numerikus vagy szimulációs mérések, nagy rendszerekkel kell dolgoznunk. Mivel azonban az állapotter mérete az N -el exponenciálisan nő $\Omega = 2^N$ lehetetlen az egész állapotteret feltérképezni és pontos eredményekkel szolgálni az attraktorok méreté-

vel és számával kapcsolatosan. Több módszert dolgoztak ki a probléma orvoslására, de egyik se problémamentes. Azonban a legtöbb (köztük, amint később látni fogjuk, a saját eredményeink is) az előző $\sqrt{N}$ -el arányos növekedést cáfolja, és arra következtet, hogy a növekedés szuprapolinomiális [8, 9]. Ellenben egyes biológiai rendszereknél, amelyeknél a modellt alkalmazzák a $\sqrt{N}$ -es növekedés érvényesnek bizonyult, ezt az alkalmazásoknál látni fogjuk. Magyarázat lehet, hogy a biológiai (genetikai vagy hormonális) rendszerek általában maximum tízezres nagyságrendűek [4].

$K \geq 3$ eset

Kutatásunk során tapasztaltunk alacsony K -ra jellemző viselkedést is ezekben az esetekben, de ennek elég kicsi a valószínűsége. A rendszer jellemzően kaotikusan viselkedik, az attraktorok méretei elszállnak, gyakorlatilag lehetetlen megmérni őket, továbbá a bevezett rendparaméterek is igazolják a kiszámíthatatlan viselkedést (ezt később kísérletileg is igazoljuk).



2.5. ábra. Három $N = 50$ elemű rendszer időbeli evolúciója $K = 1$, $K = 2$ és $K = 3$ esetén (balról jobbra haladva). A $K = 1$ esetén látható, hogy nagyon hamar bekonvergál az attraktorba, és néhány apró ciklikusságot leszámítva pontszerű (szubkritikus). A $K = 2$ átmentet a másik két eset között (kritikus), míg a $K = 3$ érzékelhetően kaotikus (szuprakritikus).

2.5. Rendparaméterek

Két különböző időfüggő rendparaméterrel foglalkoztunk. Az egyik a D -vel jelölt, úgynevezett **Hamming távolság**, amely a „távolságot” méri meg két időlépés között. Lényegében végigmegyünk a két különböző állapotban az összes csúcsponton és ha az értékük különbözik, egyet növeljük a D paramétert. Matematikailag ez a következőképpen néz ki:

$$D(t) = \sum_{i=1}^N (\sigma_i(t) - \sigma_i(t'))^2 \quad (2.2)$$

Pl. Ha adott három különböző állapota egy négy elemű rendszernek,

$$\Sigma_1 = \{1, 0, 0, 1\}; \Sigma_2 = \{0, 1, 1, 0\}; \Sigma_3 = \{1, 0, 1, 1\}$$

akkor a távolság Σ_1 és Σ_2 között 4, míg Σ_1 és Σ_3 között 1.

Kutatások azt igazolták, hogy a

$$D(t) \approx D(0)e^{\alpha t}, \quad (2.3)$$

ahol $D(0)$ az kezdeti Hamming távolság és az α az úgynevezett *Lyapunov exponens*.

Kaotikus fázisban $\alpha > 0$, azaz a távolság exponenciálisan nő, a fagyott fázisban

$\alpha < 0$, azaz a távolság hamar lecseng. Kritikus fázisban $\alpha = 0$ és a

$$D(t) \sim t^\gamma, \quad (2.4)$$

azaz valamilyen hatványfüggvénynek engedelmeskedik [4].

A másik rendparaméter az úgynevezett **normált átfedés** (normalised overlap). Ez a paraméter összefüggésben van a Hamming távolsággal és egy 0 és 1 közötti számot

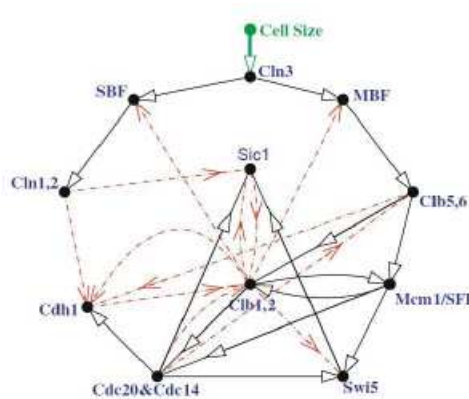
ad meg. Az

$$a(t) = 1 - \frac{D(t)}{N} \quad (2.5)$$

összefüggéssel számíthatjuk ki egy időlépésre, és ez tulajdonképpen azt adja meg, hogy a két összehasonlított állapotban mekkora annak a valószínűsége, hogy egy csúcspont értéke a két állapotban megegyezik [4].

2.6. A modell alkalmazásai

A modellt elsősorban génszabályozó hálózatok tanulmányozására használják. A biológusok felfedezték hogy egy adott génállományban csak a gének egy bizonyos százaléka aktív, és a különböző sejt-típusokat az különbözteti meg egymástól, hogy a génállomány mely génjei aktívak [10]. Ha ezt összegyeztetjük a modellel, akkor a csomópontok a génállomány génjeinek felelnek meg. Ha a Kauffman-háló statisztikai sajátosságait nézzük érdekes egyezéseket találunk a valósággal. Az attraktorok száma a különböző sejt típusoknak felel meg, illetve az attraktorok hossza a sejt életciklusával egyeztethető össze. Érdekes hogy a korábban említett $\sqrt{N}$ -es tendencia itt jó összeegyeztethetőséget mutat a valósággal [7].



2.6. ábra. Az élesztő-sejt osztódásáért felelős $N=11$ protein hálózata. A G1 fázisban a Cln3 protein inaktív, mikor viszont a sejt elég nagyra nő, aktiválódik és beindítja az osztódást [4]

Egy egyszerű példa az 2.6 ábrán látható élesztő sejtjének ciklusa:

Minden sejtnek két dolga van: túlélni és szaporodni. Egy sejt, ha túl nagyra nő, az osztódás veszi kezdetét. A folyamat több különböző fázison megy keresztül:

$$G_1 \rightarrow S \rightarrow G_2 \rightarrow M \rightarrow G_1$$

A G_1 a sejt „alapállapota”, az osztódás pedig az M fázisban következik be. A különböző fázisokban különböző proteinek aktívak. Fontos megjegyezni, hogy az összes eukarióta sejtnek hasonló az osztódási ciklusa. Az élesztő-sejtben lévő kb. 800 génből csak 11 felelős az osztódási folyamatért. Ha az inaktív magot nem vesszük figyelembe egy 11 csomópontos hálózatot kapunk, amely 7 attraktorral rendelkezik. A domináns attraktor medencéje 1764 állapotot tartalmaz (a teljes állapottér 72%-át). Figyelemre méltó hogy a domináns attraktor pontosan egyezik a kísérileg meghatározott G_1 alapállapot ciklus állapotaival. A dinamika gyönyörűen visszatér az osztódás mechanizmusát is. A hálózat nem szigorú értelemben vett Kauffman-hálózat, de átlagolva a bemenő kapcsolatok számát a $\langle K \rangle \approx 2.46$ eredményt kapták, ami közel áll a kritikus értékhez [4, 11]. A sejtosztódás az élet egyik legalapvetőbb építőköve, és nem légből kapott spekuláció azt kijelenteni, hogy az adaptív komplex hálózatok képezik az élet kialakulásának a magját. Az attraktorok *stabilitása* és válasza különböző perturbációkra is egy nagyon széles körben vizsgált téma. Különböző perturbációk alatt érthetjük egy csúcspont értékének, egy függvénynek, vagy egy élnek a megváltoztatását. Ez fontos, mert jól összeegyeztethető a sejt érzékenységevel a mutációkra, sérülésekre, esetleg vírus-támadásokra, azaz jó analógiaként viselkedik az *immunitásra* [12]. További alkalmazás bizonyos neurális hálózatok jelfeldolgozásának a vizsgálata a modell segítségével [4]. Emellett a modell használatos az evolúció-biológiában a populációk vizsgálatánál [13], és statisztikus fizikusok már spin-üvegek tanulmányozására is alkalmazták [14].

3. fejezet

A dinamika analitikus vizsgálata

Vizsgáljuk meg analitikusan, milyen szabályok alakítják a Kauffman hálók dinamikáját.

3.1. Adott foksámú (homogén) Kauffman háló

Az alábbiakban bemutatott levezetéshez hasonló módszer megtalálható a [15]-ben. Egy K -paraméterű Kauffman-háló minden csomópontjának K bemenetele van. Belátható, hogy K darab bemenet bármelyikének a változását úgy is értelmezhetjük, hogy a függvénytáblázatban a sorok páronként helyet cserélnek (lásd 2.3 ábra). A kimenet változásának a valószínűsége megegyezik a sorcserének betudható 1-0, 0-1 változások valószínűségével. Jelöljük ezt a valószínűséget Q -val. Amennyiben a két bináris érték azonos valószínűséggel jelenik meg a függvénytáblázatban, akkor a 0-0, 1-1, 0-1 és 1-0 típusú párosítások egyformán valószínűek így a Q értéke $1/2$. Amennyiben a két érték előfordulási valószínűségei q illetve $1 - q$ a változás valószínűsége a $Q = 2q(1 - q)$ (lásd a két állapotú urnamodellben a Bernoulli-eloszlást)

Ezek szerint, ha *bármilyen változás történik a bemenetben, a kimenet Q valószínűséggel megváltozik.*

p -vel és p' -vel jelölve a régi illetve új változási valószínűségeket (két egymásutáni idő-

lépés valószínűségei), és felhasználva, hogy annak valószínűsége, hogy egy bemenet se változzon meg $(1 - p)^K$, belátható, hogy:

$$p' = Q [1 - (1 - p)^K] . \quad (3.1)$$

Jelöljük $\tilde{p}$ -vel az aszimptotikusan elért, állandósult, egyensúlyi változasi valószínűséget, melyet a

$$Q(1 - \tilde{p})^K + \tilde{p} - Q = 0$$

egyenlet gyökeként kapunk meg.

Fagyott állapotban ez nulla, kaotikus dinamika esetén egy véges érték.

$$K=0 \quad \tilde{p} = 0$$

$$K=1 \quad \tilde{p} = 0$$

$$K=2 \quad \tilde{p} = \frac{2Q - 1}{Q}; \tilde{p} = 0$$

$$K=3 \quad \tilde{p} = \frac{3Q \mp \sqrt{Q(-3Q + 4)}}{2Q}; \tilde{p} = 0$$

Annak feltétele, hogy $\tilde{p} \rightarrow 0$:

$$K = K_c = \frac{1}{Q} . \quad (3.2)$$

Vizsgáljuk az időfejlődését a p valószínűségnek $p \ll 1$ érték környékén. A (3.1)-ből, (3.2) felhasználásával:

$$\frac{\Delta p}{p} = \frac{K - K_c}{K_c} + \frac{K(K - 1)}{2K_c} p + \mathcal{O}(p^2) , \quad \Delta p \equiv p' - p .$$

Ennek alapján, ha

$K < K_c$ exponenciális csökkenés a fagyott állapot felé $\rightarrow$ rendezett fázis

$K > K_c$ exponenciális növekedés egy véges érték felé $\rightarrow$ kaotikus fázis

$K = K_c$ polinomiális időfejlődés $\rightarrow$ kritikus állapot

3.2. Változó fokszámú (heterogén) háló

Vizsgáljuk meg hasonló módszerrel a dinamikát, azzal kibővítve, hogy a klasszikus rögzített fokszámeloszlás helyett egy általános f_k eloszlás szerint generált bemenő fokszámú hálózatot tekintünk.

Vizsgáljuk annak a valószínűségét, hogy a hálózatomban egy csomópontja vált. Legyen V esemény a váltás, és K esemény az, hogy a csomópontomnak pontosan K darab bemenete van. A Bayes képlet alapján:

$$p(V) = \sum_{K=0}^{\infty} p(V \cdot K) = \sum_{K=0}^{\infty} p(V|K)p(K), \quad (3.3)$$

ahol $p(V|K)$ annak a valószínűsége, hogy a csomópontom vált, ha pontosan K bemenete van.

Legyen az $(n_0, n_1, n_2, \dots, n_k, \dots)$ esemény az, hogy a K darab bemenet (bemeneti csomópontok, ősök) közül n_0 darabnak 0, n_1 darabnak 1, n_k darabnak k a bemenő fokszáma. Ezekre igaz, hogy

$$\sum_{k=0}^{\infty} n_k = K .$$

Így felírhatjuk, hogy:

$$p(V|K) = \sum_{n_0, n_1, n_2, \dots, n_k, \dots}^K \frac{p(V \cdot K \cdot (n_0, n_1, n_2, \dots, n_k, \dots))}{p(K)} \quad (3.4)$$

$$= \sum_{n_0, n_1, \dots, n_\infty}^K \frac{p(V|K \cdot (n_0, n_1, n_2, \dots, n_k, \dots))p(K \cdot (n_0, n_1, n_2, \dots, n_k, \dots))}{p(K)} \quad (3.5)$$

$$= \sum_{n_0, n_1, n_2, \dots, n_k, \dots}^K p(V \cdot K \cdot (n_0, n_1, n_2, \dots, n_k, \dots))p((n_0, n_1, n_2, \dots, n_k, \dots)|K) \quad (3.6)$$

ahol $p(V \cdot K \cdot (n_0, n_1, n_2, \dots, n_k, \dots))$ annak a valószínűsége, hogy a csomópontom vált, amennyiben olyan K bemente van, amelyekre teljesül az $(n_0, n_1, n_2, \dots, n_k, \dots)$ kiosztás. Vizsgáljuk meg ezt a valószínűséget, a bementetek viselkedését tanulmányozva (analóg módon az adott fokszámú Kauffman hálóval). Annak a valószínűsége, hogy a k fokszámú bemenetek közül egyik sem vált

$$(1 - p(V|k))^{n_k},$$

így annak a valószínűsége, hogy egyik sem vált a K bemenet közül

$$\prod_k^K (1 - p(V|k))^{n_k}.$$

Innen annak a valószínűsége, hogy csomópontom vált, ha bármelyik a bemenetek közül vált:

$$p(V \cdot K \cdot (n_0, n_1, n_2, \dots, n_k, \dots)) = Q[1 - \prod_k (1 - p(V|k))^{n_k}] \quad (3.7)$$

Továbbá:

$$p((n_0, n_1, n_2, \dots, n_k, \dots)|K) = K! \prod_k \frac{f_k^{n_k}}{n_k!} \quad (3.8)$$

A (3.7)-et és a (3.8)-t visszahelyettesítve a (3.6) egyenletbe

$$p(V|K) = \sum_{n_0, n_1, \dots, n_\infty}^K Q \left[1 - \prod_k (1 - p(V|k))^{n_k} \right] K! \prod_k \frac{f_k^{n_k}}{n_k!} \quad (3.9)$$

$$= Q \left\{ \sum_{n_0, n_1, n_2, \dots, n_k, \dots}^K K! \prod_k \frac{f_k^{n_k}}{n_k!} - \sum_{n_0, n_1, n_2, \dots, n_k, \dots}^K \prod_k \left[\frac{(1 - p(V|k)f_k)^{n_k}}{n_k!} \right] \right\} \quad (3.10)$$

Felhasználva a statisztikus fizikából ismert $K! \sum_{n_0, n_1, n_2, \dots, n_k, \dots} \prod_k \frac{a_k^{n_k}}{n_k!} = \left(\sum_{k=0}^{\infty} a_k \right)^K$ összefüggést

$$p(V|K) = Q \left\{ \left(\sum_{k=0}^{\infty} f_k \right)^K - \left[\sum_{k=0}^{\infty} (1 - p(V|k)f_k) \right]^K \right\} \quad (3.11)$$

$$= Q \left[1 - (1 - \overline{p(V|k)})^K \right] \quad (3.12)$$

ahol $\overline{p(V|k)} = \sum_k f_k p(V|k)$ az összes csúcspontra átlagolt változási valószínűség.

Ezt visszahelyettesítve a (3.3)-ba

$$p(V) = \sum_K Q \left[1 - (1 - \overline{p(V|k)})^K \right] p(K) \quad (3.13)$$

$$= Q \left[1 - (1 - \overline{p(V|k)})^K \right] \quad (3.14)$$

A $\bar{p} \ll 1$ esetén:

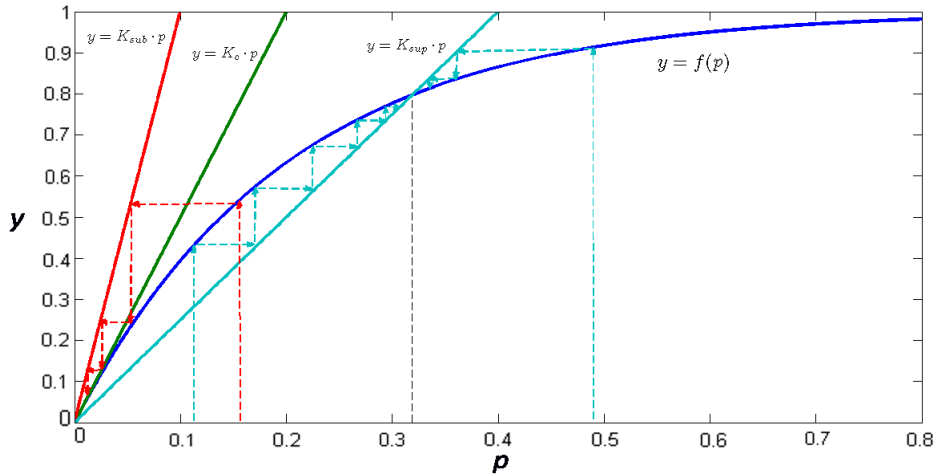
$$\frac{\Delta \bar{p}}{\bar{p}} = \frac{\bar{K} - K_c}{K_c} + \frac{\overline{K(K-1)}}{2K_c} \bar{p} + \mathcal{O}(\bar{p}^2) \quad (3.15)$$

A szub- és szuprakritikus esetben az állandó fokszerű (szigorú Kauffman) és az itt vizsgált változó fokszerű eset $K \rightarrow \overline{K}$ csere erejéig egyenértékű. Viszont a kritikus esetben $\overline{K(K-1)} = \overline{K}(\overline{K}-1) + \sigma_K^2$, ahol σ_K^2 a fokszerűk szórásnégyzete. Tehát a kritikus viselkedés az eloszlásfüggvény alakjával befolyásolható.

A

$$p_{n+1}K_c = \left[1 - \overline{(1-p_n)^k}\right] \quad (3.16)$$

iterációban ha megnézzük a jobb oldalon álló függvényt p -ben látható, hogy a nullában nulla, az egyben $Q(1-f_0)$, és az összes deriváltjával együtt monoton módon nő p szerint. A derivált a nullában $Q\overline{K}$, az egyben Q . Vizsgálva a jobb oldali függvény metszését a bal oldalon álló első szögfelezővel kiderül, hogy:



3.1. ábra. Ezen az ábrán a váltási valószínűség fixpontjait és ezek stabilitását ábrázoltuk a (3.16) alapján. A kék görbe az összefüggés jobboldalát, a három egyenes az összefüggés baloldalának három különböző esetét ábrázolja (szubkritikus, kritikus és szuperkritikus). A stabilitást iterációs módszerrel szemléltettük.

- Ha $Q\overline{K} < 1$, $\rightarrow$ az egyetlen fixpontunk nulla. Az iterációs gyökkereső módszerek elméletéből tudjuk, hogy ez a fixpont stabil (bármilyen fixponthoz közeli pontból indulunk bekonvergál a fixponthoz).
- Ha $Q\overline{K} = 1$, $\rightarrow$ kritikus helyzet.

- Ha $Q\overline{K} > 1$, $\rightarrow$ van két fixpontunk. Az egyik a nulla, a másik $\overline{p}$. A nullában mivel a derivált nagyobb mint egy, instabil fixpont van, viszont a másik metszés(fix)pontban a derivált kisebb mint az egység tehát az stabil fixpont.

3.2.1. Poisson-féle fokszámeloszlás

Alkalmazzuk a Poisson-féle fokszámeolszlást az f_k általános eloszlásra. Az (3.16)-os képletben fennáll a

$$\overline{(1 - p_n)^k} = \sum_{k=0}^{\infty} f_k (1 - p_n)^k \quad (3.17)$$

egyenlőség. Behelyettesítve az

$$f_k = \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda}$$

Poisson eloszlást

$$\begin{aligned} \overline{(1 - p_n)^k} &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda} (1 - p_n)^k \\ &= e^{-\lambda} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{[\lambda(1 - p_n)]^k}{k!} \\ &= e^{-\lambda} e^{\lambda(1 - p_n)} \\ &= e^{-\lambda p_n} \end{aligned}$$

Ezt visszahelyettesítve az eredeti (3.16)-os képletbe, kapjuk a

$$p_{n+1} K_c = 1 - e^{-\lambda p_n} \quad (3.18)$$

összefüggést, amely tökéletesen visszaadja az előző pontban tárgyalt és a 3.1 ábrán ábrázolt viselkedést. Vizsgáljuk a kritikus viselkedést a (3.15) összefüggést felhasználva, alkalmazva a Poisson eloszlást. Kritikus esetben $\overline{K} = K_c$, így a (3.15) első tagja kiesik, emiatt a második tag lesz a domináns. A Poisson eloszlás esetén a

$\overline{K} = \lambda$ és a $\overline{K^2} = \lambda^2 + \lambda$. Ezt behelyettesítve a (3.15) egyenletbe:

$$\begin{aligned}\frac{\Delta p}{p} &= -\frac{\lambda p}{2} \\ \frac{\Delta p}{p^2} &= -\frac{\lambda}{2} \\ \int \frac{\Delta p}{p^2} &= \int -\frac{\lambda}{2} dt \\ \frac{1}{p_0} - \frac{1}{p} &= -\frac{\lambda t}{2} \\ p &= \frac{p_0}{1 - \frac{\lambda p_0 t}{2}}\end{aligned}$$

Elsőrendű közelítésben ez:

$$p = p_0 \left(1 + \frac{\lambda p_0 t}{2} \right), \quad (3.19)$$

ami arra enged következtetni, hogy a valószínűség időbeni változása jó közelítéssel lineáris, és λ -val arányosan változik.

3.2.2. Skálafüggetlen fokszámoszlás

Vizsgáljuk meg, miként viselkedik a dinamika, ha skálafüggetlen fokszámoszlást alkalmazunk az előző alponttal analóg módon.

Ebben az esetben az

$$f_k = ck^{-\gamma}$$

eloszlást helyettesítjük be a (3.17) képletbe. Ahhoz, hogy a normáltság teljesüljön,

$$c = \frac{1}{\sum_{k=1}^{\infty} k^{-\gamma}} = \frac{1}{\zeta(\gamma)}$$

ahol $\zeta(\gamma)$ a Riemann zeta függvény. Ezt alkalmazva a (3.17) iterációs összefüggésben:

$$\begin{aligned}\overline{(1-p_n)^k} &= \sum_{k=1}^{\infty} f_k (1-p_n)^k \\ &= \frac{1}{\zeta(\gamma)} \sum_{k=0}^{\infty} k^{-\gamma} (1-p_n)^k \\ &= \frac{1}{\zeta(\gamma)} Li_{\gamma}(1-p_n)\end{aligned}$$

ahol a Li_{γ} polilogaritmusikus függvény, vagy Jonquiére függvény. Ezt visszahelyettesítve a (3.16) képletbe:

$$p_{n+1} = Q \left[1 - \frac{1}{\zeta(\gamma)} Li_{\gamma}(1-p_n) \right]. \quad (3.20)$$

Tanulmányozzuk a kritikusságot az előző ponthoz hasonló módon a (3.15) összefüggést felhasználva:

$$\overline{K} = \sum_{k=1}^{\infty} f_k k = \frac{\zeta(\gamma-1)}{\zeta(\gamma)}. \quad (3.21)$$

Továbbá

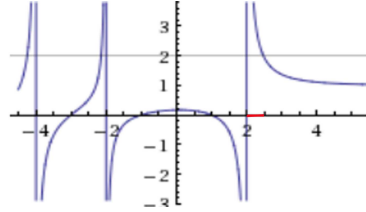
$$\overline{K^2} = \frac{\zeta(\gamma-2)}{\zeta(\gamma)} \quad (3.22)$$

Ezeket behelyettesítve a (3.15)-be,

$$\begin{aligned}\frac{\Delta p}{p} &= -\frac{1}{2} \left[\frac{\zeta(\gamma-2)}{\zeta(\gamma-1)} - 1 \right] p \\ \int \frac{\Delta p}{p^2} &= \int -\frac{1}{2} \left[\frac{\zeta(\gamma-2)}{\zeta(\gamma-1)} - 1 \right] dt \\ \frac{1}{p_0} - \frac{1}{p} &= -\frac{1}{2} \left[\frac{\zeta(\gamma-2)}{\zeta(\gamma-1)} - 1 \right] t \\ p &= \frac{p_0}{1 - p_0 \left[\frac{\zeta(\gamma-2)}{\zeta(\gamma-1)} - 1 \right] t}\end{aligned}$$

Ez az eredmény hasonló a Poisson eloszlásnál kapott eredményünkhöz, csupán itt a változási sebesség egy γ -tól függő együtthatóval arányos.

Ahhoz, hogy megkapjuk, mely γ értékekre lesz a kritikus viselkedés, vizsgáljuk meg a $\overline{K}$ -t a γ függvényében a (3.21) alapján. A 3.2 ábrán látható, hogy a függvény körülbelül a 2 és 2,5 közötti γ értékekre ad $\overline{K} \geq 2$ kritikus értéket.



3.2. ábra. A (3.21) összefüggés jobboldalán megjelenő függvény grafikus képe. A vízszintes tengelyen a γ helyezkedik el. $\overline{K}$ csak 2 felett értelmezhető (lásd (3.2)), és látható, hogy a függvény csak $\gamma \in [2, 2.5]$ intervallumon teljesíti ezt a követelményt, tehát csak bizonyos hatványkitevőjű skálafüggetlen foksámeloszlás esetén válik kritikussá a dinamika.

Ez az eredményünk összhangban van a [16] cikk által közölt eredményekkel.

3.3. A függvények és a bemenő foksám korelálása

Vizsgáljuk meg mi történik, ha az egy adott csomóponthoz rendelt függvények megválasztását összefüggésbe hozzuk a csomópont bemenő foksámával. Ez azt jelenti, hogy a

$$Q = \frac{1}{2q(1-q)} \rightarrow Q(k) \quad (3.23)$$

lesz. A $Q(k)$ alakja, mivel Q nem lehet nagyobb mint $1/2$, legyen:

$$Q(k) = \begin{cases} \frac{1}{2}, & \text{ha } k = 0, 1 \\ \frac{1}{k}, & \text{ha } k \geq 2 \end{cases} \quad (3.24)$$

A (3.16) alapján:

$$p_{n+1} = \overline{Q(K) [1 - (1 - p_n)^K]} \quad (3.25)$$

$$= \overline{Q(K)} - \overline{Q(K)(1 - p)^K} \quad (3.26)$$

Vizsgálva a kritikusságot:

$$\frac{\Delta p}{p} = \overline{Qk} - 1 - \frac{1}{2} \overline{Qk(k-1)p}. \quad (3.27)$$

Innen az első tag:

$$\overline{Q(k)k} = \sum_{k=0}^{\infty} f_k Q(k)k \quad (3.28)$$

$$= f_1 Q_1 + \sum_{k=2}^{\infty} f_k \quad (3.29)$$

$$= f_1 Q_1 + 1 - f_0 - f_1 \quad (3.30)$$

$$(3.31)$$

Ezt visszahelyettesítve a (3.27) egyenletbe

$$\frac{\Delta p}{p} = f_1 Q_1 - f_0 - f_1 - \frac{1}{2} \overline{Qk(k-1)p} \quad (3.32)$$

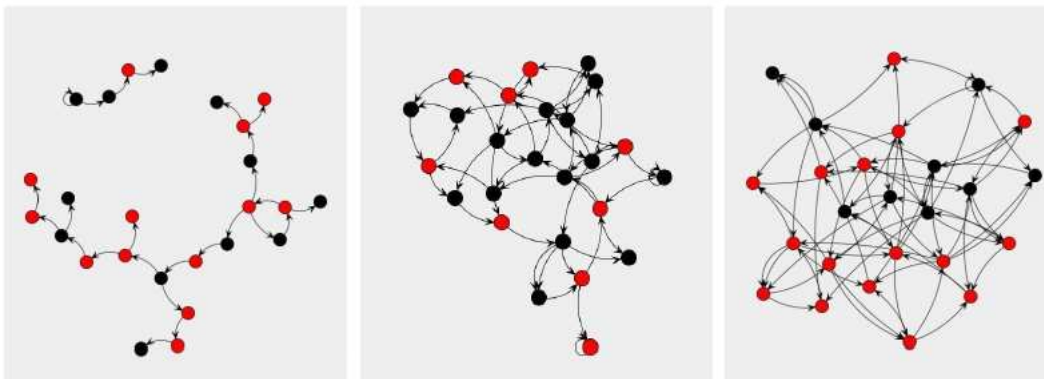
Mivel a kritikusság az első tagtól függ (a rendszer akkor kritikus, ha a sorfejtés első tagja 0), ha az f_0 és f_1 zérusok, azaz nincsenek 0 és 1 bemenetű csomópontok a rendszer **mindig kritikus, fokszámeloszlástól függetlenül**. Ugyanakkor, ha Poisson eloszlást veszünk és a λ várható érték jóval nagyobb mint 1, akkor $f_0 \ll 1$ és $f_1 \ll 1$ azaz, a rendszer kritikus közeli állapotban lesz. Továbbá ha megfigyeljük, az első tag mindig negatív, azaz a kritikusságot mindig a szubkritikus irányból közelítjük meg.

4. fejezet

A modell implementációja

Ahhoz, hogy hatékonyan, kísérletileg tanulmányozni tudjuk a Kauffman hálózato-
kat, létre kellett hozni egy jól működő számítógépes modellt. A Java programozási
nyelv tűnt jó választásnak és az adatok feldolgozásán kívül végig ennél a nyelvnél
maradtunk. Először külön programoztam be a különböző K eseteket, de ez nem volt
túl hatékony, ezért megírtam egy általános modellt, amely több-tízmilliós nagyságú
rendszereket is könnyedén futtatott, tetszőleges K -ra. Ez előnyös volt különböző
időfüggő rend-paraméterek vizsgálatára, amelyekre később részletesebben kitérek.
Célszerűnek gondoltuk, hogy valamilyen grafikus ábrázolást is megvalósítsunk. A
JUNG (*Java Universal Network/Graph Framework*) nevezetű programcsomag nagy
segítséget jelentett, mivel nagyon egyszerűen lehet vele gráfokat kezelni, ábrázolni.
A 4.1 ábrán látható néhány a JUNG által generált grafikus ábrázolás közül. A prog-
rammal képesek vagyunk a dinamikát is animálni, valós időben.

Később az egész implementációt az alapoktól kezdve átírtam, a JUNG által
nyújtott gráf-kezelési lehetőségeket használva, azért mert így sokkal könnyebb ma-
nipulálni a csúcsokat, éleket stb. A várakozással ellentétben, ha lassult is egyáltalán
a program, csak minimális mértékben. Emellett még rengeteg algoritmust kellett ki-



4.1. ábra. Három $N = 25$ elemű rendszer topológiája, $K = 1$, $K = 2$ és $K = 3$ esetén (balról jobbra haladva). Az első ábrán pl. jól kivehetőek a kialakuló klaszterek, hurkok stb. A különböző színek a csúcsponatok különböző értékeit jelölik.

dolgozni a különböző problémák tanulmányozásához, ezek közül néhány még szóba kerül.

4.1. Változó fokszámú háló implementációja

Probléma volt, hogy a tipikus Kauffman-hálózatoknál a kapcsolatok száma rögzített és csak egész, diszkrét lépésekben tudjuk tanulmányozni a tulajdonságokat a K függvényében. A valós hálózatokban, ahogyan azt az élesztős példánknál is láttuk, a bemenő élek száma nem rögzített minden csúcspontra, hanem véletlenszerű vagy valamilyen eloszlást követ. Például a sok helyen felfedezett skálafüggetlen hálózatokban a csúcspontra jutó élek száma hatványfüggvény eloszlást követ. Arra gondoltunk, hogy sokkal valóságoszerűbb lenne, ha mi is valamilyen eloszlás szerint generálnánk a különböző csúcsponatok fokszámait, és csak az átlagot követjük figyelemmel. A választás végül a Poisson eloszlásra esett. A Poisson eloszlás a természetben gyakori egyparaméteres eloszlás. Adott λ várható érték esetén a k egész érték előfordulási valószínűsége:

$$P(k) = \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda}. \quad (4.1)$$

Így hálózatunkban a bemenő fokszámokat a következő képlettel generáltuk:

$$K_i = K_0 + k_i,$$

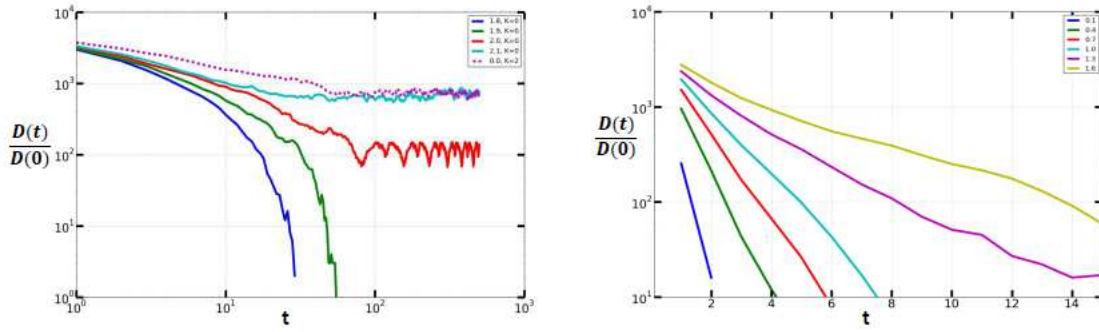
ahol a k_i a λ_k várható értékű Poisson-eloszlás szerint generált érték. Az ilyen módon generált bemenő fokszámok várható értéke folytonosan változtathatóvá válik, míg a $\lambda_k = 0$ határesetben visszkapunk egy K_0 -ad rendű Kauffman-hálót.

4.2. A rendparaméterek vizsgálata

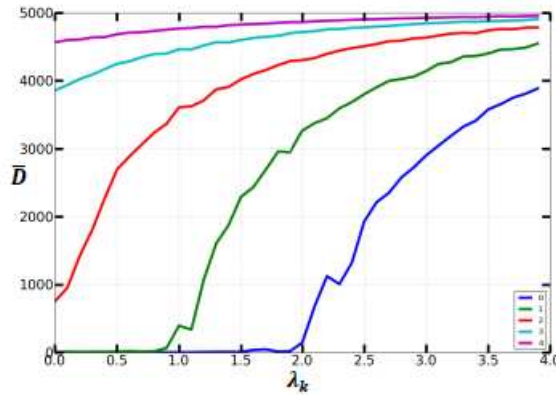
Kutatásunk során a második fejezetben említett mindkét paramétert vizsgáltuk.

4.2.1. Hamming távolság

Ennél a rendparaméternél külön vizsgáltuk a kezdeti állapothoz mért távolságot (időben) és a két egymásután következő állapot közötti távolságot. A 4.2 ábra mutatja néhány szimulációs eredményünket. A rendparaméterek elméleténél bevezetett viselkedés fagyott (szubkritikus, $\alpha < 0$) és kritikus ($\alpha = 0$) esetben igazolódni látszik. Azonban a kaotikus ($\alpha > 0$) esetet még nem tudtuk igazolni, azért mert $D(t)$ nagyon gyorsan, akár már az első időlépésben beáll a telítődött, véletlenszerűséget igazoló állapotba. A rendszer összes csomópontját szinkronban léptetjük minden időlépésben, és ez N darab frissítésnek felel meg. A kaotikus fázisnál jelentkező problémát a jövőben lehetőleg kiküszöböljük valamilyen aszinkron frissítési módszerrel. A 4.3 ábrán a rendparaméter időátlagát ábrázoltuk a különböző K_0 és λ_k értékek esetén, $N = 10^4$ csomópontra. Az ábra egyértelműen visszaadja a sok más területen is hasonlóan viselkedő fázisátalakulás görbáját (pl. ferromágnesek mágnesezettsége a hőmérséklet függvényében)



4.2. ábra. A $D(t)$ Hamming távolság egy $N = 10^4$ -es rendszerben a különböző λ_k és K_0 esetekben (kritikus és szubkritikus eset). A baloldali ábrán a kritikus értékekre vizsgált futások eredményeit ábráztuk log-log skálán. Jól látszik hogy a görbék egyenes tendenciát mutatnak (igazolva a hatványfüggvény szerű viselkedést (2.4)) majd beállnak az egyensúlyi állapotba. Amint távolodunk a $K_i = 2$ kritikus értéktől az egyenes tendencia egyre kevésbé mutatkozik. A jobboldali ábrán a szubkritikus K_i értékekre kapott eredményeket ábráztuk log-normál skálán. Egyértelműen felfedezhető az exponenciális csökkenés amit a rendparaméter elméleténél is láhattunk (2.3).

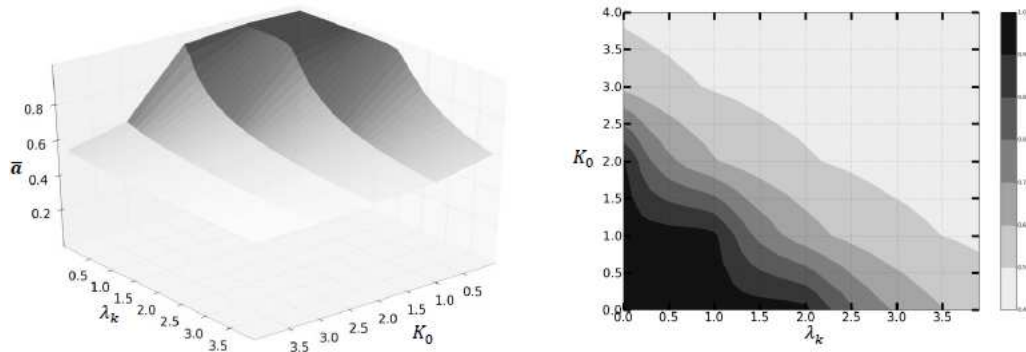


4.3. ábra. A fázisátalakulás látványos példája, a görbék a Hamming távolságok átlagát ábrázolják a λ_k függvényében. A különböző színű görbék a különböző K_0 értékekre beállított futásokat jelölik. Ha megfigyeljük a fázisátmenet mindig a $K_0 + \lambda_k = 2$ értéknél következik be. Az görbék $D(t) = 5000$ irányába telítődnek, ami 10^4 csomópontnál a teljes véletlenszerűségnek felel meg.

4.2.2. Normált átfedés

Az átfedést (2.5), ugyanúgy mint a Hamming-távolságnál, minden időlépésben mértük, majd időátlagot számoltunk, így egy számmal tudtunk jellemezni egy egész rendszert. A paraméter változását vizsgáltuk úgy a diszkrét, mint a folytonos K -k esetében. Mint korábban már definiáltuk az $a(t)$ paraméter értéke annak a valószínűsége hogy két egymásutáni időpillanatban egy csúcspont értékre a két állapotban egyezik. Belátható, hogy teljesen véletlenszerűen generált egymásutáni állapotokban

az $a(t)$ minden lépésben 0.5 körüli értéket kell adjon, mivel azonos valószínűséggel generálok 1-est és 0-ást is (ezt egy külön erre írt algoritmussal ki is próbáltam és a feltételezés beigazolódott). A 4.4 ábrán a K_0 és a λ_k függvényében ábrázoltuk az átlagolt normált átfedési paramétert $N = 10^4$ méretű rendszerre.



4.4. ábra. A baloldali ábra kiválóan szemlélteti a fázisátalakúást. A szubkritikus $K_0 + \lambda_k$ értékeken az $\bar{a}$ az 1-hez nagyon közeli magasságon van, azaz a egy csúcs két egymásutáni időpillanatban szinte biztosan egyezik. Itt a rendszer fagyott. A kritikus értékeknél látható egy hirtelen esés, itt komplex a viselkedés. A kritikus értékek felett az $\bar{a}(K_0, \lambda_k)$ a 0.5-höz kezd konvergálni ami már a véletlenszerű, kaotikus viselkedésre utal. A jobboldali grafikon a baloldali kontúr megfelelője

A paraméter jól visszaadja az elvárt viselkedést és igazolja a fázisátalakulást a kritikus pontokban. Az ábrán jól kivehető hogy:

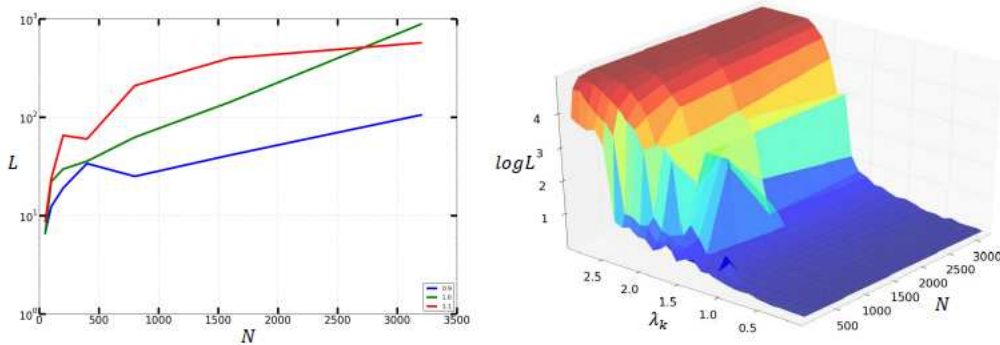
$$\bar{a}(K_0, \lambda_k) = \bar{a}(K_0 + \lambda_k)$$

Tehát a viselkedés azt is igazolja, hogy a heterogén hálózati modell visszaadja az eredeti Kauffman modell tulajdonságait és azt hogy a kritikus viselkedés kizárólag a fokszámoszlás várható értékétől függ, ahogyan az az analitikus számításainkból is kiderült(3.15).

4.3. Az attraktorok hosszának vizsgálata

Amint azt már korábban kifejtettem az attraktoroknak rendkívül fontos szerepük van a Kauffman-modell alkalmazásainál. Mivel a rendszer determinisztikus, nem lehet-

séges, hogy egy állapot többször szerepeljen, csakis ha ciklusban van. A módszerünk az attraktorok hosszának megállapítására a következő: az idő-állapot mátrix utolsó állapotát a végétől visszafele indulva mindig összehasonlítjuk a megelőző állapotokkal és ha egyezést találunk megnézzük, hogy hány lépést tettünk meg. Ez az attraktor hossza. Ezeket az attraktorokat mértük a csomópontok száma és a fokszámeloszlás függvényében. Néhány releváns eredményünket a 4.5 ábrán tüntettük fel.



4.5. ábra. A baloldali grafikonon három különböző $\bar{K} = 1 + \lambda_k$ várható értékű fokszámeloszlás esetén láthatjuk az attraktorok hosszát az N függvényében, log-normál skálán ($\lambda_k = 0.9, 1.0, 1.1$). $\bar{K} = 2$ kritikus esetben egyértelműen exponenciális, de a többi kritikus környéki esetben is hasonló tendenciát mutat. A jobboldali ábrán N és a λ_k függvényében ábrázoltuk az attraktor hosszúságok logaritmusát. Jól látszik a fázisátmenetszerű viselkedés a kritikus értéknél. Az értékek azért telítődnek, mivel csak bizonyos számú időlépést tehattunk meg, és az ennél hosszabb attraktorokat, amelyeket nem tudtunk megmérni, és azokat a maximális időlépéssel helyettesítettük. Az attraktorok hosszát L -el jelöltük

4.4. A frissítés-késleltetés

Egy másik módosítást is bevezettünk a rendszerbe. A valós rendszerek elemei nem párhuzamosan evoluálnak időben, hanem minden elem bizonyos időközönként, vagy bizonyos hatásokra. Egy másik tulajdonsága a valós rendszereknek, hogy a fontos elemeknek sok a dolguk ezért, gyorsan is kell dolgozzanak, a hatékonyság érdekében. Ezt a skálafüggetlen hálózatoknál is tapasztalhatjuk, ha megnézzük pl. az internetes szerverek sokkal gyorsabbak kell legyenek mint egy átlagos személyi számítógép,

hogy a rendszer operatíván működjön. A sejteken belül is a bizonyos proteineknel hasonló a helyzet. Ezért kapcsolni kellett a frissítési periódust és a bemenő fokszámot. Ezt figyelembe véve jött az ötlet, hogy minden csomópontnak adjunk egy saját frissítési periódust, aminek a fokszámokkal való kapcsolatát kétféleképpen oldottuk meg. Az első módszer szerint a frissítési periódust a fokszámokhoz hasonlóan Poisson eloszlás szerint generáljuk és az eloszlást a legtöbb esetben $\lambda_T = 4$ -re centráljuk. Célunk az volt, hogy kellőképpen széles spektrumon osztogassunk a csúcsoknak frissítési periódusokat. A fokszámokkal való korrelációt a következő összefüggéssel oldottuk meg:

$$T_i = 1 + \left\lceil \frac{t_i}{K_i} \right\rceil$$

ahol a t_i a λ_T várható értékű Poisson-eloszlás szerint generált érték és [...] egész részt jelöl. Így azoknak a csúcspontoknak, amelyeknek nagy a bemenő fokszáma aránylag kisebb lesz a frissítési periódusa, azaz nagyobb a relatív frekvenciája. Erre a rendszertípusra viszont a következtetések levonását lényegesen nehezítette, az újabb paraméter bevezetése.

4.4.1. Paraméter mentes fokszám-periódus kapcsolat

A frissítési feltétel a következő:

$$\left\lceil \frac{K_i}{K_{max}} t \right\rceil \neq \left\lceil \frac{K_i}{K_{max}} (t - 1) \right\rceil$$

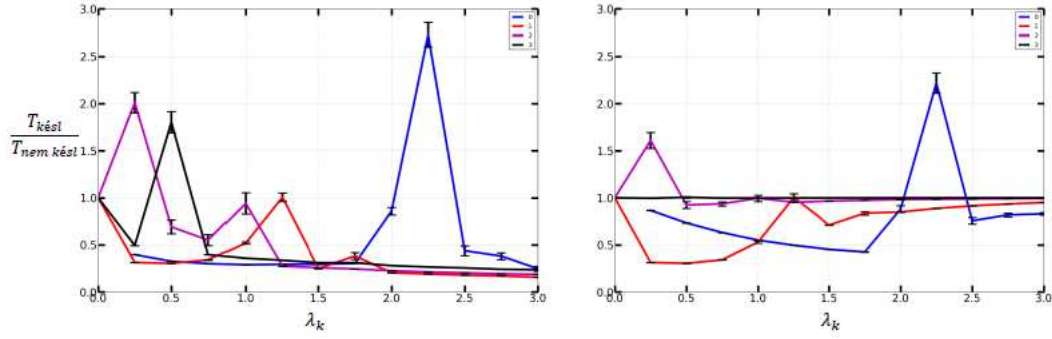
Ha ez a feltétel teljesül akkor a csúcspontnak frissítjük az értékét. Itt a t az idő, amely diszkrét lépésekben halad előre, a K_i az adott csúcspont bemenő fokszáma, a K_{max} a rendszer legnagyobb bemenő fokszáma. Ha a határértékeket nézzük, mikor $K_i = K_{max}$, akkor a feltétel mindig teljesül (így a frissítési periódus a minimális 1 lesz), ha $K_i = 0$, a feltétel soha nem teljesül, és a frissítési periódus mindig arányos a $\frac{K_i}{K_{max}}$ -szal. A 4.6 ábra ezt egy példán keresztül szemlélteti.



4.6. ábra. A könnyebb megértés kedvéért, vegyünk egy példát ($K_{\max} = 8$). A fenti ábrán a függőlegesen a különböző bemenő fokszámú csomópontok vannak, az idő pedig jobbra halad. Ha teljesül a feltétel a csomópontot frissítjük (fehér téglalap). Ha viszont nem, akkor biztosan a korábbi értékén marad (fekete téglalap). Látható, hogy a $K_{\max}$ bemenettel rendelkező csomópontok mindig frissülnek, és minél kisebb a bemenet annál ritkább a frissítések aránya.

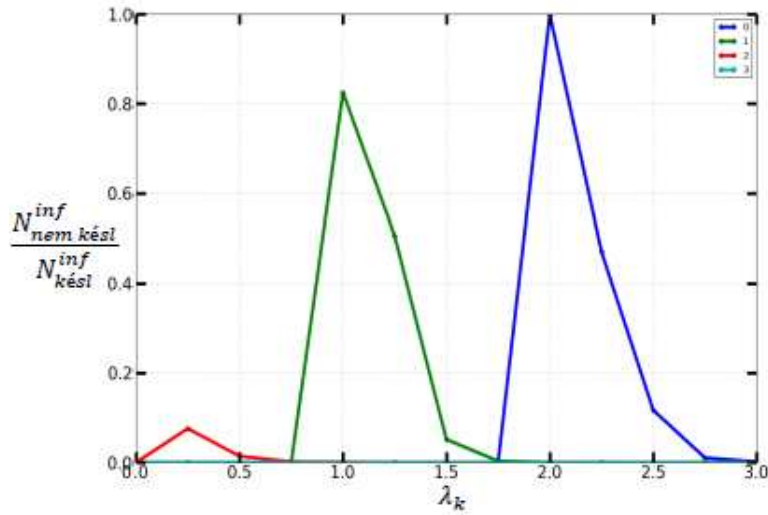
Ennél a fejlesztésnél már nem vizsgálhatjuk az attraktort a klasszikus módon, mert a késleltetések miatt előfordulhat egy állapot többször is rövid időn belül. Egy dolog azonban nem változott a klasszikus rendszerhez képest: így is kialakul minden csúcspontnak egy saját evolúciós periódusa, amely a nem túl kaotikus rendszereknél mérhető hosszúságú. Például egy időben állandó értékű csúcspontnak az evolúciós periódusa 1, egy lépésként változóknak 2, stb. (ne tévesszük össze ezt a periódust az általunk generált frissítési periódussal). Tulajdonképpen az evolúciós periódusok összességének a legkisebb közös többszöröse maga az attraktor hossza.

Így a figyelmünk az evolúciós periódusokra irányult, és sikerült kifejlesztenem egy algoritmust az evolúciós periódus megtalálására és megmérésére. Így vizsgálhattuk például az rendszer evolúciós spektrumát, vagy azt hogy az attraktorok miben különböznek ugyanannál a rendszernél frissítés késleltetés alkalmazása esetén, illetve annak



4.7. ábra. Az evolúciós periódusok aránya a késleltetett és a nem késleltetett esetben. A baloldali ábrán a nem mérhető periódusú csúcspontokat elhagytuk és úgy számoltunk arányt. A jobboldali ábrán a skálán kívüli evolúciós periódus értékeket a maximális mérhető értékkel helyettesítettük (10^4 időlépés esetén ez 5000). Az ábrákon jelöltük a standard hibát is $s_e = \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$, ahol a σ a standard elérés (szórás) és n a mérések száma.

hiányában. A szimulációink során képtelenség volt 2^N időlépést végigfuttatni, hogy az összes lehetséges állapotot biztosan végigjárjuk, így voltak (főleg a kaotikusabb fázisokban) olyan evolúciós periódusok amelyeknek a hosszát nem tudtuk megmérni. Ezeket az eseteket 0 hosszal regisztráltuk, sok információt nem adtak viszont statisztikailag még vizsgálhattuk őket. Minden vizsgált K_0 és λ_k esetben adott hálózathál mértük a csúcsok periódusát frissítés késleltetés nélkül (minden csúcspontnak a frissítési periódusa 1) és a fenti képlet szerint generált frissítési periódusok aktiválásával. Azt vártuk hogy az evolúciós periódusok általánosan nagyobbak legyenek a csúcspontokra, ezt igazolják a 4.7 ábrán feltüntetett méréseink is. Azonban egy meglepő eredmény is született. Megszámoltuk mindkét esetben a mérhetetlen periódusú csúcspontokat és megvizsgáltuk a két eset végtelen periódusai számának az arányát, ami az 4.8 ábrán látható. A kritikus fázisban a késleltetés, nemhogy kaotikusabbá teszi a rendszert, azaz megnyújtja az evolúciós periódusokat, hanem ellenkezőleg, és amit első esetben nem tudtunk megmérni a késleltetett esetben mérhető hosszúságú lett. Magyarázat lehet, hogy a fontosabb csúcspontoknak relatíve nagyobb frissítési frekvenciát adtunk, és ez egyfajta hierarchiát alakíthat ki amely rendező hatással van a rendszer egészére.



4.8. ábra. A két eset skálán kívüli evolúciós periódusai számának az aránya. A pontosan a kritikus értékeknél ez az arány megugrik, a késleltetés a végtelen periódusokat lerövidíti, azaz valamilyen szinten rendezi a rendszert. A különböző színű görbék a különböző K_0 értékekre beállított futásokat jelölik.

4.4.2. A véletlenszerű frissítés

A rendszer csúcsait egyenként frissítjük véletlenszerűen, de ugyanúgy arányosan a kapcsolatok számával. Azaz egy sok kapcsolattal rendelkező csúcspontot nagyobb valószínűséggel frissítsünk mint egy kevésel rendelkezőt. Erre egy egyszerű megoldást találtunk ki, mégpedig azt hogy összegezzük a kapcsolatok számát, az összes csúcspontra és létrehozunk egy akkora tömböt mint ez az összeg. Ebben a tömbben pedig minden csúcspontnak annyi helyet foglalunk le, amekkora a saját bemenő fokszáma. Az evolváltság során véletlenszerűen dobunk egy számot 1 és a kapcsolatok számának összege között és azt a csúcspontot frissítjük, amelyiknek a lefoglalt helyére esett a választás.

Pl. Egy 5 elemű rendszerben ha az 1-es, 3-as és 4-es csúcsnak 2, a 2-esnek 3 és az 5-ösnek 1 bemenő éle van a tömb így néz ki:

1	1	2	2	2	3	3	4	4	5
---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

a kapcsolatok számának összege 10, így 1 és 10 között dobunk és azt a csúcsot frissítjük, amelyiknek az indexével azonos számot dobtunk. Ha mondjuk 3-ast, 4-est vagy 5-öst dobok a 2-es csúcspontot frissítem. Azonban a dinamika elemzése problémás, mivel itt minden időlépésben csak egy csúcspont frissül, és ez nem ad nekünk túl sok információt. Felmerült, hogy minden N . lépésben nézzünk rá a rendszerre, mert így minden csúcsra juthatna egy frissítés ha az élek eloszlása egyenletes lenne. Az is felmerült hogy minden a tömb méretével egyenlő időlépésenként nézzünk rá a rendszerre. Sajnos egyik verzió sem tökéletes, és mivel nagy rendszerekkel dolgozunk, az összes időlépést fizikai képtelenség tárolni. Ezeken a módszereken még dolgozunk.

5. fejezet

Következtetések

Kutatásunk során sikerült a Kauffman modell számost tulajdonságát feltérképezni és igazolni. Különböző módszerekkel vizsgáltuk az önszerveződés és komplex viselkedés jeleit, továbbá néhány elméleti eredménnyel és alkalmazással is foglalkoztunk. analitikus számításokkal tanulmányoztuk a dinamikát, úgy rögzített, mint általános, heterogén foksámeloszlás esetén, és a kritikus viselkedést matematikailag is igazoltuk, továbbá megkaptunk, több, már publikált analitikus eredményt. Analitikus úton kimutattuk, hogy megfelelő lokális kapcsolatot teremtve a csomópontok dinamikájáért felelős függvény és az illető csomópont foksáma között a rendszer jó közelítéssel mindig kritikus állapotba kerül, a hálózat bemenő foksámeloszlásától függetlenül. Létrehoztunk több jól működő számítógépes implementációt a hatékony mérések elvégzésének érdekében, és ezeket alkalmazva tudtunk igazolni több vizsgált tulajdonságot. Rendparaméterekkel bizonyítottuk $K = 2$ esetén a kritikus viselkedést és a fázisátalakulást. Vizsgáltuk az attraktorok hosszának változását a különböző K és N értékekre és igazoltuk, hogy a paraméterek növelésével szuprapolinomiálisan növekednek. A modellt több szempontból is továbbfejlesztettük, elsősorban a Poisson eloszlás szerinti foksám generálással lehetővé tettük a K értékek folytonos változtatását és így pontosabb méréseket végezhattünk. A másik fejlesztés a nagy bemenő

fokszámú csomópontok relatív frissítési frekvenciájának a megnövelése volt, ezzel is közelebb hozva a modellt a valós rendszerekhez, és azt találtuk, hogy ez a tulajdonság a kritikus értékeknél rendező hatással van a rendszerre. Emellett még több további fejlesztést is eszközöltünk, amelyeknek hatékonyságát és az eredményeiket még tanulmányozzuk.

6. fejezet

Kitekintés

A szimulációink, során felléptek technikai nehézségek, pl. hogy nem tudtunk kellő mennyiségű időlépést megtenni a különböző esetekben, így sok attraktor meg periódus hosszát nem voltunk képesek megmérni. Ennek orvoslására szeretnénk valamilyen módszert kitalálni illetve már létezőket alkalmazni (pl. a redundáns csomópontok eltávolítása). A jövőben szeretnénk a jelenségeket behatóbban tanulmányozni, nagyobb számú és több típusú mérésekkel finomítani az ábrákat és pontosabb magyarázatokat adni. Azonban ez még messze nem fedi le a kitűzött céljaink sorát. Egyik legfontosabb célunk az, hogy alapvető fizikai törvényszerűségeket vezessünk be a rendszerbe mint pl. az energiamegmaradás vagy a termodinamika főtételei. Mint láthattuk, a hálózatban a kötések és a függvények rögzítettek minden csúcspontonál, ez a valós rendszerekkel sokszor nem összeegyeztethető. Ha ezeket a fixált elemeket úgy dinamizáljuk, hogy a rendszer egy optimális állapotot keressen, valószínűleg nagyon érdekes dolgok történnek majd. Emellett lehetséges, hogy a bool-féle hálózatoktól is elszakadunk és a így csomópontjaink komplexebb objektumok lehetnek, bár ez esetben a függvényeket is újra kell majd gondolni. Ha a módszereink elég hatékonyak lesznek, lehetséges hogy egy életképes és jól működő evolúciós modellt is megalkothatunk.

Irodalomjegyzék

- [1] H. Haken, Self-organization 3(8):1401., 2008. [Online]. Available: <http://www.scholarpedia.org/article/Self-organization>.
- [2] S. Camazine, *Self-Organization in Biological Systems*, Princeton University Press, 2003, p. 7.
- [3] S. A. Kauffman, *The Origins of Order: Self-Organization and Selection in Evolution*, Oxford University Press 1992.
- [4] C. Gros, *Complex and Adaptive Dynamical Systems*, Springer, 2008, pp. 75-94.
- [5] M. T. A. M. Elena Dubrova, *Kauffman Networks: Analysis and Applications*, pp. 1-2, 2008.
- [6] T. M. B. D. Viktor Kaufman, *Scaling in critical random Boolean networks*, pp. 1-2, 2008.
- [7] S. A. Kauffman, *Journal of Theoretical Biology*, vol. 22, 1969, p. 437-467.
- [8] B. S. a. C. Troein, *Phys. Rev. Lett.* 90, 2003.
- [9] B. Drossel, *On the number of attractors in random Boolean networks*, pp. 1-2, 2008.
- [10] F. J. a. J. Monod, *Genetic regulatory mechanisms in the synthesis*, in *Journal of Molecular Biology*, vol. 3, 1961, p. 318-356.

- [11] S. H. a. D. E. Ingber, *Shape-dependent control of cell growth*, in Experimental Cell Research, vol. 261, 2000, p. 91-103.
- [12] S. A. K. a. E. D. Weinberger, *The nk model of rugged fitness*, in Journal of Theoretical Biology, vol. 141, 1989, p. 211-245.
- [13] T. R. S. Bornholdt, *Topological evolution of dynamical networks*, in Physical Review Letters,, 2000, p. 6114?6117.
- [14] B. D. a. H. Flyvbjerg, *Multivalley structure in Kauffman's model: Analogy with spin glass*, in J. Phys. A: Math. Gen., vol. 19, 1989, p. L1103.
- [15] B. Derrida and Y. Pomeau. *Europhysics Letters*, 1(2):45-49, Jan 1986.
- [16] M. Aldana, *Dynamics of Boolean Networks with Scale-Free Topology*, Physica D: Nonlinear Phenomena Volume 185, 2003, p. 45-66