



Warszawa, 9 marca 2017

Prototyp chemicznego komputera wykrywa sferę

Komputery chemiczne stają się coraz bardziej realne, udowadniają naukowcy z Instytutu Chemii Fizycznej PAN w Warszawie. Okazuje się, że po zastosowaniu odpowiedniej strategii „uczenia” nawet stosunkowo prosty układ chemiczny może wykonywać nietrywialne operacje. W najnowszych symulacjach komputerowych badacze wykazali, że właściwie przeszkolone matryce chemicznie oscylujących kropeł potrafią z dużą skutecznością wykrywać kształt sfery.

Współczesne komputery do obliczeń wykorzystują sygnały elektroniczne, czyli zjawiska fizyczne związane z przepływem ładunków elektrycznych. Informację można jednak przetwarzać wieloma sposobami. Od pewnego czasu na świecie trwają próby użycia w tym celu sygnałów chemicznych. Powstające układy chemiczne realizują na razie tylko najprostsze operacje logiczne. Tymczasem w Instytucie Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk (IChF PAN) w Warszawie za pomocą symulacji komputerowych wykazano, że nawet nieskomplikowane i już dziś łatwe do wykonania zestawy kropeł, w których zachodzą oscylujące reakcje chemiczne, mogą przetwarzać informację w użyteczny sposób, np. z dużą dokładnością wykrywać kształt określonego obiektu trójwymiarowego lub poprawnie klasyfikować komórki nowotworowe na łagodne i złośliwe.

„Wiele prac prowadzonych obecnie w laboratoriach koncentruje się wokół budowy chemicznych odpowiedników standardowych bramek logicznych. My podeszliśmy do zagadnienia inaczej”, mówi dr inż. Konrad Giżyński (IChF PAN) i wyjaśnia: „Badamy układy kilkunastu-kilkudziesięciu kropeł, w których propagują się sygnały chemiczne, i każdy traktujemy jako całość, jako pewnego rodzaju sieć neuronową. Okazuje się, że takie sieci, nawet bardzo proste, już po krótkim szkoleniu potrafią sobie dobrze radzić z dość wyrafinowanymi zagadnieniami. Na przykład nasz najnowszy układ bez większego problemu wykrywa kształt sfery w zbiorze współrzędnych przestrzennych x, y, z ”.

Układy badane w IChF PAN działają dzięki reakcji Bielousowa-Żabotyńskiego zachodzącej w poszczególnych kroplach. Reakcja ta ma charakter cykliczny: po zakończeniu jednego cyklu w roztworze odtwarzają się reagenty niezbędne do rozpoczęcia cyklu kolejnego. Nim reakcja ustanie kropla zazwyczaj wykonuje od kilkadziesiąt do kilkuset oscylacji. Przebieg reakcji jest przy tym łatwy do zaobserwowania, ponieważ będąca jej katalizatorem ferroina zmienia swój kolor w trakcie cyklu. W płytkich naczyniach z cienką warstwą roztworu efekt jest spektakularny: w cieczy pojawiają się rozchodzące się na wszystkie strony barwne pasy – fronty chemiczne. W kroplach fronty także można zobaczyć, jednak w praktyce o fazie cyklu świadczy po prostu kolor kropli: gdy cykl się zaczyna, kropla gwałtownie się „wzbudza” i zmienia kolor na niebieski, po czym stopniowo powraca do stanu początkowego, w którym ma kolor czerwony.

„Podstawą działania naszych układów jest wzajemna komunikacja między kroplami: gdy krople się stykają, wtedy pobudzenia chemiczne mogą się przenosić z kropli do kropli. Innymi słowy, jedna kropla może wzbudzać reakcję w drugiej! Istotny przy tym jest fakt, że kropli wzbudzonej nie można od razu ponownie wzbudzić. Mówiąc nieco kolokwialnie, przed kolejnym wzbudzeniem musi ona chwilę 'odpocząć', żeby potem wrócić do stanu pierwotnego”, tłumaczy dr Giżyński.

Aby układ przetworzył informację, trzeba ją do niego wprowadzić, a po przetworzeniu odczytać. Ważna jest także możliwość kontrolowanego modyfikowania sposobu, w jaki układ przetwarza informację. Do tych zadań badacze z IChF PAN używali światła oraz dodatkowego (poza ferroina) katalizatora: rutenu. Reakcja Bielousowa-Żabotyńskiego katalizowana rutenem ma bowiem ważną cechę: jest inhibitowana światłem niebieskim, co oznacza, że przy intensywnym oświetleniu krople przestają oscylować. Zmieniając oświetlenie konkretnej kropli można więc decydować, czy ma ona uczestniczyć w przetwarzaniu informacji czy nie, oraz wzbudzać ją według dowolnie dobranego wzorca. W przypadku kropeł służących do wprowadzania informacji, dłuższy czas oświetlania można wtedy interpretować np. jako większą wartość wprowadzanej współrzędnej przestrzennej.

„W praktyce zmiany oświetlenia realizuje się doprowadzając do każdej kropli osobny światłowód”, mówi dr Giżyński i podkreśla, że wszystkie parametry symulacji – cykle reakcji chemicznych z wyraźnymi przejściami między stanami, propagowanie się frontów chemicznych między kroplami, zatrzymywanie i wznowianie reakcji światłem doprowadzanym światłowodami oraz wytwarzanie zestawów kropeł – zostały dobrane na podstawie wcześniej przeprowadzonych eksperymentów.

W symulacjach, w których warszawscy naukowcy poszukiwali metod detekcji kształtu sfery, rozpatrywano sieci kwadratowe złożone z 2x2, 3x3, 4x4 i 5x5 kropeł. Aby odwzorować rzeczywiste tempo reakcji chemicznych przyjmowano, że kropla w stanie wzbudzonym spędza jedną sekundę, a do stanu, w którym może być pobudzona ponownie, powraca po dziesięciu sekundach.

Przed rozpoczęciem procesu uczenia badacze musieli jeszcze stworzyć odpowiedni „podręcznik” z opisem sfery. W tym celu wygenerowano przypadkowy zestaw punktów, którym przypisano wartość 1 gdy dany punkt należał do sfery, albo wartość 0, gdy punkt leżał poza nią. Tak przygotowana baza danych stała się podstawą procesu nauki, w którym każda ze składowych punktu (x, y, z) decydowała o czasie oświetlenia innej kropli wejściowej.

Aby wytrenować układ kropeł pod kątem wykrywania kształtu sfery, badacze z IChF PAN użyli algorytmów ewolucyjnych. Proces uczenia zaczynał się od losowego wygenerowania 30 wzorców oświetlenia układu, w których pewne krople służyły do wprowadzania informacji, a pozostałe pozostawały nieaktywne przez czas będący przedmiotem optymalizacji. Po przetworzeniu przez układ krople całej bazy danych sprawdzano, dla której kropli ewolucja jest najlepiej skorelowana z oczekiwanym wynikiem. Kroplę tę traktowano jako wyjściową. Z tak otrzymanej pierwszej generacji układów wybierano kilka najlepszych, „namnażano” je wprowadzając po drodze niewielkie zmiany („mutacje”) w sposobach oświetlenia i cykl nauki rozpoczynano od początku. Proces uczenia kontynuowano przez 500 generacji.

„Najlepsze wyniki osiągnęliśmy dla układu kropeł 4x4. Wykazywał on największą skuteczność w wykrywaniu kształtu sfery, na poziomie 85%. Na dodatek nabywał tę umiejętność najszybciej, bo w ciągu zaledwie 150 generacji. Układ 5x5 być może mógłby być lepszy, ale żeby to sprawdzić, proces uczenia należałoby wydłużyć ponad 500 generacji”, mówi dr Giżyński.

Układy kropeł nie interpretują napływających danych, jedynie szukają między nimi korelacji („kształtów”) podobnych do tej, w której znajdowaniu je wytrenowano. Zamiast współrzędnych przestrzennych punktów z kształtem sfery można więc do nich wprowadzać dane o innym znaczeniu, np. powiązane z różnymi cechami komórek nowotworowych. Układ mógłby wówczas poszukiwać „kształtu” danych odpowiadającego np. nowotworom łagodnym bądź złośliwym.

„Rzeczywiście, w jednej z naszych niedawnych publikacji, zrealizowanych we współpracy z kolegami z Uniwersytetu w Jenie, pokazaliśmy, że układ 5x5 kropeł potrafił klasyfikować komórki nowotworowe z medycznej bazy danych CANCER z precyzją sięgającą 97%. Za pomocą

klasycznych komputerów osiąga się lepsze wyniki, niemniej są też na nich klasyfikatory działające mniej wydajnie. Zatem chemiczne przetwarzanie informacji, choć wciąż mocno niedoskonałe, zaczyna oferować coraz ciekawsze i bardziej użyteczne możliwości”, podsumowuje dr Giżyński.

Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk (<http://www.ichf.edu.pl/>) został powołany w 1955 roku jako jeden z pierwszych instytutów chemicznych PAN. Profil naukowy Instytutu jest silnie powiązany z najnowszymi światowymi kierunkami rozwoju chemii fizycznej i fizyki chemicznej. Badania naukowe są prowadzone w dziewięciu zakładach naukowych. Działający w ramach Instytutu Zakład Doświadczalny CHEMIPAN wdraża, produkuje i komercjalizuje specjalistyczne związki chemiczne do zastosowań m.in. w rolnictwie i farmacji. Instytut publikuje około 200 oryginalnych prac badawczych rocznie.

KONTAKT:

dr inż. **Konrad Giżyński**
Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk w Warszawie
tel.: +48 22 3433191
email: kgizynski@ichf.edu.pl

prof. dr hab. **Jerzy Górecki**
Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk w Warszawie
tel.: +48 22 3433420
email: jgorecki@ichf.edu.pl

PUBLIKACJE NAUKOWE:

1. „A Chemical System that Recognizes the Shape of a Sphere”
K. Giżyński, J. Górecki
Computational Methods in Science and Technology, 22(4) 167-177 (2016)
DOI:10.12921/cmst.2016.0000057
2. „Evolutionary design of classifiers made of droplets containing a nonlinear chemical medium”
K. Giżyński, G. Gruenert, P. Dittrich, J. Górecki
Evolutionary Computation, 2016
DOI: 10.1162/EVCO_a_00197

POWIĄZANE STRONY WWW:

<http://www.ichf.edu.pl/>
Strona Instytutu Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk.

<http://www.ichf.edu.pl/press/>
Serwis prasowy Instytutu Chemii Fizycznej PAN.

<http://www.ichfdlafirm.pl/>
Oferta Instytutu Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk skierowana do przedsiębiorców i przemysłu.

MATERIAŁY GRAFICZNE:

ICHF170309b_fot01s.jpg HR: http://ichf.edu.pl/press/2017/03/ICHF170309b_fot01.jpg
Odpowiednio skonfigurowany układ chemicznie oscylujących kropeł potrafi wykryć kształt sfery ukryty w przypadkowym zbiorze punktów, obrazowo przedstawionym przez dr. inż. Konrada Giżyńskiego z Instytutu Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk w Warszawie. (Źródło: IChF PAN, Grzegorz Krzyżewski)

ICHF170309b_fot02s.jpg HR: http://ichf.edu.pl/press/2017/03/ICHF170309b_fot02.jpg
Przykład przechodzenia frontu chemicznego z jednej kropli (w lewym dolnym rogu) do dwóch przyległych. Zdjęcia wykonane za pomocą mikroskopu Hirox KH-8700. (Źródło: IChF PAN, Hirox)

MATERIAŁY FILMOWE:

ICHF170309c_mov01.mp4 1280x720, 55 MB
<https://www.youtube.com/watch?v=ZTO3kly4igA>
http://ichf.edu.pl/press/2017/03/ICHF170309c_mov01.mp4
Układy chemicznie oscylujących kropeł. Widać fronty chemiczne propagujące się z kropli do kropli. (Źródło: IChF PAN, Hirox)