

Е.Н ТРОИЦКИЙ, Р.А. ТИКИДЖИ – ХАМБУРЬЯН

НИИ Нейрокибернетики им. А.Б. Когана

Ростовский Государственный университет .

E-mail: etroy@nisms.krinc.ru

ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ МНОГОАГЕНТНЫХ СИСТЕМ И ИССЛЕДОВАНИЮ УСТОЙЧИВОСТИ АГЕНТОВ НА ОСНОВЕ БИОХИМИЧЕСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

Аннотация

В работе предложена система, состоящая из модели многокомпонентной биохимической среды и модели агентов. Среда представлена набором химических элементов с редукией как их количества, так и физико-химических характеристик молекул. В качестве агента определен участок среды, отделенный протяженной замкнутой границей и имеющий ряд дополнительных свойств. Для агента описаны механизмы его адаптации и эволюционирования, а также принципы его взаимодействия со средой. Описан способ реализации данной модели и дана оценка ее вычислительной емкости.

Введение. Известно, что даже простые биологические объекты, такие как клетки и микроорганизмы, проявляют высокий уровень сложности коллективного поведения [1, 2, 3]. Вместе с тем показано, что для межобъектного взаимодействия живые организмы используют относительно простые биохимические механизмы [2]. Математическое моделирование кооперативных действий биологических объектов традиционно проводится в концепции многоагентных систем (МАС) [1, 2, 4, 5, 6]. Однако в классических моделях МАС, как правило, априорно задаются способы взаимодействия между агентами [4, 5, 6]. В результате процесс формирования сигнальных (информационных) взаимодействий остается за рамками данного подхода. С другой стороны, этап выделения информационно-значимых химических переносчиков из множества первоначально несущественных веществ, обычно рассматривается как формирование протоязыка и является основой для развития кооперативного поведения агентов [1, 2].

Для реализации возможности изучения механизмов формирования информационных взаимодействий в модели необходимо введение дополнительных степеней свободы, что может быть достигнуто с помощью представления системы в виде редуцированной модели химической среды (РМХС) по аналогии с работами [7, 8, 9].

В работе рассматривается модель системы, состоящей из модели агента и среды, опирающейся на общую РМХС. В перспективе, с

помощью данного подхода, предполагается исследование условий возникновения устойчивых агентов, функционирующих в сложной химической среде, развития механизмов адаптации агента к плавно и скачкообразно изменяющимся внешним условиям, возникновение информационно-значимых веществ и взаимной адаптации и дифференциации агентов для более эффективного решения проблемы выживания.

Модель среды. Модель среды реализуется в виде 3-х мерной тороидальной поверхности, каждая точка которой характеризуется вектором неотрицательных взаимозависимых переменных. Каждая переменная определяет концентрацию соответствующего химического вещества в данной точке в данный момент. Правила взаимной зависимости переменных описываются РМХС, действующей внутри системы. Кроме того, в каждой точке среды присутствует свободная энергия, величина которой может изменяться от точки к точке и должна быть неотрицательной. В процессе моделирования в среде происходят химические реакции, изменяющие значения концентраций веществ в разных ее точках. Кроме химических реакций, в модели также реализована диффузия химических веществ по градиентам их концентраций, с учетом коэффициента диффузии каждого вещества. Среда представляет собой энергетически замкнутую систему, в которой, однако, свободная энергия перераспределяется по правилу, аналогичному правилу диффузии.

Редуцированная модель химической среды. РМХС описывается как некоторое подмножество известных химических закономерностей. Предлагается редуцировать количество элементов в системе до 4-х типов атомов (A, B, C и D соответственно). Атомы образуют химические вещества, общая формула которых имеет вид $A_i B_j C_k D_l$, где i, j, k, l – неотрицательные целые числа, атомарные индексы.

В модели не учитываются различные виды изомерии, пространственное строение молекул вещества и их геометрические особенности. Атомная масса одинакова для всех атомов и равна 1. Для увеличения количества степеней свободы в описании модели не ограничивается максимальный атомарный индекс в молекуле. Это обеспечивает возможность существования веществ произвольной сложности. Кроме того, каждому веществу присвоена определенная величина внутренней энергии, которая используется для расчета энергетического эффекта реакций с участием данного вещества.

Между веществами возможно протекание химических реакций следующего вида:



где E – энергетический эффект реакции, который может быть как положительной так и отрицательной величиной (экзо- и эндотермические реакции).

При этом должны выполняться следующие правила:

- 1) Закон сохранения вещества реализуется как $\sum r_i + \sum q_j = \sum m_i + \sum n_j$, и т.д.
- 2) Возможны только моно- и бимолекулярные реакции, включая реакции присоединения и распада.
- 3) Все реакции являются обратимыми и характеризуются двумя константами скорости, для прямой и для обратной реакции.
- 4) При протекании реакции, величина ее энергетического эффекта прибавляется к значению свободной энергии в данной точке среды. Невозможно протекание реакций с отрицательным энергетическим эффектом, для которых недостаточно свободной энергии в точке их протекания.

В начальный момент времени система содержит порядка $10^2 - 10^3$ относительно простых веществ (молекулярная масса не более 6 атомных весов) и до 10^2 реакций между ними. Эти, первоначально протекающие реакции, приводят к образованию только уже существующих в системе веществ. Кроме того, такие реакции характеризуются относительно низкой скоростью протекания. Реакции, приводящие к образованию более сложных веществ, имеющие высокую скорость и каталитические реакции могут протекать только внутри агента.

Модель агента. Агент – это участок среды, отделенный от своего окружения замкнутой границей, т.н. «мембранной», и обладающий рядом особых свойств. При протекании в агенте химических реакций, изменяется величина полной свободной энергии агента. Поиск, достижение и поддержание в окрестностях некоторой заданной оптимальной величины свободной энергии составляет целевую функцию агента.

Агент обладает рядом свойств, таких как форма, размер, способность к перемещению в среде, способность к выбору направления перемещения, проницаемость мембраны для различных веществ и др. Набор и характеристики таких свойств зависят от наличия химических веществ определенных классов в определенных концентрациях внутри агента. Эти свойства, в свою очередь, влияют на способность агента осуществлять те или иные действия в среде, определяют возможности для его эффективного функционирования.

«Мембрана» агента препятствует свободной диффузии сложных химических веществ. Перенос сложных веществ через «мембрану» возможен только при условии наличия внутри агента, в участке, непосредственно прилегающем к «мембране» определенных видов веществ-переносчиков. Моделирование переноса энергии через «мембрану» происходит со скоростью на несколько порядков меньше таковой для перераспределения энергии в среде.

Внутри агента, также как и в среде, протекают химические реакции, однако, список таких реакций отличается от аналогичного списка для среды. У каждого агента в системе присутствует т.н. «геном», определяющий список разрешенных реакций, протекание которых, в принципе возможно внутри данного агента. Это список является надмножеством списка реакций, осуществляющихся в среде, за пределами агента. «Геном» не меняется в процессе жизни агента и при порождении агентом «потомства», с некоторой вероятностью в «геноме» происходят «мутации».

Из списка разрешенных реакций внутри агента в каждый момент времени осуществляется только их часть, т.н. активные реакции. Какие из разрешенных реакций активны в данный момент, определяет «маска генома», которая, в отличие от «генома», может изменяться в течение жизни агента. Величина отклонения полной внутренней энергии агента от некоторого, изначально заданного оптимального значения, определяет вероятность изменения «маски генома» в каждый момент времени «жизни» агента. Это реализует механизм адаптации агента к изменяющимся условиям внешней среды.

Жизненный цикл агента определяется степенью отклонения полной величины его свободной энергии от оптимального значения, заданного в начале моделирования. Если эта степень уходит от оптимума дальше некоторого порогового значения и агент не может в течение критического времени вернуть ее в заданные рамки, он погибает. Если агент достигает значительной степени близости своей энергетической функции к оптимальному значению и сохраняет эту близость достаточно длительное время, он дает «потомство». При этом возможно возникновение «мутаций», изменяющих отдельные участки «генома». Например, возможно появление в «геноме» реакции, ранее не существовавшей в системе и приводящей к образованию новых химических веществ, имеющих новый набор свойств. Иерархия внешней и внутренних сред относительно РМХС показана на Рис. 1.

Такой подход к реализации многоагентной системы позволяет реализовать процессы, которые традиционно исследуются в концепции МАС (такие как адаптация, эволюционирование, взаимодействие со средой и межагентное взаимодействие), а также дает возможность изучать механизмы формирования информационного агент-агентного обмена. Однако подход к моделированию МАС, основанный на биохимических взаимодействиях, приводит к существенному увеличению вычислительной емкости модели, делая критичным выбор метода программной реализации.

Модель Химической Среды

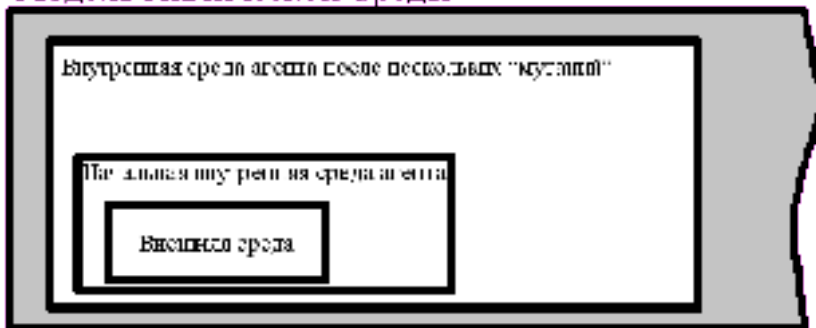


Рисунок 1. Иерархия химических сред.

Численное моделирование. Основные особенности реализации данной модели заключаются в:

- 1) необходимости хранения и обработки больших массивов независимых переменных, описывающих химические вещества и их свойства, концентрации веществ во всех точках среды, параметры химических реакций, информацию о «геноме» каждого агента и др.
- 2) высокой вычислительной емкости модели, связанной с необходимостью устойчивого дискретного моделирования непрерывных процессов на длительном промежутке времени.

Предварительное тестирование механизмов хранения и эффективного поиска информации о веществах и реакциях проводилось на основе программной реализации контейнерной структуры гибридного типа: бинарное дерево + хэш таблицы. Для решения дифференциальных уравнений, описывающих химическую кинетику, были выбраны полуаналитические методы. Для решения задачи диффузии веществ был использован метод прямого численного решения по Эйлерау.

Единицей условного модельного времени (УМВ) является шаг численного решения дифференциальных уравнений процессов, протекающих в системе. Для упрощения представления результатов моделирования единица УМВ приравнивается к 1мс.

При решении тестовых задач обнаружена стабильность вычислений в течение 200 часов УМВ. Отклонения результирующих величин концентраций, полученных по результатам моделирования, от значений вычисленных аналитически составили менее 0.1%.

Для описанных выше условий моделирования и решения были получены следующие значения времени вычислений для 1000с УМВ в одном дифференциальном участке среды на ЭВМ с ЦП Duron 700 (Таб.1 и 2).

Таблица 1. Время вычислений уравнений химической кинетики.

1 реакция	4 вещества	0.75 с
3 реакции	8 веществ	2.24 с
50 реакций	100 веществ	35.78 с

Таблица 2. Время вычислений уравнений диффузии.

1 уравнение	0.04 с
3 уравнения	0.11 с
50 уравнений	1.87 с

Таким образом, для расчета 1000с УМВ, для модели размером 10x10 дифференциальных участков, при условии наличия в системе 100 веществ и протекания 50 реакций, ЭВМ на базе ЦП Duron 700 требуется порядка 3700 секунд реального времени.

Заключение. Рассмотренная модель, основанная на РМХС и представлении о протяженном агенте с внутренней средой, позволяет расширить возможности исследования коллективного поведения агентов и их адаптации в концепции МАС. Предполагается, что в рамках описанного подхода, помимо решения классических задач МАС, будет возможно исследование возникновения сигнального протоязыка взаимодействий между агентами, основанного на обмене определенными, ранее не значимыми, химическими веществами. Наиболее интересной представляется задача наблюдения кооперативного поведения и, возможно, образование некоторых форм многоагентных образований, действующих как единое целое, возникших в результате ненаправленной извне эволюции колонии агентов, в системе с очень большим количеством степеней свободы

На основе полученных результатов предварительного тестирования, описанных выше, представляется возможным моделирование и исследование большой популяции агентов или значительного количества единичных агентов (для изучения их устойчивости). Достижение отношения реального времени к УМВ, равным 1, на 2-4 узловом кластере Athlon 2500 является приемлемым при реализации поставленной задачи.

Список литературы

1. В.Г. Редько, Эволюционная кибернетика, ISBN: 5-02-032793-X, М: Наука 2003 г.
2. Теоретические и математические аспекты морфогенеза. - М.: Наука, 1987 г.
3. Коган А.Б., Наумов Н.П., Режабег В.Г., Гораян Н.Г. Биологическая кибернетика. М: Высшая школа, 1972 г.
4. . E. Doran, S. Franklin, N. R. Jennings, and T. J. Norman. On cooperation in multi-agent systems. The Knowledge Engineering Review, 1997.
5. The Multi-Agent Systems Lab, <http://mas.cs.umass.edu/>.

6. American Association for Artificial Intelligence, <http://www.aaai.org>.
7. K Kaneko and C Furusawa "Robust and Irreversible Development in Cell Society as a General Consequence of Intra-Inter Dynamics", *Physica A* 280 (2000) 23-33.
8. C. Furusawa and K. Kaneko "Emergence of Rules in Cell Society: Differentiation, Hierarchy, and Stability", *Bull.Math. Biol.*, 60 (1998) 659-687.
9. C. Furusawa and K. Kaneko "Origin of Multicellular Organisms as an Inevitable Consequence of Dynamical Systems " *Anatomical Record*, 268 (2002) 327-342.