

Az egyszerű fizikai rendszerektől, a bonyolult fizikai rendszereken át a komplex rendszerekig

Boda Dezső

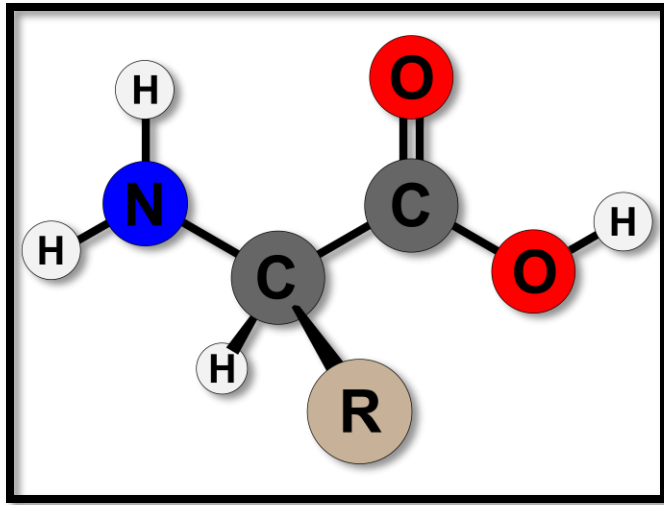
Természettudományi Központ,
Pannon Egyetem, Veszprém



msMS modeling and simulation
of Complex
Molecular Systems
research group

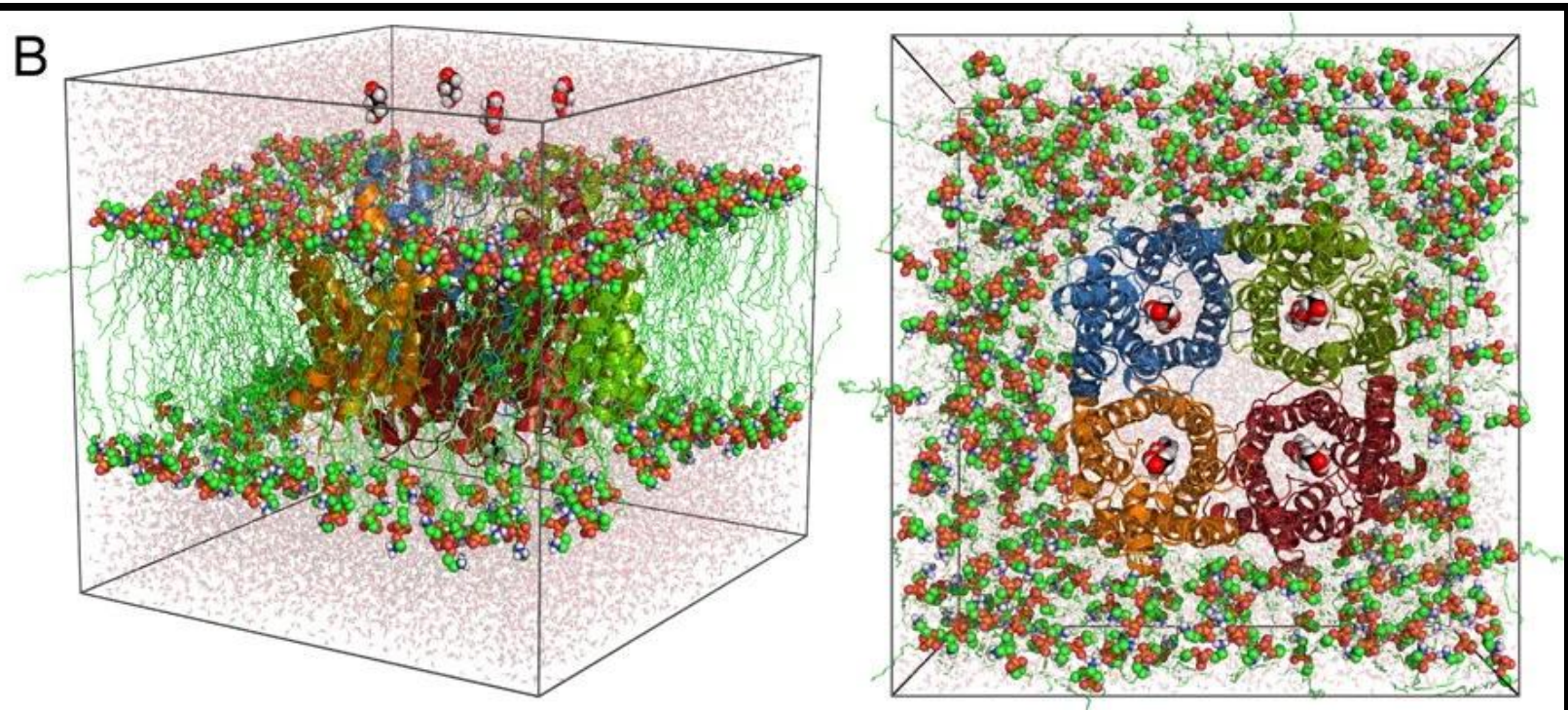
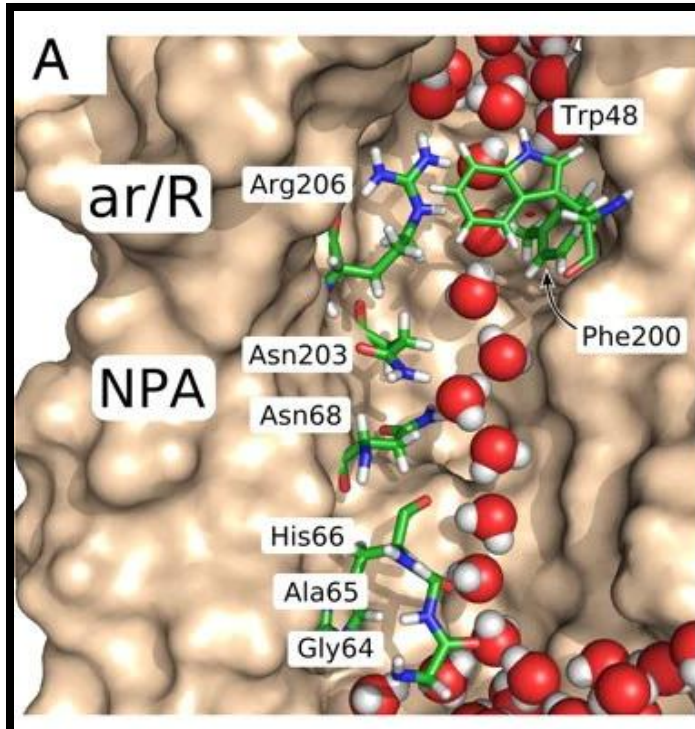
Egyszerű vs. összetett rendszer



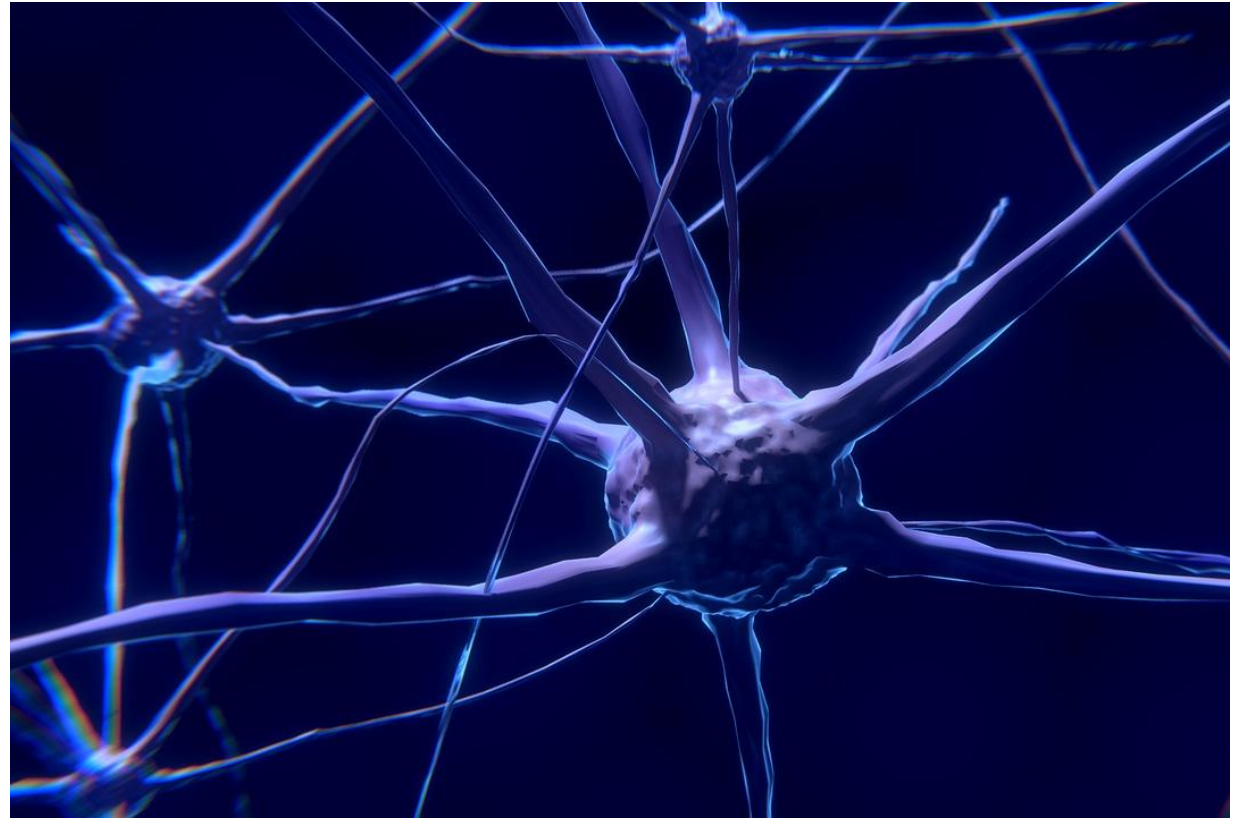


Egyszerű vs.

összetett rendszer



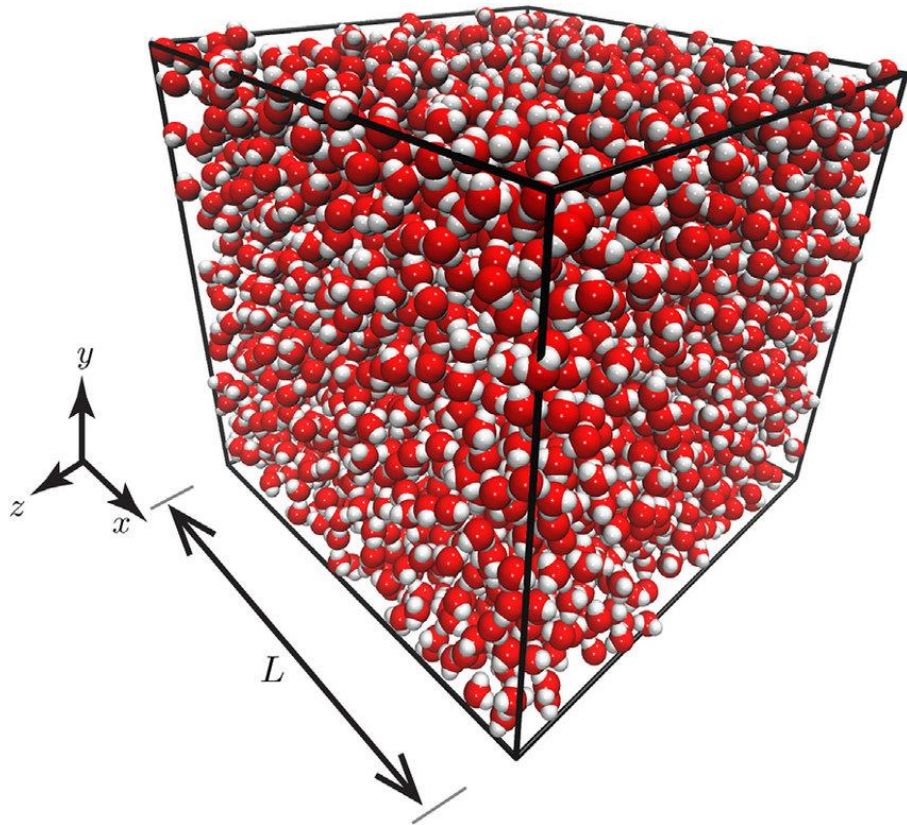
Komplikált vs. komplex rendszer



Komplikált vs. komplex rendszer

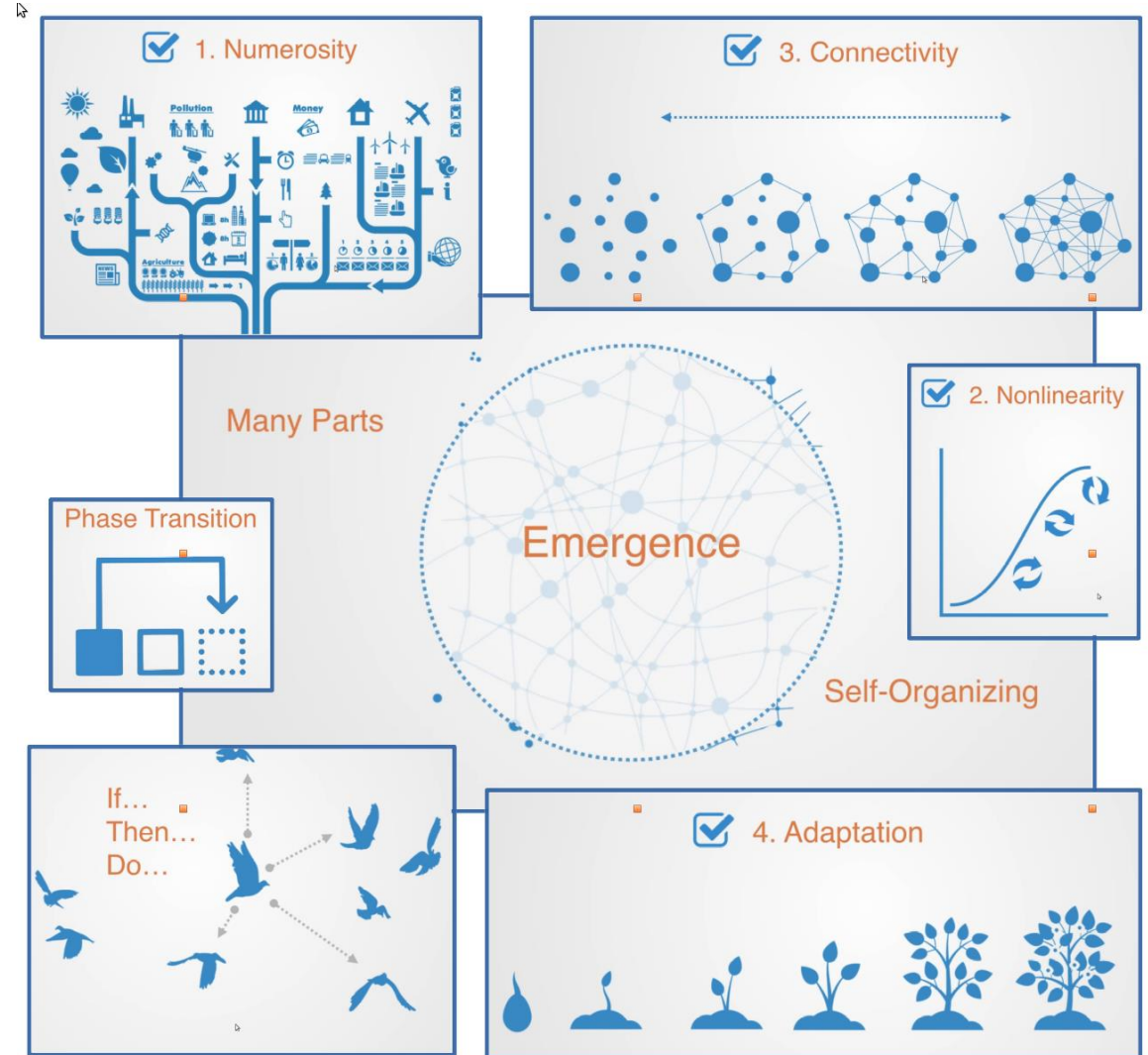


Komplikált vs. komplex rendszer

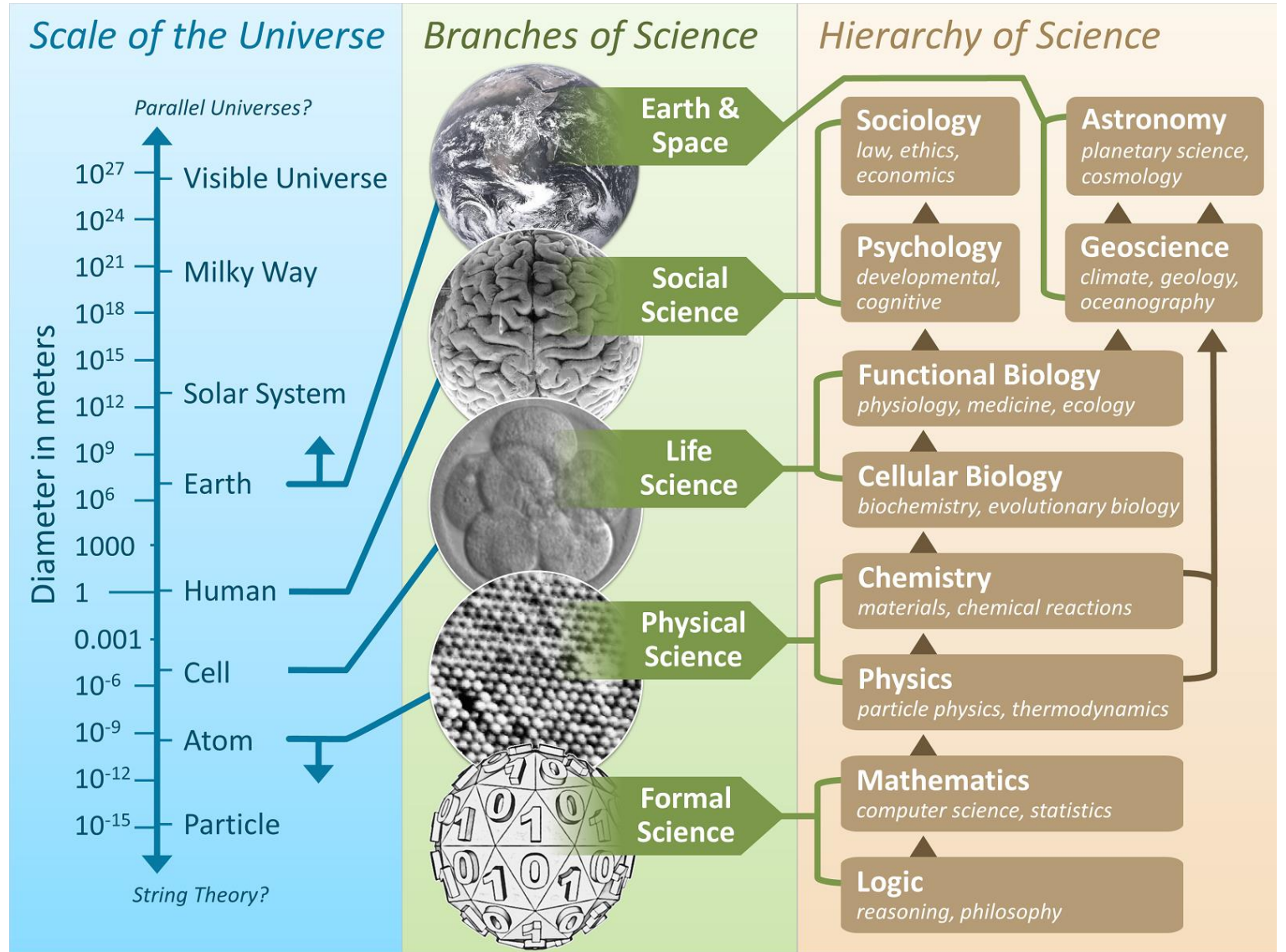


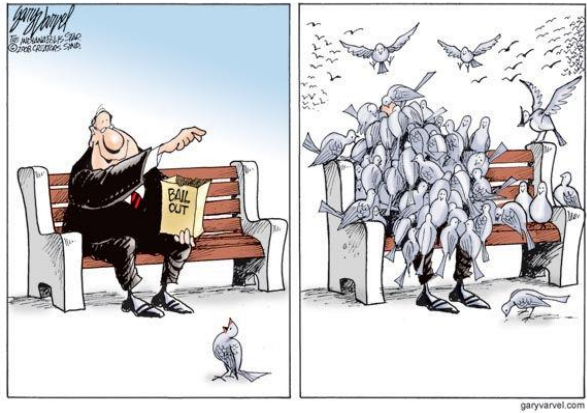
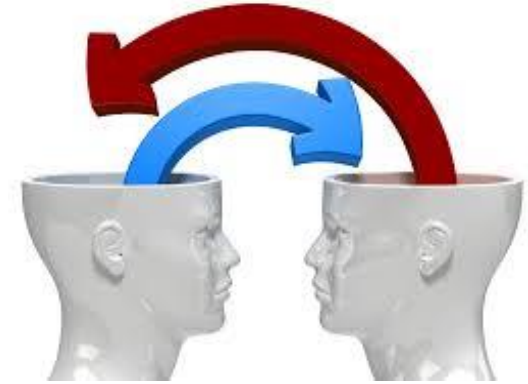
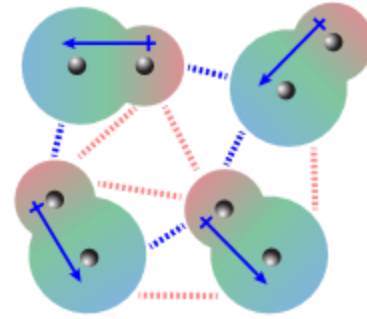
Komplex rendszer:

- A komplex rendszer olyan **hierarchikus** struktúra, amely a struktúra alsó szintjén nagyon sok komponensből (elemből, összetevőből, **ágens**ből) áll, amelyeknek a **kölcsönhatásai** és a **szabályok** által vezérelt adaptív viselkedésük egy spontán (önszervező) **emergens rend**hez (viselkedéshez, mintázathoz) vezet a struktúra magasabb szintjein.
- A rendszer szintjei és komponensei között **visszacsatolások** működnek, amelyek lehetővé teszik az ágensek **adaptív** válaszát az őket ért behatásokra.

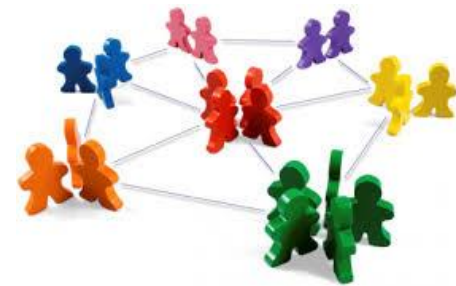


Hierarchia: hosszúság és időskálák

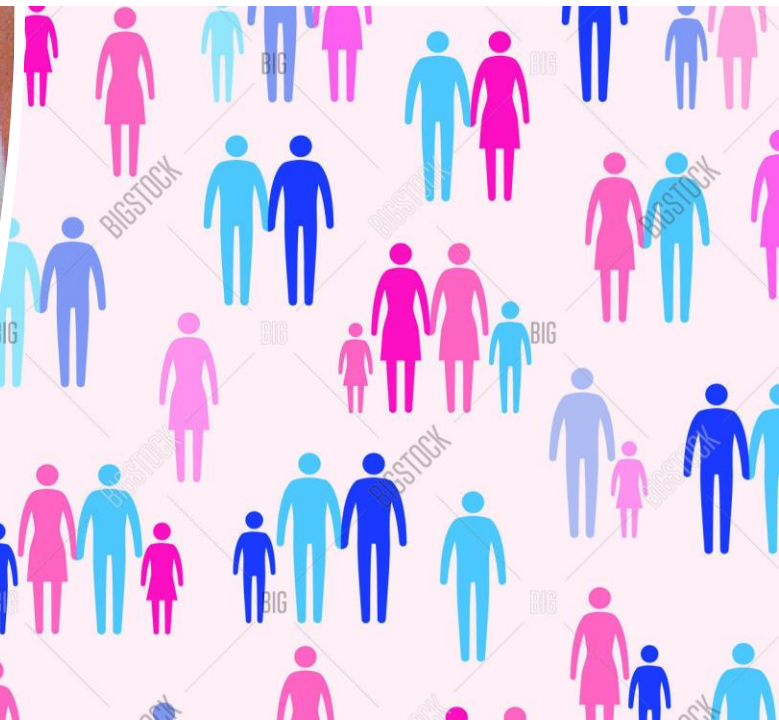
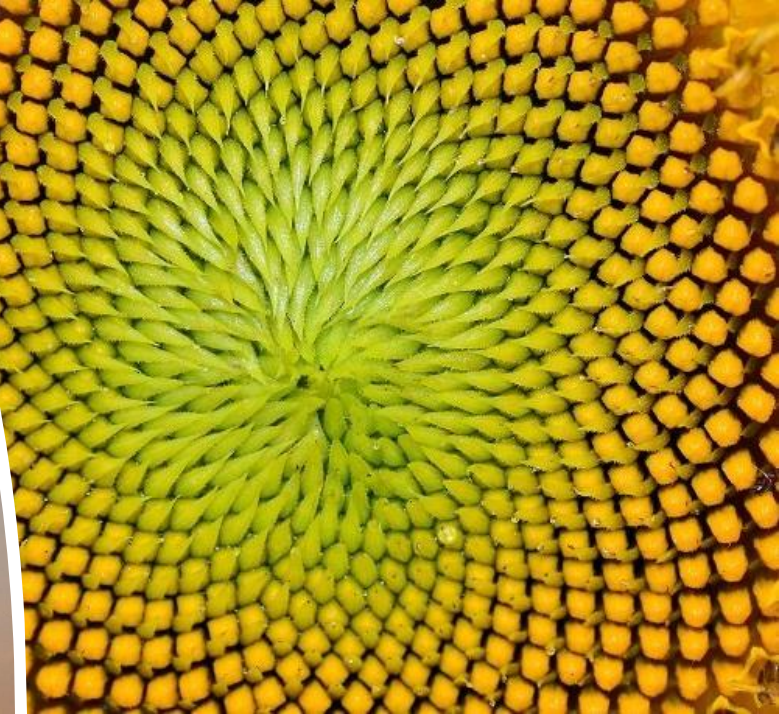




Kölcsönhatások:
stimulus és válasz

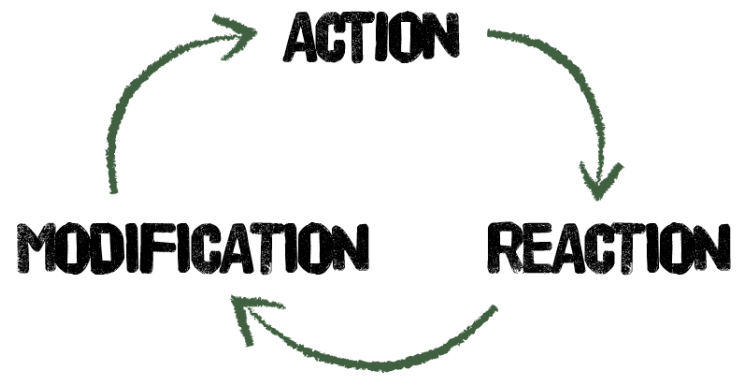


Mikroállapot -
makroállapot:
emergencia



Önszerveződés
vs. tervezés

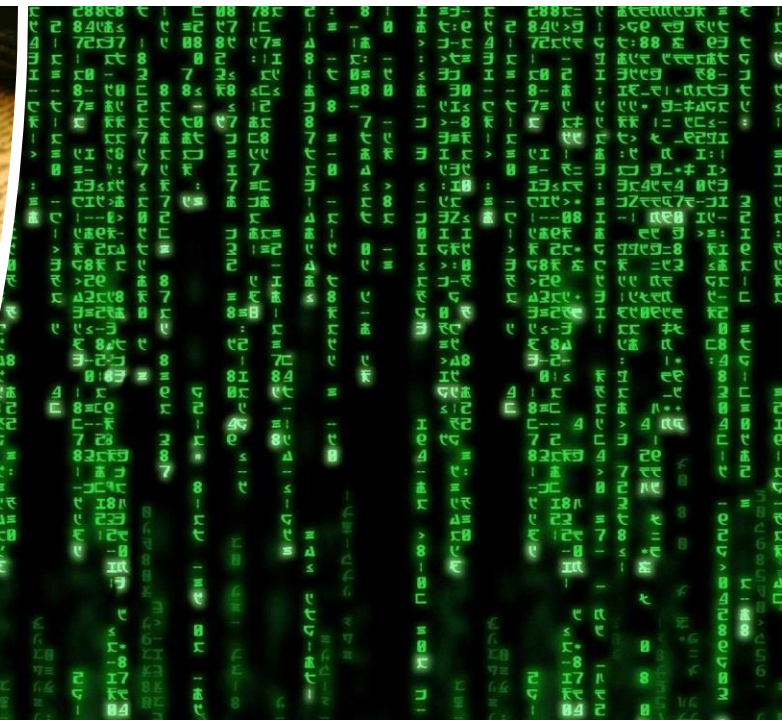
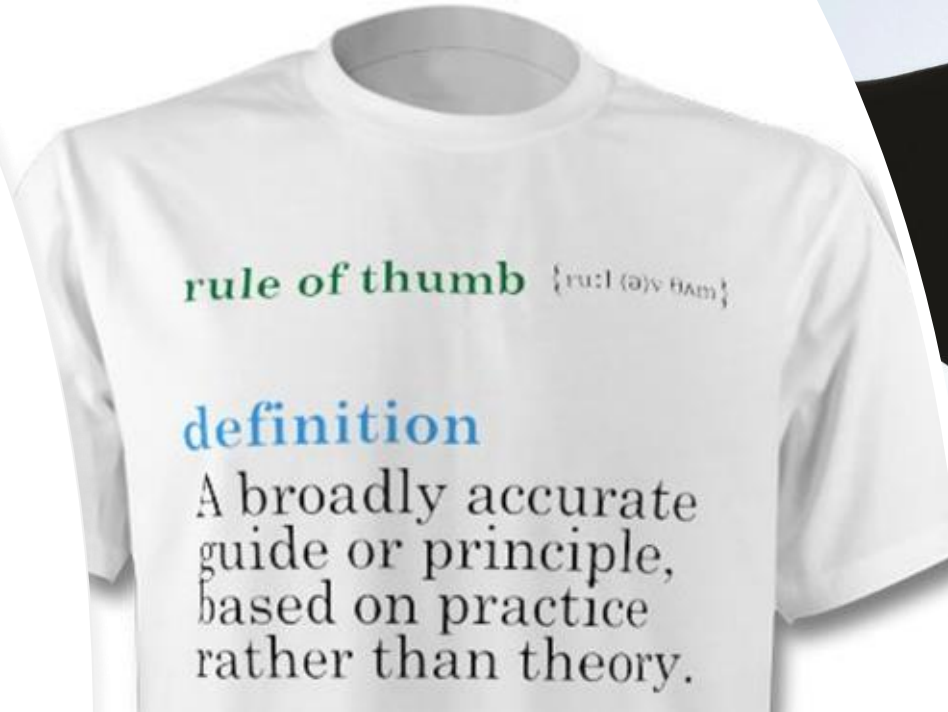




Adaptáció: változó viselkedés
visszacsatolás alapján



Kódok, szabályok,
törvények,
stratégiák



Ágensek viselkedése



Emergens viselkedés



Szabályok:

1. **Fizika:** törvények
2. **Biológia:** genetikus (ösztönök)
3. **Társadalom:** tanult (szocializáció)
+ genetikus



Viselkedési szabályok:

Akármerre repülhetsz, kivéve

1. Próbáld meg arrafele repülni, mint a szomszédaid!
2. Próbáld közel maradni hozzájuk!
3. Próbáld nem nekik menni!

A Giorgio Parisinak odaítélt Nobel-díj egy rendkívüli tudóst jutalmaz, és erősíti az okos elméleti fizikai iskola kiváló szellemét. CARLO ROVELLI

Giorgio Parisi

FIZIKAI NOBEL-DÍJ 2021



A KOMPLEX RENDSZEREK
CSODÁI

a seregélyek röpte

Pax Könyvesház

Példa: madárraj



<https://youtu.be/KTY3a-YIfKU?si=Q7ng9T3ZzM070Erl>

Warren Weaver nómenklatúrája

Egyszerű rendszerek:

- kevés számú változó
- kiszámítható viselkedés

Példa: néhány billiárdgolyó mozgása Newton mozgásegyenletei alapján



„Disorganized complexity”:

- milliányi változó
- statisztikus leírásmód,

Példa: rohadt sok billiárdgolyó



„Organized complexity”:

- a változók erősen korreláltak („interconnectedness”),
- visszacsatolások
- adaptív viselkedés
- szabályok is változnak,

Példa: a billiárdgolyók fékeznek vagy gyorsítanak attól függően, hogy mit csinál a többi



Warren Weaver

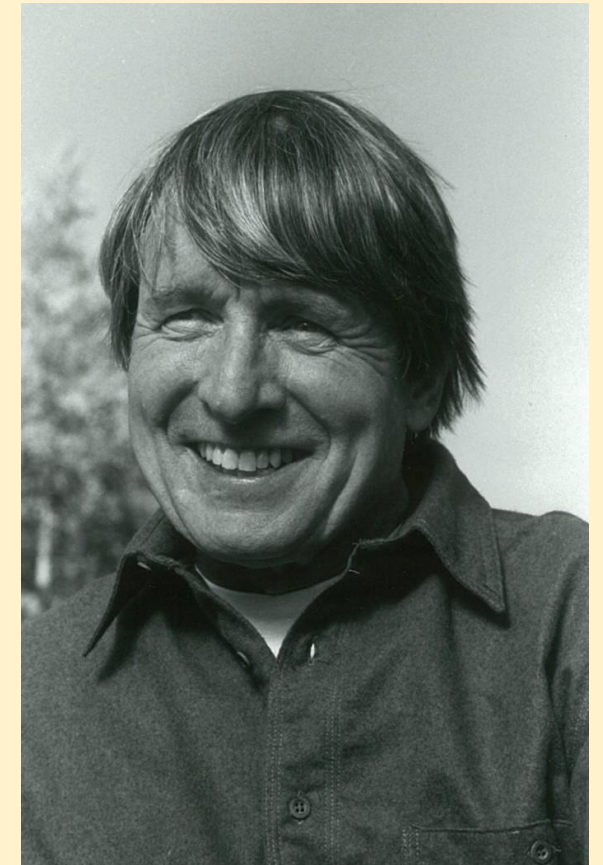
1894-1978
mathematician and
science organizer (Natural
Sciences division of the
Rockefeller Foundation)

John Holland nómenklatúraja

"The elements of a **Complex Physical Systems (CPS)** follow fixed physical laws, usually expressed by differential equations—Newton's laws of gravity and Maxwell's laws of electromagnetism are cases in point. **Neither the laws nor the elements change over time**; only the positions of the elements change. CPS show several properties: self-organized criticality, self-similarity, scaling, and power laws."



"**Complex Adaptive Systems (CAS)** are composed of elements, called agents, that learn or adapt in response to interactions with other agents. ... all CAS exhibit lever points, points where a small directed action causes large predictable changes in aggregate behaviour. All **CAS agents** have three levels of activity: performance (moment-by-moment capabilities), credit-assignment (rating the usefulness of available capabilities), and **rule-discovery (generating new capabilities)**. The behaviour of a CAS is always generated by the adaptive interactions of its components."



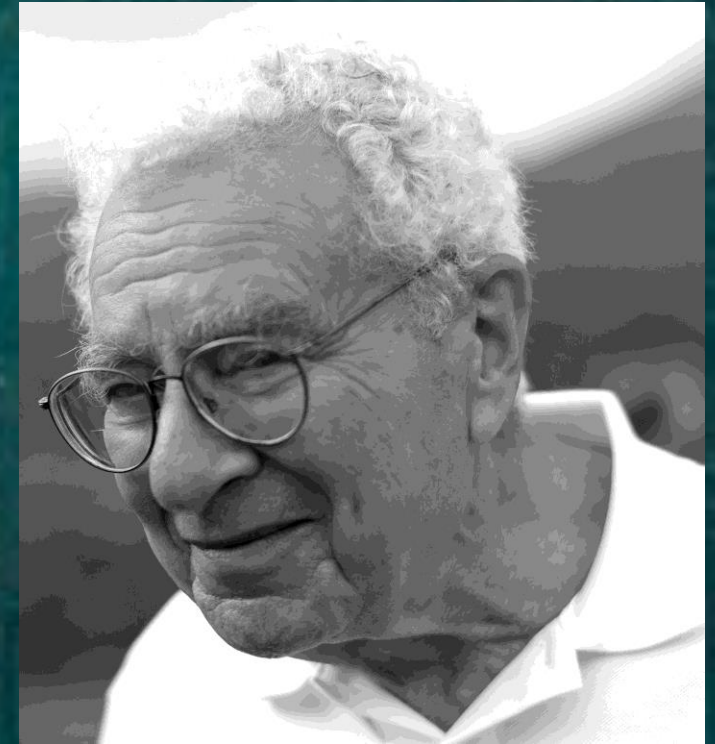
1929-2015
professor of psychology, electrical engineering, and computer science, pioneer of genetic algorithms.

Murray Gell-Mann sémái

1. „A CAS gathers information about its surroundings and about itself” – a traffic of input-output data
2. The system identifies **regularities in the data (patterns)**
3. „...the perceived **regularities are compressed into a schema.**” Each schema provides **description, prescription, and prediction** (strategy, rule). „Mutations” lead to rival schemata.
4. „The results obtained by a schema in the real world then feed back to affect its standing with respect to the other schemata with which it is in competition.”

Adaptation:

1. „The schemata include prescriptions for collective behavior.” The schemata contain the **possible routes for action** in the case of a challenge from the environment.
2. A given CAS **may change its own schemata due to feedback** from the environment.
3. „Finally, there is the level of Darwinian survival of the fittest” **The successful schemata survive**, because the CAS carrying them survives.



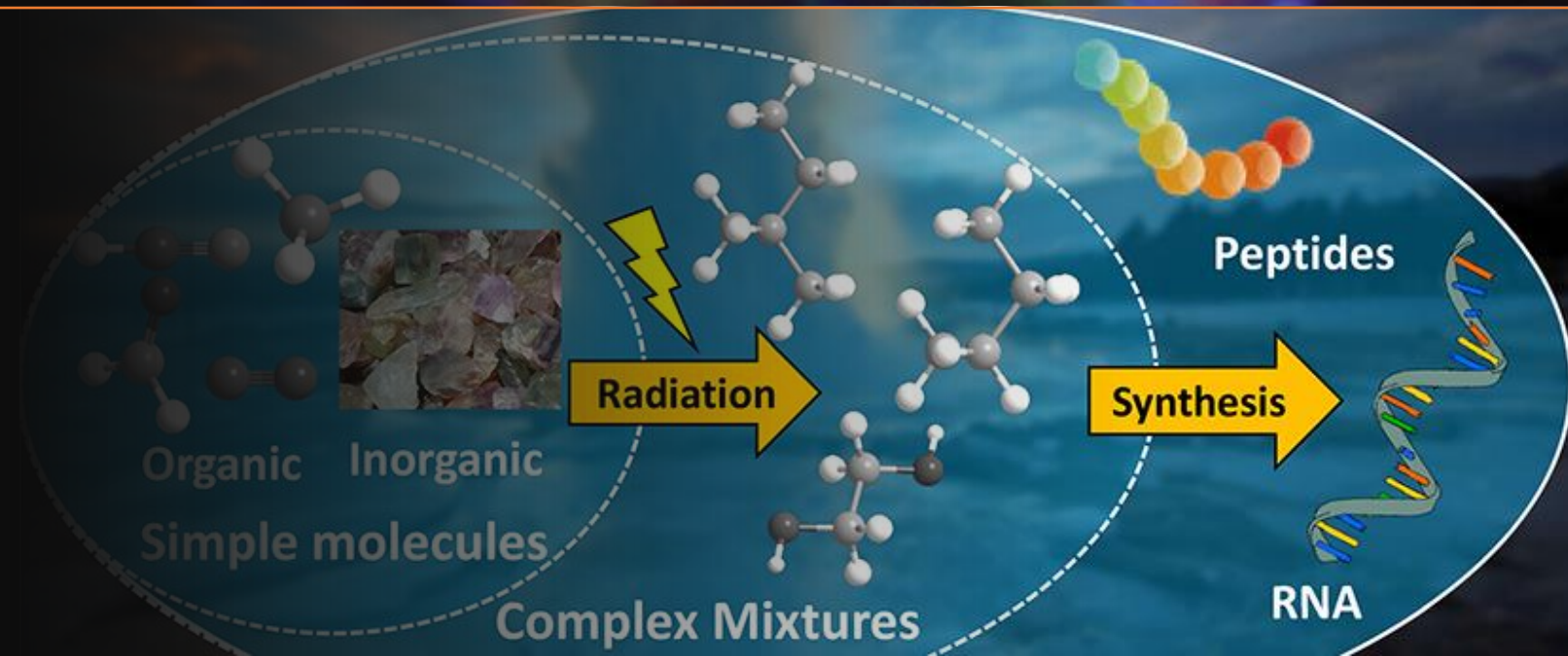
1929-2019

Theoretical physicist (Yale, MIT, etc.), Nobel Prize (1969, quarks), co-founder of the Santa Fe Institute (SFI) in 1984

Első lépés:

kémiai evolúció

Komplex molekulák létrejötte



Biológiai Evolúció

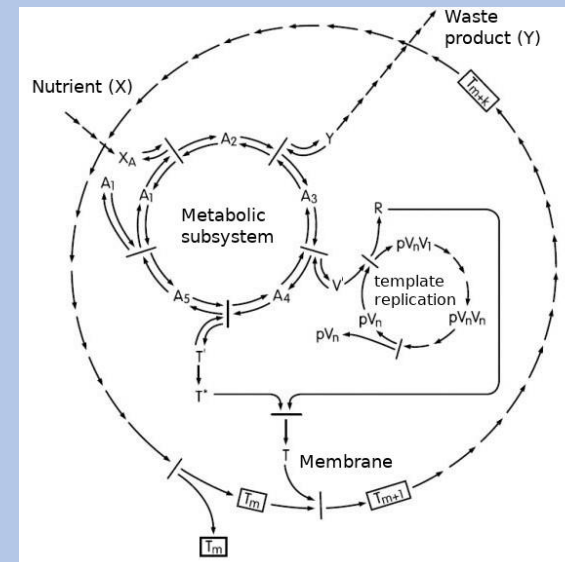
Minden az őssejttel kezdődött (ld. kemoton).

- **Autokatalitikus folyamatok** (metabolizmus)
- **Templátmolekula** (információ átörökítése)
- **Membrán** (térbeli definiálás, védelem, osztódás)

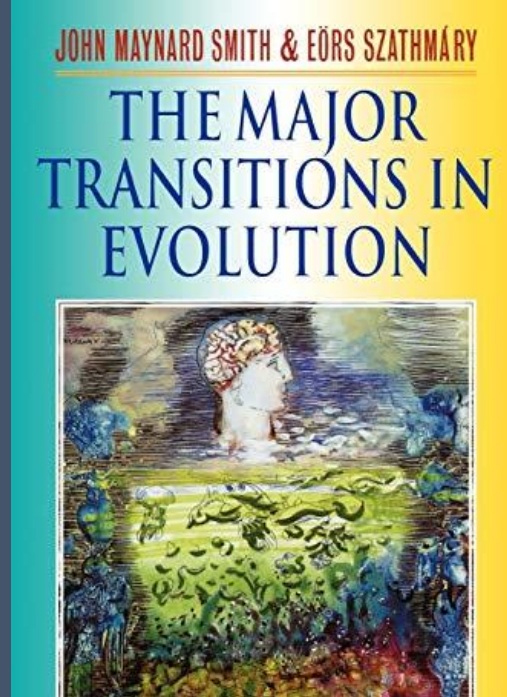
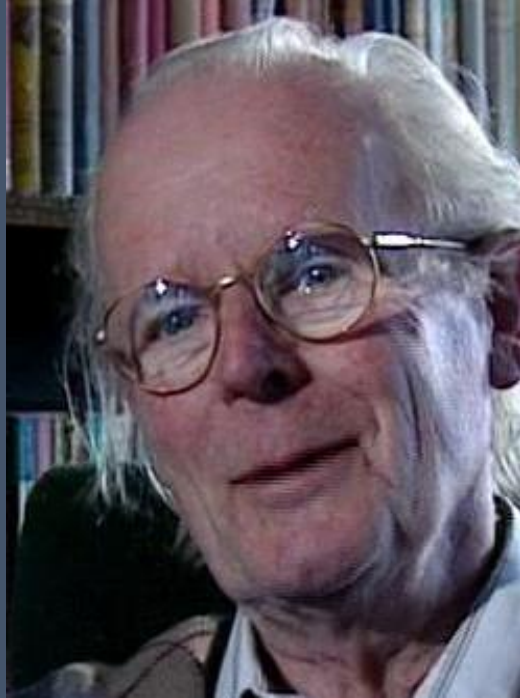


Stuart Kauffman

kemoton



Gánti Tibor



- 1 Replikálódó molekulák → kompartmentekbe zárt molekulapopulációk az „őssejt” kialakulása
- 2 Független replikátorok → kromoszómák
- 3 RNS mint gén és enzim → DNS és fehérje
- 4 Prokarióták → eukarióták
- 5 Ivartalan klónok → ivaros populációk
- 6 Egysejtűek → állatok, növények és gombák
- 7 Magányos egyedek → kolóniák állati társadalmak, kooperáció az állatvilágban
- 8 Főemlős társadalmak → emberi társadalmak és a nyelvkészség eredete a kulturális evolúció kezdete

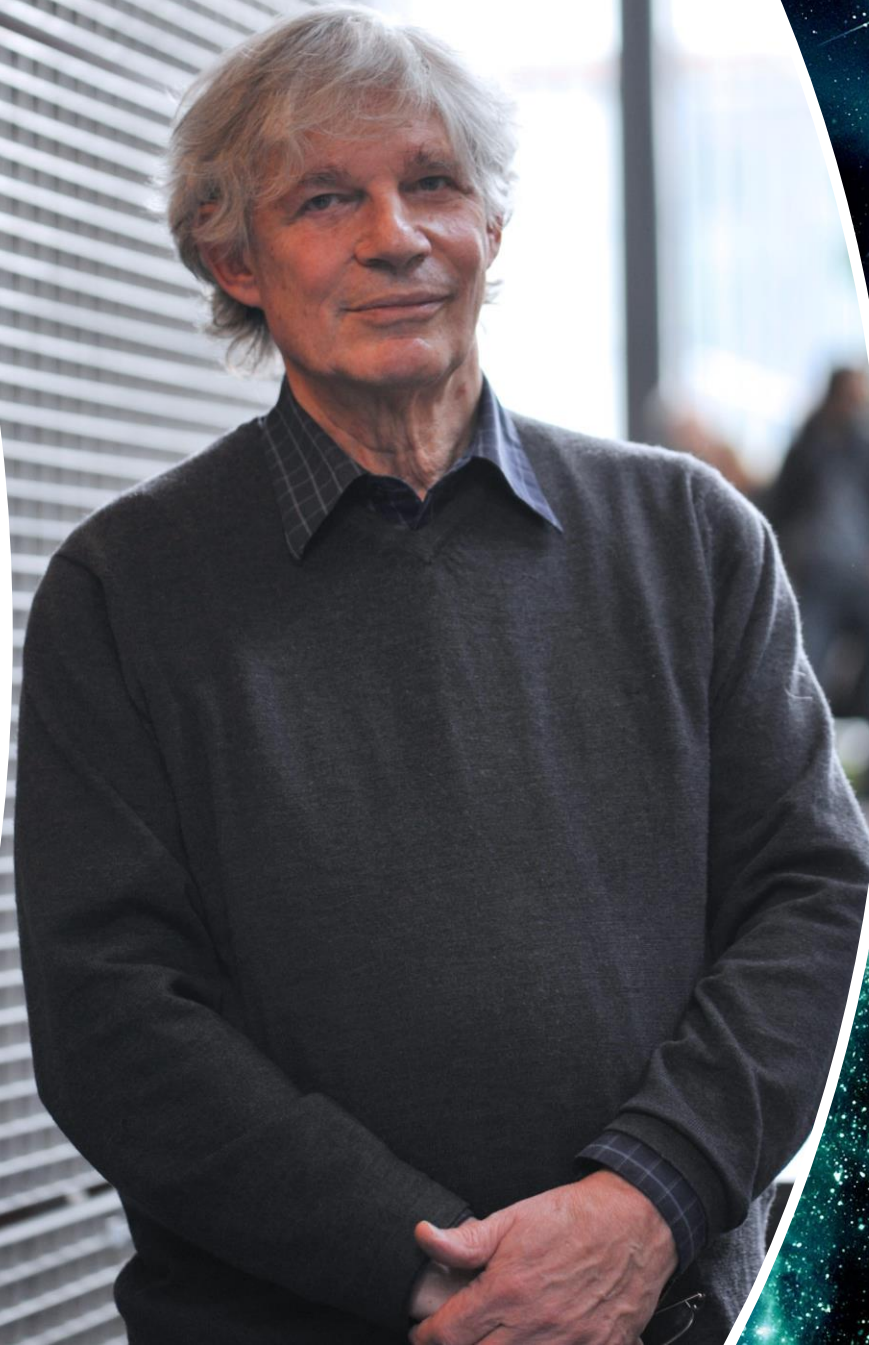
1

A kémiától a társadalomig

„... az első replikálódó molekuláktól ... az emberi társadalmakig ... az **információ** átadásának módja is többször módosult. Ezeket a változásokat neveztük el az evolúció nagy lépéseinek: végső soron ezek tették lehetővé a **komplexitás** ... evolúcióját. Könyvünk e **komplexitás evolúciójáról** szól.”

Stuart Kauffman: az evolúció nem ergodikus folyamat

- Képtelenség minden variációt kipróbálni
- Bizonyos mutáns variációs megvalósulása az egész rendszerre aránytalanul nagy hatással van



WORLD BEYOND PHYSICS

THE
EMERGENCE
& EVOLUTION
OF LIFE

STUART A.
KAUFFMAN

$$= \frac{1}{T_m} \int_{t_0}^{t_0 + T_m} f(q(t), p(t)) dt$$

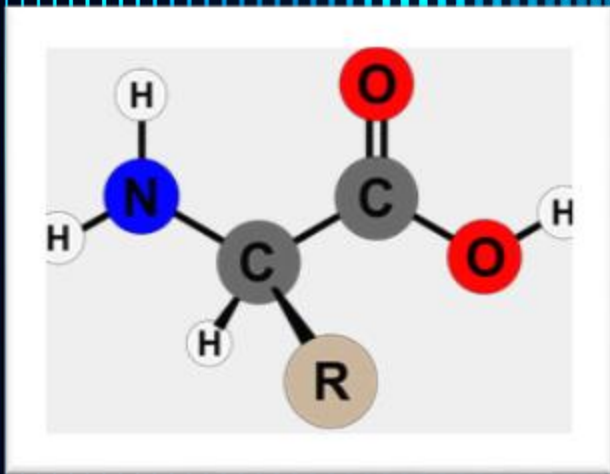
Történelmi idő vs. logikai idő

- Biológiai evolúció,
kulturális evolúció:
történelmi idő
- Fizika: logikai idő
(kísérletek
reprodukálhatósága:
 t_0 bármi lehet)

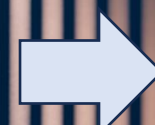
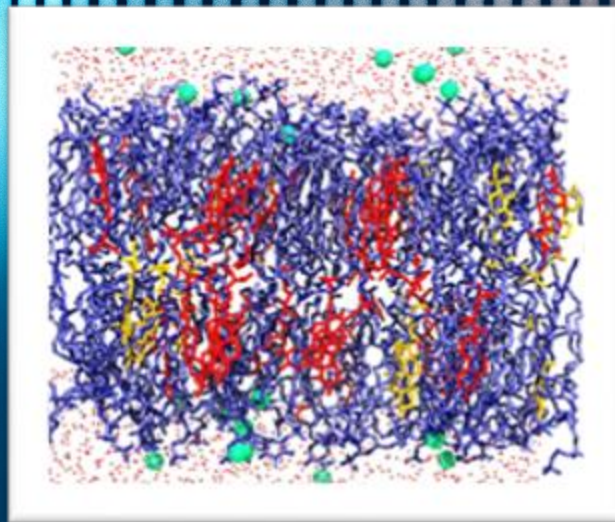


A leegyszerűsített kép

Egyszerű fizikai
rendszer



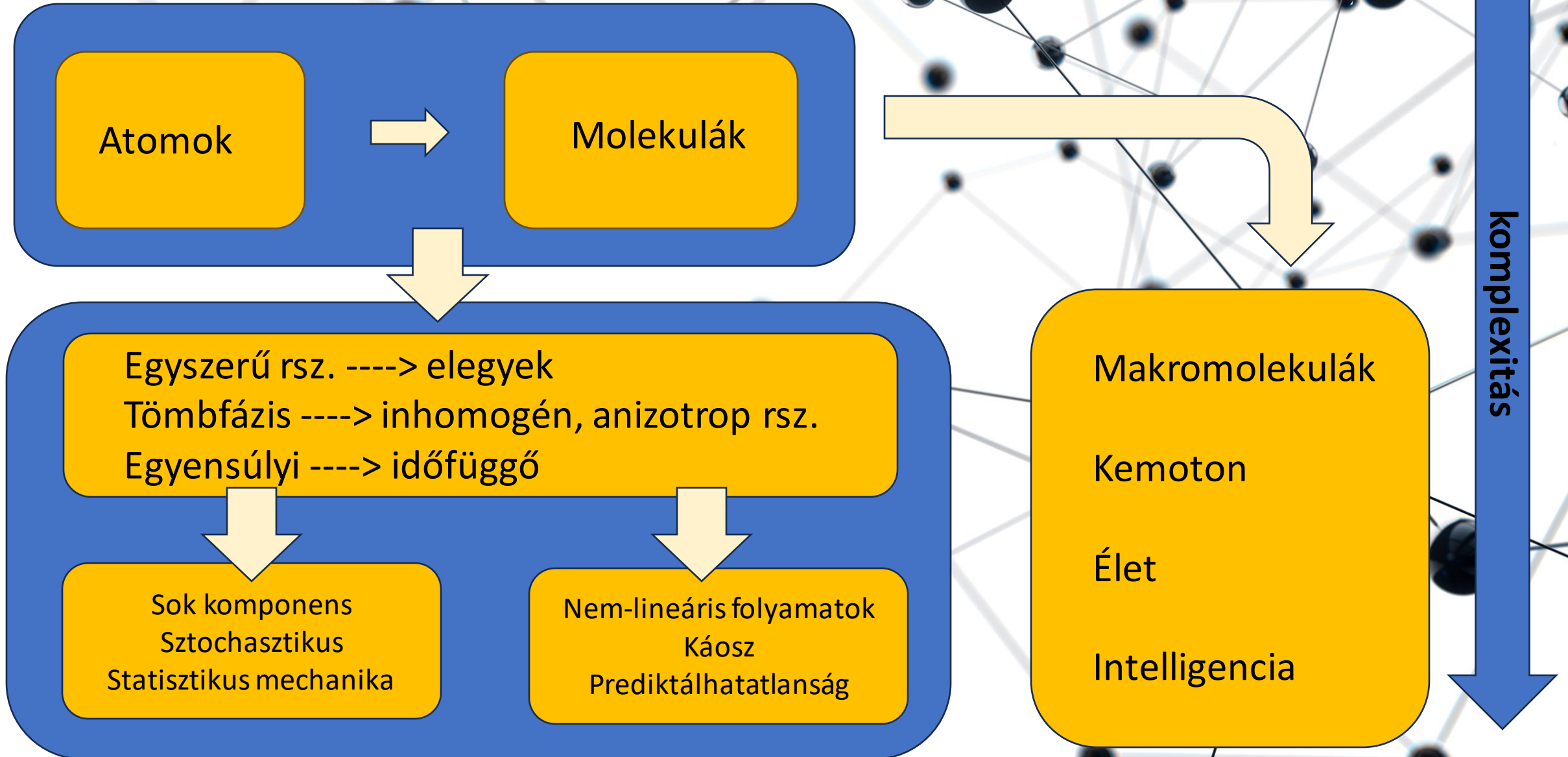
Összetett fizikai
rendszer



Komplex adaptív
rendszer



Egy kicsit mélyebben



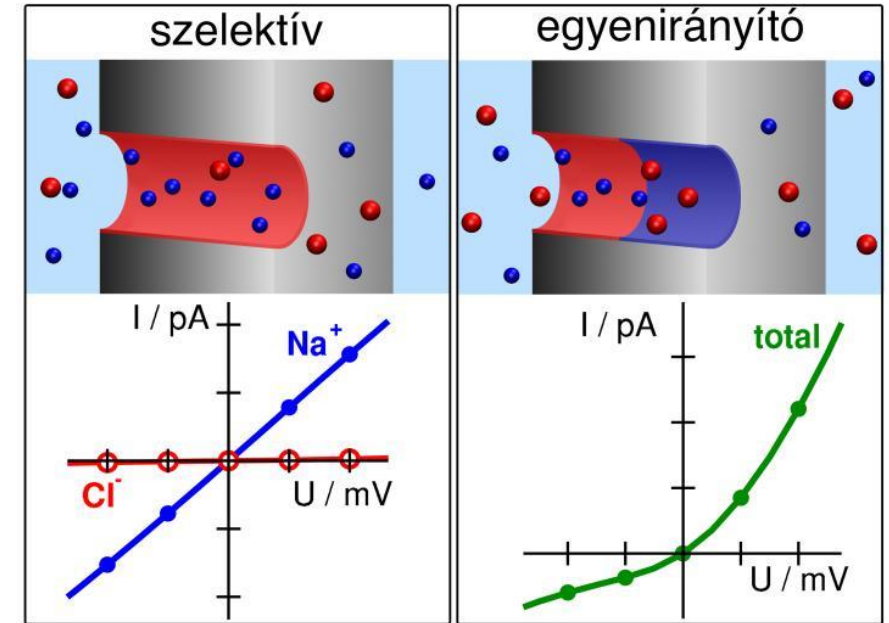


Mi a közös ezekben?

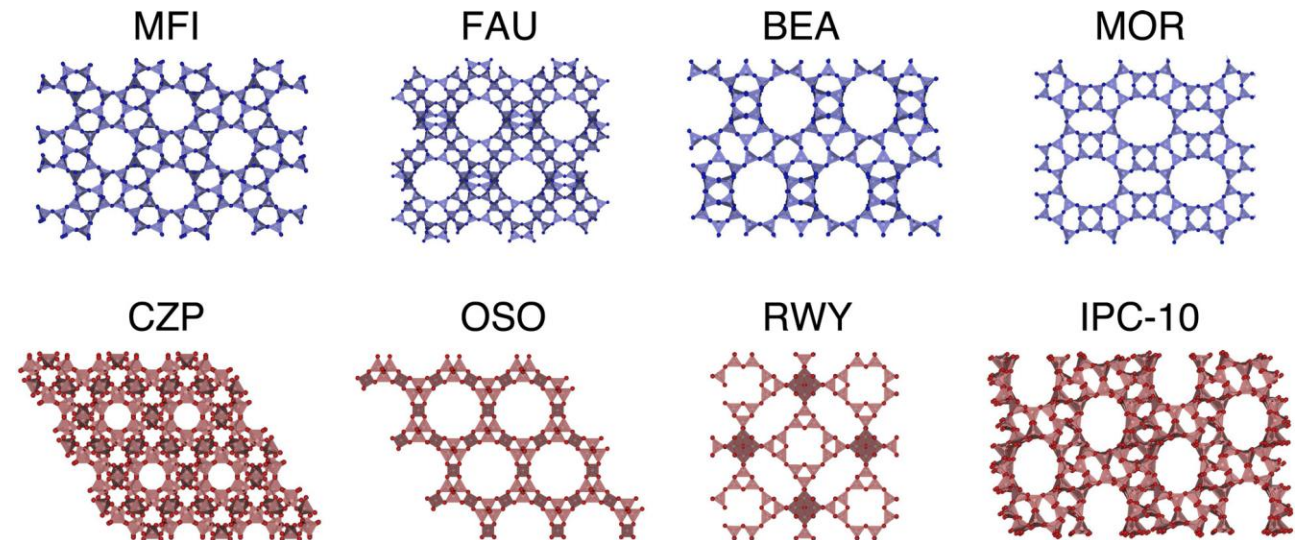
- Technológia fejlődés, digitális technika, szenzorok, mobiltelefonok, stb.
- Nagy mennyiségben rendelkezésre álló adatmennyiség (Big Data)
- Az új kihívás: rendet vágni az adattömkelemben (adat ---> információ)

Két apró példa Veszprémből

- **Nanopórus** sok paraméterrel: (R , H , σ , c , z_+ , z_- , U , etc.)
Gyors számolás ---> nagy mennyiségű adat ---> jól definiált célfüggvény (input-output reláció)
Mi az összefüggés a paraméterek között?



- Lehetséges **zeolit** struktúrák kipróbálása ---> célzott szimulációk ---> jól definiált célfüggvény (szelektivitás)
- Az alapprobléma **occami** – az adatfeldolgozás lehet **gépi tanulás**





Köszönöm a
figyelmet!

dezsoboda@gmail.com

<https://mscms.uni-pannon.hu>