

■ **ΕΠΙΛΕΓΜΕΝΕΣ** ■

ΠΤΥΧΙΑΚΕΣ
ΚΑΙ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΕΣ
ΕΡΓΑΣΙΕΣ

[ΤΟΜΟΣ 8]

■ **ΕΠΙΛΕΓΜΕΝΕΣ** ■

ΠΤΥΧΙΑΚΕΣ ΚΑΙ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΕΣ ΕΡΓΑΣΙΕΣ

[ΤΟΜΟΣ 8]

Εκδίδεται μία φορά το χρόνο από το:

Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών
Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Πανεπιστημιούπολη, 15784 Αθήνα

Τηλ: 210 - 727 5190, **Φαξ:** 210 - 727 5333
email: library@di.uoa.gr, **url:** <http://www.di.uoa.gr/lib>

Επιμέλεια έκδοσης:

Επιτροπή Ερευνητικών και Αναπτυξιακών Δραστηριοτήτων

Μ. Γρηγοριάδου, Καθηγήτρια, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών
Θ. Θεοχάρης (υπεύθυνος έκδοσης), Καθηγητής, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών
Η. Μανωλάκος, Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών

Γραφιστική Επιμέλεια:

Λ. Χαλάτση, Γραφείο Προβολής, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών

ISSN 1792-8826

Copyright © 2011
Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών
Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΠΡΟΛΟΓΟΣ	1
ΠΤΥΧΙΑΚΕΣ ΕΡΓΑΣΙΕΣ	2
ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΜΗΧΑΝΗΣ ΓΡΑΦΙΚΩΝ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΣΧΕΔΙΑΣΗΣ ΜΕ ΥΣΤΕΡΗΣΗ	3
<i>Καλαμπόκης Φ. Κωνσταντίνος, Ταμπούρλος Σπ. Λάμπρος</i>	
ΔΙΑΔΙΚΤΥΑΚΗ ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΑΝΑΛΥΣΗΣ ΕΠΙΧΕΙΡΗΜΑΤΙΚΟΥ ΣΧΕΔΙΟΥ	16
<i>Κουρτελλής Ι. Αδωνης, Ξιναρής Γ. Χαράλαμπος</i>	
ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΕΝΟΣ ΠΑΙΓΝΙΟΘΕΩΡΗΤΙΚΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΓΙΑ ΣΥΝΕΡΓΑΤΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΑΣ	28
<i>Ντέμος Ι. Κωνσταντίνος</i>	
ΑΥΤΟΜΑΤΟΠΟΙΗΜΕΝΗ ΣΥΝΑΡΜΟΛΟΓΗΣΗ ΠΡΩΤΕΪΝΩΝ ΑΠΟ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΕΣ ΑΚΑΜΠΤΩΝ ΤΜΗΜΑΤΩΝ	41
<i>Χαριτούδη Κωνσταντινιά</i>	
ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΕΣ ΕΡΓΑΣΙΕΣ	53
ΕΚΠΟΜΠΗ ΑΚΤΙΝΩΝ ΣΕ ΤΕΤΡΑΕΔΡΙΚΑ ΠΛΕΓΜΑΤΑ ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΤΗ ΓΡΑΦΙΚΩΝ	54
<i>Δανελάκης Ε. Αντώνιος, Σαϊτή Ε. Ευδοκία</i>	
ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΙΑ ΠΡΩΤΕΟΜΙΚΩΝ ΕΙΚΟΝΩΝ	67
<i>Κωστοπούλου Α. Ειρήνη</i>	
ΤΡΙΓΩΝΟΠΟΙΗΣΕΙΣ ΣΗΜΕΙΟΣΥΝΟΛΩΝ, ΠΟΛΥΤΟΠΑ ΥΨΗΛΗΣ ΔΙΑΣΤΑΣΗΣ ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ	77
<i>Φυσικόπουλος Βησσαρίων</i>	

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Ο τόμος αυτός περιλαμβάνει περιλήψεις των καλύτερων διπλωματικών και πτυχιακών εργασιών που εκπονήθηκαν στο Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών του Εθνικού και Καποδιστριακού Πανεπιστημίου Αθηνών κατά το διάστημα 01/01/2010 - 31/12/2010. Πρόκειται για τον 8ο τόμο στη σειρά αυτή. Στόχος του θεσμού είναι η ενθάρρυνση της δημιουργικής προσπάθειας και η προβολή των πρωτότυπων εργασιών των φοιτητών του Τμήματος.

Από φέτος, η έκδοση αυτή γίνεται ψηφιακή και αποκτά νέο ISSN. Αναρτάται στην επίσημη ιστοσελίδα του Τμήματος και έτσι, εκτός από την μείωση της δαπάνης κατά την τρέχουσα περίοδο οικονομικής κρίσης, πιστεύουμε ότι θα αποκτήσει και μεγαλύτερη προσβασιμότητα. Για τον στόχο αυτό σημαντική ήταν η συμβολή της Λήδας Χαλάτση που επιμελήθηκε την ψηφιακή έκδοση και πέτυχε μια ελκυστική ποιότητα παρουσίασης, ενώ βελτίωσε και την ομοιογένεια των κειμένων.

Η συμμετοχή των φοιτητών ήταν και φέτος πολύ ικανοποιητική. Κατόπιν της διαδικασίας κρίσεως, έγιναν τελικά δεκτές για δημοσίευση **7** συνολικά πτυχιακές και διπλωματικές εργασίες. Η στάθμη των εργασιών που υποβλήθηκαν ήταν υψηλή και τα γνωστικά αντικείμενα που πραγματεύονται οι εργασίες καλύπτουν σε μεγάλο βαθμό ολόκληρη την περιοχή της Πληροφορικής και των Τηλεπικοινωνιών.

Θα θέλαμε να ευχαριστήσουμε τους φοιτητές για τον χρόνο που αφιέρωσαν για να παρουσιάσουν τη δουλειά τους στα πλαίσια αυτού του θεσμού και να τους συγχαρούμε για την ποιότητα των εργασιών τους. Ελπίζουμε η διαδικασία αυτή να προσέφερε και στους ίδιους μια εμπειρία που θα τους βοηθήσει στη συνέχεια των σπουδών τους ή της επαγγελματικής τους σταδιοδρομίας.

Η Επιτροπή Ερευνητικών και Αναπτυξιακών Δραστηριοτήτων

Μ. Γρηγοριάδου, Θ. Θεοχάρης (υπεύθυνος έκδοσης), Η. Μανωλάκος

Αθήνα, Μάιος 2011



■ ΠΤΥΧΙΑΚΕΣ ■
ΕΡΓΑΣΙΕΣ

Ανάπτυξη Μηχανής Γραφικών με τη Μέθοδο Σχεδίασης με Υστέρηση

Καλαμπόκης Φ. Κωνσταντίνος

conkal@msn.com

Ταμπούρλος Σπ. Λάμπρος

lamtab@hotmail.com

*Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών,
Πανεπιστημιούπολη, Ιλίσια, 15784, Αθήνα, Ελλάδα*

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Σε αυτήν την πτυχιακή εργασία, μελετούμε τη μέθοδο της Σχεδίασης με Υστέρηση (Deferred rendering) στον τομέα των Τρισδιάστατων Γραφικών δημιουργώντας μία μηχανή γραφικών που χρησιμοποιεί την ανωτέρω τεχνική, εκμεταλλευόμενη τις τελευταίες εφαρμογές της παράλληλης επεξεργασίας στις σύγχρονες κάρτες γραφικών. Ως προς την μέθοδο της σχεδίασης με υστέρηση, παρουσιάζουμε τη θεωρία πίσω από αυτήν, τις πιθανές χρήσεις της και τις εφαρμογές της στην ανταγωνιστική βιομηχανία των υπολογιστών σε τομείς που απαιτούν ποιοτική οπτική απεικόνιση τρισδιάστατων γραφικών με υψηλούς ρυθμούς ανανέωσης της οθόνης, όπως η δημιουργία τίτλων ηλεκτρονικών παιχνιδιών. Στηριζόμενοι στα οφέλη που προκύπτουν από αυτήν την τεχνική σχεδίασης, αναπτύσσουμε και παρουσιάζουμε έναν ικανό αριθμό από οπτικά εφέ που αφορούν τη σκίαση και το φωτισμό της τρισδιάστατης σκηνής, καθώς και οπτικά εφέ για τη ρεαλιστικότερη απεικόνισή του. Κάθε εφέ συνοδεύεται από θεωρητική θεμελίωση, παρουσίαση του αντίστοιχου αλγορίθμου και οργανώνεται με αντικειμενοστραφή τρόπο σε κλάσεις. Συνολικά ο τρισδιάστατος σχεδιαστής (Deferred Renderer) συνιστά μία αυτοδύναμη βιβλιοθήκη της οποίας η χρήση από τρίτους είναι εύκολη. Σημειώνουμε, ότι το σύνολο της μηχανής γραφικών μας, εκμεταλλεύεται την εφαρμογή της τεχνολογίας της μαζικά παράλληλης επεξεργασίας στις κάρτες γραφικών, μέσω ενός αριθμού από μικροεπεξεργαστές ή αλλιώς σκιαστές (shaders), που βρίσκονται στη Μονάδα Επεξεργασίας Γραφικών (Graphics Processing Unit) και δίνουν τη δυνατότητα ανάπτυξης εξειδικευμένων οπτικών εφέ παρακάμπτοντας τη δεδομένη ως τότε ροή στην επεξεργασία των γραφικών.

Λέξεις κλειδιά: Μηχανή γραφικών, Σχεδίαση με υστέρηση, Σκιαστές (shaders), Οπτικά εφέ σε τρισδιάστατο χώρο

ΕΠΙΒΛΕΠΟΝΤΕΣ:

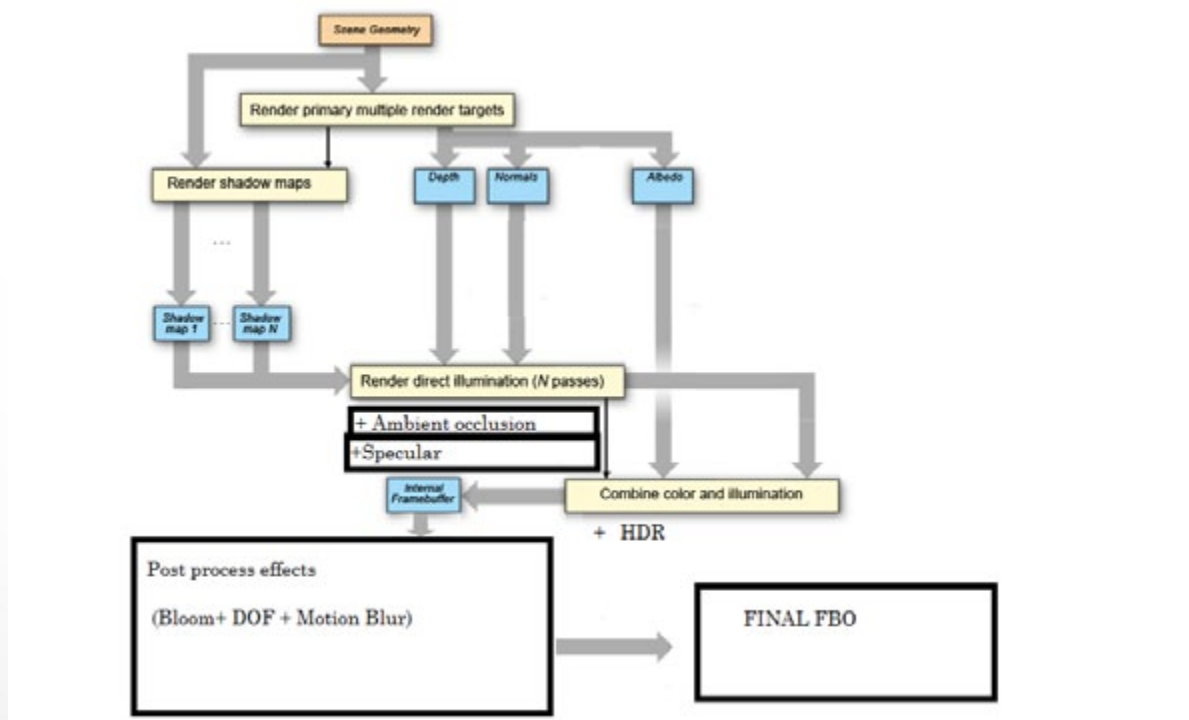
Θεοχάρης Θεοχάρης, Καθηγητής, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών - ΕΚΠΑ

Παπαϊωάννου Γεώργιος, Επίκουρος Καθηγητής, Τμήμα Πληροφορικής - Οικονομικό Πανεπιστήμιο Αθηνών

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η ραγδαία εξέλιξη της τεχνολογίας στις κάρτες γραφικών και η ύπαρξη προγραμματιζόμενων συστημάτων παραλληλίας καθιστά πλέον δυνατή την εφαρμογή τεχνικών σχεδιασμού που παλαιότερα θεωρούνταν ακατάλληλες για συστήματα πραγματικού χρόνου. Η σχεδίαση με υστέρηση, που ανήκει σε αυτή την κατηγορία, προτάθηκε το 1988 από τον Michael Deering. Η κεντρική ιδέα που προτάθηκε ήταν ένα σύστημα το οποίο, αφού σχεδιάσει τη γεωμετρία, μπορεί να εφαρμόσει πολλαπλές πηγές φωτός στο αποτέλεσμα. Την έρευνα του Deering ακολούθησε η έρευνα των Saito και Takahashi το 1990. Οι Saito και Takahashi πρότειναν ένα σύστημα σχεδιασμού βασισμένο στην αναγνώριση σχημάτων και προτύπων, αφού η αναγνώριση αυτή μπορεί εύκολα να πραγματοποιηθεί αν τονιστούν τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά κάθε αντικειμένου. Τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά των επιφανειών αποθηκεύονται σε περιοχές μνήμης καλούμενες «Γεωμετρική Μνήμη» (Geometry Buffers). Η γεωμετρική μνήμη χρησιμοποιείται ως ενδιάμεσο αποτέλεσμα και έτσι ο τεχνητός τονισμός των γεωμετρικών χαρακτηριστικών διαχωρίζεται από τη γεωμετρική σχεδίαση, τους μετασχηματισμούς και την απόκρυψη επιφανειών, αλλά και από το φωτισμό και τη σχεδίαση υφής, και πραγματοποιείται αργότερα (post-process). Ακόμη μια έρευνα σχετική με τη σχεδίαση με υστέρηση πραγματοποιήθηκε το 1991 από τον Ellsworth, η οποία εξετάζει τη χρησιμοποίηση παράλληλων αρχιτεκτονικών και αλγορίθμων για σχεδίαση υψηλής ποιότητας εικόνων σε πραγματικό χρόνο.

Η αρχιτεκτονική της σχεδίασης με υστέρηση αποτελείται από τέσσερα στάδια. Τη σχεδίαση της γεωμετρίας, τον υπολογισμό και τη σχεδίαση του φωτός, την εφαρμογή των εφέ και το τελικό στάδιο σχεδίασης. Κατά το πρώτο στάδιο υπολογίζονται και αποθηκεύονται ξεχωριστά το βάθος και το χρώμα της γεωμετρίας.



Κάθε στάδιο αξιοποιεί τη σωλήνωση του υλικού μέσω προγραμμάτων vertex που εκτελούνται για κάθε διάνυσμα και fragment που εκτελούνται για κάθε σημείο. Επίσης η πρόσβαση κάθε σταδίου στο αποτέλεσμα που παρήγαγε κάποιο προηγούμενο γίνεται μέσω κοινής μνήμης που βρίσκεται στην κάρτα γραφικών. Το κάθε προϊόν τελικά βρίσκεται σε μνήμη υφής προσπελάσιμη από κάθε άλλη διαδικασία της αρχιτεκτονικής. Συγκριτικά με την κατεξοχήν αρχιτεκτονική σχεδίασης, την απ' ευθείας σχεδίαση, η σχεδίαση με υστέρηση υπερέχει σε κάποιους τομείς, ενώ σε άλλους μειονεκτεί. Συγκεκριμένα είναι εύκολο να ενσωματωθούν πολλοί τύποι φωτεινών πηγών, ενώ δεν υπάρχει όριο στον αριθμό των φωτεινών πηγών, όπως συμβαίνει στην απευθείας σχεδίαση. Επιπρόσθετα, είναι εύκολος ο χειρισμός και η παραμετροποίηση της κάθε φωτεινής πηγής ξεχωριστά. Με τον τρόπο αυτό, είναι εφικτός ο χειρισμός ενός περισσότερο δυναμικού φωτισμού. Επίσης, τα χαρακτηριστικά της γεωμετρίας, όπως τα κανονικά διανύσματα και το βάθος, υπολογίζονται μόνο μια φορά και αυτό ευνοεί την εφαρμογή των εφέ που τα χρησιμοποιούν μειώνοντας το υπολογιστικό κόστος. Άλλωστε η πολυπλοκότητα της γεωμετρίας δεν αποτελεί σημαντικό παράγοντα, αφού σχεδιάζεται μόνο μια φορά σε ένα πέρασμα. Η αρχιτεκτονική υστερεί κυρίως στην εφαρμογή αλγορίθμων που αποσκοπούν στην εξομάλυνση επιφανειών, σε επίπεδο υλικού και στις απαιτήσεις της σε μνήμη. Τέλος καθιστά δύσκολη την εφαρμογή διαφάνειας σε αντικείμενα, καθώς και τη χρήση ποικιλίας υλικών.

2. ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗ ΠΟΛΛΑΠΛΩΝ ΣΤΟΧΩΝ ΣΧΕΔΙΑΣΗΣ

Οι πολλαπλοί στόχοι σχεδίασης αποτελούν τη ραχοκοκαλιά ενός συστήματος σχεδίασης με υστέρηση. Κατά τη διάρκεια αυτού του σταδίου προεπεξεργασίας της σκηνής, ο σκιαστής (shader) αναλαμβάνει να αποθηκεύσει σε διαφορετικές μνήμες σχεδίασης τα καίρια στοιχεία της σκηνής όπως:

το χρώμα,



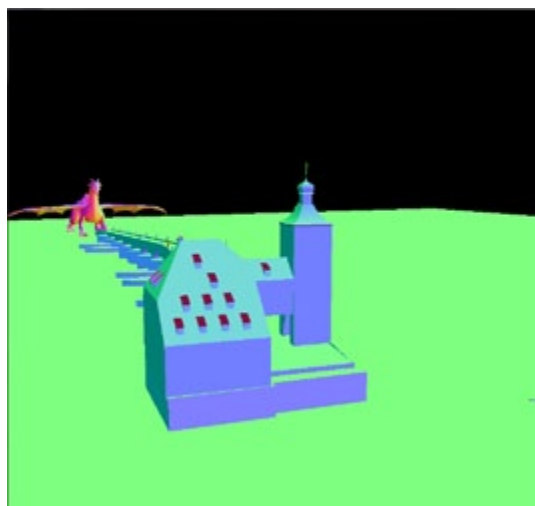
Εικόνα χρώματος

το βάθος,



Εικόνα βάθους

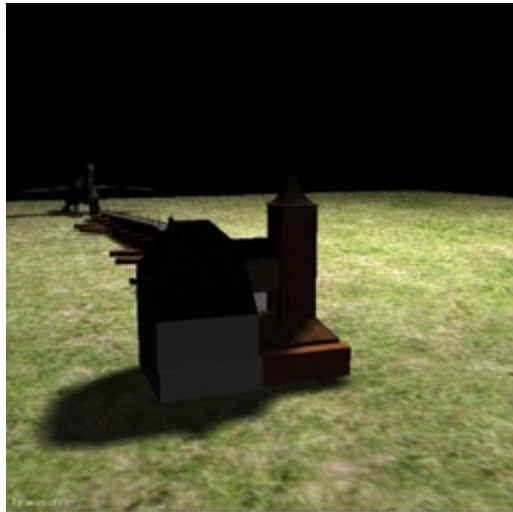
και το κανονικό διάνυσμα



Εικόνα κανονικών διανυσμάτων

για κάθε pixel του καρτέ. Ο στόχος αυτής της διαδικασίας είναι η αποφυγή επαναυπολογισμού στοιχείων της εικόνας, που χρησιμοποιούνται συχνά στα στάδια της δημιουργίας του φωτισμού και των ειδικών οπτικών εφέ (post process effects). Με αυτόν τον τρόπο, το υπολογιστικό κόστος που προστίθεται στο στάδιο προεπεξεργασίας συνεπικουρεί στην περαιτέρω εξοικονόμηση μεγαλύτερου κόστους από τα επόμενα στάδια της σχεδίασης. Στη συνέχεια γίνεται η σύνδεση των στόχων σχεδίασης με τις μονάδες υψής που παρέχει η OpenGL και το πέρασμά τους ως ορίσματα στο πρόγραμμα shader, που συνθέτει την τελική εικόνα. Ως εικόνα φωτισμού έχουμε εκείνη που προέκυψε από τη διαδικασία Υψηλού Δυναμικού Εύρους. Το βάθος και τα διανύσματα δεν είναι απαραίτητα σε αυτό το στάδιο και δεν δίνονται ως όρισμα. Η τελική εικόνα προκύπτει ως το γινόμενο του χρώματος με το φωτισμό. Ο φωτισμός για κάθε σημείο υπολογίζεται από το αρχείο υψής που περιέχει το φωτισμό και το αρχείο που περιέχει τις

υψηλές συχνότητες, όπως υπολογίστηκαν από τα στάδια του υψηλού δυναμικού εύρους.



Τελικό αποτέλεσμα

3. ΚΑΤΑΣΚΕΥΗ ΣΚΙΩΝ

Σημαντικό ρόλο στην πιστότητα της αναπαράστασης του πραγματικού κόσμου με γραφικά διαδραματίζει η κατασκευή σκιών. Οι σύγχρονες μηχανές γραφικών έχουν τη δυνατότητα σχεδίασης σκιών διαφόρων τύπων, ο καθένας από τους οποίους παρέχει αποτελέσματα διαφορετικής ποιότητας, αλλά και διαφορετικού υπολογιστικού κόστους. Οι υλοποιήσεις που έγιναν στα πλαίσια αυτής της πτυχιακής εργασίας και θα παρουσιαστούν στη συνέχεια του κεφαλαίου έχουν βασιστεί στην τεχνική σχεδίασης με τη χρήση χαρτών σκιών. Η τεχνική αυτή χρησιμοποιείται ευρέως, αφότου παρουσιάστηκε το 1978 από τον Lance Williams [Will1978] σε εφαρμογές πραγματικού χρόνου, όπως στις μηχανές γραφικών παιχνιδιών, αλλά και σε εφαρμογές μη πραγματικού χρόνου, όπως οι ταινίες κινουμένων σχεδίων με χαρακτηριστικό παράδειγμα την ταινία της Disney Toy Story.

Η μέθοδος σχεδίασης σκιών με τη χρήση χαρτών σκιών βασίζεται σε μια απλή αρχή. Κάθε σημείο που είναι ορατό κοιτώντας από την πηγή του φωτός προς τη σκηνή θα είναι και φωτισμένο, ενώ τα σημεία που δεν είναι ορατά βρίσκονται υπό σκιά. Η σχεδίαση της σκηνής ως προς την πηγή του φωτός είναι και το πρώτο βήμα του αλγορίθμου. Στη συνέχεια σχεδιάζεται η σκηνή κανονικά, πραγματοποιώντας όμως σύγκριση του βάθους κάθε σημείου ως προς το φως με την αντίστοιχη τιμή που βρίσκεται αποθηκευμένη στο χάρτη σκιάς. Τελικά θα σχεδιαστεί η σκηνή έχοντας τις σκιές που δημιουργούνται από το φως. Η τεχνική αυτή είναι υπολογιστικά «φθηνή» και γι' αυτό πολλές φορές προτιμάται από την τεχνική όγκων σκιών (shadow volumes) που παράγει ακριβέστερα αποτελέσματα. Στην περίπτωση των πανκατευθυντικών φώτων το πρώτο βήμα του αλγορίθμου επαναλαμβάνεται έξι φορές, μία φορά για κάθε κατεύθυνση γύρω από το φως, έτσι ώστε οι έξι χάρτες σκιάς που θα κατασκευαστούν να συνθέτουν ένα κύβο που

περιλαμβάνει όλο το χώρο που είναι ορατός από το φως. Για να γίνει αυτό μπορεί να χρησιμοποιηθεί η δομή `EXT_texture_cube_map` που παρέχεται έτοιμη από την OpenGL. Στην υλοποίηση που πραγματοποιήθηκε η κάθε σχεδίαση έγινε σε διαφορετική μνήμη υφής.



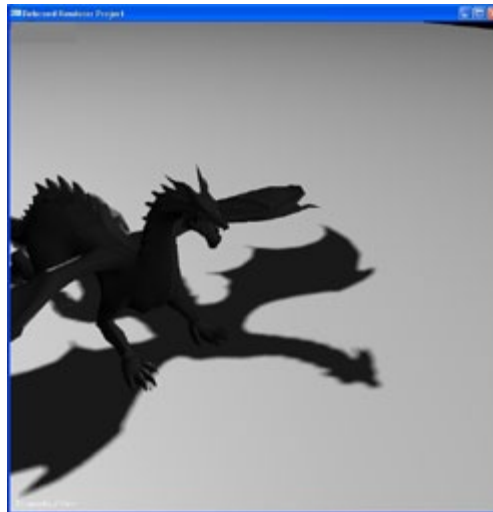
Σκληρή σκία

Η εφαρμογή του αλγορίθμου, ακριβώς όπως παρουσιάστηκε, παράγει σωστά αποτελέσματα, αλλά όχι αρκετά ρεαλιστικά, καθώς η τιμή που επιστρέφεται από το τεστ βάθους είναι 0 ή 1, δηλαδή ή τελείως φωτεινό ή τελείως σκοτεινό. Η σκιές αυτού του είδους καλούνται σκληρές σκιές (hard shadows). Η χρήση σκληρών σκιών δεν έχει το επιθυμητό αισθητικό αποτέλεσμα. Υπάρχουν τεχνικές κατασκευής σκιών που μπορούν να προσδώσουν περισσότερο ρεαλισμό και καλύτερο αισθητικά αποτέλεσμα. Οι τεχνικές αυτές βασίζονται στον αλγόριθμο που περιγράφηκε, αλλά παραλλάσσουν το δεύτερο βήμα και συγκεκριμένα το τεστ βάθους εφαρμόζοντας κάποιο φίλτρο. Οι τεχνικές που υλοποιήθηκαν και θα παρουσιαστούν στη συνέχεια είναι οι PCF (percentage closer filtering) και VSM (variance shadow maps).

3.1 Σκιές PCF

Η τεχνική αυτή υλοποιεί τον αλγόριθμο που παρουσιάστηκε στην προηγούμενη παράγραφο τροποποιώντας όμως το τεστ βάθους. Αντί για μια σύγκριση ανά σημείο πραγματοποιείται αριθμός συγκρίσεων με ένα πυρήνα σημείων και υπολογίζεται η μέση τιμή των αποτελεσμάτων των συγκρίσεων. Υπολογίζεται έτσι η ποσοστιαία ποσότητα των παραγόντων σκίασης που παρεμβάλλονται μεταξύ του σημείου και της φωτεινής πηγής με κάθε παράγοντα να συνεισφέρει ανάλογα με την απόστασή του από το φως. Η αρχή που ακολουθείται εφαρμόζοντας αυτό το φίλτρο είναι πως αν οι περιοχές που δειγματοληπτούνται είναι αρκετά μεγάλες και τα σημεία αρκετά κοντά, τότε επικαλύπτονται σε μεγάλο βαθμό. Ο συντελεστής σκίασης, όπως προκύπτει από αυτή

τη μέθοδο είναι ένας αριθμός μεταξύ του μηδενός και της μονάδας και έτσι το χρώμα του περιγράμματος των σκιών που σχεδιάζονται διαβαθμίζεται, κάτι που ανταποκρίνεται περισσότερο στην πραγματικότητα απ' ότι στις σκληρές σκιές. Στην αρχική παρουσίαση της μεθόδου προτάθηκε επιλογή του πυρήνα αυτού στοχαστικά, όμως στην υλοποίηση που παρουσιάζεται ο πυρήνας είναι συγκεκριμένος ανά σημείο. Η ακρίβεια των αποτελεσμάτων εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από το μέγεθος του πυρήνα.



Σκία PCF

3.2 Σκιές VSM

Η τεχνική variance shadow maps είναι υπολογιστικά «φθηνότερη» από την τεχνική PCF, ενώ τα αποτελέσματα που παράγει εξίσου ρεαλιστικά. Όπως και πριν ακολουθείται η κεντρική ιδέα του αλγορίθμου των σκληρών σκιών, αλλά απαιτεί εφαρμογή γκαουσιανού φίλτρου στο χάρτη σκιάς που κατασκευάζεται, ενώ το δεύτερο βήμα τροποποιείται. Ο αρχικός αλγόριθμος απαιτεί επιπλέον την αποθήκευση των τιμών του βάθους στο τετράγωνο, αλλά το βήμα αυτό πραγματοποιήθηκε ανά σημείο στους shaders.



Σκία VSM

4. ΠΑΡΕΜΠΟΔΙΣΗ ΔΙΑΧΥΤΟΥ ΦΩΤΙΣΜΟΥ ΣΤΟ ΧΩΡΟ ΤΗΣ ΣΚΗΝΗΣ

Στα περισσότερα τοπικά μοντέλα φωτισμού η συνιστώσα του έμμεσου φωτισμού είναι μια σταθερά. Η συνιστώσα αυτή όμως αποτελεί την ακτινοβολία που εκπέμπεται από κάθε επιφάνεια προς όλες τις υπόλοιπες και εφόσον κάθε σκηνή περιέχει επιφάνειες που ανακλούν το φως, η χρήση μιας σταθεράς είναι «κακή» προσέγγιση. Το μοντέλο παρεμπόδισης διάχυτου φωτισμού που προτάθηκε από το Zhukon υπολογίζει το ποσοστό της ακτινοβολίας που εκπέμπεται από ένα σημείο και προσπίπτει σε μια μικρή επιφάνεια της σκηνής χωρίς να παρεμποδιστεί. Η μέθοδος είναι ανάλογη του υπολογισμού της προσβασιμότητας κάθε επιφάνειας από τις υπόλοιπες, όπως παρουσιάστηκε στην περιγραφή της μεθόδου φωτισμού radiosity. Ισοδύναμα ο συντελεστής σκίασης μιας επιφάνειας υπολογίζεται ως το ποσοστό ενός ημισφαιρίου πάνω από την επιφάνεια στο οποίο δεν επιτρέπεται η διέλευση ακτινοβολίας λόγω της παρεμβολής άλλων αντικειμένων. Με τον όρο συντελεστής σκίασης $w(p)$ έχει επικρατήσει η αναφορά στο φωτισμό του αντικειμένου και όχι στη σκιάσή του.

Ο υπολογισμός του συντελεστή σκίασης $w(p)$ μπορεί να γίνει μια φορά για μια σκηνή και να αποθηκευτεί ως πληροφορία σχετικά με το χρώμα. Στη συνέχεια πολλαπλασιάζοντας με σταθερή τιμή έμμεσου φωτισμού παρέχεται αποτέλεσμα πιο ακριβές από τα συνήθη μοντέλα φωτισμού. Το σημαντικότερο πλεονέκτημα της μεθόδου είναι πως το αποτέλεσμα δεν εξαρτάται από τη θέση του παρατηρητή. Ωστόσο δεν αποτελεί ακριβή αναπαράσταση της πραγματικότητας, καθώς η μέθοδος υπολογισμού του συντελεστή σκίασης θεωρεί τη σκίαση κάθε επιφάνειας ίδια προς κάθε κατεύθυνση. Η μέθοδος που παρουσιάστηκε, αν και παρέχει αρκετά ικανοποιητικά αποτελέσματα, δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε εφαρμογές πραγματικού χρόνου. Μια προσέγγιση της μεθόδου υπολογιστικά «φθηνότερη» είναι η «παρεμπόδισης διάχυτου φωτισμού στο χώρο της σκηνής». Η μέθοδος «παρεμπόδισης διάχυτου φωτισμού στο χώρο της σκηνής» ακολουθεί την κεντρική ιδέα της μεθόδου που περιγράφηκε, χωρίς όμως να την υλοποιεί επακριβώς. Τα κύριο χαρακτηριστικό της, που την καθιστά κατάλληλη για εφαρμογές πραγματικού χρόνου, είναι πως όλοι οι υπολογισμοί πραγματοποιούνται σε χώρο συντεταγμένων κάμερας, άρα ολοκληρώνονται ταχύτερα. Επίσης η μέθοδος απαιτεί γνώση του βάθους και των κανονικών διανυσμάτων που είναι γνωστά στην περίπτωση μας από το στάδιο MRT.

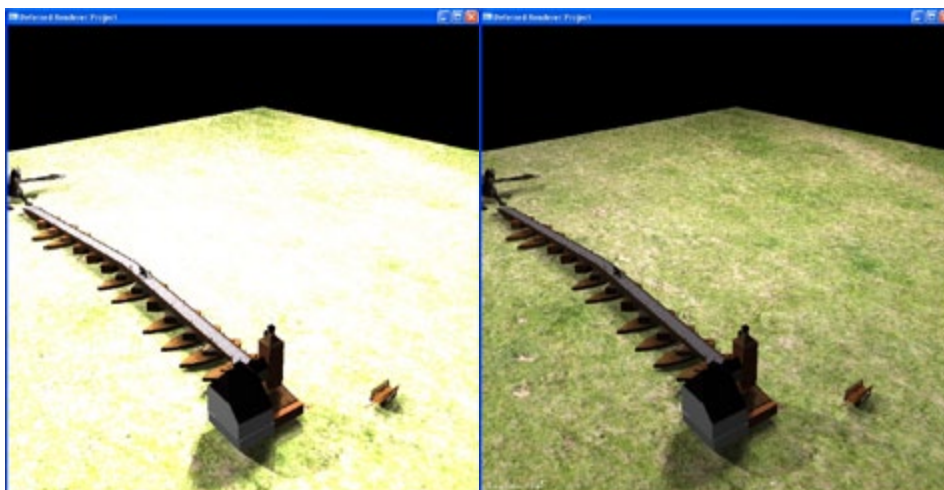


Εμμεση Σκίαση

5. ΥΨΗΛΟ ΔΥΝΑΜΙΚΟ ΕΥΡΟΣ

Όπως έχουμε δει μέχρι τώρα κάθε τιμή ενός αρχείου υψής περιέχει τέσσερις πραγματικούς αριθμούς των 8 δυφίων (bits) με τιμές στο $[0,1]$. Η ιδιότητα αυτή περιορίζει τις αντιθέσεις των εντάσεων του φωτισμού που μπορούν να υπάρξουν και δημιουργεί πρόβλημα στην περίπτωση που η ένταση του φωτός ξεπερνάει τη μονάδα. Αυτό συμβαίνει, γιατί το μοντέλο RGB (Red Green Blue) δεν καλύπτει το δυναμικό εύρος του ανθρώπινου ματιού αποκόποντας και περιορίζοντας στην μονάδα της τιμές φωτισμού που την ξεπερνούν. Η τεχνική που θα παρουσιαστεί δίνει λύση σε αυτό το πρόβλημα χρησιμοποιώντας αρχεία υψής πραγματικών αριθμών των 16 δυφίων για κάθε χρωματικό κανάλι στην μνήμη σχεδίασης του φωτισμού και ακολουθώντας μια σειρά από στάδια επεξεργασίας του αρχείου στο οποίο είναι αποθηκευμένες οι τιμές του φωτισμού. Τελικά θα προκύψει αρχείο φωτισμού με κανονικοποιημένες τιμές. Το υψηλό δυναμικό εύρος χρησιμοποιήθηκε για πρώτη φορά στα παιχνίδια Half-Life 2: Lost Coast και Oblivion.

Το πρώτο στάδιο της διαδικασίας πραγματοποιείται αμέσως μετά την κατασκευή του αρχείου φωτισμού και συνίσταται στην υποδειγματολήπτσή του. Το δεύτερο στάδιο αποσκοπεί στην εύρεση της μέσης και της μέγιστης τιμής του φωτισμού από το υποδειγματοληπτημένο αρχείο. Ακολουθώς εφαρμόζεται το φίλτρο brightpass στο οποίο αποθηκεύονται οι τιμές που ξεπερνούν κάποιο όριο. Το προϊόν της διαδικασίας αυτής θα χρησιμοποιηθεί στην τελική σύνθεση για την εφαρμογή εφέ αίγλης στα σημεία με πολύ υψηλές εντάσεις φωτός. Για το στάδιο αυτό απαιτείται αρχείο με τις τιμές φωτισμού κάθε σημείου και εκείνο με τη μέση και τη μέγιστη τιμή. Το τελικό στάδιο στο οποίο γίνεται και η ρύθμιση της κλίμακας των τιμών του φωτισμού είναι η κανονικοποίηση των τιμών (tone mapping). Όπως και προηγουμένως θα χρησιμοποιηθούν το αρχείο φωτισμού και το αρχείο με τη μέση και τη μέγιστη τιμή του.



Χωρίς HDR (αριστερά) και με HDR (δεξιά)

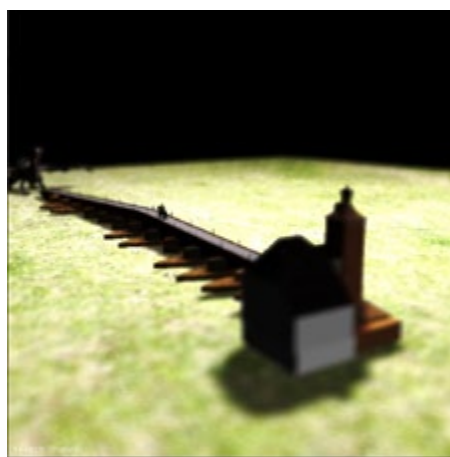
6. POST PROCESS EFFECTS

Η φωτορεαλιστική απεικόνιση στη σχεδίαση γραφικών υπολογιστών απαιτεί την πιστή προσομοίωση των νόμων που διέπουν την όραση και τη λειτουργία των φακών στον πραγματικό κόσμο. Σε περίπτωση μη προσομοίωσης των νόμων της οπτικής, η απεικόνιση μιας σκηνής ή ενός αντικειμένου ακόμη και αν υπάρχει πιστότητα στις λεπτομέρειες προφανώς δεν ανταποκρίνεται στην πραγματικότητα.

6.1 Βάθος Πεδίου

Ένα εφέ που συμβάλλει στη ρεαλιστική αναπαράσταση της πραγματικότητας προσομοιώνοντας την ιδιότητα εστίασης των φακών είναι το «Βάθος Πεδίου». Λόγω της ιδιότητας αυτής μόνο μια περιοχή της εικόνας που προβάλλεται με τη χρήση του φακού είναι πλήρως εστιασμένη, ενώ ο υπόλοιπος χώρος πριν και μετά από αυτή φαίνεται πιο θολός. Το βάθος εστίασης καθορίζεται από τις ιδιότητες του φακού που χρησιμοποιείται. Ένας ακόμα στόχος της χρήσης του εφέ είναι ο τονισμός αντικειμένων ή περιοχών σε μια σκηνή, ώστε να γίνουν ιδιαίτερα αντιληπτές από το θεατή.

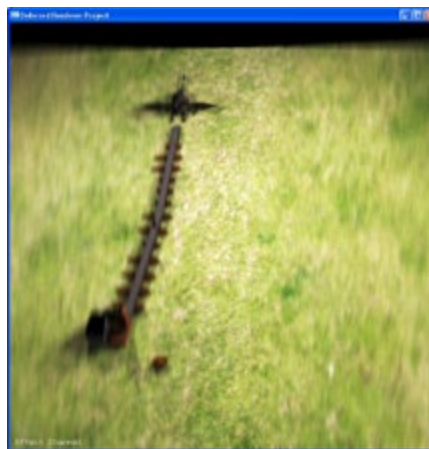
Ένας αλγόριθμος που αποτελεί μία αποδοτική λύση για εφαρμογές πραγματικού χρόνου είναι η υλοποίηση του εφέ μέσω δύο περασμάτων. Η πρόταση αυτή παρουσιάζει μια επέκταση στην post-processing μέθοδο των Potmesil και Chakravarty, που πρωτοεκδόθηκε στη δημοσίευση [Potmesil83]. Σύμφωνα με αυτήν την τεχνική, αρχικά σχεδιάζεται η σκηνή λαμβάνοντας ως έξοδο το χρώμα καθώς και τις λοιπές χρήσιμες πληροφορίες της εικόνας, που είναι απαραίτητες για την προσθήκη θολώματος στις εκτός εστίασης περιοχές. Στο δεύτερο βήμα, επεξεργαζόμαστε το αποτέλεσμα του πρώτου βήματος με ένα φίλτρο μεταβλητού μεγέθους πυρήνα για την προσομοίωση του Κύκλου της Σύγχυσης (circle of confusion). Συμπληρωματικά στο πρώτο βήμα έχει ήδη υπολογιστεί ένα παράγοντας θολώματος που ελέγχει την ακτίνα του Κύκλου στο τελικό στάδιο. Πιθανώς, για μία ικανοποιητικότερη υλοποίηση, να ληφθούν μέτρα βελτίωσης της εικόνας για την αποφυγή της διάχυσης χρώματος από σημεία εντός του χώρου εστίασης προς σημεία του φόντου που ανήκουν σε θολές περιοχές της εικόνας.



Εφαρμογή Depth Of Field

6.2 Θόλωμα Κίνησης

Κατά την παρατήρηση ενός κινούμενου αντικείμενου δημιουργείται η ψευδαίσθηση πως το αντικείμενο αφήνει ίχνος κατά τη φορά κίνησης τονίζοντας έτσι την κίνησή του. Το φαινόμενο αυτό εμφανίζεται και κατά την κίνηση του παρατηρητή. Οι λόγοι που έχουμε την εμφάνιση του ίχνους ποικίλλουν ανάλογα με το οπτικό σύστημα παρατήρησης. Η τεχνική, όπως υλοποιήθηκε και περιγράφεται παρακάτω, έχει ως αποτέλεσμα την εφαρμογή του εφέ όταν μετακινείται η κάμερα, δηλαδή όταν η κίνηση επηρεάζει ολόκληρη τη σκηνή και πραγματοποιείται σε δύο βήματα. Στο πρώτο βήμα γίνεται σχεδίαση της σκηνής σε μνήμη σχεδίασης, ενώ στο δεύτερο υπολογίζεται η ταχύτητα κίνησης και σε κάθε σημείο προστίθενται τιμές από γειτονικά σημεία, τα οποία επιλέγονται με βάση την ταχύτητα.



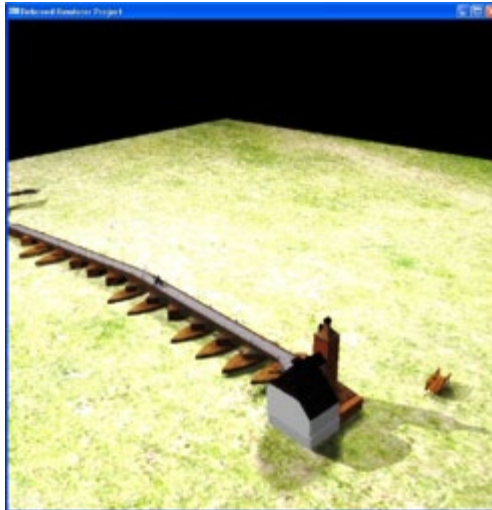
Εφαρμογή Motion Blur

6.3 Εφέ Αίγλης

Το εφέ αίγλης (glow effect, color bloom) χρησιμοποιείται στα γραφικά υπολογιστών για την πιστή αναπαράσταση αντικειμένων από τα οποία προέρχεται μέσω εκπομπής φωτός υψηλής έντασης. Το αποτέλεσμα του εφέ είναι η δημιουργία αχνού φωτεινού περιγράμματος γύρω από το αντικείμενο δίνοντας την εντύπωση διάχυσης φωτός από το αντικείμενο στο περιβάλλον του.

Η προτεινόμενη υλοποίηση πραγματοποιείται σε τέσσερα στάδια. Το πρώτο στάδιο, που είναι η σχεδίαση της σκηνής σε μνήμη σχεδίασης, στην υλοποίηση που παρουσιάζεται έχει ήδη πραγματοποιηθεί κατά τη σχεδίαση των MRT (προηγούμενο κεφάλαιο). Στο δεύτερο στάδιο γίνεται επιλογή των σημείων της οθόνης στα οποία εμφανίζεται η αίγλη και άρα θα εφαρμοστεί το εφέ. Η επιλογή αυτή γίνεται με την εφαρμογή ενός υψιπερατού φίλτρου στις εντάσεις του χρώματος της εικόνας. Έτσι παράγεται μία νέα εικόνα που περιέχει μόνο τα τμήματα της σκηνής που έχουν εντάσεις υψηλότερες από ένα προκαθορισμένο κατώφλι. Στην συνέχεια, η παραγόμενη εικόνα υποδειγματοληπτείται με σκοπό τη μείωση του υπολογιστικού κόστους του επόμενου σταδίου, το οποίο απαιτεί τουλάχιστον

9 αναγνώσεις από γειτονικά pixel για κάθε pixel της εικόνας, καθώς εφαρμόζεται χωρικό φίλτρο κανονικής κατανομής (Gaussian) στην υποδειγματοληπτημένη εικόνα. Το φίλτρο αυτό παράγει την αίσθηση ότι η εικόνα είναι ανεστίαστη μέσω της διάχυσης του χρώματος του κάθε pixel στα γειτονικά του και ουσιαστικά είναι αυτό που προκαλεί την επιθυμητή αίγλη. Στο τελικό στάδιο προσθέτουμε στην αρχική εικόνα το αποτέλεσμα του προηγούμενου βήματος, έτσι ώστε να ταιριάζουν οι αναλύσεις των εικόνων.



Εφαρμογή Bloom

ΑΝΑΦΟΡΕΣ

1. Θεοχάρης, Θ. & Μπεμ, Α. (1999). *Γραφικά ΑΡΧΕΣ & ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ*. Αθήνα: ΣΥΜΜΕΤΡΙΑ
2. Theoharis, T., Papaioannou, G., Platis, N & Patrikalakis, N.M. (2008). *Graphics & Visualization Principles and Algorithms*. Wellesley Massachusetts: AK Peters Ltd
3. Richard S. Wright, Jr., Benjamin Lipchak & Nicholas Haemel (2007). *OpenGL SuperBible 4thEd*. Boston: Addison Wesley
4. Cook & Torrance (1982). A Reflectance Model for Computer Graphics. *ACM Transactions on Graphics, volume 1, number 1, pages 7-24*
5. [Gour71] Gouraud, H. (1971). Continuous shading of curved surfaces. *IEEE Transactions on Computers, C-20(6):623-629*
6. Gouraud, H. (1971). Computer Display of Curved Surfaces. *Doctoral Thesis, University of Utah, USA*

7. Nakamae et al (1990). A lighting model aiming at drive simulators, *SIGGRAPH* 90.395-404.
8. Riguer, G., Tatarchuk, N., Isidoro, J. Real Time Depth Of Field Rendering. *ShaderX2* pages 529 - 559
9. William Donnelly & Andrew Lauritzen (2006). Variance Shadow Maps. In *Proceedings of the Symposium on Interactive 3D Graphics and Games*, pp. 161–165.
10. Zheng, Y., Kostler, H., Thurey, N. & Rude, U. (2006). Enhanced Motion Blur Calculation with Optical Flow. *Proceedings of Vision, Modeling and Visualization*
11. Josh Klint (2008). Deferred Rendering in Leadwerks Engine. *Leadwers Corporation*
12. Michal Valient (2007). Deferred Rendering in Killzone 2. *Guerilla Developer Conference*
13. Michal Valient. 3D Engines in Games Introduction
14. Drobot, M. (2008). Practical use of Screen Space Ambient Occlusion. *GCDC*
15. Greg, J., O'Rorke, J.(2004). Real Time Glow. *GPU Gems, 1*.
Retrieved from http://http.developer.nvidia.com/GPUGems/gpugems_ch21.html
16. Demers, J. (2007). Depth Of Field: A Survey of Techniques. *GPU Gems, 1*.
Retrieved from http://http.developer.nvidia.com/GPUGems/gpugems_ch23.html
17. Kozlov, S. (2004). Depth Perspective Shadow Maps. *GPU Gems, 1*.
Retrieved from http://http.developer.nvidia.com/GPUGems/gpugems_ch14.html
18. Rosado, G. (2007). Motion Blur as a Post-Processing Effect. *GPU Gems, 3*.
Retrieved from http://http.developer.nvidia.com/GPUGems3/gpugems3_ch27.html
19. Lauritzen, A. (2008). Summed-Area Variance Shadow Maps. *GPU Gems, 3*.
Retrieved from http://http.developer.nvidia.com/GPUGems3/gpugems3_ch08.html
20. Koonce, R. (2008). Deferred Shading in Tabula Rasa. *GPU Gems, 3*.
Retrieved from http://http.developer.nvidia.com/GPUGems3/gpugems3_ch19.html
21. [Will1978] Casting Curved Shadows on Curved Surfaces, Lance Williams (1978)
<http://en.scientificcommons.org/42594103>

Διαδικτυακή Εφαρμογή Ανάλυσης Επιχειρηματικού Σχεδίου

Κουρτελλής Ι. Άδωνης

std05188@di.uoa.gr

Ξιναρής Γ. Χαράλαμπος

std05193@di.uoa.gr

*Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών,
Πανεπιστημιούπολη, Ιλίσια, 15784, Αθήνα, Ελλάδα*

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Παρουσιάζουμε τη διαδικτυακή εφαρμογή «**Academic Business Planner**», που σκοπό έχει να ενσωματώσει υφιστάμενες μεθόδους και τεχνικές της Ακαδημαϊκής Κοινότητας για τη δημιουργία ενός Επιχειρηματικού Σχεδίου σε μια ενιαία πλατφόρμα. Χρησιμοποιούμε τις πιο σύγχρονες προγραμματιστικές τεχνικές και τεχνολογίες εφαρμογών διαδικτύου, με σκοπό τη διευκόλυνση στη συλλογή, τον υπολογισμό και την παρουσίαση των σημαντικότερων μεγεθών μιας μελλοντικής επιχείρησης.

Λέξεις κλειδιά: Στρατηγικός Επιχειρηματικός Σχεδιασμός, Διαδικτυακές Εφαρμογές, Microsoft .NET Framework, Καινοτομία & Επιχειρηματικότητα

ΕΠΙΒΛΕΠΟΝΤΕΣ:

Γεωργιάδης Παναγιώτης, Καθηγητής, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών - ΕΚΠΑ
Κακούρης Αλέκος, Εξωτερικός Συνεργάτης, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών - ΕΚΠΑ

Συνεισέφεραν επίσης οι:

Μαυρωτάς Γεώργιος, Λέκτορας, Τμήμα Χημικών - ΕΜΠ

Δαμίγος Δημήτριος, Λέκτορας, Τμήμα Μεταλλειολόγων Μηχανικών - ΕΜΠ

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η δημιουργία μιας νέας επιχείρησης εμπεριέχει πολλούς κινδύνους και απρόβλεπτες καταστάσεις, οι οποίες είναι χρήσιμο να προσομοιωθούν εκ των προτέρων, στα πλαίσια της διεξαγωγής ενδεδειγμένης ανάλυσης πολλών επιπέδων. Αυτή η ανάλυση γίνεται συνήθως στα πλαίσια του Στρατηγικού Επιχειρηματικού Σχεδιασμού της μελλοντικής επιχείρησης ^{2,3}.

Τα μεγέθη αυτά, δίνουν μια εικόνα της βιωσιμότητας της επιχείρησης με μέγιστο χρονικό ορίζοντα 5 ετών, καθιστώντας έτσι την εφαρμογή ιδανική για την υποστήριξη του Επιχειρηματικού Σχεδίου μιας επιχείρησης, σε περίπτωση αναζήτησης ξένων κεφαλαίων μέσω δανείου, Venture Capital Investment, κλπ ^{1,4}.

Σκοπός μας είναι η δημιουργία μιας διαδικτυακής πλατφόρμας, η οποία να συγκεντρώνει τα σημαντικότερα ευρήματα της Ακαδημαϊκής Κοινότητας, να προσφέρει ένα σύγχρονο τρόπο πρόσβασης, επεξεργασίας των δεδομένων και παρουσίας των πληροφοριών, με τρόπους που να είναι φιλικό προς την χρήση. Ασφαλώς, ο χρήστης δεν θα επιβαρύνεται με επιπλέον κόστος. Επιπλέον, η πλατφόρμα θα πρέπει να είναι σχεδιασμένη με τέτοιο τρόπο, ώστε να μπορεί να ενσωματωθεί στις ανάγκες μαθημάτων ακαδημαϊκού επιπέδου, με αντικείμενο την Καινοτομία και Επιχειρηματικότητα.

Κατά την τρέχουσα χρονική περίοδο, υπάρχουν δύο οδοί τις οποίες δύναται να ακολουθήσει κάποιος, προκειμένου να διεξάγει επιτυχώς μια λεπτομερή ανάλυση επιχειρηματικού σχεδιασμού:

α) Συμβουλευτικές υπηρεσίες με εξειδικευμένο προσωπικό

Μια αξιόπιστη μέθοδος, που προσφέρει συνήθως μελέτες υψηλής ποιότητας, κατάλληλα μορφοποιημένες στις εκάστοτε ανάγκες και ιδιομορφίες μιας επιχείρησης. Η μέθοδος αυτή περιλαμβάνει συνήθως εξαιρετικά ψηλό κόστος μισθοδοσίας, χρονοβόρες διαδικασίες και ανάγκη φυσικής παρουσίας των ενδιαφερομένων μερών, όπως επίσης και μειωμένα περιθώρια ευελιξίας σε τυχόν μελλοντικές τροποποιήσεις οι οποίες προοικονομούν επιπλέον έξοδα και καθυστερήσεις.

Εμπεριέχεται, ακόμη, το ρίσκο κλοπής πνευματικής ιδιοκτησίας, μιας και είναι αναπόφευκτη η ενημέρωση των εξωτερικών συμβούλων για τα στρατηγικά σχέδια της επιχείρησης.

β) Αυτοματοποιημένο Λογισμικό

Χρήση λογισμικού/εφαρμογής, το οποίο διατίθεται συνήθως σε μορφή γενικευμένου προτύπου, το οποίο να ικανοποιεί τις περισσότερες από τις απαιτήσεις ενός επιχειρηματικού σχεδίου. Εξειδικευμένες λύσεις παρέχονται μόνο από εφαρμογές οι οποίες σύμφωνα με πρόσφατες έρευνές μας, κοστίζουν μερικές δεκάδες χιλιάδες ευρώ (Ιούλιος 2010), ενώ πάντα εμπεριέχεται ο κίνδυνος ασαφειών, ελλιπούς πληροφόρησης ή και αδυναμίας παροχής των εξειδικευμένων υπηρεσιών που η επιχείρηση αναζητά. Το κόστος λογισμικού για λύσεις γενικής μορφής είναι

σημαντικά χαμηλότερο συγκρινόμενο με αυτό των συμβουλευτικών υπηρεσιών, ενώ αξίζει να τονίσουμε την ευελιξία και την ευκολία με την οποία μπορεί κάποιος να προβεί σε τροποποιήσεις ενός σχεδίου με νέα δεδομένα, σε ελάχιστο χρόνο και χωρίς επιπλέον κόστος.

Σημαντικό πλεονέκτημα της χρήσης σχετικού λογισμικού, αποτελεί η δυνατότητα προστασίας των καινοτόμων ιδεών που μπορεί να έχει ο ενδιαφερόμενος και τις οποίες να μην θέλει να μοιραστεί με τρίτους, διασφαλίζοντας έτσι το απόρρητο ή οποιαδήποτε απώλεια ευαίσθητων πληροφοριών.

Η έρευνα αγοράς την οποία διεξήγαμε καθ' όλη τη διάρκεια του έτους 2010, έδειξε σημαντικά κενά στις υπηρεσίες που παρέχονται, τα οποία θα μπορούσαν να καλυφθούν βελτιώνοντας έτσι την ποιότητα των παρεχόμενων υπηρεσιών.

Αξίζει να σημειωθεί ότι κατά τη διάρκεια της έρευνάς μας, δεν εντοπίσαμε εταιρείες που να προσφέρουν τις υπηρεσίες ή το λογισμικό τους προς χρήση μέσω διαδικτύου, καθιστώντας αδύνατη την πρόσβαση στα επιχειρηματικά σχέδια του ενδιαφερόμενου ανά πάσα στιγμή, από οποιοδήποτε σημείο στον κόσμο με πρόσβαση στο διαδίκτυο. Επιπλέον, κατά την αναζήτηση υπηρεσιών που να παρέχονται χωρίς χρέωση, εντοπίσαμε ελάχιστες εταιρείες που παρέχουν υπηρεσίες και προϊόντα αμφιβόλου ποιότητας και μειωμένης λειτουργικότητας.

Η έρευνά μας, εντόπισε ακόμη την μεγάλη απουσία χρήσιμων εργαλείων και μεθόδων, όπως για παράδειγμα τα **Monte Carlo simulations**, η χρήση **Διεθνών Λογιστικών Προτύπων** και οι **υπολογισμοί εξειδικευμένων αριθμοδεικτών**. Οι πλατφόρμες που παρείχαν τέτοιες υπηρεσίες ήταν ελάχιστες, ενώ παράλληλα η χρέωση ήταν εμφανώς αυξημένη σε σύγκριση με τον ανταγωνισμό.

Ανύπαρκτη ήταν επίσης η παρουσία εφαρμογών που να έχουν Ακαδημαϊκό προσανατολισμό, με εργαλεία διευκόλυνσης της εργασίας και επικοινωνίας μεταξύ ομάδων φοιτητών, δυνατότητα ανατροφοδότησης, σχολιασμού και αξιολόγησης κάθε σταδίου από τον επιβλέποντα, κλπ. Οι υλοποιήσεις που έχουμε αξιολογήσει δεν είχαν κανένα απολύτως χαρακτηριστικό διαδραστικότητας, καθιστώντας έτσι ουσιαστικά ανύπαρκτη την επικοινωνία επιβλέποντα και φοιτητών.

Στην παρούσα εργασία, αφού εντοπίσαμε τις αδυναμίες των υφιστάμενων λύσεων, προτείνουμε μια εναλλακτική μέθοδο, η οποία στόχος μας είναι να ενσωματώνει τα περισσότερα, αν όχι όλα, από τα θετικά χαρακτηριστικά των διαθέσιμων λύσεων.

2. ΑΡΙΘΜΟΔΕΙΚΤΕΣ

Η εφαρμογή χρησιμοποιεί στους υπολογισμούς της τους εξής αριθμοδείκτες (ratios) που εφαρμόζονται κατά κόρον στη ΧρηματοΟικονομική ανάλυση ^{5,6,7}:

α) Liquidity Ratios

i. Current Ratio

$$\frac{\text{Current Assets}}{\text{Current Liabilities}}$$

ii. Quick (Acid-Test) Ratio

$$\frac{\text{Current Assets} - (\text{Inventories} + \text{Prepayments})}{\text{Current Liabilities}}$$

iii. Cash Ratio

$$\frac{\text{Cash and Marketable Securities}}{\text{Current Liabilities}}$$

iv. Operation Cash Flow Ratio

$$\frac{\text{Operation Cash Flow}}{\text{Total Debts}}$$

β) Profitability Ratios

v. Gross Profit Margin

$$\frac{\text{Gross Profit}}{\text{Net Sales}}$$

vi. Profit Margin

$$\frac{\text{Net Profit}}{\text{Net Sales}}$$

vii. Return on Equity (DuPont)

$$\left(\frac{\text{Net Income}}{\text{Net Sales}} \right) \left(\frac{\text{Net Sales}}{\text{Average Assets}} \right) \left(\frac{\text{Average Assets}}{\text{Average Equity}} \right)$$

viii. Return on Investment

$$\frac{\text{Net Income}}{\text{Average Owners Equity}}$$

ix. Return on Capital

$$\frac{\text{EBIT}(1 - \text{Tax Rate})}{\text{Invested Capital}}$$

γ) Activity Ratios

x. Average Collection Period

$$\frac{\text{Accounts Receivable}}{\text{Annual Credit Sales} \div 365 \text{ Days}}$$

xi. Stock Turnover

$$\frac{\text{Cost of Goods Sold}}{\text{Average Inventory}}$$

xii. Receivables Turnover

$$\frac{\text{Net Credit Sales}}{\text{Average Net Receivables}}$$

3. MONTE CARLO SIMULATION

Η μέθοδος Monte Carlo αποτελεί μια κλάση υπολογιστικών αλγορίθμων, οι οποίοι μέσω μιας επαναληπτικής διαδικασίας με χρήση μεγάλου πλήθους (ψευδο)τυχαίων αριθμών ¹², μπορούν να προσομοιώσουν με στατιστική διασπορά διάφορες μελλοντικές καταστάσεις ενός συστήματος. Πολλοί κλάδοι της τεχνολογίας, των επιστημών, όπως επίσης και των χρηματο-οικονομικών, εφαρμόζουν τέτοια μοντέλα κατά τον υπολογισμό και διαχείριση του ρίσκου που αναλαμβάνουν μέσω μιας ποσοτικής ανάλυσης που συνήθως προηγείται της λήψης αποφάσεων ^{9,10,11}.

Στην περίπτωση μας, χρησιμοποιούμε μια παραλλαγή της μεθόδου που ανέπτυξε ο S. Paskov (Quasi Monte Carlo)⁸ για να αποφύγουμε το πρόβλημα των πολλαπλών διαστάσεων της λύσης της εξίσωσης:

$$\varphi^{\text{MC}}(f) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i),$$

όπου, x_i : (ψευδο)τυχαία επιλεγμένες τιμές για κάθε παραμετροποιημένη μεταβλητή που θέλουμε να προσομοιώσουμε, και
 n : συνολικό πλήθος επαναλήψεων (≥ 1000)

4. ΑΡΧΙΤΕΚΤΟΝΙΚΗ ΣΥΣΤΗΜΑΤΟΣ & ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΕΣ ΔΙΑΔΙΚΤΥΟΥ

Οι επικρατέστερες προσεγγίσεις όσον αφορά την χρησιμοποιούμενη αρχιτεκτονική του συστήματος, αποτελούν τα 2-tier και 3-tier (multi-tier) μοντέλα ^{15,16}:

α) 2-tier client-server

Η 2-tier client-server αρχιτεκτονική υποστηρίζει δύο στρώματα όπου συνήθως το πρώτο συνδυάζει μαζί το στρώμα παρουσίασης (presentation layer) και το στρώμα λογικής της εφαρμογής (application logic layer) και το δεύτερο φιλοξενεί το στρώμα διαχείρισης πόρων (Resource Management Layer). Ο client (fat client) δηλαδή κάνει το μεγαλύτερο μέρος της επεξεργασίας, έχοντας άμεση πρόσβαση στη βάση δεδομένων.

β) Multi-tier client-server

Στη multi-tier client-server αρχιτεκτονική έχουμε τρία ή περισσότερα επικοινωνούντα tiers, καθένα με τις δικές του ευθύνες. Αυτά είναι τα Presentation tier, Business Logic tier και Data tier. Το Presentation tier - το οποίο μπορεί να εκτελείται είτε στον client (thin client) είτε σε κάποιον web server - επικοινωνεί αποκλειστικά με το Business Logic tier και καθορίζει απλά την μορφή με την οποία παρουσιάζονται τα αποτελέσματα στον πελάτη. Το Business logic tier - το οποίο εκτελείται σε κάποιον application server - υλοποιεί όλες τις διαδικασίες και τις οντότητες για την δημιουργία αποτελεσμάτων, έλεγχο και μεταφορά δεδομένων μεταξύ των άλλων tiers (επικοινωνεί και με το Data tier και με το Presentation tier). Το Data tier - το οποίο εκτελείται σε κάποιον database server - επικοινωνεί μόνο με το Business Logic tier και αναλαμβάνει την πρόσβαση στα δεδομένα και τη διαχείριση της βάσης.

Αξιολογώντας τη φύση του προβλήματος που το σύστημά μας καλείται να αντιμετωπίσει και λαμβάνοντας υπ' όψιν τις βασικές διαφορές μεταξύ των δύο προαναφερθέντων προσεγγίσεων καταλήγουμε στην επιλογή της multi-tier αρχιτεκτονικής ως καταλληλότερης, επειδή παρουσιάζει μια πληθώρα πλεονεκτημάτων, σημαντικά για την εν λόγω περίπτωση.

Τα σημαντικότερα εξ αυτών είναι:

- i. Οποιοδήποτε από τα tiers μπορεί να αλλάξει ριζικά στη λειτουργία του ή στη σχεδίασή του, χωρίς αυτό να επηρεάσει τα υπόλοιπα. Δηλαδή, κάθε tier αντιμετωπίζει τα επικοινωνούντα με αυτό tiers σαν μαύρα κουτιά (black boxes), αδιαφορώντας για την υλοποίησή τους.

- ii. Διευκολύνεται η κατανομή της λειτουργικότητας της εφαρμογής στα διάφορα tiers κάνοντας την έτσι πιο δομημένη και ταυτόχρονα ευκολότερα συντηρήσιμη. Επίσης, νέες λειτουργίες μπορούν να εισαχθούν στο σύστημα με μεγαλύτερη άνεση.
- iii. Η απομόνωση του Data tier επιτρέπει μεγαλύτερη ποικιλία στις υποκείμενες βάσεις δεδομένων καθώς και εύκολη ενσωμάτωση και συνεργασία με ήδη υπάρχοντα συστήματα (legacy systems) του οργανισμού στη multi-tier εφαρμογή.
- iv. Ο διαχωρισμός μεταξύ Business Logic tier και Data tier αποφέρει επίσης και καλύτερη εξισορρόπηση φορτίου (load balancing) αφού πλέον οι database servers δεν διαχειρίζονται απ' ευθείας τις συνδέσεις του καθενός client (σπατάλη υπολογιστικής ισχύος) αλλά διαχειρίζονται μόνο λίγες συνδέσεις με τους application servers, οι οποίοι εξυπηρετούν τους clients, και μπορούν λοιπόν να επεξεργάζονται κατά πολύ μεγαλύτερους όγκους δεδομένων.
- v. Γενικότερα, η συγκεκριμένη αρχιτεκτονική ανταποκρίνεται πολύ καλύτερα σε περίπτωση μεγάλου αριθμού ταυτοχρόνως εξυπηρετούμενων χρηστών. Ακόμη σημαντικότερο είναι το γεγονός ότι μια τέτοια εφαρμογή μπορεί να κλιμακωθεί (scalable) πολύ ευκολότερα, απλά με την προσθήκη περισσότερων (κυρίως) application και database servers, οι οποίοι επιτρέπουν παράλληλα την καλύτερη εξισορρόπηση του φορτίου (load balancing). Το συγκεκριμένο χαρακτηριστικό είναι μεγάλης σημασίας για τον ενδιαφερόμενο οργανισμό καθώς ανάλογα με τις ανάγκες του, μπορεί να επενδύσει σε hardware και να επεκτείνει έτσι αν χρειάζεται τις δυνατότητες του συστήματος.
- vi. Τέλος, επαρκείς πολιτικές ασφαλείας (security policies) μπορούν να εφαρμοσθούν με ευκολία στα tiers στη πλευρά του server χωρίς να επιβαρύνεται ο εκάστοτε client από αυτό.

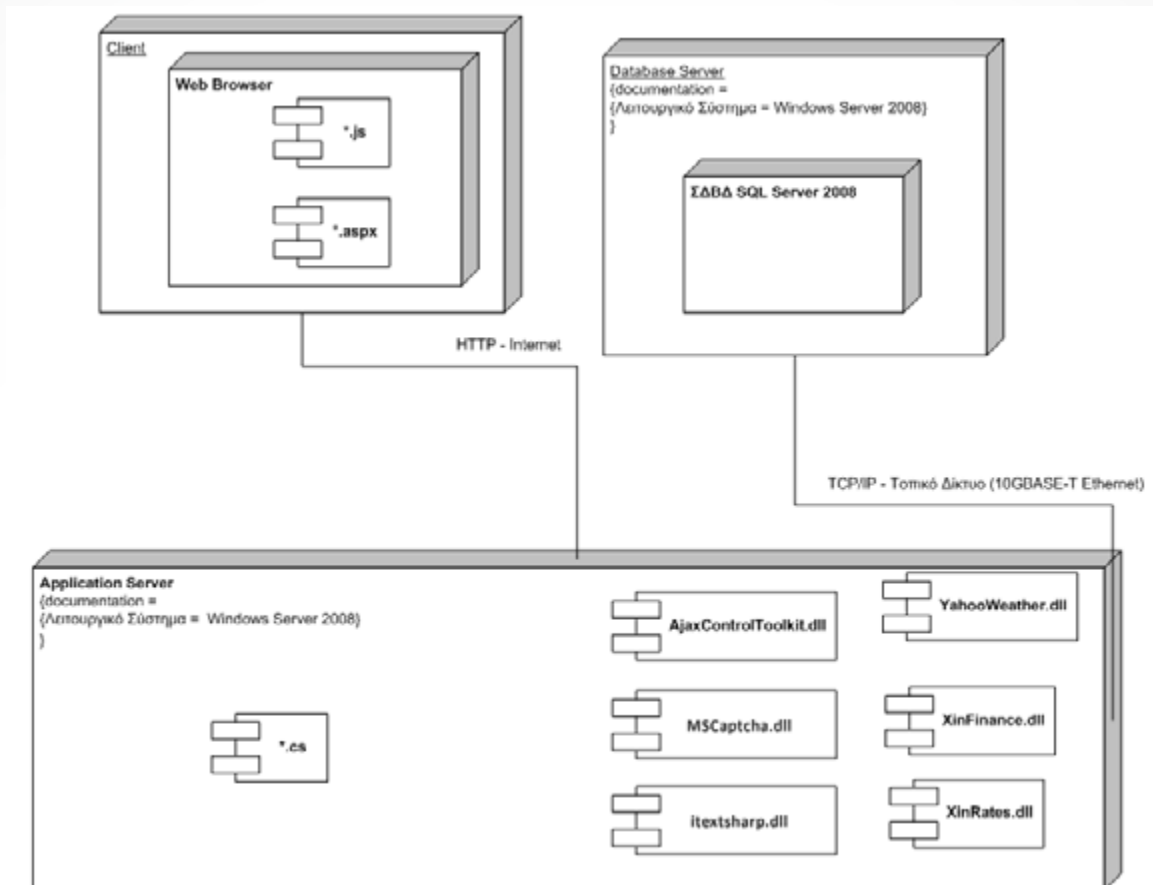
Όπως φαίνεται στο Σχήμα 1, θα υπάρχουν τρεις Application Servers και ένας Database Server. Ο Database Server θα περιέχει τη βάση δεδομένων μας, ενώ οι Application Servers θα περιέχουν τις ASP.NET σελίδες (Presentation Layer) και το business tier (Business Logic Layer) που είναι υλοποιημένο σε C# με χρήση Workflow Foundation. Η επικοινωνία με τη βάση γίνεται με χρήση του LINQ to SQL εργαλείου της τεχνολογίας LINQ, που μας παρέχει ένα Object-Relational Mapping (ORM) μεταξύ της σχεσιακής βάσης και των κλάσεων του κώδικά μας.

Συνοπτικά, κάθε Client, που τρέχει έναν οποιοδήποτε Web Browser, κάνει HTTP requests σε κάποιον από τους Application Servers. Αυτός με τη σειρά του εφαρμόζει business logic για να εξυπηρετήσει το αίτημα, η οποία, αν αυτό είναι αναγκαίο, δημιουργεί (με τη βοήθεια της LINQ to SQL) ερωτήσεις προς τη βάση δεδομένων.

Ο Database Server με τη σειρά του μεταβιβάζει αυτές τις ερωτήσεις στη βάση και επιστρέφει τα αποτελέσματα πίσω στον Application Server, ο οποίος παράγει html σελίδες τις οποίες και μεταβιβάζει στον Client.

Στο Σχήμα 1, φαίνεται πως τα components του συστήματος «τρέχουν» πάνω στους

κόμβους. Για λόγους απλότητας, καθώς ο αριθμός των components του συστήματος είναι πολύ μεγάλος, με «*.cs» εννοούμε όλα τα components C# κώδικα, με «*.aspx» εννοούμε όλες τις ASP ιστοσελίδες-components και με «*.js» εννοούμε όλα τα Javascript components.



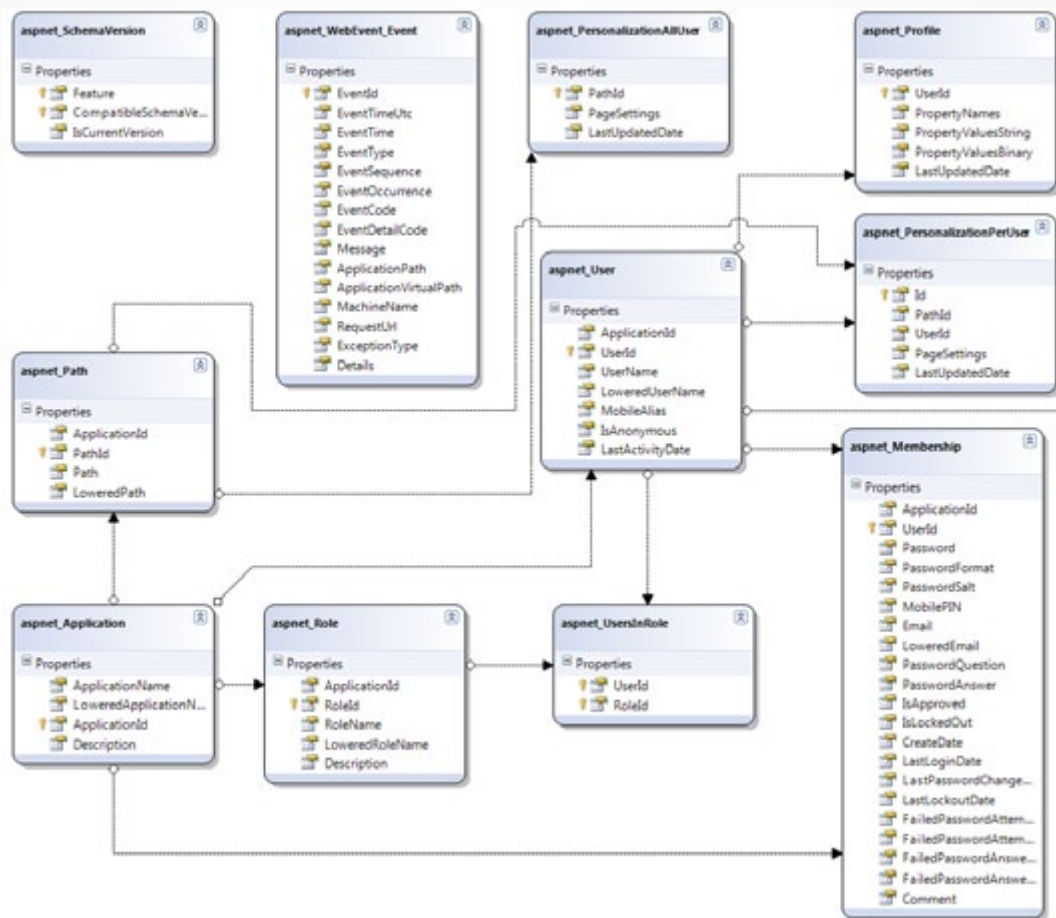
Σχήμα 1: Deployment diagram

Ο σχεδιασμός της Βάσης Δεδομένων του Συστήματος έγινε σύμφωνα με το Σχήμα 2. Λόγω έλλειψης χώρου, οι αναλυτικοί πίνακες της Βάσης Δεδομένων, όπως επίσης και η παραμετροποίηση των πεδίων-κλειδιών, περιλαμβάνονται μόνο στην πλήρη έκδοση της εργασίας.

5. ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ ^{13,14,17,18,19}

Σε μια πρώτη εξερευνητική φάση χρησιμοποιήσαμε διαδικασία ανάπτυξης καταρράκτη (waterfall process) ώστε να διαμορφώσουμε μια συνολική άποψη για τις απαιτήσεις και την κατανομή αυτών στα μέρη του έργου προκειμένου να προκύψουν ορισμένες υψηλού επιπέδου σχεδιαστικές αποφάσεις. Ακολούθως, εφαρμόσαμε την ευέλικτη (agile) επαναληπτική διαδικασία ανάπτυξης (iterative process) για την παραγωγή του τελικού

προϊόντος σε ελεγχόμενα επαναλαμβανόμενα υποστάδια.



Σχήμα 2: Σχεδιασμός Βάσης Δεδομένων Συστήματος

Η ανάλυση απαιτήσεων και ο σχεδιασμός έγινε με χρήση της γλώσσας μοντελοποίησης UML και του Microsoft Office Visio 2007 (Enterprise). Η υλοποίηση της εφαρμογής έγινε με C# .NET και ASP.NET (Framework 3.5) σε περιβάλλον Microsoft Visual Studio 2010 (Professional Edition). Χρησιμοποιήθηκαν επίσης web τεχνολογίες όπως DHTML, CSS, ASP.NET AJAX 3.5, JQuery, JavaScript, VBScript, XML κ.ά. κυρίως για να αυξήσουν την διαδραστικότητα, αλλά και την εμφάνιση/φιλικότητα προς τους χρήστες.

Για τη σχεδίαση του σχήματος της βάση δεδομένων χρησιμοποιήθηκε το DBDesigner 4 (www.fabforce.net), το SQL Management Studio 2008 και Visual Studio 2008.

Το γραφικό περιεχόμενο των ιστοσελίδων σχεδιάστηκε με Adobe Photoshop CS3 και Microsoft Expression Web 2007.

6. ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ

Η εργασία μας κατάφερε επιτυχώς να συνδυάσει σε μια ενιαία διαδικτυακή εφαρμογή,

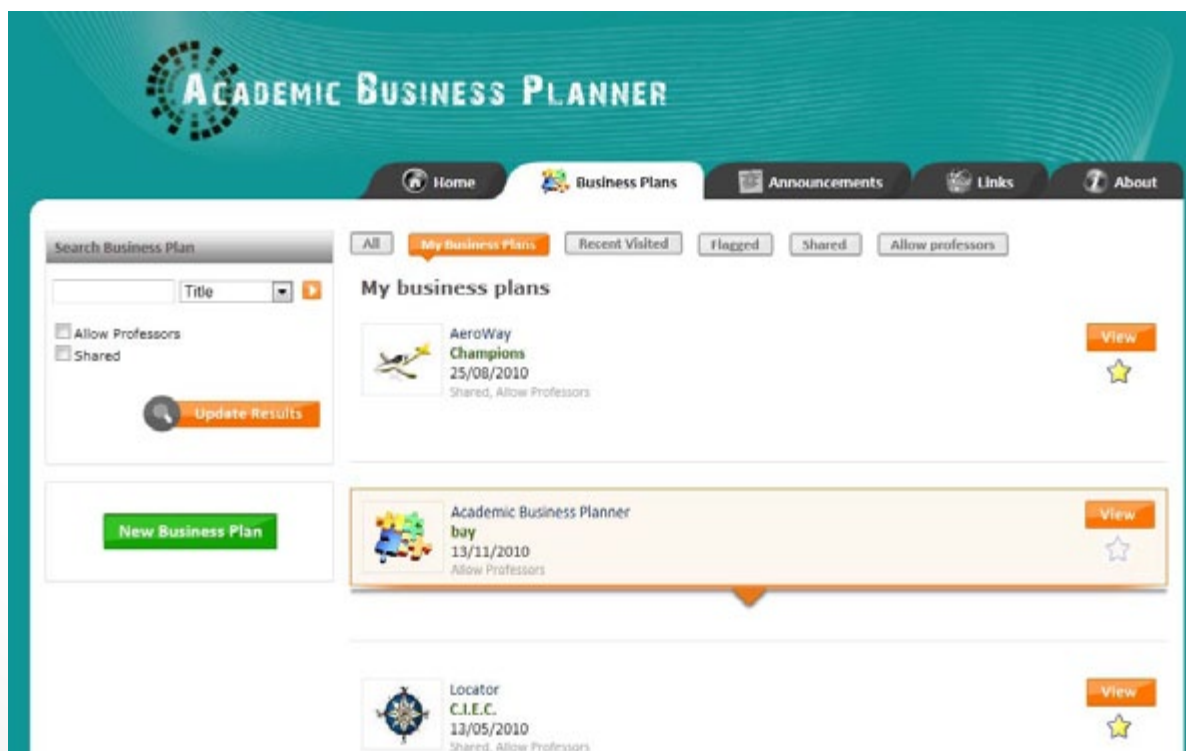
διαθέσιμη χωρίς κόστος, μια πλατφόρμα που προσφέρει δυνατότητα εγγραφής και σύνδεσης χρηστών, προσωπική σελίδα με πλήρως παραμετροποιήσιμα web-parts (τιμές ξένου συναλλάγματος, αντζέντα με ανακοινώσεις / εκδηλώσεις / δραστηριότητες, ημερολόγιο, υπολογιστική μηχανή, καιρός) όπως επίσης και λειτουργία προσωπικών μηνυμάτων μεταξύ των χρηστών, με WYSIWYG editor. Η τεχνολογία Captcha αποτρέπει την κακόβουλη αποστολή μηνυμάτων από (ro)bots.

Περαιτέρω, υπάρχει η δυνατότητα δημιουργίας και αποθήκευσης Επιχειρηματικού Σχεδίου με όλες τις σχετικές πληροφορίες, λογότυπο, στοιχεία ισολογισμού, υπολογισμό δόσεων χρηματοδότησης και εξόφλησης δανείων, υπολογισμό περιόδου απόσβεσης επένδυσης και υπολογισμό αριθμοδεικτών. Επιπλέον, υπάρχει η δυνατότητα εμφάνισης γραφικών παραστάσεων, εξαγωγής σε αρχείο τύπου PDF, συγκρότησης ομάδων εργασίας μεταξύ χρηστών, λειτουργίας ρόλου καθηγητή / επιβλέποντα, σχολιασμού από τους συμμετέχοντες σε κάθε εργασία, όπως επίσης και επανατροφοδότηση/αξιολόγηση από τον επιβλέποντα. Οι χρήστες έχουν ακόμη την επιλογή αναζήτησης Επιχειρηματικών Σχεδίων, κατηγοριοποιημένα σύμφωνα με τις επιλογές τους.

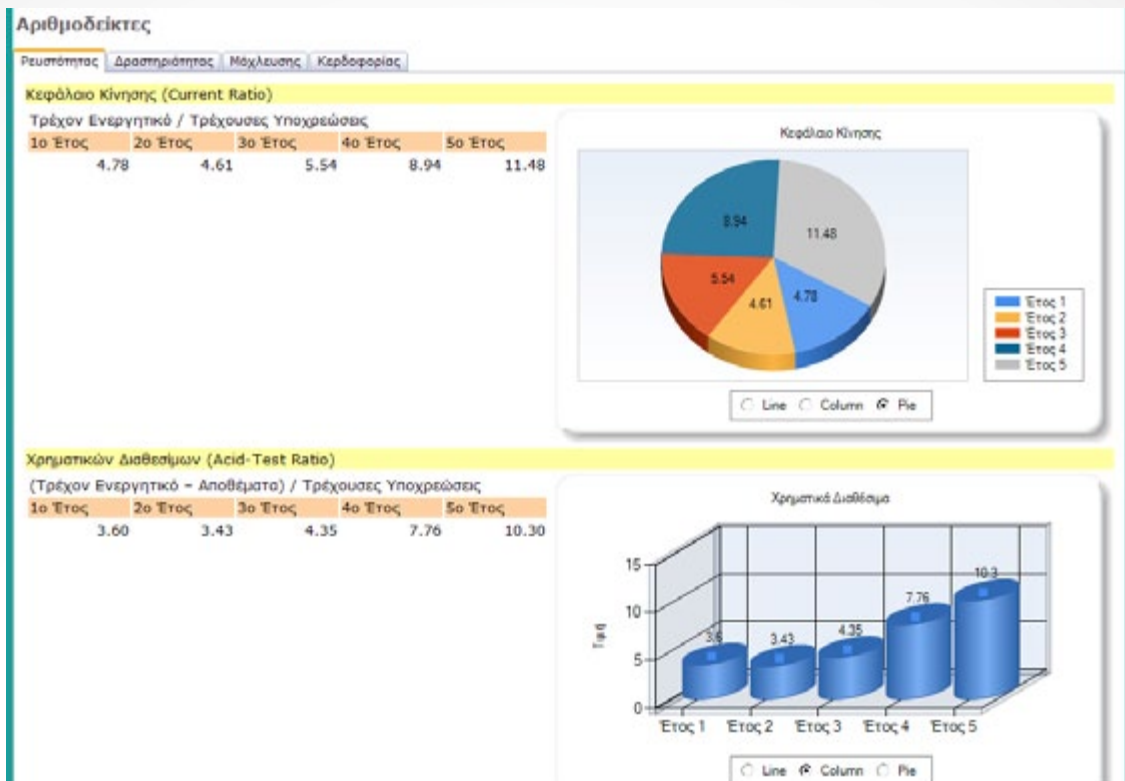
Ως επιπλέον μέτρο ενίσχυσης της διαφάνειας μεταξύ των διαφόρων χρηστών, αλλά και για λόγους πρόσβασης στο ιστορικό των δραστηριοτήτων, η εφαρμογή καταγράφει κάθε πράξη των χρηστών και προβάλλει τις τροποποιήσεις σε κάθε πίνακα / σελίδα.

Η εφαρμογή που δημιουργήσαμε χρησιμοποιείται ήδη σε πιλοτική φάση στα πλαίσια του μαθήματος Καινοτομία & Επιχειρηματικότητα, που διδάσκεται στο Τμήμα Πληροφορικής & Τηλεπικοινωνιών του Ε.Κ.Π.Α.

Ακολουθούν εικόνες με ορισμένα χαρακτηριστικά της εφαρμογής:



Σχήμα 3: Business Plan Dashboard



Σχήμα 4: Υπολογισμός αριθμοδεικτών και δημιουργία γραφικής παράστασης

Administrator Dashboard | Messages(3) | Control Panel | Logout

ACADEMIC BUSINESS PLANNER

Home | Business Plans | Announcements | Links | About

Πίνακας ελέγχου διαχειριστή

Dashboard

Membership

Settings

Business Planner Preferences

Μέλη	Έτοιμοι Χρήστη																														
Search for users Arranged by User name	Ταυτότητα Username: adonettos Email: adonettos@gmail.com																														
<table border="1"> <tr><td></td><td>adonettos</td><td>04/09/2010</td></tr> <tr><td></td><td>dfgdfg</td><td>12/08/2010</td></tr> <tr><td></td><td>harold</td><td>22/07/2010</td></tr> <tr><td></td><td>hasd</td><td>22/07/2010</td></tr> <tr><td></td><td>John</td><td>22/07/2009</td></tr> <tr><td></td><td>kostis</td><td>22/07/2010</td></tr> <tr><td></td><td>mister</td><td>22/07/2010</td></tr> <tr><td></td><td>nina</td><td>10/08/2010</td></tr> <tr><td></td><td>pambos</td><td>10/08/2010</td></tr> <tr><td></td><td>pambos@hotmail</td><td>12/08/2010</td></tr> </table>		adonettos	04/09/2010		dfgdfg	12/08/2010		harold	22/07/2010		hasd	22/07/2010		John	22/07/2009		kostis	22/07/2010		mister	22/07/2010		nina	10/08/2010		pambos	10/08/2010		pambos@hotmail	12/08/2010	Καθίσκος Τύπος: Hashed Last changed: 22/07/2010 10:27:50 Password question: Not set Password Answer: Not set
	adonettos	04/09/2010																													
	dfgdfg	12/08/2010																													
	harold	22/07/2010																													
	hasd	22/07/2010																													
	John	22/07/2009																													
	kostis	22/07/2010																													
	mister	22/07/2010																													
	nina	10/08/2010																													
	pambos	10/08/2010																													
	pambos@hotmail	12/08/2010																													
	Ρόλοι professor																														
	Profile Data First Name: Adonied Last Name: Kourtelis Birthday: 15/07/1985 Country: Ελλάδα City: Αθήνα University: Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών Department: Φιλοσοφική Σχολή																														
	Comments																														

Σχήμα 5: Πίνακας ελέγχου διαχειριστή

ΑΝΑΦΟΡΕΣ

1. Colin Mason, and Matthew Stark (2004) "What do investors look for in a Business Plan? A comparison of the Investment criteria for Bankers, Venture Capitalists and Business Angels", University of Strathclyde, International Small Business Journal.
2. Pinson Linda, and Jinnett Jerry (1993) "Anatomy of a Business Plan", Enterprise Dearborn, ISBN: 0793106184.
3. Rhonda Abrams, Eugene Kleiner (2003) "The successful Business Plan: Secrets & Strategies", The Planning Shop, ISBN: 0966963563.
4. Jeffrey A. Timmons and Stephen Spinelli (2009) "New Venture Creation, Entrepreneurship for the 21st Century", McGraw-Hill Higher Education, ISBN: 0073381551.
5. James O. Horrigan (1968) "A Short History of Financial Ratio Analysis", The Accounting Review.
6. Timo Salmi, and Teppo Martikainen (1994) "A review of the theoretical and empirical basis of financial ratio analysis", The Finnish Journal of Business Economics.
7. Groppelli, Angelico A., Ehsan Nikbakht (2000) Finance, 4th ed. Barron's Educational Series.
8. S. H. Paskov, and J. F. Traub (1995), "Faster evaluation of financial derivatives".
9. Don L. McLeish (2004) "Monte Carlo Simulation and Finance", University of Waterloo.
10. Harald Niederreiter (2010) "Quasi-Monte Carlo Methods for multi-dimensional numerical integration and their applications to computational finance", Encyclopedia of Quantitative Finance.
11. Paul Glasserman (2004) "Monte Carlo methods in Financial Engineering", Springer Science, ISBN: 0387004513.
12. Introduction to Monte Carlo Simulations. <http://office.microsoft.com>
13. Tony Northrup (2009) "Microsoft .NET Framework - Application Development Foundation Second Edition", Microsoft Press.
14. Mike Snell, Glenn Johnson, Tony Northrup, and GrandMasters (2009) – "Microsoft .NET Framework 3.5 – ASP.NET Application Development" Microsoft Press.
15. Building a 3-tier application using ASP.NET. <http://www.c-sharpcorner.com>
16. Application Design Guidelines: From N-Tier to .NET. <http://msdn.microsoft.com/en-us/library/ms978384.aspx>
17. GridView cells in ASP.NET. <http://www.codeproject.com>
18. AJAX Control Toolkit. http://www.asp.net/ajaxlibrary/act_tutorials.ashx
19. jQuery JavaScript Library. <http://docs.jquery.com/>

Ανάπτυξη ενός Παιγνιοθεωρητικού Μοντέλου για Συνεργατικά Δίκτυα Επικοινωνίας

Ντέμος Ι. Κωνσταντίνος

mop10327@di.uoa.gr

*Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών,
Πανεπιστημιούπολη, Ιλίσια, 15784, Αθήνα, Ελλάδα*

ΠΕΡΙΛΗΨΗ:

Αναπτύχθηκε ένα παίγνιο-θεωρητικό μοντέλο για ασύρματα συνεργατικά δίκτυα (Cooperative Communication Networks), το οποίο είναι βασισμένο στο μοντέλο του Hotelling. Σκοπός της προσπάθειας αυτής είναι η προσαρμογή ενός ασύρματου δικτύου στο μοντέλο του Hotelling, και η έρευνα για την ύπαρξη ή μη συνθηκών ανταγωνισμού στο σύστημα. Το πλαίσιο/μοντέλο που προτείνουμε, σε αντίθεση με ένα κεντροποιημένο σχήμα (centralized scheme) δεν απαιτεί την ανταλλαγή Πληροφορίας Κατάστασης Καναλιού (CSI) μεταξύ των επικοινωνούντων τερματικών και παρέχει έναν γρήγορο και εύκολο τρόπο για την επιλογή της βέλτιστης απόφασης για την αποστολή ενός σήματος από έναν κόμβο σε έναν άλλον.

Λέξεις κλειδιά: Θεωρία Παιγνίων, Νόμος του Hotelling, Συνεργατικά Δίκτυα Επικοινωνίας (Cooperative Communication Networks), Ανταγωνισμός.

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ:

Βαρουτάς Δημήτρης, Λέκτορας, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών - ΕΚΠΑ

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Τα τελευταία χρόνια τα συνεργατικά δίκτυα επικοινωνίας (Cooperative Communication Networks) έχουν προσελκύσει το ενδιαφέρον πολλών ερευνητών παγκοσμίως. Εκμεταλλευόμενα τη χωρική και πολυχρηστική ποικιλομορφία, τα ασύρματα τερματικά μπορούν να συνεργαστούν, προκειμένου να επιτύχουν πιο αποτελεσματική μετάδοση πληροφορίας μεταξύ των κόμβων του δικτύου και έτσι, να επιτευχθεί καλύτερη χρήση του φάσματος, μεγαλύτερη διεκπαιρευτική ικανότητα (throughput) και καλύτερη απόδοση στο σύστημα γενικότερα [7,9].

Αρκετές προσεγγίσεις έχουν γίνει τα τελευταία χρόνια, οι οποίες στοχεύουν στην εφαρμογή παιγνιοθεωρητικών μεθοδολογιών και εργαλείων. Αυτές οι προσεγγίσεις εστιάζουν κυρίως στην κατανομή ισχύος (power allocation) και/ή στην αντικατάσταση/επιλογή των ενδιάμεσων κόμβων (relay replacement/selection) [1,3,4,6,8]. Όμως, οι υπάρχουσες προσεγγίσεις, είτε με κεντρικοποιημένα, είτε με από-κεντρικοποιημένα σχήματα επικοινωνίας, απαιτούν μεγάλο ποσό πληροφορίας να μεταφερθεί ανάμεσα στους κόμβους, ή πολύπλοκους υπολογισμούς στα ασύρματα τερματικά του δικτύου [1,6,8].

Αυτή είναι η πρώτη προσπάθεια να χρησιμοποιηθεί το μοντέλο του Hotelling (1929) στα συνεργατικά δίκτυα επικοινωνίας. Το μοντέλο του Hotelling είναι ένα μοντέλο ανταγωνισμού το οποίο υποστηρίζει ότι είναι λογικό για τους παραγωγούς να κάνουν τα προϊόντα τους όσο το δυνατόν πιο όμοια [5]. Αυτό το συμπέρασμα, θεωρητικά, μπορεί να έχει εφαρμογή και στα συνεργατικά δίκτυα, αφού οι ενδιάμεσοι/βοηθητικοί κόμβοι προσφέρουν το ίδιο επίπεδο υπηρεσίας/προϊόντος.

Το πλαίσιο/μοντέλο το οποίο προτείνουμε διαφοροποιείται από τα μοντέλα κεντρικοποιημένων σχημάτων στο γεγονός ότι δεν απαιτείται ανταλλαγή πληροφορίας κατάστασης του καναλιού (CSI) μεταξύ των κόμβων, έτσι ώστε να αποφασιστεί πως θα μεταδώσει ένας πηγαίος κόμβος ένα σήμα σε έναν άλλο κόμβο (απευθείας ή μέσω των ενδιάμεσων κόμβων). Επιπλέον, η απόφαση αυτή γίνεται γρήγορα χωρίς να απαιτούνται πολύπλοκοι υπολογισμοί στα επικοινωνούντα τερματικά, όπως γίνεται σε άλλους κατανεμημένους (distributed) τρόπους επικοινωνίας (όπως π.χ. με τη χρήση επαναληπτικών αλγορίθμων) [8].

2. ΠΡΟΣΑΡΜΟΓΗ ΕΝΟΣ ΑΣΥΡΜΑΤΟΥ ΔΙΚΤΥΟΥ ΣΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΤΟΥ HOTELLING

Θα προσαρμόσουμε, λοιπόν, ένα ασύρματο δίκτυο στο μοντέλο του Hotelling. Το δίκτυο αποτελείται από τους εξής κόμβους:

- i. Τους πηγαίους κόμβους (source nodes), οι οποίοι θα έχουν το ρόλο των *καταναλωτών* στο μοντέλο του Hotelling. Οι πηγαίοι κόμβοι είναι ομοιόμορφα κατανεμημένοι στο διάστημα $[0,1]$ κατά μήκος του οριζοντίου άξονα μήκους 1.
- ii. Τους δύο ενδιάμεσους κόμβους (relay nodes), οι οποίοι έχουν το ρόλο των *παραγωγών*

στο μοντέλο του Hotelling. Ο ένας από αυτούς βρίσκεται στη θέση 0, ενώ ο άλλος στη θέση 1 του οριζόντιου άξονα [5].

- iii. Τον κόμβο-προορισμό, ο οποίος βρίσκεται κάπου στο δισδιάστατο χώρο. Αυτοί οι κόμβοι συμβολίζονται με s (source), r_1 , r_2 (relays), d (destination), αντίστοιχα. Το σύστημα αναπαρίσταται στην Εικόνα 1. Η απόσταση μεταξύ των r_1 και r_2 είναι 1, η απόσταση μεταξύ των s και r_1 θα συμβολίζεται x_1 και η απόσταση μεταξύ των s και r_2 θα συμβολίζεται με x_2 , το οποίο είναι ίσο με:

$$x_2 = 1 - x_1 \quad (1)$$



Εικόνα 1: Οι θέσεις των κόμβων στο μοντέλο του Hotelling

Αρχικά, σχηματίζουμε τις συναρτήσεις χρησιμότητας των κόμβων (s , r_1 , r_2). Ορίζουμε ως συνάρτηση χρησιμότητας του πηγαιού κόμβου (s) την εξής:

$$U_s = \begin{cases} K - P_s c_s - t(sd) \\ K - P_{r_i} p_i - t(x_i) \end{cases}, i = 1, 2 \quad (2)$$

Όπως βλέπουμε, η συνάρτηση χρησιμότητας του s έχει δύο κλάδους. Αυτό γιατί ο πηγαιός κόμβος s μπορεί να στείλει το σήμα στον προορισμό (d) με δύο τρόπους. Ο άνω κλάδος της εξίσωσης (2) εκφράζει την χρησιμότητα που αποκτά ο πηγαιός κόμβος (s) αν αυτός στείλει το σήμα στον προορισμό απευθείας, ενώ ο κάτω κλάδος εκφράζει την χρησιμότητα που αποκτά ο s , αν επιλέξει να στείλει το σήμα στον d μέσω ενός εκ των δύο ενδιαμέσων κόμβων αγοράζοντας ισχύ από αυτόν.

Το K δηλώνει το «κεφάλαιο» που ο s είναι διατεθειμένος να ξοδέψει είτε στην αγορά ισχύος από τους r_1 και r_2 , είτε στην παραγωγή της απαιτούμενης ισχύος, για την απευθείας μετάδοση του σήματος στον d . Η μεταβλητή P_s δηλώνει το ποσό ισχύος που ο s χρειάζεται να παράγει για να στείλει το σήμα στον προορισμό απευθείας, ενώ το P_{r_i} είναι το ποσό ισχύος που ο s πρέπει να αγοράσει από τον κόμβο r_i , σε περίπτωση που ο s επιλέξει ότι η βέλτιστη επιλογή του είναι να στείλει το σήμα μέσω του r_i και έτσι, ο r_i να στείλει το σήμα στον d για τον s . Η μεταβλητή t είναι το κόστος μεταφοράς (*transportation cost*), το οποίο αντιπροσωπεύει το κόστος για τον s να επιλέξει τον έναν ή τον άλλον ενδιάμεσο κόμβο, το c_s είναι κόστος ανά μονάδα ισχύος που παράγει ο s και

το p_i είναι η τιμή ανά μονάδα ισχύος στην οποία πουλάει ο ενδιάμεσος κόμβος i . Τέλος, το (sd) είναι η απόσταση μεταξύ του s και του d , ενώ το x_i είναι η απόσταση μεταξύ του s και του r_i .

Υποθέτουμε ότι ο κόμβος-προορισμός (d), προκειμένου να αποκωδικοποιήσει σωστά το σήμα απαιτεί ένα ελάχιστο ποσό ισχύος, το οποίο ονομάζουμε *ισχύς κατωφλίου* και θα συμβολίζουμε με P_{Th} (threshold). Έτσι, υιοθετούμε μια απλοποιημένη προσέγγιση:

$$P_s = P_{Th}(sd)^2 \quad (3)$$

$$P_{r_i} = P_{Th}(dr_i)^2, \quad i = 1,2 \quad (4)$$

όπου, το (sd) είναι η απόσταση μεταξύ του s και του d και το (dr_i) είναι η απόσταση μεταξύ των d και r_i .

Στην εξίσωση (2) ο άνω κλάδος της εξίσωσης δηλώνει ότι η χρησιμότητα του s , στην περίπτωση που ο s στείλει το σήμα στον d απευθείας, ισούται με το ποσό των «χρημάτων» που έχει στην διάθεση του (K) μείον το συνολικό κόστος παραγωγής της ισχύος (P_s) μείον το *κόστος μεταφοράς (transportation cost)* που απαιτείται για να στείλει ο s το σήμα στον d .

Ωστόσο, στην περίπτωση που ο s επιλέξει να πληρώσει τον r_i για να στείλει το σήμα στον d για τον s , τότε ο κάτω κλάδος της εξίσωσης (2) χρησιμοποιείται για να υπολογιστεί η χρησιμότητα του s . Τότε, η χρησιμότητα του s ισούται με το ποσό των «χρημάτων» που έχει στην διάθεση του (K) μείον το συνολικό κόστος αγοράς ισχύος από τον r_i μείον το *κόστος μεταφοράς (transportation cost)* που απαιτείται για να στείλει ο s το σήμα στον r_i .

Έτσι λοιπόν, είναι προφανές ότι ο πηγαίος κόμβος έχει δύο εναλλακτικές επιλογές. Η μία επιλογή είναι να στείλει απευθείας το σήμα στον κόμβο-προορισμό, ενώ η άλλη είναι να πληρώσει τον έναν εκ των δύο ενδιάμεσων κόμβων, προκειμένου να στείλει αυτός ο ενδιάμεσος κόμβος το σήμα στον d για τον πηγαίο κόμβο. Φυσικά, ο πηγαίος κόμβος θα επιλέξει την εναλλακτική που μεγιστοποιεί την χρησιμότητά του.

Ορίζουμε την συνάρτηση χρησιμότητας των ενδιάμεσων κόμβων:

$$U_{r_i} = P_{r_i}(p_i - c_i)x_i \quad (5)$$

Δηλαδή, η χρησιμότητα των ενδιάμεσων κόμβων ισούται με τα έσοδα από την πώληση ισχύος στον πηγαίο κόμβο s μείον το κόστος παραγωγής αυτού του ποσού ισχύος πολλαπλασιασμένα επί της μεταβλητής x_i . Όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή της μεταβλητής x_i , αυτό σημαίνει ότι τόσο περισσότεροι πηγαίοι κόμβοι αγοράζουν ισχύ

από τον r_i , δηλαδή το μερίδιο αγοράς (market share) του r_i μεγαλώνει, κάτι που οδηγεί σε αύξηση της χρησιμότητάς του.

3. ΛΥΣΗ ΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ

Αφού προσαρμόσαμε το σύστημα στο μοντέλο του Hotelling, θα μελετήσουμε τις συνθήκες για ύπαρξη ανταγωνισμού στο σύστημα.

Αρχικά, είναι σημαντικό να βρούμε την θέση στην οποία ο πηγαίος κόμβος είναι αδιάφορος μεταξύ του να αγοράσει ισχύ από τον r_1 και του να αγοράσει ισχύ από τον r_2 . Αυτή η θέση μπορεί να βρεθεί αν λύσουμε την εξίσωση $U_s^{r_1} = U_s^{r_2}$, το οποίο σημαίνει ότι σε αυτή τη θέση ο πηγαίος κόμβος αποκτά την ίδια χρησιμότητα είτε αγοράσει ισχύ από τον r_1 , είτε αγοράσει από τον r_2 . Έτσι, η θέση του αδιάφορου πηγαίου κόμβου, που θα τον συμβολίζουμε με $x_{indifferent}$, δίνεται από την εξίσωση:

$$x_{indifferent} = \frac{Pr_2p_2 - Pr_1p_1 + t}{2t} \quad (6)$$

Έτσι, όλοι οι κόμβοι που βρίσκονται στο διάστημα $(x_{indifferent}, 1]$ του άξονα, θα αγοράσουν ισχύ από τον r_2 , ενώ οι κόμβοι που βρίσκονται στο διάστημα $[0, x_{indifferent})$, θα αγοράσουν ισχύ από τον r_1 .

Μπορούμε τώρα, να υπολογίσουμε τις βέλτιστες τιμές (optimal prices) p_1^* και p_2^* , στις οποίες οι ενδιαμέσοι κόμβοι πουλούν ισχύ. Παίρνοντας τις συνθήκες πρώτης παραγώγου των U_{r_1} και U_{r_2} ως προς τα p_1 και p_2 , αντίστοιχα, εξισώνοντας με 0 και λύνοντας μαζί το σύστημα εξισώσεων που προκύπτει, έχουμε:

$$p_1^* = \frac{2Pr_1c_1 + Pr_2c_2 + t}{2Pr_1} \quad (7)$$

$$p_2^* = \frac{2Pr_2c_2 + Pr_1c_1 + t}{2Pr_2} \quad (8)$$

Αντικαθιστώντας τα p_1^* και p_2^* στην Εξ. (6), προκύπτει:

$$x_{indifferent} = \frac{Pr_2c_2 - Pr_1c_1 + 3t}{6t} \quad (9)$$

4. ΔΙΑΦΟΡΕΣ ΜΕΤΑΞΥ ΤΩΝ ΔΥΟ ΜΟΝΤΕΛΩΝ

Ανάμεσα στο μοντέλο που προτείνουμε και στο κλασικό μοντέλο του Hotelling υπάρχει μια σημαντική διαφορά. Αρχικά, όταν θεωρήσαμε το σύστημα των κόμβων που θα αποτελούν το δίκτυο, υποθέσαμε ότι οι πηγαίοι κόμβοι θα έχουν την επιλογή να στέλνουν το σήμα απευθείας το σήμα στον κόμβο-προορισμό και όχι μόνο την επιλογή να αγοράζουν ισχύ από τους ενδιάμεσους κόμβους για να στείλουν το σήμα στον d . Αυτό διαφοροποιεί σημαντικά την μελέτη του προβλήματος σε σχέση με ένα κλασικό πρόβλημα Hotelling. Πρέπει επομένως, να καταλήξουμε στις συνθήκες που οδηγούν έναν πηγαίο κόμβο στην βέλτιστη για αυτόν απόφαση.

Έτσι, εκτός από την κρίσιμη θέση $x_{indifferent}$, θα βρούμε άλλες δύο σημαντικές θέσεις για το πρόβλημα αυτό. Η μία είναι η θέση στην οποία ο πηγαίος κόμβος είναι αδιάφορος μεταξύ του να στείλει το σήμα απευθείας στον κόμβο-προορισμό και του να πληρώσει τον r_1 για να το κάνει αυτό. Η άλλη θέση είναι αυτή στην οποία ο πηγαίος κόμβος είναι αδιάφορος μεταξύ του να στείλει το σήμα απευθείας στον κόμβο-προορισμό και του να πληρώσει τον r_2 για να το κάνει αυτό. Αυτές οι θέσεις θα συμβολίζονται με x_{r1} και x_{r2} , αντίστοιχα. Για να βρούμε αυτές τις δύο θέσεις, θα λύσουμε την Εξ. (2), εξισώνοντας τους δύο κλάδους της Εξ. (2) και λύνοντας ως προς x_1 . Επομένως, η λύση της εξίσωσης $U_s^{upper_branch} = U_s^{lower_branch}$ δίνει τη θέση αδιαφορίας.

Για να βρούμε τη θέση x_{r1} , ορίζουμε την ακόλουθη συνάρτηση:

$$g(x_1) = -P_s c_s - t(sd) + P_{r1} p_1 + t x_1 \quad (10)$$

Η πρώτη τάξης παράγωγος $\frac{\partial g(x_1)}{\partial x_1}$ απαιτείται, προκειμένου να μελετήσουμε τη συμπεριφορά της $g(x_1)$. Όμως, το (sd) είναι συνάρτηση του x_1 . Δηλαδή:

$$sd = \sqrt{((dx) - x_1)^2 + (dy)^2} \quad (11)$$

Η μεταβλητή (dx) είναι η συντεταγμένη του d στον οριζόντιο άξονα, ενώ η (dy) είναι η συντεταγμένη του d στον κάθετο άξονα. Το σημείο $(0,0)$ από το οποίο μετρούνται οι αποστάσεις είναι η θέση του κόμβου r_1 (Εικ. 1).

Αντικαθιστώντας τις Εξ. (3), (4) και (11) στην Εξ. (10), προκύπτει:

$$g(x_1) = -P_{Th} c_s [(dx - x_1)^2 + dy^2] - t \sqrt{(dx - x_1)^2 + dy^2} + P_{Th} (dr_1)^2 p_1 + t x_1 \quad (12)$$

και η πρώτη παράγωγος είναι:

$$\frac{\partial g(x_1)}{\partial x_1} = 2P_{Th}c_s(dx - x_1) + t(dx - x_1)[(dx - x_1)^2 + dy^2]^{-1/2} + t \quad (13)$$

Λύνουμε την εξίσωση:

$$g(x_{r1}) = 0 \quad (14)$$

Άρα, λαμβάνοντας υπόψη το x_{r1} , που είναι η τιμή της μεταβλητής x_1 που ικανοποιεί την Εξ. (14), καθώς και την Εξ. (13), μπορούμε να αποφανθούμε για κάθε πηγαίο κόμβο στον άξονα αν θα στείλει το σήμα στον προορισμό απευθείας ή μέσω ενός ενδιάμεσου κόμβου. Έτσι, το x_{r1} είναι:

$$x_{r1} = \frac{P_s c_s + t(sd) - P_{r1} p_1}{t} \quad (15)$$

Με τον ίδιο τρόπο, βρίσκουμε και το x_{r2} , που είναι η θέση στην οποία ο πηγαίος κόμβος είναι αδιάφορος μεταξύ του να στείλει το σήμα απευθείας στον προορισμό και του να αγοράσει ισχύ από τον r_2 για να το κάνει αυτό. Επομένως, ορίζουμε την συνάρτηση:

$$h(x_2) = -P_s c_s - t(sd) + P_{r_2} p_2 + t x_2 \quad (16)$$

Η πρώτη παράγωγος της $h(x_2)$ είναι:

$$\frac{\partial h(x_2)}{\partial x_2} = 2P_{Th}c_s(dx - 1 + x_1) + t(dx - 1 + x_1)[(dx - 1 + x_1)^2 + dy^2]^{-1/2} + t \quad (17)$$

Ομοίως με πριν, βρίσκουμε:

$$x_{r2} = \frac{P_s c_s + t(sd) - P_{r_2} p_2}{t} \quad (18)$$

Υποθέτουμε ότι οι ενδιάμεσοι κόμβοι δεν έχουν πληροφόρηση ότι οι πηγαίοι κόμβοι έχουν τη δυνατότητα να στείλουν το σήμα στον κόμβο-προορισμό απευθείας και γι αυτό οι τιμές που οι ενδιάμεσοι κόμβοι χρεώνουν στους πηγαίους κόμβους είναι οι βέλτιστες τιμές που βρήκαμε πιο πάνω p_1^* και p_2^* . Γι αυτό, αντικαθιστούμε τις Εξ. (7) και (8) στις Εξ. (15) και (18). Έτσι:

$$x_{r1} = \frac{3P_s c_s + 3t(sd) - 2P_{r_1} c_1 - P_{r_2} c_2 - 3t}{3t} \quad (19)$$

$$x_{r2} = \frac{3P_s c_s + 3t(sd) - 2P_{r2}c_2 - P_{r1}c_1 - 3t}{3t} \quad (20)$$

Αντικαθιστώντας τις Εξ. (3),(4),(11) στις Εξ. (19) και (20), καταλήγουμε:

$$x_{r1} = \frac{3P_{Th}[(dx-x_{r1})^2+dy^2]c_s+3t\sqrt{(dx-x_{r1})^2+dy^2}-2P_{Th}(dr_1)^2c_1-P_{Th}(dr_2)^2c_2-3t}{3t} \quad (21)$$

$$x_{r2} = \frac{3P_{Th}[(dx-x_{r2})^2+dy^2]c_s+3t\sqrt{(dx-x_{r2})^2+dy^2}-2P_{Th}(dr_2)^2c_2-P_{Th}(dr_1)^2c_1-3t}{3t} \quad (22)$$

5. ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΚΑΙ ΒΕΛΤΙΣΤΗ ΕΠΙΛΟΓΗ

Σε αυτήν την ενότητα, θα μελετηθούν οι συνθήκες για την ύπαρξη ανταγωνισμού ανάμεσα στους r_1 και r_2 . Αυτό θα γίνει αρχικά, με τη μελέτη των συναρτήσεων $g(x_1)$ και $h(x_2)$. Εάν οι συναρτήσεις αυτές είναι θετικές, τότε αυτό σημαίνει ότι ο πηγαίος κόμβος αποκτά μεγαλύτερη χρησιμότητα αν στείλει το σήμα απευθείας στον προορισμό. Από την άλλη, αν αυτές οι συναρτήσεις είναι αρνητικές, τότε αυτό σημαίνει ότι η βέλτιστη επιλογή για τον πηγαίο κόμβο, είναι να αγοράσει ισχύ από τον ενδιάμεσο κόμβο r_1 ή τον r_2 , αντίστοιχα, για να στείλει το σήμα.

Γι' αυτό είναι σημαντικό, να λάβουμε υπόψη τις κρίσιμες θέσεις του άξονα όπου ο πηγαίος κόμβος είναι αδιάφορος μεταξύ του να στείλει μόνος του το σήμα στον προορισμό και του να στείλει το σήμα μέσω ενός από τους ενδιάμεσους κόμβους, αλλά και την θέση που ο s είναι αδιάφορος να αγοράσει από τον r_1 ή τον r_2 . Όπως αναφέραμε και νωρίτερα, αυτές οι θέσεις αδιαφορίας είναι οι x_{r1} , x_{r2} και $x_{indifferent}$, αντίστοιχα. Από την στιγμή που αυτές οι σημαντικές θέσεις είναι γνωστές, όπως και η συμπεριφορά των συναρτήσεων $g(x_1)$ και $h(x_2)$, τότε μπορούμε να καταλήξουμε στις συνθήκες για την ύπαρξη ανταγωνισμού στο σύστημα.

Από τις Εξ. (13) και (17), συμπεραίνουμε ότι μπορεί να υπάρξουν πέντε διαφορετικές περιπτώσεις ανάλογα με τις τιμές των πρώτης τάξεως παραγώγων στο διάστημα $x_1, x_2 \in [0, 1]$. Συγκεκριμένα:

Περίπτωση #1: $\frac{\partial g(x_1)}{\partial x_1} > 0$ και $\frac{\partial h(x_2)}{\partial x_2} > 0$. **Περίπτωση #2:** $\frac{\partial g(x_1)}{\partial x_1} > 0$ και $\frac{\partial h(x_2)}{\partial x_2} < 0$.

Περίπτωση #3: $\frac{\partial g(x_1)}{\partial x_1} < 0$ και $\frac{\partial h(x_2)}{\partial x_2} > 0$. **Περίπτωση #4:** $\frac{\partial g(x_1)}{\partial x_1} < 0$ και $\frac{\partial h(x_2)}{\partial x_2} < 0$.

Περίπτωση #5: $\frac{\partial g(x_1)}{\partial x_1}$ ή $\frac{\partial h(x_2)}{\partial x_2}$ έχουν ρίζες στο διάστημα $x_1, x_2 \in [0, 1]$.

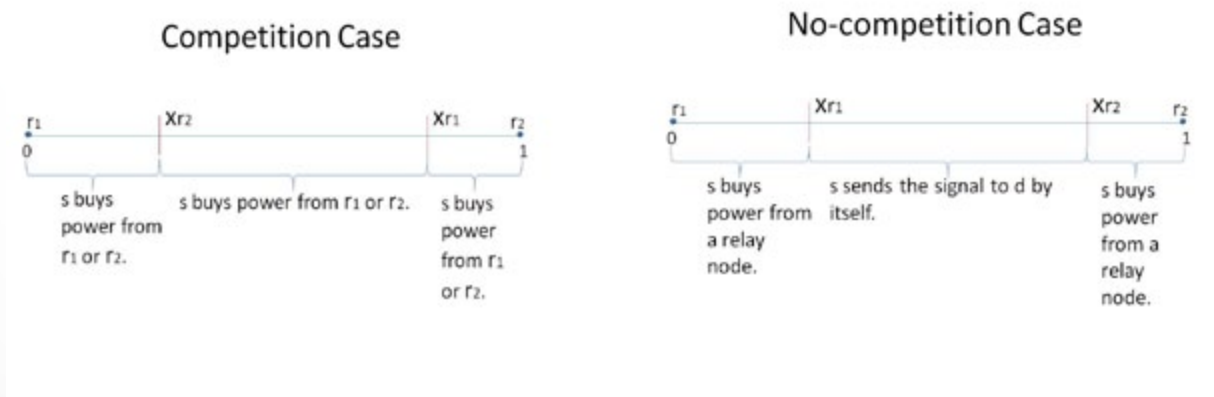
Εδώ, λόγω έλλειψης χώρου, θα εξετάσουμε σε βάθος μόνο την περίπτωση 1 και θα παρουσιάσουμε προσομοιώσεις για αυτήν. Όμως, οι συνθήκες για την ύπαρξη ανταγωνισμού και τα αποτελέσματα γενικά, προκύπτουν με παρόμοιο τρόπο και για τις άλλες περιπτώσεις, επίσης.

Έτσι, στο διάστημα $[0, x_{r1})$, αφού $\frac{\partial g(x_1)}{\partial x_1} > 0$ και ισχύει $g(x_{r1}) = 0$ (Εξ. (14)), τότε η $g(x_1)$ θα είναι αρνητική σε αυτό το διάστημα. Αυτό σημαίνει ότι η βέλτιστη επιλογή των πηγαίων κόμβων που βρίσκονται σε αυτό το διάστημα, είναι να αγοράσουν ισχύ από έναν εκ των δύο ενδιαμέσων κόμβων για να στείλουν το σήμα στον κόμβο-προορισμό και για να δούμε από ποιον από τους δύο ελέγχουμε το $x_{indifferent}$. Από την άλλη, στο διάστημα $(x_{r1}, 1]$, η $g(x_1)$ είναι θετική, το οποίο σημαίνει ότι οι πηγαίοι κόμβοι σε αυτό το διάστημα στέλνουν το σήμα στον προορισμό απευθείας.

Με την ίδια λογική, στο διάστημα $(x_{r2}, 1]$, οι πηγαίοι κόμβοι αγοράζουν ισχύ από έναν ενδιαμέσο κόμβο, ενώ στο διάστημα $[0, x_{r2})$ η βέλτιστη επιλογή είναι να στείλουν το σήμα στον προορισμό απευθείας.

Όλα αυτά μας οδηγούν στο συμπέρασμα ότι ανταγωνισμός μεταξύ των r_1 και r_2 **σε όλο το σύστημα** θα υπάρχει μόνο όταν υπάρχει μια περιοχή όπου η βέλτιστη επιλογή για τον πηγαίο κόμβο θα είναι να αγοράσει ισχύ από τον r_1 και τον r_2 **ταυτόχρονα**. Αυτό μπορεί να συμβεί μόνο αν το x_{r1} είναι στα δεξιά του x_{r2} (Εικ. 2). Με άλλα λόγια θα υπάρχει ανταγωνισμός αν το άθροισμα $x_{r1} + x_{r2}$ είναι μεγαλύτερο από το μήκος του οριζοντίου άξονα(ίσο με 1). Άρα, η συνθήκη για ύπαρξη ανταγωνισμού **σε όλο το σύστημα** είναι:

$$x_{r1} + x_{r2} \geq 1 \quad (23)$$



Εικόνα 2: Ανταγωνισμός σε όλο το σύστημα

Εικόνα 3: Δεν υπάρχει ανταγωνισμός σε όλο το σύστημα

Άρα, η γνώση των κρίσιμων θέσεων x_{r1} , x_{r2} μας οδηγούν στο συμπέρασμα για το αν υπάρχει ανταγωνισμός σε όλο το σύστημα, και σε συνδυασμό με τη γνώση του $x_{indifferent}$ στο να βρούμε την βέλτιστη επιλογή για κάθε πηγαίο κόμβο πάνω στον άξονα. Από την άλλη αν η Εξ. (23) δεν ικανοποιείται, τότε δεν υπάρχει ανταγωνισμός μεταξύ των r_1 και r_2 σε όλο το σύστημα (ανάμεσα στα X_{r1} και X_{r2} οι πηγαίοι κόμβοι στέλνουν απευθείας το σήμα) (Εικόνα 3).

Όσον αφορά τις άλλες τέσσερις περιπτώσεις, με την ίδια λογική μπορούμε να καταλήξουμε στις συνθήκες ανταγωνισμού.

6. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ

Σε αυτήν την ενότητα, θα παρουσιάσουμε τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων για την Περίπτωση 1, προκειμένου να καταλήξουμε σε χρήσιμες παρατηρήσεις σχετικά με την συμπεριφορά του μοντέλου.

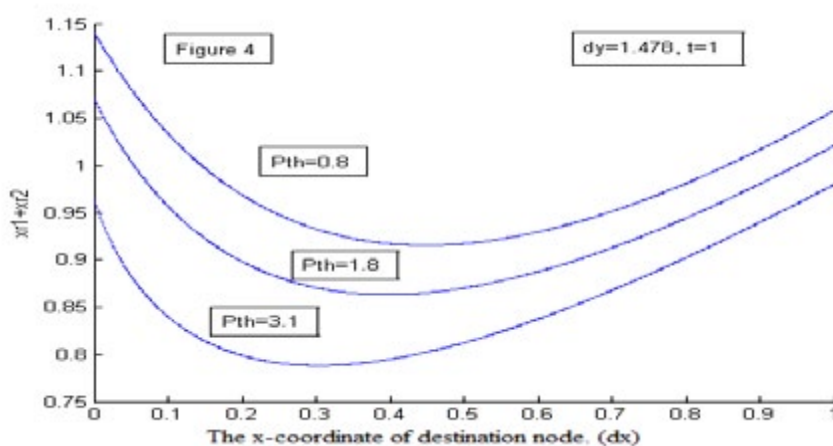
Οι μεταβλητές επιλέχθηκαν κατάλληλα, έτσι ώστε να εξασφαλίσουμε ότι οι Εξ. (13) και (17) είναι θετικές στις προσομοιώσεις που θα παρουσιάσουμε. Συγκεκριμένα, θέσαμε $c_1 = c_2 = c_3 = 0.1$. Ο κόμβος-προορισμός κινείται ενδιάμεσα από τις θέσεις $(0, dy)$ και $(1, dy)$ κατά μήκος της ευθείας που ορίζεται από αυτά τα δύο σημεία. Τα αποτελέσματα, όπως θα δείξουμε εξαρτώνται από τις τιμές τριών μεταβλητών. Η μία μεταβλητή είναι η απόσταση μεταξύ του πηγαίου κόμβου και του κόμβου-προορισμού (sd), και συγκεκριμένα η μεταβλητή dy (η y -συντεταγμένη του d), από την στιγμή που η dx παίρνει όλες τις τιμές στο διάστημα $[0,1]$. Η άλλη μεταβλητή είναι η ισχύς κατωφλίου P_{Th} και η τρίτη μεταβλητή που επηρεάζει τα αποτελέσματα είναι το κόστος μεταφοράς (*transportation cost*) t . Λόγω της περιπλοκότητας των Εξ. (21) και (22), θα χρησιμοποιηθεί μια αριθμητική μέθοδος για τον υπολογισμό των τιμών X_{r1} και X_{r2} . Αφού τα υπολογίσουμε, μπορούμε να ελέγξουμε αν ισχύει η Εξ. (23) για αυτές τις τιμές των X_{r1} και X_{r2} .

Όπως παρατηρούμε στην Εικόνα 4, όσο το P_{Th} αυξάνει, μειώνεται το άθροισμα $X_{r1} + X_{r2}$. Αυτό σημαίνει, πως για μια δεδομένη θέση του d , όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή του P_{Th} , η πιθανότητα να υπάρχει ανταγωνισμός σε όλο το σύστημα μειώνεται (το άθροισμα μικραίνει και είναι πιθανόν να είναι μικρότερο από την τιμή 1 και έτσι να μην ικανοποιείται η Εξ. (23)). Το αποτέλεσμα αυτό είναι λογικό, αφού ο πηγαίος κόμβος πρέπει να αγοράσει μεγαλύτερο ποσό ισχύος από έναν ενδιάμεσο κόμβο, καθώς το P_{Th} μεγαλώνει (βλέπε Εξ. (2) και (4)), για να στείλει το σήμα στον d . Δηλαδή, πρέπει να πληρώσει περισσότερο στον ενδιάμεσο κόμβο, οπότε είναι πιθανότερο να επιλέξει να στείλει το σήμα στον d απευθείας.

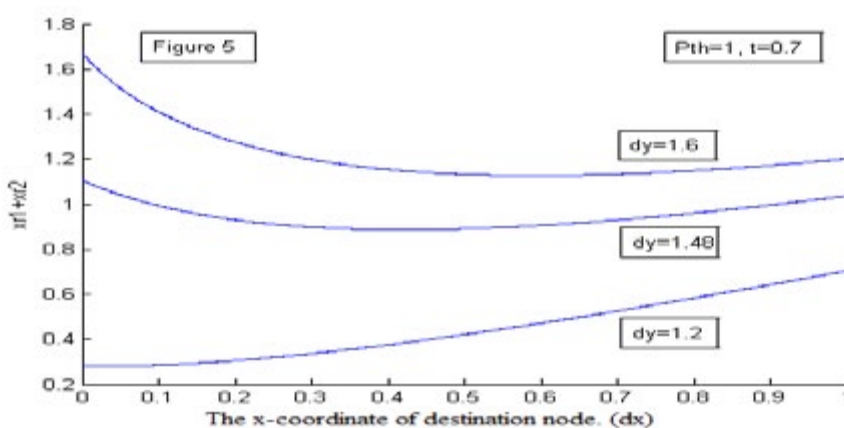
Όσον αφορά την απόσταση μεταξύ του πηγαίου κόμβου και προορισμού, η Εικ. 5 δείχνει ότι όσο το dy μειώνεται, και άρα και η απόσταση μεταξύ των s και d , είναι λιγότερο πιθανό να υπάρξει ανταγωνισμός σε όλο το σύστημα, αφού το άθροισμα $X_{r1} + X_{r2}$ βλέπουμε ότι μειώνεται. Αυτό είναι λογικό, γιατί αν ο πηγαίος κόμβος είναι κοντά στον προορισμό,

τότε το *συνολικό κόστος μεταφοράς (total transportation cost)* για να στείλει το σήμα ο *s* στον *d* θα είναι επίσης μικρό και έτσι είναι πιο πιθανό η βέλτιστη επιλογή για τον *s* να είναι να στείλει το σήμα στον προορισμό απευθείας.

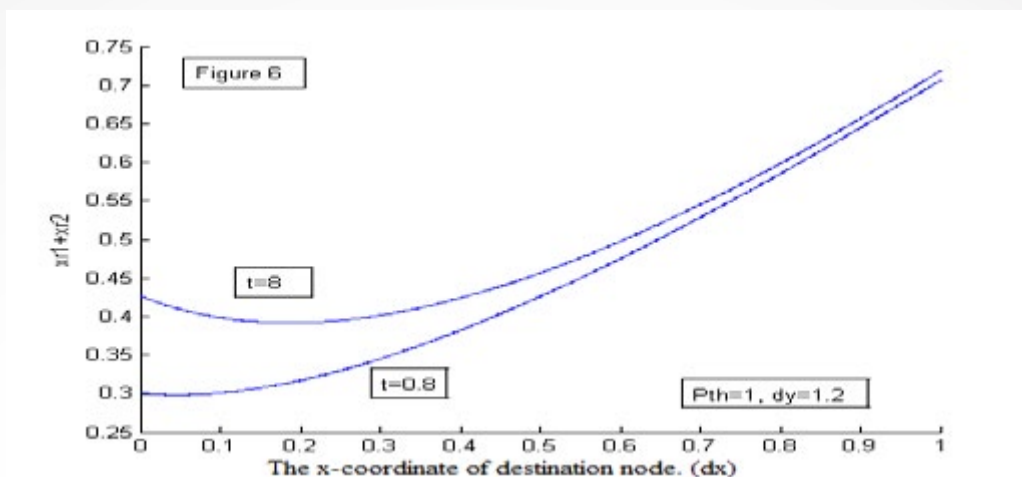
Η σχέση ανάμεσα στην ύπαρξη ανταγωνισμού σε όλο το σύστημα και στο *κόστος μεταφοράς (transportation cost)* φαίνεται στην Εικόνα 6. Φαίνεται ότι όσο το *κόστος μεταφοράς* αυξάνει, η ικανοποίηση της Εξ. (23) γίνεται πιο πιθανή. Αυτό σημαίνει ότι είναι και πιο πιθανή η ύπαρξη ανταγωνισμού σε όλο το σύστημα. Αυτό το αποτέλεσμα είναι λογικό γιατί, όσο αυξάνει το *κόστος μεταφοράς*, γίνεται ακριβότερη η άμεση αποστολή του σήματος και άρα, πιθανόν, αυτή η επιλογή να μην συμφέρει τον πηγαίο κόμβο.



Εικόνα 4: Το άθροισμα $x_{r1} + x_{r2}$ για διαφορετικά ποσά ισχύος κατωφλίου



Εικόνα 5: Το άθροισμα $x_{r1} + x_{r2}$ για διαφορετικές αποστάσεις ανάμεσα στον πηγαίο κόμβο και στον προορισμό



Εικόνα 6. Το άθροισμα $x_{r1} + x_{r2}$ για διαφορετικές τιμές του κόστους μεταφοράς (transportation cost)

7. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Αναπτύχθηκε και μελετήθηκε ένα πλαίσιο για την έρευνα των συνθηκών ανταγωνισμού μεταξύ των ενδιάμεσων κόμβων σε ένα συνεργατικό ασύρματο δίκτυο εκμεταλλευόμενοι το μοντέλο του Hotelling.

Η προσέγγιση αυτή δεν απαιτεί Πληροφορία Κατάστασης Καναλιού (CSI) να ανταλλαχθεί μεταξύ των κόμβων του δικτύου, και προσφέρει έναν γρήγορο τρόπο για την επιλογή της βέλτιστης απόφασης για έναν πηγαίο κόμβο χωρίς πολύπλοκους υπολογισμούς στα τερματικά του δικτύου (όπως π.χ. επαναληπτικούς αλγορίθμους).

Τέλος, τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων δείχνουν ότι η προσέγγιση είναι λογική και μπορεί να εκμεταλλευθεί για την ανάπτυξη τιμολογιακών στρατηγικών (pricing strategies) σε ένα ασύρματο συνεργατικό δίκτυο. Μελλοντική έρευνα στο θέμα μπορεί να εστιάσει στην ανάλυση του κόστους μεταφοράς (transportation cost) με έναν πιο τεχνικό τρόπο, καθώς και στην εκμετάλλευση της ανάλυσης αυτής για το σχεδιασμό πρωτοκόλλων για ασύρματα συνεργατικά δίκτυα.

ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- [1] M. O. Hasna and M. S. Alouini, "Optimal power allocation for relayed transmissions over Rayleigh-fading channels," *IEEE Trans Wireless Comm.*, vol. 3, no 6, pp. 1999-2004, 2004.
- [2] W. Su, A. Sadek, and K. Ray Liu, "Cooperative Communication Protocols in Wireless Networks: Performance Analysis and Optimum Power Allocation," *Wireless Personal Comm.*, vol. 44, no 2, pp. 181-217, 2008.
- [3] I. Maric and R. D. Yates, "Cooperative multihop broadcast for wireless networks," *IEEE JSAC*, vol. 22, no 6, pp. 1080-1088, 2004.
- [4] A. S. Ibrahim, A. K. Sadek, S. Weifeng, and K. J. R. Liu, "Cooperative communications with relay-selection: when to cooperate and whom to cooperate with?," *IEEE Trans Wireless Comm.*, vol. 7, no 7, pp. 2814-2827, 2008.
- [5] Hotelling, H., 1929. Stability in competition. *Economic Journal* 39(154) 41-57
- [6] A. K. Sadek, W. Su, and K. J. R. Liu, "Multinode Cooperative Communications in Wireless Networks," *IEEE Trans. Signal Processing*, vol. 55, no 1, pp. 341-355, 2007.
- [7] S. Savazzi and U. Spagnolini, "Energy aware power allocation strategies for multihop-cooperative transmission schemes," *IEEE JSAC*, vol. 25, no 2, pp. 318-327, 2007.
- [8] B. Wang, Z. Han, and K. J. R. Liu, "Distributed Relay Selection and Power Control for Multiuser Cooperative Communication Networks Using Stackelberg Game," *IEEE Transactions on Mobile Computing*, vol. 8, no 7, pp. 975-990, 2009.
- [9] S. Wei, D. L. Goeckel, and M. C. Valenti, "Asynchronous cooperative diversity," *IEEE Trans Wireless Comm.*, vol. 5, no 6, pp. 1547-1557, 2006.

Αυτοματοποιημένη Συναρμολόγηση Πρωτεϊνών από Βιβλιοθήκες Άκαμπτων Τμημάτων

Χαριτούδη Κωνσταντινιά

grad1042@di.uoa.gr

*Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών,
Πανεπιστημιούπολη, Ιλίσια, 15784, Αθήνα, Ελλάδα*

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Μελετάμε έναν αλγόριθμο συναρμολόγησης για την αυτοματοποιημένη δόμηση πρωτεϊνών με σκοπό την ακριβή αναπαράστασή τους, η οποία βασίζεται στους άνθρακες Ca του σκελετού των πρωτεϊνών. Γι' αυτό το λόγο, χρησιμοποιούμε βιβλιοθήκες με τμήματα πρωτεϊνών μικρού μήκους (σε αριθμό καταλοίπων), οι οποίες αποδεικνύεται ότι μπορούν να αναπαραστήσουν με ακρίβεια όλες τις φυσικές πρωτεΐνες, μέσω συναρμολόγησης. Υλοποιήσαμε σε Matlab μια ρουτίνα συναρμολόγησης, βασισμένη αλλά ελαφρώς διαφορετική από αυτή στο άρθρο των Guibas, Levitt και λοιπών, «Small Libraries of Protein Fragments Model Native Protein Structures Accurately», με σκοπό να αναπαράγουμε και να ελέγξουμε τα αποτελέσματά τους, καθώς και να μελετήσουμε την ευαισθησία της μεθόδου στα δεδομένα, αλλά και τη χρονική και χωρική της πολυπλοκότητα. Τα συμπεράσματά μας παρουσιάζουν ομοιότητες όσο και διαφορές από αυτά της προαναφερθείσας έρευνας.

Λέξεις κλειδιά: *Αυτοματοποιημένη δόμηση πρωτεϊνών, Κατάλοιπα, Μιμούμενη Ανόπτηση, Αλγόριθμος χτισίματος*

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ:

Εμίρης Ιωάννης, Καθηγητής, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών - ΕΚΠΑ

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η πρόβλεψη της πρωτεϊνικής δομής, δηλαδή η εξέλιξη της διαδικασίας διπλώματος στην οποία υπόκειται η πρωτεϊνική ακολουθία μέχρι να καταλήξει στον βιολογικά ενεργό σχηματισμό της, έχει αποτελέσει θέμα έρευνας δεκαετιών. Κατά το πλείστον, οι προβλέψεις αυτές εξαρτώνται από τα μοντέλα αναπαράστασης που χρησιμοποιούνται, την πολυπλοκότητά τους και την ακρίβειά τους. Ο πιο απλός τρόπος για την απλοποίηση των πρωτεϊνικών δομών είναι η επιβολή περιορισμών στις διαμορφώσεις της κεντρικής αλυσίδας. Σκοπός της προσπάθειας αυτοματοποίησης της αναπαράστασης της τριτοταγούς δομής των πρωτεϊνών είναι η διευκόλυνση της μελέτης τους και η πρόβλεψη των μετασχηματισμών τους με σκοπό την παραγωγή φαρμάκων και όχι μόνο.

Η συγκεκριμένη εργασία βασίζεται κυρίως στη δουλειά των Guibas, Levitt και λοιπών και πιο συγκεκριμένα στο άρθρο τους «Small Libraries Of Protein Fragments Model Native Protein Structures Accurately» [1] και εξετάζει την κατασκευή μιας βιβλιοθήκης πεπερασμένου αριθμού πρωτεϊνικών τμημάτων με απώτερο σκοπό να χρησιμοποιηθούν στην κατασκευή διακριτών πρωτεϊνικών μετασχηματισμών με μεγάλη ακρίβεια. Αυτό δεν είναι εύκολο γιατί το πρόβλημα είναι συνδυαστικό, με εκθετική πολυπλοκότητα, επομένως για μείωση του χώρου εξερεύνησης χρειάζεται να χρησιμοποιήσουμε κάποιους περιορισμούς. Πρώτον, μειώνουμε τους τοπικούς σχηματισμούς του κάθε καταλοίπου σε περιορισμένο αριθμό, έτσι ώστε κάθε αλυσίδα ως σύνολο να έχει έναν αριθμό μετρήσιμων χωρικών διατάξεων που να μπορούν να διερευνηθούν. Δεύτερον, χρησιμοποιούμε την παρατήρηση των Rooman, Park & Levitt, οι οποίοι απέδειξαν ότι τα μοντέλα που λαμβάνουν υπόψη την άνιση κατανομή των (φ,ψ) γωνιών των μετασχηματισμών του κάθε καταλοίπου είναι πιο ακριβή για καθορισμένη πολυπλοκότητα (αριθμός επιτρεπτών καταστάσεων ανά κατάλοιπο). Έτσι η πολυπεπτιδική αλυσίδα αναπαρίσταται σαν μια ακολουθία σταθερών αντιπροσωπευτικών τμημάτων τα οποία συνενώνονται χωρίς βαθμούς ελευθερίας.

Για την κατασκευή της βιβλιοθήκης και την εξαγωγή αντιπροσώπων, χρησιμοποιείται μια καινοτόμος παραλλαγή μιας μεθόδου συσταδοποίησης, γνωστή ως simulated annealing k-means. Πρόκειται για τον γνωστό αλγόριθμο συσταδοποίησης k-means, παραλλαγμένο με χρήση Monte Carlo μεθόδων και με την επίσης γνωστή από τη φυσική μέθοδο της προσομοιούμενης ανόπτησης (simulated annealing). Οι φυσικές δομές δεν διαφοροποιούνται συνεχώς, αλλά συσπειρώνονται σε ομάδες, από τις οποίες μπορούμε να διεξάγουμε αντιπροσώπους, οι οποίοι βέλτιστα συγκεντρώνουν τα γεωμετρικά και τοπολογικά χαρακτηριστικά της ομάδας. Έτσι προσπαθούμε να κατασκευάσουμε το μικρότερο σύνολο τμημάτων που είναι βέλτιστο για να αντιπροσωπεύσει όλα τα ολιγομερή (minimal set).

Στο τέλος, χρησιμοποιείται ένας αλγόριθμος συναρμολόγησης πρωτεϊνών με χρήση των τμημάτων της προκατασκευασμένης βιβλιοθήκης. Εκτός από έναν τρόπο αναπαραγωγής και μελέτης των πρωτεϊνών, που είναι και το ζητούμενο, ο αλγόριθμος προσφέρει έναν τρόπο αξιολόγησης της βιβλιοθήκης. Ουσιαστικά χρησιμοποιείται για να ταιριάξει τις πρωτεΐνες στις δομές που μας παρέχει γι' αυτές η κρυσταλλογραφία ακτινών Χ. Κατ' αυτόν

τον τρόπο, μελετάται και η σχέση ακρίβειας και πολυπλοκότητας των μοντέλων αναπαράστασης, η οποία έχει βρεθεί να είναι περίπου $(\text{Ακρίβεια})^\infty (\text{Πολυπλοκότητα})^x$ [2]. Επίσης, μερικά ακόμη αποτελέσματα σχετικών ερευνών είναι ότι με μερικές δεκάδες τμήματα μήκους 5 – 6 πεπτιδίων μπορούν να αναπαρασταθούν όλες οι πρωτεΐνες [3]. Η τρισδιάστατη δομή των πρωτεϊνών μετατρέπεται σε μια συμβολοσειρά που αναπαριστά τις τοπικές καταστάσεις. Η ομάδα αυτή των αντιπροσώπων καθορίζει το χώρο των μετασχηματισμών πλήρως καθώς όλοι οι πιθανοί σχηματισμοί μπορούν να παραχθούν από όλες τις πιθανές συμβολοσειρές.

2. ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΣΥΣΤΑΔΟΠΟΙΗΣΗΣ

Σκοπός είναι να γίνει μια εξαντλητική συσταδοποίηση διαφορετικών τοπικών μοτίβων για να χρησιμοποιηθούν στην εξονυχιστική εξερεύνηση του χώρου των βιώσιμων πρωτεϊνών. Γι' αυτό το λόγο, χρησιμοποιείται μια μέθοδος συσταδοποίησης η οποία θα πετύχει το βέλτιστο διαχωρισμό σε κλάσεις ομοιότητας και θα εξαχθούν μετά από αυτές οι καλύτεροι αντιπρόσωποι. Ένα μεγάλο προσόν αυτής της μεθόδου είναι ότι χρησιμοποιεί εκτενώς τα καλύτερα κριτήρια, βασισμένα στην εκ των προτέρων γνώση για τη συσταδοποίηση. Ανήκει δηλαδή, στην κατηγορία αλγόριθμων μη εποπτευόμενης μάθησης (unsupervised learning).

Ο αλγόριθμος που χρησιμοποιείται εδώ, είναι μια παραλλαγή του γνωστού $k - \text{means}$, ονομάζεται *simulated annealing $k - \text{means}$* και τον χρησιμοποιούμε για να ομαδοποιούμε κάθε φορά τμήματα ίδιου μήκους. Η διαφορά του από τον κλασικό είναι ότι χρησιμοποιεί τη μέθοδο *simulated annealing* για να βελτιστοποιήσει τα κέντρα των κλάσεων. Ο *simulated annealing $k - \text{means}$* τρέχει επαναλαμβανόμενα τον $k - \text{means}$ και μετά συνενώνει δύο κλάσεις και χωρίζει δύο άλλες με Monte Carlo τρόπο. Η μετρική που αποδείχθηκε να αποδίδει καλύτερα είναι η ολική διακύμανση της κλάσης (το ολικό άθροισμα σε όλες τις κλάσεις των τετραγώνων των αποστάσεων των τμημάτων με το κέντρο της κλάσης στην οποία ανήκουν). Αυτή η παραλλαγή ξεπερνά τον κλασικό αλγόριθμο, στο ότι μπορεί να αντιμετωπίσει ένα ευρύ φάσμα από συσπειρώσεις τμημάτων (υπάρχουν για παράδειγμα πολύ περισσότερες $\alpha - \text{έλικες}$), και στο ότι δεν επηρεάζεται από τα αρχικά κέντρα.

Ο *simulated annealing $k - \text{means}$* , βάση έρευνας που έχει προηγηθεί, είναι ο καλύτερος αλγόριθμος για τη συσταδοποίηση των τμημάτων, αφού αποδίδει σαφώς καλύτερα από άλλους αλγόριθμους, όπως ο ιεραρχικός ή ακόμη και ο κλασικός $k - \text{means}$. Είναι καλύτερος από τους άλλους κατά δύο μέτρα:

- 1) την ολική διακύμανση των αποτελεσμάτων και
- 2) τη μέση *c.r.m.s* απόκλιση των προσεγγίσεων των τοπικών δομών των πρωτεϊνών, στο σετ δοκιμής που φτιάχτηκε από τη βιβλιοθήκη που παράγεται σαν αποτέλεσμα.

Η διαδικασία που ακολουθεί ο αλγόριθμος χωρίς τις παραλλαγές είναι, να διαλέγει τυχαία αρχικά κέντρα εκκίνησης και με βάση κάποια μετρική να τα επαναπροσδιορίζει καλύτερα,

μέχρι τα κέντρα να μην κινούνται άλλο, οπότε και δίνει και τις τελικές συστάδες. Στη δική μας περίπτωση, η μετρική είναι η c.r.m.s απόσταση δύο τμημάτων X και Y με μήκος N.

$$\sigma(X, Y) = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^N |r_k^{C\alpha}(X) - r_k^{C\alpha}(Y)|^2}{N}}$$

Η ιδέα βέβαια της απόστασης μεταξύ δύο τμημάτων X και Y έχει νόημα μόνο αν τα τμήματα έχουν πρώτα υπερτεθεί με τη μέθοδο του Kabsch. Αυτό είναι και το πιο ακριβό υπολογιστικά βήμα σε όλη τη μέθοδο καθώς απαιτεί την εφαρμογή του αλγόριθμου του Kabsch για κάθε ζευγάρι τμημάτων.

Μετά την εφαρμογή του αλγόριθμου κι έχοντας πια τις συστάδες, εξάγονται τα αντιπροσωπευτικά τμήματα με τα οποία κατασκευάζεται η βιβλιοθήκη. Ως αντιπρόσωπο μιας συστάδας θεωρούμε το κέντρο της. Είναι τα τμήματα που σε μια συγκεκριμένη ακτίνα γύρω τους συγκεντρώνουν τους περισσότερους γείτονες. Αυτά είναι και τα τμήματα που μπορούν καλύτερα να αντιπροσωπεύσουν τις συστάδες καθώς αντιπροσωπεύουν καλύτερα την τοπολογία και τα χαρακτηριστικά όλων των υπολοίπων.

Το βασικό πλεονέκτημα αυτής της μεθόδου είναι ότι με μέτρια υπολογιστική προσπάθεια, αφού η c.r.m.s υπολογίζεται μόνο μια φορά για όλα τα ζευγάρια, κάποιος έχει και τις υποδιαίρέσεις σε συστάδες και τους αντιπροσώπους και μάλιστα σε σειρά προτεραιότητας. Οι καλύτεροι αντιπρόσωποι με τους μεγαλύτερους βαθμούς εγγύτητας είναι λογικό να είναι τα πιο κοινά δομικά μοτίβα, όπως έλικες και φύλλα. Οι λιγότερο συχνοί αντιπρόσωποι αντιστοιχούν στις πιο άτυπες τοπικές δομές μιας πρωτεΐνης.

3. ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΤΗΣ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗΣ

Μια βιβλιοθήκη θεωρείται καλή αν μπορεί να αναπαραστήσει τις πραγματικές πρωτεϊνικές δομές με ακρίβεια. Τα κριτήρια αξιολόγησης της βιβλιοθήκης είναι:

- 1) τοπικό ταίριασμα (δηλαδή η ικανότητα διατήρησης της φυσικής δευτεροταγούς δομής) και
- 2) ολικό ταίριασμα (δηλαδή πόσο κοντά είναι το μοντέλο που κατασκευάζουμε από αυτό το σετ στις συντεταγμένες της αντίστοιχης πρωτεΐνης, σύμφωνα με τις συντεταγμένες που μας δίνει η PDB μετά από κρυσταλλογραφία ακτινών X).

Πιο αναλυτικά, με τον όρο τοπικό ταίριασμα εννοούμε, πόσο καλά η βιβλιοθήκη αναπαριστά τις τοπικές δευτεροταγής δομές στο δοκιμαστικό σετ. Κάθε πρωτεΐνη έχει σπάσει σε τμήματα μήκους ίδιου με αυτό των τμημάτων της βιβλιοθήκης. Το καλύτερο τοπικό ταίριασμα για κάθε πρωτεΐνη κατασκευάζεται σε γραμμικό χρόνο, βρίσκοντας για τα τμήματα κάθε πρωτεΐνης τα τμήματα που ταιριάζουν καλύτερα από τη

βιβλιοθήκη με όρους c.r.m.s. Ο μέσος όρος όλων των c.r.m.s όλων των τμημάτων όλων των πρωτεϊνών είναι η βαθμολόγηση του τοπικού ταιριάσματος για τη βιβλιοθήκη.

Με τον όρο ολικό ταίριασμα εννοούμε, το πόσο καλά μπορεί η βιβλιοθήκη να αναπαραστήσει τις τρισδιάστατες δομές των πρωτεϊνών στο δοκιμαστικό σετ. Ο τρόπος κατασκευής συναφών τρισδιάστατων δομών που ακολουθούν οι συγγραφείς είναι με την υπέρθεση των πρώτων τριών C_α του κάθε προστιθέμενου τμήματος στους τελευταίους τρεις C_α του τμήματος που προηγείται στο κομμάτι που έχει ήδη κατασκευαστεί. Ακόμη κι αν αυτές οι τριπλέτες δεν ταιριάξουν απόλυτα, ο προσανατολισμός του τμήματος θα έχει προσδιοριστεί μοναδικά, αν θεωρήσουμε πως τα τρία άτομα άνθρακα δεν θα είναι συνευθειακά.

Στη δική μας εργασία η προσέγγιση είναι διαφορετική. Δεν ακολουθούμε τη διαδικασία της υπέρθεσης. Μετά το τοπικό ταίριασμα κι αφού ξέρουμε ποιά τμήματα ταιριάζουν καλύτερα με κάθε ένα τμήμα της πρωτεΐνης μας, βρίσκουμε τον προσανατολισμό του τμήματος της αρχικής πρωτεΐνης και περιστρέφουμε το τμήμα της βιβλιοθήκης μας ώστε να έχει το σωστό προσανατολισμό. Αυτό επιτυγχάνεται ως εξής, συγκρίνουμε αποστάσεις σε τριπλέτες ανθράκων C_α για να βρούμε πως πρέπει να περιστραφεί το τμήμα της βιβλιοθήκης ώστε να έχει τον ίδιο προσανατολισμό με το τμήμα της αρχικής πρωτεΐνης, βρίσκουμε δυο ορθοκανονικές βάσεις, μία για το τμήμα της βιβλιοθήκης και μία για το τμήμα της αρχικής πρωτεΐνης, και μετά πολλαπλασιάζουμε το τμήμα της βιβλιοθήκης με τους κατάλληλους πίνακες ώστε τα δύο τμήματα να βρεθούν στο ίδιο σύστημα συντεταγμένων και να έχει πραγματοποιηθεί και η περιστροφή. Στο τέλος, απλώς συνενώνουμε τα τμήματα το ένα δίπλα στο άλλο για την κατασκευή της τελικής πρωτεΐνης.

4. ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΣΥΝΑΡΜΟΛΟΓΗΣΗΣ

Οι καλύτερες προσεγγίσεις σε τοπικό επίπεδο είναι εύκολο να βρεθούν και μάλιστα σε γραμμικό χρόνο. Οι καλύτερες προσεγγίσεις σε ολικό επίπεδο όμως, είναι πιο δύσκολο να βρεθούν. Η βέλτιστη ακολουθία από τα τμήματα της βιβλιοθήκης πρέπει να προσδιορίζει την τρισδιάστατη δομή με τη μικρότερη δυνατή c.r.m.s απόκλιση από την πραγματική πρωτεΐνη στόχο. Το πλήθος των πιθανών ακολουθιών τμημάτων είναι εκθετικό στο μήκος της πρωτεΐνης και γι' αυτό το λόγο, δυστυχώς, δεν είναι δυνατό να ερευνηθούν όλες για να βρεθεί η καλύτερη προσέγγιση σε ολικό επίπεδο.

Ακολουθώντας τα βήματα των Park & Levitt [2], χρησιμοποιείται ένας άπληστος (greedy) αλγόριθμος για να βρεθεί μια καλή ολική προσέγγιση έναντι της καλύτερης. Έστω f το μήκος των τμημάτων στη βιβλιοθήκη. Ξεκινώντας από το τελευταίο N στην αλυσίδα που έχει κατασκευαστεί ως ενός σημείου, επεκτείνεται με τις καλύτερες N_{keep} προσεγγίσεις από τη βιβλιοθήκη, δηλαδή αυτά που δίνουν τη μικρότερη c.r.m.s με το αντίστοιχο τμήμα της πρωτεΐνης. Σε κάθε βήμα επεκτείνονται αυτοί οι N_{keep} σχηματισμοί με όλα τα τμήματα της βιβλιοθήκης, και μετά φυλάσσονται και πάλι οι N_{keep} καλύτεροι. Η επέκταση γίνεται υπερθέτοντας τα τρία πρώτα κατάλοιπα του τμήματος που προστίθενται στα τρία

τελευταία κατάλοιπα της κατασκευασμένης αλυσίδας, έτσι ώστε κάθε φορά να προστίθενται στην αλυσίδα $f - 3$ κατάλοιπα. Η διαδικασία που τερματίζει όταν φτάσει στον τελευταίο C της πρωτεΐνης στόχο, είναι ντετερμινιστική και παίρνει γραμμικό χρόνο.

Σ' αυτή τη μελέτη, στη θέση της c.r.m.s χρησιμοποιούμε την ενεργό ρίζα των τετραγώνων των αποστάσεων των C_α στην ίδια την πρωτεΐνη (d.r.m.s), ως μετρική των προσεγγίσεων, προς αποφυγήν υπέρθεσης των συντεταγμένων που είναι απαραίτητη για το προηγούμενο μέτρο.

$$d.r.m.s = \left(\frac{\sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n (|r_{\alpha i} - r_{\alpha j}| - |r_{b i} - r_{b j}|)^2}{(n(n-1))/2} \right)^{1/2}$$

όπου, n το μήκος της πρωτεΐνης και r_a και r_b είναι οι συντεταγμένες των ανθράκων α (C_α) των κομματιών της βιβλιοθήκης και της πρωτεΐνης αντίστοιχα.

Η μόνη ουσιώδης διαφορά ανάμεσα στα δύο μέτρα είναι ότι η c.r.m.s μετρά την ομοιότητα των ατομικών θέσεων, ενώ η d.r.m.s μετρά την ομοιότητα των διατομικών αποστάσεων. Γι' αυτό το πρώτο μέτρο είναι συνήθως μεγαλύτερο από το δεύτερο και είναι ανεξάρτητο των συστημάτων συντεταγμένων που βρίσκονται οι πρωτεΐνες. Όπως αναφέρεται και στο άρθρο των Park & Levitt [2] η αλλαγή αυτή μετρικής δεν επηρεάζει ουσιαστικά τη διαδικασία.

Έχοντας ως δεδομένα τα παραπάνω κατασκευάσαμε τον αλγόριθμο που ακολουθεί:

1. Input: fr_len = length of fragments, pr_len = length of proteins (how many fragments), Nkeep

Read from file the coordinates of the fragments and the proteins

2. for $i=1(1)pr_len$ (pr_len is the length of the protein in fragments)

2.1 for $j=1(1)no_of_frag$ (no_of_frag is the number of fragments in the library)

$$2.1.1 \quad d_{rms}(j) = \left(\frac{\sum_{count1=1}^{fr_len-1} \sum_{count2=count1+1}^{fr_len} (|r_{acount1} - r_{acount2}| - |r_{bcount1} - r_{bcount2}|)^2}{(fr_len(fr_len-1))/2} \right)^{1/2}$$

2.2. Compare and keep the Nkeep better fragments.

3. for all possible $Nkeep^{pr_len}$ combinations of proteins.

3.1 for each fragment

3.1.1 Compare triplets with the original protein

3.1.2 Sort and find the best combinations of sides in order to define orientation

3.1.3 Make orthonormal bases and rotate the fragment

3.2 Concatenate the fragments in order to build each protein

4. Output: From all possible built combinations, compare and keep the best protein (best global fit)

$$d_{rms}(i) = \left(\frac{\sum_{count1=1}^{(pr_len*fr_len)-1} \sum_{count2=count1+1}^{pr_len*fr_len} (|r_{acount1} - r_{acount2}| - |r_{bcount1} - r_{bcount2}|)^2}{((pr_len * fr_len)(pr_len * fr_len) - 1) / 2} \right)^{1/2}$$

Make orthonormal bases and rotate the fragment:

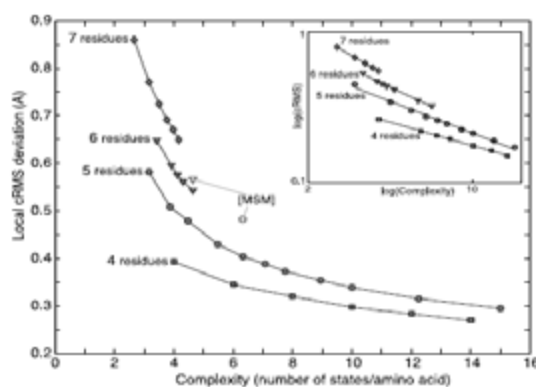
1. Normalize v_1 from the library fragment and complete to an orthonormal basis $\{v_1, v_2, v_3\}$ (find v_2, v_3 linearly independent and use gram-schmidt process to orthonormalize).
2. Normalize w_1 from the fragment of the original protein and complete to an orthonormal basis $\{w_1, w_2, w_3\}$
3. Form the matrix V whose column are the vectors v_i . Compute the determinant. If it is -1 , switch columns 2 and 3
4. Form the matrix W whose columns are the w_i . Compute the determinant. If it is -1 , switch columns 2 and 3 (These are the matrices that send the standard orthonormal basis e_1, e_2, e_3 to v_1, v_2, v_3 and w_1, w_2, w_3 respectively by a rotation)
5. Invert the matrix V . Then WV^{-1} is a matrix that sends the v_i to w_i by a rotation

Ο αλγόριθμος συγκεντρώνει τα δεδομένα που χρειάζεται και για κάθε τμήμα της πρωτεΐνης που χτίζεται εξετάζονται ως υποψήφια όλα τα τμήματα που βρίσκονται στη βιβλιοθήκη και επιλέγονται τα N_{keep} καλύτερα. Επειδή συνήθως τα τμήματα δεν βρίσκονται στην κατάλληλη θέση σε σχέση με τα αντίστοιχα τμήματα της πρωτεΐνης στόχο, τα περιστρέφουμε πρώτα έτσι ώστε να έχουν τον ίδιο προσανατολισμό και μετά χτίζουμε την πρωτεΐνη. Ως έξοδο ο αλγόριθμος εξερευνά όλους τους $N_{keep}^{pr_len}$ συνδυασμούς πρωτεϊνών που προκύπτουν κι επιλέγει τον καλύτερο. Να σημειωθεί ότι στο τελευταίο βήμα συμμετέχουν όλοι οι άνθρακες α (C_α) κατά μήκος όλης της πρωτεΐνης.

5. ΑΚΡΙΒΕΙΑ & ΠΟΛΥΠΛΟΚΟΤΗΤΑ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΥ

Η ακρίβεια είναι ένα από τα κριτήρια που χρησιμοποιούμε για την αξιολόγηση των μοντέλων αναπαράστασης που κατασκευάζουμε. Υποδεικνύει πόσο ακριβής είναι η αναπαράστασή μας ως προς την πραγματική πρωτεΐνη. Υπάρχουν δύο τρόποι να μετρηθεί η ομοιότητα αυτή. Ο πρώτος αφορά το τοπικό επίπεδο, δηλαδή τα τοπικά μοτίβα δευτεροταγούς δομής και ονομάζεται local fit – τοπικό ταίριασμα. Σαν ένα ορισμό μπορούμε να πούμε ότι μετράει την απόκλιση της ενεργούς ρίζας των τετραγώνων των συντεταγμένων (c.r.m.s) όλων των τμημάτων της πρωτεΐνης στόχο με τα τμήματα της βιβλιοθήκης. Οι τοπικές αυτές προσεγγίσεις, δηλαδή οι δευτεροταγείς δομές, παρουσιάζουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον γιατί μέσα από αυτές αναζητούμε μια λίστα από τμήματα που μπορούν να αντιπροσωπεύσουν όλα τα τμήματα γνωστών πρωτεϊνών.

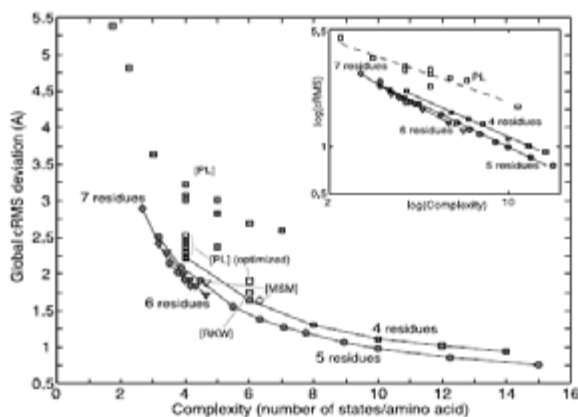
Στην Εικόνα 1 βλέπουμε μια αναπαράσταση των αποτελεσμάτων ακρίβειας για τις καλύτερες τοπικές προσεγγίσεις όλων των βιβλιοθηκών συναρτήσει της πολυπλοκότητας. Είναι εμφανές ότι οι πρωτεΐνες στο δοκιμαστικό σετ μπορούν να αναπαρασταθούν πολύ καλά από τις βιβλιοθήκες εφόσον η μέση c.r.m.s απόκλιση είναι σε όλες τις περιπτώσεις μικρότερη του 1 Å. Όπως μπορούμε να δούμε για βιβλιοθήκες με σταθερό μήκος τμημάτων, η ακρίβεια των τοπικών προσεγγίσεων βελτιώνεται, όταν η πολυπλοκότητα της βιβλιοθήκης αυξάνεται. Διαισθητικά αυτό είναι λογικό καθώς μια βιβλιοθήκη με μεγαλύτερη ποικιλία θα ταίριαζε τα τμήματα στις πρωτεΐνες του δοκιμαστικού σετ καλύτερα. Για βιβλιοθήκες της ίδιας πολυπλοκότητας, η ακρίβεια των τοπικών προσεγγίσεων βελτιώνεται, με μικρότερα τμήματα. Επίσης διαισθητικά, τα μικρότερα τμήματα θα δίνουν καλύτερες τοπικές προσεγγίσεις αφού εμπλέκονται λιγότερα άτομα C_α σε κάθε σύγκριση μεταξύ τμημάτων.



Εικόνα 1: Η μέση τοπική c.r.m.s απόκλιση αναπαρίσταται συναρτήσει της πολυπλοκότητας

Ο δεύτερος τρόπος μέτρησης της ακρίβειας της αναπαράστασης ως προς την πραγματική πρωτεΐνη αφορά το ολικό ταίριασμα της κατασκευασθείσας πρωτεΐνης με την πραγματική. Σαν ένα ορισμό της έννοιας global fit – ολικό ταίριασμα, μπορούμε να πούμε ότι μετρά την ενεργό ρίζας των τετραγώνων των συντεταγμένων (c.r.m.s) της ανακατασκευασμένης τρισδιάστατης δομής από ολόκληρη τη φυσική δομή της

πρωτεΐνης στόχο. Η Εικόνα 2 αναπαριστά τα αποτελέσματα ακρίβειας για τις καλύτερες ολικές προσεγγίσεις όλων των βιβλιοθηκών συναρτήσει της πολυπλοκότητας και μας βοηθάει να αποκτήσουμε επίγνωση της σχέσης μεταξύ βιβλιοθηκών με σταθερό μήκος τμημάτων και κυμαινόμενης πολυπλοκότητας και της σχέσης μεταξύ βιβλιοθηκών σταθερής πολυπλοκότητας και κυμαινόμενου μήκους τμημάτων. Βιβλιοθήκες μεγαλύτερης πολυπλοκότητας προσφέρουν καλύτερες ολικές προσεγγίσεις. Η πολυπλοκότητα των βιβλιοθηκών με σταθερό μήκος τμημάτων εξαρτάται από τον αριθμό των τμημάτων στη βιβλιοθήκη και βιβλιοθήκες με μεγαλύτερη ποικιλία θα αποφέρουν πιο ακριβείς προσεγγίσεις. Για σταθερή πολυπλοκότητα από την άλλη, βιβλιοθήκες με τμήματα μεγαλύτερου μήκους δίνουν καλύτερες ολικές προσεγγίσεις.



Εικόνα 2: Η μέση ολική c.r.m.s απόκλιση αναπαρίσταται συναρτήσει της πολυπλοκότητας

Προκειμένου να υλοποιήσουμε υπολογιστικά τις ολικές προσεγγίσεις, χρειαζόμαστε ένα σωρό που θα φυλάσσουμε τις καλύτερες μέχρι στιγμής υπαρκτές, κατά τη διάρκεια της συναρμολόγησης. Το μέγεθος του σωρού θα πρέπει να παρέχει μια ισορροπία μεταξύ του στόχου για εξερεύνηση όσο το δυνατόν μεγαλύτερου μέρους του χώρου των προσεγγίσεων και του χρόνου εκτέλεσης, καθώς και των περιορισμών μνήμης. Ο αριθμός των δυνατών ολικών προσεγγίσεων μιας πρωτεΐνης στόχου είναι εκθετικός στο μήκος της πρωτεΐνης, γι' αυτό και η εξερεύνησή του είναι αδύνατη. Έτσι εξερευνούμε μόνο τις N_{keep} προσεγγίσεις, με N_{keep} το μέγεθος του σωρού. Ως προς το μέγεθος του σωρού ο χρόνος εκτέλεσης είναι γραμμικός $O(N_{keep} \cdot n|L|)$, ενώ ο χώρος που απαιτείται στη μνήμη είναι $O(N_{keep})$.

6. ΜΕΤΡΗΣΕΙΣ & ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Προκειμένου να πάρουμε αποτελέσματα και χρόνους εκτέλεσης του προγράμματος, δοκιμάσαμε διαφορετικά δεδομένα εισόδου και παραμέτρους. Μεταβάλλαμε κάθε φορά το μήκος των τμημάτων, το μήκος των πρωτεϊνών, αλλά και το πλήθος των βέλτιστων τμημάτων (N_{keep}). Για τις μετρήσεις μας αυτές χρησιμοποιήσαμε έναν Intel Core 2 DUO στα 2,53 GHz, με 4,00 GB RAM και Windows Vista Home Premium. Το πρόγραμμα που χρησιμοποιήσαμε είναι το Matlab v. 7.0 full package με Simulink.

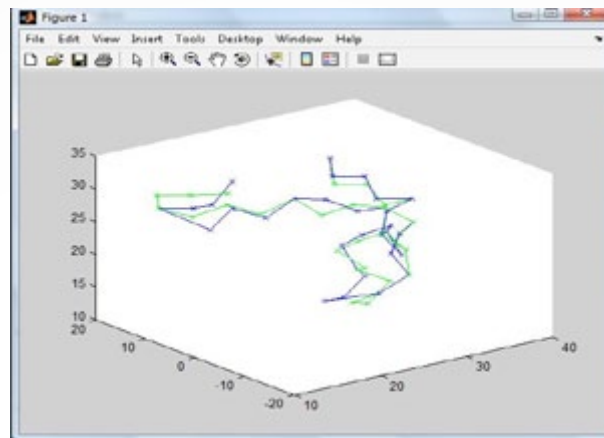
Να θυμίσουμε ότι, η προσέγγισή μας έχει διαφορές από αυτή των συγγραφέων. Ξεκινώντας, ως παρατηρήσουμε πως η αλλαγή στην προσέγγιση της συνένωσης των τμημάτων επηρέασε την πολυπλοκότητα των βιβλιοθηκών μας. Διαισθητικά, αυτό σημαίνει ότι είναι πιο δύσκολο να ταιριάξουμε μεγάλα τμήματα που είναι πιο δύσκαμπτα, αφού εμπλέκονται περισσότερα άτομα C_α σε κάθε σύγκριση μεταξύ τμημάτων. Με τα μικρότερα τμήματα υπάρχουν επομένως περισσότεροι βαθμοί ελευθερίας για να ταιριάξουν μια πρωτεϊνική δομή δεδομένου μήκους.

Όσον αφορά το local fit, παρατηρήσαμε ότι οι πρωτεΐνες στο δοκιμαστικό σετ μπορούν να αναπαρασταθούν πολύ καλά από τις βιβλιοθήκες εφόσον η μέση d.r.m.s απόκλιση στα αποτελέσματά μας είναι σε όλες τις περιπτώσεις μικρότερη του 1 Å. Παραθέτοντας τα αποτελέσματα του τοπικού ταιριάσματος η d.r.m.s μετρική εμφανίζει μικρότερες τιμές από την c.r.m.s για τις ίδιες βιβλιοθήκες. Αυτό είναι φυσιολογικό γιατί όπως είχαμε αναφέρει η d.r.m.s μετράει την ομοιότητα των διατομικών αποστάσεων εντός της ίδιας πρωτεΐνης, ενώ η c.r.m.s μετρά την ομοιότητα των ατομικών θέσεων μεταξύ δύο πρωτεϊνών, γι' αυτό και το πρώτο μέτρο είναι συνήθως μικρότερο από το δεύτερο. Επίσης, επιβεβαιώνεται ότι για βιβλιοθήκες με σταθερό μήκος τμημάτων, η ακρίβεια των τοπικών προσεγγίσεων βελτιώνεται, όταν η πολυπλοκότητα της βιβλιοθήκης αυξάνεται, καθώς μια βιβλιοθήκη με μεγαλύτερη ποικιλία θα ταίριαζε τα τμήματα στις πρωτεΐνες του δοκιμαστικού σετ καλύτερα.

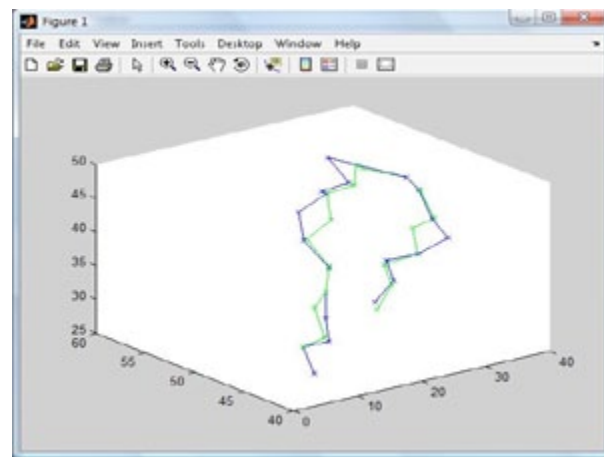
Στην περίπτωση του global fit η d.r.m.s επιβεβαιώνει, ότι για βιβλιοθήκες μικρότερης πολυπλοκότητας, η τιμές της είναι πιο μεγάλες διότι τα ταιριάσματα είναι πιο δύσκολα, ενώ για βιβλιοθήκες μεγαλύτερης πολυπλοκότητας οι τιμές είναι πιο μικρές και τα ταιριάσματα πιο εύκολα. Η πολυπλοκότητα των βιβλιοθηκών με σταθερό μήκος τμημάτων εξαρτάται από τον αριθμό των τμημάτων στη βιβλιοθήκη και βιβλιοθήκες με μεγαλύτερη ποικιλία θα αποφέρουν πιο ακριβείς προσεγγίσεις όπως φαίνεται. Από την άλλη, για σταθερή πολυπλοκότητα, βιβλιοθήκες με τμήματα μεγαλύτερου μήκους στην περίπτωση μας δεν δίνουν καλύτερες ολικές προσεγγίσεις όπως στους συγγραφείς. Αυτό συμβαίνει γιατί εμείς προσπαθούμε να ταιριάξουμε πιο μεγάλα τμήματα, πράγμα σαφώς πιο δύσκολο, και έχουμε μεγαλύτερες αποκλίσεις ανά τμήμα, επομένως και ολικά το σφάλμα μεγαλώνει αθροιστικά.

Παρακάτω παρατίθενται ενδεικτικά κάποια οπτικά αποτελέσματα για τον αναγνώστη. Παρατηρούμε ότι για μικρότερα τμήματα οι προσεγγίσεις ταιριάζουν καλύτερα, ενώ για μεγαλύτερα τμήματα το ολικό αποτέλεσμα αποκλίνει. Οι περιστροφές των τμημάτων, όπως φαίνεται, εκτελούνται σωστά, αλλά υπάρχει μια μετατόπιση που κάνει το

αποτέλεσμα να αποκλίνει, αυτό είναι και το σφάλμα στην προσέγγιση.




Εικόνα 4: Ανακατασκευή της πρωτεΐνης 1A44 με βιβλιοθήκη τμημάτων μήκους 4



Εικόνα 5: Ανακατασκευή της πρωτεΐνης 1ANU με βιβλιοθήκη τμημάτων μήκους 4

ΑΝΑΦΟΡΕΣ

1. Rachel Kolodny, Patrice Koehl, Leonidas Guibas and Michael Levitt. "Small Libraries of Protein Fragments Model Native Protein Structures Accurately". J. Mol. Biol. (2002) 323, 297-307.
2. Britt H. Park and Michael Levitt. "The Complexity and Accuracy of Discrete State Models of Protein Structure". J. Mol. Biol. (1995) 249, 493-507.
3. Micheletti C., Seno F., Maritan A. . "Recurrent Oligomers in Proteins: An Optimal Scheme of Reconciling Accurate and Concise Backbone Representations in Automated Folding and Design Studies". Proteins: Struct. Funct. Genet. 40, 662-674.
4. Arthur M. Lesk. "Introduction to Bioinformatics". Oxford University Press, Copyright 2002.
5. Ιωάννης Ζ. Εμίρης. «Αλγόριθμοι στη Μοριακή Βιολογία: Γεωμετρικές και Αλγεβρικές Μέθοδοι». Τμήμα Πληροφορικής & Τηλεπικοινωνιών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 2006.
6. RCSB Protein Data Bank, <http://www.rcsb.org/>
7. Συμπληρωματικό Υλικό Του "Recurrent oligomers in proteins - an optimal scheme reconciling accurate and concise backbone representations in automated folding and design studies." C. Micheletti, F. Seno and A. Maritan, <http://people.sissa.it/~michelet/prot/repset/index.html>
8. Συμπληρωματικό Υλικό Του "Small Libraries of Protein Fragments Accurately Model Native Protein Structures" Rachel Kolodny, Patrice Koehl, Leonidas Guibas and Michael Levitt, <http://csb.stanford.edu/rachel/fragments/>



■ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΕΣ ■
ΕΡΓΑΣΙΕΣ

Εκπομπή Ακτίνων σε Τετραεδρικά Πλέγματα με Χρήση Επεξεργαστή Γραφικών

Δανελάκης Ε. Αντώνιος

a.danelakis@gmail.com

Σαϊτή Ε. Ευδοκία

edsaiti@yahoo.gr

*Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών,
Πανεπιστημιούπολη, Ιλίσια, 15784, Αθήνα, Ελλάς*

ΠΕΡΙΛΗΨΗ:

Αντικείμενο της εργασίας αυτής είναι η υλοποίηση του αλγορίθμου εκπομπής ακτίνων, για οπτικοποίηση του όγκου τετραεδρικών πλεγμάτων, στον επεξεργαστή γραφικών. Βασικός κορμός για την υλοποίηση του εν λόγω αλγορίθμου, είναι η χρήση μεθόδου εύρεσης τομής ακτίνας τετραέδρου, και κατά συνέπεια τετραεδρικού πλέγματος, που, προκειμένου να επιτύχει τον σκοπό της, χρησιμοποιεί τις συντεταγμένες Plücker. Ο τρόπος υλοποίησης του αλγορίθμου στον επεξεργαστή γραφικών παρουσιάζεται λεπτομερώς μέσω παραδειγμάτων και εφαρμογών. Σημαντικά σημεία της υλοποίησης είναι η κάλυψη της περίπτωσης της μη κυρτότητας του τετραεδρικού μοντέλου, καθώς και η οικονομία χώρου στη μνήμη του επεξεργαστή γραφικών. Η εκπομπή ακτίνων υλοποιείται αποκλειστικά στον επεξεργαστή γραφικών χωρίς να χρειάζεται η επικοινωνία της με την κεντρική μονάδα επεξεργασίας του υπολογιστή, που χαρακτηρίζεται ως μια χρονοβόρα διαδικασία.

Λέξεις κλειδιά: *Τετραεδρικό πλέγμα, Εκπομπή ακτίνων, Τομή, Επεξεργαστής γραφικών*

ΕΠΙΒΛΕΠΟΝΤΕΣ:

Θεοχάρης Θεοχάρης, Καθηγητής, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών - ΕΚΠΑ
Πλατής Νικόλαος, Λέκτορας, Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υπολογιστών - Πανεπιστήμιο
Πελοποννήσου

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Οι όγκοι στα γραφικά αναπαρίστανται ως πολυεδρικά μοντέλα, δηλαδή ως σύνολα πολυέδρων που τους διαμερίζουν και τους καλύπτουν. Τα πιο συχνά χρησιμοποιούμενα πολυέδρα για το σκοπό αυτό είναι τα τετράεδρα. Το τετράεδρο, είναι το θεμελιώδες στοιχείο όγκου στις τρεις διαστάσεις και για αυτό το λόγο θα επιλεχτεί αποκλειστικά στην παρούσα εργασία για την αναπαράσταση όγκων. Επομένως η αναπαράσταση των όγκων θα πραγματοποιείται με χρήση τετραεδρικών πλεγμάτων.

Στο εσωτερικό του όγκου μπορούν να ορισθούν ένα ή περισσότερα πεδία, δηλαδή σύνολα μη γεωμετρικών χαρακτηριστικών τα οποία συνήθως αντιστοιχούν σε αποτελέσματα μετρήσεων ή προσομοιώσεων στο χώρο που ορίζει ο όγκος. Τα πεδία μπορεί να είναι βαθμωτά ή διανυσματικά. Κατά την αναπαράσταση του όγκου με τετραεδρικό πλέγμα, θεωρούνται γνωστές οι τιμές του πεδίου μόνο στις κορυφές του πλέγματος, ενώ στο εσωτερικό των τετράεδρων προκύπτουν με παρεμβολή.

Η οπτικοποίηση όγκου που περιέχει τρισδιάστατα βαθμωτά ή διανυσματικά πεδία αποτελεί σημαντική περιοχή έρευνας στο χώρο των γραφικών από τις αρχές της δεκαετίας του '80. Χαρακτηριστικό της οπτικοποίησης όγκου είναι η σχεδίαση του εσωτερικού του όγκου και όχι μόνο του εξωτερικού του περιβλήματος. Οι τεχνικές που χρησιμοποιούνται για την οπτικοποίηση όγκου έχουν εφαρμογές σε πολλά επιστημονικά πεδία, όπως για παράδειγμα στην απεικόνιση ιατρικών δεδομένων και στο βιομηχανικό σχεδιασμό. Ο αλγόριθμος *Εκπομπής Ακτίνων* είναι ο πλέον διαδεδομένος αλγόριθμος για την οπτικοποίηση όγκου μοντέλων που αναπαρίστανται με τετραεδρικά πλέγματα.

Εν γένει, οι αλγόριθμοι οπτικοποίησης όγκου, εμπεριέχουν μια έμφυτη ικανότητα παραλληλοποίησης, εξαιτίας της διακριτότητας των επιμέρους εικονοστοιχείων τους. Κάθε εικονοστοιχείο, μπορεί να επεξεργάζεται χωριστά. Οι σύγχρονες κάρτες γραφικών περιέχουν εξειδικευμένους επεξεργαστές που επιτρέπουν την παράλληλη εκτέλεση κώδικα πάνω σε πολλαπλά δεδομένα. Οπότε με τη βοήθειά τους, ένας απλός υπολογιστής μπορεί να μετατραπεί σε παράλληλη μηχανή υψηλών επιδόσεων και να μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την οπτικοποίηση όγκου. Εκμεταλλευόμενοι την παραλληλοποίηση των τεχνικών οπτικοποίησης όγκου, οι επεξεργαστές γραφικών μπορούν να δημιουργούν ρεαλιστικές εικόνες σε όσο το δυνατό λιγότερο χρόνο.

Η υλοποίηση του αλγορίθμου εκπομπής ακτίνων στον επεξεργαστή γραφικών δεν είναι πρόσφατη. Έχει γίνει πολλή έρευνα και υπάρχουν αρκετές υλοποιήσεις που χρησιμοποιούν τον επεξεργαστή γραφικών για να εκτελέσουν τον αλγόριθμο. Αυτό είναι λογικό, αφού οι κάρτες γραφικών είναι από την κατασκευή τους παράλληλες μηχανές και είναι οι πλέον κατάλληλες για την υλοποίηση του παράλληλου αλγορίθμου εκπομπής ακτίνων.

Πρωτοπόρος στην παρακολούθηση ακτίνων ήταν ο Garrity [1]. Η τεχνική του αξιοποιεί τη συνδεσιμότητα του πλέγματος για να βελτιστοποιήσει τη διάσχιση του από την ακτίνα. Η ακτίνα διατρέχει το πλέγμα ακολουθώντας τις γειτνιάσεις μεταξύ γειτονικών κελιών. Επειδή τα πλέγματα δεν είναι απαραίτητα κυρτά, μια ακτίνα μπορεί να εισέρχεται και να

εξέρχεται από το πλέγμα πολλαπλές φορές. Για την αποφυγή ακριβών υπολογισμών, η τεχνική αυτή χρησιμοποιεί μια χωρικά φτιαγμένη ιεραρχική δομή για να αποθηκεύει τα συνοριακά κελιά.

Το 2003 ο Weiler [2] πρότεινε έναν αλγόριθμο εκπομπής ακτίνων υλοποιημένο στον επεξεργαστή γραφικών που βασίζεται στη δουλειά του Garrity. Τα απαραίτητα δεδομένα για την αναπαράσταση του πλέγματος και των δομών για τη διάσχιση της ακτίνας, αποθηκεύονται σε 3D και 2D υφές. Η συγκεκριμένη τεχνική ακολουθεί τον τρόπο διάσχισης του πλέγματος του Garrity, αλλά χειρίζεται μόνο κυρτά μοντέλα. Στην περίπτωση των μη κυρτών μοντέλων, χρειάζεται ένα προπαρασκευαστικό στάδιο, το οποίο μετατρέπει το μη κυρτό μοντέλο σε κυρτό. Η μετατροπή αυτή επιτυγχάνεται με την εισαγωγή στο πλέγμα νέων κενών τετραέδρων, ώστε να καλυφθούν οι κοιλότητες και επομένως το πλέγμα να μετασχηματιστεί σε κυρτό.

2. ΟΡΙΣΜΟΙ ΚΑΙ ΣΥΜΒΟΛΙΣΜΟΙ

Ορισμός 1.

Ένα *τετραεδρικό μοντέλο* ή *τετραεδρικό πλέγμα* (tetrahedral mesh) $M=(V,T)$ αποτελείται από ένα σύνολο κορυφών $V=\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ και μια τετραεδροποίηση αυτών $T = \{t_1, t_2, \dots, t_m\}$. Η συνδεσιμότητα της τετραεδροποίησης T είναι σύμφωνη με τη γεωμετρία του πλέγματος, δηλαδή αν δυο κορυφές τετραέδρων έχουν τις ίδιες συντεταγμένες, τότε τα τετράεδρα έχουν κοινή αυτή την κορυφή [3].

Ορισμός 2.

Δυο τετράεδρα είναι *γείτονες* όταν έχουν κοινή μια όψη τους, δηλαδή μοιράζονται τρεις κορυφές τους. Κάθε τετράεδρο μπορεί να έχει το πολύ 4 γείτονες. Τα τετράεδρα στο σύνορο του πλέγματος έχουν λιγότερους από 4 γείτονες.

Συμβολισμοί:

Σε ένα τετραεδρικό πλέγμα που αποτελείται από n τετράεδρα, το κάθε τετράεδρο έχει και ένα δείκτη t από το 0 μέχρι το $n-1$. Θα συμβολίζουμε τις κορυφές ενός τετραεδρικού πλέγματος ως διανύσματα-στήλες με τις συντεταγμένες τους στον τρισδιάστατο χώρο, για παράδειγμα $v_i=(x_i, y_i, z_i)^T$. Το τετράεδρο που συνορεύει με το τετράεδρο t στην i -οστή όψη του συμβολίζεται με $a_{t,i}$. Θα συμβολίζουμε με $N_{t,i} = \{t_\alpha, t_\beta, t_\gamma, t_\delta\}$, το σύνολο των γειτόνων του τετραέδρου t . Όταν ένας ή παραπάνω γείτονες δεν υπάρχουν τότε σημαίνει ότι το τετράεδρο βρίσκεται στο σύνορο του πλέγματος. Σε αυτή την περίπτωση εισάγεται το -1 στην αντίστοιχη θέση μέσα στο σύνολο. Το -1 θα αντιστοιχεί στην όψη του τετραέδρου που βρίσκεται στο σύνορο.

Ορισμός 3.

Θα συμβολίζουμε ένα βαθμωτό πεδίο εμφυτευμένο σε τετραεδρικό πλέγμα ως $\Phi = (V, T, S)$, όπου $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ είναι ένα σύνολο κορυφών, $T = \{t_1, t_2, \dots, t_m\}$ είναι μια τετραεδροποίηση του V και $S = \{s_1, s_2, \dots, s_n\}$ είναι ένα σύνολο βαθμωτών τιμών τέτοιων ώστε κάθε s_i να είναι η τιμή του πεδίου πάνω στην κορυφή i .

Κατά την αναπαράσταση του πεδίου με τετραεδρικό πλέγμα, θεωρούνται γνωστές οι τιμές του πεδίου μόνο στις κορυφές του πλέγματος. Ακόμα και αν οι τιμές του πεδίου είναι γνωστές σε όλο τον όγκο, γίνεται δειγματοληψία στις κορυφές του πλέγματος. Στο εσωτερικό των τετραέδρων η τιμή του πεδίου προκύπτει από γραμμική παρεμβολή των τιμών του στις κορυφές του τετραέδρου [4].

3. ΤΟΜΗ ΑΚΤΙΝΑΣ - ΤΕΤΡΑΕΔΡΟΥ

Η κύρια λειτουργία του αλγορίθμου εκπομπής ακτίνων είναι η εύρεση των τετραέδρων που τέμνει μια ακτίνα καθώς διασχίζει το πλέγμα. Για τον παραπάνω λόγο είναι αναγκαία η χρήση ενός αποδοτικού αλγορίθμου που ευρίσκει την τομή μεταξύ μιας ακτίνας και ενός τετραέδρου. Από εκεί και πέρα, το πρόβλημα εύρεσης της τομής μεταξύ μιας ακτίνας και ενός τετραεδρικού πλέγματος, ανάγεται στο πρόβλημα εύρεσης της τομής μεταξύ μιας ακτίνας και κάθε τετραέδρου που ανήκει στο πλέγμα. Για την εύρεση τομής μεταξύ μιας ακτίνας και ενός τετραέδρου χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος των Πλατή και Θεοχάρη [5] για την εύρεση τομής με χρήση των συντεταγμένων Plücker.

Ο αλγόριθμος εύρεσης τομής ακτίνας - τετραέδρου δέχεται σαν είσοδο:

- Το σημείο P της αρχής της ακτίνας
- Τη κατεύθυνση D της ακτίνας
- Την αναπαράσταση του τετραέδρου ως σύνολο τεσσάρων 3D κορυφών

Οι ακμές του τετραέδρου μετατρέπονται σε συντεταγμένες Plücker και ελέγχεται η ύπαρξη τομής με την κάθε όψη του τετραέδρου. Ο έλεγχος αυτός μεταφράζεται σε εύρεση τομής ακτίνας με τα τρίγωνα στον 3D χώρο που αντιστοιχούν στις όψεις του τετραέδρου. Επιστρέφεται 1 εάν υπάρχει τομή μεταξύ της δεδομένης ακτίνας και του δεδομένου τετραέδρου και 0 σε αντίθετη περίπτωση επιστρέφει. Υπολογίζονται:

- Οι καρτεσιανές συντεταγμένες των σημείων τομής P_{enter} και P_{leave}
- Η όψη εισόδου Δ_{enter} και η όψη εξόδου Δ_{leave} της ακτίνας
- Οι βαρυκεντρικές συντεταγμένες ως προς τις όψεις Δ_{enter} και Δ_{leave}
- Οι παραμετρικές αποστάσεις τους από την αρχή της ακτίνας

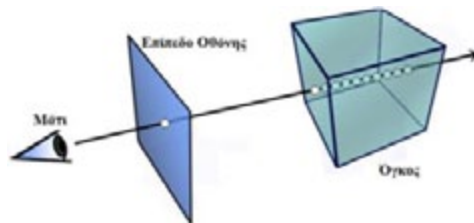
4. ΥΛΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΟΝ ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΤΗ ΓΡΑΦΙΚΩΝ

Η γενική περιγραφή της Εκπομπής Ακτίνων αποτυπώνεται στον αλγόριθμο που ακολουθεί, καθώς και την εικόνα 1.

ΑΡΧΗ

1. Κατασκευή τρέχουσας ακτίνας
2. Αρχικοποίηση αλγορίθμου
3. Εύρεση χρώματος αρχικού τετραέδρου
4. ΌΣΟ η ακτίνα δεν έχει εξέλθει του μοντέλου
 - 4.1 Εύρεση επόμενου τετραέδρου
 - 4.2 Εύρεση χρώματος επόμενου τετραέδρου
 - 4.3 Μίξη χρωματικών συνεισφορών

ΤΕΛΟΣ



Εικόνα 1: Απεικόνιση αλγορίθμου Εκπομπής Ακτίνων

Κατασκευή Ακτίνας

Χρειάζονται δύο 3D σημεία, το $P_{beg} = (x_{beg}, y_{beg}, z_{beg})$ και το $P_{end} = (x_{end}, y_{end}, z_{end})$, ώστε το ευθύγραμμο τμήμα με άκρα τα P_{beg}, P_{end} που αντιπροσωπεύει την ακτίνα να ξεκινάει πριν το μοντέλο και να τελειώνει μετά από αυτό. Επειδή εδώ χρησιμοποιείται ορθογραφική προβολή, η κατεύθυνση μιας ακτίνας είναι πάντα $(0, 0, 1)$. Η κατεύθυνση D της ακτίνας, στη γενική περίπτωση υπολογίζεται ως:

$$D = P_{end} - P_{beg} = (x_{end} - x_{beg}, y_{end} - y_{beg}, z_{end} - z_{beg})$$

Το τρέχον εικονοστοιχείο χαρακτηρίζεται από τις συντεταγμένες (x_{pix}, y_{pix}) , καθότι η οθόνη μας είναι 2D. Ταυτίζονται λοιπόν οι 2D συντεταγμένες του εικονοστοιχείου (x_{pix}, y_{pix}) με τις αντίστοιχες 2D συντεταγμένες της αρχής της ακτίνας (x_{beg}, y_{beg}) και τις συντεταγμένες του τέλους της ακτίνας (x_{end}, y_{end}) . Αφού η ακτίνα μας είναι 3D θα πρέπει να κατασκευαστεί και η τρίτη συντεταγμένη z_{beg}, z_{end} της αρχής και του τέλους της ακτίνας αντίστοιχα. Η z_{beg} λαμβάνει μια τιμή μεγαλύτερη της μέγιστης z-συντεταγμένης που συναντάται στο μοντέλο, ενώ η z_{end} λαμβάνει μια τιμή μικρότερη της ελάχιστης z-συντεταγμένης που συναντάται στο μοντέλο. Με αυτό το τρόπο η ακτίνα του τρέχοντος εικονοστοιχείου εκπέμπεται από μπρος προς τα πίσω στη θέση του μοντέλου

που αντιστοιχεί στο τρέχον εικονοστοιχείο, όπως φαίνεται στην εικόνα 1 [6].

Αρχικοποίηση αλγορίθμου

Στη φάση αυτή πραγματοποιείται η εύρεση του πρώτου τετραέδρου του πλέγματος που τέμνει η ακτίνα που αντιστοιχεί στο τρέχον εικονοστοιχείο. Ο τρόπος που επιτυγχάνεται το παραπάνω, είναι να εφαρμοστεί ο έλεγχος τομής μεταξύ των συννοριακών τετραέδρων του πλέγματος και της τρέχουσας ακτίνας χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο που παρουσιάστηκε στο κεφάλαιο 3. Για κάθε τετράεδρο που ο έλεγχος τομής είναι θετικός ελέγχεται η παραμετρική απόσταση της τομής του με την τρέχουσα ακτίνα από την αρχή της. Αφού η ακτίνα εκπέμπεται από μπρος προς τα πίσω, στο τέλος κρατείται το τετράεδρο που έχει την μικρότερη παραμετρική απόσταση. Αυτό θα είναι το πρώτο τετράεδρο που τέμνεται από την ακτίνα.

Εύρεση επόμενου τεμνόμενου τετραέδρου

Η ακτίνα διατρέχει το πλέγμα και λαμβάνει τις χρωματικές συνεισφορές όλων των τετραέδρων που συναντά μέχρι να εξέλθει από το μοντέλο. Μέχρι στιγμής έχει βρεθεί το πρώτο τετράεδρο που συναντά η ακτίνα. Τα επόμενα τετράεδρα θα βρεθούν, επίσης με την μέθοδο που περιγράφεται στην ενότητα 3. Εφόσον γνωρίζουμε την όψη εξόδου της ακτίνας από το τρέχον τετράεδρο, δεν έχουμε παρά να βρούμε το τετράεδρο που γειτονεύει με το τρέχον στην συγκεκριμένη όψη. Η πληροφορία αυτή είναι διαθέσιμη στις δομές που αποθηκεύονται για το μοντέλο, όπως θα δούμε στο κεφάλαιο 6. Έπειτα θα διαβάζουμε της κορυφές του επόμενου τετραέδρου και θα το στείλουμε για έλεγχο τομής με την τρέχουσα ακτίνα με χρήση του αλγορίθμου του κεφαλαίου 3. Φυσικά, ο έλεγχος θα είναι θετικός και το γνωρίζαμε από την αρχή. Όμως εκτελώντας τον εν λόγω αλγόριθμο, λαμβάνουμε τα πολύ σημαντικά στοιχεία που επιστρέφει και τα οποία είναι απαραίτητα για την συνέχεια.

Υπολογισμός χρωματικής συνεισφοράς τετραέδρου

Κάθε ακτίνα, που αντιστοιχεί σε ένα εικονοστοιχείο της εικόνας, διαπερνά το τετραεδρικό πλέγμα και συνδυάζει της χρωματικές συνεισφορές όλων των τετραέδρων που συναντά, ώστε να αποδοθεί στο τρέχον εικονοστοιχείο το κατάλληλο χρώμα. Η χρωματική συνεισφορά ενός τετραέδρου αναπαριστά το χρώμα που συγκεντρώνει η ακτίνα κατά το ταξίδι της εντός αυτού του τετραέδρου. Πρόκειται δηλαδή, με άλλα λόγια, για μια μαθηματική ολοκλήρωση των χρωμάτων που συναντά η ακτίνα για όλα τα σημεία του τετραέδρου που διασχίζει [7]. Δυστυχώς όμως, λόγω της υπολογιστικής πολυπλοκότητας της ολοκλήρωσης αυτής, είναι αδύνατος ο συνεχής υπολογισμός της που χρειάζεται για αλληλεπιδραστικές εφαρμογές.

Η τεχνική που χρησιμοποιείται εδώ ονομάζεται προ-ολοκλήρωση (pre-integration). Αυτή η τεχνική χρησιμοποιεί έναν προϋπολογισμένο πίνακα, που αντιστοιχεί το ολοκλήρωμα σε μια συνάρτηση της βαθμωτής τιμής του πεδίου στο σημείο εισόδου, της βαθμωτής τιμής του πεδίου στο σημείο εξόδου καθώς και του μήκους της ακτίνας εντός τετραέδρου [2].

Ο προϋπολογισμένος αυτός πίνακας είναι ένας 3D πίνακας. Χρησιμοποιεί μια διάσταση για τις βαθμωτές τιμές σημείων εισόδου, μια διάσταση για τις βαθμωτές τιμές των σημείων εξόδου και μια διάσταση για τα μήκη της ακτίνας. Κάθε θέση του πίνακα αυτού περιέχει μια χρωματική τιμή και μια τιμή διαφάνειας. Για κάθε διάσταση χρησιμοποιεί 128 τιμές. Επομένως τα στοιχεία που περιέχονται στον πίνακα είναι 128^3 . Όλη αυτή η πληροφορία του πίνακα, πρέπει να είναι γνωστή στον επεξεργαστή γραφικών και για αυτό στέλνεται με την μορφή μιας 3D υφής (στον επεξεργαστή γραφικών ένας πίνακας αναπαρίσταται αποδοτικότερα με μορφή υφής). Με τον τρόπο αυτό λαμβάνεται πολύ γρήγορα μία προσεγγιστική τιμή του ζητούμενου ολοκληρώματος, χωρίς να χρειαστεί αυτό να υπολογιστεί πλήρως. Επιπλέον, η τεχνική αυτή είναι ταχύτερη στον επεξεργαστή γραφικών, καθώς ο τελευταίος είναι κατασκευασμένος με τέτοιο τρόπο, ώστε η παρεμβολή σε χώρο υφής να γίνεται ταχύτατα.

Εύρεση βαθμωτών τιμών

Έστω ότι θέλουμε να βρούμε την βαθμωτή τιμή s ενός σημείου P της όψης (εισόδου ή εξόδου) ενός τετραέδρου του πλέγματος. Η μόνη πληροφορία που έχουμε είναι οι βαθμωτές τιμές (s_0, s_1, s_2, s_3) των αντίστοιχων κορυφών του τετραέδρου (V_0, V_1, V_2, V_3) . Χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο του κεφαλαίου 3, λαμβάνουμε τις βαρυκεντρικές συντεταγμένες u_1, u_2 του εν λόγω σημείου στην αντίστοιχη όψη. Προκειμένου να επιτευχθεί ο σκοπός μας, θα χρησιμοποιηθεί η γραμμική παρεμβολή. Τελικά, η βαθμωτή τιμή s στο σημείο P που βρίσκεται πάνω στην όψη (εισόδου ή εξόδου) i ενός τετραέδρου, με $i=0,1,2,3$ υπολογίζεται με βάση των παρακάτω τύπων:

$$\begin{aligned} i=0: s &= (1 - u_1 - u_2) * s_3 + u_1 * s_2 + u_2 * s_1 \\ i=1: s &= (1 - u_1 - u_2) * s_2 + u_1 * s_3 + u_2 * s_0 \\ i=2: s &= (1 - u_1 - u_2) * s_1 + u_1 * s_0 + u_2 * s_3 \\ i=3: s &= (1 - u_1 - u_2) * s_0 + u_1 * s_1 + u_2 * s_2 \end{aligned}$$

Εύρεση μήκους ακτίνας

Το μήκος της ακτίνας εντός του τετραέδρου βρίσκεται πολύ εύκολα. Κατά τον έλεγχο για μια ακτίνα που αντιστοιχεί σε κάποιο εικονοστοιχείο, οι συντεταγμένες των αξόνων X και Y παραμένουν σταθερές καθώς, όπως έχουμε ήδη αναφέρει, λόγω ορθογραφικής προβολής οι ακτίνες είναι παράλληλες στον άξονα Z . Αυτές που αλλάζουν είναι οι συντεταγμένες του άξονα των Z . Επομένως, αν με ExitPoint.z και EnterPoint.z συμβολίζουμε τις συντεταγμένες του άξονα των Z του σημείου εξόδου και εισόδου αντίστοιχα, η απόσταση υπολογίζεται από τον παρακάτω τύπο.

$$\text{Distance} = \sqrt{\text{ExitPoint.z}^2 - \text{EnterPoint.z}^2}$$

Μίξη χρώματος

Έστω C η συνεισφορά χρώματος του τρέχοντος τετραέδρου και A_C η αντίστοιχη διαφάνεια. Έστω $Color$ το μέχρι στιγμής χρώμα του τρέχοντος εικονοστοιχείου, που έχει προέλθει από την μίξη των χρωματικών συνεισφορών των τετραέδρων που έχει συναντήσει η ακτίνα μας μέχρι εκείνη τη στιγμή και A_{Color} η αντίστοιχη διαφάνεια. Όπως έχει αναφερθεί, η ακτίνα μας εκπέμπεται στο τετραεδρικό πλέγμα από μπρος προς τα πίσω. Επομένως, και τα χρώματα θα αναμειχθούν από μπρος προς τα πίσω [2]. Άρα με βάση τα παραπάνω, το νέο χρώμα $NewColor$ του εικονοστοιχείου μετά την μίξη και η νέα διαφάνεια $A_{NewColor}$ θα δίδονται από τους παρακάτω τύπους:

$$NewColor = Color + C * (1 - A_{Color})$$

$$A_{NewColor} = A_{Color} + A_C * (1 - A_{Color})$$

Έξοδος ακτίνας από το τετραεδρικό πλέγμα

Ο αλγόριθμος της εκπομπής ακτίνων τερματίζει όταν η ακτίνα εξέλθει από το πλέγμα. Το παραπάνω μπορεί να μεταφραστεί σε προγραμματιστικό έλεγχο πολύ απλά. Καταρχάς, όπως είναι λογικό, η ακτίνα, όπως εισέρχεται στο πλέγμα από ένα συνοριακό τετράεδρο, έτσι και εξέρχεται από αυτό επίσης μέσω ενός συνοριακού τετραέδρου. Αν κάποιο τετράεδρο είναι συνοριακό, τότε ο γείτονας της εξωτερικής του όψης του θα δεικτοδοτείται στο -1.

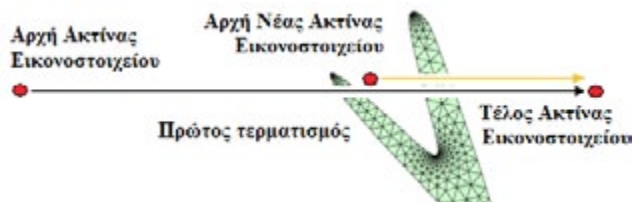
Όταν λοιπόν, η διαδικασία εύρεσης του επόμενου τετραέδρου, αποφανθεί ότι το επόμενο τετράεδρο είναι το -1, τότε όπως αιτιολογήθηκε στην προηγούμενη παράγραφο, έχουμε φτάσει σε συνοριακό τετράεδρο, ή αλλιώς σε τετράεδρο εξόδου. Σε αυτή την περίπτωση το τρέχον τετράεδρο είναι το τελευταίο τετράεδρο που θα συναντήσει η ακτίνα και μόλις γίνει η επεξεργασία της χρωματικής του συνεισφοράς, πρέπει να τερματίσει ο αλγόριθμος εκπομπής ακτίνων.

5. ΜΗ ΚΥΡΤΟΤΗΤΑ

Ο αλγόριθμος που παρουσιάστηκε δουλεύει για κυρτά τετραεδρικά μοντέλα. Όμως, είναι δυνατόν, με μια μικρή τροποποίηση, να μπορεί να διαχειριστεί και μη κυρτά μοντέλα. Αυτή η τροποποίηση αφορά στον τερματισμό του αλγορίθμου και περιγράφεται λεπτομερώς στην συνέχεια. Η τροποποίηση είναι απαραίτητη καθώς η ακτίνα είναι δυνατό, σε ένα μη κυρτό μοντέλο, να εισέλθει και πάλι στο μοντέλο μετά από μία έξοδό της.

Προκειμένου να καλύψουμε την περίπτωση μη κυρτών μοντέλων, τροποποιούμε ελαφρώς τη διαδικασία που περιγράφηκε στην προηγούμενη ενότητα. Μόλις η ακτίνα εξέλθει από το τετραεδρικό πλέγμα, αντί να τερματίσει ο αλγόριθμος, δημιουργείται μια νέα ακτίνα που εκπέμπεται στο μοντέλο, η οποία ξεκινά από εκεί που σταμάτησε η προηγούμενη.

Έπειτα, ελέγχεται με την διαδικασία της αρχικοποίησης, αν η καινούρια ακτίνα τέμνει ξανά το μοντέλο. Αν δεν το τέμνει, τότε προφανώς το μοντέλο, στη θέση της συγκεκριμένης ακτίνας που αντιστοιχεί το τρέχον εικονοστοιχείο, είναι κυρτό. Αν η νέα ακτίνα τέμνει ξανά το τετραεδρικό μοντέλο μας, τότε στη θέση της ακτίνας του τρέχοντος εικονοστοιχείου, το μοντέλο μας είναι μη κυρτό, οπότε εισερχόμαστε ξανά στον κύριο βρόχο του αλγορίθμου, ώστε να δειγματοληπτηθούν τα τετράεδρα στο νέο, πλέον, κυρτό τμήμα του μη κυρτού τετραεδρικού μας πλέγματος. Η διαδικασία παρουσιάζεται οπτικά στην εικόνα 2.



Εικόνα 2: Κάλυψη μη κυρτότητας

Το τελικό σημείο της νέας ακτίνας ταυτίζεται με το τελικό σημείο της παλαιάς ακτίνας ($NewP_{end} = P_{end}$). Αυτό που αλλάζει είναι το αρχικό σημείο της νέας ακτίνας, το οποίο πλέον θα συμβολίζεται ως $NewP_{beg}$. Οι συντεταγμένες των X και Y αξόνων του $NewP_{beg}$ ταυτίζονται με τις συντεταγμένες των X και Y αξόνων του αρχικού σημείου της παλαιάς ακτίνας P_{beg} , που είναι (x_{beg}, y_{beg}) . Όμως η z -συντεταγμένη του σημείου αρχής της νέας ακτίνας ευρίσκεται, αν προσθέσουμε στην z -συντεταγμένη του σημείου εξόδου του τελευταίου (εξωτερικού) τετραέδρου που συνάντησε η παλαιά ακτίνα $z_{LastExit}$, μια ανεκτικότητα e . Δηλαδή τελικά είναι $NewP_{beg} = (x_{beg}, y_{beg}, z_{LastExit} + e)$. Η κατεύθυνση της ακτίνας ταυτίζεται με αυτή της προηγούμενης.

6. ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΛΕΠΤΟΜΕΡΕΙΕΣ

Στις σύγχρονες κάρτες γραφικών, ο πιο ενδεδειγμένος τρόπος αποθήκευσης δεδομένων είναι με τη μορφή υφών, οι οποίες, στην πραγματικότητα, δεν είναι παρά πίνακες 1, 2 ή 3 διαστάσεων. Η μεταφορά των υφών από και προς τον επεξεργαστή γραφικών καθώς και η διαχείρισή τους είναι πολύ αποδοτικές. Εδώ αποθηκεύουμε σε υφές όλες τις πληροφορίες του τετραεδρικού μοντέλου που οπτικοποιούμε. Επίσης, σε υφές αποθηκεύονται οι δείκτες των τετραέδρων που βρίσκονται στο σύνορο του πλέγματος καθώς και ο πίνακας ολοκλήρωσης του χρώματος.

Η πληροφορία που πρέπει να υπάρχει για κάθε τετράεδρο είναι οι συντεταγμένες των κορυφών του, οι βαθμωτές τιμές του πεδίου για κάθε κορυφή και οι γείτονες του.

Οι συντεταγμένες των κορυφών των τετραέδρων αποθηκεύονται σε μια 2Δ υφή των 16 bits διάστασης ίσης με το πλήθος των τετραέδρων επί 3. Σε κάθε εικονοστοιχείο υφής μπορούν να αποθηκευτούν τέσσερις πραγματικοί αριθμοί. Κάθε μια από τις τρεις πρώτες

κορυφές ενός τετραέδρου t , $v_{t,0}$, $v_{t,1}$, $v_{t,2}$, αποθηκεύονται στις τρεις πρώτες θέσεις του κάθε εικονοστοιχείου υψής. Στην τελευταία θέση κάθε εικονοστοιχείου εκχωρούμε την τέταρτη κορυφή.

Σε μια δεύτερη 2D υφή, επίσης των 16 bits και διάστασης ίσης με το πλήθος των τετραέδρων επί 2, αποθηκεύονται οι γείτονες και οι βαθμωτές τιμές του πεδίου για κάθε τετράεδρο. Κάθε γραμμή της υψής αναλογεί σε ένα τετράεδρο του πλέγματος. Στο πρώτο εικονοστοιχείο υψής κάθε γραμμής αποθηκεύονται οι τέσσερις γείτονες αναλογικά με την όψη που συνορεύουν με το τετράεδρο. Στο επόμενο εικονοστοιχείο, εκχωρούνται οι βαθμωτές τιμές του πεδίου, μια για κάθε κορυφή του τετραέδρου.

Για την αποθήκευση των συνοριακών τετραέδρων στον επεξεργαστή γραφικών χρησιμοποιείται μια μονοδιάστατη υφή των 16 bits, και μέγεθος ίσο με το πλήθος των τετραέδρων, όπου αποθηκεύονται οι δείκτες των τετραέδρων που βρίσκονται στο σύνορο.

Επειδή δεν είναι πιθανό όλα τα τετράεδρα του πλέγματος να είναι συνοριακά, στις πρώτες θέσεις της υψής με τα συνοριακά τετράεδρα, αποθηκεύονται οι δείκτες των συνοριακών τετραέδρων και μόλις έχουν εισαχθεί όλα τα συνοριακά τετράεδρα εκχωρείται η τιμή -1. Με αυτό τον τρόπο δεν χρειάζεται να διατρέξουμε όλη την υφή, μόλις βρεθεί η τιμή -1, σταματάει το διάβασμα των εικονοστοιχείων της υψής.

Στις εικόνες 3, 4 φαίνονται με λεπτομέρεια οι δομές δεδομένων που αποθηκεύονται στον επεξεργαστή γραφικών.

Δεδομένα πλέγματος	Συντεταγμένες Υψής		Δεδομένα Υψής			
	u	v	r	g	b	a
κορυφές	t	0	$V_{t,0,x}$	$V_{t,0,y}$	$V_{t,0,z}$	$V_{t,3,x}$
κορυφές	t	1	$V_{t,1,x}$	$V_{t,1,y}$	$V_{t,1,z}$	$V_{t,3,y}$
κορυφές	t	2	$V_{t,2,x}$	$V_{t,2,y}$	$V_{t,2,z}$	$V_{t,3,z}$
γείτονες	t	0	$\alpha_{t,0}$	$\alpha_{t,1}$	$\alpha_{t,2}$	$\alpha_{t,3}$
βαθμωτές τιμές	t	1	$S_{t,0}$	$S_{t,1}$	$S_{t,2}$	$S_{t,3}$

Εικόνα 3: Υφή κορυφών και υφή γειτόνων/βαθμωτών τιμών

0	1	...	N	N+1	...	M
-	-	...	-	-	...	-
-	-	...	-	-	...	-
-	-	...	-	-	...	-
Δείκτης	Δείκτης	...	Δείκτης	-1	...	-1

Εικόνα 4: Υφή συνοριακών τετραέδρων

Η τελευταία υφή που αποθηκεύεται στον επεξεργαστή γραφικών είναι ο πίνακας με τα χρώματα που έχουν προκύψει ύστερα από επεξεργασία ολοκλήρωσης. Η υφή είναι των 16 bits, τρισδιάστατη με ανάλυση 128 επί 128 επί 128. Σε κάθε εικονοστοιχείο υψής υπάρχει το αντίστοιχο χρώμα και διαφάνεια που έχει προέλθει από την ολοκλήρωση των επιμέρους χρωμάτων.

7. ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΧΩΡΟΥ

Ο χώρος αποθήκευσης μιας συνήθους κάρτας γραφικών του εμπορίου, είναι 512 *megabytes*. Πρόσφατα παρουσιάστηκαν στην αγορά κάρτες γραφικών με χώρο 1 *gigabytes*, 2 *gigabytes* και 4 *gigabytes*, με κόστος όμως, που παραμένει απαγορευτικό. Γίνεται, λοιπόν, εύκολα κατανοητό, ότι ο χώρος αποθηκευτικού μέσου που χρειάζεται η υλοποίηση του αλγορίθμου που παρουσιάζεται, είναι ζωτικής σημασίας. Στην παρούσα ενότητα, θα προσδιορίσουμε τον χώρο που χρειάζεται ο αλγόριθμος εκπομπής ακτίνων που υλοποιήθηκε, προκειμένου να αρχίσει την εκτέλεση του πάνω στον επεξεργαστή γραφικών.

Στον επεξεργαστή γραφικών, αποθηκεύονται τα παρακάτω:

1. 2Δ υφή που περιέχει τις κορυφές του μοντέλου.
2. 2Δ υφή με τις βαθμωτές τιμές και τις γειτνιάσεις του μοντέλου.
3. 1Δ υφή που περιέχει τα συνοριακά τετράεδρα του μοντέλου.
4. 3Δ υφή που περιέχει τις χρωματικές συνεισφορές των τετραέδρων.

Κάθε υφή είναι των 2 *bytes*. Ο αντίστοιχος χώρος που απαιτείται είναι:

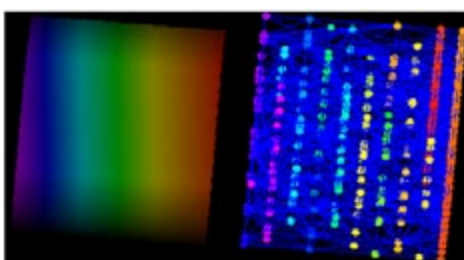
1. Η υφή που περιέχει τις κορυφές του μοντέλου, χρησιμοποιεί 3 στοιχεία υφής, των 4 θέσεων, για κάθε τετράεδρο. Άρα αν T είναι το πλήθος των τετραέδρων τότε η αποθήκευση της συγκεκριμένης υφής απαιτεί: $(24 * T)$ *bytes*.
2. Η υφή που περιέχει τις βαθμωτές τιμές των κορυφών και τις γειτνιάσεις του μοντέλου, χρησιμοποιεί 2 στοιχεία υφής, των 4 θέσεων, για κάθε τετράεδρο. Άρα η αποθήκευση της συγκεκριμένης υφής απαιτεί $(16 * T)$ *bytes*.
3. Η υφή που περιέχει τα συνοριακά τετράεδρα του μοντέλου, χρησιμοποιεί 1 στοιχείο υφής, των 4 θέσεων, για κάθε τετράεδρο. Άρα η αποθήκευση της συγκεκριμένης υφής απαιτεί $(8 * T)$ *bytes*. Σε αυτή την περίπτωση, επειδή καταλαμβάνεται μόνο μία από τις 4 θέσεις του στοιχείου υφής, έχουμε σπατάλη χώρου της τάξης των $(6 * T)$ *bytes* σε κάθε στοιχείο υφής που χρησιμοποιείται για αποθήκευση συνοριακού τετραέδρου. Επίσης, επειδή τα συνοριακά τετράεδρα είναι λιγότερα από το πλήθος των συνολικών τετραέδρων του πλέγματος, δεν χρησιμοποιούνται όλα τα στοιχεία της υφής για την φύλαξη των συνοριακών τετραέδρων, με αποτέλεσμα να σπαταλείται και ο χώρος της υφής από το σημείο που τοποθετείται το τελευταίο συνοριακό τετράεδρο και έπειτα. Πρόκειται για αρκετά μεγάλη σπατάλη, που όμως, ήμαστε διατεθειμένοι να πληρώσουμε προκειμένου να εκμεταλλευτούμε το χρονικό κέρδος που μας προσφέρει η συγκεκριμένη υφή κατά τη διάρκεια αρχικοποίησης του αλγορίθμου.
4. Η υφή που περιέχει τις χρωματικές συνεισφορές των τετραέδρων, χρησιμοποιεί 128^3 στοιχεία υφής, των 4 θέσεων. Άρα η αποθήκευση της συγκεκριμένης υφής απαιτεί περίπου 33,5 *megabytes*.

Παρατηρούμε ότι για να αποθηκευτεί η πληροφορία κάθε τετραέδρου αρκούν 48 *bytes*. Αυτή η επίδοση είναι καλύτερη από όλες τις επιδόσεις μνήμης που έχουν κατά καιρούς επιτευχθεί στις εργασίες που αναφέρονται στην εισαγωγή. Αξίζει να σημειωθεί ότι όταν υλοποιήθηκαν οι αλγόριθμοι στις εργασίες αυτές δεν υπήρχαν όλες οι μορφές υφών που

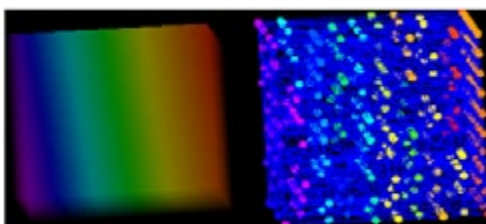
υπάρχουν τώρα και έτσι γινόταν μεγαλύτερη σπατάλη χώρου.

8. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

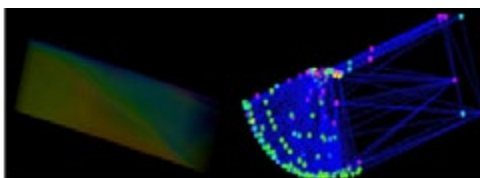
Ακολουθούν κάποια οπτικά αποτελέσματα της εφαρμογής μας. Στο αριστερό μέρος των εικόνων φαίνεται το οπτικό αποτέλεσμα της εφαρμογής μας πάνω σε δοθέν τετραεδρικό πλέγμα, ενώ στο δεξιό μέρος, παρουσιάζεται το αντίστοιχο τετραεδρικό πλέγμα με τα χρώματα των κορυφών του.



Εικόνα 5: Κυρτό πλέγμα 1440 τετραέδρων



Εικόνα 6: Κυρτό πλέγμα 1257 τετραέδρων



Εικόνα 7: Μη κυρτό τετραέδρο 1655 τετραέδρων

9. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στην παρούσα εργασία υλοποιείται στον επεξεργαστή γραφικών αλγόριθμος Εκπομπής Ακτίνων για την οπτικοποίηση όγκου τετραεδρικών μοντέλων. Στη συγκεκριμένη υλοποίηση,

η αναπαράσταση των δεδομένων γίνεται πιο αποδοτικά από τις μέχρι τώρα υλοποιήσεις, με τη βοήθεια ακόμα πιο πυκνών και πρόσφατων μορφών 2Δ υφών. Η αντιμετώπιση της μη-κυρτότητας, δεν γίνεται με την τεχνική depth peeling, αλλά με ορισμό νέας θέσης εκπομπής για την ακτίνα. Τέλος, δεν υποδιαιρείται η οθόνη σε τμήματα, αλλά τερματίζεται αυτόματα η εκτέλεση του προγράμματος στον επεξεργαστή γραφικών για τα μέρη της οθόνης που δεν καλύπτονται από το πλέγμα.

ΑΝΑΦΟΡΕΣ

1. M.P. Garrity, *Raytracing Irregular Volume Data*, Computer Graphics (San Diego Workshop on Volume Visualization), 24(5): 35 - 40, 1990.
2. M. Weiler, M. Kraus, M. Merz and T. Ertl, *Hardware - Based Ray Casting for Tetrahedral Meshes*, In Proceedings of the 14th IEEE Visualization Conference (VIS'03), pages 333-340, 2003.
3. Νικόλαος Πλατής, *Τεχνικές πολλαπλών αναλύσεων στην απλοποίηση τριγωνικών και τετραεδρικών πλεγμάτων*, Διδακτορική Διατριβή, Τμήμα Πληροφορικής & Τηλεπικοινωνιών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 2005.
4. N. Platis and T. Theoharis, *Simplification of Vector Fields over Tetrahedral Meshes*, In Proceedings of Computer Graphics International 2004, pp. 174 - 181.
5. N. Platis and T. Theoharis, *Fast Ray-Tetrahedron Intersection Using Plücker Coordinates*, Journal of Graphics Tools, 2003, vol. 8, no. 4, pp. 37 - 48.
6. S. Stegmaier, M. Strengert, T. Klein and T. Ertl, *A Simple and Flexible Volume Rendering Framework for Graphics-Hardware-based Ray Casting*, The Eurographics Association, 2005.
7. P. L. Williams and N. L. Max, *A Volume Density Optical Model*, In 1992 Workshop on Volume Visualization, pages 61-68, 1992.

Επεξεργασία Πρωτομικών Εικόνων

Κωστοπούλου Α. Ειρήνη

ikostop@di.uoa.gr

*Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών,
Πανεπιστημιούπολη, Ιλίσια, 15784, Αθήνα, Ελλάδα*

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στην παρούσα διπλωματική εργασία αναπτύχθηκε πρωτότυπος αλγόριθμος επεξεργασίας εικόνας για τον εντοπισμό των πρωτεϊνικών κηλίδων σε πηκτώματα δισδιάστατης ηλεκτροφόρησης. Η προτεινόμενη μέθοδος χρησιμοποιεί δισδιάστατα ιστογράμματα και μέθοδο κατάτμησης watershed για το διαχωρισμό των κηλίδων σε πρωτεΐνες. Η προσπάθεια υλοποίησης ενός τέτοιου αλγορίθμου κρίθηκε απαραίτητη αφού τα διαθέσιμα λογισμικά επεξεργασίας εικόνων πρωτεομικής δεν παρέχουν ικανοποιητικά αποτελέσματα και συνήθως απαιτούν την παρέμβαση του χρήστη για τη βελτιστοποίηση των αποτελεσμάτων. Η προτεινόμενη μέθοδος κατάτμησης κηλίδων εφαρμόσθηκε σε συνθετικές και σε πραγματικές εικόνες και τα αποτελέσματα που προέκυψαν κρίνονται ικανοποιητικά.

Λέξεις κλειδιά: *Βιοϊατρικά Δεδομένα, Εικόνα Πηκτώματος, Ιστόγραμμα, Κατωφλίωση, Κατάτμηση*

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ:

Μαρούλης Δημήτρης, Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών - ΕΚΠΑ

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Την τελευταία δεκαετία η δισδιάστατη ηλεκτροφόρηση πολυακριλαμιδικών gel (2D-PAGE) είναι αδιαμφισβήτητα ένα από τα πιο χρήσιμα εργαλεία στην βιολογική και ιατρική έρευνα. Η διαδεδομένη χρήση της τεχνικής αυτής οφείλεται στην ευκολία που προσφέρει στους επιστήμονες να αναλύσουν μεγάλα και πολύπλοκα συμπλέγματα πρωτεϊνών. Το αποτέλεσμα της δισδιάστατης ηλεκτροφόρησης πολυακριλαμιδικών gel είναι μια ψηφιακή εικόνα, στο εξής εικόνα πηκτώματος, η οποία περιέχει εκατοντάδες κηλίδες. Η κατάτμηση αυτών των κηλίδων μπορεί να αποκαλύψει διαφοροποιήσεις στην έκφραση των πρωτεϊνών σε ένα δοθέν βιολογικό σύστημα. Ωστόσο, λανθασμένη κατάτμηση των εικόνων πηκτώματος μπορεί να επηρεάσει πάρα πολύ σημαντικά το προφίλ έκφρασης των πρωτεϊνών.

Η κατάτμηση των πρωτεϊνών παραμένει ακόμα και σήμερα μία πρόκληση λόγω της φύσης της εικόνας. Οι εικόνες πηκτώματος μπορεί να περιέχουν μέχρι και 10,000 πρωτεϊνικές κηλίδες, κάθε μία εκ των οποίων έχει διαφορετική φωτεινότητα, σχήμα και μέγεθος. Επιπρόσθετα, μπορεί να υπάρχουν διπλανές κηλίδες οι οποίες να μην μπορούν να διαχωριστούν επειδή είναι επικαλυπτόμενες. Ακόμα, οι εικόνες πηκτώματος περιέχουν ανομοιογενές υπόβαθρο και είναι επηρεασμένες από θόρυβο γεγονός που καθιστά την επεξεργασία και την κατάτμηση τους δύσκολες διαδικασίες.

Μέχρι στιγμής έχουν προταθεί αρκετές τεχνικές και έχουν αναπτυχθεί αρκετά λογισμικά για τη διαχείριση εικόνων πηκτώματος. Οι τεχνικές κατάτμησης εικόνων βασισμένες σε watershed μεθόδους [1, 2] μπορούν να οδηγήσουν σε υπερκατάτμηση. Η επιλογή εσωτερικών δεικτών [3] είναι μια μέθοδος που προτάθηκε για την αντιμετώπιση του προβλήματος της υπερκατάτμησης, απαιτεί όμως ανθρώπινη παρέμβαση η οποία επηρεάζει τα αποτελέσματα. Οι μέθοδοι που βασίζονται σε μορφολογία [4] και εύρεση ακμών [5, 6] δεν δίνουν ικανοποιητικά αποτελέσματα λόγω της χαμηλής ποιότητας των εικόνων πηκτώματος. Μέθοδοι κατάτμησης εικόνων βασισμένες σε μονοδιάστατο ιστόγραμμα [7, 8] αποτυγχάνουν γιατί το μονοδιάστατο ιστόγραμμα δεν περιέχει πληροφορία για τη χωρική συσχέτιση μεταξύ των εικονοστοιχείων της εικόνας. Κατ' επέκταση, εικόνες με χαμηλό δείκτη σήματος-προς-θόρυβο (SNR) όπως οι εικόνες πηκτώματος, δεν μπορούν να κατατμηθούν επιτυχώς με αυτήν την μέθοδο.

Η μέθοδος που αναπτύχθηκε στα πλαίσια αυτής της διπλωματικής για την ανάλυση των 2D-PAGE εικόνων μπορεί να χωριστεί σε τρία βασικά στάδια:

α) Χοντρική κατάτμηση της 2D-PAGE σε ένα σετ περιοχών που περιέχουν κυρίως υπόβαθρο και σε ένα σετ που περιέχουν κυρίως κηλίδες,

β) κατάτμηση κάθε συνεκτικής περιοχής του προσκηνίου η οποία περιέχει κυρίως κηλίδες για τον διαχωρισμό γειτνιαζόντων περιοχών που περιέχουν κηλίδες,

γ) διαδικασία βελτιστοποίησης των αποτελεσμάτων για την εύρεση του κατάλληλου περιγράμματος των εικόνων.

Η μέθοδος εφαρμόστηκε σε ένα σετ 16-bit 2D-PAGE εικόνων και τα αποτελέσματα δείχνουν ότι είναι γρήγορη και πολύ αποτελεσματική στην κατάτμηση των εικόνων. Πιο

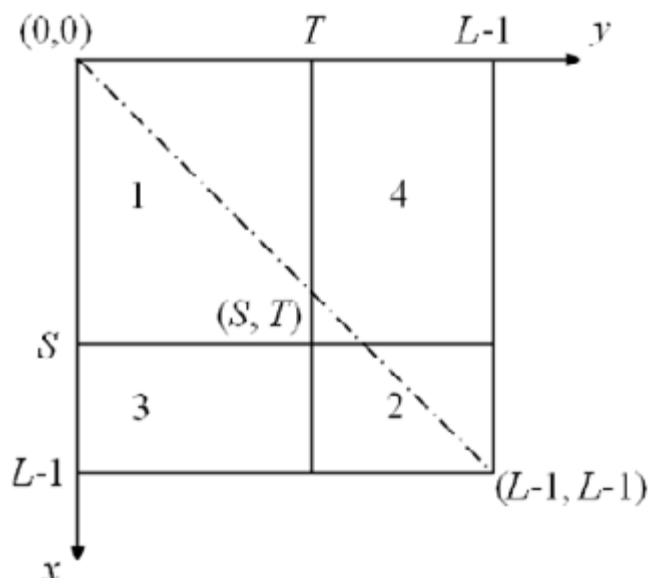
συγκεκριμένα είχε καλά αποτελέσματα ακόμα και όταν εφαρμόστηκε σε εικόνες οι οποίες είχαν πολλές επικαλυπτόμενες κηλίδες, καθώς και σε εικόνες που περιείχαν κηλίδες ποικίλων φωτεινοτήτων, μεγεθών και σχημάτων. Τέλος, τα αποτελέσματα έδειξαν ότι η προτεινόμενη μέθοδος μπορεί να εφαρμοστεί σε εικόνες οι οποίες περιέχουν ανομοιογενές υπόβαθρο.

2. ΚΑΤΩΦΛΙΩΣΗ ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΔΙΣΔΙΑΣΤΑΤΩΝ ΙΣΤΟΓΡΑΜΜΑΤΩΝ

Έστω I μια εικόνα ηχητώματος και I_{mean} η μέση της εικόνα [9]. Το δισδιάστατο ιστογράμμα απεικονίζεται στην Εικόνα 1. Ο x -άξονας και ο y -άξονας αντιπροσωπεύουν το επίπεδο γκρι των I και I_{mean} αντίστοιχα. Ο z -άξονας αντιπροσωπεύει την joint-probability mass function $P(I_r, I_m)$ η οποία δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$P(I_r, I_m) = \frac{r(I_r, I_m)}{M \times N} \quad (1)$$

Τα I_r και I_m αντιπροσωπεύουν τις τιμές φωτεινότητας δύο αντιστοιχών pixel που βρίσκονται στις εικόνες I και I_{mean} . Το $r(I_r, I_m)$ αντιπροσωπεύει τη συχνότητα εμφάνισης του ζεύγους (I_r, I_m) , ενώ τα M, N είναι οι διαστάσεις των δύο εικόνων I και I_{mean} .



Εικόνα 1: Δισδιάστατο Ιστόγραμμα

Σύμφωνα με την αναδρομική μέθοδο 2D Otsu [9,10], μπορεί να βρεθεί ένα ιδανικό διάνυσμα (S, T) το οποίο διασπά το δισδιάστατο ιστογράμμα σε 4 τεταρτημόρια (Εικόνα 1). Τα τεταρτημόρια 1 και 2 περιέχουν τις κατανομές του υποβάθρου και του προσκηνίου

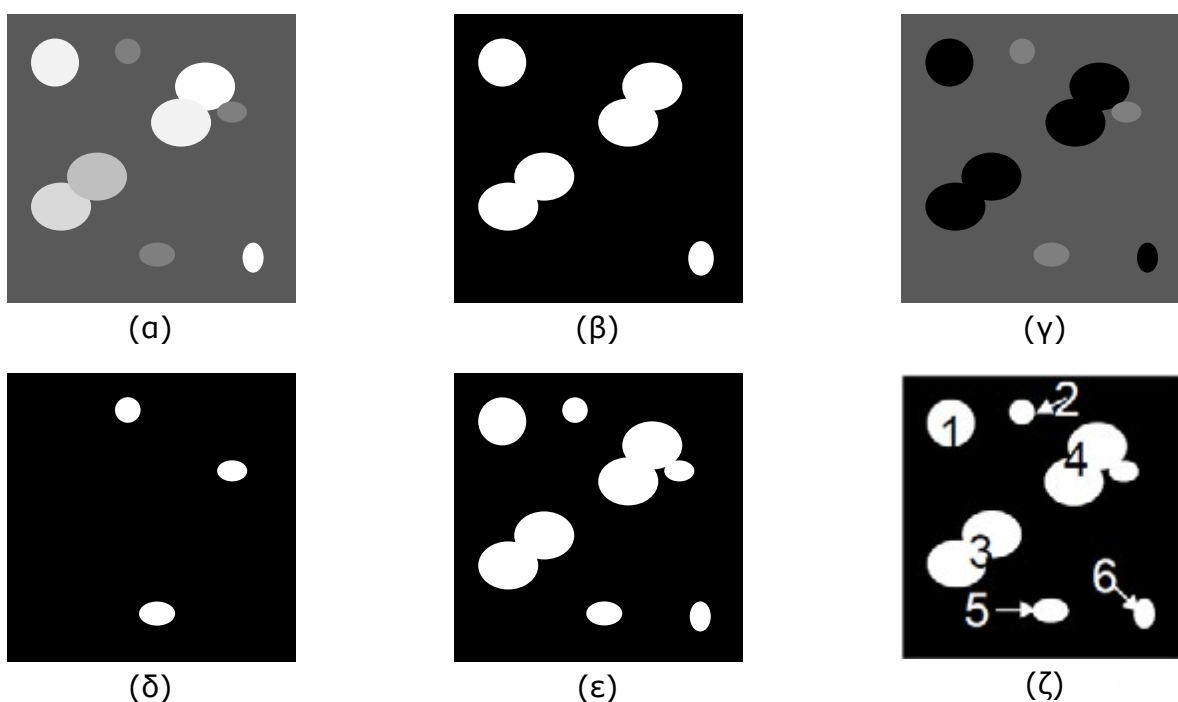
ενώ τα τεταρτημόρια 3 και 4 περιέχουν τις κατανομές των εικονοστοιχείων που βρίσκονται κοντά σε ακμές και θόρυβο [9, 10].

3. ΠΡΟΤΕΙΝΟΜΕΝΗ ΜΕΘΟΔΟΣ

Η προτεινόμενη μέθοδος μπορεί να χωριστεί σε 3 στάδια:

1ο στάδιο:

Καθορίζονται οι περιοχές της εικόνας στις οποίες υπάρχουν πρωτεΐνες. Πιο συγκεκριμένα η 2D-PAGE εικόνα κατατέμνεται χοντρικά σε ένα σετ από περιοχές που περιέχουν κυρίως υπόβαθρο B και σε ένα σετ από περιοχές οι οποίες περιέχουν κυρίως κηλίδες S . Για να εντοπιστούν και οι κηλίδες που είναι χαμηλής φωτεινότητας και κατ' επέκταση δύσκολα ορατές, η αναδρομική τεχνική κατωφλίωσης 2D Otsu εφαρμόζεται δύο φορές.



Εικόνα 2: Οι δύο φάσεις του πρώτου σταδίου της μεθόδου οι οποίες βασίζονται στην τεχνική κατωφλίωσης 2D Otsu

Αρχικά, η αναδρομική τεχνική κατωφλίωσης 2D Otsu εφαρμόζεται σε όλη την 2D-PAGE εικόνα (Εικόνα 2α). Με αυτόν τον τρόπο η εικόνα χωρίζεται σε

- α) ένα σετ περιοχών F_0 που περιέχει κυρίως spots (άσπρες περιοχές Εικόνας 2β) και
- β) στα pixel που κατά πάσα πιθανότητα ανήκουν στο υπόβαθρο B_0 υπόβαθρο (μαύρη περιοχή Εικόνας 2β).

Για να εντοπιστούν κηλίδες που αποτελούνται από εικονοστοιχεία p χαμηλής φωτεινότητας, η τεχνική κατωφλίωσης 2D Otsu εφαρμόζεται ξανά στα εικονοστοιχεία του υποβάθρου B_0 (εικονοστοιχεία Εικόνας 2γ που δεν είναι μαύρα). Με αυτόν τον τρόπο η περιοχή B_0 διαχωρίζεται στις περιοχές που δημιουργούν το F_{01} (άσπρες περιοχές Εικόνας 2δ) και στην περιοχή του υποβάθρου B_{01} (μαύρα εικονοστοιχεία Εικόνας 2δ που είναι μαύρα και στην Εικόνα 2β). Το συνολικό σετ των εικονοστοιχείων που θεωρείται πως ανήκει σε κηλίδες I ορίζεται ως:

$$S = \{p \mid p \in F_0 \cup F_{01}\} \quad (2)$$

και εμφανίζεται στην Εικόνα 2ε με άσπρο χρώμα. Στην Εικόνα 2ζ παρουσιάζονται οι 6 ανεξάρτητες περιοχές $R_i, i=1..6$ που δημιουργούν τα εικονοστοιχεία του σετ S .

2ο στάδιο:

Στη συνέχεια κατατέμνεται σε υποπεριοχές κάθε περιοχή R_i που δημιουργείται από τα εικονοστοιχεία του S ώστε να διαχωριστούν οι επικαλυπτόμενες κηλίδες. Σύμφωνα με τον Bettens κ.α. [11] η φωτεινότητα των πρωτεϊνικών κηλίδων μεγιστοποιείται στο κέντρο τους, ενώ μειώνεται σε περιοχές μακριά από το κέντρο τους. Όταν η κορυφή είναι λεπτή τότε οι κηλίδες προσομοιάζουν με τη συνάρτηση 3D-Gaussian. Ενώ όταν η κορυφή είναι πλατιά, οι κηλίδες μοιάζουν με οροπέδιο. Έτσι τα τοπικά μέγιστα στις περιοχές R είναι οι πιθανότεροι υποψήφιοι για τα κέντρα των πρωτεϊνικών κηλίδων που υπάρχουν σε αυτές.

Κάθε περιοχή R_i κατατέμνεται σε υποπεριοχές γύρω από τα τοπικά μέγιστα που υπάρχουν στις εντάσεις των εικονοστοιχείων της. Αρχικά ο αλγόριθμος κατάτμησης εντοπίζει τη μέγιστη τιμή έντασης των εικονοστοιχείων της κάθε περιοχής στη μειωμένη από το θόρυβο εικόνα I .

Εν συνεχεία για κάθε τιμή έντασης I (ξεκινώντας από τη μέγιστη και καταλήγοντας στην ελάχιστη), εντοπίζει τα εικονοστοιχεία P που έχουν την ένταση I . Στη συνέχεια σε κάθε ένα από αυτά τα P αποδίδει ετικέτα με βάση τα παρακάτω κριτήρια:

- Αν τουλάχιστον ένα από τα 8 γειτονικά εικονοστοιχεία του εικονοστοιχείου έχει ετικέτα, τότε το εικονοστοιχείο παίρνει την ετικέτα που εμφανίζεται τις περισσότερες φορές. Αν το εικονοστοιχείο μπορεί να λάβει παραπάνω από μία ετικέτες, τότε επιλέγεται τυχαία η μία από αυτές.
- Αν κανένα από τα 8 γειτονικά εικονοστοιχεία του εικονοστοιχείου P δεν έχει ετικέτα, τότε το εικονοστοιχείο P λαμβάνει μία νέα ετικέτα.
- Γειτονικά εικονοστοιχεία του P για τα οποία τα αντίστοιχα εικονοστοιχεία έχουν ίδια ένταση παίρνουν την ίδια τιμή-ετικέτα.

Με αυτόν τον τρόπο οι 6 περιοχές R_i χωρίζονται σε Z υποπεριοχές, όσες και οι διαφορετικές ετικέτες με τις οποίες επισημάνθηκαν τα εικονοστοιχεία με τη διαδικασία αυτή. Τα εικονοστοιχεία που βρίσκονται σε κάθε υποπεριοχή έχουν ίδια τιμή-ετικέτα ενώ

τα εικονοστοιχεία διαφορετικών υποπεριοχών έχουν διαφορετικές μεταξύ τους ετικέτες. Κάθε μία από τις αυτές υποπεριοχές θεωρείται πρωτεϊνική κηλίδα η οποία πιθανόν να περιέχει υπόβαθρο ή θόρυβο γύρω της.

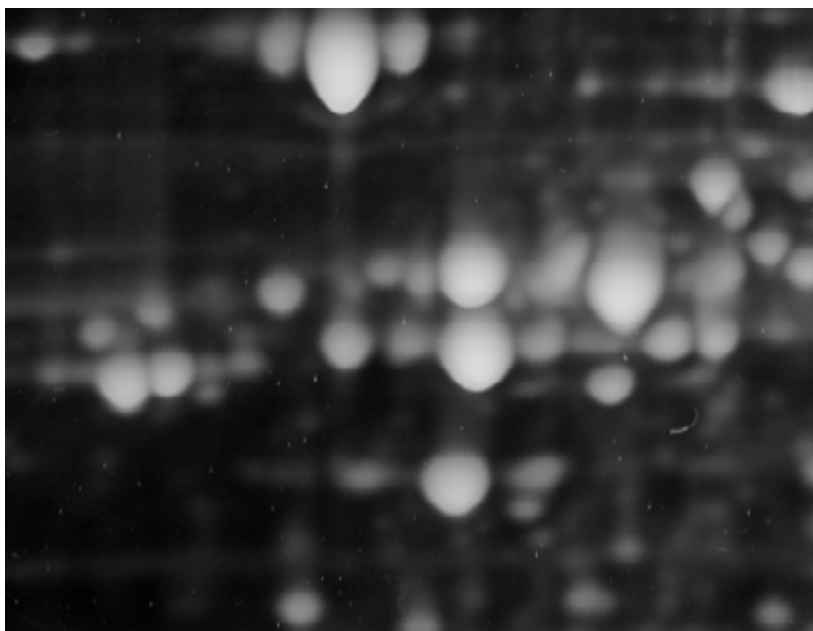
3ο στάδιο:

Σε αυτό το στάδιο γίνεται κατωφλίωση ξεχωριστά σε κάθε υποπεριοχή έτσι ώστε να απομονωθεί τυχόν υπόβαθρο υψηλής φωτεινότητας ή θόρυβος που υπάρχει γύρω από τις κηλίδες και που δημιουργήθηκε από εικονοστοιχεία του συνόλου S . Το κατώφλι που χρησιμοποιείται λέγεται βέλτιστο (Optimal threshold) [12].

Ο αλγόριθμος ολοκληρώνεται με τη δημιουργία της εικόνας εξόδου στην οποία έχουν διαχωριστεί οι κηλίδες με βάση το περίγραμμα των κατωφλιωμένων υποπεριοχών.

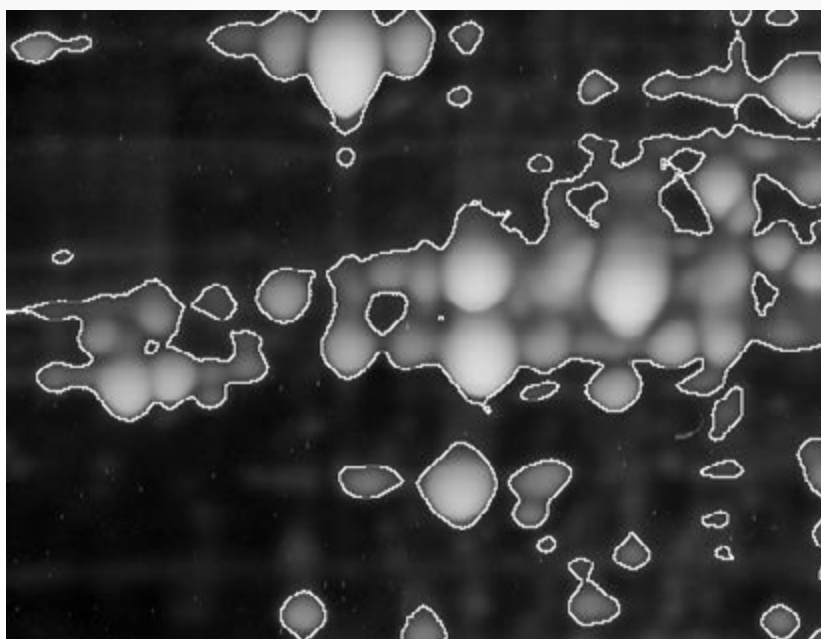
4. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Η προτεινόμενη μέθοδος εφαρμόστηκε σε πραγματικές και συνθετικές εικόνες πηκτώματος που περιέχουν θόρυβο καθώς και πολλές επικαλυπτόμενες κηλίδες. Ένα παράδειγμα πραγματικής εικόνας πηκτώματος παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.



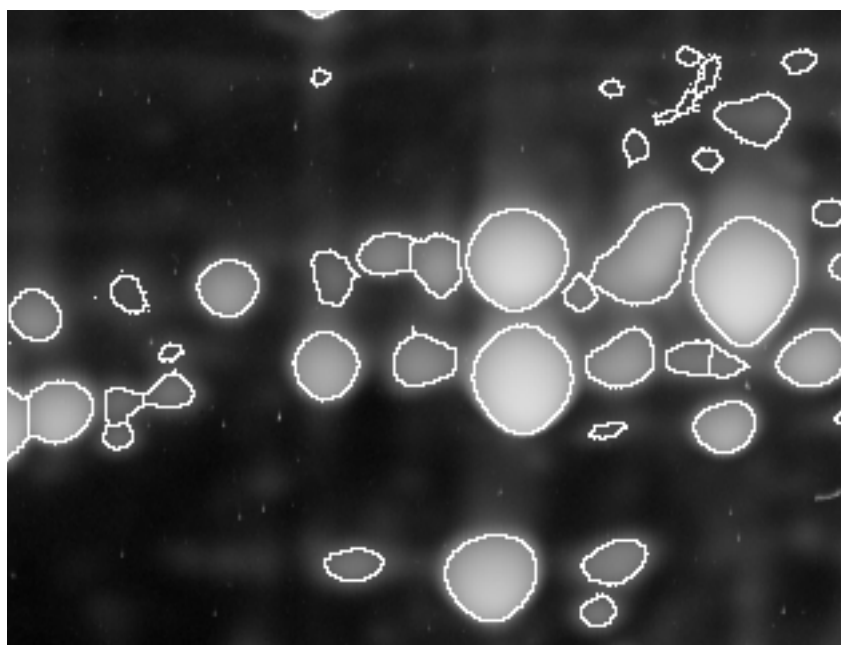
Εικόνα 3: Περιοχή δισδιάστατης πραγματικής εικόνας πηκτώματος

Στην Εικόνα 4 παρουσιάζονται με διαχωριστικά περιγράμματα οι συνεκτικές περιοχές τις οποίες σχηματίζουν τα εικονοστοιχεία της Εικόνας 3 μετά τη διπλή εφαρμογή της αναδρομικής τεχνικής κατωφλίωσης 2D Otsu στην Εικόνα 3.



Εικόνα 4: Περιγράμματα συνεκτικών περιοχών προσκηνίου Εικόνας 3

Η εικόνα εξόδου μετά την εφαρμογή του διαχωρισμού των περιοχών με βάση τα τοπικά μέγιστα των συνεκτικών περιοχών καθώς και την εφαρμογή μονοδιάστατης κατωφλίωσης σε κάθε μία από της υποπεριοχές εμφανίζεται στην Εικόνα 5. Όπως φαίνεται η προτεινόμενη μέθοδος εντόπισε και κατέτμησε με αρκετή επιτυχία την πλειονότητα των πρωτεϊνικών κηλίδων.



Εικόνα 5: Κατατμημένη εικόνα η οποία αντιστοιχεί στην Εικόνα 3

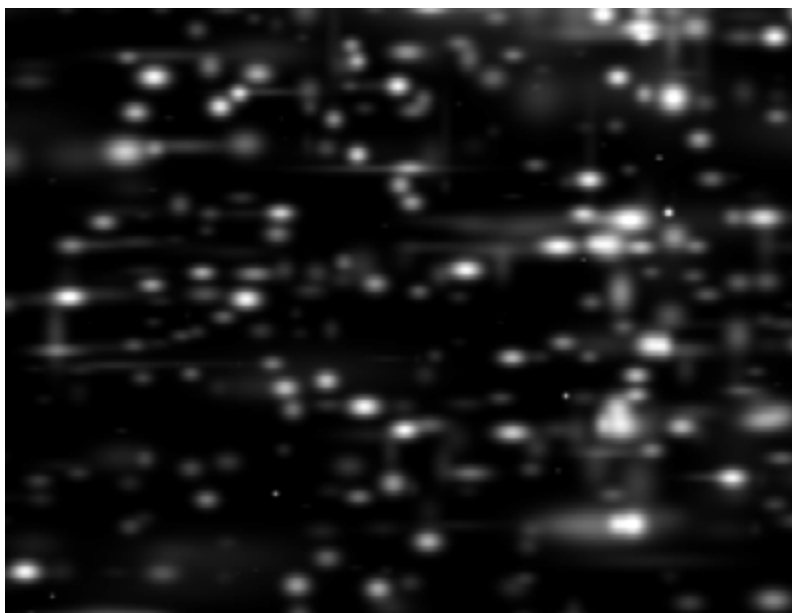
Ο πίνακας 1 παρουσιάζει τα στατιστικά αποτελέσματα κατάτμησης της προτεινόμενης μεθόδου στην πραγματική εικόνα πηκτώματος που παρουσιάζεται στην Εικόνα 3. Όπως

φαίνεται, το ποσοστό των πραγματικών κηλίδων που εντοπίστηκαν από την προτεινόμενη μέθοδο είναι αρκετά υψηλό (αγγίζει το 91,8%), ενώ το ποσοστό των ψεύτικων κηλίδων που ανιχνεύτηκαν ως αληθινές είναι πολύ μικρό (μόλις 6,7%).

Κηλίδες	Ποσοστό επιτυχίας
Αληθινές κηλίδες που ανιχνεύτηκαν	91,8%
Ψεύτικες κηλίδες που ανιχνεύτηκαν ως αληθινές	6,7%

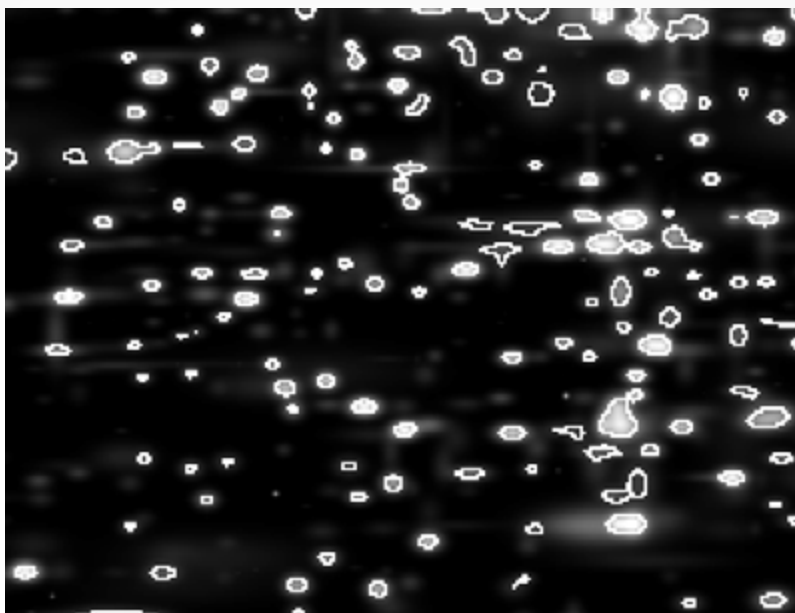
Πίνακας 1: Αποτελέσματα βάσει της προτεινόμενης μεθόδου

Εν συνεχεία, ο αλγόριθμος εφαρμόστηκε και σε συνθετικές εικόνες πηκτώματος. Ένα παράδειγμα συνθετικής εικόνας πηκτώματος παρουσιάζεται στην Εικόνα 6. Όπως μπορεί να παρατηρηθεί εύκολα οι εικόνα αυτή περιλαμβάνουν πρωτεϊνικές κηλίδες μικρότερου μεγέθους σε σχέση με τις κηλίδες των πραγματικών εικόνων. Επιπλέον οι κηλίδες αυτές είναι πολύ δυσδιάκριτες δια γυμνού οφθαλμού.



Εικόνα 6: Δισδιάστατη συνθετική εικόνα πηκτώματος

Το αποτέλεσμα της κατάτμησης της εικόνας μετά την εφαρμογή του διαχωρισμού των περιοχών με βάση τα τοπικά μέγιστα καθώς και την εφαρμογή μονοδιάστατης κατωφλίωσης σε κάθε μία από της υποπεριοχές εμφανίζεται στην Εικόνα 7. Όπως φαίνεται η προτεινόμενη μέθοδος εντόπισε και κατέτμησε με αρκετή επιτυχία την πλειονότητα των πρωτεϊνικών κηλίδων.



Εικόνα 7: Κατατημένη εικόνα η οποία αντιστοιχεί στην Εικόνας 6

5. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Συνοψίζοντας, η δισδιάστατη ηλεκτροφόρηση του πηκτώματος είναι μια ισχυρή, καθιερωμένη μέθοδος για τον διαχωρισμό χιλιάδων πρωτεϊνών μέσα σε ένα βιολογικό δείγμα. Η πολυπλοκότητα των κηλίδων υπαγορεύει τη χρήση δυνατών μεθόδων επεξεργασίας εικόνας ώστε να αναλυθούν τα πηκτώματα και να απομονωθούν οι πρωτεΐνες. Τα διαθέσιμα λογισμικά επεξεργασίας εικόνων πηκτώματος δεν παρέχουν ικανοποιητικά αποτελέσματα και συνήθως απαιτούν την παρέμβαση του χρήστη για την βελτιστοποίηση των αποτελεσμάτων. Στην παρούσα διπλωματική αναπτύχθηκε πρωτότυπος αλγόριθμος επεξεργασίας εικόνων πηκτώματος. Ο αλγόριθμος βασίζεται στον εντοπισμό των περιοχών της εικόνας που περιέχουν πρωτεϊνικές κηλίδες χρησιμοποιώντας δισδιάστατα ιστογράμματα. Εν συνεχεία, κατατέμνει με χρήση watershed τις περιοχές αυτές και βελτιστοποιεί το περίγραμμά τους.

Η πειραματική αξιολόγηση που διενεργήθηκε απέδειξε πως ο συγκεκριμένος αλγόριθμος είναι ικανός να εντοπίζει και να κατατέμνει με μεγάλα ποσοστά επιτυχίας την πλειοψηφία των πρωτεϊνικών κηλίδων που υπάρχουν σε πραγματικές και συνθετικές εικόνες πηκτώματος. Οι εικόνες αυτές χαρακτηρίζονται από ανομοιογενές υπόβαθρο και πολλές επικαλυπτόμενες κηλίδες. Η παρούσα διπλωματική επεκτάθηκε και αποτελέσματα της δημοσιεύτηκαν στο διεθνές επιστημονικό συνέδριο ICPR 2010 [13].

ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- [1] Pleissner, K.P., Hoffman, F., Kriegel, K., Wenk, C., Wegner, S., Sahlstrom, A., Oswald, H., Alt, H., Fleck, E.: New algorithmic approaches to protein spot detection and pattern matching in two-dimensional electrophoresis databases, *Electrophoresis*, vol. 20, pp. 755-765 (1999)
- [2] Vincent, L., and Soille, P.Q.: Watersheds in digital spaces: an efficient algorithm based on immersion simulations, *IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, vol. 13, no. 6, pp. 583–598 (1991)
- [3] Kim, Y., Kim, J. , Won, Y. , In, Y: Segmentation of protein spots in 2-D gel electrophoresis images with watershed using hierarchical threshold, *LNCS*, vol. 2869, pp. 389-396 (2003)
- [4] Vincent, L.: Morphological grayscale reconstruction in image analysis: applications and efficient algorithms, *IEEE Trans. on Image Processing*, vol. 2, no. 2, pp. 176-201 (1993)
- [5] Lemkin, P.F., L.E. Lipkin, 2D electrophoresis gel data base analysis: aspects of data structures and search strategies in GELLAB, *Electrophoresis*, vol. 4, no. 1, pp. 71-81 (1983)
- [6] Appel, R.D., et al, Melanie II-a third generation software package for analysis of two-dimensional electrophoresis images: II. Algorithms, *Electrophoresis*, vol. 8, no. 15, pp. 2735-2748 (1997)
- [7] Cutler, P., G. Heald, G., White, I.R., Ruan, J.: A novel approach to spot detection for two-dimensional gel electrophoresis images using pixel value collection, *Proteomics*, vol. 3, pp. 392-401 (2003)
- [8] Peer, P., Corzo, L.G.: Local Pixel Value Collection Algorithm for Spot Segmentation in Two-Dimensional Gel Electrophoresis Research, Hindawi Publishing Corporation Comparative and Functional Genomics, (2007)
- [9] Zhang, J., Hu, J.: Image Segmentation Based on 2D Otsu Method with Histogram Analysis, *International Conference Science and Software Engineering* (2008)
- [10] Gong, J., Li, L., Chen, W. Q: Fast recursive algorithms for two-dimensional thresholding, *Pattern Recognition*, vol. 31, no. 3, pp. 295-300, (1998)
- [11] Bettens, E., Scheunders, P., Van Dyck, D., Moens, L., Van Osta, P.,: Computer analysis of two-dimensional electrophoresis gels: a new segmentation and modelling algorithm, *Electrophoresis*, vol. 18, pp. 792-798 (1997)
- [12] Gonzalez, R., Woods, R.,: *Digital Image Processing*, Prentice Hall, Second Edition.
- [13] Zacharia, E., Kostopoulou, E., Maroulis, D., Kossida, S.: A Spot Segmentation Approach for 2D Gel Electrophoresis Images Based on 2D Histograms, In *International Conference on Pattern Recognition (ICPR)*, pp. 2540-2543, Istanbul (2010)

Τριγωνοποιήσεις Σημειοσυνόλων, Πολύτοπα Υψηλής Διάστασης και Εφαρμογές

Φυσικόπουλος Βησσαρίων

vfisikop@di.uoa.gr

*Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών,
Πανεπιστημιούπολη, Ιλίσια, 15784, Αθήνα, Ελλάδα*

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στην παρούσα εργασία ασχολούμαστε με γεωμετρικούς αλγορίθμους με εφαρμογές στην επίλυση συστημάτων πολυωνυμικών εξισώσεων. Η προσέγγιση που θα μελετήσουμε υπολογίζει το πολύτοπο της απαλείφουσας του Νεύτωνα ενός δεδομένου πολυωνυμικού συστήματος απαριθμώντας υποδιαιρέσεις ενός συνόλου που προκύπτει από τις εξισώσεις. Σε θεωρητικό επίπεδο μελετάμε τα Ξ πολύτοπα και αποδεικνύουμε ότι μια ειδική περίπτωση τους είναι το πολύτοπο της απαλείφουσας. Επιπλέον δίνουμε αλγοριθμικούς χαρακτηρισμούς για ένα είδος τοπικών μετασχηματισμών μεταξύ υποδιαιρέσεων με ιδιαίτερο ενδιαφέρον. Τέλος, αναπτύσσουμε λογισμικό για την πειραματική αξιολόγηση των μεθόδων και των θεωρητικών αποτελεσμάτων.

Λέξεις κλειδιά: Υπολογιστική γεωμετρία, Πολύτοπο απαλείφουσας, Αλγόριθμοι απαρίθμησης τριγωνοποιήσεων, Ευαίσθητοι εξόδοι αλγόριθμοι

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ:

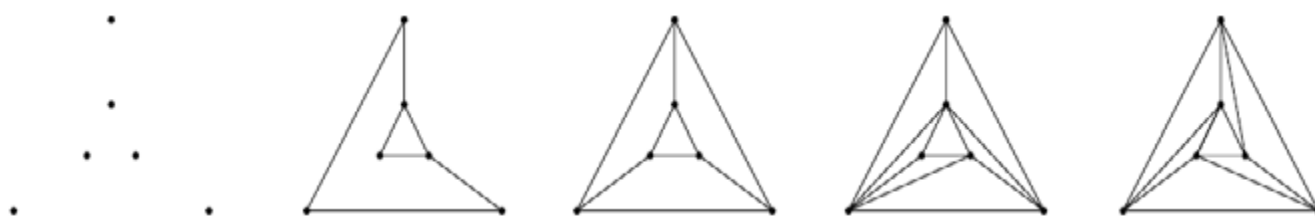
Εμίρης Ιωάννης, Καθηγητής, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών - ΕΚΠΑ

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Σε αυτήν τη διπλωματική εργασία μελετάμε αλγορίθμους που υπολογίζουν το πολύτοπο του Νεύτωνα της απαλείφουσας (resultant), ή *πολύτοπο της απαλείφουσας*, ενός δεδομένου πολυωνυμικού συστήματος. Ως είσοδο του προβλήματος μας θα θεωρούμε το σύνολο των σημείων που αντιστοιχούν στους εκθέτες των μονωνύμων του συστήματος (π.χ. το x^3y αντιστοιχεί στο σημείο $(3, 1)$), ενώ ως έξοδο θα θέλαμε όλες τις κορυφές του πολυτόπου της απαλείφουσας. Ουσιαστικά η εργασία αφορά Υπολογιστική Γεωμετρία μεγάλων διαστάσεων, συνήθως πάνω από 5 και 10.

Η απαλείφουσα είναι ένα θεμελιώδες αντικείμενο στην υπολογιστική άλγεβρα με εφαρμογές στην επίλυση πολυωνυμικών συστημάτων και στην *αλγεβροποίηση* (implicitization) παραμετρικών επιφανειών [DE05, EK03]. Στην δεύτερη περίπτωση, μια προβολή του πολυτόπου της απαλείφουσας παράγει το πολύτοπο της (άγνωστης) αλγεβρικής εξίσωσης, αναγάγοντας κατά συνέπεια το πρόβλημα της αλγεβροποίησης σε ένα πρόβλημα γραμμικής άλγεβρας.

Η προσέγγιση που θα μελετήσουμε υπολογίζει το πολύτοπο της απαλείφουσας *απαριθμώντας υποδιαιρέσεις* ενός συνόλου που προκύπτει από τις εξισώσεις. Μια εναλλακτική προσέγγιση βασίζεται στην τροπική γεωμετρία [SY08]. Από τη θεωρία [GKZ94] γνωρίζουμε δύο πολύ βασικά αποτελέσματα. Το πρώτο μας λέει ότι οι υποδιαιρέσεις που αρκούν για να απαριθμηθούν αντιστοιχούν στις κορυφές ενός πολυτόπου που ονομάζεται δευτερεύον (secondary) πολύτοπο. Το δεύτερο ότι πολλές από αυτές τις υποδιαιρέσεις, δηλαδή κορυφές του δευτερεύοντος πολυτόπου αντιστοιχούν σε μια κορυφή του πολυτόπου της απαλείφουσας.



Σχήμα 1: Ένα σύνολο σημείων, μια μη έγκυρη και μια έγκυρη πολυεδρική υποδιάρθρωση, μια κανονική και μια μη κανονική τριγωνοποίηση

Ένας υποψήφιος αλγόριθμος θα απαριθμούσε όλες αυτές τις κορυφές εκτελώντας κάποιον αλγόριθμο αναζήτησης γραφημάτων (π.χ. BreathFirstSearch) στο γράφημα του δευτερεύοντος πολυτόπου. Εφόσον μας ενδιαφέρουν αλγόριθμοι υπολογισμού του πολυτόπου της απαλείφουσας, ο αλγόριθμος αυτός είναι μη αποδοτικός για το πρόβλημα μας. Αξίζει να σημειωθεί ότι το πλήθος των κορυφών και των δύο πολυτόπων μπορεί να είναι εκθετικό ως προς το πλήθος των σημείων εισόδου.

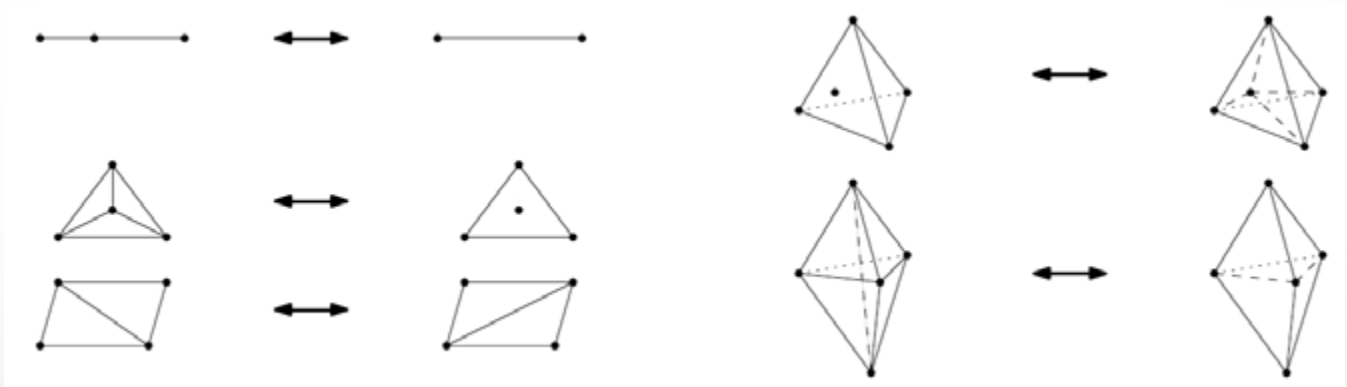
Στα πλαίσια της εργασίας μελετάμε τις ιδιότητες αυτών των πολυτόπων, συγκρίνουμε

πειραματικά το πλήθος των κορυφών τους αλλά και την ταχύτητα και τη μνήμη που καταναλώνουν οι διάφοροι αλγόριθμοι που τα απαριθμούν. Σε θεωρητικό επίπεδο μελετάμε τα Ξ πολύτοπα και αποδεικνύουμε ότι μια ειδική περίπτωση τους είναι το πολύτοπο της απαλείφουσας. Επιπλέον δίνουμε αλγοριθμικούς χαρακτηρισμούς για ένα είδος τοπικών μετασχηματισμών μεταξύ υποδιαίρεσεων με ιδιαίτερο ενδιαφέρον. Απώτερος σκοπός μας είναι η κατασκευή ενός αλγορίθμου που απαριθμεί το πολύτοπο της απαλείφουσας και έχει πολυωνυμική χρονική και χωρική πολυπλοκότητα ως προς το μέγεθος του πολύτοπου αυτού. Τέτοιοι αλγόριθμοι ονομάζονται *ευαίσθητοι εξόδου* (output-sensitive) αλγόριθμοι. Κάποια από τα αποτελέσματα αυτής της διπλωματικής έχουν δημοσιευθεί στην εργασία [EFK10].

1. ΤΡΙΓΩΝΟΠΟΙΗΣΕΙΣ ΚΑΙ ΠΟΛΥΩΝΥΜΙΚΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ

Έστω A ένα σύνολο σημείων στον \mathbb{R}^d . Μια *πολυεδρική υποδιαίρεση* (polyhedral subdivision) του A είναι ένα σύνολο υποσυνόλων του A , τα κελιά της υποδιαίρεσης, τέτοια ώστε η ένωση των κυρτών περιβλημάτων τους (convex hull) να ισούται με το κυρτό περίβλημα του και κάθε ζευγάρι κελιών να τέμνεται σε ένα κοινή του έδρα (face). Μια πολυεδρική υποδιαίρεση ονομάζεται *κανονική* (regular) όταν μπορεί να παραχθεί ως προβολή του κάτω περιβλήματος (lower hull) του ανυψωμένου, για κάποια ανύψωση του στον \mathbb{R}^{d+1} . Μια *τριγωνοποίηση* (triangulation) T είναι μια πολυεδρική υποδιαίρεση του A , τις οποίας τα κελιά είναι όλα άπλωκα (simplicies). Το άπλωκο είναι ένα μέγιστο αφινικώς ανεξάρτητο σύνολο. Για παράδειγμα, τρία σημεία που σχηματίζουν τρίγωνο στο επίπεδο είναι ένα άπλωκο. Μια τριγωνοποίηση μπορεί να μετατραπεί σε μια άλλη μέσω ενός τοπικού μετασχηματισμού που ονομάζεται flip.

Το *κύκλωμα* (circuit) είναι το ελάχιστο αφινικώς εξαρτημένο σύνολο. Για παράδειγμα, τρία σημεία που σχηματίζουν τρίγωνο στο επίπεδο και ένα σημείο στο εσωτερικό. Τα κυκλώματα έχουν ακριβώς δύο τριγωνοποιήσεις (βλ. Σχήμα 2).



Σχήμα 2: Κυκλώματα διάστασης 1,2,3 και οι αντίστοιχες τριγωνοποιήσεις

Έστω T μια τριγωνοποίηση του A και $Z_+ \subseteq T$ μια τριγωνοποίηση του κυκλώματος $Z \subseteq A$. Θα λέμε ότι η T στηρίζεται στο Z αν αλλάζοντας την παρούσα τριγωνοποίηση Z_+ του Z στην άλλη (Z_-), δημιουργούσαμε μια νέα τριγωνοποίηση T . Αυτός είναι και ο ορισμός ενός flip που στηρίζεται στο Z . Έστω $|A| = n$, τότε το δευτερεύον πολύτοπο (secondary polytope) $\Sigma(A)$ έχει διάσταση $n - d - 1$, οι κορυφές του αντιστοιχούν στις κανονικές τριγωνοποιήσεις του και οι ακμές του σε flips [GKZ94, LRS08].

Το άθροισμα Minkowski δύο (ή περισσότερων) κυρτών πολύτοπων P_1, P_2 είναι το κυρτό πολύτοπο $P = P_1 + P_2 := \{p_1 + p_2 \mid p_1 \in P_1, p_2 \in P_2\}$. Έστω A_0, \dots, A_k σύνολα σημείων στον \mathbb{R}^d και $A = A_0 + \dots + A_k$ το Minkowski άθροισμα τους. Ένα υποσύνολο του A ονομάζεται Minkowski κελί αν μπορεί να γραφτεί ως $F_0 + \dots + F_k$ για $F_i \subseteq A_i$. Το Minkowski κελί είναι λεπτό (fine) να τα F_i είναι αφινικώς ανεξάρτητα και $\sum_{i=1}^k \dim(\text{CH}(F_i)) = d$.

Όταν $k = d$, τα Minkowski κελιά είναι i -μικτά αν είναι Minkowski αθροίσματα k ακμών και μίας κορυφής, δηλαδή $|F_j| = 2$ για $j = i$, $|F_i| = 1$. Όταν $k = d - 1$, τα Minkowski κελιά είναι μικτά αν είναι Minkowski αθροίσματα ακμών. Μια κανονική πολυεδρική υποδιαίρεση του A ονομάζεται μικτή και είναι λεπτή αν όλα τα κελιά της είναι λεπτά. Στη συνέχεια θα ασχοληθούμε μόνο με υποδιαίρεσεις που είναι κανονικές και λεπτές και $k = d$ εκτός αν αναφέρεται το αντίθετο. Αυτή είναι και η πιο σημαντική περίπτωση καθώς περικλείει την επίλυση συστημάτων και την αλγεβροποίηση. Σημειώστε ότι η αλγεβροποίηση επιφανειών στον \mathbb{R}^3 αντιστοιχεί στην περίπτωση $k = d = 2$.

Έστω $f = f_0, \dots, f_k$ ένα σύστημα πολυωνυμικών εξισώσεων σε k μεταβλητές. Το σύνολο στήριξης (support) $A_i \in \mathbb{N}^k$ της f_i είναι το σύνολο των διανυσμάτων των εκθετών που αντιστοιχούν σε μη μηδενικούς συντελεστές. Για οποιοδήποτε υποσύνολο $J \subset \{0, \dots, k\}$, έστω ότι $r(J)$ δηλώνει το βαθμό (rank) του αφινικού πλέγματος (lattice) που παράγεται από το $\sum_{j \in J} A_j$. Υποθέτουμε ότι $r(\{0, \dots, k\}) = k$, και $r(J) \geq |J|$ για κάθε κατάλληλο J .

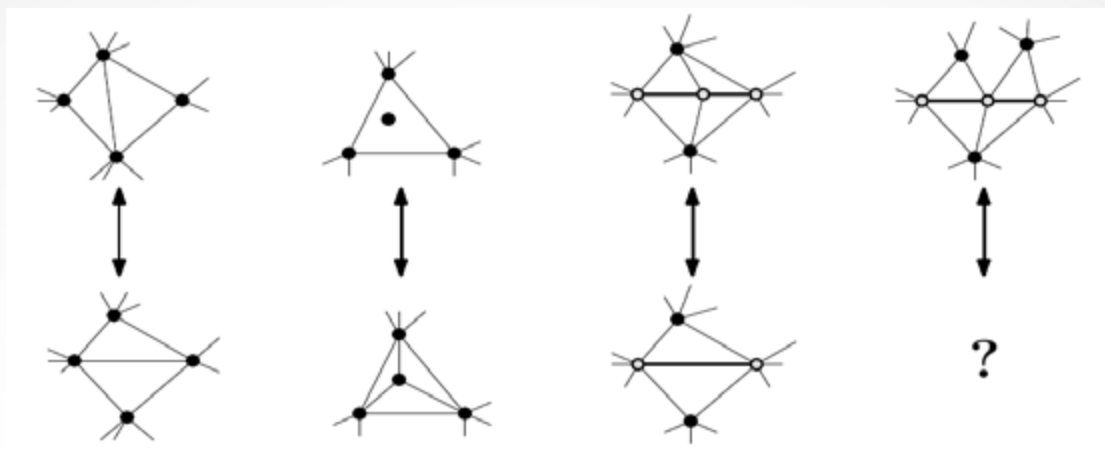
Το πολύτοπο το Νεύτωνα $N(f_i)$ ενός πολυωνύμου f_i είναι το κυρτό περίβλημα το συνόλου στήριξης. Η (αραιή) απαλείφουσα R του f είναι ένα πολυώνυμο στους συντελεστές του f τέτοιο ώστε $R = 0$ αν και μόνον αν f έχει μια λύση στο $(\mathbb{C}^*)^k$. Η απαλείφουσα είναι η γενίκευση της ορίζουσας ενός υπερπροσδιορισμένου συστήματος και της απαλείφουσας κατά Sylvester δύο πολυωνύμων σε μια μεταβλητή. Ονομάζουμε $N(R)$ το πολύτοπο της απαλείφουσας και ακραίο όρο του R ένα μονώνυμο του R που αντιστοιχεί στο $N(R)$.

Πρόταση 1.1. [Stu94, Θεώρημα 2.1]

Σύμφωνα με τους παραπάνω ορισμούς και συμβολισμούς, δεδομένου ενός πολυωνυμικού συστήματος f και μια μικτής υποδιαίρεσης του Minkowski sum των συνόλων στήριξης, παίρνουμε ένα ακραίο όρο της απαλείφουσας R που ισούται με:

$$\pm \prod_{i=0}^k \prod_{\sigma} c_{iF_i}^{vol(\sigma)}$$

όπου $\sigma = F_0 + \dots + F_k$ είναι ένα i -μικτό κελί και $vol(\cdot)$ δηλώνει τον Ευκλείδιο όγκο.



Σχήμα 3: Flips που στηρίζονται σε κυκλώματα διάστασης 2 και 1

Το *τέχνασμα Cayley* (Cayley's trick) [GKZ94] ορίζει, για κάποια αφινική βάση, $\{e_0, \dots, e_k\}$ του \mathbb{R}^k , το σύνολο σημείων $C(A_0, \dots, A_k) := \cup_{i=0}^k \{(a, e_i) : a \in A_i\} \subset \mathbb{R}^{d+k}$, του οποίου οι κανονικές τριγωνοποιήσεις είναι 1-1 με τις μικτές υποδιαιρέσεις του A . Οπότε, μπορούμε να απαριθμήσουμε τις κορυφές του $N(R)$ απαριθμώντας όλες τις κορυφές του δευτερεύοντος πολύτοπου $\Sigma(A_0, A_1, \dots, A_k)$.

Επιπλέον, το $N(R)$ είναι ένας αθροιστής Minkowski $\Sigma(A_0, A_1, \dots, A_k)$ [Stu94]. Είναι γνωστές δύο βασικές μέθοδοι απαρίθμησης τριγωνοποιήσεων [MII96, PR03]. Η πρώτη μέθοδος χρησιμοποιεί την τεχνική της αντίστροφης αναζήτησης (reverse search) ενώ η δεύτερη τη θεωρία των matroids. Επιπλέον, η δεύτερη μέθοδος έχει υλοποιηθεί στο πακέτο λογισμικού TOPCOM το οποίο και χρησιμοποιούμε στην παρούσα εργασία για πειραματική αξιολόγηση των μεθόδων που μελετάμε. Όπως θα δούμε και στη συνέχεια της εργασίας ο αλγόριθμος που προκύπτει είναι απλοϊκός και μη αποδοτικός σε πραγματικές εφαρμογές.

Από τη σκοπιά της υπολογιστικής πολυπλοκότητας το πρόβλημα της απαρίθμησης όλων των τριγωνοποιήσεων ενός συνόλου $A = \{a_1, a_1, \dots, a_m\}$ στον \mathbb{R}^d , ακόμα και στην περίπτωση που $d = 2$ η εικασία λέει ότι είναι #P-complete [Vaz04]. Βέβαια στην ειδική περίπτωση που τα σημεία είναι σε κυρτή θέση το πλήθος των τριγωνοποιήσεων δίνεται από τον $m-2$ nd αριθμό Catalan:

$$C_{m-2} = \frac{1}{m-1} C(2m-4, m-2) .$$

Σχετικά με τις κανονικές τριγωνοποιήσεις η χωρική πολυπλοκότητα του προβλήματος απαρίθμησης είναι πολυωνυμική στο μέγεθος της διάστασης d και στο μέγεθος της μέγιστης τριγωνοποίησης [Mas95]. Εντούτοις, το πλήθος των τριγωνοποιήσεων μπορεί να είναι εκθετικό ως προς $|A|$ [Mas95]. Οπότε, επικεντρωνόμαστε σε πολυωνυμικούς ως προς το πλήθος της εξόδου αλγορίθμους (output-sensitive algorithms).

2. Ξ ΠΟΛΥΤΟΠΑ ΚΑΙ ΚΥΒΙΚΑ FLIPS

Στην προηγούμενη ενότητα υπολογίζαμε τις κορυφές το $N(R)$ χρησιμοποιώντας αλγορίθμους απαρίθμησης κανονικών τριγωνοποιήσεων. Ο στόχος μας εδώ είναι να μελετήσουμε την πολυπλοκότητα αυτής της μεθόδου και τελικά να την βελτιώσουμε.

2.1 Ξ πολύτοπα

Όταν $k = d - 1$, οι *διαμορφώσεις (configurations) μικτών κελιών* είναι οι κλάσεις ισοδυναμίας των μικτών υποδιαίρεσεων με τα ίδια μικτά κελιά. Οι κλάσεις αυτές ορίζονται μαζί με τα αντίστοιχα flips μεταξύ τους στο [MV97].

Όταν $k = d$, είναι λογικό να επικεντρωθούμε στα i -μικτά κελιά για να υπολογίσουμε τις κορυφές του $N(R)$. Στο [Kon06], περιγράφεται μια επέκταση των διαμορφώσεων μικτών κελιών σε κλάσεις που περιέχουν τα ίδια i -μικτά κελιά για όλα τα $i \in \{0, \dots, k\}$ και ονομάζονται διαμορφώσεις i -μικτών κελιών. Τα flips μεταξύ των κλάσεων μπορούν να ελεγχθούν εύκολα έχοντας υπολογίσει τη λίστα με όλα τα κυκλώματα της κλάσης. Για να το δούμε αυτό είναι σημαντικό να παρατηρήσουμε ότι ένα flip που ενώνει δύο κλάσεις καταστρέφει τουλάχιστον ένα i -μικτό κελί. Ο αλγόριθμος που προκύπτει απαριθμεί όλες τις διαμορφώσεις i -μικτών κελιών αλλά όχι όλες τις μικτές υποδιαίρεσεις που γενικά είναι περισσότερες οπότε είναι πιο αποδοτικός.

Σημειώστε ότι για λόγους συμβολισμού αφού ένα μικτό κελί c γράφεται ως Minkowski άθροισμα $F_0 + \dots + F_n$, όπου $F_0 \subseteq A_0, \dots, F_n \subseteq A_n$ μπορεί να αναπαρασταθεί από το σύνολο $\{F_0, F_1, \dots, F_n\}$. Έστω S μια μικτή υποδιαίρεση και $c \in S$ ένα κελί της, τότε ο τύπος του c είναι το σύνολο $\tau(c) = \{i \in \{0, \dots, n\} : |F_i| > 1\}$. Ένα κελί $c = \{F_0, F_1, \dots, F_n\}$ ονομάζεται I -μικτό αν $I = \tau(c)$. Μια διαμόρφωση I -μικτών κελιών είναι το σύνολο $S^I := \{(F_i \mid i \in I) \mid c \in S \text{ και } \tau(c) = I\}$ όπου S είναι μια δοσμένη μικτή υποδιαίρεση.

Παρατηρούμε ότι S^I δεν είναι η μικτή υποδιαίρεση του $A_i, i \in I$ επειδή η S^I δεν είναι αναγκαστικά κυρτή (βλ. $\Xi(A_0, A_2)$ στο σχήμα 4 για ένα αντιπαράδειγμα). Παρατηρούμε ότι τα i -μικτά κελιά, που είναι λεπτά, που περιγράφονται παραπάνω για την περίπτωση $n = d$ είναι I -μικτά κελιά όπου $I = \{0, 1, \dots, n\} - \{i\}$. Αν $I = \{0, 1, \dots, n\}$ τότε τα I -μικτά κελιά ονομάζονται πλήρως μικτά κελιά και η διαμόρφωση τους πλήρως μικτή. Αν $n = d - 1$, οι πλήρως μικτές διαμορφώσεις κελιών είναι οι διαμορφώσεις μικτών κελιών όπως ορίζονται στο [MV97]. Αν $n = d$, δεν υπάρχουν πλήρως μικτά κελιά δηλαδή κελιά c με $\tau(c) = \{0, 1, \dots, n\}$. Παρόλα αυτά, μπορούμε να έχουμε σύνολα κελιών c^* τέτοια που $\tau(c^*) = \{0, 1, \dots, n\}$. Θα δούμε στην επόμενη ενότητα ότι αυτά τα σύνολα κελιών έχουν ενδιαφέρουσες ιδιότητες.

Το Ξ πολύτοπο ορίζεται στο [MC00] για $n \leq d - 1$. Θα παρουσιάσουμε τα Ξ πολύτοπα και θα αποδείξουμε ότι μια ειδική περίπτωση του Ξ πολύτόπου όταν $n = d$ είναι το $N(R)$. Έστω $m = \sum_{i=0}^n |A_i|$, S μια μικτή υποδιαίρεση και $c \in S$ ένα κελί της.

Ορίζουμε ως *GKZ διάνυσμα* το $\Phi_S(A) = (\varphi_{S,1}(A), \dots, \varphi_{S,m}(A))$ όπου $\varphi_{S,j}(A) = \sum_{c \in S: aj \in F_i} \text{vol}(C(c))$. Το *I-μικτό GKZ διάνυσμα* είναι το $\Phi_{S,j}^I(A) = (\varphi_{S,1}^I(A), \dots, \varphi_{S,m}^I(A))$ όπου $\varphi_{S,j}^I(A) = \sum_{c \in S: \tau(c) \cup \{i\} = I, aj \in F_i} \text{vol}(C(c))$, $c = \sum_0^n F_i$ και aj παίρνει τιμές στο $u_i A_i$.

Το Ξ *πολύτοπο* των συνόλων σημείων A_0, A_1, \dots, A_n στο \mathbb{R}^d ορίζεται ως $\Xi(A_0, A_1, \dots, A_n) := \text{conv_hull}\{\Phi_S^{\{0,1,\dots,n\}}(A) \mid S \text{ είναι μια μικτή υποδιαίρεση του } (A_0, A_1, \dots, A_n)\}$. Το βασικό θεώρημα στο [MC00] περιγράφει πως τα Ξ πολύτοπα αθροίζουν στο δευτερεύον πολύτοπο. Δηλαδή το δευτερεύον πολύτοπο του A μπορεί να γραφτεί ως $\Sigma(A) = \sum_{I \in \{0,1,\dots,n\}} \Xi(A_i \mid i \in I)$ όπου το άθροισμα είναι ένα Minkowski άθροισμα και οι προσθετέοι ανήκουν στον ίδιο $(\sum_{i=0}^n |A_i|)$ -διάστασης χώρο. Επιπλέον, το I παίρνει τιμές από το δυναμοσύνολο του $\{0, 1, \dots, n\}$.

Πρόταση 2.1.

Αν $n = d$ τότε $\Xi(A_0, A_1, \dots, A_n) = N(\mathbb{R})$.

Απόδειξη.

Έστω S μια μικτή υποδιαίρεση του A και $I = \{0, 1, \dots, n\}$. Θα χρησιμοποιήσουμε την κατασκευή ακραίων όρων του $N(\mathbb{R})$ δεδομένης μικτής υποδιαίρεσης όπως αυτή παρουσιάζεται στο 1.1. Το $\Phi_S(A)$ εξ ορισμού έχει i -συντεταγμένη το άθροισμα των όγκων των απλόκων που περιέχουν το a_i . Αυτός είναι και ο τρόπος που κατασκευάζεται το δευτερεύον πολύτοπο. Τα Ξ πολύτοπα χρησιμοποιούν το $\Phi_S^I(A)$ αντίστοιχα. Το $\Phi_S^I(A)$ εξ ορισμού έχει i -συντεταγμένη το άθροισμα των όγκων των απλόκων που περιέχουν το $a_i \in A_j$ και το αντίστοιχο (από το τέχνασμα Cayley) κελί τους είναι j -μικτό. Ισοδύναμα, κάθε j -μικτό κελί $F_0 + \dots + F_{j-1} + a_i + F_{j+1} + \dots + F_n$ συνεισφέρει με τον όγκο του στην i -συντεταγμένη του $\Phi_S^I(A)$. Δηλαδή, αν a_i είναι το l -στό σημείο του A_j τότε ο όγκος αυτός μπορεί να εκφραστεί ως ο εκθέτης της c_{ij} συμβολικής μεταβλητής του ακραίου όρου που κατασκευάζουμε από το S όπως περιγράφεται στην πρόταση 1.1. Οπότε, $\Phi_S^I(A)$ με $I = \{0, 1, \dots, n\}$ εκφράζει έναν ακραίο όρο του $N(\mathbb{R})$ ίδιο με αυτόν της πρότασης 1.1 δεδομένης υποδιαίρεσης S του A . Άρα, $\text{conv}(\Phi_S^I)$ για όλες τις μικτές υποδιαίρεσεις S ισούται με το $N(\mathbb{R})$ και από τον ορισμό του Ξ είναι επίσης ίσο με $\Xi(A_0, A_1, \dots, A_n)$. *ο.ε.δ.*

Από [Stu94, corollary 5.1] γνωρίζουμε ότι το $N(\mathbb{R})$ είναι ένας Minkowski προσθετέος του δευτερεύοντος πολυτόπου. Συνδυάζοντας το με την παραπάνω πρόταση καταλήγουμε στο ακόλουθο πόρισμα.

Πόρισμα 2.2. $\Sigma(A) = \sum_{I \in \{0,1,\dots,n\}} \Xi(A_i \mid i \in I) + N(\mathbb{R})$

2.2 R-ισοδύναμες κλάσεις

Η πρόταση 1.1, μας υποδεικνύει ότι πολλές μικτές υποδιαίρεσεις μπορούν να αντιστοιχούν

στον ίδιο ακραίο όρο του $N(R)$. Θα ονομάζουμε αυτές τις υποδιαιρέσεις *R-ισοδύναμες*. Παρατηρούμε ότι δύο υποδιαιρέσεις μπορούν να αντιστοιχούν στον ίδιο ακραίο όρο ακόμα και αν δεν ανήκουν στην ίδια διαμόρφωση μικτών κελιών. Οι *R-ισοδύναμες* κλάσεις αντιστοιχούν σε κορυφές του $N(R)$. Θέλουμε να μελετήσουμε τα flips που συνδέουν δύο υποδιαιρέσεις που ανήκουν σε διαφορετική *R-ισοδύναμη* κλάση.

Στη συνέχεια θα υποθέσουμε ότι τα σημεία στα A_i είναι σε γενική θέση δηλαδή αν πάρουμε δύο σημεία από κάποιο A_k και δύο σημεία από κάποιο άλλο A_j οι ακμές που σχηματίζονται δεν είναι παράλληλες. Ο Sturmfels [Stu94, thm.5.2] ονομάζει τα flips αυτά *κυβικά* (cubical). Ας θεωρήσουμε το σύνολο των κελιών που αλλάζουν από ένα τέτοιο flip. Αν αυτά ανυψωθούν στον R^{d+1} στην γενική περίπτωση σχηματίζουν ένα κύβο ο οποίος προβάλλεται στον R^d . Το flip είναι ουσιαστικά η αλλαγή της άνω με την κάτω προβολή αυτού του κύβου. Στη συνέχεια θα προσπαθήσουμε να δώσουμε έναν αλγοριθμικό χαρακτηρισμό των flips αυτών.

Πρόταση 2.3

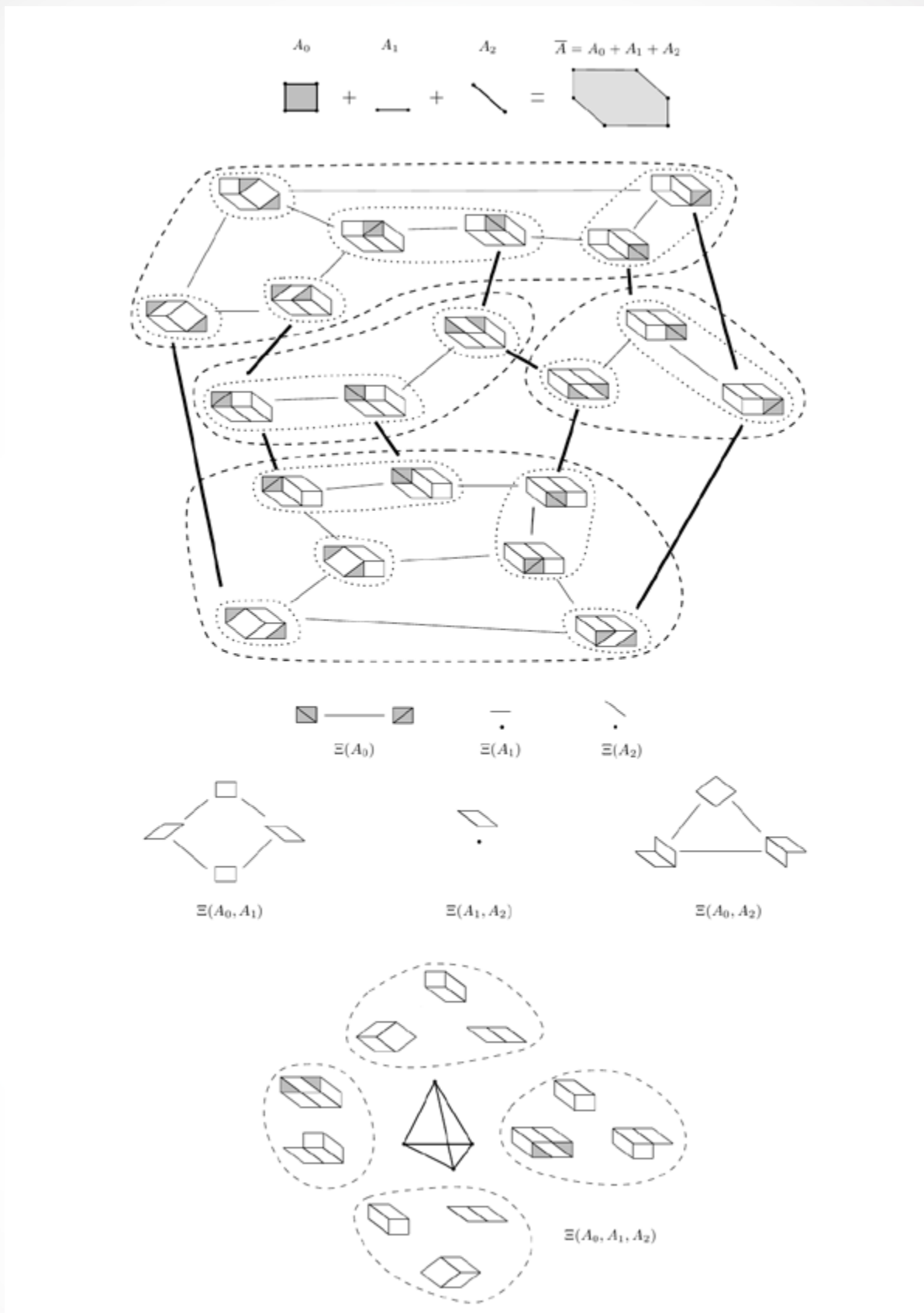
Έστω S μια μικτή υποδιαιρέση $A_0 + \dots + A_n$. Τότε η S έχει ένα κυβικό flip αν και μόνον αν υπάρχει ένα σύνολο $\{C_0, \dots, C_n\}$ από i -μικτά κελιά $C_i = F_0 + \dots + a_i + \dots + F_n$, για $i = \{0, 1, \dots, n\}$, όπου $a_i \in F_i \subseteq A_i$, $|F_i| = 2$, τέτοιο ώστε, αν $C = \cup_{i=0}^n C_i$, τότε $C = F_0 + \dots + F_n$. Θα λέμε ότι S στηρίζεται στο C . Το κυβικό flip στο S προκύπτει από την αλλαγή σε κάθε C_i , του σημείου a_i από το $F_i - \{a_i\}$.

Αν η υπόθεση της γενικής θέσης δεν ισχύει τότε μπορούμε να γενικεύσουμε την παραπάνω πρόταση χαρακτηρίζοντας τα κυκλώματα που στηρίζουν το flip σε κυβικά και μη κυβικά.

Παρατηρούμε ότι το γράφημα που έχει ως κορυφές τις κορυφές του δευτερεύοντος πολύτοπου και ως ακμές τα κυβικά flips δεν είναι πάντα συνεκτικό. Έτσι τα κυβικά flips δεν αρκούν για να απαριθμήσουμε όλες τις κορυφές του $N(R)$.

Παράδειγμα 2.4

Έστω $A_0 = \{(0, 0), (1, 0), (0, 1), (1, 1)\}$, $A_1 = \{(0, 0), (1, 0)\}$, $A_2 = \{(1, 0), (0, 1)\}$. Το δευτερεύον πολύτοπο $\Sigma(C(A_0, A_1, A_2))$ με τις μικτές υποδιαιρέσεις του A ως κορυφές απεικονίζεται στο σχήμα 1. Οι διαμορφώσεις i -μικτών κελιών απεικονίζονται με διακεκομμένες τελείες και οι *R-ισοδύναμες* κλάσεις με διακεκομμένες γραμμές. Τα κυβικά flips (έντονες γραμμές) ενώνουν τις *R-ισοδύναμες* κλάσεις. Επίσης απεικονίζονται και τα Ξ πολύτοπα. Οι κορυφές των Ξ πολύτοπων όπου $I = \{0, 1, 2\}$ στις διαμορφώσεις μικτών κελιών $S^{\{0\}}$, $S^{\{1\}}$, $S^{\{2\}}$, $S^{\{0,1\}}$, $S^{\{1,2\}}$, $S^{\{0,2\}}$ και για να τις απεικονίσουμε τις σχεδιάζουμε ως $\sum_{i \in I} F_i$. Παρατηρούμε επίσης ότι το $\Xi(A_0, A_1, A_2)$ πολύτοπο είναι ίδιο με το $N(R)$. Οι κορυφές του πολύτοπου αυτού αντιστοιχούν σε σύνολα κορυφών του $\Sigma(C(A_0, A_1, A_2))$.





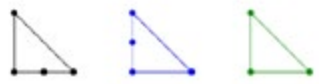
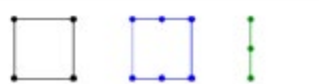
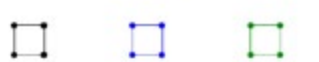
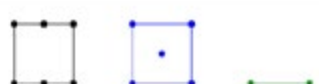
Σχήμα 4: Παράδειγμα 2.4

3. ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

Ένα βασικό μέρος αυτής της εργασίας είναι η *πειραματική αξιολόγηση* των υπό εξέταση μεθόδων υπολογισμού του $N(R)$. Για αυτό το λόγο αναπτύχθηκε ένα υπολογιστικό πακέτο σε Python. Το πακέτο δέχεται ως είσοδο σημεία συνόλων από γνωστά προβλήματα αλγεβροποίησης καμπυλών και επιφανειών [Kok]. Χρησιμοποιεί το πακέτο TOPCOM καθώς και τον κώδικα του [Mas95] για την απαρίθμηση τριγωνοποιήσεων. Επιπλέον χρησιμοποιεί για συμβολικούς υπολογισμούς τη βιβλιοθήκη sympy της python [Sym10], το πακέτο PORTA [TA97] για υπολογισμό των ακέραιων σημείων μέσα σε ένα πολύτοπο (χρησιμοποιείται στην αλγεβροποίηση) και το πακέτο Polymake [GJ00] για οπτικοποίηση των αποτελεσμάτων. Για την παρουσίαση των πειραματικών αποτελεσμάτων δημιουργήθηκε μια σελίδα wiki [Fis09]. Στόχος της είναι διάφοροι ερευνητές και φοιτητές που εργάζονται σε θέματα γεωμετρικής σχεδίασης, αλγεβρικής γεωμετρίας αλλά και άλλα συναφή αντικείμενα να μπορούν να εισάγουν την παραμετρική μορφή μια επιφάνειας προς μελέτη και στη συνέχεια εμείς να μπορούμε να αξιολογήσουμε την μέθοδο μας με αυτήν της επιφάνεια ως είσοδο και να αναρτούμε τα αποτελέσματα.

Σχετικά με τα πειράματα, παρατηρούμε ότι το TOPCOM είναι πιο γρήγορο από την μέθοδο που χρησιμοποιεί την αντίστροφη αναζήτηση ενώ φαίνεται να χρησιμοποιεί πιο πολύ μνήμη. Στη συνέχεια θα περιγράψουμε το πιο απαιτητικό από τα πειράματα. Χρησιμοποιούμε το TOPCOM για να υπολογίσουμε το πλήθος των τριγωνοποιήσεων ενός συνόλου 27 σημείων σε διάσταση 2 που παίρνουμε από μια συγκεκριμένη εφαρμογή αλγεβροποίησης (παράδειγμα bicubic surface στο [EK03]). Αν θέλουμε να υπολογίσουμε μόνο τις κανονικές τριγωνοποιήσεις πρέπει να γίνεται ένας έλεγχος κανονικότητας σε κάθε νέα τριγωνοποίηση που παράγουμε. Έτσι μπορούμε να υπολογίσουμε 1.806.467 τριγωνοποιήσεις που αντιστοιχούν σε 29 κορυφές του $N(R)$ σε πάνω από μια μέρα χρησιμοποιώντας περίπου 9 GB μνήμης. Αν επιπλέον υπολογίζουμε και τις μη κανονικές τριγωνοποιήσεις που συνδέονται με κάποια κανονική με flip τότε το TOPCOM μπορεί να υπολογίσει 1.3760.410 τριγωνοποιήσεις που αντιστοιχούν σε 62 κορυφές του $N(R)$ μέσα σε μερικές μόνο ώρες χρησιμοποιώντας μνήμη 67.2 GB. Αξίζει να σημειωθεί ότι και τα 2 παραπάνω πειράματα δεν κατάφεραν να τερματίσουν και γενικά δεν γνωρίζουμε το πλήθος των τριγωνοποιήσεων του εν λόγω συνόλου σημείων.

Περισσότερα παραδείγματα παρουσιάζονται στο Σχήμα 5 αλλά και στην ιστοσελίδα [Fis09].

input point sets	# Secondary polytope vertices	# $N(R)$ vertices
	108	6
	122	8
	3540	22
	76280	95
	17916	60
	104148	21

Σχήμα 5: Μερικά πειραματικά αποτελέσματα

4. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Η εργασία αυτή αρχικά ασχολείται με τη σύγκριση μεταξύ του πλήθους των R -ισοδύναμων κλάσεων, των διαμορφώσεων μικτών κελιών και του πλήθους των κορυφών του δευτερεύοντος πολύτοπου και δείχνει ότι εκτός από τις τετριμμένες περιπτώσεις αυτές οι κλάσεις έχουν διαφορετικές πληθικότητες. Επιπλέον δείχνει πειραματικά ότι οι δύο τελευταίες κλάσεις είναι πολυπληθέστερες από την πρώτη γεγονός που συνιστά απαραίτητη την δημιουργία πιο αποδοτικών αλγορίθμων.

Σε θεωρητικό επίπεδο μελετάμε τα Ξ πολύτοπα και αποδεικνύουμε ότι μια ειδική περίπτωση τους είναι το πολύτοπο της απαλείφουσας. Επιπλέον, δίνουμε αλγοριθμικούς χαρακτηρισμούς για τα κυβικά flips που όπως είδαμε είναι ένα είδος τοπικών μετασχηματισμών με ιδιαίτερο ενδιαφέρον.

Στα πλαίσια της εργασίας αναπτύχθηκε λογισμικό για την πειραματική αξιολόγηση των μεθόδων και των θεωρητικών αποτελεσμάτων. Τα πειραματικά αποτελέσματα αναρτήθηκαν σε μια ιστοσελίδα wiki [Fis09].

ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- [DE05] A. Dickenstein and I.Z. Emiris, editors. Solving Polynomial Equations: Foundations, Algorithms and Applications. Springer, Berlin, 2005.
- [EFK10] I.Z. Emiris, V. Fisikopoulos, and C. Konaxis. Regular triangulations and resultant polytopes. In European Workshop on Computational Geometry (EuroCG), pages 137–140, 2010.
- [EK03] I.Z. Emiris and I.S. Kotsireas. Implicit polynomial support optimized for sparseness. In Intern. CCSA, pages 397–406, 2003.
- [Fis09] V. Fisikopoulos. Implicitization experiments on curves and surfaces wikipage, 2009. <http://ergawiki.di.uoa.gr/index.php/Implicitization>.
- [GJ00] E. Gawrilow and M. Joswig. polymake: a framework for analyzing convex polytopes. In Gil Kalai and Günter M. Ziegler, editors, Polytopes — Combinatorics and Computation, pages 43–74. Birkhäuser, 2000.
- [GKZ94] I.M. Gelfand, M.M. Kapranov, and A.V. Zelevinsky. Discriminants, resultants, and multidimensional determinants. Birkhäuser, Boston, 1994.
- [Kok] Stephen Kokoska. Fifty famous curves, lots of calculus questions, and a few answers. Department of Mathematics, Computer Science, and Statistics, Bloomsburg University.
- [Kon06] C. Konaxis. Triangulations and resultants (master thesis). July 2006. (in Greek).
- [LRS08] J.A. De Loera, J. Rambau, and F. Santos. Triangulations: Structures and algorithms. Book manuscript, 2008.
- [Mas95] T. Masada. An algorithm for the enumeration of regular triangulations (master thesis). March 1995.
- [MC00] T. Michiels and R. Cools. Decomposing the secondary Cayley polytope. Discrete & Computational Geometry, 23(3):367–380, April 2000.
- [MII96] T. Masada, H. Imai, and K. Imai. Enumeration of regular triangulations. In SCG '96: Proceedings of the twelfth annual symposium on Computational geometry, pages 224–233, New York, NY, USA, 1996. ACM.
- [MV97] T. Michiels and J. Verschelde. Enumerating regular mixed-cell configurations. In Discrete & Computational Geometry, 1997.
- [PR03] J. Pfeifle and J. Rambau. Computing triangulations using oriented matroids. In Algebra, Geometry, and Software Systems, pages 49–75, 2003.
- [Stu94] B. Sturmfels. On the Newton polytope of the resultant. J. Algebraic Comb., 3(2):207–236, 1994.
- [SY08] B. Sturmfels and J. Yu. Tropical implicitization and mixed fiber polytopes. In Software for algebraic geom., IMA volumes Math. & Appl., pages 111–131. Springer, 2008.
- [Sym10] SymPy Development Team. SymPy: Python library for symbolic mathematics, 2010.

[TA97] C. Thomas and L. Andreas. PORTA: a collection of routines for analyzing polytopes and polyhedra. 1997.

[Vaz04] V.V. Vazirani. Approximation Algorithms. Springer, March 2004.

ISSN
1792-8826

