

Kvantumneurobioinformatika – mi köze van mindennek egymáshoz?

Koman Zsombor

Bevezető

E rövid tanulmány célja az informatika, az algoritmusok világa és a természettudományok közötti kölcsönhatások tettenérése pár példán keresztül. A dolgozat az egyszerűbb, egészen nyilvánvaló összefüggésektől az egyes tudományterületek felismeréseinek más területeken való alkalmazásán keresztül az eredendően közös erőfeszítésekkel megvalósítható álmokig terjedő együttműködési skálát tekinti át. Egy próbálkozás az összefüggésekről való nyitott, kíváncsi ugyanakkor komoly gondolkodásra.

Fizika és kvantummechanika

Az algoritmusok története az ókorig nyúlik vissza. Ekkor alakultak ki olyan jól ismert eljárások, mint az Euklidész-féle legnagyobb közös többszörös megtalálására szolgáló módszer illetve a prímszámok keresésére használatos Eratoszthenész szitája¹. Az algoritmusok mechanisztikus jellege miatt már ekkoriban adódott az elképzelés, hogy végrehajtásukhoz nincs szükség emberi intelligenciára, megvalósíthatóak lennének gépek segítségével. Ezen ötlet egyik nagyon korai képviselője az Arkhimédész által megszerkesztett fogaskerekek rendszerén alapuló szerkezet-terv, mely Eratoszthenész szitájának egy lehetséges implementációját vázolja.²

¹ KNUTH, Donald E. (1972), „Ancient babylonian algorithms” *Communications of the ACM*. [15] (7). 671-677.

² RÉNYI Alfréd (1973), *Ars mathematica*. Budapest, Magvető.

A sok korai algoritmikus gondolat, megoldás, kezdetleges implementáció³ ellenére tulajdonképpen a számítógép (elektronikus elvek alapján történő) megvalósítása vezetett a számítástechnika „belendüléséhez”, ez tette lehetővé az algoritmusok nagyon széles skálájának igazán hatékony megvalósítását. Ez is egy gyakori fenomén, mintázat a tudományok fejlődéstörténetében: egy bizonyos összefüggés elmés kihasználásának lehetősége felmerül már korábban, amely azonban más területek (pl. technológia) aktualitásában nem megvalósítható, azonban a későbbi fejlődés során visszanyúlva hozzá bebizonyosodik termékenysége. Valahogy így ragadható meg az informatika nagyon gyors fejlődése is: rengeteg alapanyag állt rendelkezésre, melyeket az addig élt legnagyobb matematikusok és tudósok dolgoztak ki. Így „csupán” megvalósításra vártak. Ez a megvalósítás alapvetően a technológia által vált lehetővé, jelen esetben főleg a fizika és a kvantummechanika fejlődésén keresztül.

A másik oldalon ugyanúgy megvan ezen együttműködés továbbsugárzása. A fizika keretében általában az szab határt a jelenségek megértésének, hogy egyesek túlzottan bonyolultak, analitikusan kezelhetetlenek, ezért vagy nagyon durva közelítésekkel kell élni, vagy esetenként külön eljárásokat kell kitalálni bizonyos nehézségek „megszelídítéséhez”. Nagyon kézenfekvő hát ilyen helyzetben a számítógépekhez nyúlni és az analitikusan nem vagy nagyon nehezen kezelhető esetekben numerikus megközelítésekkel élni⁵. Az aktuális természettudományos praxis elképzelhetetlen lenne az ilyen megoldások nélkül. Az első számítógépeknek köszönhető például, hogy ma már tudjuk, az időjárást nem csak az elmélet viszonylagos gyengesége miatt nehéz jóslni, hanem tulajdonképpen lehetetlen hosszú távú jóslatokat tenni pontosan a rendszer kaotikus voltából adódóan⁶ (ez annyit tesz, hogy a kiinduló állapotban még mérhetetlenül kis eltérések az idő múlásával óriási különbségeket eredményeznek a kimenetek között). Továbbá a kvantummechanikára erősen jellemző, hogy komplex rendszerek vizsgálatához vezet, ugyanis általában nem egy elektron viselkedése érdekli a kutatókat, hanem például egy sok ezer, milliárd részecskéből álló rendszer veze-

³ HYMAN, Anthony (1985), *Charles Babbage: pioneer of the computer*. Princeton, Princeton University Press.

⁴ METROPOLIS, Nicholas (2014), *History of computing in the twentieth century*. Amsterdam, Elsevier.

⁵ GREENSPAN, Donald, CASULLI, Vincenzo (1988), *Numerical analysis for applied mathematics, science and engineering*. Redwood City, Addison-Wesley.

⁶ LORENZ, Edward N. (1963), „Deterministic nonperiodic flow” *Journal of the atmospheric sciences*. [20] (2). 130-141.

tési tulajdonságai (hogyan egy olyan példára utaljak, amely újabb visszacsatolást jelent, ugyanis az efféle felfedezések vezetnek olyan technológia kialakításához, amely nélkülözhetetlen a számítógépek teljesítményének növeléséhez, valamint méretének és energiahasználatának csökkentéséhez).

Mindez csupán az első lépés ezen kölcsönhatás keretében, és éppen az a törekvés vezérel, hogy ennél mélyebbre mutató példák kerüljenek terítékre. Valamiféle gondolati kapcsolat felmutatásának céljából példaként egy fizikai jelenségen alapuló optimalizációs algoritmus kerül rövid bemutatásra.

A fémek (ötvezetek) edzése egy olyan eljárás, amit már valószínűleg az első kovácsok is alkalmaztak, természetesen a mögötte rejlő fizika ismerete nélkül. Az acél például főként vasat és szenet tartalmaz. Olvadáspontközeli hőmérsékletre hevítve a benne található szén nagyjából egyenletesen oszlik el a vasmasszában, majd ezt hirtelen lehűtve ebben az állapotban dermed meg. Tulajdonképpen az így kialakuló „szén-buborékok” okozzák az acél rugalmasságát⁷. Ugyanakkor, ha nagyon lassan hűtenénk le, a felületi feszültség (és ezáltal az energia) csökkentésének érdekében egyre nagyobb szén-somósodások alakulnának ki, ami nem eredményezne megfelelő rugalmasságot. Vagyis lassú hűtéssel érhető el az, hogy a rendszer megtalálja a közel optimális állapotot (ezt használják ki például mágneses információ-rögzítésnél). Ezt úgy lehet az optimalizációk világába átvinni, hogy a hőmérsékletet (ugyancsak a fizikai ismereteknek megfelelően) zajként fogjuk fel: úgy próbáljuk megtalálni a globális optimumot, hogy magas zajról indulva lassan fagyasztjuk be a rendszert, ezáltal csökkentve a lokális optimumokba való beragadás valószínűségét. Ezt az eljárást nevezi a szakzsargon szimulált dermesztésnek⁸. Szemléltetésképpen elképzelhetünk egy domborzatot, melynek keressük a legalacsonyabb pontját. Ekkor tulajdonképpen ez a fajta megközelítés azt mondja, hogy először nézzünk rá jó messziről, és így a nagy különbségeket érzékelve csupán, próbáljunk a völgyek irányába orientálódni, majd egyre jobban ráközelítve pontosítsuk a becslésünket. Tulajdonképpen azt a hétköznapi intuíciónkat helyezhetjük mögé, hogy ha túlságosan belemerülünk egy problémába, akkor nem látva a nagyobb skálájú összefüggéseket, jó eséllyel elmulasztjuk az optimális megoldás megtalálását.

⁷ Tulajdonképpen az egyenletesen eloszló összetételbeli inhomogenitások lecsökkentik az anyag szilárdságát/rugalmasságát biztosító diszlokációk - vonalhibák - semlegesítődésének valószínűségét.

⁸ KIRKPATRICK, Scott, et al. (1983), „Optimization by simulated annealing” *Science*. [220] (4598). 671-680.

Érdekes összefüggés fedezhető fel abban is, hogy a szimulált hűtés egyik legelterjedtebb továbbgondolása, feljavítása szintén egy fizikából fakadó ötleten alapszik. Az itt közrejátszó jelenség az alagúteffektus. Tulajdonképpen arról van szó, hogy a radioaktív bomlás során az atommagból távozó részecske (például az urán bomlásakor az alfa-részecske) a klasszikus elképzelés alapján nem akkora energiájú, amekkora szükséges lenne ahhoz, hogy megmássza az atommaggal való kölcsönhatásából származó potenciálgátat⁹. A kvantummechanika azonban magyarázatot ad erre a jelenségre, ugyanis állítása szerint megvan a pozitív valószínűsége annak, hogy a részecske, mintha egy láthatatlan alagúton kelne át, megkerüli a magas potenciállal rendelkező állapotot, és annak túloldalán tűnik fel. Ezen lehetőség magyarázata az anyag hullám természetével függ össze, mely azonban nem képezi a taglalt téma fókuszát, ezért nem kerül részletezésre. Ami sokkal lényegesebb a tanulmány szempontjából az, hogy ezt a gondolatot sikerült beépíteni az előzőleg taglalt optimalizációs eljárásba, így alakult ki a kvantumumos dermesztés nevet viselő megoldás¹⁰. A kiegészítés abban áll, hogy adott energiájú (ami megfeleltethető a hőmérséklettel és a zajszinttel) állapotból egy sokkal magasabb energiát igénylő állapotot alagúthatás segítségével átkelhetünk egy a kezdetihez hasonló energiájú állapotba, melynek környezetében végül esetlegesen jobb optimumot sikerül találni. Mint kiderült ez valóban sokat segít az algoritmuson, ha nagyon göröngyös, ormokkal és szakadékokkal nehezített optimalizációs domborzatról van szó.

Arról volt szó tehát, hogy a kvantummechanika egy ilyen nehezen megfogható eredményét használjuk a szokványos számítógép számára írt algoritmusban. Hamar felvetődött azonban a kérdés, hogy ha ez ténylegesen egy a valóságban lejátszódó folyamat, akkor miért nem alakítunk ki olyan implementációt, mely ezt fizikailag megvalósítja. Mindezt azzal a várárással, hogy ez ilyen módon sokkal gyorsabb lesz, mert kiküszöbölődik egy közvetettségi viszony, tudniillik a szimulációé. Tulajdonképpen ez és több ehhez hasonló gondolat vezetett el a kvantumszámítógép ötletéhez, mely Szent Grálként csillogott a kvantuminformatikusok szeme előtt, akik hamarosan algoritmusok sokaságát alakították ki a hipotetikus kvantumumos visel-

⁹ MERZBACHER, Eugen (2002), „The early history of quantum tunneling” *Physics Today*. [55] (8). 44-50.

¹⁰ FINNILA, A. B., et al. (1994), „Quantum annealing: a new method for minimizing multidimensional functions” *Chemical physics letters*. [219] (5). 343-348.

kedésre alapozva¹¹. Ezek között sok olyan van, mely a klasszikus számítógép műveleteivel kialakítható megoldásokat messze lekörözi (mindez meghatározott típusú feladatokra igaz). A megvalósítás sokkal bonyolultabbnak bizonyult, mint azt eleinte képzelték. A kvantumos folyamatok ugyanis nagyon alacsony zaj esetében tudnak érvényre jutni, azaz általában nagyon alacsony hőmérsékleten kell dolgozni, vagy valamilyen más módszert kell kialakítani a rendszer izolálásához. A nehézségek ellenére úgy néz ki, hogy mostanra elkészültek a kvantumos számítógépek, melyek képesek megvalósítani a kvantumos dermesztést. Ilyen a D-Wave processzora is, melyből már az 1000 kvantum-bites (qubites) változat is elkészült¹². Talán eléggé szemléletesen tükrözi az irány fontosságát és a hozzá fűzött reményeket, hogy a Google és a NASA is rendelkezik ilyen processzorokkal, és erősen érdekelt a témában.

Ezzel a jövőbe mutató iránnyal záródik a fizikával kapcsolatos része a dolgozatnak, mely által láthatóvá válik, hogy a kvantummechanika gondolati síkon tudta alapvetően befolyásolni az informatika alakulását (a kvantum-informatika létrejötté). Ugyanakkor az is, hogy a két terület közötti szoros együttműködés és a határok feszegetése elvezetett egy új implementációs lehetőség feltárásához, melynek megvalósítása is a küszöbön van a kvantumszámítógépek alakjában.

Evolúció, biológia és játékelmélet

Valószínűleg nem újdonság az olvasó számára, hogy az evolúció és a biológia szavakat egymás mellett látja leírva. Ugyanakkor sokak esetében kérdéseket vethet fel az alcím harmadik kifejezése, a játékelmélet¹³. Erre az összefüggésre térnek ki pár gondolat erejéig.

A játékelmélet azt vizsgálja, hogy amikor két vagy több ágens (az adott játékban részt vevő szereplő) találkozik, a választott stratégiák függvényében milyenek lesznek a nyereségeik. Innen már csak egy lépés, hogy meglássuk az összefüggést az evolúció jelenségével. Ugyanis a természetes evolúció nem más, mint egy olyan játék, melyben fajok versen-

¹¹ CLEVE, Richard, et al. (1998), „Quantum algorithms revisited” *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, [454] (1969). 339-354.

¹² DWAVESYS (2015), *D-Wave Systems Announces the General Availability of the 1000+ Qubit D-Wave 2X Quantum Computer*. <http://goo.gl/ukAKeW>.

¹³ SIGMUND, Karl (1994), *Games of life*. Oxford, Oxford University Press.

genek egymással, és ahol stratégiájukat a genetikai állomány jelenti. Hogy ennek milyen köze van az informatikához, arra is hamarosan fény derül. Először is a számítástechnika rengeteg olyan problémával szembesült az idők során, melyekről kiderült, hogy nagyon nehéz őket megoldani. Nem azért, mert bonyolult feladatok ezek, sokkal inkább azért, mert az optimum megtalálása teljes keresést igényel a legtöbb esetben, így nem oldhatóak meg polinomiális időben (ezek az NP-nehez problémák)¹⁴. A lényeg az, hogy a tökéletes megoldás megtalálása évszázadokba vagy esetleg évmilliókba telne egy-egy nagyobb probléma esetén. Ugyanakkor az élővilágban is felbukkannak ehhez hasonló feladatok, amiket az élő rendszerek nap mint nap sikeresen megoldanak. Általában ezek a megoldások nem tökéletesek, de legtöbbször nagyon közel állnak az optimumhoz. Ezen kívül még egy jó tulajdonsággal is rendelkeznek: robusztusak. Ha kis módosítás történik, még nem dől romokba az egész, ha egy hangyát eltaposnak, attól még egész jól fog működni a hangyaboly. Innen indult tehát az a törekvés, hogy ezekre a feladatokra biológiailag inspirált heurisztikákat¹⁵ alkalmazzanak¹⁶.

Az ilyen megközelítések egy fontos csoportja a részecskeraj-optimalizáció¹⁷. Ezt a következőkben bemutatott példa szemlélteti. Egy téren galambok keresik a kenyérmorzskákat, és céljuk a legnagyobb kupac megtalálása. Ekkor tulajdonképpen három tényező befolyásolja a galambok haladását: a tehetetlenségük (amerre elindultak, arra könnyebben mennek tovább), amit látnak (amelyik irányba jó sok morzsát látnak, az igencsak vonzó számukra) és hogy a többiek merre mennek (nem szeretnének egyedül maradni, sem lemaradni a csapat által megtalált nagy zsákmányról). Az optimalizáció szempontjából ezeknek a tényezőknek mind megvan a maguk szerepe. A tehetetlenség simítja a keresést, és viszonylag védetté teszi a különféle mesterséges berezgések, beakadások „rémségeivel” szemben. A saját irányok fontossága azt eredményezi, hogy a galambok mozgásában kifejeződik az általuk begyűjtött információ, így lehetővé válik a közlés. Az pedig, hogy figyelnek egymásra azt eredményezi, hogy jó eséllyel sikerül megtalálni a globális optimumot, és nem lesz olyan egyszerű leragadni egy lokális kupacnál.

¹⁴ PAPADIMITRIOU, Christos H. (2013), *Computational complexity*. Hoboken, John Wiley and Sons Ltd.

¹⁵ A heurisztika egyszerűen egy olyan megközelítés, ami nem garantálja az optimum megtalálását, de valószínűleg elég jó eredményre vezet.

¹⁶ COLORNI, Alberto, et al. (1996), „Heuristics from nature for hard combinatorial optimization problems” *International Transactions in Operational Research*, [3] (1). 1-21.

¹⁷ KENNEDY, James (2011), „Particle swarm optimization” *Encyclopedia of machine learning*. Springer US. 760-766.

Ezen paradigma egyik megvalósítását jelenti tulajdonképpen a hangyaboly-optimalizációnak¹⁸ nevezett eljárás. Ilyenkor a feladat lényege, hogy a hangyák megtalálják az optimális utakat a különféle étellelőhelyek és a bázis között, mi több, jól osszák be az egyes irányokba haladó hangyák számát. Ezt úgy érik el, hogy feromonnyomok segítségével jeleznek egymás számára. Ha találtak valamit, izgalomba jönnek és kémiai anyagokat bocsátanak ki, amit a többiek érzékelné tudnak. A feromonok párolgása pedig lehetővé teszi, hogy a rövidebb utak részesüljenek előnyben. Például elképzelhetjük, hogy hangyák masíroznak a hangyaboly és az ételforrás között. Ekkor ha beteszünk valami akadályt az újukba, hirtelen összezavarodnak és véletlen bolyongásba kezdenek. De amint találnak valami nyomot, elindulnak rajta. Így kialakul két út: az akadály egyik illetve másik oldalán. Végül a hosszabb út hátrányba kerül, mivel a rajta haladó hangyáknak alacsonyabb lesz az izgatottsága mire visszaérnek a bázisig, és a nyom nagyobb része elpárolgott az út távolabbi szakaszain. Ennek köszönhetően sikerül megtalálni a rövidebb utat a kiindulóponttól a célig. A példa elég egyszerű, de az eljárás sokkal bonyolultabb helyzetekre is alkalmazható, illetve hasonló megfontolásokkal megközelíthetővé válik az egyik legismertebb NP-nehéz probléma, az utazó ügynök¹⁹ problémája is (sőt, mivel az NP-nehéz feladatok átalakíthatóak egymásba, ezzel egy általános heurisztikát kaptunk ezen esetek megközelítéséhez).

Világosan megfigyelhető tehát, hogy a biológia jelentős ihletforrás volt (és ma is az) az algoritmusok kialakításához, nagy bonyolultságú optimumkeresési feladatok közelítő megoldásához. Ahogy azt a fizika esetében is láttuk, itt is megtalálható a visszacsatolás. A biológiai kutatásban leggyakrabban komplex rendszerek²⁰ állnak a középpontban. Egy komplex rendszer attól komplex, hogy viselkedése nem értelmezhető egyszerűen a részek viselkedésének összegeként. Vagyis a részek közötti kölcsönhatások diffúziója olyan mintázatokat alakít ki a rendszerben, melyek megdöbbenőek, ha csak annyit tudunk, hogyan működnek az alkotórészek önmagukban. Gondoljunk csak egy egyszerű példaként a Mekkába zarándokló hívekre,

¹⁸ DORIGO, Marco, BIRATTARI, Mauro, STÜTZLE, Thomas (2006), „Ant colony optimization.” *Computational Intelligence Magazine, IEEE*. [1] (4). 28-39.

¹⁹ A feladat lényege, hogy az ügynöknek meg kell találnia a legrövidebb utat, mellyel bejárhatja az összes kiszemelt célpontot, mindegyiket csak egyszer érintve, és végül visszaérve a kezdeti pontba.

²⁰ DOOLEY, Kevin (1996), „Complex adaptive systems: A nominal definition” *The Chaos Network*, [8] (1). 2-3. CURTIS, Sean, et al. (2011): „Virtual Tawaf: A case study in simulating the behavior of dense, heterogeneous crowds” *Computer Vision Workshops*.

akik szeretnék megérinteni a Fekete Követ. Mindegyikük célja, hogy közelebb kerülhessen a középponthoz, akik végeztek, azok pedig távozhassanak. És ebből az egyszerű szabályból komplex mintázat alakul ki: a tömeg forogni kezd, mintegy körültáncolja a középpontot²¹.

Az ilyen jellegű helyzetek tanulmányozása éppen ezért általában nem kezelhető analitikus számolásokkal. Legtöbbször számítógépes szimulációk teszik lehetővé azt, hogy jobban megismerhetővé váljon a működési mechanizmus és a befolyásoló paraméterek jelentősége. Egy másik kiemelkedő példa az emberi genom szekvenálása²², amelyhez óriású mennyiségű gépi munkát kellett felhasználni, algoritmusok tömkelegét kidolgozni és feljavítani. Manapság is a bioinformatika élvonalában áll a szekvenálás és az így szerzett információk között felállítható kapcsolatrendszer²³.

Másrészt a biológiában is gyakran kell optimumot keresni. Itt térünk vissza a fejezet bevezetőjében felmutatott kapcsolatra a játékelmélet és evolúció között. Ugyanis, ha megértettük, hogy az evolúció tulajdonképpen egy biológiai játék, akkor abban aligha lehet más célja a résztvevőknek, mint maximalizálni a jussukat. Ebben az értelemben az evolúció is tulajdonképpen egy optimalizációs probléma, ahol az adott fajok keresik a lehető legnagyobb nyereséget az adott ökoszisztéma által képviselt játéktérben.

Ebből a gondolatból eredeztethetőek az evolúciós algoritmusok^{24,25}, melyek a következő megfontoláson alapulnak: alakítsunk ki olyan mesterséges ökoszisztémát, melyben az egyes játékosok nyeresége akkor maximális, ha megoldják azt a problémát, amit a tervező szeretne. És hogyan lehet legegyszerűbben mesterséges világokat létrehozni? Hát a számítógép segítségével. Az egyedek tulajdonképpen a genomjuk által lesznek képviselve, a probléma pedig valamilyen fitnessfüggvény (életképességet, átlagos utódok számát megadó függvény) maximalizálása lesz. Ezen függvény meghatározása pedig tulajdonképpen specifikálja a megoldandó feladatot. Ezek után a termé-

²¹ CURTIS, Sean, et al. (2011): „Virtual Tawaf: A case study in simulating the behavior of dense, heterogeneous crowds” Computer Vision Workshops.

²² A genom kis részleteiből a teljes szekvencia összeállítása óriási számítási kapacitást igényel, a feladat csak nagyon jól átgondolt és specializált algoritmusok segítségével hajtható végre.

²³ LANGMEAD, Ben, et al. (2009), „Ultrafast and memory-efficient alignment of short DNA sequences to the human genome” *Genome Biol.*, [10] (3). R25.

²⁴ DEB, Kalyanmoy (2001), *Multi-objective optimization using evolutionary algorithms*. XVI. kötet. Hoboken, John Wiley & Sons.

²⁵ BORGULYA István (2004), *Evolúciós algoritmusok*. Budapest-Pécs, Dialóg Campus.

szethez fordulunk és lekoppintjuk az evolúció tetszetős ötletét: először létrehozunk egy véletlenszerű populációt, melynek tagjai az életképességükkel arányosan hoznak létre utódokat, néha esetleg mutációkat hajtunk végre és türelmesen várunk, míg ez a mesterséges evolúció kitermeli számunkra azt a megoldást, amivel már elégedettek vagyunk. (A megállás kritériuma különböző lehet: a fitnessfüggvény adott értéket meghalad, sok iteráción keresztül sem észlelhető jelentős változás, vagy esetleg bizonyos előre meghatározott generációs szám elérése.)

És még csak most következik a csattanó... Mert jó: eddig sikerült megmutatni, hogy a természet mennyi szinten segítette az informatika és az algoritmusok világának kiteljesedését; de most jön a grandiózus visszacsatolás. Tulajdonképpen egy számítógépprogram megírásának lényege az, hogy valamilyen jól körülhatárolható feladatot minél gyorsabban és pontosabban teljesítsen. Tehát, ha kitalálunk egy olyan fitnessfüggvényt, mely jól leírja az adott elvárásokat, és alkalmazzuk az előzőekben ismertetett evolúciós stratégiát, akkor eljuthatunk a programozók álmához: ne kelljen megírni a programokat, csak mondjuk meg, hogy mit csináljon, és írja meg magát. Ez az, amit genetikus programozás néven emlegetnek²⁶.

Gondolatnak nagyon szép és bizonyára nagyon régen felmerült már ez az elképzelés sokakban, de a megvalósításhoz vezető komolyság első jeleit Koza mutatta 1991-ben²⁷. Kezdetben a problémát az optimalizálandó genon miben léte okozta. Ha például a programot képező bitek sorozatára próbáljuk alkalmazni az evolúciós paradigmát, elég hamar bajba kerülünk. Már az első lépésnél mély szomorúsággal szembesülünk, mikor kiderül, hogy a véletlenszerűen legenerált kódok jó esetben el sem indulnak, rossz esetben veszélybe sodorhatják a számítógépünket és adatainkat. Egy olyan megközelítésre volt szükség tehát, mely során a keresés megfelelő keretek között történik. Koza ötlete az volt, hogy használjunk műveleti fákat genomként. A műveleti fák lényege, hogy értelmezhető részekből építi fel a procedúrát: például, ha a feladat egy összefüggés megragadása, akkor a matematika műveleteiből, változókból és konstansokból. Így bizonyos, hogy csak értelmezhető, végrehajtható és biztonságos példányok jönnek létre. A keresést pedig a fák alrészeinek kombinálásával lehetett elérni. Ilyen módon sikerült is megoldani az első feladatokat, azaz a szimuláció a megadott bemenet-kimenet

²⁶ BANZHAF, Wolfgang, et al. (1998), *Genetic programming: an introduction*. I. kötet. San Francisco, Morgan Kaufmann.

²⁷ KOZA, John R. (1991): „Genetic evolution and co-evolution of computer programs” *Artificial life II*. (10). 603-629.

párok alapján megkonstruálta azt az összefüggést (az előre szolgáltatott műveletek felhasználásával), mely a legpontosabban adta vissza a várt eredményt. Nyilvánvalóan ez még távol áll attól, hogy bármilyen feladatot specifikálva a számítógép kidobjon egy annak megfelelő programot, de tény az, hogy műveleti fák segítségével bármilyen komplexitású algoritmus leírható, ennek mindössze a rendelkezésre bocsátott elemek szabnak határt. Vagyis ezt a megközelítést továbbgondolva azóta is a programozók lelkét gyönyörködtető eredmények születnek a bemutatott paradigma nyomán. (A legerősebb határt természetesen itt is a számítási komplexitás jelenti és az, hogy komplexebb feladatok megoldásához óriási kód-populációkra van szükség.)

Újból sikerült elkapnunk tehát a tudományterületek közötti oda-vissza pattanó ihletgomolya egy szálát. A számítógép lehetővé tette a modern értelemben vett genetika létrejöttét és az evolúciós gondolat elfogadottá válását. Ebből a gondolatvilágból kiindulva létrejött az evolúciós algoritmusok világa, ami visszacsatolódva mély gondolati hatással volt az informatika világára a genetikus programozás lehetősége és megvalósulásai folytán.

Neurológia

Valószínűleg nem fog nagy nehézséget okozni az olvasó meggyőzése arról, hogy a neurológiának igenis van köze az informatikához. Elég, ha arra gondolunk, hogy a mindennapokban is mennyire gyakran szerepelnek olyan kifejezések, mint „az agy egy számítógép”, „a számítógép gondolkodik”, „meg tudja értetni magát a géppel”, stb. Ugyanakkor éppen ez az interdiszciplináris terület szolgálhat jó példát arra, hogy nem elég valamilyen kölcsönhatást evidenciaként elfogadni: ettől még nem válik azzá, aminek hisszük. Ugyanis nagyon sokáig jellemző volt a területre, hogy rengeteg gondolati kapocs alakult ki és vált elfogadottá, mielőtt bármiféle megvalósított projekt ezt érdemben alátámasztotta volna. Tulajdonképpen az első igazán lényeges és megvalósítható ötlet ebből a témakörből a neurális háló²⁸ gondolata volt. A koncepció lényege, hogy szimuláljuk az idegrendszer egy részhálózatát a neuronok egy nagyon egyszerű modellje alapján. Ebben az esetben ezt a komplex sejtet egy gráf csúcsaként képzeljük el, melybe beérkeznek jelek a feléje irányított éleken, ezeket összeadja, esetleg egy aktivációs függvényt haddat rá, majd az így kapott értéket

28 HORNIK, Kurt, et al. (1989), „Multilayer feedforward networks are universal approximators” *Neural networks* 2. (5). 359-366.

továbbítja a belőle kiinduló éleken. A gráf tulajdonképpen egy úthálózatként képzelhető el a legegyszerűbben. Így a csúcspontok a kereszteződések, forgalmi csomópontok, a bemenő élek a beérkező sávok és a kimenő élek pedig a távozó sávok. A továbbított adatok pedig a közlekedő járművek. Ezen túl, ahogy az a valóságban is van, egyes utak forgalmasabbak, mások kevésbé forgalmasak, ezt a gráfelméletben az élek (utak) súlya jelképezi. Vagyis a működés alapvetően a következő: az autók beérkeznek a kereszteződésbe, és az összeg úgy oszlik el, hogy az összes kimenő út terheltsége azonos legyen (vagyis a szélesebb, nagyobb utakra többen mennek, a mellékutákba pedig alig). Tulajdonképpen az idegrendszer is valahogyan így működik, csak ott az autók helyett elektromos impulzusokról, a kimenő és bemenő sávok helyett pedig axonokról és dendritekről beszélünk. Az agyunk tehát ilyen rendszerek segítségével képes tanulni. Ugyanakkor az ilyen rendszerek gráfokkal (viszonylag egyszerűen és jól paraméterezhető matematikai objektumokkal) történő reprezentációja könnyen megvalósítható számítógépek segítségével. Már csak össze kellene illeszteni valahogy a kettőt, és elérhetnénk, hogy a számítógépek is emberként tanuljanak. De hogyan tanul az agy? A legegyszerűbb és legelső magyarázatok egyike szerint a szinapszisok erősségének változtatása által. Ahogyan változik a neuronok közötti áramátadás jósága, azonos beérkező impulzusokból más mintázatok alakulnak ki. Ezt az úthálózat kapcsán úgy szemléltethetjük, hogy változik az utak szélessége, járhatósága, így más eloszlása lesz a kimenő autóknak a fent leírt egyszerű szabály alapján, vagyis megváltozik a forgalom mintázata a városban. Ezek szerint, ha adott irányba szeretnénk változtatni a forgalmat, akkor vissza kell terjednie az információnak; például szólni kell, hogy szeretnénk, ha ide kevesebb autó jönne. Ekkor szűkíteni kell az utat, illetve az azt megelőző csomópontba beérkező utak teherbírását is érdemes lehet csökkenteni, stb. Ugyanígy működik a szélesség növelése, ha magasabb látogatottságot szeretnénk egy városrészben.

Alapvetően ilyen elvek mentén működnek a legegyszerűbb neurális hálóak, azzal a megköttéssel, hogy ott általában a terjedés a bemenettől a kimenetig irányítva halad úgynevezett rétegekbe szerveződő csomópontokon keresztül. Ez a neurológiából szerzett tudás beépítése a modellbe, ugyanis az agy legjobban feltérképezett területén, a látókéregben, ilyen jellegű szerveződés figyelhető meg. Tehát kezdetben van egy tetszőleges élsúlyokkal ellátott, adott szerkezetű gráf, végigterjed rajta a bemeneten kapott információ és kialakul valamilyen kimenet (ezt nevezi a szaknyelv *feedforward fázisnak*),

majd a várt kimenettől való eltérés – a hiba – visszaterjed, és annak megfelelően igazításra kerülnek a súlyok (backpropagation).

Ilyen háló segítségével megoldható feladat például, hogy egy fényképről eldöntse, egy arc látható-e rajta vagy sem. Ezek szerint annyi bemenő út lesz a hálózatba, ahány képpontból áll a kép, és elindítunk az egyes képpontok intenzitásával arányos számú autót. A hálózat végén pedig két nagy úton lehet kihajtani, az egyik fogja jelképezni a pozitív választ, a másik a tagadót. Ha tehát több autó megy ki az „igen” ágon, akkor ezt úgy értelmezzük, hogy a rendszer megítélése szerint igenis egy arc van a képen. Ugyanakkor az optimális kimenetet pár (általában ezres nagyságrendű) tanító esetre megadjuk és a visszaterjedés mechanizmusa által beállításra kerül az élek súlya. Esetenként ezt a folyamatot többször megismétlik. Ehhez hasonló módszereket alkalmaznak a fényképezőgépben levő arc-felismerőktől a kézírás digitalizálására szolgáló programokon keresztül a robotok járásának kalibrálásáig nagyon sok területen. Tulajdonképpen a mesterséges intelligencia egyik legsikeresebb eszközének tekinthető azóta is.

Így tanul az informatika az agyról szerzett tudásból, de mint láttuk, ezek a kapcsolatok általában visszafelé is segítő jellegűek. Gondoljunk csak a mai agy-kutatásban használt módszerekre, de talán már az orvostudományban használatos EEG is jó példa rá, hogy a számítógépek segítségével másodpercek alatt ki lehet termelni a fontos paramétereket egy sok ezer adatpontból álló információcsomagból (ezzel a jelfeldolgozás szakterülete foglalkozik). Napjainkban ütemes fejlődést mutatnak a tágabb értelemben vett agyszámítógép interfészek is. Sikerül finom-mechanikai eszközök segítségével jeleket továbbítani az idegrendszerből egy számítógépbe, ami azt feldolgozza és értelmezi. Ezek innen egy több ezer kilométerre levő számítógépbe juttathatóak ahonnan egy másik egyén koponyájába juthatnak. Ilyen módon valószínűsíthető már meg mesterséges telepátiát. Ugyanakkor hasonló fejlődés segít mozgatható művétagok létrehozásában, de egyszerűen az agykutatásban, az idegrendszer működésének közelebbi megismerésében is.

Ugyanakkor a most folyó neurológiai projektek közül a legnagyobbak közé tartozik úgy befektetett munkaerő, mint infrastruktúra szempontjából az agy működésének minél pontosabb modellezésére irányuló megakísérlet (Human Brain Project²⁹), ahol a neurális hálókkal ellentétben az a cél, hogy a lehető legrealisztikusabban sikerüljön modellezni az agyat. Itt a neuronok

²⁹ SHEPHERD, Gordon M., et al. (1998), „The Human Brain Project: neuroinformatics tools for integrating, searching and modeling multidisciplinary neuroscience data” *Trends in neurosciences*, [21] (11). 460-468.

már nem egy gráf csúcsai, hanem komplex szerkezettel rendelkező sejtek. Az elektromos impulzusok sem csak az axonokon és dendriteken keresztül terjednek, hanem a fizika törvényei szerint kiterjednek a neuron-közi térbe is, és még rengeteg más finomság is be van építve az algoritmusba, melyen több száz kutató dolgozik.

Mégis miért, kérdezhetnénk. Rengeteg válasz lehetséges erre a kérdésre. Például azért mert szeretnénk megérteni az agy működését minél pontosabban, ami segíthet az emberiség helyzetének újraértékelésében, a mesterséges intelligencia továbbfejlesztésében, betegségek kezelésében és még rengeteg területen.

Most azonban tekintsük a számítástechnika területét. Manapság egyre inkább elterjednek a sokmagú processzorok, ma már egy átlagos okostelefonban is ilyen található. Az elején az volt az elképzelés, hogy tegyünk több ugyanolyan, jól összehangolt processzort egymás mellé. Az utóbbi időben azonban egyre erőteljesebben feltörekvő irány, hogy használjunk bizonyos specifikus feladatokra kidolgozott magokat, amik ezeket a lehető leggyorsabban, legenergiatakarékosabban hajtják végre. Elterjedt például a grafikus kártyák programozása, ami tulajdonképpen azt használja ki, hogy egy ilyen kártyán rengeteg nagyon gyors, de korlátozott feladatok elvégzésére alkalmas mag található.

Másrészt, visszatérve a kiindulási ponthoz, az agyunk végül is egy számítógép. Még hozzá egy nagyon jól párhuzamosított, roppant gyors számításokat végző rendszer. Rengeteg kis processzorból áll, a neuronokból, melyeknél a leglényegesebb talán összeköttetésük és kölcsönhatásaik módja. Azaz a neurológia fejlődése, kiteljesedése a jövőre nézve újabb lehetőségekkel kecsegtet a számítógépes rendszerekre nézve: lehetségessé teheti a párhuzamosítás művészetének eltanulását az agytól. Azaz újra egy olyan esettel állunk szemben, ahol a tudományos fejlődés, a területek közötti szoros együttműködés egy új implementációs lehetőséget vet fel és ihlettel szolgál a számítógépek fizikai valóságának újratervezéséhez.

Konklúziók

Az áttekintett mozaikdarabkák remélhetőleg érzékelhetővé tették a különböző tudományterületek közötti mély kölcsönhatásokat. Jelen esetben az informatika és három más terület – a fizika, a biológia és evolúciós játékelmélet valamint a neurológia – közötti kapcsolatra került a hangsúly, viszont hasonló összefüggések fellelhetőek természetesen más témakörök esetében is.

Egyrészt elkerülhetetlen annak leszögezése, hogy a jelenben kibontakozó tudományos fejlődés nem lenne elképzelhető a számítógépek segítségével nélkül (műveletek millióit, milliárdjait hajtja végre másodpercenként egyetlen processzor – ennél viszont jóval kevesebbet egy professzor). Ugyanakkor már a számítógépek létrehozásához is szükség volt a fizika és kvantummechanika fejlődéséhez. Ugyanígy minden megvizsgált területen megfigyelhető volt, hogy a hatás nem egyirányú, az összes példaként felsorakoztatott irány mentén előkerültek olyan esetek, amikor a kölcsönhatás nem csak lehetővé teszi bizonyos új paradigmák formálódását, hanem mély gondolati, tudomány-filozófiai perspektívákat nyit meg, illetve gyakran új – eddig kihasználatlan, talán kihasználhatatlan – megvalósítási (implementációs) elképzelésekhez vezet el.

Szükséges kiemelni viszont, hogy nem elég a tág látótér, az hogy a szakszavak áthallásából gyönyörű ábrándok fakadnak. Kíváncsisággal társuló komolyságra van szükség ahhoz, hogy ezekből a kapcsolatokból sok tanulás és munka után valami olyan csoda jöhessen létre, mint a kvantumszámítógép, a genetikus programozás vagy az agy modelljére alapozott elosztott rendszerek. Végül ebben a szellemiségben Konfuciusz gondolatával zárulhat a tanulmány: „Amit hallok, azt tudom, amit látok, azt megjegyzem, amit teszek, azt megértem.”