

Modeliranje bioloških in kemijskih sistemov s celičnimi avtomati

Dejan Šemrov, Tadej Kotnik, Damijan Miklavčič

Univerza v Ljubljani, Fakulteta za elektrotehniko, Laboratorij za biokibernetiko
Tržaška 25, 1000 Ljubljana, Slovenija
e-mail: dejans@lbk.fe.uni-lj.si

Povzetek. Celične avtomate smo uporabili kot orodje za modeliranje naravnih sistemov. Proučili smo osnovne pojme iz teorije teh struktur. Z dvodimenzionalnimi celičnimi avtomati smo zgradili različne modele rasti in proučevali vpliv pravila spreminjanja stanj ter sosedstva na razvoj avtomatov. Celični avtomat s heksagonalno razporeditvijo celic smo uporabili za modeliranje oscilirajoče kemične reakcije Belousov-Zhabotinsky. Analizirali smo začetne pogoje, ki vodijo v oblikovanje različnih oblik, značilnih za ta poskus.

Ključne besede: celični avtomati, populacijski modeli, reakcija Belousov- Zhabotinsky

Cellular Automata Modelling of Biological and Chemical Systems

Extended abstract. Cellular automata were used as a tool for natural systems modelling. Four properties characterise a cellular automaton. The first is the geometry of the array of cells. The most frequently used geometries for the two-dimensional cellular automata are regular meshes of equilateral shapes which are shown in Figure 1. The second property, close related to the geometry of the array of cells, is the neighbourhood. It comprises cells which determine next state of the cell and are usually close to the corresponding cell. In the two-dimensional rectilinear array two neighbourhoods have been given much attention: von Neumann and Moore, shown in Figure 2. The third property is the number of states per cell, which is usually not higher than 4. This property is highly related to the last property of the cellular automaton, the rule for determining the future state of the cell. In general, it can be described with equation (1) where i and j are determined with the definition of the neighbourhood, $a_{x,y}$ represents the state of the cell, t represents time and l represents the influence of the previous generations of cells. This property is the primary source of variety in the field of cellular automata. We further examined the properties of the best known cellular automaton, the "game of life" invented in 1970 by John Horton Conway and shown in Figure 3. The next aim of our study was to explore the potential usefulness of cellular automata as a tool for modelling of biological and chemical systems. Different growth models were built and the influence of rules and neighbourhoods on the development of cellular automata was examined. In the model of unconstrained growth we examined the influence of different neighbourhoods on growing patterns which is shown in Figure 4. Constrained and competitive growth were also modelled using cellular automata with appropriate rules. On the left side of Figure 5 a development of the model of constrained growth resembling lichens is shown while on the right side, a model of competitive growth is presented. Oscillating chemical reaction Belousov-Zhabotinsky, shown in Figure 6 was also modelled by cellular automata with hexagonal mesh of cells. A rule introduced by J. M. Greenberg and S. P. Hastings and shown in Figure 7 was used. The development of cellular automata modelling Belousov-Zhabotinsky reaction is shown in Figure 8 where typical structures, observed in the chemical reaction can be seen. Different initial conditions which

result in various geometric structures, typical for this experiment were analysed and are shown in Figure 9.

Key words: cellular automata, population models, Belousov-Zhabotinsky reaction

1 Uvod

Razumevanje kompleksnosti sistemov ter njenega izvora je eden temeljnih izzivov sodobne znanosti. Razdelitev sistema na preprostejše sestavne dele je najpogostejša metodologija analize. Raziskave v fiziki, biologiji in drugih vejah znanosti so odkrile osnovne komponente številnih sistemov. Naslednji korak pri obravnavi je iskanje pravil medsebojno odvisnega delovanja teh največkrat relativno preprostih komponent, katerega rezultat je kompleksno obnašanje celotnega sistema. Za ta pristop je bistveno proučevanje modelov, ki naj imajo čimpreprostejšo zgradbo, obenem pa vsebujejo osnovne matematične lastnosti, ki so potrebne za modeliranje kompleksnega obnašanja opazovanega sistema. Večino omenjenih lastnosti najdemo pri celičnih avtomatih, katerih osnovna zgradba in delovanje sta relativno preprosta, skupno obnašanje celotnega sistema pa je lahko zelo kompleksno in omogoča modeliranje kompleksnih dogajanj, ki jih zasledimo pri številnih fizikalnih in drugih sistemih.

Digitalni računalniki so nepogrešljivo orodje pri modeliranju večine fizikalnih in drugih sistemov. Eksaktne matematične rešitve so največkrat mogoče le za relativno preproste sisteme. V drugih primerih je za modeliranje obnašanja sistema potrebna simulacija. Osrednja vloga

digitalnega računalnika pri modeliranju zahteva, da so modeli zgrajeni tako, da je njihova uporaba na digitalnem računalniku čim preprostejša. Celični avtomati spadajo med modele, ki so zelo primerni za neposredno uporabo tako na klasičnih kot tudi na razvijajočih se vzporednih računalnikih. Računalniška simulacija je bistvena tudi za analizo lastnosti celičnih avtomatov. Celotno obnašanje sistema namreč največkrat ni neposredno razvidno iz njihove zgradbe in osnovnih pravil. Simulacija z digitalnim računalnikom pa omogoča sledenje delovanja celičnih avtomatov ter analizo njihovih lastnosti.

V minulem desetletju so celične avtomate kot modele kompleksnih sistemov uporabljali številni raziskovalci. Pogosto so bili orodje za modeliranje kemičnih reakcij [1]-[5]. V literaturi zasledimo veliko primerov uporabe teh struktur tudi na biološkem področju [6]. Aplikacije segajo od že omenjenih modelov populacijske dinamike, modeliranja rasti tumorjev [7] do poskusov razlage mehanizmov delovanja možganov [8]. Zanimive so tudi raziskave na področju modeliranja imunskega sistema tako glede osnovnih mehanizmov delovanja (na primer interakcije celic imunskega sistema [9]) kot tudi simulacije nepravilnosti oziroma okvar (HIV infekcija [10]).

Sedanji razvoj na področju teorije celičnih avtomatov gre predvsem v dve smeri:

- **direktna analiza** zajema raziskovanje lastnosti podanih celičnih avtomatov, kjer so pravilo določitve novega stanja, geometrija mreže in začetna konfiguracija poznani [11]-[13]; te raziskave se ukvarjajo predvsem s proučevanjem reverzibilnosti [14], [15], invariantnosti, računskih zmogljivosti in drugih lastnosti celičnih avtomatov;
- cilj **inverzne analize** je na podlagi podanih lastnosti poiskati pravilo oziroma množico pravil, ki imajo zelene karakteristike delovanja [16]; končni rezultat teh raziskav je razviti tehnike, s pomočjo katerih bi poiskali pravila, ki bi bila sposobna reproducirati obnašanje realnih sistemov.

2 Celični avtomati

Celični avtomati so dinamični sistemi, v katerih sta prostorska in časovna komponenta diskretni. Stanja celic, ki so urejene v pravilno mrežo, se spreminjajo sinhrono v skladu s predpisanim determinističnim pravilom, ki je lokalno (odvisno od dogajanja v neposredni oziroma bližnji okolici celice) in uniformno (enako za vse celice). Vsaka celica lahko zavzame eno od mogočih diskretnih stanj. Število teh stanj je končno (ponavadi majhno) [17].

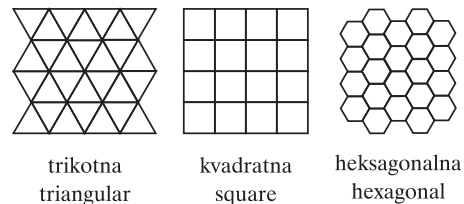
2.1 Definicija celičnega avtomata

Vsak celični avtomat je definiran s štirimi med seboj odvisnimi elementi: geometrijo mreže celic, sosedstvom

celice, številom stanj, ki jih posamezna celica lahko zavzame, in pravilom za določitev novega stanja celice [18].

2.1.1 Geometrija mreže

Celice so lahko urejene v eno- ali večdimenzionalno pravilno mrežo. Najpogosteje se uporablja dvodimenzionalna mreža enakostraničnih likov. Uporabljene oblike so lahko različne, kar prikazuje slika 1.

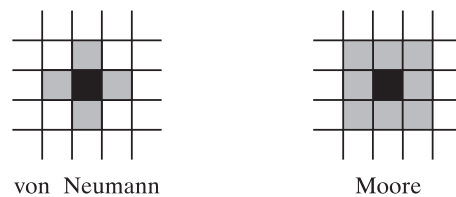


Slika 1. Geometrija mreže celic
Figure 1. Geometry of the array of cells

V primeru enodimenzionalnega celičnega avtomata je mreža sestavljena iz linije med seboj enakih celic.

2.1.2 Sosedstvo

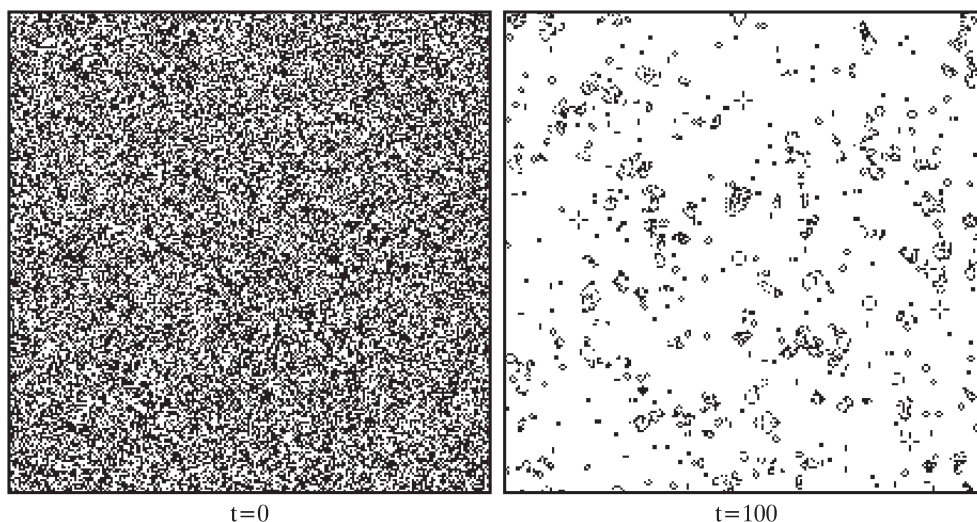
Znotraj mreže je treba določiti, katere celice bodo vplivale na določitev naslednjega stanja posamezne celice. V primeru dvodimenzionalne mreže kvadratne oblike sta zanimivi predvsem dve sosedstvi (slika 2): von Neumannovo, pri katerem so upoštevani štirje sosedje (severni, južni, vzhodni in zahodni) ter Moorovo, v katero so poleg omenjenih štirih celic vključeni še štirje diagonalni sosedje [13], [18].



Slika 2. Sosedstvi v primeru dvodimenzionalne kvadratne mreže
Figure 2. Neighbourhoods in the two-dimensional rectilinear array

Definicija sosedstva je v tesni povezavi s pravilom za določitev novega stanja. V nekaterih primerih je v sosedstvo vključena tudi celica, za katero določamo novo stanje. Za vsako celico je poleg tega značilno, da nastopa kot soseda več različnim celicam.

V zvezi s sosedstvom nastane problem robnih pogojev. Celice na robovih namreč nimajo definiranih vseh sosednjih celic. Ta problem je mogoče rešiti tako, da za manjkajoče sosede celic na robu področja določimo celice, ki ležijo na nasprotnem robu [19]. Tako dobimo neskončni prostor celic, ki ga v enodimenzion-



Slika 3. "Igra življenja"
Figure 3. The "game of life"

alnem primeru opišemo s krožnico, v dvodimenzionalnem pa s toroidom. Pri modeliranju problem robnih pogojev velikokrat rešujemo tako, da na robovih predpišemo določena stanja celic oziroma spremenjeno pravilo določanja novega stanja z namenom modeliranja določenega fenomena.

2.1.3 Stanja celice

Število mogočih stanj posamezne celice pri večini modelov, ki jih lahko zasledimo v literaturi, ponavadi ni večje od 4. Raznolikost in kompleksnost lahko zasledimo že pri sistemih, kjer celice zavzamejo eno od dveh stanj. Tudi ta lastnost je v tesni medsebojni odvisnosti s pravilom določitve novega stanja.

2.1.4 Pravilo določitve novega stanja

Osnovni vir raznolikosti, značilne za celične avtomate, je veliko mogočih pravil za določitev novega stanja celice v avtomatu glede na definirano sosedstvo. Če s K označimo število mogočih stanj posamezne celice in z N število celic v sosedstvu, je število mogočih pravil K^{K^N} . Za binarni avtomat (dve stanji posamezne celice) in von Neumannovo sosedstvo je mogočih več kot 65000 pravil, za Moorovo sosedstvo ($N=8$) pa 10^{77} [18]. Na splošno lahko pravilo določitve novega stanja zapišemo kot:

$$a_{x,y}(t+1) = f(a_{x\pm i, y\pm j}(t-l)), \quad (1)$$

kjer so vrednosti i in j odvisne od definirane sosedstva, $a_{x,y}$ je stanje celice na poziciji (x, y) , l pa vpliv prejšnjih generacij celic.

2.2 Lastnosti celičnih avtomatov

Za celične avtomate je značilna diskretnost prostora (zgrajeni so iz mrež celic), diskretnost časa (stanje vsake celice se spreminja v zaporedju diskretnih časovnih korakov) in diskretnost stanj (vsaka celica lahko zavzame eno od stanj, katerih število je končno). Celični avtomati so homogeni. Vse celice so namreč identične in urejene v pravilno mrežo. Pri uporabi celičnih avtomatov v modeliranju ta lastnost ni vedno prisotna (posebne oblike in robni pogoji). Pomembna lastnost celičnih avtomatov je sinhroniziranost prehajanja med stanji. Stanja vseh celic se namreč spreminjajo sočasno v odvisnosti od stanj sosednjih celic v prejšnjem časovnem trenutku.

Za pravilo prehajanja med stanji je značilno, da je deterministično, prostorsko lokalno (pravilo na posameznem mestu mreže celic je odvisno samo od stanja celic v lokalnem sosedstvu), časovno lokalno (odvisno samo od stanj v določenem številu predhodnih korakov, ponavadi samo enem ali dveh) in uniformno (enako za vse celice v mreži). Tudi za uniformnost pravila velja, da v primeru modeliranja ni nujna.

Pomembna lastnost nekaterih celičnih avtomatov je reverzibilnost, ki je pogojena s pravilom za določitev novega stanja celic. Za reverzibilna pravila je značilno, da se novo stanje celice določi na podlagi sedanjega in predhodnega (za en časovni korak nazaj) stanja celice in njenih sosed. Za ta pravila srečamo v literaturi tudi oznako pravila drugega reda [19]. Najpomembnejša lastnost teh pravil je, da se bo, če v določenem trenutku razvoja avtomata zamenjamo trenutno stanje s predhodnim, ob uporabi enakega (reverzibilnega) pravila sistem vračal skozi vsa prejšnja stanja do začetnega.

3 Modeliranje s celičnimi avtomati

Najpogostejše orodje matematičnega modeliranja naravnih sistemov so diferencialne enačbe, ki opisujejo spremembe določene količine kot funkcijo pozicije in časa. Vse količine, kot tudi prostorske koordinate in čas, se pri teh modelih spreminjajo zvezno. Celični avtomati so popolnoma diskretni sistemi, pri katerih prostor ni zvezen, temveč je sestavljen iz mreže celic. Čas je zaporedje diskretnih korakov. V nasprotju z zveznostjo opazovane količine pri modelih, ki temeljijo na diferencialnih enačbah, lahko celice pri celičnih avtomatih zavzamejo enega od diskretnih stanj, katerih število je končno. Zato so celični avtomati primerno orodje predvsem za modeliranje sistemov, ki so prostorsko regularni oziroma zgrajeni iz velikega števila podobnih sestavnih delov, za katere je značilna lokalnost interakcij [18].

Naloga modeliranja s celičnimi avtomati je poiskati pravilo, katerega rezultat bo razvoj celičnega avtomata, ki bo zadovoljiva slika dogajanja v naravnem sistemu (inverzni problem). Pri uporabi celičnih avtomatov za modeliranje bioloških sistemov je eden bistvenih problemov dejstvo, da gradniki bioloških sistemov navadno niso urejeni v pravilne mreže in da ponavadi ne reagirajo samo s svojimi sosedi v skladu z nespremenljivimi pravili. Kemični in fizikalni sistemi so z določenih vidikov preprostejši od bioloških in zato v nekaterih primerih lahko pričakujemo, da so bolj primerni za modeliranje s celičnimi avtomati [17].

3.1 "Igra življenja"

Osnovna ideja tega celičnega avtomata, ki ga je leta 1970 predstavil John Horton Conway, je bila iz preproste začetne konfiguracije "živih" celic (stanje 1) z uporabo "genetskih" pravil opazovati razvoj populacije. Pravila za preživetje, rojstvo in smrt je Conway izbral na podlagi obsežnega eksperimentiranja, pri čemer je želel konstruirati pravilo, pri katerem se v razvoju sistema ne bi niti rodilo niti odmrlo preveč celic. Poskušal je doseči, da bi bile dobljene konfiguracije lokalno povezane in hkrati globalno nepredvidljive. Pravila so definirana za Moorovo sosedstvo (8 celic) in so relativno preprosta [20]:

- **Preživetje.** Vsaka živa celica, ki ima natanko 2 ali 3 žive sosede, ostane živa tudi v naslednji generaciji.
- **Smrt.** Vsaka živa celica, ki ima 4 ali več živih sosedov, zaradi prenaseljenosti v naslednji generaciji umre. Vsaka živa celica, ki ima samo enega živega soseda, v naslednji generaciji umre zaradi izoliranosti.
- **Rojstvo.** Neživa celica, ki ima natanko 3 žive sosede, bo v naslednji generaciji zaživela.

Pomembna lastnost sistema je, da se spremembe dogajajo sočasno. Celice v določenem trenutku pomenijo eno generacijo v razvoju sistema. Conway je proučeval dogajanje glede na različne preproste začetne pogoje in ugotovil naslednje:

- Manjši del kombinacij živih celic sčasoma izgine, pri čemer se v nekaterih primerih to zgodi šele po dovolj velikem številu iteracij.
- Določene kombinacije živih celic ostajajo ves čas enake.
- Nekatero skupine živih celic ves čas oscilirajo med določenim (ponavadi manjšim) številom oblik.
- Oblike, ki v začetku niso simetrične, sčasoma lahko postanejo simetrične.

"Igro življenja" smo simulirali na kompatibilnem računalniku IBM-PC.

Na začetku smo v mreži dimenzij 225×225 z robovi, zaključenimi v toroidno strukturo, polovico celic naključno postavili na vrednost 1, kar je v modelu pomenilo žive celice. Situacija je prikazana na levi strani slike 3, kjer so žive celice prikazane črno. Po 100 iteracijah se populacija močno zredči (desna stran iste slike), nastanejo območja, kjer se razmere ne spreminjajo, in območja, v katerih skupine živih celic oscilirajo med manjšim številom različnih oblik. V nekaterih področjih pa se razmere še vedno spreminjajo - celice se rojevajo in umirajo po navidezno nepredvidljivih zakonitostih, sčasoma pa tudi te aktivnosti zamrejo.

3.2 Modeli rasti

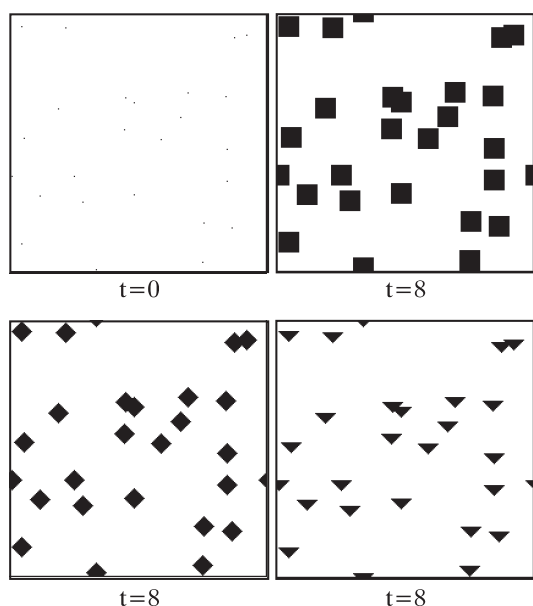
3.2.1 Neovirana rast

Preprosto pravilo, ki modelira monotono, neovirano rast, je naslednje [19]: "Če je stanje celice ali stanje katerekoli od celic v Moorovem sosedstvu enako 1, naj bo stanje celice v naslednjem koraku enako 1."

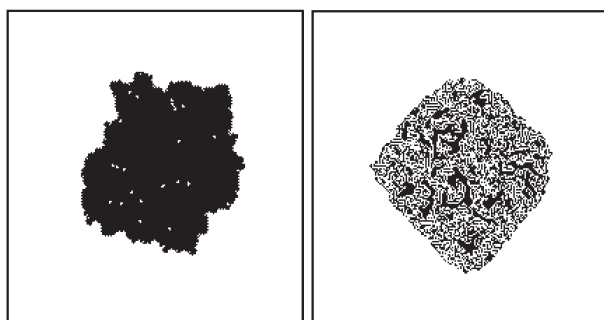
V mreži dimenzij 210×210 smo na začetku 25 naključno izbranih celic postavili v stanje 1 (slika 4 levo zgoraj). Rezultati simulacije so prikazani desno zgoraj. Po 43 korakih postanejo stanja vseh celic enaka 1 (nasičenje).

Enako pravilo smo uporabili tudi za von Neumannovo sosedstvo. Oblika rasti je spremenjena, kar je vidno na sliki 4 levo spodaj. Tudi hitrost rasti je v tem primeru počasnejša. Vse celice dosežejo stanje 1 po 67 korakih.

Če iz von Neumannovega sosedstva izpustimo severnega soseda, dobimo ob uporabi enakega pravila rast trikotne oblike, ki je prikazana na isti sliki desno spodaj in je še počasnejša. Popolno nasičenje dosežemo po 111 korakih.



Slika 4. Neovirana rast
Figure 4. Unconstrained growth



Slika 5. Omejena in tekmovalna rast
Figure 5. Constrained and competitive growth

Iz dobljenih rezultatov je razvidno, da vsak člen v disjunktivnem izrazu za pravilo, katerega pozicija v sosedstvu je stran od obravnavane (središčne) celice, povzroči rast v nasprotni smeri.

3.2.2 Omejena in tekmovalna rast

Če na obravnavanem sistemu uporabimo pravilo: "Stanje celice naj bo enako 1, če so stanja natanko treh, sedmih ali osmih sosed enaka 1, sicer naj bo nespremenjeno"; [19] dobimo zanimive oblike omejene rasti, ki spominjajo na rast lišajev (leva stran slike 5).

Pri spreminjanju začetnih pogojev smo ugotovili, da pri določenih konfiguracijah sistem kmalu preide v stabilno stanje in se ne spreminja več.

Če obravnavanemu pravilu dodamo spremembo: "Če so stanja petih sosedov enaka 1, bo stanje obravnavane celice v naslednjem koraku enako 0"; [19] dobimo primer tekmovalne rasti, ki je prikazana na desni strani iste slike.

Obe opisani pravili spadata v skupino **preštevalnih** pravil (ang. counting rules), pri katerih je stanje celice v naslednjem koraku odvisno od števila celic v sosedstvu, ki se nahajajo v določenem stanju. Poleg teh poznamo še **pragovna** pravila (ang. voting rules), pri katerih je določeno stanje celice posledica poljubnega števila celic z predpisanim stanjem, večjega od določenega števila (praga).

3.3 Reakcija Belousov-Zhabotinsky

3.3.1 Oscilirajoče kemične reakcije

Celične avtomate lahko uporabimo tudi za modeliranje oscilirajočih kemičnih reakcij, kakršna je reakcija Belousov-Zhabotinsky. Ta reakcija sodi v skupino redukcijsko-oksidacijskih (redoks) reakcij [21]. Železovi ioni ($\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$) katalizirajo oksidacijo malonske kisline $\text{CH}_2(\text{COOH})_2$, oksidant pa je bromatni ion BrO_3^- . Oscilacije koncentracij oksidirane (Fe^{3+}) in reducirane (Fe^{2+}) oblike katalizatorja povzročajo značilne oscilacije barve raztopine. Za barvni indikator uporabimo fenatrolin železov sulfat, ki spreminja barve v odvisnosti od koncentracij $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$. Periodo oscilacij lahko razdelimo v dve fazi, oksidacijo in redukcijo:



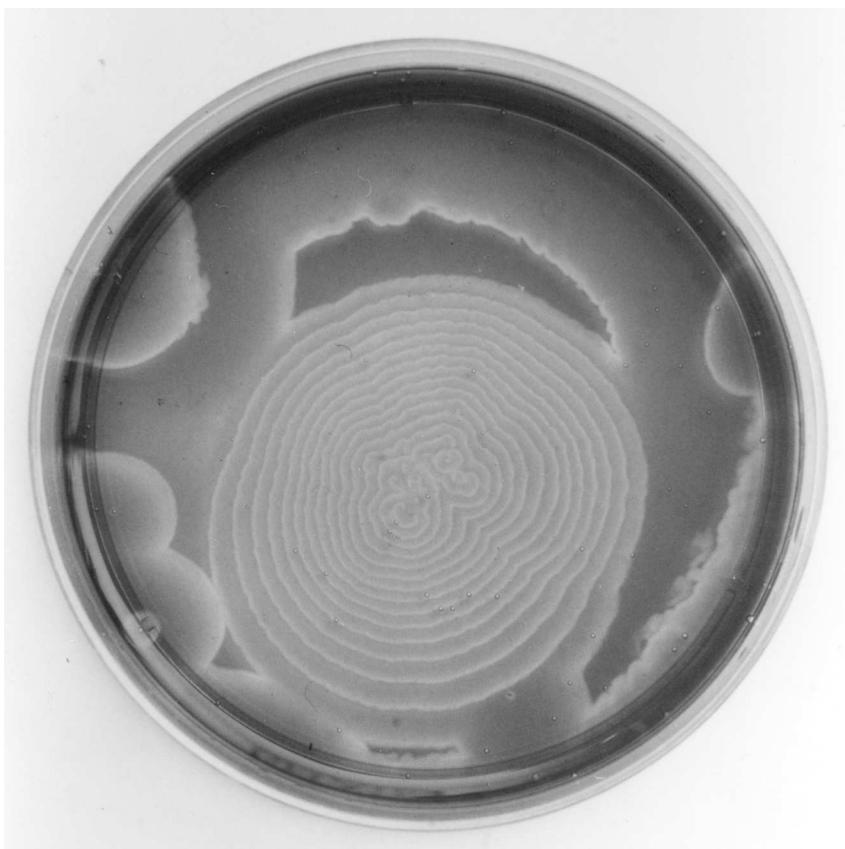
Katalizator je v oksidiranem stanju le kratek čas. V začetku je katalizator v celoti reduciran (samo Fe^{2+}) [22]. Barvni indikator povzroči rdečo obarvanost raztopine. Sledi oksidacija, ki jo opazimo kot krožne valove modre barve, ki nastajajo in se koncentrično širijo iz različnih točk izvora. Dogajanje je prikazano na sliki 6.

Pri trčenju dveh valov se medsebojno uničita. Eksperimentalno je bilo ugotovljeno, da so viri oscilacij rezultat lokalnih fluktuacij koncentracije (posebnih začetnih pogojev) [21]. Prelom valovne fronte lahko postane vir spiralne oblike. Zhabotinsky in Zaikin pa sta opazovala spiralne oblike, ki so bile posledica motnje v homogenosti sistema - lokalnega padca kislosti raztopine [23].

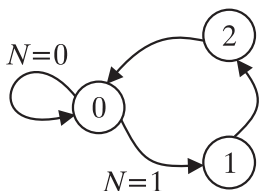
3.3.2 Modeliranje s celičnimi avtomati

Dogajanje med reakcijo Belousov-Zhabotinsky zelo dobro posnema celični avtomat s pravilom, ki sta ga predlagala J. M. Greenberg in S. P. Hastings [1], [2]. Celice v avtomatu imajo tri mogoča stanja [5]: neaktivno (0), aktivno (1) in refraktorno (2).

Pravilo je na sliki 7 prikazano z diagramom prehajanja stanj. Vsaka aktivna celica (1) bo v naslednjem koraku prešla v refraktorno stanje (2), v katerem ni sposobna aktivacije sosednjih celic. Vsaka celica v refraktornem stanju bo v naslednjem koraku prešla v neaktivno stanje



Slika 6. Fotografija reakcije Belousov-Zhabotinsky
Figure 6. Photography of the Belousov-Zhabotinsky reaction



Slika 7. Greenberg-Hastings-ovo pravilo
Figure 7. Greenberg-Hastings' rule

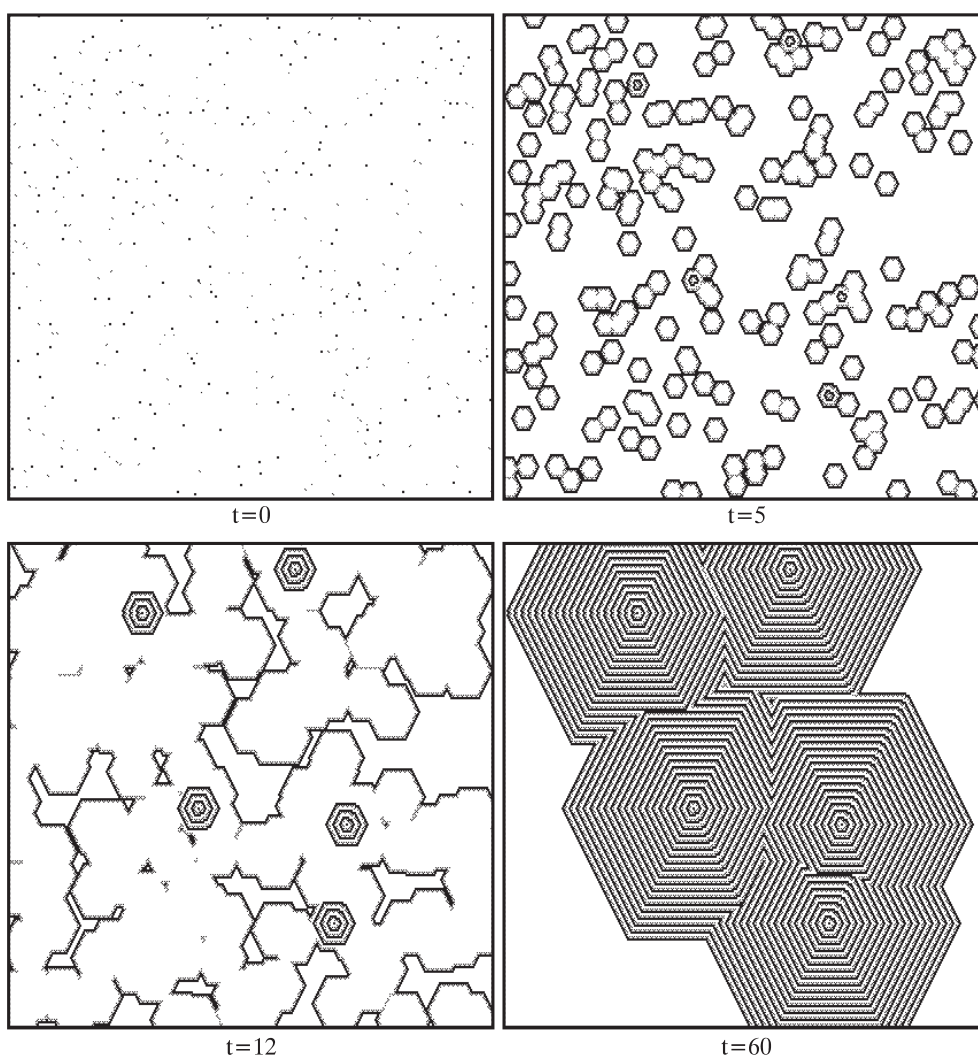
(0). Refraktorno stanje celice je tako časovna zakasnitev enega koraka pri prehodu iz aktivnega v neaktivno stanje. Neaktivna celica bo postala aktivna, če bo vsaj ena od šestih sosednjih celic aktivna.

Model reakcije Belousov-Zhabotinsky smo na podlagi Greenbergovega pravila zgradili s celičnim avtomatom s heksagonalno mrežo. Robov pri tem modelu nismo zaključili v toroidno strukturo, temveč smo za manjkajoče sosedne celice na robovih predpisali nespremenljivo neaktivno stanje (0). Tako je bilo obnašanje modela bliže realnosti. Mrežo smo zgradili z 210×210 celicami heksagonalne oblike. Na začetku smo 200 naključno izbranih celic postavili v aktivno in enako število v refraktorno stanje. Začetno stanje in razvoj avtomata prikazuje slika 8.

Aktivne celice so označene črno, neaktivne belo in celice v refraktornem stanju sivo. Na sliki 8 zgoraj desno vidimo veliko enojnih valov, ki v medsebojnem trčenju z drugimi valovi oziroma na robu izginejo (levo spodaj). Nekaj točk pa neprekinjeno generira oscilacije, ki se širijo po prostoru, kar je prikazano na sliki 8 desno spodaj.

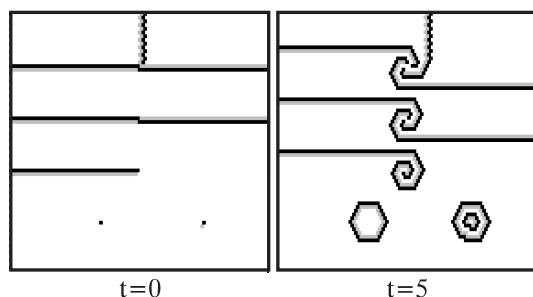
V naslednjem poskusu smo proučevali vpliv začetnih pogojev na obliko oscilacij in prišli do naslednjih osnovnih struktur [3]:

- Izolirana aktivna celica (obkrožena s samimi neaktivnimi celicami) povzroči nastanek enojnega vala, ki se razširja v krožni obliki.
- Aktivna celica, ki ima eno od sosed v refraktornem stanju, postane stalen vir oscilacij okrogle oblike, ki se koncentrično razširjajo.
- Celica na koncu linije aktivnih celic, ki imajo v sosedstvu linijo refraktornih celic (liniji sta druga poleg druge), postane vir enovejnega spiralnega vzorca, ki se širi.
- Celica na stiku dveh linij aktivnih in refraktornih celic z obrnjeno orientacijo postane vir dvojnega spiralnega vzorca.



Slika 8. Model reakcije Belousov-Zhabotinsky
Figure 8. Model of the Belousov-Zhabotinsky reaction

- Celica na stiku treh linij aktivnih in refraktornih celic postane vir trivejne, razširjajoče se spirale.



Slika 9. Značilne strukture
Figure 9. Typical structures

Opisane osnovne strukture, ki jih prikazuje slika 9, so stabilne. Pri trčenju valovnih front dveh struktur iz različnih virov pride do medsebojnega uničenja, viri pa

ostajajo nespremenjeni skozi celoten potek simulacije. Spremembe opazimo le pri obliki vira dvo- oziroma trivejne spirale, kjer se izmenjujejo oblike s povezanimi vejami (skupno jedro vira) z oblikami, kjer so posamezne veje ločene. Tudi ta lastnost je že bila opažena v realni reakciji Belousov-Zhabotinsky [23].

4 Sklep

Celični avtomati so dinamični sistemi, pri katerih sta prostor in čas diskretna. Stanja celic se spreminjajo sinhrono v skladu z determinističnim pravilom, ki je lokalno in uniformno. Celični avtomati so učinkovito orodje za modeliranje številnih naravnih sistemov in učinkovita alternativa klasičnim pristopom k modeliranju, ki temeljijo na diferencialnih enačbah. Modeli z diferencialnimi enačbami so ponavadi računsko zahtevni tako glede porabe računalniškega časa kot tudi prostora. Za učinkovito modeliranje je pri uporabi

tovrstnih modelov potrebna zmogljivejša in zato dražja računalniška oprema. V nasprotju s tem so celični avtomati razmeroma preprosti za uporabo tudi na manj zmogljivih računalniških sistemih. S stališča modeliranja so celični avtomati primerni predvsem za proučevanje obnašanja sistemov, ki so sestavljeni iz velikega števila podobnih sestavnih delov, katerih obnašanje je mogoče relativno natančno določiti. Take sisteme pogosto srečamo na področju kemije in fizike, pa tudi biologije, predvsem pri proučevanju populacijske dinamike in meh-anizmov rasti.

V prihodnosti lahko pričakujemo razvoj predvsem v smeri iskanja novih tehnik za določanje pravil, ki bodo sposobna reproducirati obnašanje realnih sistemov (inverzni problem). Za nadaljnji razvoj je pomembno, da so celični avtomati tako glede zgradbe kot tudi glede načina delovanja zelo prikladna struktura za realizacijo na prihajajočih generacijah vzporednih računalnikov.

5 Literatura

- [1] J. M. Greenberg, S. P. Hastings, Spatial Patterns for Discrete Models of Diffusion in Excitable Media. *SIAM J. Appl. Math.*, Vol. 34, No. 3, May 1978, str. 515-523.
- [2] J. M. Greenberg, B. D. Hassard, S. P. Hastings, Pattern Formation and Periodic Structures in Systems Modeled by Reaction-Diffusion Equation. *Bulletin of the American Mathematical Society*, Vol. 84, No. 6, November 1978, str. 1296- 1327.
- [3] B. F. Madore, W. L. Freedman, Computer Simulations of the Belousov - Zhabotinsky Reaction. *Science*, 222 (1983), str. 615-616.
- [4] Y. Oono, M. Kohmoto, Discrete Model of Chemical Turbulence. *Physical Review Letters*, Vol. 55, No. 27, 30. December 1985, str. 2927-2931.
- [5] H. Hartman, P. Tamayo, Reversible Cellular Automata and Chemical Turbulence. *Physica D*, 45 (1990), str. 293-306.
- [6] T. Kitagawa, Cell Space Approaches in Biomathematics. *Mathematical Biosciences*, 19 (1974), str. 27-71.
- [7] W. Düchting, T. Vogelseanger, Aspects of Modelling and Simulating Tumor Growth and Treatment. *J Cancer Res Clin Oncol*, 105 (1983), str. 1-12.
- [8] J. D. Victor, What Can Automation Theory Tell Us About the Brain? *Physica D*, 45 (1990), str. 205-207.
- [9] M. Kaufmann, Logical Analysis of Lymphocytes Interactions During an Immune Response. v J. Demongeot, E. Golès and M. Tchuente, editors. *Dynamical Systems and Cellular Automata*. Academic Press Inc., London, 1985, str. 207-220.
- [10] H. B. Sieburg, J. A. McCutchan, O. K. Clay, L. Cabalero, J. J. Ostlund, Simulation of HIV Infection in Artificial Immune Systems. *Physica D*, 45 (1990), str. 208-227.
- [11] S. Wolfram, Random Sequence Generation by Cellular Automata. *Advances in Applied Mathematics*, 7 (1986), str. 123-169.
- [12] S. Wolfram, Universality and Complexity in Cellular Automata. *Physica D*, 10 (1984), str. 1-35.
- [13] N. H. Packard, S. Wolfram, Two-Dimensional Cellular Automata. *Journal of Statistical Physics*, Vol. 38, No. 5/6, 1985, str. 901-946.
- [14] T. Toffoli, N. H. Margolus, Invertible Cellular Automata: A Review. *Physica D*, 45 (1990), str. 229-253.
- [15] S. Takesue, Relaxation Properties of Elementary Reversible Cellular Automata. *Physica D*, 45 (1990), str. 278-284.
- [16] F. C. Richards, T. P. Meyer, N. H. Packard, Extracting Cellular Automation Rules from Experimental Data. *Physica D*, 45 (1990), str. 189-202.
- [17] H. Gutowitz, editor, *Cellular Automata: Theory and Experiment*. MIT Press, London, England, 1991.
- [18] B. Hayes, Computer Recreations: The Cellular Automata Offers a Model of the World and a World unto Itself. *Scientific American*, March 1984, str. 10-16.
- [19] T. Toffoli, N. Margolus, *Cellular Automata Machines: A New Environment for Modeling*. MIT Press, London, England, 1987.
- [20] M. Gardner, Mathematical Games: The Fantastic Combinations of John Conway's New Solitaire Game "Life". *Scientific American*, October 1970, str. 120-123.
- [21] M. V. Volkenshtein, *Biophysics*. Mir Publishers, Moscow, 1983, str. 538-547.
- [22] A. N. Zaikin, A. M. Zhabotinsky, Concentration Wave Propagation in Two-dimensional Liquid-phase Self-oscillating System. *Nature*, Vol. 225, 7. February 1970, str. 535-537.
- [23] A. T. Winfree, Spiral Waves of Chemical Activity. *Science*, Vol. 175, 11. February 1972, str. 634- 636.
- [24] S. Wolfram, editor, *Theory and Applications of Cellular Automata*. World Scientific Publishing Co Pte Ltd., Singapore, 1986.

Dejan Šemrov je diplomiral leta 1991 in magistriral leta 1994 na Fakulteti za elektrotehniko in računalništvo Univerze v Ljubljani, kjer je zaposlen kot mladi raziskovalec. Leta 1994 je bil habilitiran v asistenta za področje elektrotehnike. Ukvarja se predvsem s proučevanjem in uporabo različnih računalniških orodij za modeliranje dogajanja v bioloških sistemih.

Tadej Kotnik je diplomiral leta 1995 na Fakulteti za elektrotehniko in računalništvo Univerze v Ljubljani, kjer je zaposlen kot mladi raziskovalec. Leta 1996 je bil habilitiran v asistenta za področje elektrotehnike. Ukvarja se s proučevanjem učinkov električnih polj na biološke celice.

Damijan Miklavčič je diplomiral leta 1987, magistriral leta 1991 in doktoriral leta 1993 na Fakulteti za elektrotehniko in računalništvo Univerze v Ljubljani, kjer je zaposlen kot asistent. Leta 1994 je bil habilitiran v docenta za področje elektrotehnike. Raziskovalni področji njegovega dela sta biomedicinska tehnika ter proučevanje učinkov elektromagnetnih polj na biološke sisteme.