

**Viola Tokárová** je v současné době na pozici odborného asistenta na Ústavu chemického inženýrství VŠCHT Praha a zároveň spolupředsedatelkou a vedoucí výzkumné skupiny Laboratoře biomimetického inženýrství. Její výzkum se zaměřuje zejména na oblast mikrofluidiky, přípravu strukturovaných povrchů inspirovaných přírodou a adhezi částic a buněk k různým substrátům.

**Ondřej Kašpar** se v rámci postgraduálního studia na McGillově univerzitě podílel na designu, přípravě a testování zařízení využívajících bakterií při řešení matematických problémů. Po návratu z Kanady na svou alma mater se v rámci Laboratoře biomimetického inženýrství zabývá tématem přírodních a přírodou inspirovaných antibiotik, řízeného vylučování aktivních látek, prevence bakteriálních infekcí a numerickými simulacemi částicových systémů.

# Esej: Počítače s duší

Viola Tokárová a Ondřej Kašpar



Biosimulace představují energeticky efektivní alternativu k počítačovým simulacím, kde jsou simulované prvky nahrazeny autonomně se pohybujícími organismy a výpočetní síť je reprezentovaná přírodními či člověkem připravenými strukturami. Počítače, jak je známe, budou dříve či později nahrazeny kvantovými počítači či hybridními počítači, které budou využívat živé organismy. I když je takový výzkum ve velice rané fázi, již bylo ukázáno, že se nejedná pouze o snové představy.

Numerické modelování a simulace jsou nedílnou součástí návrhu, vývoje a optimalizace člověkem vytvořených zařízení a nástrojů sloužícími k hlubšímu studiu jevů, které nás obklopují. První využití počítačových simulací v oblasti vědy (meteorologie, jaderná fyzika) nastalo po druhé světové válce. Nedlouho poté našly praktické uplatnění v mnohých oborech a disciplínách, u kterých je provádění experimentálních měření velice nákladné, nemožné či není umožněna taková míra flexibility. Nevýhodou všech numerických simulací je nutnost zavedení některých zjednodušení a předpokladů, které nám dovolují matematickou interpretaci modelu, a dále skutečnost, že ne všechny interakce a děje jsou nám známe, a tudíž v modelu zahrnuté. Z těchto důvodů je nutná validace modelu na základě porovnání s reálným experimentem. Některé problémy, které jsou svým rozsahem velké až globální (dopravní síť, předpověď počasí) do dnešního dne spoléhají výhradně na výpočetní nástroje.

Navzdory zvyšujícímu se výkonu výpočetní techniky konvenční počítače vykonávají výpočetní operace sekvenčně, tj. jednu po druhé. Určitého stupně paralelizace výpočtu se dá dosáhnout zvýšením počtu procesorů a jejich jader. Přesto se jedná o významnou limitaci, která znesnadňuje řešení velkých a komplexních problémů založených na kombinatorice, jako je predikce dopravní situace, skládání proteinů či vývoj burzovního trhu. Pro takové složité problémy výpočetní čas závisí exponenciálně na počtu simulovaných prvků (např. počet aut či osob) a na komplexitě sítě (např. počet křižovatek a křižení). Biosimulace představují energeticky efektivní alternativu k počítačovým simulacím, kde jsou simulované prvky nahrazeny autonomně se pohybujícími organismy a výpočetní síť je reprezentovaná přírodními či člověkem připravenými strukturami. Živé entity od bakterií po savce zpracovávají informace paralelně, což je naprosto nezbytné při hledání zdrojů živin a minerálů, alokaci volného prostoru a pro kooperativní a kompetitivní chování. Každý organismus má svůj vrozený „algoritmus“, který byl evolučně zdokonalován tak, aby poskytl co největší šanci na přežití a růst. Některé organismy vykazují i vysokou komplexní skupinové chování, jako je navigace při letu ptáčích hejn, organizace mravenčích cestiček, skupinový pohyb některých druhů bakterií.

Začneme od hlenek, které svou strukturou patří mezi ty nejjednodušší. Tento jednobuněčný organismus byl v roce 2010 proslaven tím, že dokázal věrně replikovat tokijský systém železnic, který patří

mezi ty nejkomplikovanější na světě. Stačilo k tomu umístit zdroje potravy v pozici hlavních uzlů a hlenka *Physarum polycephalum* umístěná v „Tokiu“ během několika hodin dokázala prozkoumat své okolí a utvořit a optimalizovat trubcovitou síť, která efektivně a robustně propojovala dosažitelné zdroje živin v okolí. Přítomnost horských masivů a vodních ploch byla zohledněna speciální maskou, která propouštěla více světla tam, kde by hlenka neměla růst. Toto byla jedna z prvních ukázek využití biosimulace, která nemusí poskytovat nejlepší možné řešení, ale z pohledu použitelnosti a délky simulace bylo řešení „perfektní“.

Dalším zástupcem organismu, který je předmětem mnohých studií, je červená chlebová plíseň *Neurospora crassa*. U této plísně byl pozorován velice efektivní algoritmus alokace prostoru, podle kterého se orientuje rostoucí vlákno houby. Bylo zjištěno, že vlákno rostoucí pod určitým úhlem má paměť a tendenci udržovat určitý směr růstu, i když bylo nuceno původní směr změnit kvůli překážce. Další zajímavou skutečností je, že pokud rostoucí vlákno narazí do překážky, dochází k jeho větvení. Na základě chování této plísně byl vytvořen algoritmus použitý pro hledání cesty náhodně generovaným bludištěm a svými výsledky byl schopen konkurovat člověkem vyvinutým metodám.

Skutečnou výzvou je skupina tzv. NP-úplných matematických problémů, pro jejichž řešení neexistuje (či nebyl dosud nalezen) efektivní algoritmus a je tak odkázáno na hrubou sílu, kdy se systematicky prochází celý prostor řešení problému. Nejznámějším příkladem je „Problém obchodního cestujícího“, poprvé formulovaný v roce 1930, který musí navštívit určitý počet měst a každé město může navštívit právě jednou. To vše musí být splněno při najetí co nejmenšího počtu kilometrů, což je při současných cenách pohonných hmot určitě pozoruhodné téma. Pokud však počet měst překročí 20, problém se stává opravdovým oříškem i pro nejmodernější počítače, jelikož počet možností, které musí obchodní cestující zvážit a porovnat, přesahuje  $6 \times 10^{16}$ . Pokud by se jednalo o skutečně velkého a nadšeného počítače, který dokáže během každé sekundy porovnat milion možností, potřeboval by na rozmyšlenou 19 století.

Obdobný problém, tj. jak navštívit co nejeffektivněji zdroje nektaru a vrátit se zpět, řeší čmelák na rozkvetlé louce každý den, a to bez kapsního superpočítače! A nejen to. Čmelák dokáže najít

i kompromis mezi nejkratší trasou a návštěvou květin, které dávají nejvíce nektaru. Jedná se tedy o optimalizační úlohu, jejíž řešení nemusí být absolutně nejlepší, ale to čmeláka asi trápit nebude. Na základě pozorování hmyzu pomocí speciálních sledovacích systémů byly navrženy modely pro řešení obdobných problémů, které jsou použitelné pro praktické aplikace.

Počítače, jak je známe, budou dříve či později nahrazeny kvantovými počítači či hybridními počítači, které budou využívat živé organismy. I když je takový výzkum ve velice rané fázi, již bylo ukázáno, že se nejedná pouze o snové představy. Bakterie prozkoumávající důmyslnou síť kanálků, které ve své architektuře kódují určitý matematický problém (může se jednat i o problém NP-úplný), mají díky svému vysokému počtu, možnosti exponenciálního dělení a masivní paralelizaci výpočtu šanci fungovat tam, kde klasické „sekvenční“ počítače selhávají. Pro funkci takových biologických počítačů je nutné, aby se pohybující bakterie řídily sadou daných pravidel, která nesmí porušit (lze připodobnit k dopravním předpisům). Toho je docíleno důmyslnou konstrukcí kanálků, které do jisté míry usměrňují nahodilý pohyb bakterií. V současné době bylo výzkumnou skupinou prof. D. V. Nicolaua (McGillova univerzita) publikováno několik studií prokazujících využitelnost bakterií pro řešení matematických problémů a škálovatelnost takového řešení. Jelikož se technologie výroby procesorů každým rokem blíží svému limitu, který je daný velikostí atomu, je zapotřebí alternativních přístupů. Je možné, že počítače, jak je známe, budou v budoucnosti přezítkem a budeme využívat armádu mikroskopických počítačů pracujících spokojeně pouze za stravu.