

Ατομική Διπλωματική Εργασία

**ΕΠΕΚΤΑΣΗ ΑΝΑΣΤΡΕΨΙΜΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ ΠΕΤΡΙ ΜΕ ΤΗΝ
ΠΡΟΣΘΗΚΗ ΤΑΥΤΟΧΡΟΝΙΣΜΟΥ ΚΑΙ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΥ
ΣΥΝΔΕΣΙΜΟΤΗΤΑΣ ΜΑΡΚΩΝ**

Ανδρέας Παπαδόπουλος

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΥΠΡΟΥ



ΤΜΗΜΑ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ

Μάιος 2023

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΥΠΡΟΥ
ΤΜΗΜΑ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ

**Επέκταση Αναστρέψιμων Δικτύων Πέτρι με την προσθήκη ταυτοχρονισμού και
περιορισμού συνδεσιμότητας μαρκών**

Ανδρέας Παπαδόπουλος

Επιβλέπων Καθηγητής
Άννα Φιλίππου

Η Ατομική Διπλωματική Εργασία υποβλήθηκε προς μερική εκπλήρωση των
απαιτήσεων απόκτησης του πτυχίου Πληροφορικής του Τμήματος Πληροφορικής του
Πανεπιστημίου Κύπρου.

Μάιος 2023

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά την επιβλέπουσα καθηγήτρια μου Δρ. Άννα Φιλίππου που μου έδωσε την ευκαιρία να εκπονήσω το συγκεκριμένο θέμα διπλωματικής εργασίας. Θα ήθελα επίσης να την ευχαριστήσω για την πολύτιμη και συνεχή υποστήριξη που μου παρείχε.

Θα ήθελα ακόμη να ευχαριστήσω τους συμφοιτητές μου, καθώς είχαμε πολύ καλή συνεργασία σε όλη την διάρκεια των σπουδών μου.

Τέλος, δεν θα μπορούσα να παραλείψω την οικογένεια μου για την στήριξη που μου παρείχε. Οφείλω ένα μεγάλο ευχαριστώ που ήταν συνεχώς δίπλα μου.

Περίληψη

Η διπλωματική μου εργασία ασχολείται με τα αναστρέψιμα δίκτυα Πέτρι και πώς μπορούν να αναπαραστήσουν την διαδικασία της επισκευής του DNA (DNA repair). Τα Αναστρέψιμα Δίκτυα Πέτρι (Reversing Petri Nets – RPN) υποστηρίζουν αναστρέψιμο υπολογισμό, ο οποίος παρουσιάζεται σε πληθώρα συστημάτων, όπως τα βιοχημικά συστήματα.

Άρα ο σκοπός της διπλωματικής είναι η επέκταση των Αναστρέψιμων Δικτύων Πέτρι, ώστε να γίνει μοντελοποίηση της διαδικασίας της επισκευής του DNA. Πιο συγκεκριμένα προσδιορίστηκαν και μελετήθηκαν δύο επεκτάσεις, οι οποίες είναι απαραίτητες για να γίνει αυτή η μοντελοποίηση. Η πρώτη είναι το true concurrency (πραγματικός ταυτοχρονισμός), όπου ουσιαστικά μπορούν να εκτελεστούν ταυτόχρονα είτε εμπρόσθια (forward) είτε αντίστροφα (backward) είτε και οι δύο τύποι περισσότερες από μια μεταβάσεις (transitions). Η δεύτερη επέκταση είναι ο προσδιορισμός των ενώσεων (connections) που μπορεί να έχει η κάθε μάρκα (token) σε περίπτωση δεσμού (bond).

Αποτέλεσμα είναι η επέκταση του μοντέλου των Αναστρέψιμων Δικτύων Πέτρι. Συγκεκριμένα, στο αρχικό μοντέλο, δεν μπορούν να εκτελεστούν την ίδια χρονική στιγμή περισσότερες από μια μεταβάσεις. Επίσης δεν υπάρχει περιορισμός που να αφορά τις συνδέσεις των μαρκών (tokens). Αντίθετα, στο προτεινόμενο μοντέλο εισάγεται η έννοια του ταυτοχρονισμού των μεταβάσεων αλλά και του περιορισμού της συνδεσιμότητας μαρκών.

Περιεχόμενα

Κεφάλαιο 1	Εισαγωγή.....	1
	1.1 Κίνητρο.....	2
	1.2 Στόχος.....	2
	1.3 Δομή Διπλωματικής.....	3
Κεφάλαιο 2	Θεωρητικό υπόβαθρο και προηγούμενες εργασίες	4
	2.1 Αναστρέψιμα Δίκτυα Πέτρι.....	4
	2.1.1 Δίκτυα Πέτρι.....	4
	2.1.1.2 Δομικά Συστατικά	5
	2.1.2 Αναστρέψιμος Υπολογισμός	5
	2.1.3 Αναστρέψιμα Δίκτυα Πέτρι	5
	2.1.3.1 Μαθηματικός ορισμός	6
	2.1.3.2 Καλά ορισμένο (Well formed)	7
	2.1.3.3 Εμπρόσθια εκτέλεση	8
	2.1.3.4 Αντίστροφη εκτέλεση	10
	2.1.3.4.1 Οπισθοδρόμηση.....	11
	2.1.3.4.2 Αναστρεψιμότητα Αιτιολογικής σειράς	11
	2.1.3.4.3 Αναστρεψιμότητα μη αιτιολογικής σειράς	12
	2.2 Επιδιόρθωση Ασυμφωνίας DNA	13
	2.2.1 DNA και Ασυμφωνία DNA	13
	2.2.2 Επισκευή Ασυμφωνίας	14
	2.2.2.1 Επισκευή Ασυμφωνίας Μεθυλίου	14
	2.2.2.1.1 Πρωτεΐνες και Διαδικασία	14
	2.3 CCB.....	15
	2.3.1 Παράδειγμα χρήσης	15
Κεφάλαιο 3	Αναστρέψιμα Δίκτυα Πέτρι με ταυτοχρονισμό και περιορισμό συνδεσιμότητας μαρκών.....	18
	3.1 Επεξήγηση Επεκτάσεων	18

3.1.1 Συνδεσιμότητα Μαρκών	18
3.1.2 Ταυτόχρονη εκτέλεση μεταβάσεων	19
3.2 Ανανεωμένοι ορισμοί Αναστρέψιμων Δικτύων Πέτρι.....	19
3.3 Παράδειγμα επεξήγησης επεκτάσεων.....	25
Κεφάλαιο 4 Μοντελοποίηση της επισκευής του DNA.....	26
4.1 Παράδειγμα Ασυμφωνίας DNA	26
4.2 Επισκευή Ασυμφωνίας DNA	26
4.2.1 Αρχικοποίηση μαρκών και τύπων	27
4.2.2 Αναπαράσταση διαδικασίας επισκευής DNA	29
4.3 Συνδεσιμότητα	44
4.3.1 Συνδεσιμότητα μαρκών τύπου A.....	44
4.3.2 Συνδεσιμότητα μαρκών τύπου C.....	44
4.3.3 Συνδεσιμότητα μαρκών τύπου G.....	45
4.3.4 Συνδεσιμότητα μαρκών τύπου T.....	45
4.3.5 Συνδεσιμότητα DP	46
4.3.6 Συνδεσιμότητα UvrD	47
4.3.7 Συνδεσιμότητα Μεθυλίου (Me)	48
4.3.8 Συνδεσιμότητα Πρωτεϊνών	48
Κεφάλαιο 5 Συμπέρασμα-Μελλοντική Εργασία	49
5.1 Συμπεράσματα	49
5.2 Μελλοντική εργασία	49
Βιβλιογραφία.....	51

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Τα Δίκτυα Πέτρι είναι ένα μαθηματικό εργαλείο που εφευρέθηκε από τον Carl Adam Petri και χρησιμοποιείται κυρίως για μελέτη και μοντελοποίηση συστημάτων επεξεργασίας πληροφοριών που χαρακτηρίζονται ως ταυτόχρονα, κατανεμημένα, παράλληλα και ασύγχρονα.[1]

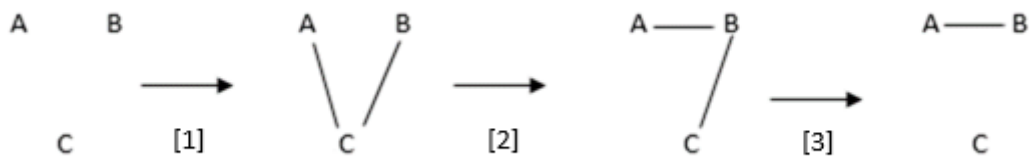
Ο Αναστρέψιμος Υπολογισμός είναι μια μορφή υπολογισμού, όπου ο υπολογισμός μπορεί να εκτελεστεί προς τα εμπρός και προς τα πίσω με την ίδια ευκολία.[1] Η αναστρέψιμη συμπεριφορά ενσωματώνεται σε μια μεγάλη ποικιλία εφαρμογών όπως βιολογικές διεργασίες, γλώσσες προγραμματισμού και τεχνικές ανάλυσης για κβαντικούς υπολογιστές. Ο αναστρέψιμος υπολογισμός χωρίζεται σε υποκατηγορίες που είναι η οπισθοδρόμηση (backtracking), η αναστρεψιμότητα αιτιολογικής σειράς (causal order reversibility) και η αναστρεψιμότητα μη αιτιολογικής σειράς (out-of-causal order reversibility), η οποία αναφέρεται κυρίως σε βιοχημικά συστήματα.[1]

Τα αναστρέψιμα Δίκτυα Πέτρι είναι ένα μαθηματικό μοντέλο που επεκτείνει τα Δίκτυα Πέτρι, με την ενσωμάτωση της αναστρεψιμότητας. Με αυτό τον τρόπο δίνεται η δυνατότητα στα Δίκτυα Πέτρι να κάνουν προς τα εμπρός αλλά και προς τα πίσω εκτέλεση. [1]

Γενικά, τα Αναστρέψιμα Δίκτυα Πέτρι έχουν αρκετές παραλλαγές, όπως τα MRPNs και τα Cyclic Petri Nets [3,4]. Παρόλα αυτά αξίζει να σημειωθεί ότι όλες αυτές οι παραλλαγές ανα πάσα στιγμή μπορούν να εκτελέσουν ακριβώς μια μετάβαση και όχι περισσότερες.

1.1 Κίνητρο

Ένας κύριος λόγος για την υλοποίηση αυτής της διπλωματικής είναι ότι πολλά συστήματα στην βιολογία περιέχουν την έννοια του ταυτοχρονισμού. Ένα παράδειγμα από την βιοχημεία που δείχνει αυτή την λειτουργία είναι η κατάλυση. Υπάρχουν δύο μόρια A και B που μπορούν να συνδεθούν μόνο εάν υποβοηθηθούν από ένα καταλύτη C. Όταν τα A και B συνδεθούν με τον καταλύτη C, τότε τα μόρια A και B μπορούν να ενωθούν και μόλις συνδεθούν, την ίδια στιγμή ο δεσμός μεταξύ του μορίου A και του καταλύτη C σπάει. Ακολούθως, σπάει ο δεσμός μεταξύ του B και του C και παραμένει μόνο ο δεσμός μεταξύ A και B. Όπως φαίνεται, στην Εικόνα 1.1 στη μετάβαση [2], σε αυτό το απλό παράδειγμα γίνονται δύο εκτελέσεις ταυτόχρονα, δημιουργίας και σπάσιμο δεσμού. Παρομοίως και στο DNA, επειδή ανήκει στο γενικό φάσμα των βιοχημικών συστημάτων, εκτελούνται ταυτόχρονα περισσότερες από μια ενέργειες.



Εικόνα 1.1: Παράδειγμα Κατάλυσης[6]

1.2 Στόχος

Στόχος αυτής της διπλωματικής είναι η επέκταση των Αναστρέψιμων Δικτύων Πέτρι. Να ενταχθούν στο μοντέλο δυνατότητες που να επιτρέπουν την μοντελοποίηση διαδικασιών όπως της επισκευής DNA. Αρχικά, ο τρόπος που θα γίνεται η αναστρεψιμότητα θα είναι μη αιτιολογικής σειράς (out-of-causal order reversibility), αφού είναι η πιο ιδανική μέθοδος για βιοχημικά συστήματα. Ακολούθως θα προστεθεί η έννοια του true concurrency (πραγματικός ταυτοχρονισμός), όπου ουσιαστικά θα μπορούν να εκτελεστούν ταυτόχρονα είτε εμπρόσθια (forward) είτε αντίστροφα (backward) περισσότερες από μια μεταβάσεις (transitions). Ο λόγος είναι ότι μπορεί να υπάρξει

δημιουργία πολλών δεσμών ταυτόχρονα ή σπάσιμο δεσμών ταυτόχρονα ή συνδυασμός και των δύο περιπτώσεων. Επίσης θα προστεθούν περιορισμοί στις μάρκες (tokens), αφού ένα στοιχείο του DNA, δεν μπορεί να συνδέεται ανεξέλεγκτα με οποιοδήποτε άλλο στοιχείο και σε περίπτωση που μπορούν να γίνουν εναλλακτικές συνδέσεις, αυτές ακολουθούν συγκεκριμένα μοτίβα. Με αυτό τον τρόπο, αρχικά θα προσδιορίζεται ο τύπος της μάρκας και ανάλογα με τον τύπο της, θα υπάρξουν και οι ανάλογοι περιορισμοί σύνδεσης.

1.3 Δομή Διπλωματικής

Στο Κεφάλαιο 2, αναλύεται το θεωρητικό υπόβαθρο που χρειάζεται τόσο για την επέκταση των Αναστρέψιμων Δικτύων Πέτρι όσο και για την μοντελοποίηση του DNA. Συγκεκριμένα, αναλύονται οι έννοιες των Δικτύων Πέτρι, του αναστρέψιμου υπολογισμού και των διάφορων ειδών του, των Αναστρέψιμων Δικτύων Πέτρι, του DNA και της επισκευής ασυμφωνίας DNA.

Στο Κεφάλαιο 3, ορίζεται το ανανεωμένο μοντέλο των Αναστρέψιμων Δικτύων Πέτρι με την προσθήκη των επεκτάσεων στο αρχικό μοντέλο.

Στο Κεφάλαιο 4, γίνεται η μοντελοποίηση της διαδικασίας της επισκευής του DNA με την χρήση του ανανεωμένου μοντέλου των Αναστρέψιμων Δικτύων Πέτρι.

Στο Κεφάλαιο 5, παρουσιάζονται τα συμπεράσματα που προέκυψαν και προτάσεις για μελλοντική εργασία.

Κεφάλαιο 2

Θεωρητικό Υπόβαθρο και προηγούμενες εργασίες

2.1 Αναστρέψιμα Δίκτυα Πέτρι

Τα Αναστρέψιμα Δίκτυα Πέτρι [1] είναι Δίκτυα Πέτρι με επιπλέον δυνατότητα την αναστρεψιμότητα. Σε αυτό το υποκεφάλαιο, αρχικά, θα γίνει επεξήγηση των κλασικών Δικτύων Πέτρι, κυρίως για την χρησιμότητά τους και τα δομικά συστατικά που αποτελούνται. Ακολούθως θα αναλυθεί η έννοια του αναστρέψιμου υπολογισμού και η χρησιμότητά του και τέλος θα οριστεί με αρκετή λεπτομέρεια το μαθηματικό μοντέλο των αναστρέψιμων δικτύων Πέτρι.

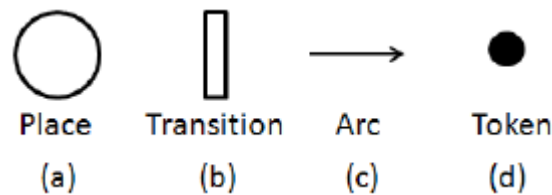
2.1.1 Δίκτυα Πέτρι

Τα Δίκτυα Πέτρι είναι ένα μαθηματικό εργαλείο που εφευρέθηκε από τον Carl Adam Petri και χρησιμοποιείται κυρίως για μελέτη και μοντελοποίηση συστημάτων επεξεργασίας πληροφοριών που χαρακτηρίζονται ως ταυτόχρονα, κατανεμημένα, παράλληλα και ασύγχρονα. Μπορούν επίσης, να χρησιμοποιηθούν και ως γραφικά εργαλεία, παρόμοια με διαγράμματα ροής (flow charts) και μπλοκ διαγράμματα (block diagrams), για οπτική απεικόνιση συστημάτων και οπτική επικοινωνία.

2.1.1.2 Δομικά συστατικά

Τα Δίκτυα Πέτρι αποτελούνται από τις θέσεις (places), τις μεταβάσεις (transitions), τα τόξα (arcs) και τις μάρκες (tokens). Οι θέσεις είναι το στοιχείο που περιέχει μάρκες. Παρουσιάζονται γραφικά ως κύκλοι. Οι μεταβάσεις εκφράζουν τις ενέργειες που έχει ένα σύστημα και παρουσιάζονται ως κουτιά. Οι μάρκες αποθηκεύονται σε θέσεις και παρουσιάζονται ως κουκκίδες. Τα τόξα ενώνουν τις θέσεις με τις μεταβάσεις. Υπάρχουν δύο είδη τόξων, τα εισερχόμενα και τα εξερχόμενα. Τα εισερχόμενα (προς τις

μεταβάσεις) εκφράζουν τις απαιτήσεις που πρέπει να τηρούνται για να εκτελεστεί η συγκεκριμένη μετάβαση. Τα εξερχόμενα τόξα παρουσιάζουν το αποτέλεσμα της εκτέλεσης της μετάβασης. Αποτέλεσμα της εκτέλεσης της μετάβασης είναι η μετακίνηση των μαρκών από μια θέση σε μια άλλη. Πιο συγκεκριμένα, οι μάρκες που υπάρχουν στα εισερχόμενα τόξα θα μετακινηθούν στη θέση που δείχνει το εξερχόμενο τόξο της μετάβασης. Τα δομικά συστατικά παρουσιάζονται στην Εικόνα 2.1.



Εικόνα 2.1: Δομικά συστατικά Δίκτυου Πετρί

2.1.2 Αναστρέψιμος Υπολογισμός

Ο Αναστρέψιμος Υπολογισμός είναι μια μορφή υπολογισμού, όπου ο υπολογισμός μπορεί να εκτελεστεί προς τα εμπρός και προς τα πίσω με την ίδια ευκολία. Η αναστρέψιμη συμπεριφορά εντοπίζεται σε μια μεγάλη ποικιλία εφαρμογών όπως βιολογικές διεργασίες, γλώσσες προγραμματισμού και τεχνικές ανάλυσης για κβαντικούς υπολογιστές.[1]

2.1.3 Αναστρέψιμα Δίκτυα Πέτρι

Τα Αναστρέψιμα Δίκτυα Πέτρι είναι Δίκτυα Πέτρι με επιπλέον δυνατότητα την αναστρεψιμότητα. Ουσιαστικά με αυτό τον τρόπο, δίνεται η δυνατότητα στα Δίκτυα Πέτρι να κάνουν προς τα εμπρός αλλά και προς τα πίσω εκτέλεση των μεταβάσεών τους, κάνοντας έτσι εφικτή την επαναφορά σε μια κατάσταση που είχε προηγουμένως το σύστημα. Υποστηρίζουν τρεις μεθόδους αναστρεψιμότητας οι οποίες είναι η οπισθοδρόμηση, η αιτιώδης αναστρεψιμότητα και η αναστρεψιμότητα μη αιτιολογικής σειράς.[2]

2.1.3.1 Μαθηματικός Ορισμός

Ορίζουμε ένα Αναστρέψιμο Δίκτυο Πέτρι ως ακολούθως: Ένα Αναστρέψιμο Δίκτυο Πέτρι (RPN) είναι μια πλειάδα (A, P, B, T, F) όπου:[1,2]

1. A είναι ένα πεπερασμένο σύνολο τύπων βάσεων ή μαρκών που κυμαίνονται κατά $a, b, \dots$. Το σύνολο $\bar{A} = \{a \mid a \in A\}$ περιέχει ένα «αρνητικό» στιγμιότυπο για κάθε μάρκα και γράφουμε $\mathcal{A} = A \cup \bar{A}$.
2. P είναι ένα πεπερασμένο σύνολο θέσεων.
3. $B \subseteq A \times A$ είναι ένα σύνολο μη κατευθυνόμενων δεσμών που συμβολίζονται με $\beta, \gamma, \dots$. Χρησιμοποιούμε το συμβολισμό $a-b$ για τον δεσμό $(a, b) \in B$. Το σύνολο $\bar{B} = \{\bar{\beta} \mid \beta \in B\}$ περιέχει ένα "αρνητικό" στιγμιότυπο για κάθε δεσμό και γράφουμε $\mathcal{B} = B \cup \bar{B}$.
4. Το T είναι ένα πεπερασμένο σύνολο μεταβάσεων.
5. $F : (P \times T \cup T \times P) \rightarrow 2^{A \cup B}$ είναι ένα σύνολο κατευθυνόμενων τόξων.

Ένα RPN χτίζεται με βάση ένα σύνολο από μάρκες. Οι μάρκες είναι διακριτές μεταξύ τους και έχουν μοναδικά ονόματα. Μπορεί να εμφανίζονται ως αυτόνομα στοιχεία, αλλά καθώς προχωρά ο υπολογισμός μπορεί να ενωθούν κάποιες μάρκες μεταξύ τους και να σχηματίσουν δεσμούς. Οι θέσεις και οι μεταβάσεις έχουν την σύνηθη σημασία.

Τα κατευθυνόμενα τόξα συνδέουν θέσεις με μεταβάσεις και αντίστροφα και επισημαίνονται, με ετικέτα, με ένα υποσύνολο του $\mathcal{A} \cup \mathcal{B}$ όπου το A περιέχει το σύνολο των θετικών μαρκών και το $\bar{A}$ περιέχει το σύνολο των “αρνητικών” μαρκών που εκφράζουν την απουσία της μάρκας και το $\bar{B}$ περιέχει το σύνολο των “αρνητικών” δεσμών που εκφράζουν την απουσία δεσμού. Για μια ετικέτα (label) $\ell = F(x, t)$ ή $\ell = F(t, x)$, υποθέτουμε ότι η κάθε μάρκα a μπορεί να εμφανίζεται στην ετικέτα το πολύ μια φορά, είτε ως a είτε ως $\bar{a}$, και αν ένας δεσμός $(a, b) \in \ell$ τότε $a, b \in \ell$. Επιπλέον, για $\ell = F(t, x)$, πρέπει να είναι ισχύει ότι $\ell \cap (\bar{A} \cup \bar{B}) = \emptyset$, δηλαδή, αρνητικές μάρκες και αρνητικοί δεσμοί μπορεί να εμφανιστούν μόνο σε τόξα που εισέρχονται σε μια μετάβαση. Διαισθητικά, αυτές οι ετικέτες, όταν τοποθετούνται στα εισερχόμενα τόξα εκφράζουν τις απαιτήσεις για να εκτελεστεί μια μετάβαση και όταν τοποθετούνται στα εξερχόμενα τόξα, εκφράζουν τα αποτελέσματα της μετάβασης. Έτσι, αν $a \in F(x, t)$, αυτό σημαίνει ότι η μάρκα a απαιτείται για να εκτελεστεί η μετάβαση t , και ομοίως για το ένα δεσμό $\beta \in$

$F(x, t)$. Από την άλλη, το $\bar{a} \in F(x, t)$, εκφράζει ότι η μάρκα a δεν πρέπει να υπάρχει στις εισερχόμενη θέση (place) x της μετάβασης t για να εκτελεστεί, και ομοίως για $\bar{b} \in F(x, t)$. Η έκφραση $F(x, t) = \emptyset$ σημαίνει ότι δεν υπάρχει τόξο από τη θέση x στη μετάβαση t και ομοίως για $F(t, x) = \emptyset$.

Ορίζονται τα σύμβολα $\bullet t = \{x \in P \mid F(x, t) \neq \emptyset\}$ και $t\bullet = \{x \in P \mid F(t, x) \neq \emptyset\}$ για τις εισερχόμενες και εξερχόμενες θέσεις της μετάβασης t , αντίστοιχα.

Επιπλέον, ορίζονται οι έννοιες $\text{pre}(t) = \bigcup_{x \in P} F(x, t)$ για την ένωση όλων των ετικετών στα εισερχόμενα τόξα της μετάβασης t και $\text{post}(t) = \bigcup_{x \in P} F(t, x)$ για την ένωση όλων των ετικετών στα εξερχόμενα τόξα της μετάβασης t .

2.1.3.2 Καλά ορισμένο (Well-formed)

Ένα Αναστρέψιμο Δίκτυο Πέτρι (A, P, B, T, F) είναι καλά ορισμένο εάν ικανοποιεί τις ακόλουθες συνθήκες για όλα τα $t \in T$: [1,2]

1. $A \cap \text{pre}(t) = A \cap \text{post}(t)$,
2. Αν $a-b \in \text{pre}(t)$ τότε $a-b \in \text{post}(t)$, και
3. $F(t, x) \cap F(t, y) = \emptyset$ για όλα τα $x, y \in P, x \neq y$.

Σύμφωνα με τα παραπάνω: (1) οι μεταβάσεις δεν διαγράφουν μάρκες, (2) οι μεταβάσεις δεν καταστρέφουν τους δεσμούς, δηλαδή εάν υπάρχει ένας δεσμός $a-b$ σε μια θέση εισόδου μιας μετάβασης, τότε διατηρείται στην εξερχόμενη θέση και (3) οι μάρκες και οι δεσμοί δεν μπορούν να κλωνοποιηθούν σε περισσότερες από μια εξερχόμενες θέσεις. Η έννοια του μαρκαρίσματος (marking) είναι η κατανομή μαρκών και δεσμών σε θέσεις, $M : P \rightarrow 2^{A \cup B}$ όπου $a-b \in M(x)$, για κάποια $x \in P$, σημαίνει $a, b \in M(x)$.

Χρησιμοποιούμε την έννοια του ιστορικού (history) που είναι η μνήμη που έχει η κάθε μετάβαση, $H : T \rightarrow \mathbb{N}$. Όταν η μετάβαση t έχει ως ιστορικό $H(t) = 0$, σημαίνει ότι η μετάβαση δεν έχει πραγματοποιηθεί ή έχει αντιστραφεί, ενώ ένα ιστορικό $H(t) = n$, $n > 0$ καταγράφει ότι η μετάβαση εκτελέστηκε και δεν αντιστράφηκε και το n υποδεικνύει τη σειρά εκτέλεσης μεταξύ των μη αναστρέψιμων δράσεων. Το H_0 υποδηλώνει το αρχικό ιστορικό όπου $H_0(t) = 0$ για όλα τα $t \in T$. Σε μια γραφική αναπαράσταση, τα ιστορικά

παρουσιάζονται δίπλα από τις μεταβάσεις ως $[m]$, αν $m = H(t) > 0$, και παραλείπεται όταν $H(t) = 0$, για κάθε μετάβαση t . [1,2]

Ένα ζεύγος που αποτελείται από ένα μαρκάρισμα και ένα ιστορικό, $\langle M, H \rangle$, περιγράφει μια κατάσταση ενός RPN βάσει του οποίου προσδιορίζεται η εκτέλεση.

Ορίζουμε το $\text{con}(a, C)$, όπου $a \in A$ και $C \subseteq A \cup B$, είναι οι μάρκες που συνδέονται με το a στο C μέσω δεσμών καθώς και οι δεσμοί που δημιουργούν αυτές τις συνδέσεις.

$$\text{con}(a, C) = (\{a\} \cap C) \cup \{\beta, b, c \mid \exists w \text{ s.t. } \text{path}(a, w, C), \beta \in w, \text{ και } \beta = (b, c)\}$$

όπου $\text{path}(a, w, C)$ αν $w = \beta_1, \dots, \beta_n$, και για όλα τα $1 \leq i \leq n$, $\beta_i = (a_{i-1}, a_i) \in$

$C \cap B$, $a_i \in C \cap A$, και $a_0 = a$.

2.1.3.3 Εμπρόσθια εκτέλεση

Έστω ένα RPN (A, P, B, T, F) , μια μετάβαση $t \in T$ και μια κατάσταση

$\langle M, H \rangle$. Λέμε ότι το t είναι ενεργοποιημένο προς τα εμπρός (forward-enabled) στην κατάσταση $\langle M, H \rangle$ εάν:[2]

1. αν $a \in F(x, t)$, για κάποιο $x \in \bullet t$, τότε $a \in M(x)$, και αν $\bar{a} \in F(x, t)$ για κάποιο $x \in \bullet t$, τότε $\bar{a} \notin M(x)$,
2. αν $\beta \in F(x, t)$, για κάποιο $x \in \bullet t$, τότε $\beta \in M(x)$, και αν $\bar{\beta} \in F(x, t)$ για κάποιο $x \in \bullet t$, μετά $\bar{\beta} \notin M(x)$,
3. αν $a \in F(t, y_1)$, $b \in F(t, y_2)$, $y_1 \neq y_2$ τότε $b \notin \text{con}(a, M(x))$ για όλα τα $x \in \bullet t$, και
4. αν $\beta \in F(t, x)$ για κάποιο $x \in t \bullet$ και $\beta \in M(y)$ για κάποιο $y \in \bullet t$ τότε $\beta \in F(y, t)$.

Έτσι, η μετάβαση t ενεργοποιείται στην κατάσταση $\langle M, H \rangle$ εάν όλες οι μάρκες και οι δεσμοί που απαιτούνται για να πραγματοποιηθεί η μετάβαση είναι διαθέσιμα στις εισερχόμενες θέσεις (places) του t και επίσης δεν γίνεται να απαιτείται η απουσία κάποιας μάρκας ή κάποιου δεσμού και ταυτόχρονα να υπάρχει σε μια εισερχόμενη θέση της μετάβασης.

Ακόμη, αν μια μετάβαση διακλαδώνεται στις θέσεις y_1 και y_2 , τότε οι μάρκες που μεταφέρονται σε αυτές τις θέσεις δεν συνδέονται μεταξύ τους στις εισερχόμενες θέσεις της μετάβασης.

Επίσης εάν ένας προϋπάρχων δεσμός εμφανίζεται σε ένα εξερχόμενο τόξο μιας μετάβασης, τότε είναι επίσης προϋπόθεση για να εκτελεστεί η μετάβαση. Κατά συνέπεια, εάν ο δεσμός εμφανίζεται σε ένα εξερχόμενο τόξο μιας μετάβασης ($\beta \in F(t, x)$ για κάποιο $x \in t^\bullet$) αλλά δεν αποτελεί απαίτηση για να εκτελεστεί η μετάβαση ($\beta \notin F(y, t)$ για όλα τα $y \in \bullet t$), τότε ο δεσμός δεν πρέπει να υπάρχει σε κάποια εισερχόμενη θέση της μετάβασης ($\beta \notin M(y)$ για όλα $y \in \bullet t$). Έτσι, ορίζουμε το αποτέλεσμα μιας μετάβασης ως $\text{eff}(t) = \text{post}(t) - \text{pre}(t)$.

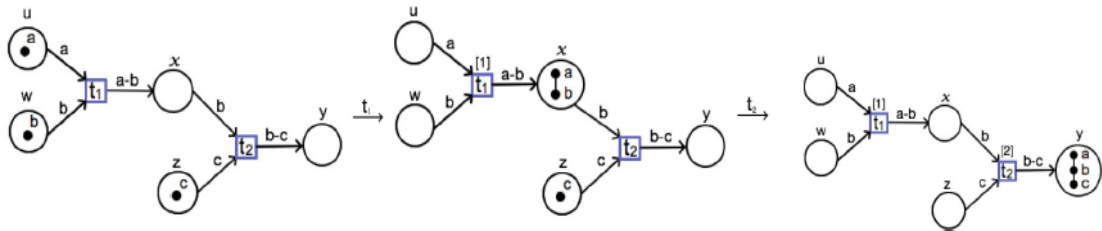
Παρατηρούμε ότι το αποτέλεσμα μιας μετάβασης είναι το σύνολο των νέων δεσμών που δημιουργούνται από τη μετάβαση, δηλαδή αυτοί που εμφανίζονται στα εξερχόμενα τόξα μιας μετάβασης αλλά όχι στα εισερχόμενα τόξα. Αυτό θα επιτρέψει στη συνέχεια την αναγγελία της αντιστροφής μετάβασης με το σπάσιμο των δεσμών στο $\text{eff}(t)$.

Δίνεται ένα RPN (A, P, B, T, F) , μια κατάσταση $\langle M, H \rangle$ και μια μετάβαση t ενεργοποιημένη στο $\langle M, H \rangle$, γράφουμε $\langle M, H \rangle \xrightarrow{t} \langle M', H' \rangle$ όπου: [2]

$$M'(x) = \begin{cases} M(x) - \bigcup_{a \in F(x, t)} \text{con}(a, M(x)) & \text{αν } x \in \bullet t \\ M(x) \cup F(t, x) \cup \bigcup_{a \in F(t, x), y \in \bullet t} \text{con}(a, M(y)) & \text{αν } x \in t^\bullet \\ M(x), & \text{αλλιώς} \end{cases}$$

$$H'(t') = \begin{cases} \max\{k \mid k = H(t''), t'' \in T\} + 1, & \text{αν } t' = t \\ H(t'), & \text{αλλιώς} \end{cases}$$

Σύμφωνα με τον ορισμό, όταν εκτελείται μια μετάβαση t , όλες οι μάρκες και οι δεσμοί που εμφανίζονται στα εισερχόμενα τόξα της μεταφέρονται από τις θέσεις εισόδου στις θέσεις εξόδου μαζί με τα συνδεδεμένα στοιχεία τους. Επιπλέον, η συνάρτηση ιστορικού H επεκτείνεται στο H' εκχωρώντας στη μετάβαση t το επόμενο διαθέσιμο ακέραιο κλειδί.



Εικόνα 2.2: Παράδειγμα εμπρόσθιας εκτέλεσης[1]

Στην Εικόνα 2.2 παρουσιάζεται η διαδικασία της εμπρόσθιας εκτέλεσης. Ουσιαστικά με την εκτέλεση της μετάβασης t_1 , δημιουργείται ο δεσμός $a-b$ και το ιστορικό της μετάβασης t_1 γίνεται $[1]$. Στην συνέχεια με την εκτέλεση της μετάβασης t_2 , δημιουργείται ο δεσμός $b-c$ και το ιστορικό της μετάβασης t_2 γίνεται $[2]$.

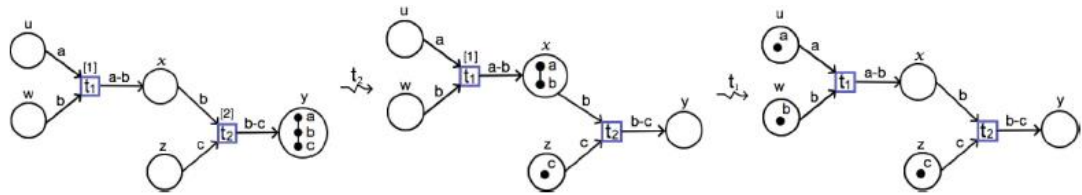
2.1.3.4 Αντίστροφη εκτέλεση

Η αντίστροφη εκτέλεση είναι η αναίρεση μιας ενέργειας που πραγματοποιήθηκε προηγουμένως. Πιο συγκεκριμένα, μια μετάβαση αντιστρέφεται σε μια κατάσταση, εάν έχει ήδη εκτελεστεί προηγουμένως και υπάρχουν οι κατάλληλες μάρκες και δεσμοί στις εξερχόμενες θέσεις. Υπάρχουν τρεις υποκατηγορίες που υποστηρίζουν αυτό τον μηχανισμό. Η οπισθοδρόμηση (backtracking), η αναστρεψιμότητα αιτιολογικής σειράς (causal order reversibility) και η αναστρεψιμότητα μη αιτιολογικής σειράς (out-of-causal order reversibility).[1,2]

2.1.3.4.1 Οπισθοδρόμηση

Στην οπισθοδρόμηση, τα υπολογιστικά βήματα αναίρούνται με την ακριβή αντίστροφη σειρά από αυτήν με την οποία έχουν συμβεί. Αυτή η μορφή αναστροφής εξασφαλίζει ότι

σε οποιαδήποτε κατάσταση σε έναν υπολογισμό υπάρχει το πολύ μία προκάτοχος κατάσταση. Στο πλαίσιο των ταυτόχρονων συστημάτων, αυτή η μορφή αντιστρεψιμότητας μπορεί να θεωρηθεί υπερβολικά περιοριστική, καθώς, η αναίρεση των κινήσεων μόνο με τη σειρά με την οποία πραγματοποιήθηκαν, προκαλεί ψεύτικες αιτιακές εξαρτήσεις από οπισθοδρομικές ακολουθίες ενεργειών, δηλαδή ενέργειες που θα μπορούσαν να είχαν αντιστραφεί με οποιαδήποτε σειρά αναγκάζονται να αναιρεθούν με την ακριβή σειρά με την οποία έγιναν.[1,2]

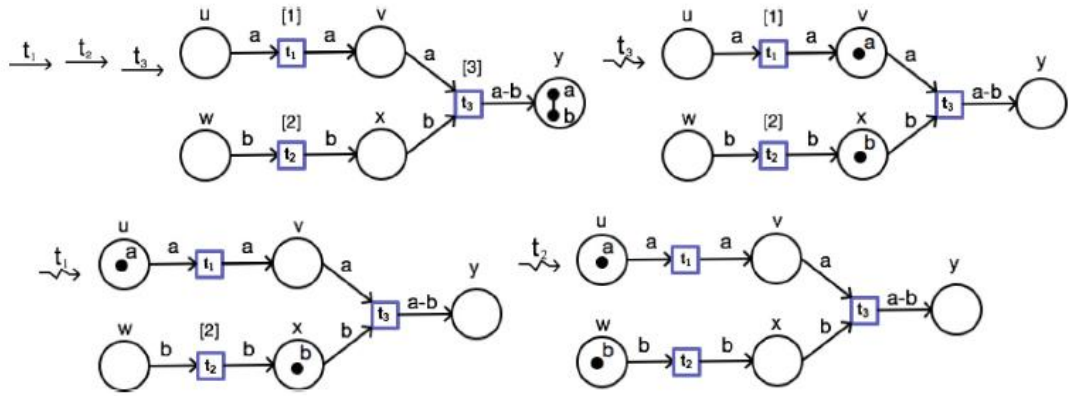


Εικόνα 2.3: Παράδειγμα Οπισθοδρόμησης[1]

Στην Εικόνα 2.3 παρουσιάζεται ένα παράδειγμα οπισθοδρόμησης. Αφού εκτελέστηκε πρώτα η μετάβαση t_1 και μετά η μετάβαση t_2 , στην αντίστροφη εκτέλεση, αντιστράφηκε πρώτα η μετάβαση t_2 και ακολούθως η t_1 .

2.1.3.4.2 Αναστρεψιμότητα αιτιολογικής σειράς[1,2]

Η αιτιώδης αναστρεψιμότητα, επιτρέπει μια πιο ευέλικτη μορφή αναστρεψιμότητας από την οπισθοδρόμηση, επιτρέποντας στα γεγονότα να αντιστρέφονται με αυθαίρετη σειρά, υποθέτοντας ότι σέβονται τις αιτιώδεις εξαρτήσεις που ισχύουν μεταξύ τους. Έτσι, στο πλαίσιο της αιτιώδους αναστρεψιμότητας, η αντιστροφή δεν χρειάζεται να ακολουθεί την ακριβή αντίστροφη σειρά για ανεξάρτητα γεγονότα, εφόσον τα αποτελέσματα, αναιρούνται πριν από τις ενέργειες που τα προκάλεσαν.

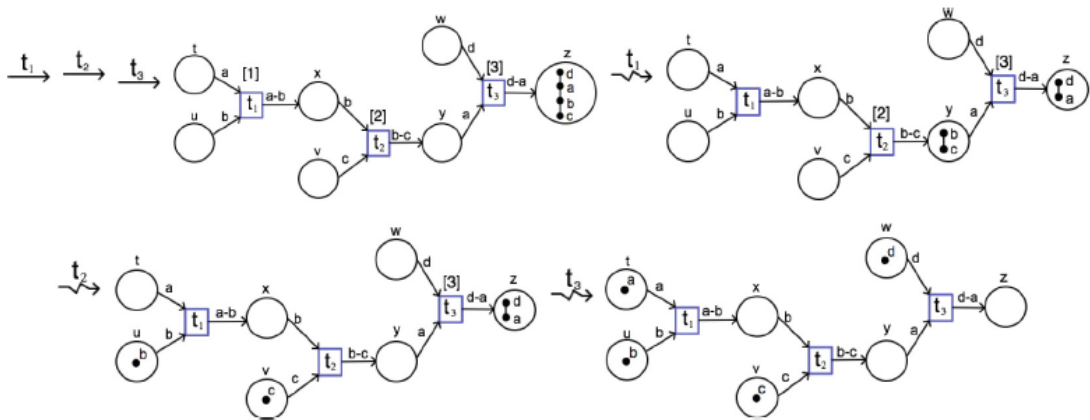


Εικόνα 2.4: Παράδειγμα αιτιακής σειράς αναστρεψιμότητας [1]

Στην Εικόνα 2.4 είναι ένα παράδειγμα αναστρεψιμότητας με αιτιακή σειρά. Όπως φαίνεται και στην εικόνα πρώτα αναιρείται το αποτέλεσμα (t_3) και ακολούθως οι ενέργειες που το προκάλεσαν (t_1, t_2). Οι μεταβάσεις t_1 και t_2 είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους και θα μπορούσαν να αντιστραφούν με οποιαδήποτε σειρά.

2.1.3.4.3 Αναστρεψιμότητα μη αιτιολογικής σειράς

Η αναστρεψιμότητα μη αιτιολογικής σειράς επιτρέπει την δημιουργία καταστάσεων που δεν μπορούν να πραγματοποιηθούν στην εμπρόσθια εκτέλεση. Ο λόγος που γίνεται αυτό είναι επειδή υπάρχει η δυνατότητα να αντιστραφεί μια κατάσταση, ακόμη και αν τα αποτελέσματά της δεν αντιστράφηκαν.[1,2]



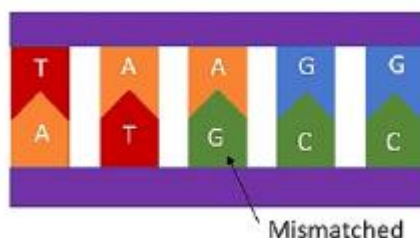
Εικόνα 2.5: Παράδειγμα μη αιτιολογικής σειράς αναστρεψιμότητας [1]

Στην εικόνα 2.4 παρουσιάζεται ένα παράδειγμα αναστροφής μη αιτιολογικής σειράς. Στο συγκεκριμένο παράδειγμα δεν υπάρχουν ανεξάρτητες μεταβάσεις. Στην εμπρόσθια εκτέλεση, πρώτα εκτελέστηκε η t1 μετά η t2 και ακολούθως η t3. Παρόλα αυτά στην αντίστροφη εκτέλεση αντιστράφηκαν με την ίδια σειρά αγνοώντας προκληθείσες ενέργειες και αποτελέσματα.

2.2 Επιδιόρθωση ασυμφωνίας DNA

2.2.1 DNA και Ασυμφωνία DNA

Το δεοξυριβονουκλεϊκό οξύ (DNA) φέρει τις απαραίτητες πληροφορίες για τη λειτουργία όλων των γνωστών οργανισμών. Αποτελείται από δύο πολυνουκλεοτιδικές αλυσίδες. Κάθε νουκλεοτίδιο περιέχει μία από τις τέσσερις νουκλεοβάσεις, ή απλά βάσεις, αδερίνη (A), κυτοσίνη (C), γουανίνη (G) και θυμίνη (T). Οι βάσεις μπορούν να αντιδράσουν μεταξύ τους ως εξής: Οι A και T παράγουν ένα ζεύγος A-T, οι C και G παράγουν ένα ζεύγος C-G και άλλοι συνδυασμοί δεν είναι κανονικά δυνατοί. Στην πραγματικότητα το DNA μπορεί να είναι ατελές. Αυτό μπορεί να οφείλεται είτε σε εξωτερικούς παράγοντες, όπως η ακτινοβολία, είτε σε εσωτερικούς παράγοντες, όπως οι ελεύθερες ρίζες που παράγονται από το σώμα. Μια άλλη πηγή σφαλμάτων DNA είναι τα προβλήματα κατά την αντιγραφή. Για παράδειγμα, μπορεί να συμβεί η αδερίνη σε μια αλυσίδα να αντιμετωπίζει τη γουανίνη στην άλλη αλυσίδα, όταν κανονικά θα έπρεπε να ταιριάζει με μια θυμίνη [7]. Η Εικόνα 2.6 δείχνει μια τέτοια αναντιστοιχία, όπου ο συνδυασμός των βάσεων A-G είναι λάθος. Στη διπλωματική αυτή έχουμε σαν στόχο την μοντελοποίηση αυτού του προβλήματος και της επισκευής του.



Εικόνα 2.6: Παράδειγμα Ασυμφωνίας DNA[7]

2.2.2 Επισκευή Ασυμφωνίας

Η επιδιόρθωση του DNA είναι ζωτικής σημασίας για τη διατήρηση της ποιότητας των πληροφοριών στους οργανισμούς. Δεδομένου ότι το λανθασμένο DNA μπορεί να προκαλέσει καρκίνο και άλλες ασθένειες και γενικά σε πρόωρη γήρανση και θάνατο, η επιδιόρθωση του DNA είναι ένα κρίσιμο μέρος της ζωής και η κατανόησή του είναι ένα σημαντικό ερευνητικό θέμα. Εάν δύο βάσεις ενσωματωθούν σε έναν κλώνο DNA που δεν ταιριάζουν, δηλαδή δεν είναι ζεύγη A-T ή C-G, αυτό συνιστά ελάττωμα στον κλώνο DNA. Ο τρόπος χειρισμού αυτής της κατάστασης στον οποίο θα επικεντρωθεί η διπλωματική, είναι η Επισκευή Ασυμφωνίας Μεθυλίου (MMR).[7]

2.2.2.1 Επισκευή Ασυμφωνίας Μεθυλίου (MMR)

Ο μηχανισμός βασίζεται στη μεθυλίωση των κλώνων DNA κάποια στιγμή μετά τη δημιουργία τους. Μεθυλίωση σημαίνει την προσάρτηση μιας μεθυλικής ομάδας (άτομο άνθρακα με τρία άτομα υδρογόνου), σε αυτή την περίπτωση στη βάση αδενίνης A. Εφόσον η μεθυλίωση συμβαίνει με καθυστέρηση μετά τον διπλασιασμό ενός κλώνου, ο παλιός κλώνος μεθυλιώνεται και ο νέος κλώνος δεν μεθυλιώνεται για σύντομο χρονικό διάστημα. Αυτό επιτρέπει την αφαίρεση της λάθος βάσης από το νέο σκέλος.[7]

2.2.2.1.1 Πρωτεΐνες και Διαδικασία

Η επιδιόρθωση περιλαμβάνει τις πρωτεΐνες MutS, MutL, MutH και UvrD. Το MutS πρώτα δεσμεύεται με την αναντιστοιχία και στη συνέχεια στρατολογεί τα MutL και MutH. Το MutL μπορεί να ανιχνεύσει τον μεθυλιωμένο κλώνο και μπορεί να σχηματίσει έναν βρόχο στο DNA. Σε αυτόν τον βρόχο, το νεότερο σκέλος είναι τώρα έξω, ενώ το παλιό σκέλος καλύπτεται από τον εαυτό του και το MutL. Στη συνέχεια, το MutH διασπά τον μη μεθυλιωμένο κλώνο. Αυτό συμβαίνει σε κάποια απόσταση από την αναντιστοιχία, λόγω του μεγέθους των πρωτεϊνών και του βρόχου στο DNA. Το UvrD μπορεί στη συνέχεια να ανιχνεύσει τη διάσπαση και μπορεί να κινηθεί κατά μήκος του κλώνου προς τη θέση της αναντιστοιχίας. Αφαιρεί το εξωτερικό σκέλος όταν κινείται κατά μήκος. Ταυτόχρονα, οι πρωτεΐνες MutL, MutH και MutS απελευθερώνονται και ο βρόχος στο

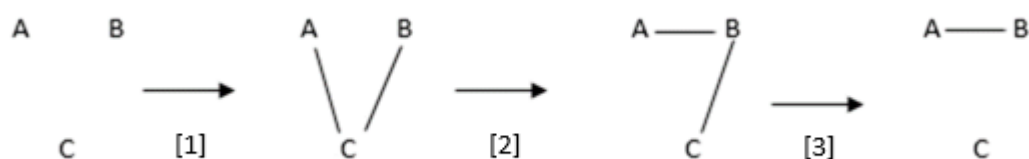
DNA εξαφανίζεται. Τελικά το UvrD μετακινείται σε μια θέση αμέσως πέρα από την αναντιστοιχία, αφαιρώντας τη λάθος βάση μαζί με τους γείτονές του. Στη συνέχεια, το UvrD απομακρύνεται από το DNA και αφήνει το παλιό, και σωστό, σκέλος να ολοκληρωθεί.[7]

2.3 CCB

Ο Λογισμός Ομοιοπολικού Δεσμού (Calculus of Covalent Bonding) είναι ένας λογισμός διαδικασιών εμπνευσμένος από χημικές αντιδράσεις. Το βασικό χαρακτηριστικό του λογισμού είναι ο τελεστής προθέματος (prefix operator) της μορφής (s; b), όπου η εκτέλεση της ενέργειας b ενεργοποιεί την αναίρεση μιας από τις ενέργειες στο s. Εξαιτίας αυτής της σχέσης μεταξύ της εκτέλεσης και της αναίρεσης πράξεων (ή σχηματισμός και διάσπαση δεσμών σε μια χημική μοντελοποίηση) ονομάζεται τοπική αντιστρεψιμότητα.[5,6] Αυτός ο τελεστής, επιτρέπει την μοντελοποίηση της αναστρεψιμότητας μη αιτιολογικής σειράς, όπου οι αιτίες αναιρούνται πριν τα αποτελέσματα τους. Αξίζει να σημειωθεί ότι αυτός ο λογισμός χρησιμοποιήθηκε για μοντελοποίηση του DNA mismatch.

2.3.1 Παράδειγμα χρήσης

Παρουσιάζεται ξανά το παράδειγμα της κατάλυσης. Υπάρχουν δύο μόρια A και B που μπορούν να ενωθούν μεταξύ τους μόνο με την βοήθεια του μορίου C.



Εικόνα 2.7: Παράδειγμα κατάλυσης[6]

Ο τρόπος με τον οποίο θα οριστούν αυτά τα μόρια σε αυτό τον λογισμό είναι ο εξής:

$$A^{def}=(a; p).A'$$

$$B^{def}=(b, p).B'$$

$$C^{def}=(a, b).C'$$

,όπου A' , B' , C' αναπαριστούν κάποια περεταίρω πιθανή συμπεριφορά των μορίων A,B και C. Επίσης χρησιμοποιείται ο τελεστής προθέματος (s; p).P, όπου s είναι μια

ακολουθία ενεργειών ή εκτελεσμένων ενεργειών και p είναι μια αδύναμη ενέργεια. Αρχικά εκτελούνται οι ενέργειες στο s λαμβάνουν μέρος και έπειτα στο p . Τα μόρια A , B και C μπορούν να συνδεθούν εκτελώντας συγχρονισμένα τις ενέργειες αντιστοίχισης σύμφωνα με τη συνάρτηση επικοινωνίας $\gamma(a, a) = c$, $\gamma(b, b) = d$ και $\gamma(p, p) = q$, παράγοντας έτσι νέες ενέργειες c , d και q αντίστοιχα. Μια αδύναμη ενέργεια p μπορεί να παραληφθεί στο $(s; p)$ με αποτέλεσμα το απλό πρόθεμα $(s).P$ (όπως στο B και C πιο πάνω). Γενικά, οι ενέργειες του s στο $(s; p).P$ μπορούν να πραγματοποιηθούν με οποιαδήποτε σειρά και το p μπορεί να συμβεί μόνο εάν όλες οι ενέργειες στο s έχουν ήδη πραγματοποιηθεί. Μόλις πραγματοποιηθεί το p , μία από τις εκτελούμενες ενέργειες στο s πρέπει να αναιρεθεί αμέσως. Αυτός είναι ένας μηχανισμός για την ενεργοποίηση του αντίστροφου υπολογισμού.[6]

Γίνεται αναπαράσταση στο σύστημα των μορίων A, B, C ως $(a; p).A' | (b, p).B' | (a, b).C' \setminus \{a, b, p\}$, όπου « $|$ » είναι η παράλληλη σύνθεση και « $\setminus$ » ο περιορισμός. Σημειώνεται ότι το A και το B δεν μπορούν να αλληλεπιδράσουν αρχικά αφού το $\gamma(a, b)$ δεν ορίζεται. Μπορούν ωστόσο και τα δύο να αλληλεπιδράσουν με το C :

$$\begin{array}{ccc} & c[1] & d[2] \\ (a; p).A' | (b, p).B' | (a, b).C' & \longrightarrow & (a[1]; p).A' | (b, p).B' | (a[1], b).C' \longrightarrow \\ & & (a[1]; p).A' | (b[2], p).B' | (a[1], b[2]).C' \end{array}$$

Οι αριθμοί 1 και 2 είναι τα κλειδιά επικοινωνίας (communication keys) που υποδεικνύουν ποια ζεύγη ενεργειών έχουν συνδεθεί. Τα μόρια A και B μπορούν τώρα να συνδεθούν στο p (με το κλειδί 3), παράγοντας την ενέργεια $q[3]$. Αυτό προκαλεί αμέσως το σπάσιμο του δεσμού $c[1]$, που σημαίνει την αναίρεση της ενέργειας a στο A και της ενέργειας a στο C . (και εξακολουθεί να αφήνει το A και B ενωμένα). Μοντελοποιείται ένα τέτοιο γεγονός δημιουργίας δεσμού και ταυτόχρονα σπάζοντας έναν άλλο δεσμό με ένα ζευγάρι συντονισμένων ενεργειών:

$$(a[1]; p).A' | (b[2], p).B' | (a[1], b[2]).C' \xrightarrow{\{q[3], c[1]\}} (a; p[3]).A' | (b[2], p[3]).B' | (a, b[2]).C'$$

Ο δεσμός με το κλειδί 3 στην αδύναμη ενέργεια p είναι ασταθής, και έτσι προωθείται σε έναν σταθερό και ισχυρότερο δεσμό στα a και p , ο οποίος διαμορφώνεται από την ακόλουθη επανεγγραφή:

$$(a; p[3]).A' \mid (b[2], p[3]).B' \mid (a, b[2]).C' \Rightarrow (a[3]; p).A' \mid (b[2], p[3]).B' \mid (a, b[2]).C'$$

Τέλος, ο καταλύτης διαλύει τον δεσμό με το B:

$$(a[3]; p).A' \mid (b[2], p[3]).B' \mid (a, b[2]).C' \xrightarrow{d[2]} (a[3]; p).A' \mid (b, p[3]).B' \mid (a, b).C'$$

Με αυτό τον τρόπο με την χρήση του Λογισμού Ομοιοπολικού Δεσμού, έγινε ο δεσμός μεταξύ των μορίων A και B.

Κεφάλαιο 3

Αναστρέψιμα Δίκτυα Πέτρι με ταυτοχρονισμό και περιορισμό συνδεσιμότητας μαρκών

Τα Αναστρέψιμα Δίκτυα Πέτρι όπως παρουσιάστηκαν μέχρι στιγμής, τονίστηκε η χρησιμότητά τους, δόθηκαν οι ορισμοί τους και εξηγήθηκε ο τρόπος λειτουργίας τους. Ένα κύριο χαρακτηριστικό τους είναι ότι μπορούν να εκτελέσουν μόνο μια μετάβαση κάθε φορά. Παρόλα αυτά δίνεται η δυνατότητα να επεκταθεί ο ορισμός τους έτσι ώστε να μπορούν να εφαρμοστούν σε περισσότερα συστήματα. Όπως αναφέρθηκε και στην εισαγωγή, στόχος της διπλωματικής είναι η επέκταση αυτού του μοντέλου.

3.1 Εξήγηση επεκτάσεων

Θα μελετηθούν δύο επεκτάσεις των Αναστρέψιμων Δικτύων Πέτρι. Η μια επέκταση αφορά την συνδεσιμότητα των μαρκών και η δεύτερη την εκτέλεση των μεταβάσεων.

3.1.1 Συνδεσιμότητα μαρκών

Σε αυτή την επέκταση θα προστεθούν περιορισμοί στις μάρκες (tokens). Αρχικά, θα δοθεί σε κάθε μάρκα ένας τύπος, ο οποίος την αντιπροσωπεύει. Ο κάθε τύπος δικαιούται να έχει μέχρι να ένα συγκεκριμένο αριθμό ενώσεων με άλλο τύπο μάρκας, αλλά και συγκεκριμένους συνδυασμούς τύπων που μπορεί να ενωθεί. Με βάση αυτούς τους περιορισμούς που έχει ο κάθε τύπος, θα έχουν και οι μάρκες περιορισμούς ανάλογα με τους τύπους τους. Οι μάρκες στα απλά Αναστρέψιμα Δίκτυα Πέτρι, δεν έχουν τέτοιους περιορισμούς και μπορούν να δημιουργήσουν δεσμό (bond), με οποιαδήποτε άλλη μάρκα. Αυτή είναι η πρώτη επέκταση των Αναστρέψιμων Δικτύων Πέτρι. Η χρησιμότητα αυτής της επέκταση είναι ότι μπορεί να εφαρμοστεί σε συστήματα που υπάρχει περιορισμός σύνδεσης. Για παράδειγμα στο DNA, δεν μπορεί να συνδεθεί μια βάση τύπου A με μια βάση τύπου C ή G. Άρα είναι χρήσιμη η επέκταση αυτή για τέτοιο σύστημα.

3.1.2 Ταυτόχρονη εκτέλεση μεταβάσεων

Η δεύτερη επέκταση αφορά τον τρόπο εκτέλεσης. Στα Αναστρέψιμα Δίκτυα Πέτρι υπάρχει η εμπρόσθια εκτέλεση και η αντίστροφη εκτέλεση. Ουσιαστικά, κάθε φορά μπορεί να εκτελεστεί μόνο μια μετάβαση, είτε εμπρόσθια είτε προς τα πίσω. Σε αυτή την επέκταση, δίνεται η ευκαιρία να μπορούν να εκτελεστούν περισσότερες από μια μεταβάσεις την ίδια στιγμή. Έτσι, δίνεται η δυνατότητα να δημιουργούνται κάποια δεσμοί και ταυτόχρονα να σπάζουν κάποιοι άλλοι δεσμοί.

3.2 Ανανεωμένοι ορισμοί Αναστρέψιμων Δίκτυων Πέτρι

Ορίζουμε ένα Αναστρέψιμο Δίκτυο Πέτρι ως ακολούθως:

Ορισμός 1. Ένα Αναστρέψιμο Δίκτυο Πέτρι (RPN) είναι μια πλειάδα (A, P, B, T, F) όπου:

1. A είναι ένα πεπερασμένο μαρκών που συμβολίζονται με $a, b, \dots \bar{A} = \{a \mid a \in A\}$ περιέχει ένα «αρνητικό» στιγμιότυπο για κάθε μάρκα και γράφουμε $\mathcal{A} = A \cup \bar{A}$.
2. P είναι ένα πεπερασμένο σύνολο θέσεων.
3. $B \subseteq A \times A$ είναι ένα σύνολο μη κατευθυνόμενων δεσμών που συμβολίζονται με $\beta, \gamma, \dots$ Χρησιμοποιούμε το συμβολισμό $a-b$ για δεσμό $(a, b) \in B$. $\bar{B} = \{\bar{\beta} \mid \beta \in B\}$ περιέχει ένα "αρνητικό" στιγμιότυπο για κάθε δεσμό και γράφουμε $\mathcal{B} = B \cup \bar{B}$.
4. Το T είναι ένα πεπερασμένο σύνολο μεταβάσεων.
5. $F : (P \times T \cup T \times P) \rightarrow 2^{A \cup B}$ είναι ένα σύνολο κατευθυνόμενων τόξων.
6. $Ttypes$ είναι ένα πεπερασμένο σύνολο από τύπους
7. $Ctypes(Ttypes) \rightarrow P(P(Ttypes))$.

Ένα RPN χτίζεται με βάση ένα σύνολο από μάρκες. Οι μάρκες είναι διακριτές μεταξύ τους και έχουν μοναδικά ονόματα. Μπορεί να εμφανίζονται ως αυτόνομα στοιχεία, αλλά καθώς προχωρά ο υπολογισμός μπορεί να ενωθούν κάποιες μάρκες μεταξύ τους και να σχηματίσουν δεσμούς. Η κάθε μάρκα ανήκει σε ένα τύπο. Για κάθε τύπο υπάρχει ένα σύνολο από μάρκες που ανήκουν στον συγκεκριμένο τύπο. Αν η μάρκα x έχει τύπο N , τότε γράφουμε $x : N$. Επίσης υπάρχει η συνάρτηση $Ctypes$, η οποία επιστρέφει τα *connection types* για κάθε τύπο μάρκας ($Type$). Ουσιαστικά επιστρέφει ένα σύνολο από σύνολα τύπου $Ttypes$.

Τα κατευθυνόμενα τόξα συνδέουν θέσεις με μεταβάσεις και αντίστροφα και επισημαίνονται, με ετικέτα, με ένα υποσύνολο του $\mathcal{A} \cup \mathcal{B}$ όπου το $\bar{A}$ περιέχει το σύνολο των “αρνητικών” μαρκών που εκφράζουν την απουσία της μάρκας και το $\bar{B}$ περιέχει το σύνολο των “αρνητικών” δεσμών που εκφράζουν την απουσία δεσμού. Για μια ετικέτα (label) $\ell = F(x, t)$ ή $\ell = F(t, x)$, υποθέτουμε ότι η κάθε μάρκα a μπορεί να εμφανίζεται στην ετικέτα το πολύ μια φορά, είτε ως a είτε ως $\bar{a}$, και αν ένας δεσμός $(a, b) \in \ell$ τότε $a, b \in \ell$. Επιπλέον, για $\ell = F(t, x)$, πρέπει να είναι ισχύει ότι $\ell \cap (\bar{A} \cup \bar{B}) = \emptyset$, δηλαδή, αρνητικές μάρκες και αρνητικοί δεσμοί μπορεί να εμφανιστούν μόνο σε τόξα που εισέρχονται σε μια μετάβαση. Διαισθητικά, αυτές οι ετικέτες, όταν τοποθετούνται στα εισερχόμενα τόξα εκφράζουν τις απαιτήσεις για να εκτελεστεί μια μετάβαση και όταν τοποθετούνται στα εξερχόμενα τόξα, εκφράζουν τα αποτελέσματα της μετάβασης. Έτσι, αν $a \in F(x, t)$, αυτό σημαίνει ότι η μάρκα a απαιτείται για να εκτελεστεί η μετάβαση t , και ομοίως για το ένα δεσμό $\beta \in F(x, t)$. Από την άλλη πλευρά, το $\bar{a} \in F(x, t)$, εκφράζει ότι η μάρκα a δεν πρέπει να υπάρχει στις εισερχόμενες θέσεις (places) της μετάβασης t για να εκτελεστεί, και ομοίως για $\bar{\beta} \in F(x, t)$. Η έκφραση $F(x, t) = \emptyset$ σημαίνει ότι δεν υπάρχει τόξο από τη θέση x στη μετάβαση t και ομοίως για $F(t, x) = \emptyset$.

Ορίζουμε τα σύμβολα $\bullet t = \{x \in P \mid F(x, t) \neq \emptyset\}$ και $t \bullet = \{x \in P \mid F(t, x) \neq \emptyset\}$ για τις εισερχόμενες και εξερχόμενες θέσεις της μετάβασης t , αντίστοιχα. Επιπλέον, ορίζουμε τις συναρτήσεις $\text{pre}(t) = \bigcup_{x \in P} F(x, t)$ για την ένωση όλων των ετικετών στα εισερχόμενα τόξα της μετάβασης t και $\text{post}(t) = \bigcup_{x \in P} F(t, x)$ για την ένωση όλων των ετικετών στα εξερχόμενα τόξα της μετάβασης t . Ακόμη ορίζουμε την έννοια $\text{types}(s, a)$, όπου s είναι σύνολο από δεσμούς (bonds), a είναι μάρκα και επιστρέφει τους τύπους όλων των μαρκών που είναι ενωμένες με την μάρκα a . Επίσης ορίζεται η έννοια $\text{post}(t)_a$ η οποία επιλέγει όλους τους δεσμούς που περιέχουν την μάρκα a .

Ορισμός 2

Ένα αναστρέψιμο δίκτυο Πέτρι (A, P, B, T, F) είναι καλά ορισμένο εάν ικανοποιεί τις ακόλουθες συνθήκες για όλα τα $t \in T$:

1. $A \cap \text{pre}(t) = A \cap \text{post}(t)$,
2. Αν $a-b \in \text{pre}(t)$ τότε $a-b \in \text{post}(t)$,
3. $F(t, x) \cap F(t, y) = \emptyset$ για όλα τα $x, y \in P, x \neq y$.

4. $\text{types}(\text{post}(t)_a) \in \text{CType}(\text{Typ})$, για όλες τις μάρκες $a:\text{Typ}$, $a \in \text{post}(t)$

Σύμφωνα με τα παραπάνω: (1) οι μεταβάσεις δεν διαγράφουν μάρκες, (2) οι μεταβάσεις δεν καταστρέφουν τους δεσμούς, δηλαδή εάν υπάρχει ένας δεσμός $a-b$ σε μια θέση εισόδου μιας μετάβασης, τότε διατηρείται στην εξερχόμενη θέση, (3) οι μάρκες και οι δεσμοί δεν μπορούν να κλωνοποιηθούν σε περισσότερες από μια εξερχόμενες θέσεις και (4) θα πρέπει να ικανοποιούνται οι περιορισμοί των τύπων των μαρκών. Συγκεκριμένα, στα εξερχόμενα τόξα κάθε μετάβασης, οι τύποι των μαρκών που είναι ενωμένοι με μια συγκεκριμένη μάρκα συγκεκριμένου τύπου, θα πρέπει να ανήκουν στο CType του τύπου αυτού.

Η έννοια του μαρκαρίσματος (marking) είναι η κατανομή μαρκών και δεσμών σε θέσεις, $M : P \rightarrow 2^{A \cup B}$ όπου $a-b \in M(x)$, για κάποια $x \in P$, σημαίνει $a, b \in M(x)$.

Χρησιμοποιούμε την έννοια του ιστορικού (history) που είναι η μνήμη που έχει η κάθε μετάβαση, $H : T \rightarrow \mathbb{N}$. Όταν η μετάβαση t έχει ως ιστορικό $H(t) = 0$, σημαίνει ότι η μετάβαση δεν έχει πραγματοποιηθεί ή έχει αντιστραφεί, ενώ ένα ιστορικό $H(t) = n$, $n > 0$ καταγράφει ότι η μετάβαση εκτελέστηκε και δεν αντιστράφηκε και το n υποδεικνύει τη σειρά εκτέλεσης μεταξύ των μη αναστρέψιμων δράσεων. Το H_0 υποδηλώνει το αρχικό ιστορικό όπου $H_0(t) = 0$ για όλα τα $t \in T$. Σε μια γραφική αναπαράσταση, τα ιστορικά παρουσιάζονται στις μεταβάσεις ως $[m]$, αν $m = H(t) > 0$, και παραλείπεται όταν $H(t) = 0$, για κάθε μετάβαση t .

Ένα ζεύγος που αποτελείται από ένα μαρκάρισμα και ένα ιστορικό, $\langle M, H \rangle$, περιγράφει μια κατάσταση ενός RPN βάσει του οποίου προσδιορίζεται η εκτέλεση. Ορίζουμε το $\text{con}(a, C)$, όπου $a \in A$ και $C \subseteq A \cup B$, είναι οι μάρκες που συνδέονται με το a στο C μέσω δεσμών καθώς και οι δεσμοί που δημιουργούν αυτές τις συνδέσεις.

$\text{con}(a, C) = (\{a\} \cap C) \cup \{\beta, b, c \mid \exists w \text{ s.t. } \text{διαδρομή}(a, w, C), \beta \in w, \text{ και } \beta = (b, c)\}$
 όπου $\text{διαδρομή}(a, w, C)$ αν $w = \beta_1, \dots, \beta_n$, και για όλα τα $1 \leq i \leq n$, $\beta_i = (a_{i-1}, a_i) \in C \cap B$, $a_i \in C \cap A$, και $a_0 = a$.

Ορισμός 3 : Εμπρόσθια και αντίστροφη εκτέλεση

Θεωρήστε ένα RPN (A, P, B, T, F) , την ακολουθία μεταβάσεων $t_1, \dots, t_n, \overline{t_{n+1}}, \dots, \overline{t_m} \in T$, όπου γράφουμε $For = \{t_1, \dots, t_n\}$ και $Back = \{\overline{t_{n+1}}, \dots, \overline{t_m}\}$ και μια κατάσταση $\langle M, H \rangle$. Λέμε ότι η ακολουθία μεταβάσεων $t_1, \dots, t_n, \overline{t_{n+1}}, \dots, \overline{t_m}$ είναι εκτελέσιμη (enabled) στην κατάσταση $\langle M, H \rangle$ εάν:

1. Για κάθε $t, t' \in For$, $pre(t) \cap pre(t') = \emptyset$.
2. Για κάθε $t, t' \in Back$ $post(t) \cap post(t') = \emptyset$.
3. Για κάθε $t \in For, t' \in Back$, $pre(t) \cap post(t') = \emptyset$.
4. Για κάθε $t \in For, t' \in Back$ $pre(t) \cap post(t') = \emptyset$.
5. Για κάθε $t \in For, a, \beta \in F(x, t)$, είτε $a, \beta \in M(x)$ και $a \notin F(t', x)$ για κάθε $t' \in Back$, είτε $a, \beta \in F(x, t')$ για κάποιο $t' \in Back$.
6. Για κάθε $t \in For$, αν $a, \beta \in F(t, x)$ τότε $a, \beta \in M(x)$.
7. Για κάθε $t \in For$, αν $a \in F(t, y_1), \beta \in F(t, y_2), y_1 \neq y_2$ τότε $\beta \notin con(a, M(x))$ για όλα τα $x \in \bullet t$,
8. Για κάθε $t \in For$, αν $\beta \in F(t, x)$ για κάποιο $x \in t \bullet$ και $\beta \in M(y)$ για κάποιο $y \in \bullet t$ τότε $\beta \in F(y, t)$.
9. Για κάθε $t \in For, x \in \bullet t, a \in F(x, t), a: Typ, A = con(a, (M(x) \cup eff(t)) - \bigcup_{t' \in Back} eff(t'))$ $type(A, a) \in CType(Typ)$.
10. Για κάθε $t \in Back, x \in t \bullet, a \in F(t, x), a: Typ, A = con(a, (M(x) - eff(t)) \cup \bigcup_{t' \in For} eff(t'))$, $type(A, a) \in CType(Typ)$.

Ουσιαστικά δεν πρέπει να υπάρχουν οι ίδιες μάρκες/δεσμοί σε εισερχόμενα τόξα εμπρόσθιων μεταβάσεων που εκτελούνται ταυτόχρονα. Δεν γίνεται να σπάσει ο ίδιος δεσμός ταυτόχρονα από δύο διαφορετικές μεταβάσεις. Για κάθε εμπρόσθια μετάβαση που έχουν στα εισερχόμενα τόξα τους μάρκες ή δεσμούς, αυτό σημαίνει ότι οι μάρκες και οι δεσμοί είτε ανήκουν σε εισερχόμενη θέση και όχι σε εξερχόμενο τόξο αντίστροφης μετάβασης είτε ανήκει σε εισερχόμενο τόξο μετάβασης που θα γίνει reversed. Για κάθε εμπρόσθια μετάβαση που έχει σε εξερχόμενο τόξο μάρκες ή δεσμούς, τότε αυτές οι μάρκες και δεσμοί θα υπάρχουν σε εξερχόμενη θέση. Αν οι μεταβάσεις που κάνουν εμπρόσθια εκτέλεση διακλαδίζονται σε εξερχόμενες θέσεις, τότε οι μάρκες που μεταφέρονται σε αυτές τις θέσεις δεν συνδέονται μεταξύ τους στις εισερχόμενες θέσεις.

Ακόμη, όσοι προ υπάρχων δεσμοί εμφανίζονται σε εξερχόμενα τόξα εμπρόσθιων μεταβάσεων, τότε είναι επίσης προϋπόθεση για να εκτελεστούν οι μεταβάσεις. Επίσης, για κάθε εμπρόσθια μετάβαση που έχει στο εισερχόμενο τόξο της μάρκα με τύπο θα πρέπει η συνδεσιμότητα της μάρκας να ικανοποιεί τα connection types του τύπου της. Για κάθε μετάβαση που θα εκτελεστεί αντίστροφα και στο εξερχόμενο τόξο της έχει μάρκα με τύπο, θα πρέπει η συνδεσιμότητα της μάρκας να ικανοποιεί το connection type του τύπου.

Τελευταία μετάβαση και Τελευταία θέση

Δεδομένου ενός δικτύου Πέτρι που αντιστρέφεται (A, P, B, T, F) , αρχικό μαρκάρισμα M_0 , μια ιστορία H και ένα σύνολο βάσεων και δεσμών $C \subseteq A \cup B$ γράφουμε:

$$\text{lastT}(C, H) = \begin{cases} t, & \text{if } \exists t, \text{post}(t) \cap C \neq \emptyset, \text{ and } \nexists t', \text{post}(t') \cap C \neq \emptyset, \\ & \max(H(t')) \geq \max(H(t)) \\ \perp, & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$\text{lastP}(C, H) = \begin{cases} x, & \text{if } t = \text{lastT}(C, H), \{x\} = \{y \in t^\bullet \mid F(t, y) \cap C \neq \emptyset\} \\ \text{or, if } \perp = \text{lastT}(C, H), C \subseteq M_0(x) \\ \perp, & \text{otherwise} \end{cases}$$

Έτσι, εάν το στοιχείο C έχει υποστεί χειραγώγηση από κάποια μετάβαση που είχε εκτελεστεί προηγουμένως, τότε το $\text{lastT}(C, H)$ είναι η τελευταία τέτοιου είδους μετάβαση που εκτελέστηκε. Διαφορετικά, εάν δεν υπάρχει τέτοια μετάβαση (π.χ. επειδή

όλες οι μεταβάσεις που περιλαμβάνουν το C έχουν αντιστραφεί, τότε το $\text{lastT}(C, H)$ δεν ορίζεται ($\perp$). Ομοίως, το $\text{lastP}(C, H)$ είναι η εξερχόμενη θέση (place) που είναι συνδεδεμένη με τη μετάβαση $\text{lastT}(C, H) \neq \perp$ έχοντας κοινές μάρκες με το C, υποθέτοντας ότι μια τέτοια θέση είναι μοναδική, ή είναι η θέση στο αρχικό μαρκάρισμα στο οποίο υπήρχε το C αν $\text{lastT}(C, H) = \perp$, και διαφορετικά δεν ορίζεται.

Ορισμός: Θεωρήστε ένα RPN (A, P, B, T, F) , την ακολουθία μεταβάσεων $t_1, \dots, t_n, \overline{t_{n+1}}, \dots, \overline{t_m} \in T$, όπου γράφουμε $\text{For} = \{t_1, \dots, t_n\}$ και $\text{Back} = \{\overline{t_{n+1}}, \dots, \overline{t_m}\}$ και μια κατάσταση $\langle M, H \rangle$,

$$\text{στο } \langle M, H \rangle, \text{ γράφουμε } \langle M, H \rangle \xrightarrow{\{t_1, \dots, t_n, \overline{t_{n+1}}, \dots, \overline{t_m}\}} \langle M', H' \rangle$$

$$M'(x) = (M(x) \cup \bigcup_{(a,y) \in \text{For}, x} Ca, y) - (\text{eff}(w) \cup \bigcup_{a \in \text{OBack}, x} Ca, x)$$

Όπου γράφουμε $I_{w,x} = \{(a,y) \mid y \in P, a \in A \cap \text{post}(w), \text{lastP}(C_{a,y}, H') = x\}$, $O_{w,x} = \{a \mid a \in A \cap M(x) \cap \text{post}(w), \text{lastP}(C_{a,x}, H') \neq x\}$, και $C_{b,z} = \text{con}(b, M(z) - \text{eff}(w))$ για $b \in A, z \in P$.

Θα δημιουργηθούν δύο σύνολα F και R. Το F αντιπροσωπεύει τις μεταβάσεις που θα εκτελεστούν εμπρόσθια (forward) και το R περιέχει τις μεταβάσεις που θα εκτελεστούν αντίστροφα (reverse) ταυτόχρονα.

$F: \{t_1, t_2, \dots, t_k\} \rightarrow \text{Σύνολο από forwarded μεταβάσεις.}$

$R: \{\overline{t_1}, \dots, \overline{t_m}\} \rightarrow \text{Σύνολο από reversed μεταβάσεις.}$

$$H'(t') = \begin{cases} H(t') \cup \{\max(\{0\} \cup \{k \mid k \in H(t'), t'' \in T\}) + 1\}, & \text{if } t'=t, t \in F \\ H(t') - \{k\}, & \text{if } t'=t, k=\max(H(t)), t \in R \\ H(t'), & \text{otherwise} \end{cases}$$

Το ιστορικό της κάθε μετάβασης αλλάζει ανάλογα με το αν εκτελέστηκε εμπρόσθια ή αντίστροφα. Εξαιτίας του ότι μπορεί να τύχει να εκτελεστεί ταυτόχρονα μια μετάβαση εμπρόσθια και μια άλλη μετάβαση αντίστροφα, χωρίζονται οι μεταβάσεις σε δύο σύνολα F και R . Αν ανήκει στις εμπρόσθιες μεταβάσεις, τότε το ιστορικό της συγκεκριμένης μετάβασης θα βρεί το μέγιστο k που έχει μια μετάβαση σε όλο το δίκτυο πέτρι και θα πάρει την τιμή $k+1$. Την ίδια στιγμή, αν μια μετάβαση ανήκει στο σύνολο των αντίστροφων μεταβάσεων, τότε το ιστορικό της συγκεκριμένης μετάβασης, θα βρεί το μέγιστο k που έχει η συγκεκριμένη μετάβαση και θα το αφαιρέσει από το ιστορικό της.

3.3 Παράδειγμα επεξήγησης των επεκτάσεων

Έστω μάρκες a_1, b_1, b_2, c_1, c_2 . Η μάρκα a_1 είναι τύπου A , $a_1:A$. Οι μάρκες b_1 και b_2 είναι τύπου B , $b_1:B$ $b_2:B$, και οι μάρκες c_1 και c_2 είναι τύπου C , $c_1:C$ $c_2:C$. Έστω ότι οι μάρκες που είναι τύπου A , δηλαδή η μάρκα a , έχει περιορισμό να μπορεί να ενωθεί είτε με 1 μάρκα τύπου B , είτε με μια μάρκα τύπου C , είτε με 1 μάρκα τύπου B και μια μάρκα τύπου C . Δεν μπορεί να ενωθεί με 2 μάρκες ή περισσότερες τύπου B ή τύπου C . Υποθέτουμε ότι είναι ήδη συνδεδεμένη με την b_1 και την c_1 . Όταν πάει να ενωθεί με την μάρκα b_2 , ταυτόχρονα θα σπάσει ο δεσμός a_1-b_1 , εξαιτίας του περιορισμού.

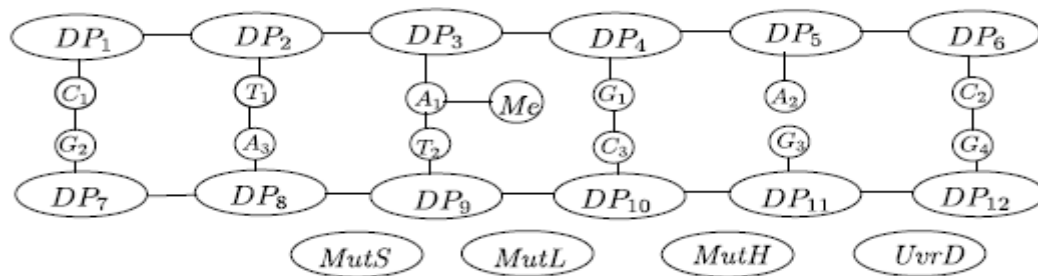
Κεφάλαιο 4

Μοντελοποίηση της επισκευής του DNA με το νέο μοντέλο

Σε αυτό το κεφάλαιο, θα παρουσιαστεί και θα εξηγηθεί ο τρόπος που μπορεί να γίνει η αναπαράσταση της επισκευής της ασυμφωνίας του DNA, με τη χρήση του καινούριου μοντέλου RPN που παρουσιάστηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο.

4.1 Παράδειγμα ασυμφωνίας DNA

Το DNA αποτελείται από δύο πολυνουκλεοτιδικές αλυσίδες. Κάθε νουκλεοτίδιο περιέχει μία από τις τέσσερις νουκλεοβάσεις, ή απλά βάσεις, αδενίνη (A), κυτοσίνη (C), γουανίνη (G) και θυμίνη (T). Οι βάσεις μπορούν να αντιδράσουν μεταξύ τους ως εξής: Οι A και T παράγουν ένα ζεύγος A-T, οι C και G παράγουν ένα ζεύγος C-G και άλλοι συνδυασμοί δεν είναι κανονικά δυνατοί.



Εικόνα 4.1: DNA mismatch[7]

Όπως φαίνεται στο παράδειγμα στην Εικόνα 4.1, υπάρχει ένας συνδυασμός που προκαλεί αναντιστοιχία. Ο συνδυασμός A₂-G₃, δεν είναι κανονικά δυνατός να πραγματοποιηθεί. Το A₂ είναι αδενίνη και το G₃ είναι γουανίνη. Η αδενίνη (A) μπορεί να συνδυαστεί μόνο με θυμίνη (T) και η γουανίνη (G) μόνο με κυτοσίνη (C). Άρα υπάρχει αναντιστοιχία στο συγκεκριμένο σημείο.

4.2 Επισκευή Ασυμφωνίας

Ο μηχανισμός που θα χρησιμοποιηθεί για την επισκευή της συγκεκριμένης αναντιστοιχίας, είναι η Επισκευή Ασυμφωνίας Μεθυλίου (MMR), που βασίζεται στη μεθυλίωση των κλώνων DNA κάποια στιγμή μετά τη δημιουργία τους, την οποία έχουμε περιγράψει στο υποκεφάλαιο 2.2.2. Ουσιαστικά θα συνδεθεί μια ομάδα μεθυλίου (Me) στην αδενίνη A₁. Δεν υπάρχει ομάδα μεθυλίου στο A₂. Αυτό συμβαίνει επειδή η

μεθυλίωση συμβαίνει μόνο σε ακολουθίες CTAG, η οποία βρίσκεται στο πάνω αριστερά κομμάτι του DNA. Καμία βάση δεν είναι μεθυλιωμένη στο νέο κάτω μισό, ακόμη και αν αποτελεί μέρος των ακολουθιών CTAG, καθώς δεν έχει περάσει αρκετός χρόνος σε αυτό το στάδιο για να συμβεί αυτό. Επίσης θα χρησιμοποιηθούν για την επιδιόρθωση οι πρωτεΐνες MutS, MutL, MutH και UvrD, οι οποίες θα χρησιμοποιηθούν με αυτή την σειρά.

4.2.1 Αρχικοποίηση του Δικτύου

Αρχικά, θα πρέπει να οριστούν ποιες θα είναι οι μάρκες που θα χρησιμοποιηθούν κατά την μοντελοποίηση, καθώς επίσης και ο τύπος τους. Να αναφερθεί πως οι μάρκες: DP₁, DP₂, DP₃, DP₄, DP₅, DP₆, DP₇, C₁, T₁, C₂, G₂, A₃, G₄, δεν θα χρειαστεί να αναπαρασταθούν στο δίκτυο Πέτρι, αφού δεν θα συμμετέχουν στην διαδικασία επισκευής. Παρόλα αυτά θα οριστεί για όλες τις μάρκες ο τύπος τους. Οι τύποι που θα έχουν οι μάρκες είναι οι εξής: A, C, G, T, DP, Me, Πρωτεΐνες και UvrD. Οι μάρκες είναι οι εξής: DP₁, DP₂, DP₃, DP₄, DP₅, DP₆, DP₇, DP₈, DP₉, DP₁₀, DP₁₁, DP₁₂, C₁, G₂, T₁, A₃, A₁, Me, T₂, G₁, C₃, A₂, G₃, C₂, G₄, MutS, MutL, MutH, UvrD.

Στον πιο κάτω πίνακα παρουσιάζεται η αντιστοιχία μάρκα- τύπος, δηλαδή, σε ποιο τύπο ανήκει η κάθε μάρκα:

A	C	G	T	DP	Me	Πρωτεΐνη	UvrD
A ₁	C ₁	G ₁	T ₁	DP ₁	Me	MutS	UvrD
A ₂	C ₂	G ₂	T ₂	DP ₂		MutL	
A ₃	C ₃	G ₃		DP ₃		MutH	
		G ₄		DP ₄			
				DP ₅			
				DP ₆			
				DP ₇			
				DP ₈			
				DP ₉			
				DP ₁₀			
				DP ₁₁			
				DP ₁₂			

Επίσης, βάση της κατανόησης του μοντέλου, προκύπτουν οι τύποι συνδεσιμότητας (connection types) για τον κάθε τύπο. Στον πιο κάτω πίνακα, παρουσιάζεται η αντιστοιχία Τύπος-Connection Types. Θα εξηγηθούν στην συνέχεια πως προέκυψαν τα connection types.

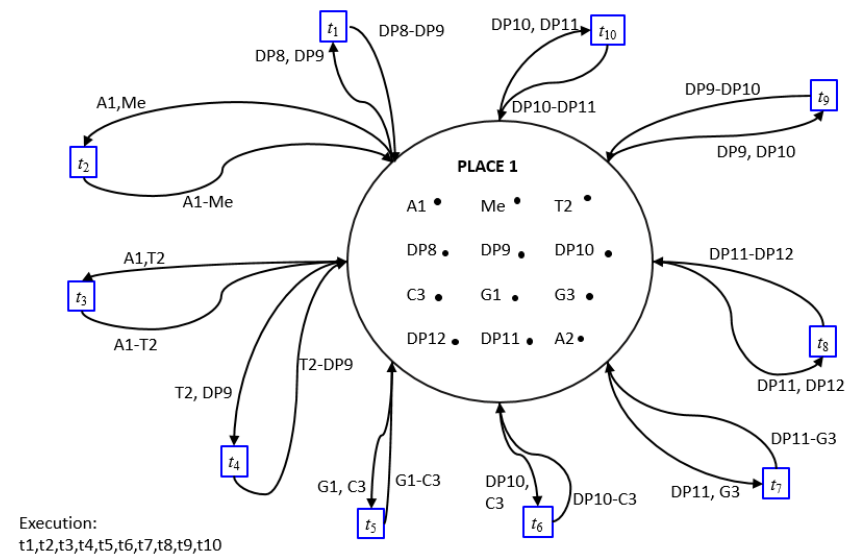
Τύπος	Connection Types
A	$CTypes(A) = \{\{DP\}, \{DP, T\}, \{DP, πρωτεΐνη\}, \{DP, Me, T\}, \{DP, Me\}\}$
C	$CTypes(C) = \{\{DP, G\}, \{DP\}, \{DP, πρωτεΐνη\}\}$
G	$CTypes(G) = \{\{DP, C\}, \{DP\}, \{DP, πρωτεΐνη\}, \{DP, UvrD\}\}$
T	$CTypes(T) = \{\{DP, A\}, \{DP\}, \{DP, UvrD\}\}$
DP	$CTypes(DP) = \{\{T\}, \{G\}, \{C\}, \{DP, A\}, \{DP, C\}, \{DP, G\}, \{DP, T\}, \{DP, DP, A\}, \{DP, DP, T\}, \{DP, DP, G\}, \{DP, DP, C\}, \{DP, A, πρωτεΐνη\}, \{DP, C, UvrD\}, \{DP, G, UvrD\}, \{G, UvrD\}\}$
Me	$CTypes(Me) = \{\{A\}, \{A, πρωτεΐνη\}\}$
Πρωτεΐνη	$CTypes(Πρωτεΐνη) = \{\{A, G\}, \{A, G, πρωτεΐνη\}, \{πρωτεΐνη\}, \{Me, πρωτεΐνη\}, \{πρωτεΐνη, πρωτεΐνη, Me\}, \{DP, πρωτεΐνη\}\}$
UvrD	$CTypes(UvrD) = \{\{DP\}, \{DP, C\}, \{DP, G\}, \{DP, T\}\}$

Επιπλέον, ορίζονται οι θέσεις (places) που θα χρησιμοποιηθούν κατά την μοντελοποίηση. Συγκεκριμένα, θα χρησιμοποιηθούν οι θέσεις : Place1, Place2 και Place3. Στο Place1, είναι η αρχικοποίηση του συστήματος, όπου γίνεται το κτίσιμο του DNA, και περιέχεται το DNA mismatch. Στο Place2, περιέχονται οι πρωτεΐνες, οι οποίες θα χρησιμοποιηθούν κατά την διαδικασία της επισκευής. Στο Place3, ουσιαστικά θα πραγματοποιηθεί η διαδικασία της επισκευής αναντιστοιχίας του DNA

Όσο αφορά τις μεταβάσεις που θα χρησιμοποιηθούν στο Αναστρέψιμο Δίκτυο Πέτρι: Ορίζονται οι 22 μεταβάσεις $\{t_1, \dots, t_{22}\}$. Οι πρώτες 10 μεταβάσεις (t_1 - t_{10}) αφορούν το κτίσιμο του DNA που περιέχει την αναντιστοιχία. Οι μεταβάσεις t_{11} και t_{12} ενεργοποιούν την πρωτεΐνη MutS, η οποία ενώνεται με το A2 και το G3, δηλαδή στο σημείο της αναντιστοιχίας. Με τις μεταβάσεις t_{13} και t_{14} γίνεται η ενεργοποίηση της πρωτεΐνης MutL και η ένωση της με το μεθύλιο (Me). Η μετάβαση t_{15} φέρνει στην διαδικασία και την πρωτεΐνη MutH η οποία με την εκτέλεση της t_{16} έχει ως αποτέλεσμα την αντιστροφή μετάβασης που θα οδηγήσει στην διάσπαση του μη μεθυλιωμένου κλώνου. Οι μεταβάσεις t_{17} - t_{22} αφορούν το UvrD, το οποίο αφού πρώτα ανιχνεύσει την σχισμή του κλώνου, ακολούθως προχωρά στον κλώνο αφαιρώντας τον, μέχρι να εξαφανιστεί η αναντιστοιχία του DNA.

4.2.2 Αναπαράσταση διαδικασίας Επισκευής DNA

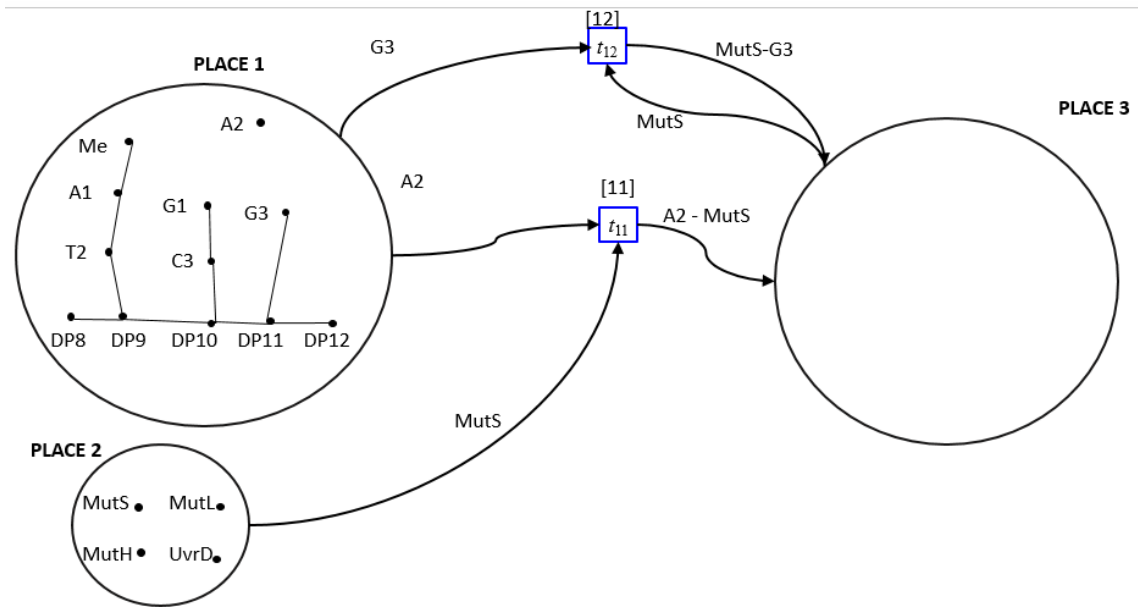
Σε αυτό το υποκεφάλαιο θα αναπαρασταθεί η διαδικασία της επισκευής του DNA, με την χρήση των Αναστρέψιμων Δικτύων Πέτρι αλλά με τις επεκτάσεις που επεξηγήθηκαν στο προηγούμενο κεφάλαιο.



Εικόνα 4.2: Αρχική αναπαράσταση DNA με RPN

Στην Εικόνα 4.2 παρουσιάζονται οι πρώτες 10 μεταβάσεις, οι οποίες με την εκτέλεση τους, έχουν σκοπό να δημιουργήσουν το αρχικό DNA με την αναντιστοιχία. Κάθε

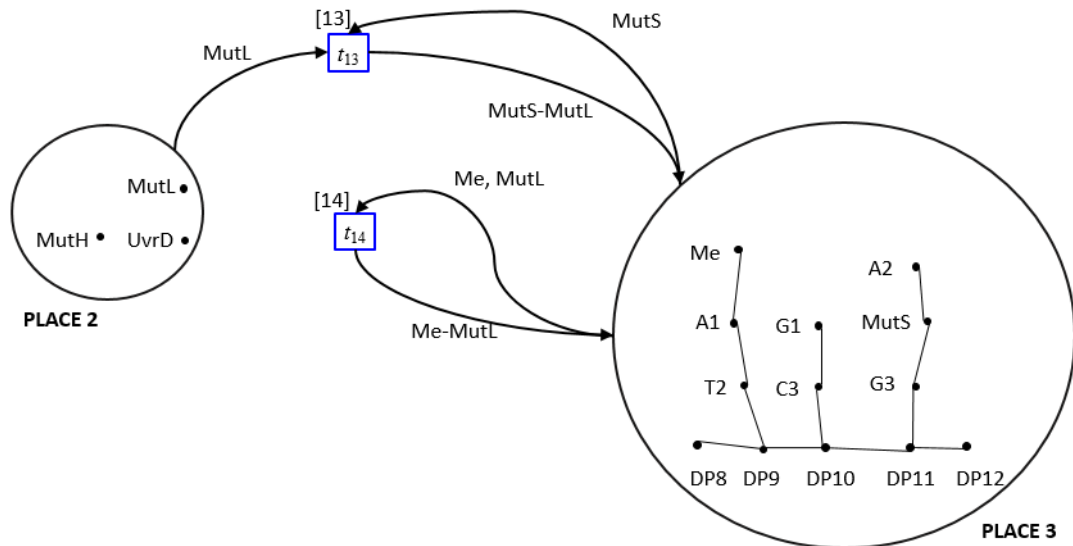
μετάβαση είναι η δημιουργία δεσμού μεταξύ δύο στοιχείων. Μετά την εμπρόσθια εκτέλεση τους παίρνουμε το σύστημα που βλέπουμε στην Εικόνα 4.3.



Εικόνα 4.3: Χρήση MutS

Εκτέλεση: t_{11}, t_{12}

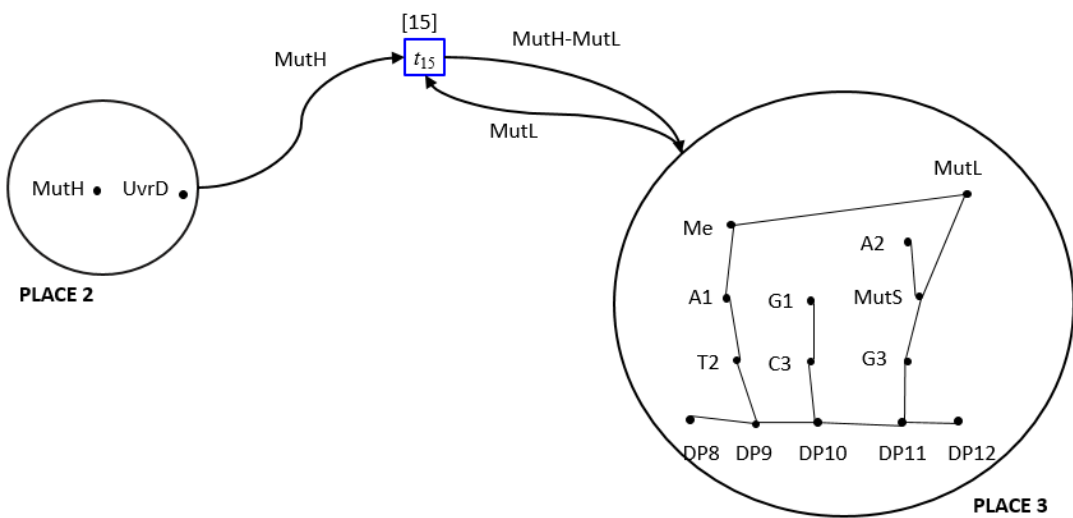
Εδώ γίνεται η πρώτη χρήση των πρωτεϊνών. Συγκεκριμένα γίνεται η χρήση του MutS που ενώνεται με τις δύο βάσεις που δημιουργούν την αναντιστοιχία. Άρα ενώνεται με το A2 (που είναι τύπου A) αρχικά με την εκτέλεση της μετάβασης t_{11} και αμέσως μετά με το G3 (που είναι τύπου G) λόγω της εκτέλεσης της t_{12} . Το αποτέλεσμα αυτών των εκτελέσεων παρουσιάζεται στην Εικόνα 4.4.



Εικόνα 4.4: Ενεργοποίηση MutL

Εκτέλεση: t_{13}, t_{14}

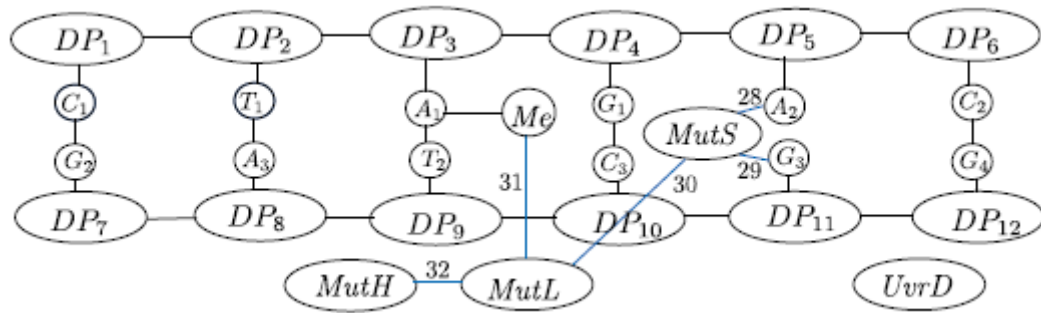
Στη συνέχεια το MutS ενεργοποιεί το MutL, το οποίο μπορεί να ανιχνεύσει τον μεθυλιωμένο κλώνο. Αρχικά με τη μετάβαση t_{13} το MutL ενώνεται με το MutS (ενεργοποίηση MutL) και έπειτα με τη μετάβαση t_{14} , ενώνεται με το μεθύλιο (Me), όπου βασικά γίνεται η ανίχνευση του μεθυλιωμένου κλώνου. Οι δεσμοί αυτοί παρουσιάζονται στην Εικόνα 4.5.



Εικόνα 4.5: Ενεργοποίηση MutH

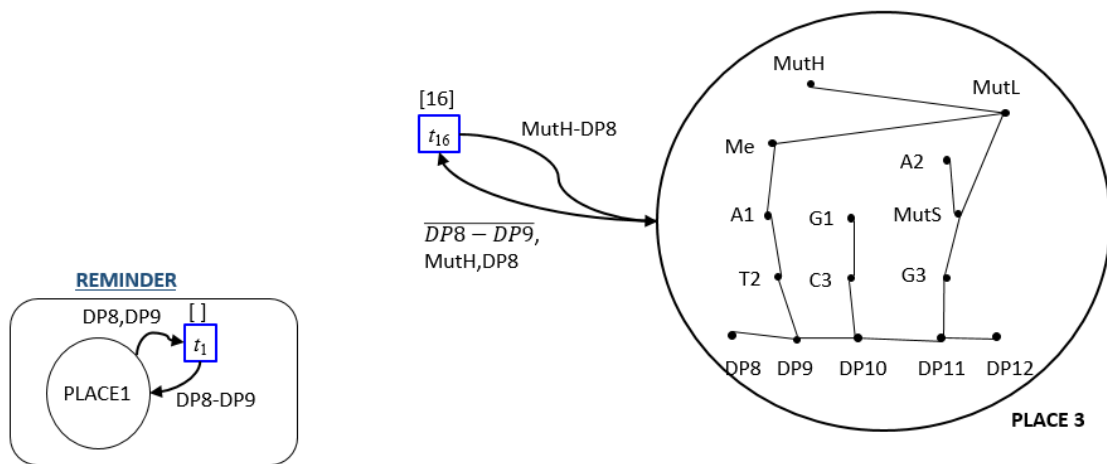
Εκτέλεση: t_{15}

Ενεργοποιείται η πρωτεΐνη MutH, η οποία έχει απώτερο σκοπό να διασπάσει τον μη μεθυλιωμένο κλώνο. Αρχικά όμως θα εκτελεστεί η μετάβαση t_{15} , η οποία θα έχει ως αποτέλεσμα τον δεσμό μεταξύ MutH και MutL. Το αποτέλεσμα του δεσμού φαίνεται στην Εικόνα 4.7.



Εικόνα 4.6: Αναπαράσταση DNA μέχρι t_{15} [7]

Μέχρι και την εκτέλεση της μετάβασης t_{15} , το DNA θα έχει την κατάσταση που δείχνει η Εικόνα 4.6. Με μπλε είναι οι δεσμοί που δημιουργήθηκαν με τις εκτελέσεις των μεταβάσεων.



Εικόνα 4.7: Ταυτόχρονη εκτέλεση t_{16} και $\bar{t}_1$

Εκτέλεση: t_{16} και $\bar{t}_1$ ταυτόχρονα

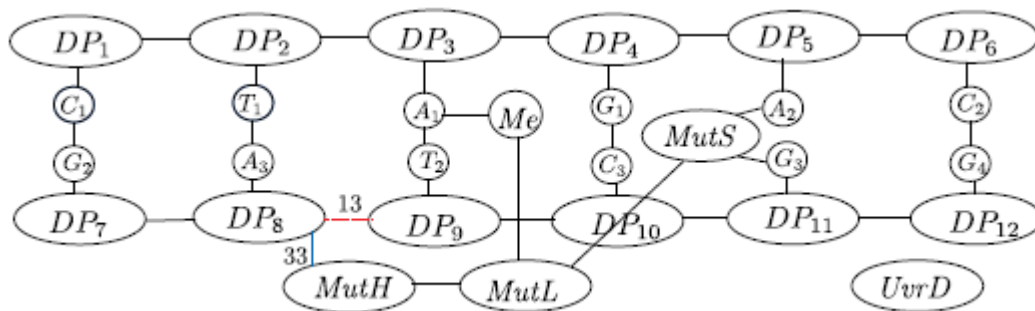
Ακολουθώντας, θα εκτελεστούν ταυτόχρονα δύο μεταβάσεις. Η t_{16} με εμπρόσθια εκτέλεση και η t_1 με αντίστροφη εκτέλεση. Συγκεκριμένα, θα δημιουργηθεί ο δεσμός MutH-DP8 με την εμπρόσθια εκτέλεση της t_{16} και ταυτόχρονα θα σπάσει ο δεσμός DP8-DP9 με την

αντίστροφη εκτέλεση της t_1 . Παρατηρούμε πως η μάρκα DP_8 παρουσιάζεται και στις δύο εκτελέσεις που έγιναν ταυτόχρονα. Πριν την εκτέλεση αυτών των μεταβάσεων ήταν ενωμένη με το DP_7 και το DP_9 που είναι τύπου DP και με το A_3 που είναι αδενίνη και είναι τύπου A. Μετά την εκτέλεση των μεταβάσεων είναι συνδεδεμένη με την DP_7 (DP) , με την A_3 (A) και με την $MutH$ που είναι τύπου πρωτεΐνης.

Πριν την εκτέλεση: Το DP_8 που είναι τύπου DP ενωμένο με: 2 μάρκες τύπου DP και 1 μάρκα τύπου A.

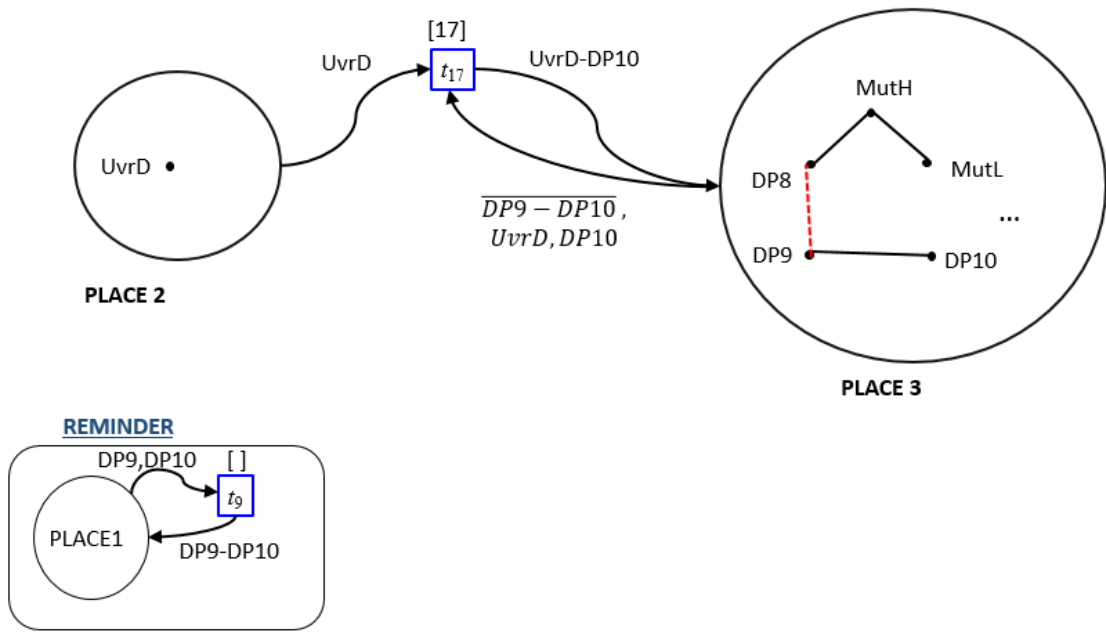
Μετά στην εκτέλεση: Το DP_8 που είναι τύπου DP ενωμένο με: 1 μάρκα τύπου DP , 1 μάρκα τύπου A και 1 μάρκα τύπου πρωτεΐνη.

Επίσης, γίνεται ταυτόχρονη αλλαγή ιστορικού της μετάβασης t_{16} και της μετάβασης t_1 . Όπως φαίνεται το ιστορικό της t_{16} θα πάρει τον αριθμό [16], ενώ ταυτόχρονα διαγράφεται το ιστορικό της t_1 με αριθμό [1]. Αυτές οι αλλαγές που πραγματοποιούνται παρουσιάζονται στην Εικόνα 4.9.



Εικόνα 4.8: Αναπαράσταση DNA μέχρι t_{16}

Η Εικόνα 4.8 απεικονίζει την καινούρια κατάσταση που θα έχει το DNA μέχρι και την ταυτόχρονη εκτέλεση t_{16} , $\bar{t}_1$. Με μπλε είναι ο δεσμός που δημιουργήθηκε και με κόκκινο ο δεσμός που έσπασε.



Εικόνα 4.9: Ταυτόχρονη εκτέλεση t_{17} $\bar{t}_9$

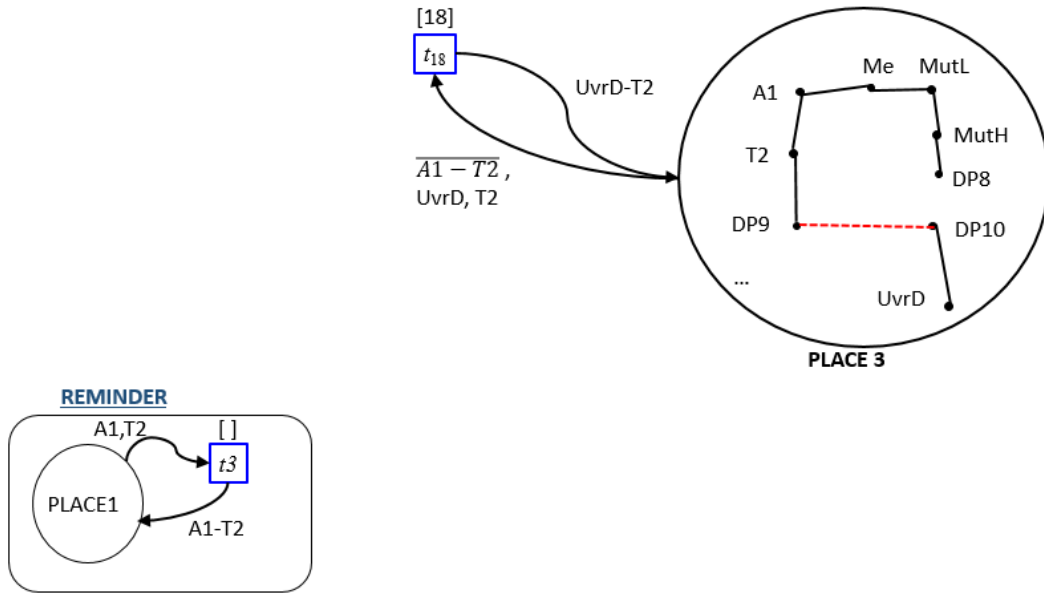
Εκτέλεση: t_{17} και $\bar{t}_9$ ταυτόχρονα.

Αυτό είναι το σημείο που θα ενεργοποιηθεί η πρωτεΐνη UvrD. Το UvrD μπορεί να ανιχνεύσει τη διάσπαση και να κινηθεί κατά μήκος του κλώνου προς τη θέση της αναντιστοιχίας. Θα εκτελεστούν ταυτόχρονα δύο μεταβάσεις. Η t_{17} με εμπρόσθια εκτέλεση και η t_9 με αντίστροφη εκτέλεση. Συγκεκριμένα, θα δημιουργηθεί ο δεσμός UvrD-DP₁₀ με την εμπρόσθια εκτέλεση της t_{17} και ταυτόχρονα θα σπάσει ο δεσμός DP₉-DP₁₀ με την αντίστροφη εκτέλεση της t_9 . Παρατηρούμε πως η μάρκα DP₁₀ παρουσιάζεται και στις δύο εκτελέσεις που έγιναν ταυτόχρονα. Πριν την εκτέλεση αυτών των μεταβάσεων ήταν ενωμένη με το DP₉ και το DP₁₁ που είναι τύπου DP και με το C₃ που είναι κυτοσίνη και είναι τύπου C. Μετά την εκτέλεση των μεταβάσεων είναι συνδεδεμένη με την DP₁₁ (DP), με την C₃ (C) και με την UvrD.

Πριν την εκτέλεση: Το DP₁₀ που είναι τύπου DP ενωμένο με: 2 μάρκες τύπου DP και 1 μάρκα τύπου C.

Μετά στην εκτέλεση: Το DP₁₀ που είναι τύπου DP ενωμένο με: 1 μάρκα τύπου DP, 1 μάρκα τύπου C και 1 μάρκα τύπου UvrD.

Επίσης, γίνεται ταυτόχρονη αλλαγή ιστορικού της μετάβασης t_{17} και της μετάβασης t_9 . Όπως φαίνεται το ιστορικό της t_{17} θα πάρει τον αριθμό [17], ενώ ταυτόχρονα διαγράφεται το ιστορικό της t_9 με αριθμό [9]. Αυτές οι αλλαγές που πραγματοποιούνται παρουσιάζονται στην Εικόνα 4.10.



Εικόνα 4.10: Ταυτόχρονη εκτέλεση t_{18} $\bar{t}_3$

Εκτέλεση: t_{18} και $\bar{t}_3$ ταυτόχρονα.

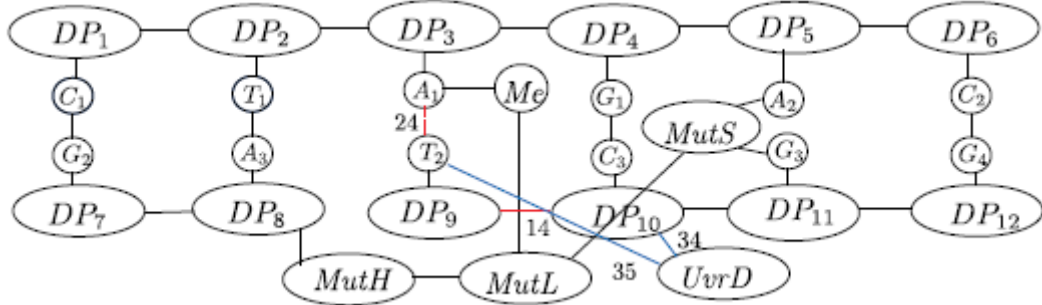
Θα εκτελεστούν ταυτόχρονα δύο μεταβάσεις. Η t_{18} με εμπρόσθια εκτέλεση και η t_3 με αντίστροφη εκτέλεση. Συγκεκριμένα, θα δημιουργηθεί ο δεσμός UvrD-T₂ με την εμπρόσθια εκτέλεση της t_{18} και ταυτόχρονα θα σπάσει ο δεσμός A₁-T₂ με την αντίστροφη εκτέλεση της t_3 . Παρατηρούμε πως η μάρκα T₂ παρουσιάζεται και στις δύο εκτελέσεις που έγιναν ταυτόχρονα. Πριν την εκτέλεση αυτών των μεταβάσεων ήταν ενωμένη με το DP₉ που είναι τύπου DP και με το A₁ που είναι αδενίνη και είναι τύπου A. Μετά την εκτέλεση των μεταβάσεων, είναι συνδεδεμένη με την DP₉ (DP) και με την UvrD.

Πριν την εκτέλεση: Το T₂ που είναι τύπου T ενωμένο με: 1 μάρκα τύπου DP και 1 μάρκα τύπου A.

Μετά στην εκτέλεση: Το T₂ που είναι τύπου T ενωμένο με: 1 μάρκα τύπου DP και 1 μάρκα τύπου UvrD.

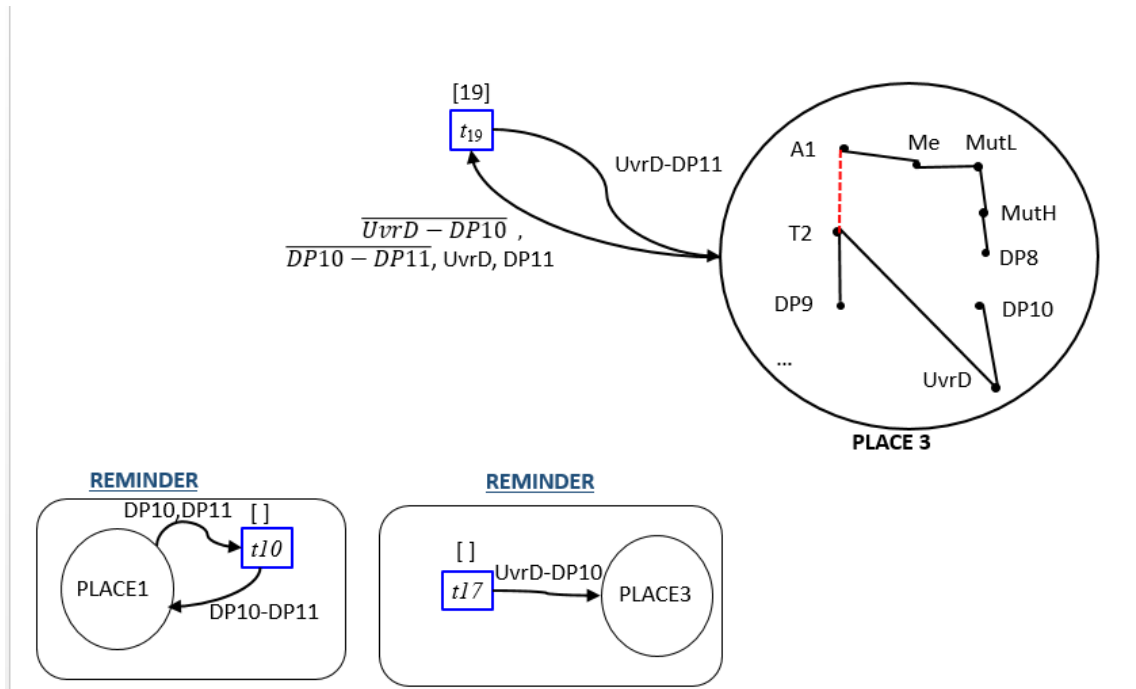
Επίσης, γίνεται ταυτόχρονη αλλαγή ιστορικού της μετάβασης t_{18} και της μετάβασης t_3 . Όπως φαίνεται το ιστορικό της t_{18} θα πάρει τον αριθμό [18], ενώ ταυτόχρονα διαγράφεται

το ιστορικό της t_3 με αριθμό [3]. Αυτές οι αλλαγές που πραγματοποιούνται παρουσιάζονται στην Εικόνα 4.12.



Εικόνα 4.11: Αναπαράσταση DNA μέχρι το t_{18} [7]

Η Εικόνα 4.11 απεικονίζει την καινούρια κατάσταση που θα έχει το DNA μέχρι την ταυτόχρονη εκτέλεση $t_{18}, \overline{t_3}$. Με μπλε είναι οι δεσμοί που δημιουργήθηκαν και με κόκκινο οι δεσμοί που έσπασαν.



Εικόνα 4.12: Ταυτόχρονη εκτέλεση $t_{19} \overline{t_{10}} \overline{t_{17}}$

Εκτέλεση: $t_{19}, \overline{t_{10}}$ και $\overline{t_{17}}$ ταυτόχρονα.

Θα εκτελεστούν ταυτόχρονα τρεις μεταβάσεις. Η t_{19} με εμπρόσθια εκτέλεση και οι t_{10} και t_{17} με αντίστροφη εκτέλεση. Συγκεκριμένα, θα δημιουργηθεί ο δεσμός $UvrD-DP_{11}$ με την εμπρόσθια εκτέλεση της t_{19} και ταυτόχρονα θα σπάσει ο δεσμός $UvrD-DP_{10}$ με την αντίστροφη εκτέλεση της t_{17} και ο δεσμός $DP_{10}-DP_{11}$ με την αντίστροφη εκτέλεση της t_{10} . Παρατηρούμε ότι οι μάρκες $UvrD$ και DP_{11} παρουσιάζονται και σε εμπρόσθια εκτέλεση και σε αντίστροφη εκτέλεση ταυτόχρονα. Πριν την εκτέλεση αυτών των μεταβάσεων η μάρκα DP_{11} ήταν ενωμένη με το DP_{10} και με το DP_{12} που είναι τύπου DP και με το G_3 που είναι γουανίνη και είναι τύπου G , ενώ η μάρκα $UvrD$ ήταν ενωμένη με το DP_{10} που είναι τύπου DP και με το T_2 που είναι τύπου T . Μετά την εκτέλεση των μεταβάσεων, το DP_{11} είναι συνδεδεμένο με την DP_{12} (DP), με την G_3 (G) και με την $UvrD$. Ενώ η $UvrD$ είναι συνδεδεμένη με το DP_{11} (DP) και με το T_2 (T).

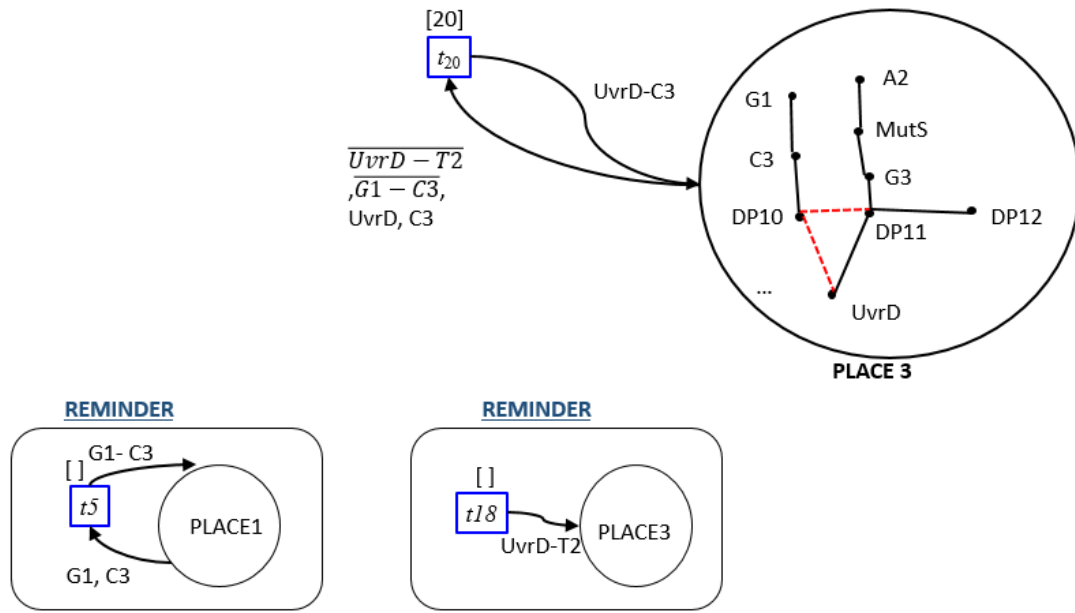
Πριν την εκτέλεση: Το DP_{11} που είναι τύπου DP ενωμένο με: 2 μάρκες τύπου DP και 1 μάρκα τύπου G .

Μετά στην εκτέλεση: Το DP_{11} που είναι τύπου DP ενωμένο με: 1 μάρκα τύπου DP , 1 μάρκα τύπου G και 1 μάρκα τύπου $UvrD$.

Πριν την εκτέλεση: Το $UvrD$ ενωμένο με: 1 μάρκα τύπου DP και 1 μάρκα τύπου T .

Μετά στην εκτέλεση: Το $UvrD$ ενωμένο με: 1 μάρκα τύπου DP και 1 μάρκα τύπου T .

Επίσης, γίνεται ταυτόχρονη αλλαγή ιστορικού της μετάβασης t_{19} , της μετάβασης t_{10} και της μετάβασης t_{17} . Όπως φαίνεται το ιστορικό της t_{19} θα πάρει τον αριθμό [19], ενώ ταυτόχρονα διαγράφεται το ιστορικό της t_{10} με αριθμό [10] και το ιστορικό της t_{17} με αριθμό [17]. Αυτές οι αλλαγές που πραγματοποιούνται παρουσιάζονται στην Εικόνα 4.13.



Εικόνα 4.13: Ταυτόχρονη εκτέλεση t_{20} $\overline{t_5}$ $\overline{t_{18}}$

Εκτέλεση: t_{20} , $\overline{t_5}$ και $\overline{t_{18}}$ ταυτόχρονα.

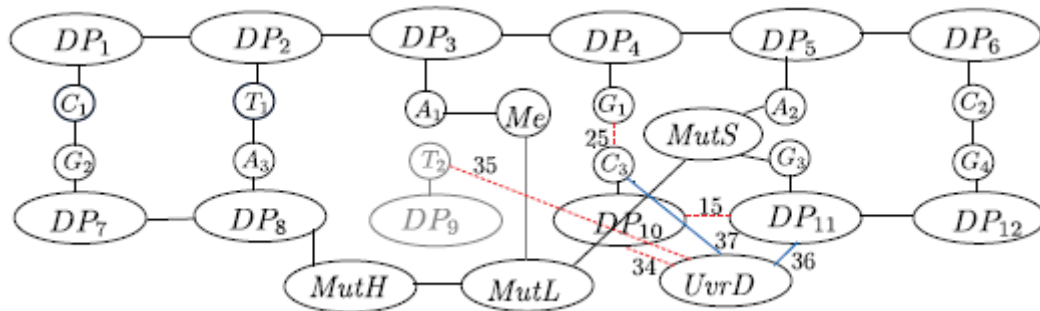
Θα εκτελεστούν ταυτόχρονα τρεις μεταβάσεις. Η t_{20} με εμπρόσθια εκτέλεση και οι t_5 και t_{18} με αντίστροφη εκτέλεση. Συγκεκριμένα, θα δημιουργηθεί ο δεσμός $UvrD-C_3$ με την εμπρόσθια εκτέλεση της t_{20} και ταυτόχρονα θα σπάσει ο δεσμός G_1-C_3 με την αντίστροφη εκτέλεση της t_5 και ο δεσμός $UvrD-T_2$ με την αντίστροφη εκτέλεση της t_{18} . Παρατηρούμε ότι οι μάρκες $UvrD$ και C_3 παρουσιάζονται και σε εμπρόσθια εκτέλεση και σε αντίστροφη εκτέλεση ταυτόχρονα. Πριν την εκτέλεση αυτών των μεταβάσεων η μάρκα C_3 ήταν ενωμένη με το DP_{10} που είναι τύπου DP και με το G_1 που είναι γουανίνη και είναι τύπου G , ενώ η μάρκα $UvrD$ ήταν ενωμένη με το DP_{11} που είναι τύπου DP και με το T_2 που είναι τύπου T . Μετά την εκτέλεση των μεταβάσεων, το C_3 είναι συνδεδεμένο με την DP_{10} (DP) και με την $UvrD$. Ενώ η $UvrD$ είναι συνδεδεμένη με το DP_{11} (DP) και με με το C_3 (C).

Πριν την εκτέλεση: Το C_3 που είναι τύπου C ενωμένο με: 1 μάρκα τύπου DP και 1 μάρκα τύπου G .

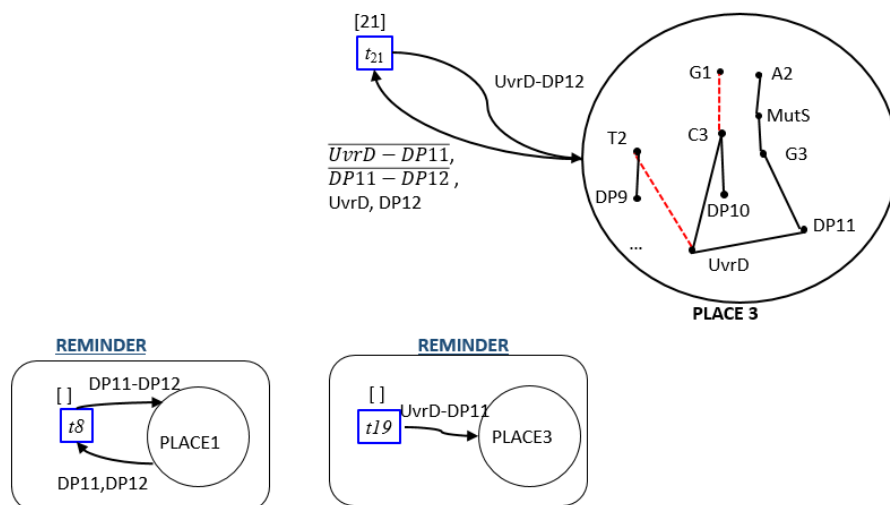
Μετά στην εκτέλεση: Το C_3 που είναι τύπου C ενωμένο με: 1 μάρκα τύπου DP και 1 μάρκα τύπου $UvrD$.

Πριν την εκτέλεση: Το $UvrD$ ενωμένο με: 1 μάρκα τύπου DP και 1 μάρκα τύπου T .

Επίσης, γίνεται ταυτόχρονη αλλαγή ιστορικού της μετάβασης t_{20} , της μετάβασης t_{18} και της μετάβασης t_5 . Όπως φαίνεται το ιστορικό της t_{20} θα πάρει τον αριθμό [20], ενώ ταυτόχρονα διαγράφεται το ιστορικό της t_5 με αριθμό [5] και το ιστορικό της t_{18} με αριθμό [18]. Αυτές οι αλλαγές που πραγματοποιούνται παρουσιάζονται στην Εικόνα 4.15.



Η Εικόνα 4.14 απεικονίζει την καινούρια κατάσταση που θα έχει το DNA μέχρι την ταυτόχρονη εκτέλεση t_{20} , $\overline{t_5}$ $\overline{t_{18}}$. Με μπλε είναι οι δεσμοί που δημιουργήθηκαν και με κόκκινο οι δεσμοί που έσπασαν. Ο δεσμός T_2 -DP₉ δεν είναι πλέον συνδεδεμένος στο DNA.



39

Εκτέλεση: t_{21} , $\overline{t_{19}}$ και $\overline{t_8}$ ταυτόχρονα.

Θα εκτελεστούν ταυτόχρονα τρεις μεταβάσεις. Η t_{21} με εμπρόσθια εκτέλεση και οι t_8 και t_{19} με αντίστροφη εκτέλεση. Συγκεκριμένα, θα δημιουργηθεί ο δεσμός $UvrD-DP_{12}$ με την εμπρόσθια εκτέλεση της t_{21} και ταυτόχρονα θα σπάσει ο δεσμός $UvrD-DP_{11}$ με την αντίστροφη εκτέλεση της t_{19} και ο δεσμός $DP_{11}-DP_{12}$ με την αντίστροφη εκτέλεση της t_8 . Παρατηρούμε ότι οι μάρκες $UvrD$ και DP_{12} παρουσιάζονται και σε εμπρόσθια εκτέλεση και σε αντίστροφη εκτέλεση ταυτόχρονα. Πριν την εκτέλεση αυτών των μεταβάσεων η μάρκα DP_{12} ήταν ενωμένη με το DP_{11} , που είναι τύπου DP και με το G_4 που είναι γουανίνη και είναι τύπου G , ενώ η μάρκα $UvrD$ ήταν ενωμένη με το DP_{11} που είναι τύπου DP και με το C_3 που είναι τύπου C . Μετά την εκτέλεση των μεταβάσεων, το DP_{12} είναι συνδεδεμένο με την G_4 (G) και με την $UvrD$. Ενώ η $UvrD$ είναι συνδεδεμένη με το DP_{12} (DP) και με το C_3 (C).

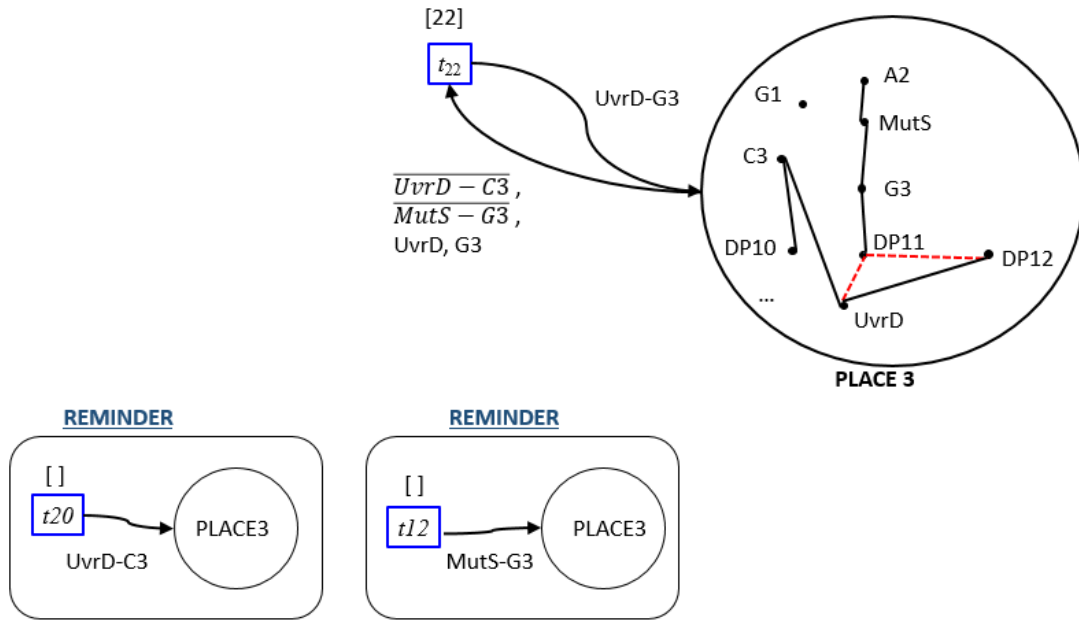
Πριν την εκτέλεση: Το DP_{12} που είναι τύπου DP ενωμένο με: 1 μάρκα τύπου DP και 1 μάρκα τύπου G .

Μετά στην εκτέλεση: Το DP_{12} που είναι τύπου DP ενωμένο με: 1 μάρκα τύπου G και 1 μάρκα τύπου $UvrD$.

Πριν την εκτέλεση: Το $UvrD$ ενωμένο με: 1 μάρκα τύπου DP και 1 μάρκα τύπου C .

Μετά στην εκτέλεση: Το $UvrD$ ενωμένο με: 1 μάρκα τύπου DP και 1 μάρκα τύπου C .

Επίσης, γίνεται ταυτόχρονη αλλαγή ιστορικού της μετάβασης t_{21} , της μετάβασης t_{19} και της μετάβασης t_8 . Όπως φαίνεται το ιστορικό της t_{21} θα πάρει τον αριθμό [21], ενώ ταυτόχρονα διαγράφεται το ιστορικό της t_{19} με αριθμό [19] και το ιστορικό της t_8 με αριθμό [8]. Αυτές οι αλλαγές που πραγματοποιούνται παρουσιάζονται στην Εικόνα 4.16.



Εικόνα 4.16: Ταυτόχρονη εκτέλεση t_{22} $\overline{t_{20}}$ $\overline{t_{12}}$

Εκτέλεση: t_{22} , $\overline{t_{12}}$ και $\overline{t_{20}}$ ταυτόχρονα.

Θα εκτελεστούν ταυτόχρονα τρεις μεταβάσεις. Η t_{22} με εμπρόσθια εκτέλεση και οι t_{20} και t_{12} με αντίστροφη εκτέλεση. Συγκεκριμένα, θα δημιουργηθεί ο δεσμός UvrD-G₃ με την εμπρόσθια εκτέλεση της t_{22} και ταυτόχρονα θα σπάσει ο δεσμός MutS-G₃ με την αντίστροφη εκτέλεση της t_{12} και ο δεσμός UvrD-C₃ με την αντίστροφη εκτέλεση της t_{20} . Παρατηρούμε ότι οι μάρκες UvrD και G₃ παρουσιάζονται και σε εμπρόσθια εκτέλεση και σε αντίστροφη εκτέλεση ταυτόχρονα. Πριν την εκτέλεση αυτών των μεταβάσεων η μάρκα G₃ ήταν ενωμένη με το DP₁₁ που είναι τύπου DP και με την MutS που είναι τύπου πρωτεΐνης, ενώ η μάρκα UvrD ήταν ενωμένη με το DP₁₂ που είναι τύπου DP και με το C₃ που είναι τύπου C. Μετά την εκτέλεση των μεταβάσεων, το G₃ είναι συνδεδεμένο με την DP₁₁ (DP) και με την UvrD. Ενώ η UvrD είναι συνδεδεμένη με το DP₁₂ (DP) και με το G₃ (G). Αυτές οι αλλαγές που πραγματοποιούνται παρουσιάζονται στην Εικόνα 4.18.

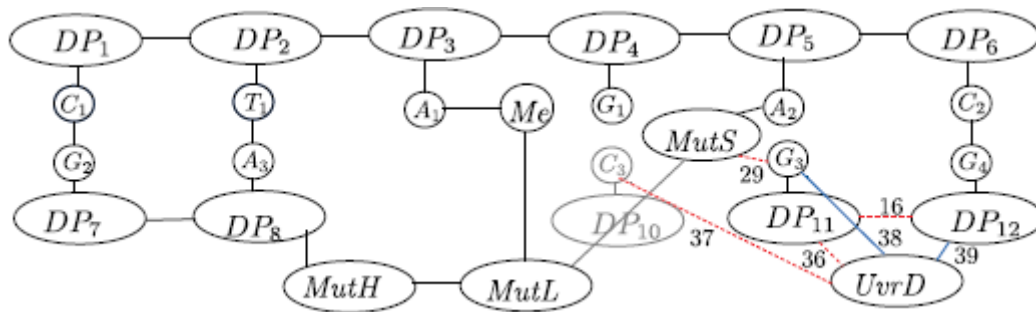
Πριν την εκτέλεση: Το G₃ που είναι τύπου G ενωμένο με: 1 μάρκα τύπου DP και 1 μάρκα τύπου πρωτεΐνη.

Μετά στην εκτέλεση: Το G₃ που είναι τύπου G ενωμένο με: 1 μάρκα τύπου DP και 1 μάρκα τύπου UvrD.

Πριν την εκτέλεση: Το UvrD ενωμένο με: 1 μάρκα τύπου DP και 1 μάρκα τύπου C.

Μετά στην εκτέλεση: Το UvrD ενωμένο με: 1 μάρκα τύπου DP και 1 μάρκα τύπου G.

Επίσης, γίνεται ταυτόχρονη αλλαγή ιστορικού της μετάβασης t_{22} , της μετάβασης t_{12} και της μετάβασης t_{20} . Όπως φαίνεται το ιστορικό της t_{22} θα πάρει τον αριθμό [22], ενώ ταυτόχρονα διαγράφεται το ιστορικό της t_{12} με αριθμό [12] και το ιστορικό της t_{20} με αριθμό [20].



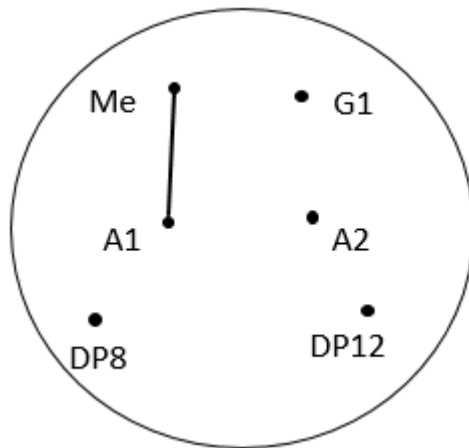
Εικόνα 4.17: Αναπαράσταση DNA μέχρι t_{22} [7]

Η Εικόνα 4.17 απεικονίζει την καινούρια κατάσταση που θα έχει το DNA μέχρι την ταυτόχρονη εκτέλεση t_{22} , $\overline{t_{20}}$ $\overline{t_{12}}$. Με μπλε είναι οι δεσμοί που δημιουργήθηκαν και με κόκκινο οι δεσμοί που έσπασαν. Ο δεσμός C_3 - DP_{10} δεν είναι πλέον συνδεδεμένος στο dna. Πλέον η UvrD συνδέθηκε με την μάρκα που δημιουργεί ασυμφωνία του DNA.



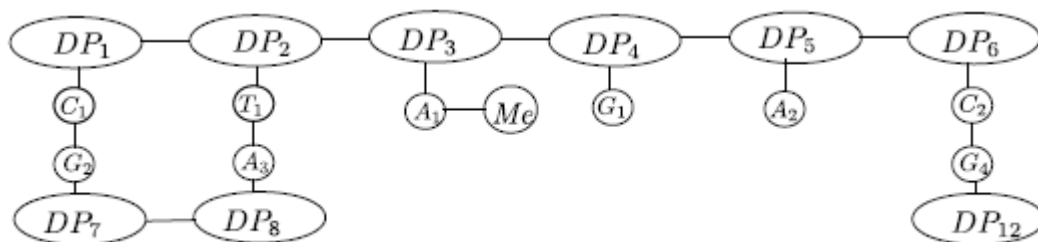
Εικόνα 4.18: Σπάσιμο δεσμών που περιέχουν πρωτείνες ή UvrD

Ακολούθως σπάζουν κάποιοι δεσμοί. Συγκεκριμένα, θα σπάσουν όλοι οι δεσμοί που περιέχουν έστω και μια μάρκα πρωτεΐνη, αφού πλέον δεν χρειάζονται οι πρωτεΐνες. Οι δεσμοί που σπάζουν, παρουσιάζονται στην Εικόνα 4.18, στη δεξιά μεριά.



Εικόνα 4.19: Τελικό αποτέλεσμα επισκευής στο RPN

Στην Εικόνα 4.19 είναι το αποτέλεσμα της επισκευής DNA με την χρήση των Αναστρέψιμων Δικτύων Πέτρι και παρουσιάζονται μόνο οι μάρκες που συμμετείχαν στην διαδικασία.



Εικόνα 4.20: Τελικό αποτέλεσμα επισκευής στο DNA [7]

Η Εικόνα 4.20 παρουσιάζει το αποτέλεσμά της επισκευής DNA. Εδώ παρουσιάζονται όλα τα στοιχεία του DNA, ακόμη και αν δεν συμμετείχαν στην διαδικασία επισκευής. Συγκεκριμένα, δεν εμφανίζεται πλέον η αναντιστοιχία, αφού αφαιρέθηκε από το DNA το G_3 που προκαλούσε την αναντιστοιχία.

4.3 Συνδεσιμότητα

Όπως προαναφέρθηκε στο υποκεφάλαιο 4.2.1 κάθε τύπος μάρκας δεν μπορεί να συνδεθεί με οποιοδήποτε αριθμό και τύπο μαρκών, γι'αυτό και ορίστηκαν τα connection types. Πιο κάτω θα παρουσιαστεί ο τρόπος με τον οποίο ορίστηκαν

4.3.1 Συνδεσιμότητα μαρκών τύπου A

Η μάρκα A1 αρχικά ήταν ενωμένη με μια μάρκα DP, μια μάρκα τύπου T και μια μάρκα Me. Στην συνέχεια ήταν με μια μάρκα DP και μια μάρκα Me. $\{DP, T, Me\} \rightarrow \{DP, Me\}$

Η μάρκα A2 αρχικά ήταν ενωμένη με ένα DP ,στην συνέχεια με μια μάρκα DP και μια πρωτεΐνη και τέλος μόνο με ένα DP $\{DP\} \rightarrow \{DP, πρωτεΐνη\} \rightarrow \{DP\}$

Η μάρκα A3 ήταν ενωμένη με ένα DP και μια μάρκα τύπου T σε όλη την διάρκεια. $\{DP, T\}$.

Αρα τα connection types των μαρκών τύπου A είναι :

$\{\{DP\}, \{DP, T\}, \{DP, πρωτεΐνη\}, \{DP, Me, T\}, \{DP, Me\}\}$

Όπως φαίνεται μια μάρκα τύπου A είναι συνδεδεμένη συνεχώς μια μάρκα τύπου DP. Επίσης αξίζει να σημειωθεί ότι από τις βάσεις μπορεί να ενωθεί μόνο με μάρκα τύπου T.

4.3.2 Συνδεσιμότητα μαρκών τύπου C

Οι μάρκες C1 και C2 ήταν ενωμένες με μια μάρκα DP και μια μάρκα τύπου G σε όλη την διαδικασία $\{DP, G\}$

Η μάρκα C3 αρχικά ήταν ενωμένη με ένα DP και μια μάρκα τύπου G ,στην συνέχεια με μια μάρκα DP και μια πρωτεΐνη και τέλος μόνο με ένα DP. $\{DP, G\} \rightarrow \{DP, UvrD\} \rightarrow \{DP\}$.

Αρα τα connection types των μαρκών τύπου C είναι :

$\{\{DP, G\}, \{DP\}, \{DP, πρωτεΐνη\}\}$

Όπως φαίνεται μια μάρκα τύπου C είναι συνδεδεμένη συνεχώς μια μάρκα τύπου DP. Επίσης, από τις βάσεις μπορεί να ενωθεί μόνο με μάρκα τύπου G. Επίσης αξίζει να σημειωθεί ότι δεν μπορεί να είναι την ίδια στιγμή συνδεδεμένη και με μάρκα τύπου G

και με μάρκα τύπου UvrD. Αυτό είναι εμφανές κατά την διάρκεια της όλης διαδικασίας , διότι ενώ ήταν συνδεδεμένη με 1 DP και 1 G, όταν έφτανε η στιγμή να ενωθεί με UvrD, έσπαζε ο δεσμός με την μάρκα τύπου G για να συνδεθεί με την UvrD.

4.3.3 Συνδεσιμότητα μαρκών τύπου G

Οι μάρκες G2 και G4 ήταν ενωμένες με μια μάρκα DP και μια μάρκα τύπου C σε όλη την διαδικασία. **{DP, C}**

Η μάρκα G1 αρχικά ήταν ενωμένη με ένα DP και μια μάρκα τύπου C και στην συνέχεια με μια μάρκα DP. **{DP, C}→{DP}**

Η μάρκα G3 αρχικά ήταν ενωμένη με ένα DP στην συνέχεια με μια μάρκα DP και μια μάρκα πρωτεϊνης και τέλος με μια μάρκα DP και μια UvrD. **{DP}→{DP, Πρωτεϊνη}→{DP,UvrD}**

Άρα τα connection types των μαρκών τύπου G είναι :

{DP, C}, {DP}, {DP, πρωτεΐνη},{DP,UvrD}

Όπως φαίνεται μια μάρκα τύπου G είναι συνδεδεμένη συνεχώς μια μάρκα τύπου DP. Επίσης, από τις βάσεις μπορεί να ενωθεί μόνο με μάρκα τύπου C . Επίσης αξίζει να σημειωθεί ότι δεν μπορεί να είναι την ίδια στιγμή συνδεδεμένη και με μάρκα τύπου C και με μάρκα τύπου UvrD. Αυτό είναι εμφανές κατά την διάρκεια της όλης διαδικασίας , διότι ενώ ήταν συνδεδεμένη με 1 DP και 1 C, όταν έφτανε η στιγμή να ενωθεί με UvrD, έσπαζε ο δεσμός με την μάρκα τύπου C για να συνδεθεί με την UvrD.

4.3.4 Συνδεσιμότητα μαρκών τύπου T

Η μάρκα T1 ήταν ενωμένη με μια μάρκα DP και μια μάρκα τύπου A σε όλη την διαδικασία **{DP, A}**.

Η μάρκα T2 αρχικά ήταν ενωμένη με ένα DP και μια μάρκα τύπου A στην συνέχεια με μια μάρκα DP και μια μάρκα UvrD και τέλος με μια μάρκα DP.

{DP,A}→{DP, UvrD}→{DP }.

Άρα τα connection types των μαρκών τύπου T είναι :

{DP, A}, {DP}, {DP, UvrD}

Όπως φαίνεται μια μάρκα τύπου T είναι συνδεδεμένη συνεχώς μια μάρκα τύπου DP. Επίσης, από τις βάσεις μπορεί να ενωθεί μόνο με μάρκα τύπου A . Επίσης αξίζει να σημειωθεί ότι δεν μπορεί να είναι την ίδια στιγμή συνδεδεμένη και με μάρκα τύπου A και με μάρκα τύπου UvrD. Αυτό είναι εμφανές κατά την διάρκεια της όλης διαδικασίας , διότι ενώ ήταν συνδεδεμένη με 1 DP και 1 A, όταν έφτανε η στιγμή να ενωθεί με UvrD, έσπαζε ο δεσμός με την μάρκα τύπου A για να συνδεθεί με την UvrD.

4.3.5 Συνδεσιμότητα DP

Οι μάρκες DP1, DP6 και DP7, σε όλη την διαδικασία ήταν συνδεδεμένες με 1 μάρκα τύπου DP και 1 βάση.

Συγκεκριμένα, οι μάρκες DP1 και DP6 η βάση που ήταν συνδεδεμένες ήταν τύπου C **{DP, C}**.

Ενώ η μάρκα DP7 η βάση που ήταν συνδεδεμένη ήταν τύπου G **{DP, G}**

Οι μάρκες DP2, DP3, DP4 και DP5, σε όλη την διαδικασία ήταν συνδεδεμένες με 2 μάρκες τύπου DP και 1 βάση.

Συγκεκριμένα, οι μάρκες DP3 και DP5 ήταν συνδεδεμένες με βάση τύπου A **{DP, DP, A}** .

Η μάρκα DP2 ήταν συνδεδεμένη με βάση τύπου C **{DP, DP, T}**.

Η μάρκα DP4 ήταν συνδεδεμένη με βάση τύπου G **{DP, DP, G}**.

Η μάρκα DP8, αρχικά ήταν συνδεδεμένη με 2 μάρκες τύπου DP και 1 βάση που είναι μάρκα τύπου A. Ακολούθως με 1 μάρκα τύπου DP ,1 μάρκα τύπου A και μια πρωτεΐνη και τέλος με 1 μάρκα τύπου DP και μια μάρκα τύπου A **{DP,DP, A}**, **{DP, A, πρωτεΐνη}**, **{DP, A}**.

Η μάρκα DP9, αρχικά ήταν συνδεδεμένη με 2 μάρκες τύπου DP και 1 βάση που είναι μάρκα τύπου T. Ακολούθως με 1 μάρκα τύπου DP και 1 μάρκα τύπου T και τέλος με 1 μάρκα τύπου T **{DP,DP, T}**, **{DP, T}**, **{T}**.

Η μάρκα DP10, αρχικά ήταν συνδεδεμένη με 2 μάρκες τύπου DP και 1 βάση που είναι μάρκα τύπου C. Ακολούθως με 1 μάρκα τύπου DP ,1 μάρκα τύπου C και με μάρκα τύπου UvrD και τέλος με μια μάρκα τύπου C **{DP,DP, C}, {DP, C, UvrD}, {C}**.

Η μάρκα DP11, αρχικά ήταν συνδεδεμένη με 2 μάρκες τύπου DP και 1 βάση που είναι μάρκα τύπου G. Ακολούθως με 1 μάρκα τύπου DP ,1 μάρκα τύπου G και με μάρκα τύπου UvrD και τέλος με μια μάρκα τύπου C **{DP,DP, G}, {DP, G, UvrD}, {G}**.

Η μάρκα DP12, αρχικά ήταν συνδεδεμένη με 1 μάρκα τύπου DP και 1 μάρκα τύπου G. Ακολούθως με 1 μάρκα τύπου G και με μάρκα τύπου UvrD και τέλος με 1 μάρκα τύπου G.

{DP, G}, {G, UvrD}, {G}.

Άρα τα connection types των DP είναι :

{{T}, {G}, {C}, {DP, A}, {DP, C}, {DP, G},{DP, T}, {DP, DP, A}, {DP, DP, T}, {DP, DP, G}, {DP,DP, C}, {DP, A, πρωτεΐνη}, {DP, C, UvrD}, {DP, G, UvrD}, {G, UvrD}}.

Όπως φαίνεται μια μάρκα τύπου DP είναι συνδεδεμένη συνεχώς με τουλάχιστον μια βάση ανεξαρτήτου τύπου. Επίσης αξίζει να σημειωθεί ότι δεν μπορεί να είναι την ίδια στιγμή συνδεδεμένη και με 2 μάρκες τύπου DP και με μάρκα τύπου UvrD. Αυτό είναι εμφανές κατά την διάρκεια της όλης διαδικασίας , διότι ενώ ήταν συνδεδεμένη με 2 DP και 1 βάση, όταν έφτανε η στιγμή να ενωθεί με UvrD, έσπαζε ο δεσμός με ένα DP για να συνδεθεί με το UvrD.

4.3.6 Συνδεσιμότητα UvrD

Η πρωτεΐνη UvrD είναι η πρωτεΐνη στην οποία παρατηρήθηκαν έντονα οι δεσμοί που είχε κατά την διάρκεια όλης της διαδικασίας. Αρχικά ενώθηκε με μια μάρκα τύπου DP και ακολούθως είχε για όλη την διάρκεια δεσμό με μια μάρκα DP και μια βάση ανεξάρτητα με τον τύπο της. Πολλές φορές, ενώ ήταν συνδεδεμένη με μια μάρκα DP και μια μάρκα βάσης, προσπαθούσε να ενωθεί με ένα DP ή μια βάση. Το αποτέλεσμα ήταν ενωθεί με το νέο DP ή την νέα βάση και έσπαζε τον αντίστοιχο δεσμό που είχε. Έτσι παρέμενε με αυτό το connection type.

Άρα τα connection types του UvrD είναι :

{{DP}, {DP, C}, {DP, G}, {DP, T}}

4.3.7 Συνδεσιμότητα Μεθυλίου (Me)

Η μάρκα τύπου Me αρχικά ήταν συνδεδεμένη με μια μάρκα τύπου A και ακολούθως με μια μάρκα τύπου A και μια μάρκα τύπου πρωτεΐνης.

Άρα τα connection types του Me είναι:

{{A}, {A, πρωτεΐνη}}.

4.3.8 Συνδεσιμότητα Πρωτεϊνών

Όσο αφορά την συνδεσιμότητα μαρκών τύπου πρωτεΐνης, δεν παρατηρήθηκε κάποιο κοινό μοτίβο στον τρόπο που συνδέονται αυτές οι μάρκες. Συγκεκριμένα:

Η μάρκα MutS αρχικά ήταν συνδεδεμένη με τις δύο 2 βάσεις που δημιουργούσαν την ασυμφωνία του dna και είναι τύπου A και G. Στην συνέχεια με μάρκα τύπου A , μάρκα τύπου G και 1 πρωτεΐνη **{{A, G}, {A, G, πρωτεΐνη}}.**

Η μάρκα MutL αρχικά ήταν με 1 πρωτεΐνη, ακολούθως με μια πρωτεΐνη μια 1 Me και τέλος με 2 πρωτεΐνες και 1 Me

{{ πρωτεΐνη }, {Me, πρωτεΐνη},{ πρωτεΐνη, πρωτεΐνη, Me}}.

Η μάρκα MutH αρχικά ήταν συνδεδεμένη με μια πρωτεΐνη και στην συνέχεια με μια πρωτεΐνη και 1 DP **{{ πρωτεΐνη }, {DP, πρωτεΐνη}}**

Γενικά, οι μάρκες τύπου πρωτεΐνης δεν συμμετείχαν σε μεταβάσεις που εκτελούνταν ταυτόχρονα και δεν χρειάστηκε να συνδεθεί με μια μάρκα και να σπάσει ο δεσμός με άλλη μάρκα.

Άρα τα connection types των πρωτεϊνών είναι :

{{A, G}, {A, G, πρωτεΐνη},{ πρωτεΐνη }, {Me, πρωτεΐνη},{ πρωτεΐνη, πρωτεΐνη, Me},{DP, πρωτεΐνη}}

Κεφάλαιο 5

Συμπεράσματα-Μελλοντική Εργασία

5.1 Συμπεράσματα

Η διπλωματική αυτή ασχολείται με την επέκταση των Αναστρέψιμων Δικτύων Πέτρι. Ουσιαστικά προστέθηκε η έννοια του ταυτοχρονισμού η οποία επιτρέπει να εκτελούνται περισσότερες από μια ενέργειες ταυτόχρονα, και ο περιορισμός στην συνδεσιμότητα μαρκών, όπου ανάλογα με τον τύπο της μάρκας (token type) έχει και τον ανάλογο τύπο συνδεσιμότητας (connection type). Αυτές οι έννοιες οι οποίες προστέθηκαν και επέκτειναν το απλό μοντέλο των Αναστρέψιμων Δικτύων Πέτρι, είναι πολύ σημαντικές διότι εφαρμόζονται σε διάφορα συστήματα. Το παράδειγμα στο οποίο εφαρμόστηκαν σε αυτή την διπλωματική, ήταν στην διαδικασία επισκευής της αναντιστοιχίας του DNA. Υπήρχαν αρκετές προκλήσεις που έπρεπε να αντιμετωπιστούν κατά τη διάρκεια της εργασίας αυτής. Αρχικά, έπρεπε να κατανοηθούν οι έννοιες των Αναστρέψιμων Δικτύων Πέτρι. Δόθηκε τεράστια έμφαση στην κατανόηση των διάφορων μαθηματικών ορισμών που τα απαρτίζουν και έγινε μεγάλη προσπάθεια για να προστεθούν και να αλλάξουν στοιχεία και λειτουργίες. Έπειτα, λόγω του ότι οι επεκτάσεις θα εφαρμόζονταν σε σύστημα της επιστήμης της βιολογίας, μελετήθηκε αρκετά η δομή του DNA και αρκετές βιολογικές έννοιες που σχετίζονται με αυτό. Επιπρόσθετα, μελετήθηκε ο Λογισμός Ομοιοπολικού Δεσμού, ο οποίος με τον αναστρέψιμο υπολογισμό που υποστηρίζει μοντελοποιούσε την διαδικασία επισκευής του DNA και παρατηρήθηκε πως στο συγκεκριμένο παράδειγμα, με την χρήση των απλών Αναστρέψιμων Δικτύων Πέτρι, απαιτούνταν περισσότερες ενέργειες σε σχέση με τον CCB, ενώ με την προσθήκη των επεκτάσεων πλέον απαιτούνται ίσος αριθμός ενεργειών με τον λογισμό.

5.2 Μελλοντική Εργασία

Πιθανή μελλοντική εργασία είναι η μελέτη και η κατανόηση του καινούριου μοντέλου που δημιουργήθηκε σε αυτή την διπλωματική και να γίνει έρευνα κατά πόσο μπορεί να προστεθούν περαιτέρω επεκτάσεις ώστε να γίνει βελτιστοποίηση και να χρειάζονται ακόμη λιγότερες ενέργειες για την επισκευή του DNA. Ακόμη θα μπορούσε γίνει

υλοποίηση εφαρμογής που να μπορεί να εφαρμοστούν τα Αναστρέψιμα Δίκτυα Πέτρι με αυτές τις επεκτάσεις, ούτως ώστε να μπορεί να γίνει μοντελοποίηση βιολογικών ή και άλλων συστημάτων με τη χρήση εργαλείων τα οποία επιπρόσθετα θα υποστηρίζουν την προσομοίωση ή και την ανάλυση συστημάτων. Γενικά το μοντέλο που αναπτύξαμε έχει αρκετά περιθώρια βελτίωσης. Μπορεί να γίνει πιο γενικό το μοντέλο και να μην ακολουθείτε ακριβώς αυτό το συγκεκριμένο παράδειγμα επισκευής, ώστε να μπορεί να εφαρμοστεί σε περισσότερα παραδείγματα επισκευής DNA. Ένας τρόπος είναι να προστεθούν μεταβλητές στο μοντέλο, όπως έχουν τα MRPNs. Επίσης, μπορούν να βελτιωθούν οι απαιτήσεις που προσθέσαμε για τις ενεργοποιημένες (enabled) μεταβάσεις ή ακόμη και να προστεθούν κι άλλες.

Βιβλιογραφία

- [1] A.Philippou and K.Psara, “Reversible Computation in Petri Nets”, RC 2018, LNCS 11106, pp. 84–101, 2018.
Available: https://doi.org/10.1007/978-3-319-99498-7_6
- [2] A.Philippou and K.Psara, “Reversible Computation in Nets with Bonds”. Journal of Logical and Algebraic Methods in Programming 2023
- [3] A.Philippou and K.Psara, “Token Multiplicity in Reversing Petri Nets Under the Individual Token Interpretation”. Submitted to EXPRESS/SOS 2022
- [4] A.Philippou and K.Psara, “A Collective Interpretation Semantics for Reversing Petri Nets”. Preprint submitted to Elsevier (2022)
- [5] S.Kuhn, “Simulation of Base Excision Repair in the Calculus of Covalent Bonding”. RC2018, LNCS 11106, pp. 123-129, 2018. Available: https://doi.org/10.1007/978-3-319-99498-7_8
- [6] S.Kuhn, I.Ulidowski, “Local reversibility in a Calculus of Covalent Bonding” Science of Computer Programming Volume 151, 1 January 2018, Pages 18-47
Available: <https://doi.org/10.1016/j.scico.2017.09.008>
- [7] S.Kuhn, I.Ulidowski, “Modelling of DNA mismatch repair with a reversible process calculus”. Theoretical Computer Science 925 (2022) 68–86 Available: <https://doi.org/10.1016/j.tcs.2022.06.009>