

EESTI TEADUSTE AKADEEMIA
SEMINARI MATERJALID



1.11.2006

Tallinn

2006

TEADUSE UUED SUUNAD:
KOMPLEKSSÜSTEEMID

JG-XIX-2006
ISSN 1406-9148

© Eesti Teaduste Akadeemia

SISSEJUHATUS

Keerukus ja kompleksüsteemid on viimasel ajal omandanud ikka suuremat tähtsust, sest praktiliselt on terviksüsteemi ja tema osade holistlik käsitus vajalik pea igas teadusharus ja eluvaldkonnas. Uue kvaliteedi teke, iseorganiseerumine, koherentsed struktuurid, termodünaamilise tasakaalu teke ja muud on olulised nii füüsikas ja matemaatikas, bioloogias ja keemias, arvutiteaduses ja materjaliteaduses jne ning ka sotsiaalteadustes on ju taolised probleemid päevakorras. Matemaatilises keeles on põhjus süsteemi osade mittelineaarsuses (väljund ja sisend pole võrdelised) ja osade interaktsiooni toimemehhanismis.

Kompleksüsteemide ajalugu on pikk ja huvitav. Täna on siiski mõtet alustada 6RP ideest rahvuslike uuringuprogrammide koordineerimisest nn ERA-NET programmides. Üheks selliseks võrgustikuks on ka ERA-NET "Complexity", mida soovitas Euroopa Komisjon, täpselt küll CREST, juba ERA-NETide idee sõnastamisel.

Eestis on kompleksüsteemidega tegeletud mitmes valdkonnas. Mittelineaarsete Protsesside Analüüsi Keskus (Centre for Nonlinear Studies – CENS) TTÜ Küberneetika Instituudi juures moodustati juba 1998. a, et koondada ühe "vihmavarju" alla teadlasrühmad, kes tegelevad taoliste probleemidega pehmisefüüsika ja mehaanika ning biofüüsika ja biomeditsiinitehnika vallas. Kuna CENS on üks Eesti teaduse tippkeskustest, siis ERA-NET "Complexity" esimese faasi (eritoetus – SSA) käivitamisel lülitusid ka CENSi programmid Eesti Haridus- ja Teadusministeeriumi (HTM) tippkeskuste programmi kaudu sellesse võrgustikku ning HTM volitas Teaduste Akadeemiat seda võrgustikku koordineerima. Kuid CENSi teemade kõrval on Eestis ka teisi keerukuse ja kompleksüsteemidega seotud uuringuid, nii näiteks tegelevad arvutiteadlased samalaadsete probleemidega. 2005/2006 akadeemilisel aastal toimus CENSi initsiatiivil TTÜ Küberneetika Instituudis rida seminare, kus prooviti leida ühist keelt eelkõige arvutiteadlastega ja valmistada ette järgmine – juba 3,5 aasta pikkune programm (alates 1.06.2006 kuni 30.11.2009), mis nüüd on juba käivitatud.

Käesolev Eesti Teaduste Akadeemia seminar on sarjast "Teaduse uued suunad", ning pühendatud kompleksüsteemidele. Ettekanded olid valitud nii, et võimalikult palju suundi oleks esindatud – nii haarasid ettekanded pehmisefüüsikat, biofüüsikat, arvutiteadust ja ökonofüüsikat – igast suunast vaid üks, lisaks veel üks näide, kuidas lihtsate mudelite abil saab tekitada keerulisi struktuure. Seminari kavas oli samuti ülevaade ERA-NET "Complexity" struktuurist ja kavadest. Tuleb märkida, et nimetatud ERA-NET on üks viiest (vaid viiest!) baasuuringute võrgustikust 6RP raames.

Käesolevas kogumikus on esitatud kõigi ettekannete materjalid, lisaks ka väljavõte ERA-NET "Complexity" projektist, selle lühikirjeldusega ja osavõtjate nimekirjaga. Kompleksüsteemide Eesti võrgustik on avatud kõigile selliste probleemidega tegelevatele uurijatele ja uurimisgruppidele. Mitmed selle teemaga seotud uurijad ei saanud ühel või teisel põhjusel käesoleval seminaril osaleda, ootame nende arvamusi ja loodame tulevasele koostööle. Potentsiaal keerukuse ja kompleksüsteemide uurimisele Eestis on aga kindlasti olemas.

*Jüri Engelbrecht
Leo Mõtus*

KOMPLEKSSÜSTEEMID

Jüri Engelbrecht

FÜÜSIKA: KAS JUHUMUUTLIKUS TUNNEB PIIRE?

Jaan Kalda

BIOLOOGILISED KOMPLEKSSÜSTEEMID

Marko Vendelin

KOMPLEKSSÜSTEEMID ARVUTITEADUSES

Leo Mõtus

ÖKONOFÜÜSIKA JA KOMPLKSSÜSTEEMID

Robert Kitt

LIHTSAD MUDELID – ÜLLATAVAD TULEMUSED

Taivo Lints

ERA-NET KOMPLEKSSÜSTEEMID

Leo Mõtus

VÄLJAVÕTE

Sixth Framework Programme

KOMPLEKSSÜSTEEMID

SEMINAR SARJAST

"TEADUSE UUED SUUNAD"

Jüri Engelbrecht

1.11.2006

Tegijaid

Mittelineaarsete protsesside analüüsi keskus (CENS), TTÜ Küberneetika Instituut

TTÜ Küberneetika Instituut

TTÜ arvutiteadlased

TÜ bioloogid

...

MIKS?

The whole is greater than the sum of its parts

Tervik on suurem kui tema osade summa

Aristoteles



EUROPEAN
COMMISSION

Community research

ERA-NET

SERIES II

PROJECT SYNOPSES

**Networking of national
research programmes
in the European Research Area**

SERIES II



SUPPORT FOR THE COORDINATION OF ACTIVITIES

ERA-NET Complexity

SSA Aug 2004-April 2005, coordinator Denmark

Network June 2006-Dec 2009, coordinator UK

Increasing demand for Complexity research and technologies

- ❑ Production industry (food, materials, chemical industry etc.) needs more effective analysis, decision support and process control tools
- ❑ Bio-sector needs the development of new mathematical models to analyse complex organisms
- ❑ Better energy resources and environment requires improved analyses of the dynamics of wind, water and other fluid systems
- ❑ Modern information and communication systems depend on the development of new signal and image processing tools
- ❑ The application of new nonlinear and complex methods in economical and financial analysts is rapidly increasing

Complexity research

- ❑ The world does not consist of simple linear relations but show generally features that originate entirely from inherent nonlinearities
- ❑ The world develops and adapt dynamically, often driven far away from simple equilibrium
- ❑ Complexity research has its origin in the natural sciences of mathematics, physics, chemistry, biology, and computer science, but has now spread into the economic and social sciences
- ❑ Complexity research is holistic and a multi-disciplinary field covering research in nonlinear dynamical systems, systems out of equilibrium, control theory, adaptive and self-organising systems and complex dynamical networks of interacting units
- ❑ The systems investigated differs widely in character, size and time scale

Stronger focus on the field of Complexity

- ❑ Nine European Research Councils and Ministries (Belgium, Denmark, Estonia, Greece, Ireland, The Netherlands, Portugal, Spain, and U.K.) has initiated a cooperation "Complexity-NET"
- ❑ The objective is to examine the need and opportunities for a better coordination of the European research activities within complex systems and processes and related technologies
- ❑ The cooperation originated in continuation of the decision by the European Commission Committee CREST for Science and Technological Research to select complexity and complex systems as one of five pilot areas for programme coordinating activities
- ❑ The cooperation is financed by the European Commission under the ERA-NET initiative

Specific Support Action

WP1: National Programmes

WP2: Procedures

WP3: Complexity-NET

Start of Specific Support Action: August 1, 2004

End of Coordinated Action: April 30, 2005

Total budget: 153.720 Euro

Strengths and weaknesses

- ❑ Complexity researchers belong to the most publishing and most cited science and technology researchers in Europe
- ❑ Complexity research attracts many students and young researchers (PhD students and post-docs) because of the interdisciplinary nature, the holistic approach, the cognitive challenges, and the many applications
- ❑ The cooperation between the complexity researchers who develop new methods of analysis and those who apply these in the development of new analysis tools is limited
- ❑ Complexity research often takes place in small units, characterized by one highly recognized researcher and his or hers group of students and post-docs

Opportunities and threats

- ❑ Complexity research is a rapidly growing research field with a well documented high innovative potential there is a unique opportunity to exploit and develop with great promises for large returns within a limited time
- ❑ Europe has highly qualified human resources within complexity research, who are cooperative and flexible across traditional disciplinary boundaries
- ❑ The globalisation and the steadily increasing need for science based products at a competitive price level continuously increases the requirements to the efficiency of industrial processes and decision-making. Without sufficient competences to develop new and more efficient tools, Europe cannot create the sufficient growth in this field implying high risks for lacking behind and loss of workplaces
- ❑ Many European highly educated young complexity researchers leaves Europe for positions in e.g. U.S.A., where the cooperation across traditional disciplinary boundaries as well as the cooperation between science and industry is more advanced and has better conditions

General comments

- ❑ It is crucial that there to a much higher degree than is the case today is focus and concentrated efforts on research and development within complex systems, processes and related technologies, in order for Europe to keep up with the development within this field
- ❑ There is an explosive growth in number of scientific articles and new journals with focus on complexity
- ❑ There is an increasing number of small and medium sized enterprises developing new science based tools originating from the results of complexity research
- ❑ Complexity research and technology is today a very attractive growth area in line with nanoscience and technology
- ❑ A simple search on the internet shows that complexity, complex systems, complexity research or complexity science results in millions of hits in line with a search on nanoscience or nanotechnology

Coordinated Action

WP1: Collection and exchange of information and best practice

WP2: Strategic Activities

WP3: Joint Activities

WP4: Transnational Research Activities

WP5: Dissemination, co-ordination and management

Application date for next phase: October 4, 2005

Start of Coordinated Action: January 1, 2006

End of Coordinated Action: June 30, 2009

Total budget: 2.737.000 Euro

Participation

Estonian Ministry of Education and Research (Science Competence Council)
Estonian Academy of Sciences (authorized by Ministry)

* * *

- Nonlinearity and fractality of natural processes
- Biocomplexity
- Complexity of dynamical processes
- Software complexity
- Complexity in software-intensive systems

Sõnaseletusi

complexity – keerukus, terviklus (vt Akadeemia 3/2005)

emergency – esiletulek (Silvet: tembistumine)

ubiquity – kõiksus

self-organized systems – iseorganiseeruvad süsteemid

self-organized criticality – iseorganiseeruv kriitilisus

dissipative structures – hajuvad struktuurid

power law – astmeseadus

Kirjandust

1. Ü. Lepik, J. Engelbrecht. Kaoseraamat. TA Kirjastus, Tallinn, 1999.
2. J. Kalda. Mittelineaarne juhumuutlik maailm. Lehed ja tähed, 2004, 140–145.
3. J. Kalda, R. Mankin, R. Tammelo. Elu võimalikkus mittelineaarses ja mittetasakaalulises juhumuutlikus maailmas. Teadusmõte Eestis. Täppisteadused, 2006, 53–62.
4. J. Engelbrecht. Keerukus, terviklus ja füüsika. N. Alumäe nimelise medali loengu lühikokkuvõte. Eesti TA aastaraamat XI (38), 2005, 219–221.

Kas juhumuutlikkus tunneb piire?

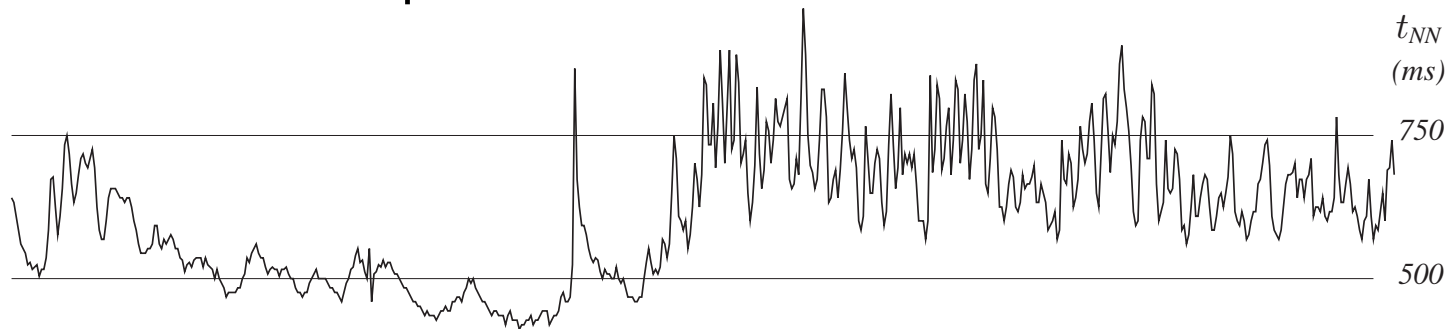
Jaan Kalda

CENS, Küberneetika Instituut, TTÜ

- Põhimõisted.
- Komplekssüsteemide, juhumuutlikkuse jms uurimine: kas mood või reaalne vajadus?
- Konkreetseid näiteid CENS-i uurimisteedest.
- Kokkuvõte.



Juhumuutlikkus (ik *intermittency*): süsteem on vaheldumisi korrapärase ja juhuslikus liikumises; üleminek ühest olekust teise ettearvamatu, olekuhüpete suurus ettearvamatu.



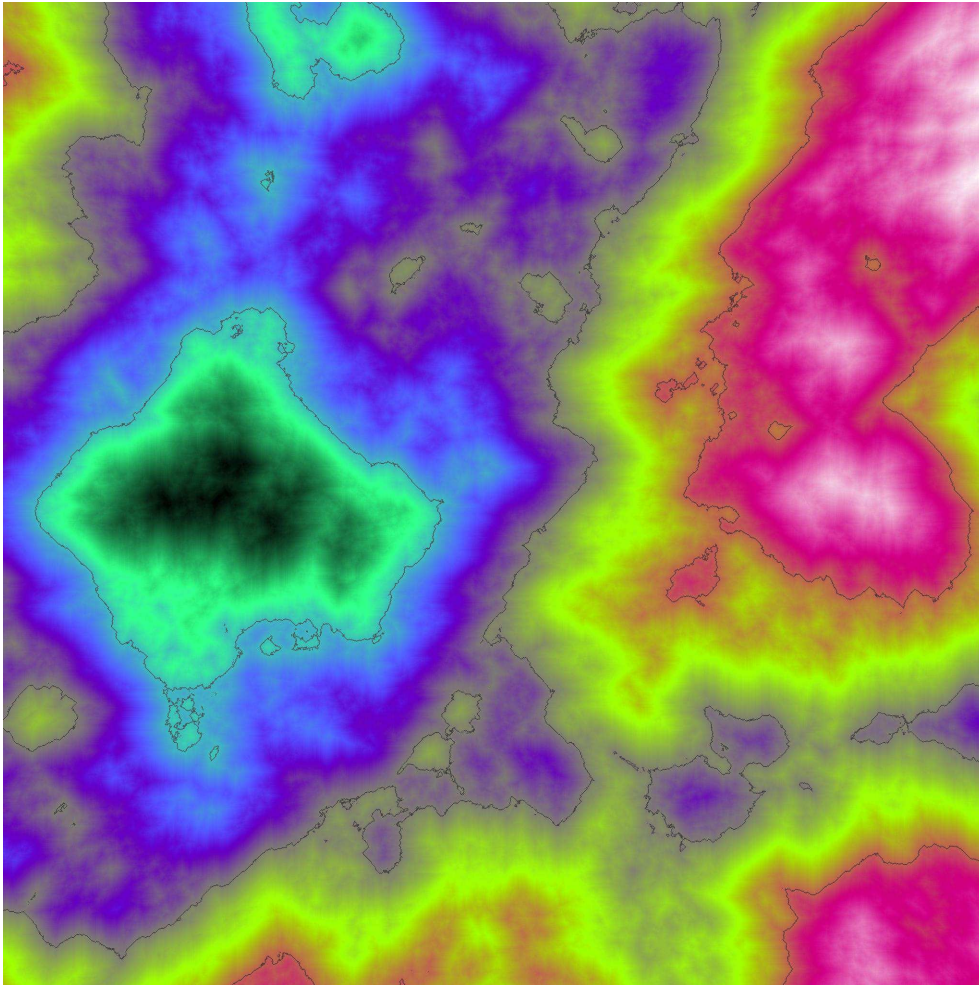
[M. Säkki, J. Kalda, M. Vainu, and M. Laan, *Chaos*, 2004, **14**, 138-143.]

Mastaabi-invariantsus (*scale-invariance*): süsteemil puudub laias väärtuste vahemikus iseloomulik mastaap (lihtsaimaks näiteks on fraktaalised struktuurid, üldisemalt aga multifraktaalsed, multiafiinsed vms struktuurid.)



Iseorganiseerumine ja iseorganiseeruv kriitilisus Mõiste “kriitiline nähtus” tähistab makroskoopilise süsteemi mikroskoopiliste komponentide vahelise pikamastaabilise korrelatsiooni teket ja kadu; heaks näiteks on aine faasiüleminekud (nt perkolatsiooniprobleem). Öeldakse, et süsteem on kriitiline, kui ta on täpselt makroskoopiliste omaduste muutumise piiril ja tema mikroskoopiliste koostisosade olekute korrelatsioonifunktsioon järgib (mittetriviaalset) skeelinguseadust. Parameetrite ruumis on kriitilisel olekul üldiselt nullmõõt, st kriitiline olek on tegelikult ebatüüpiline olek.

Dünaamiliste dissipatiivsete süsteemide puhul pole see aga nii, sest makroskoopiliste dünaamiliste jõudude ning mikroskoopilise dissipationiooni koosmõju võib juhtida süsteemi täpsele kriitilisusele. Sel puhul öeldakse, et tegemist on iseorganiseeruvalt kriitilise süsteemiga.



J. Kalda,
Phys. Rev. Lett. **90**
118501 (2003)

Komplekssüsteemid (ik *complex systems*): süsteemid, millele on omane iseorganiseerumine või adaptiivne käitumine, sh turbulentsed keskkonnad, granulaarsed jms materjalid (mida tähistatakse ingliskeelse terminiga *soft matter*, eesti keeles *pehmis*). Need koosnevad harilikult suhteliselt lihtsatest komponentidest, mis interaktsiooni teel moodustavad keeruka terviku.

Näited: teatud liigi kohandumine keskkonna ja naaberliikidega Bak-Sneppen'i mudeli järgi (evolutsioonihüpete jaotus on astmeseadus); kasvav liivakuhi (varingute suurusjaotus on astmeseadus);

Kardar-Parisi-Zhang'i mudel kasvava pinna jaoks (pinna struktuur on eneseafinne);

passiivse skaalari segunemine turbulentses voolus (dissipatsiooniväli on multifraktaalne).

Bak-Sneppen'i mudel. Iga liiki (mis asub arvteljel i) kirjeldatakse kohandumusmaksimumi kõrgusega B_i . Muteerumistõenäosus on võrdeline e^{B_i} -ga. Muteerumise tulemusel omandab nii liik ise, kui ka mõlemad ta naabrid uue juhusliku kohandumuse vahemikus $[0; 1]$.

[P. Bak, K. Sneppen, Phys. Rev. Lett. **71**, 4083 (1993)]

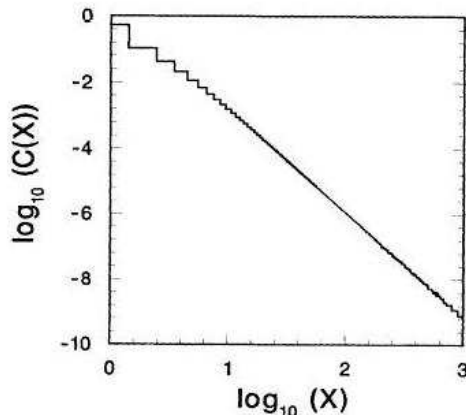


FIG. 1. Distribution of distances $C(x)$ between successive mutations. The power law indicates that the ecology has self-organized into a critical state.

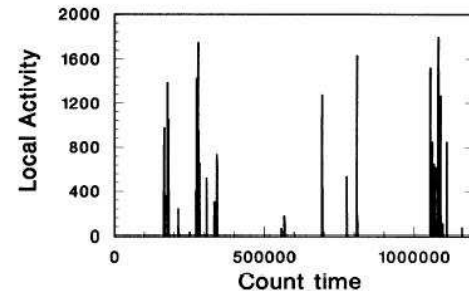


FIG. 4. Punctuated equilibrium behavior. Activity vs time in a local segment of ten consecutive sites is shown for a system of size $N = 512$. Time is measured in units of the number of mutations. In real time, the intermittency is further enhanced by the exponential enlargement of the periods of stasis.

Komplekssüsteemide uurimine: kas moeröögatus või reaalne vajadus?

Lühivastus: vajadus reaalne, sest neid leidub väga mitmepalgelistes olukordades, iseorganiseerumine on väga universaalne nähtus.

Miks me uurime neid alles viimasel ajal?

Üldreeglina pole neid võimalik kirjeldada võrrandi või võrrandisüsteemiga. Paremini sobivad spinn-klaaside taolised mudelid, kus komponentosakeste karakteristikud (“spinnid”) evolutsioneeruvad nt mingil viisil defineeritud energia miinimumi suunas, tehes seda teatud müra foonil. Analüütiliselt õnnestub selliseid mudeleid lahendada vaid erandjuhtudel. Küll aga saab neid mugavasti analüüsida numbriliste arvutuste abil. Seega oli vaja arvuteid!

Miks neid nii palju uuritakse?

Komplekssüsteeme võib leida igalt poolt, ootamatutest interdistsiplinaarsetest valdkondadest. Klassikalisele füüsikule-teoreetikule võib kompleksüsteemide modelleerimine tunduda liiga lihtsustav, aga Bak-Sneppeni mudeli näide sobib illustreerima, kuivõrd sisukaid järeldusi võib saada ka väga tugevate lihtsustuste juures.

Atraktiivsus füüsiku jaoks: probleemid on harilikult

- (a) lihtsalt formuleeritavad (arusaadavad ka füüsikutele väljaspool kitsast erialaspetsialistide ringi);
- (b) fundamentaalse iseloomuga või olulise praktilise väljundiga, st pres-tiižsed ;
- (c) lahendajale eeldatavasti loomingulist naudingut pakkuvad (lihtsate adekvaatsete mudelite otsimine).

Miks on kompleksüsteeme nii palju?

Maailm peab olema keeruline, sest vastasel juhul ei saaks olla vaatlejat (antroopsusprintsii!).

Tõepoolest, vaatleja ei saa olla midagi lihtsat ja deterministlikku, sest ta peab olema võimeline informatsiooni töötlemiseks ja salvestamiseks.

Teisalt, Ockham'i habemenoa printsiibi järgi peavad Universumi ehituskivid ja seadused olema lihtsad (vähemasti on kõik füüsikud selles veendunud).

Niisiis, vaatleja saab olla vaid sellises Universumis, kus keerukus kasvab lihtsatest ehituskividest tänu kompleksüsteemide moodustumisele ja iseorganiseerumisele!

Komplekssüsteemide uurimisest **CENS-is**

- Bioloogilised süsteemid — süda (lähemalt: Marko Vendelin);
- Geoloogilised süsteemid (nt maastike kujunemise mudel);
- Turbulentne difusioon;
- Majandusfüüsika (lähemalt: Robert Kitt)

Richard Feynman: “Turbulents on klassikalise füüsika viimane lahendamata probleem, millel on õnnestunud vältida füüsikalist arusaamist ja süstemaatilist kirjeldamist mitmete aastakümnete jooksul.” Nõrk turbulents on tänapäeval siiski võrdlemisi hästi mõistetud: ennustamatus ja fluktuatsioonid on jälgitavad nõrgalt, peaaegu lineaarse regulaarse liikumise foonil. Heaks töövahendiks on häiritusmeetodid, kvaasiosakeste (nt plasmonite) kineetilised võrrandid jms.

R. Feynman peab aga silmas tugevat turbulentsi, kus keskset rolli mängivad koherentsed struktuurid — sõltuvalt keskkonnast kas keerisniidid, solitonid vms. Turbulentsiteooria tähtsaimaks rakenduseks on hüdrodünaamika; paraku on hüdrodünaamiline turbulents vältimatult tugev, sest Navier-Stokes’i võrrandi mittelineaarseid liikmeid ei saa vaadelda häirituslikult väikestena.

Turbulentselt segunevate suuruste hierarhia: Navier-Stokes'i võrrand — aktiivne vektor (keeriselisus); kinemaatiline dünamo — passiivne vektor; temperatuur, reostus jms — passiivne skaalar.

Millega on seletatav, et isegi passiivse skaalari turbulentsi probleem ei ole senini ammendavalt lahendatud, vaatamata tema sajandi-pikkusele ajaloole?

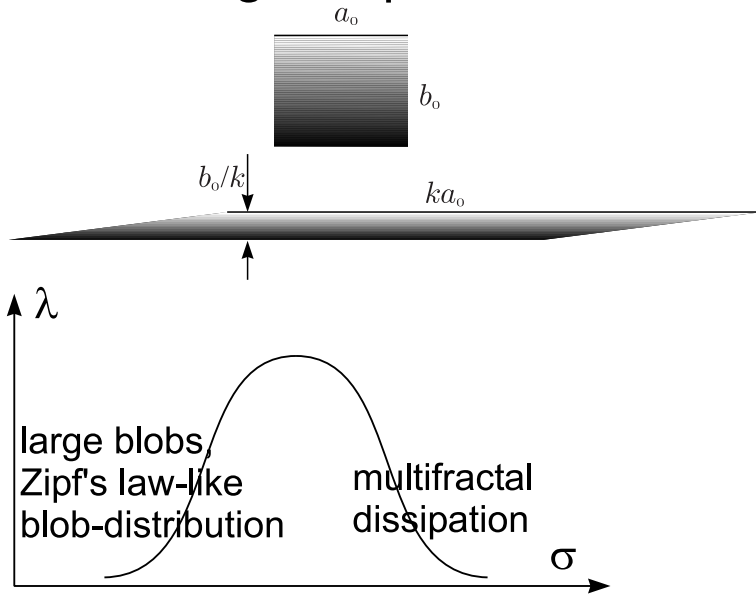
Esiteks, passiivse skaalari väli areneb keeruliste juhumuutlike peenstruktuuride poole. Niisuguse käitumise kirjeldamine polnud võimalik ilma tänapäevase matemaatilise aparatuurita, mh multifraktaalse formalismita.

Teiseks, passiivse skaalari turbulents on väga tundlik kiirusvälja omaduste suhtes.



J. Kalda, Phys Rev. Lett, **84** (3), 471 (2000).

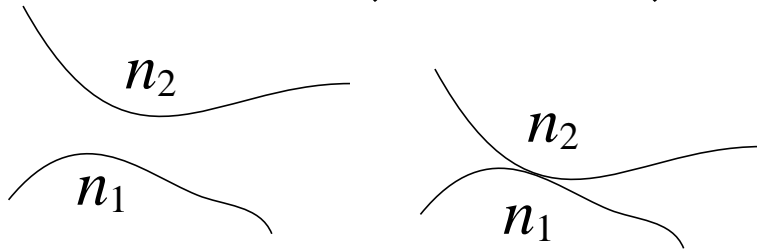
Siledas kaootilises voolus on triibuline struktuur tingitud vedeliku elementide tugevast pikenemisest, mis on ebäühtlane.



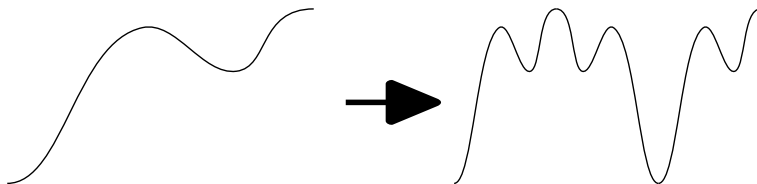


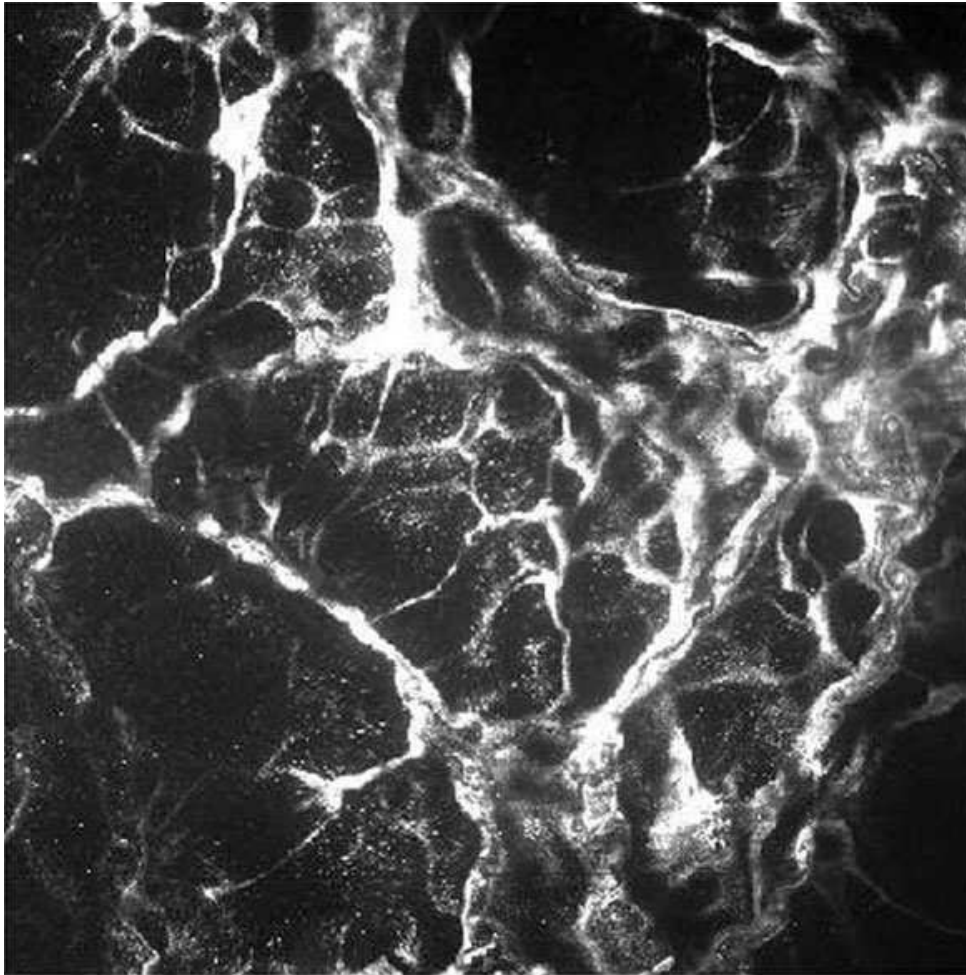
G. Falkovich,
K. Gawedzki,
M. Vergassola.
Rev. Mod. Phys.
73, pp. 913-975,
(2001).

Turbulentse spektri korral on temperatuuriväli kõikjal katkev, sest kaks samaväärtusjoont võivad jõud kontaktini lõpliku aja jooksul.



CENS-is käivad uurimised: vedela joone fraktaalne evolutsioon, lihtne 1D mudel, mis viib katkevuste kaskaadi moodustumiseni.





G. Bofetta,
J. Davoudi,
B. Eckhardt,
J. Schumacher,
Phys. Rev. Lett.
93, 134501
(2004).

Kokkusurutavad voolud võivad esineda nt turbulentse vedeliku vabal pinnal, aga ka juhusliku potentsiaaliga keskkonnas ülesumbunud difusiooni režiimis. Kui kokkusurutavus ületab läveväärtuse, hakkavad lisandaine osakesed kogunema klastritesse.

CENS-is: analüütilised tulemused klastrite moodustumist iseloomustavate astmenäitajate osas.

Õppetunnid.

Kõndides lahtiste silmadega, kus me võime näha viiteid kompleksssüsteemidele (juhumuutlikkust jms)?

Igapäeva elu: kõik kulgeb üksluiselt — hommikul üles, siis tööle, pärast koju. Siiski väikseid sekeldusi: võipakk unus poest osta, varvas löödud vastu tänavakivi ja paistes jne.

Siis aga juhtub midagi tõsisemat: raske haigus, töökoha vahetus, lapse sünd vms. Mõnda aega turbulentsi, hiljem võib asi jälle minna kindlatesse rööbastesse.

Ühiskonna areng: on pikki peaaegu muutusteta perioode, siis aga toimub kiire areng (leiutused, sõjad jms), tsivilisatsioon on lühikese aja jooksul täielikultki kadunud.

Tunnusjoon: mitte-statsionaarsus. Faktist, et teatud pikkusega perioodi jooksul (mis võib vägagi pikk olla) pole teatud ekstreemsusega sündmusi täheldatud, pole võimalik järeldada nende üldist puudumist.

Kui viimase 100 aasta tugevaim maavärin oli 9,5 magnituudi, ei tähenda see, et homme ei või tulla kaks korda võimsam.

Kui viimase 50 miljoni aasta jooksul pole toimunud sellist geoloogilist kataklüsmi, mis ohustanuks suuremat osa elusloodust Maal, siis see ei tähenda taoliste sündmuste võimatust.

Kui viimase 5 miljardi aasta jooksul pole toimunud sellist sündmust, mis ohustanuks planeedi Maa terviklikkust, siis see ei tähenda taoliste sündmuste võimatust.

Arenguhüpete suurusjaotus ei ole Gaussi jaotus, vaid astmeseadus, nt Lévi jaotus, mille *sabad on sageli lõikamata*.

Üllatusena ei pruugi jaotus olla isegi mitte stabiilne (nagu seda on Gaussi jaotus ja stabiilne Lévi jaotus). Nt aktsiahinna kõikumiste jaoks on leitud, et tegemist on mitte-stabiilse Lévi jaotusega. Selletus: hüpetel pole ühest algpõhjust, nii et ei toimu keskmistumist ja koondumist stabiilseks jaotuseks. Selle asemel on lai spekter eriolemuslikke algpõhjusti.

Kokkuvõte: Juhumuutlikkus on võimeline ületama kõiki piire, kuid elu on sellele vaatamata (ja võib-olla isegi just tänu sellele) võimalik.

Bioloogilised kompleksüsteemid

Marko Vendelin

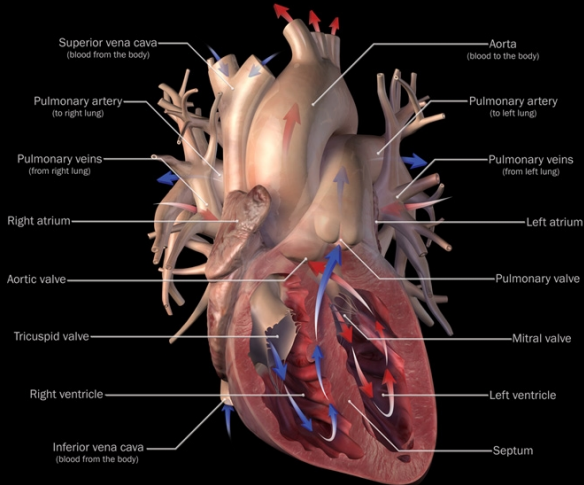
Küberneetika Instituut, TTÜ

01.11.2006

One of the definitions

Systems biology is an academic field that seeks to integrate different levels of information to understand how biological systems function. By studying the *relationships* and *interactions* between various parts of a biological system (e.g., gene and protein networks involved in cell signaling, metabolic pathways, organelles, cells, physiological systems, organisms etc.) it is hoped that eventually an understandable model of the whole system can be developed.

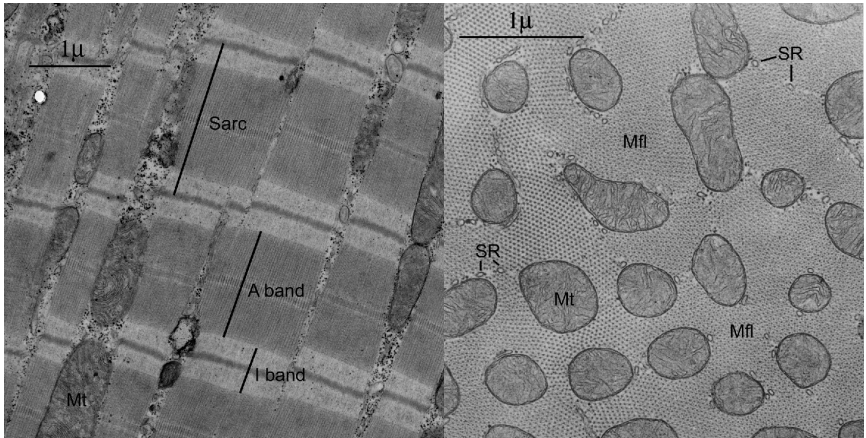
Heart



Zygote Media Group, Inc. ©2006

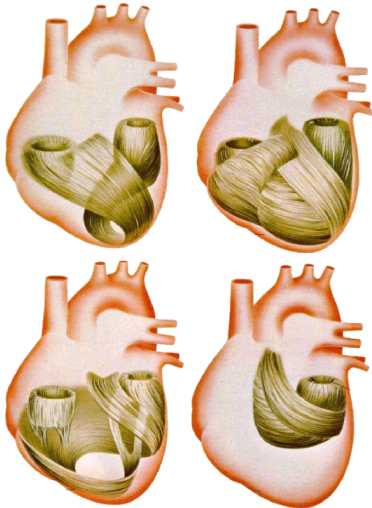
Image provided to Wikipedia courtesy of 3DSCIENCE.COM

Cardiac muscle cells



DW Fawcett and NS McNutt
(*ASCB Image & Video Library*. 2006)

Fiber orientation



Fiber orientation: adaptation mechanisms

Aim

What determines the fiber orientation in the left ventricle?

Possible adaptation mechanisms

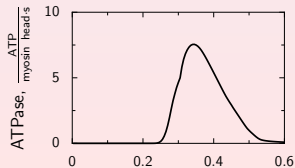
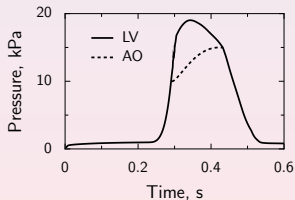
Reduction of heterogeneity of

- ▶ developed stress
- ▶ strain
- ▶ energy consumption

Testing the hypothesis

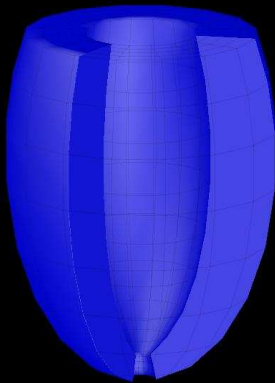
To test the different possible mechanisms, the finite element model was composed and the fiber orientation was predicted by minimizing either strain, stress, or energy consumption heterogeneity.

Model of the left ventricle



ATPase rate within a cycle

DATP at 0.002500



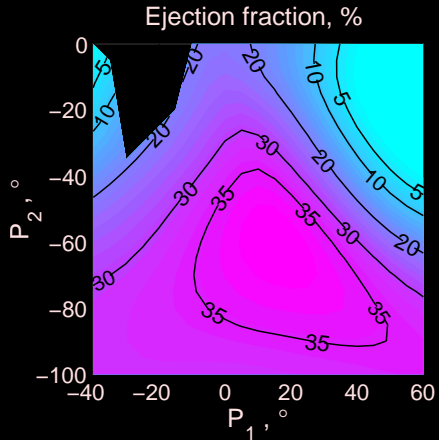
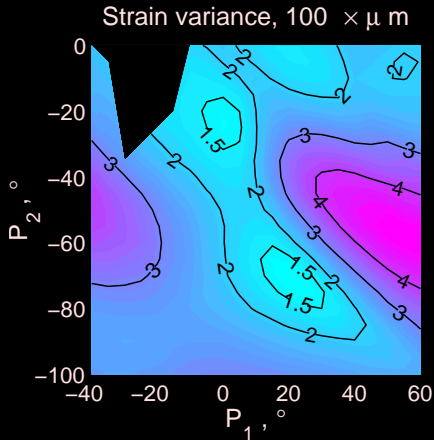
ATP/myosin head sec

18
16
14
12
10
8
6
4
2
0



Vendelin *et al* (*Am J Physiol Heart*, 2002)

Fiber orientation: influence on mechanics



Vendelin *et al* (*Am J Physiol Heart*, 2002)

Adaptation mechanism: results

Test passed

The fiber orientation in the left ventricle was predicted correctly by minimizing the heterogeneity of

- ▶ developed stress
- ▶ strain

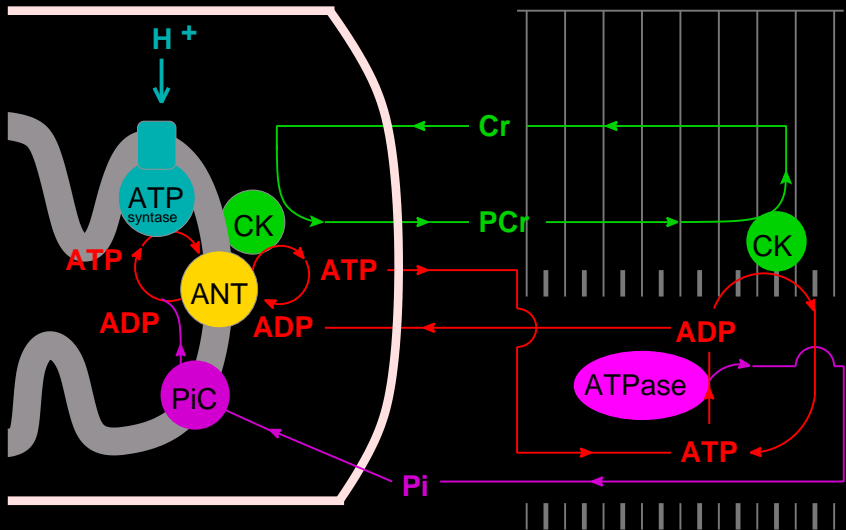
Test failed

The transmural angle was underestimated if heterogeneity of energy consumption was minimized.

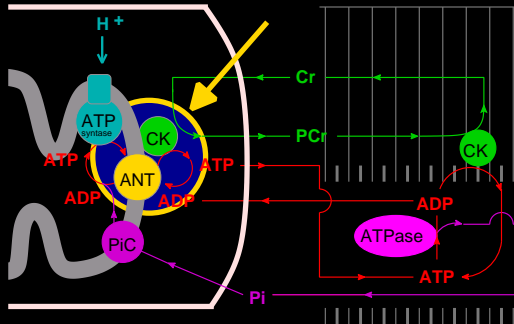
Drawbacks

- ▶ Model has to take into account that the left ventricle is not symmetric. Extension to the whole heart model is planned
- ▶ Adaptation mechanism should be local, not global minimization

Intracellular energy fluxes



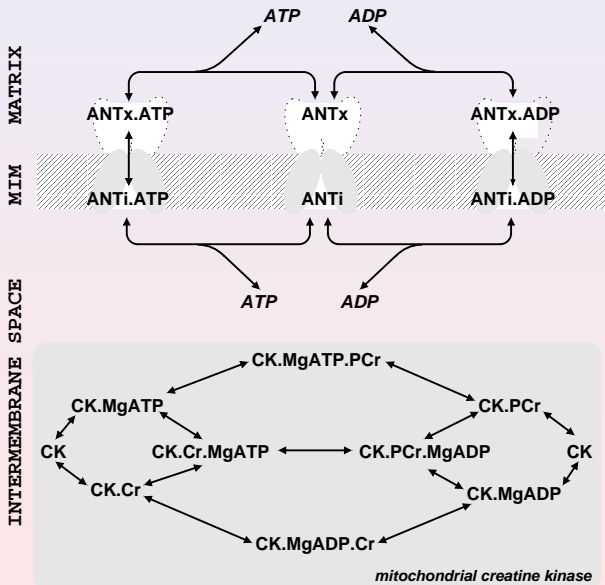
MiCK and ANT



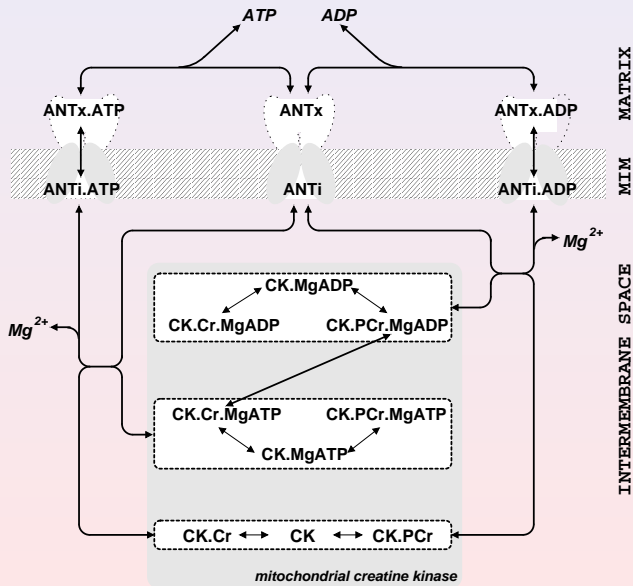
Aim

What is *the simplest mechanism* that is able to reproduce the available experimental data on functional coupling between MiCK and ANT?

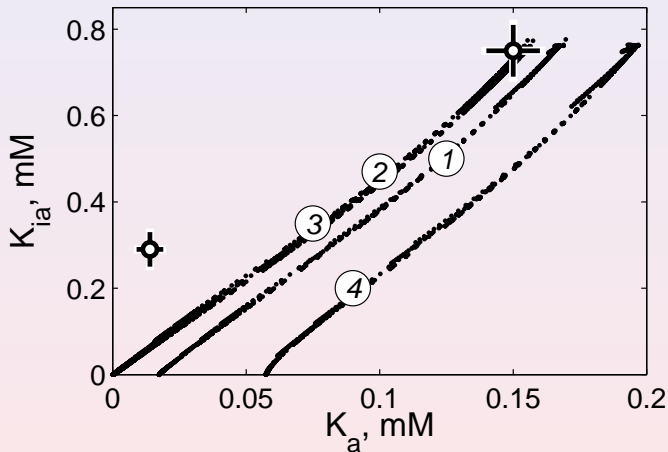
MiCK-ANT: dynamic compartmentation



MiCK-ANT: direct transfer



MiCK-ANT: dynamic compartmentation

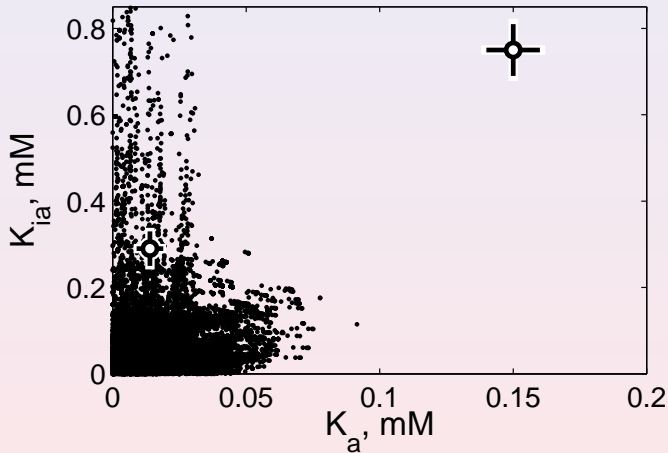


K_a Dissociation constant: $\text{CK.Cr} \leftrightarrow \text{CK.MgATP.Cr}$

K_{ia} Dissociation constant: $\text{CK} \leftrightarrow \text{CK.MgATP}$

Vendelin *et al* (*Biophys J*, 2004)

MiCK-ANT: direct transfer

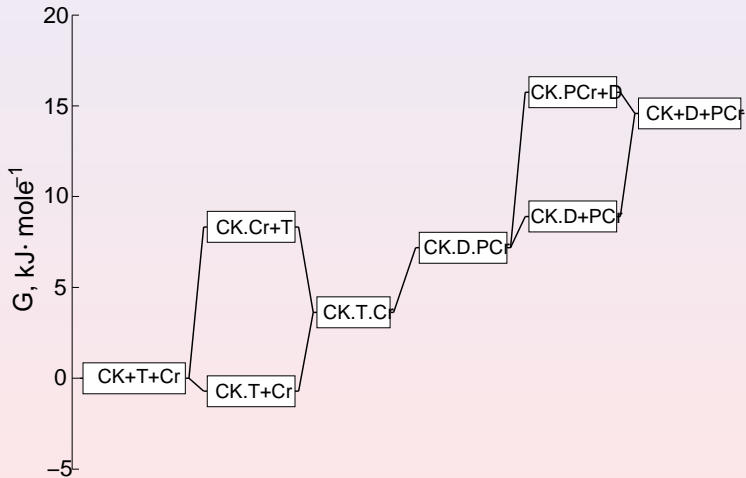


K_a Dissociation constant: $\text{CK.Cr} \leftrightarrow \text{CK.MgATP.Cr}$

K_{ia} Dissociation constant: $\text{CK} \leftrightarrow \text{CK.MgATP}$

Vendelin *et al* (*Biophys J*, 2004)

MiCK: free energy profile

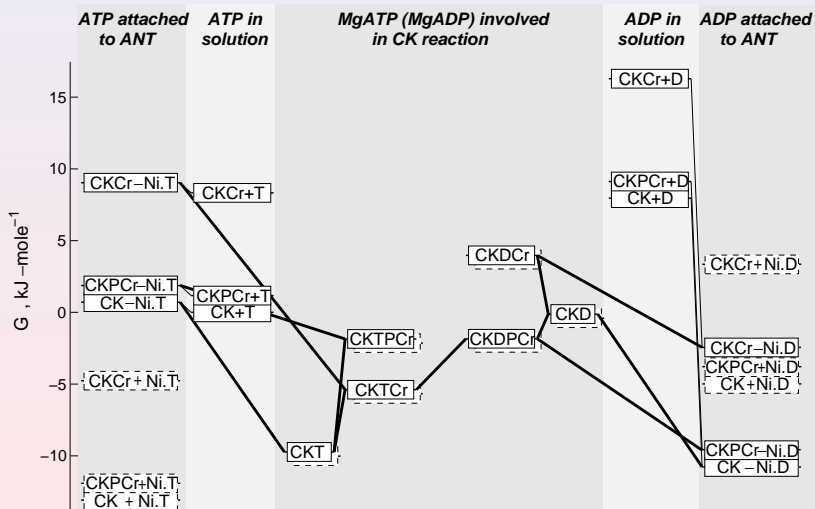


Free energy profile



<http://www.oregonscenics.com>

MiCK-ANT: model prediction



Vendelin *et al* (*Biophys J*, 2004)

MiCK-ANT: summary

Test of kinetic schemes

The simplest kinetic scheme which can reproduce the experimental measurements on functional coupling between mitochondrial creatine kinase (MiCK) and adenine nucleotide translocase (ANT) involves the direct transfer of ATP and ADP between the proteins.

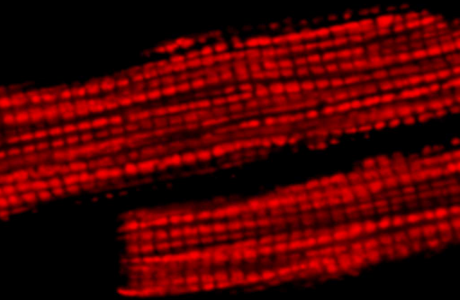
Free energy profile: model prediction

Our analysis revealed the minimal changes in free energy profile of MiCK-ANT interaction required to reproduce the experimental data.

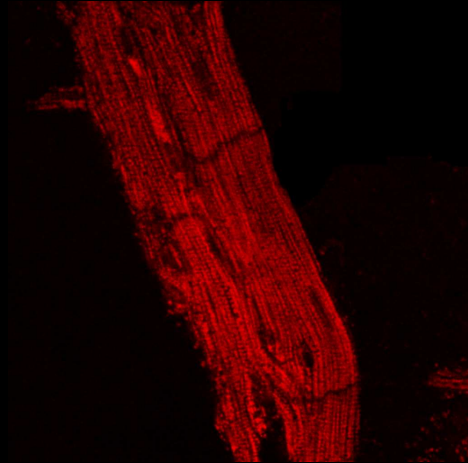
Open problems

- ▶ Accurate ANT kinetics should be used in the future analysis.
- ▶ Structural basis of coupling is still not clear. How ATP and ADP are exchanged between the proteins?

Cardiac permeabilized fibers and cells



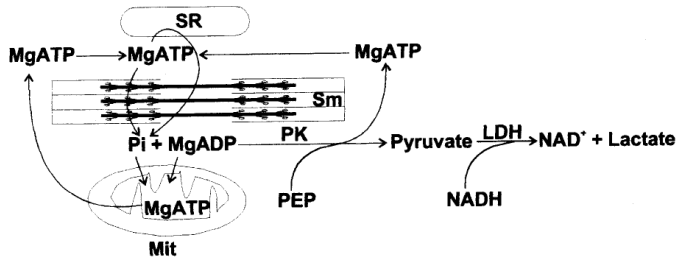
Cardiomyocytes



Fibers

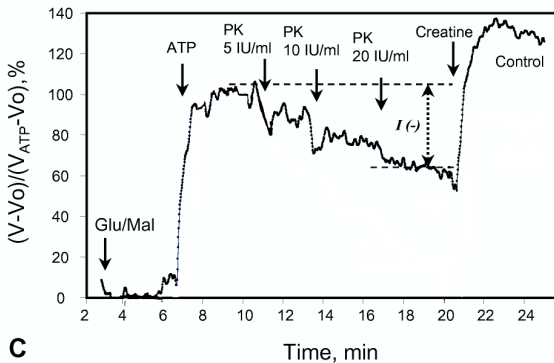
Vendelin *et al* (*Am J Physiol Cell*, 2005)

Direct channeling of ADP between organelles



Seppet *et al* (*BBA*, 2000)

Inhibition of respiration by PK+PEP

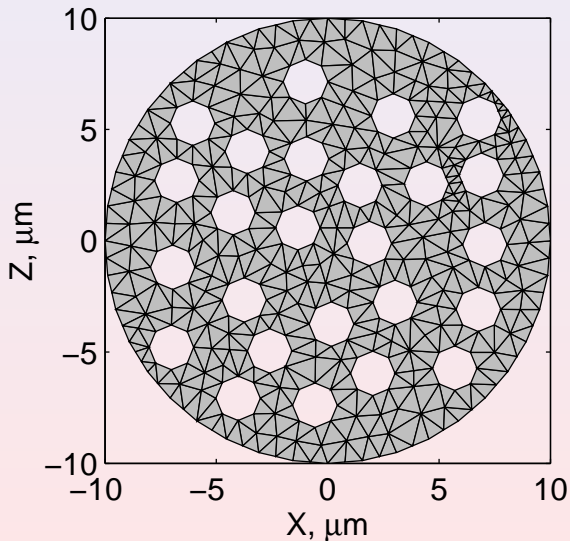


Saks *et al* (*Biophys J*, 2003)

Conclusion

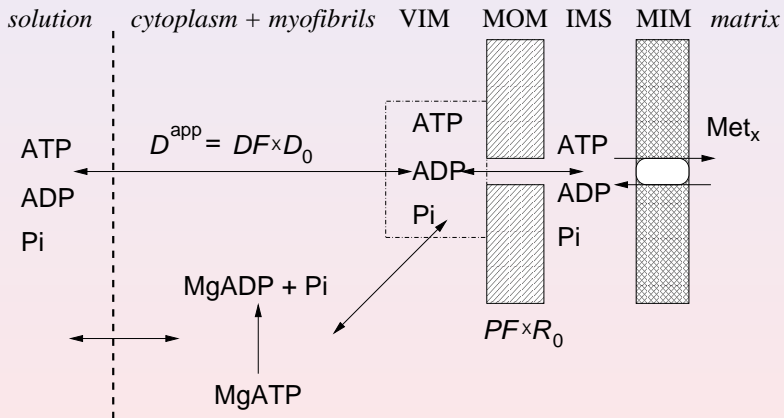
Mitochondria are organized into functional complexes with myofibrils and sarcoplasmic reticulum

Fiber cross-section used in the model



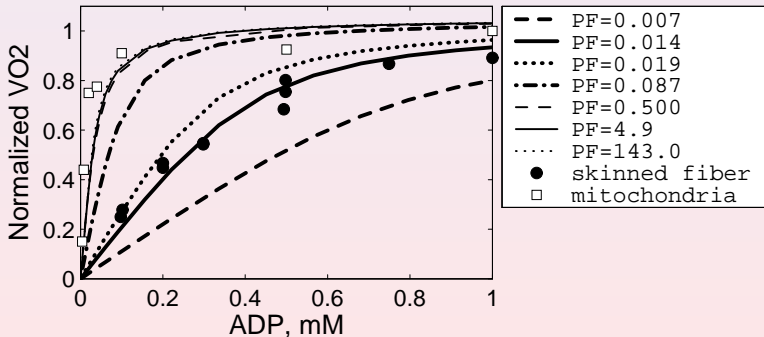
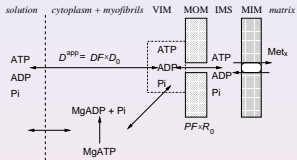
Saks *et al* (*Biophys J*, 2003)

Diffusion limitations in fiber



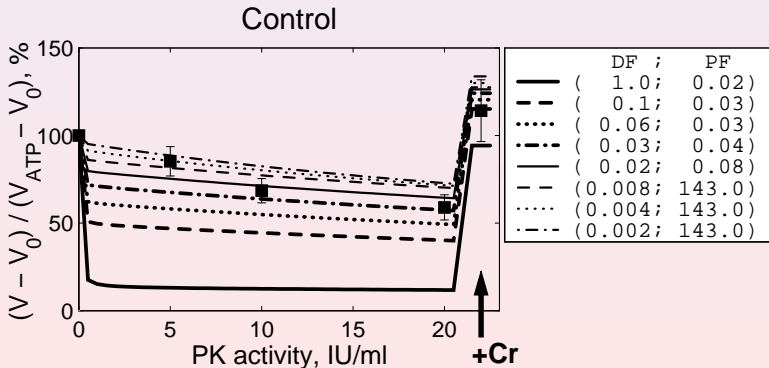
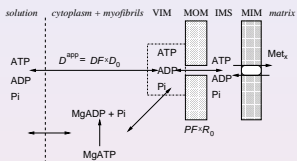
Saks *et al* (*Biophys J*, 2003)

Influence of overall diffusion restriction



Saks *et al* (*Biophys J*, 2003)

Partitioning of diffusion restrictions

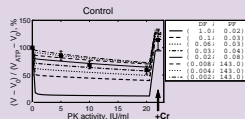


Saks *et al* (*Biophys J*, 2003)

Diffusion restrictions: summary

Diffusion restrictions in the fiber

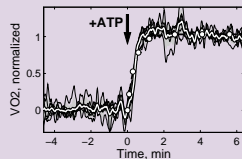
It is possible to distinguish two diffusion restrictions in the cardiac muscle fibers: (1) between ATPases and mitochondrial inner membrane; (2) between ATPases and solution, surrounding the fibers.



Saks *et al* (*Biophys J*, 2003)

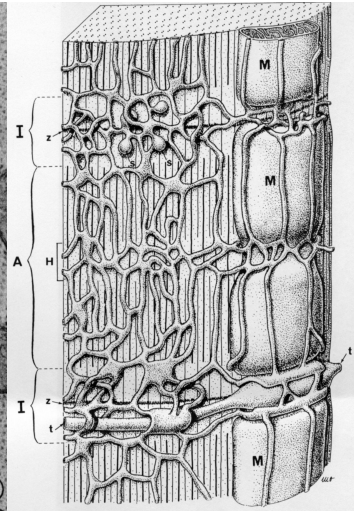
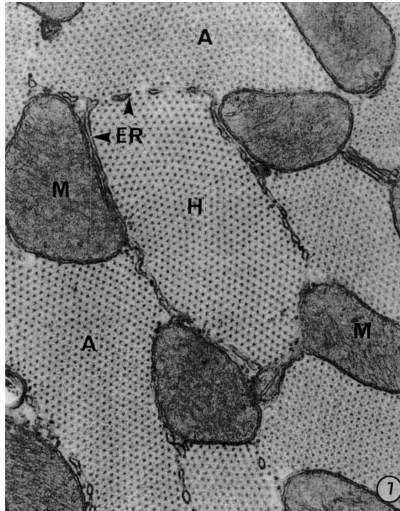
Diffusion restrictions between ATPases and solution

Intracellular diffusion restrictions for ATP and ADP are not distributed uniformly, but rather are localized in certain compartments of the cardiac cells.



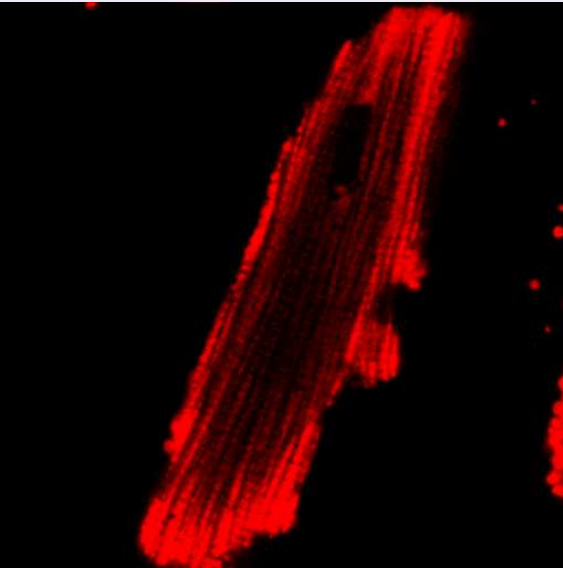
Vendelin *et al* (*Mol Cell Biochem*, 2004)

Which structures can be responsible?

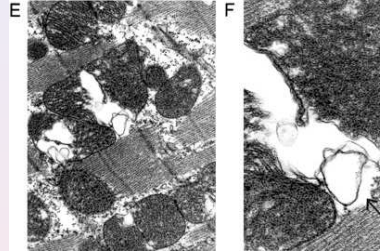


Segretain *et al* (*Anat Rec*, 200:139-151, 1981)

Changes in structure and function

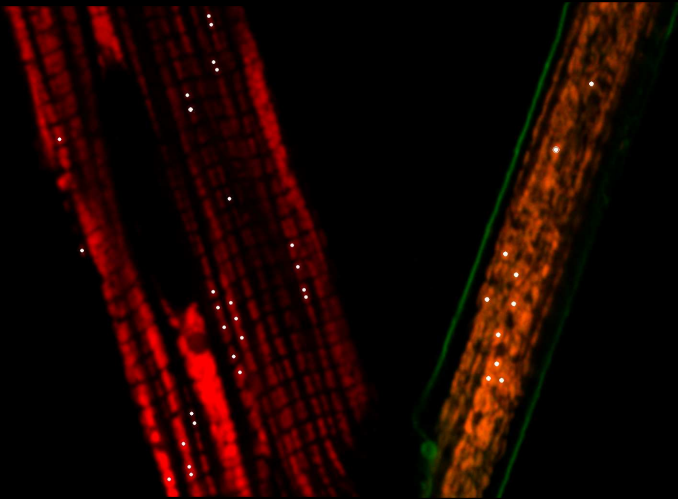


Vendelin *et al* (*Am J Physiol Cell*, 2005)

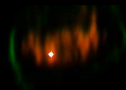
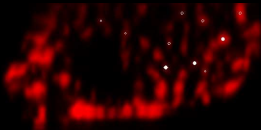


Boudina *et al* (*Am J Physiol Heart*, 2002)

Representative stacks: rat (left) and trout (right)

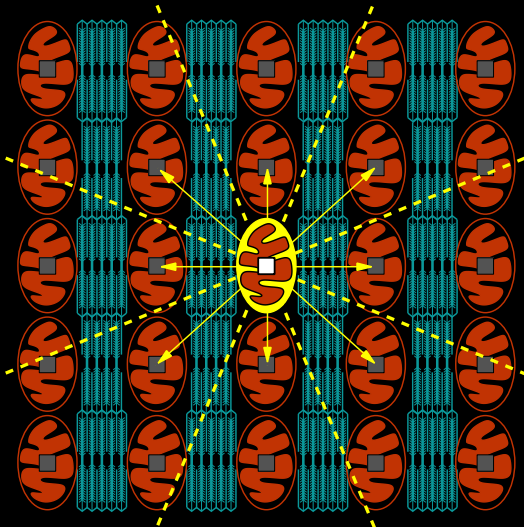


X-Y plane

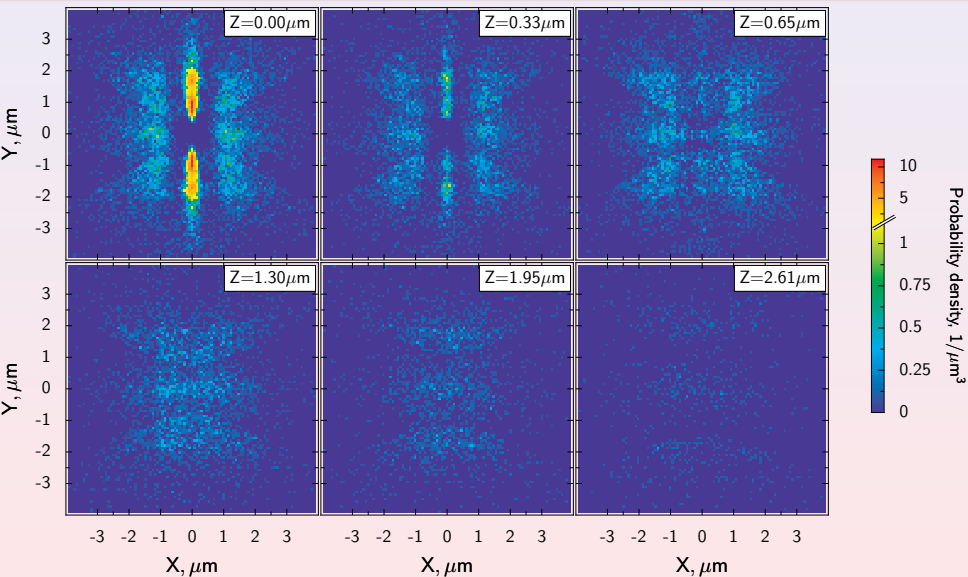


X-Z plane

3D mitochondrial organization

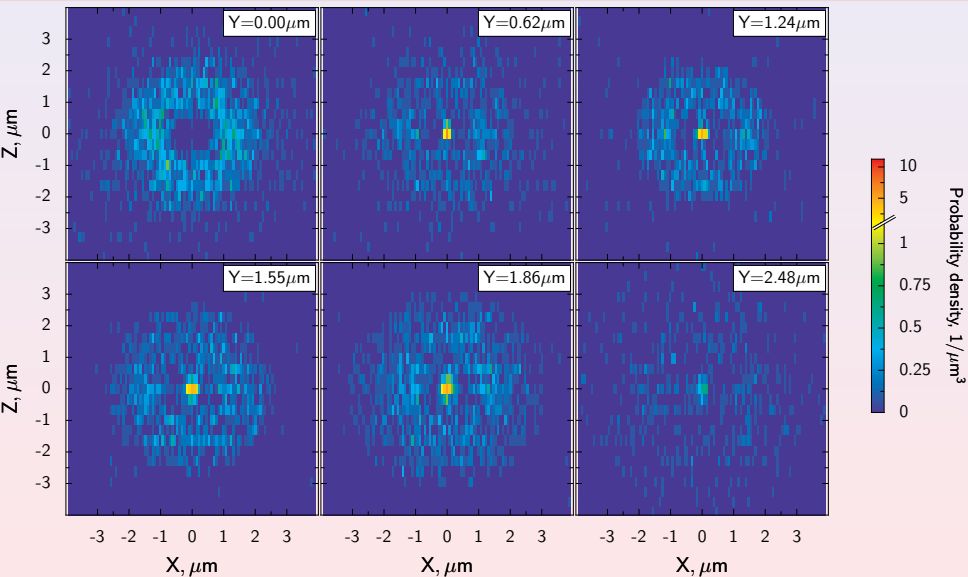


Mitochondrial distribution in rat: X-Y plane



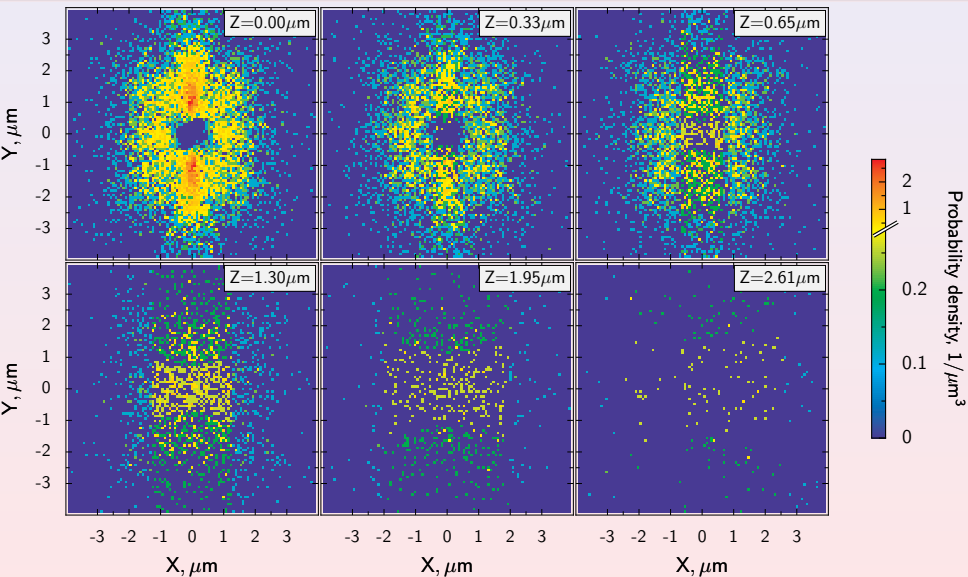
Birkedal *et al* (*Am J Physiol Cell*, in press)

Mitochondrial distribution in rat: X-Z plane



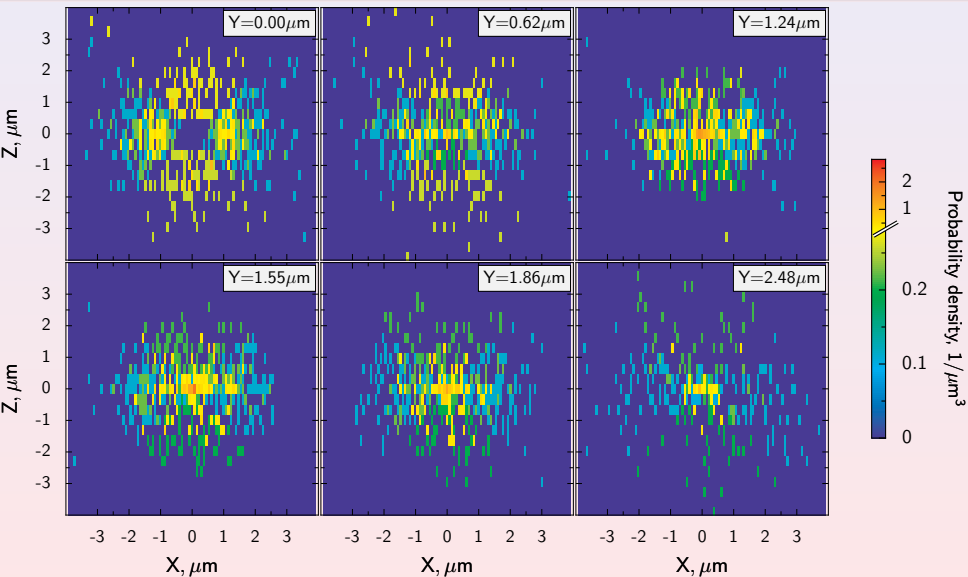
Birkedal *et al* (*Am J Physiol Cell*, in press)

Mitochondrial distribution in trout: X-Y plane



Birkedal *et al* (*Am J Physiol Cell*, in press)

Mitochondrial distribution in trout: X-Z plane



Birkedal *et al* (*Am J Physiol Cell*, in press)

- ▶ Studies of energy transfer in isolated hearts using ^{31}P -NMR inversion techniques.
- ▶ Measurement of local diffusion coefficients in isolated cardiac muscle cells.
- ▶ 3D model of intracellular energy transfer. Identification of structures that can considerably reduce the diffusion of metabolites
- ▶ Extension of mathematical model of mitochondria. Main direction: taking into account interactions between different proteins.

Acknowledgments

- ▶ Tuuli Käämbre, Peeter Sikk, Tiia Anmann, Karen Guerrero, Nathalie Béraud, Tatiana Andrienko, Valdur Saks (UJF Grenoble, KBFI Tallinn)
- ▶ Hena R. Ramay, Ardo Illaste (Küberneetika Instituut, TTÜ)
- ▶ Margus Eimre, Evelin Seppet, Nadezda Peet, Enn Seppet (Tartu Ülikool)
- ▶ Peter Bovendeerd, Theo Arts (Eindhoven University of Technology)
- ▶ Rikke Birkedal, Holly A. Shiels (University of Manchester)
- ▶ Jacqueline Hoerter, Jean-Luc Mazet (U-446 INSERM, Université Paris-Sud)

Supported by:

Marie Curie Fellowship and Re-integration Grant of the European Community, INSERM, Estonian Science Foundation

Tehismaailma keerukuse mõju arvutiteadusele

Leo Mõtus
Eesti Teaduste Akadeemia

Miks välismaailm mõjutab arvutiteadust?

Arvutirakenduste klassid muutuvad järjest nõudlikumaks:

- Suure hulga arvutuste tegemine (*number crunching*)
- Virtuaalne reaalsus ja arvutuslikud mudelid (*virtual reality and computational models*)
- Arvutite ehitamine looduslikesse ja tehislikesse struktuuridesse (*ubiquitous, or invisible and pervasive computing*)

Traditsiooniline arvutiteadus

Uurib:

- Turingi mõttes arvutatavaid (*Turing computable*) funktsioone, nendest programmide ehitamist, ja muud sellega seotut ning rahuldab täielikult esimese rakenduste klassi vajadusi
- Ligikaudselt, kuid sageli piisava täpsusega, saab ka teist rakenduste klassi kirjeldada Turingi mõttes arvutatavate funktsioonidega
- Üsna abitu on traditsiooniline arvutiteadus kolmanda rakenduste klassi omaduste analüüsil. Samal ajal hõlmab see rakenduste klass ligi 80% kasutusel olevate protsessorite üldarvust.

Arvutiteadus on uue ajastu väravas

“Journeys in Non-Classical Computation”, by S. Stepney et alii claims that

We are currently poised on the threshold of a significant **gateway event** in computation:

**Breaking free from many of our current
“classical computational” assumptions.**

“Journeys...” is

one of the reports resulting from the British venture on
Grand Challenges in Computing Research

Näiteid "klassikalistest arvutuslikest" eeldustest

- **Turingi paradigma** – tegelikult tuleks arvutamist vaadata palju laiemalt kui seda teeb Church-Turingi teesil põhinev algoritmiteooria
- **John von Neumanni paradigma** – tegelikud arvutused on sundparalleelsed, puudub keskne mälu, programm pole staatiline
- **Algoritmiline paradigma** – harva piirduakse vaid stringi töötusega, töötuse ajal ei isoleerita end välismaailmast, vaja on jätkuvat, ajalugu mäletavat, töötlust
- **Samm-haaval täpsustamise paradigma** – ei kehti, tegelikult esineb enamuses rakendustes ilmnev käitumine

Näiteid teistest minevikus läbitud uue ajastu väravatest

Värava läbimine annab süsteemile/teadusele võimaluse käsitleda palju laiemat klassi (ja keerulisemaid) nähtuseid, kui enne.

Näiteid:

Elu evolutsioonist – mitmerakulised organismid, hapnikurikas atmosfäär, jne.

Matemaatikast – reaalarvud, kompleksarvud, hulgad, diferentsiaalvutus, jne.

Füüsikast – relatiivsusteooria, kvantteooria, jne.

Keemiast – elementide perioodilisuse seadus, jne.

Keerukus ja kompleks- süsteemide süntees

Tarkvaramahukate kompleksüsteemide süntees
(Holistlikud süsteemid)

Arvutuslik keerukus (computational complexity)

- On piiratud Turingi mõttes arvutatavate funktsioonide (*Turing computable functions*) uurimisega
- On palju ekvivalentseid arvutusmudeleid – Turingi masin, μ -rekursiivsed funktsioonid, λ -rekursiivsed funktsioonid, Posti masinad, jne.

Arvutuslik keerukus näitab, kuidas suureneb operatsioonide arv ja mälu vajadus kui algoritmi sisendmuutujate arv suureneb

Enamasti jagatakse algoritmid kahte klassi -- P ja NP keerukusega algoritmid.

See teooria on väike osa kompleksüsteemide teooriast

Holistlike arvutisüsteemide näiteid

- ❑ Mobiiltelefonid ja muu koduelektroonika
- ❑ Autonoomsed robotid ja muud liikuvad seadmed
- ❑ Meditsiiniseadmed ja seiresüsteemid
- ❑ Tehnoloogiliste protsesside juhtimissüsteemid
- ❑ Mitmed interaktiivsed probleemilahendajad
- ❑ Arvutipõhised projekteerimissüsteemid
- ❑ Arvutuslikud mudelid (computational models)
- ❑ Jne.

Miks “korralik” arvutisüsteem muutub holistlikuks?

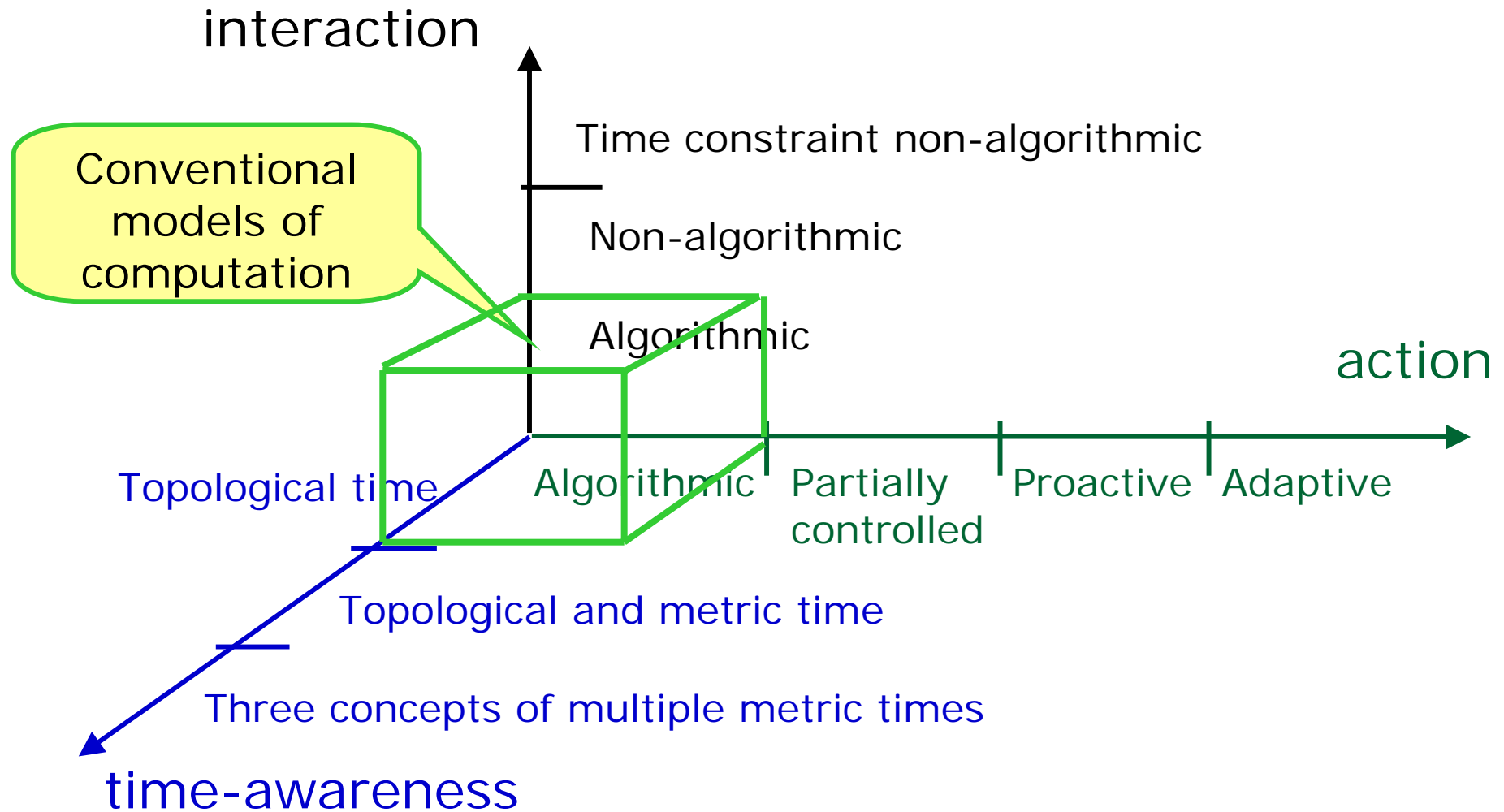
Holistlik süsteem – terviku omadused ei tulene ainult komponentide omadustest; tervik mõjutab omakorda komponentide käitumist.

1. Arvuti on vahetus interaktsioonis keskkonnaga
2. Keskkonna omadused teada vaid osaliselt
3. Arvuti ja tarkvara komponentide vahelised põhjuslikud seosed teada vaid osaliselt
4. Mitu simultaanset, sundparalleelset ja omavahel infot vahetavat arvutusvoogu

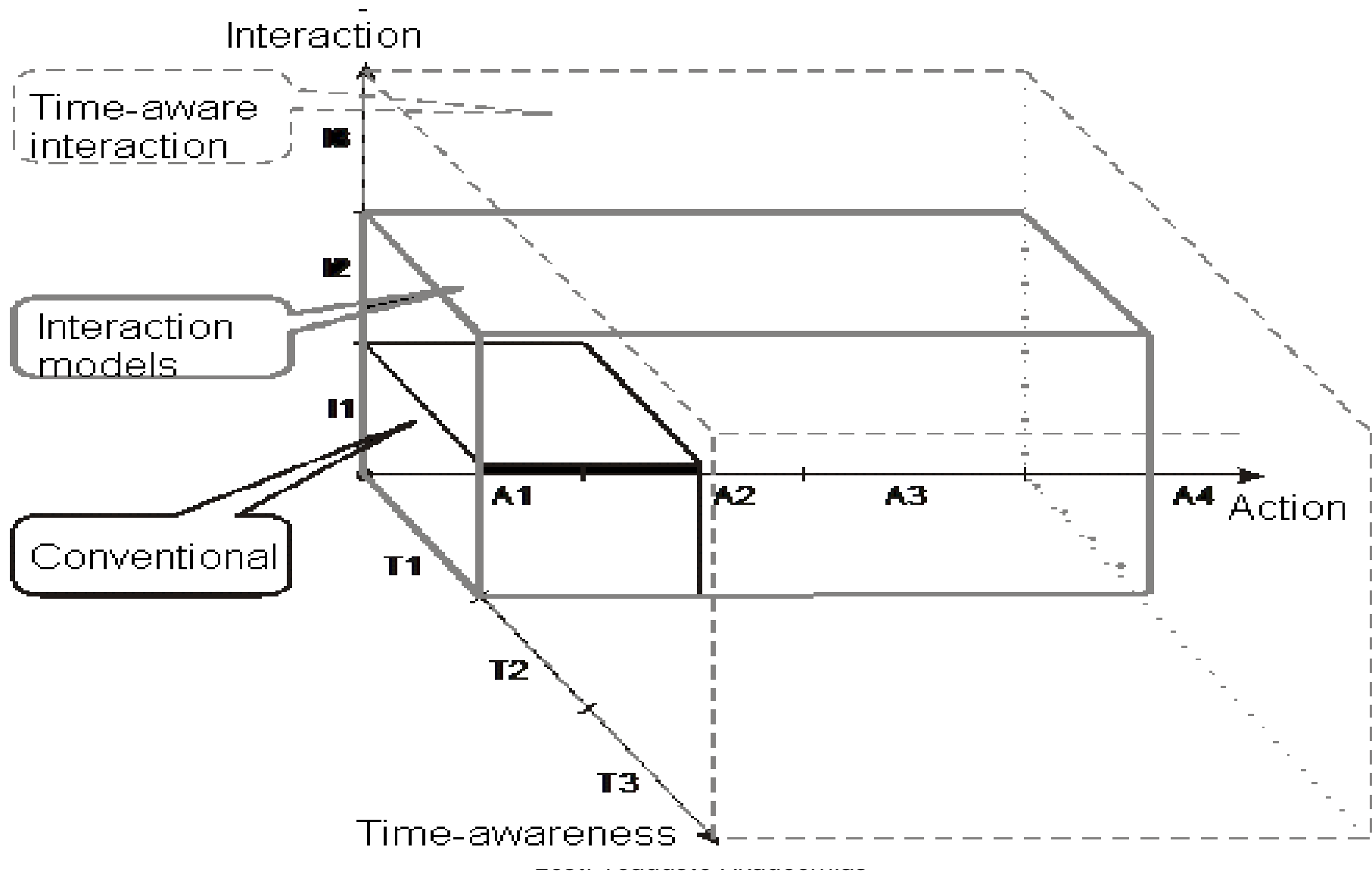
Miks on holistlik süsteem tema loojale ebamugav?

- Ilmneva käitumise osakaal ei luba seda ignoreerida
- Ranged kitsendused tehissüsteemi ilmnevale käitumisele, mille tagamiseks tuleb:
 - sulgeda süsteem ohutusse(?) kesta (“hullusärk”),
 - Tagada iseorganiseerumise ja enesekontrolli võime
 - igale komponendile ja/või
 - komponentide vahelistele interaktsioonidele
- Ilmneva käitumise tekkimise mehhanismist ja põhjustest pole veel täpselt aru saadud, ja need võivad paljudel juhtudel olla väljaspool looja mõjusfääri. Arvutiteadus pole seni selliste probleemidega tõsiselt tegelenud.

Holistlike süsteemide arvutusmudelite ruum



Arvutusmudelite taksonoomia näide



Järgmine samm – uus arvutusmudel, mis

- võimaldab erinevaid analüüsi tasandeid kirjeldada neile sobivates erinevates keeltes
- võimaldab erinevatel analüüsi tasanditel rakendatavate teooriate aluseks olevaid ontoloogiaid paremini (täielikult?) kooskõlastada
- tekitab selge loogilise ühenduse erinevate analüüsi tasandite (ja erinevate füüsikalise reaalsuse tasandite) vahel – ja seega minimeerib “müstiliste” selgituste vajaduse nähtuste põhjendamisel

Sellise tegevuse inglisekeelne nimetus on

Ontological unification

Näiteid analoogilistest üritustest

Rob Clewley “The Demystification of Emergence and Complexity”:

- Vähendada lõhet neuroni dünaamika detailse mudeli ja suure närvivõrgu toimimise vahel.
- Sama, elementaarosakeste mudelite ja statistilise füüsika vahel
- Sama, kognitiivse psühholoogia indiviidi mudelite ja sotsiaalsete gruppide käitumismudelite vahel.
- Jne.

See on jätkuv tegevus, millest on vara kokkuvõtteid teha.



Ökonofüüsika ja komplekssüsteemid

Robert Kitt



Ülevaade ettekandest

- Teretutvus ökonofüüsikaga
- Ülevaade uurimustööst CENSis



Ökonofüüsika - *Econophysics*

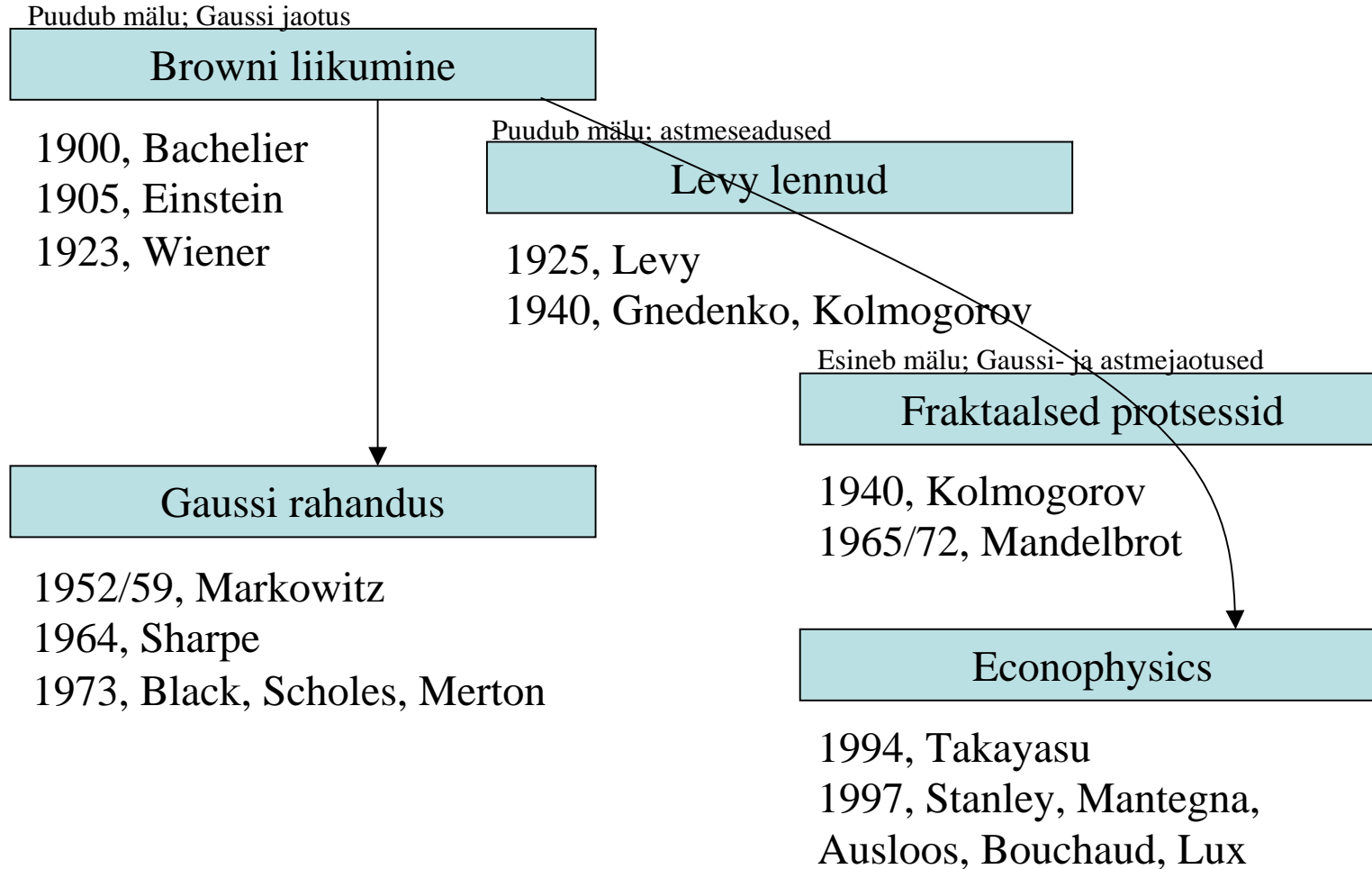
- Termin *Econophysics* tekkis 1990nendate keskel ritta *neurophysics*, *biophysics*, ...
- Alternatiivina on olnud kõnepruugis ka termine *phynance*
- Eestikeelne *ökonofüüsika* – oli ilmselt esimesena kasutusel 2002a
 - Alternatiivina võib kasutada ka *finantsfüüsika* 't või *majandusfüüsika* 't



Motivatsioon – miks füüsik?

- Mida oskab majandusteadlane?
 - Näpuotsaga matemaatikat ning statistilist analüüsi
 - Lihtsustatud majandust kirjeldavaid seoseid
 - Turgude formaalseid reeglistikke
- Mida oskab matemaatik?
 - Palju matemaatikat
- Mida oskab füüsik?
 - Natuke matemaatikat; päris palju statistikat tänu juhuslikele protsessidele
 - Mudelite koostamist
 - Selliste detailide vaatlusväljalt kõrvaldamist, mis ei muuda kvalitatiivselt protsesse
 - Statistilise füüsika abil ka peaaegu kõike finantsteaduse mudelitest

Mõtte areng 20 sajandil





Vaatleme korraks majandust

- Majanduses toimib pidevalt väga suurel hulgal erinevaid tehinguid. Keskne koht on turg.
 - Igal tehingul on osapooled ning hind
- Turgu liigutavaks elementaarüksuseks on inimõistus.
 - Inimõistusel on mälu ja ta on mittelineaarses interaktsioonis teiste inimeste- ja väliskeskkonnaga
 - Turgu saab vaadelda keerulise protsessina, mille kirjeldamine on oluliselt keerukam, kui kaasaegsed majandusmudelid
- Kvalitatiivne hüpe on toimivate mudelite loomine
- Seda on suutnud ellu viia just füüsikud
 - Eeskätt haakub majandusfüüsika just statistilise füüsikaga (laiemalt)
 - Samuti turbulentsiteooria ja kompleksüsteemide füüsikaga (kitsamalt)

Kas on tasuta lõunaid?

- Efektiivse turu hüpotees: termodünaamilist analoogiat kasutades, turg on *soojuslikus tasakaalus*, süstemaatiliselt teenida pole võimalik
- Analooogia pole ideaalne, on võimalik leida strateegiaid, mille signaali ja müra suhe on kuni 1%. Nende realiseerimine on nagu *tuumapommi ehitamine*: tulemusi ei avaldata, vaid salastatakse ja kasutatakse; kasutamine nõuab filigraanset tehnikat - tehingute optimeerimist ja globaalset turgu (et tagada müra välja keskmistumine). Erinevus: strateegiate efektiivsus muutub ajas — pidevalt tuleb otsida uusi.
- Vähem salastatud (sageli üldse mitte) ja teoreetiliselt rikkam: riskianalüüs



Nobeli preemia veel saamata

- Ökonofüüsika – omadele võõras, võõrastele tundmatu
 - Traditsiooniline füüsik ei pea ökonofüüsikat sageli tõsiseltvõetavaks distsipliiniks
 - Tavaline majandusteadlane või praktik ei ole ökonofüüsikast midagi kuulnud

Economics and physics are two disciplines that, contrary to widespread perceptions, have significant common agendas. Shame, then, that the professionals don't do more to recognize the fact.

*Nature, vol 441, 8 juuni 2006, lk 667, Econophysicists matter
ibid, lk 686, Culture Crash*



Ülevaade majandusfüüsika- alasest uurimistööst CENSis

Publikatsioonid

2003

- i. R.Kitt, *The importance of the Hurst exponent in describing financial time series*, Proc. Est. Acad. Sci. Phys. Math

2004

- ii. R.Kitt, J.Kalda, *Pareto-Zipf's Law in Variability of Financial Time Series*, WSEAS Trans. on Business and Economics

2005

- i. R.Kitt, J.Kalda, *Properties of low-variability periods in financial time series*, Physica A
- ii. R.Kitt, J.Kalda, *Scaling analysis of multi-variate intermittent time series*, Physica A

2006

- i. R.Kitt, J.Kalda, *Leptokurtic portfolio theory*, Eur Phys J B



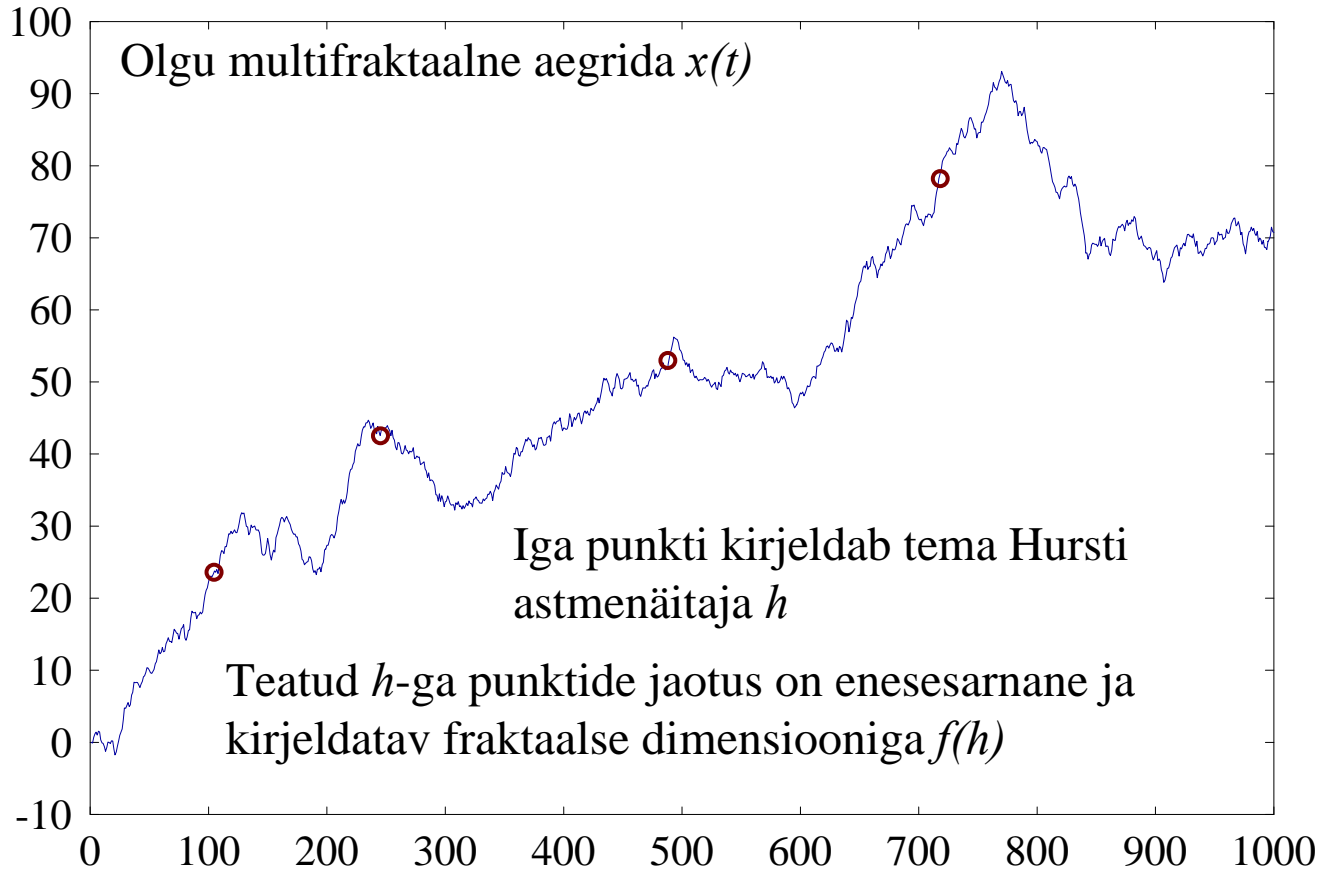
2005: kaitstud doktoriväitekiri

1. Ülevaade skaleerimisest ning juhuslikkusest finantsaegridades. Samuti detailne ülevaade majandusfüüsika mudelitest ning rakendustest.
2. Mitme sisendiga juhumuutlike aegridade skaleerimisanalüüs
 - Madala muutlikkusega perioodide rakendus
 - Artiklites pakuti välja teooria ning hulgaliselt empiirikat nähtuse kohta
3. Portfelli koostamise probleemid
 - Rakendus väärtpaberiportfelli koostamiseks mitte-Gaussi iseloomuga riskide maandamiseks

Madala muutlikkusega perioodide multiskaleerimine

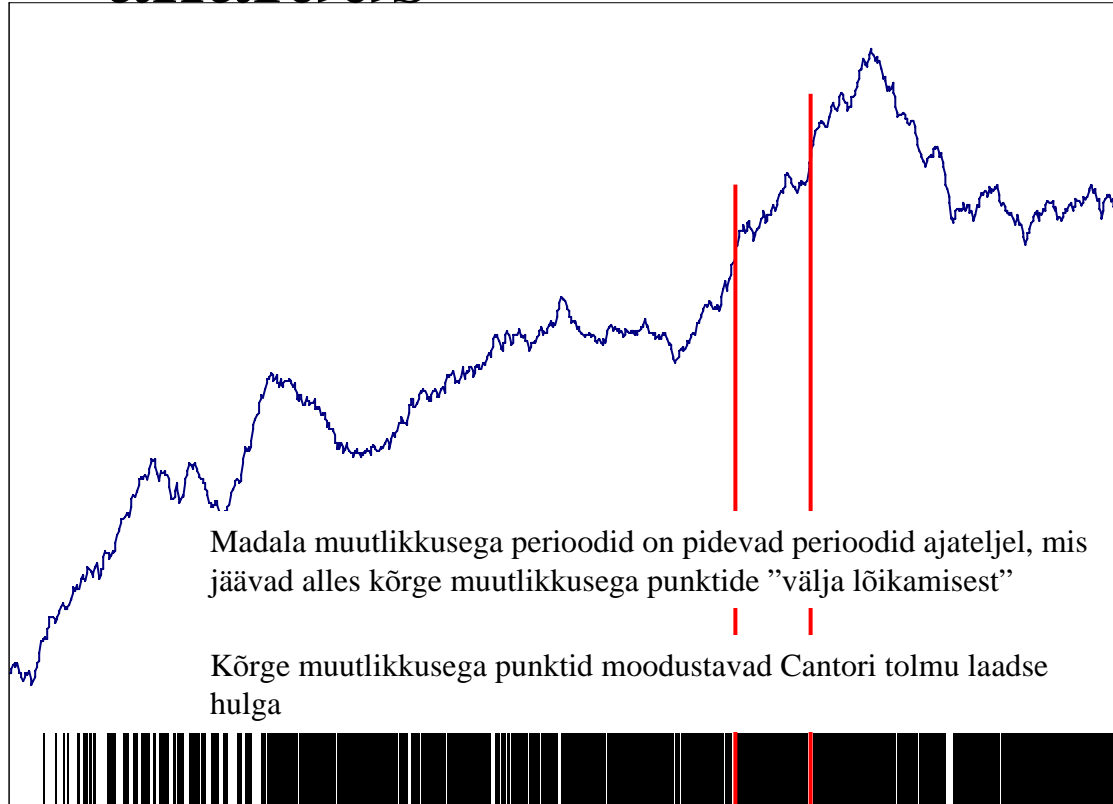
- Madala muutlikkusega perioodide definitsioon:
 - Olgu $T_i = [t_i, t_i + l_i]$; ($i = 1, 2, \dots$) mis rahuldab:
 - (i) $|x(t) - \langle x(t) \rangle_\tau| \leq \delta$ iga $t \in T_i$
 - (ii) Iga perioodi iseloomustab tema pikkus
- Kui esineb multiskaleerimine, siis:
 - $R(n) = R_0 n^{-\alpha(\delta, \tau)}$ kus:
 - $R(n)$ on madala muutlikkusega perioodide kumulatiivne jaotusfunktsioon ($l_i \geq n$)

Multifraktaalne analüüs



Multifraktaalse analüüsi puudus: otsest tähelepanu ei pöörata kõrge muutlikkusega perioodide kogunemisele, kuna skaleerimisevahemikke $|x(t)-x(t_0)|$ uuritakse suures skaalas $|t-t_0| \gg \tau_0$

Madala muutlikkusega perioodide analüüs



Kõrge muutlikkusega punktide fraktaalne dimensioon on:
 $d = \sup f(h) = f(\log_{\tau} \delta)$

Madala muutlikkusega perioodide pikkus-jaotuse eksponent on samuti d

Seega, madala muutlikkusega perioodide skaalaeksponent vastab algse aegrea multifraktaalsele dimensioonile

Meetodi eelis #1: Võimalus kontrollida multifraktaalsust

Meetodi eelis #2: Skaalaeksponenti võib vaadelda ka multiaafiinse spektri $f(h)$ täiendust kõige kõrgeimal ajaresolutsioonil



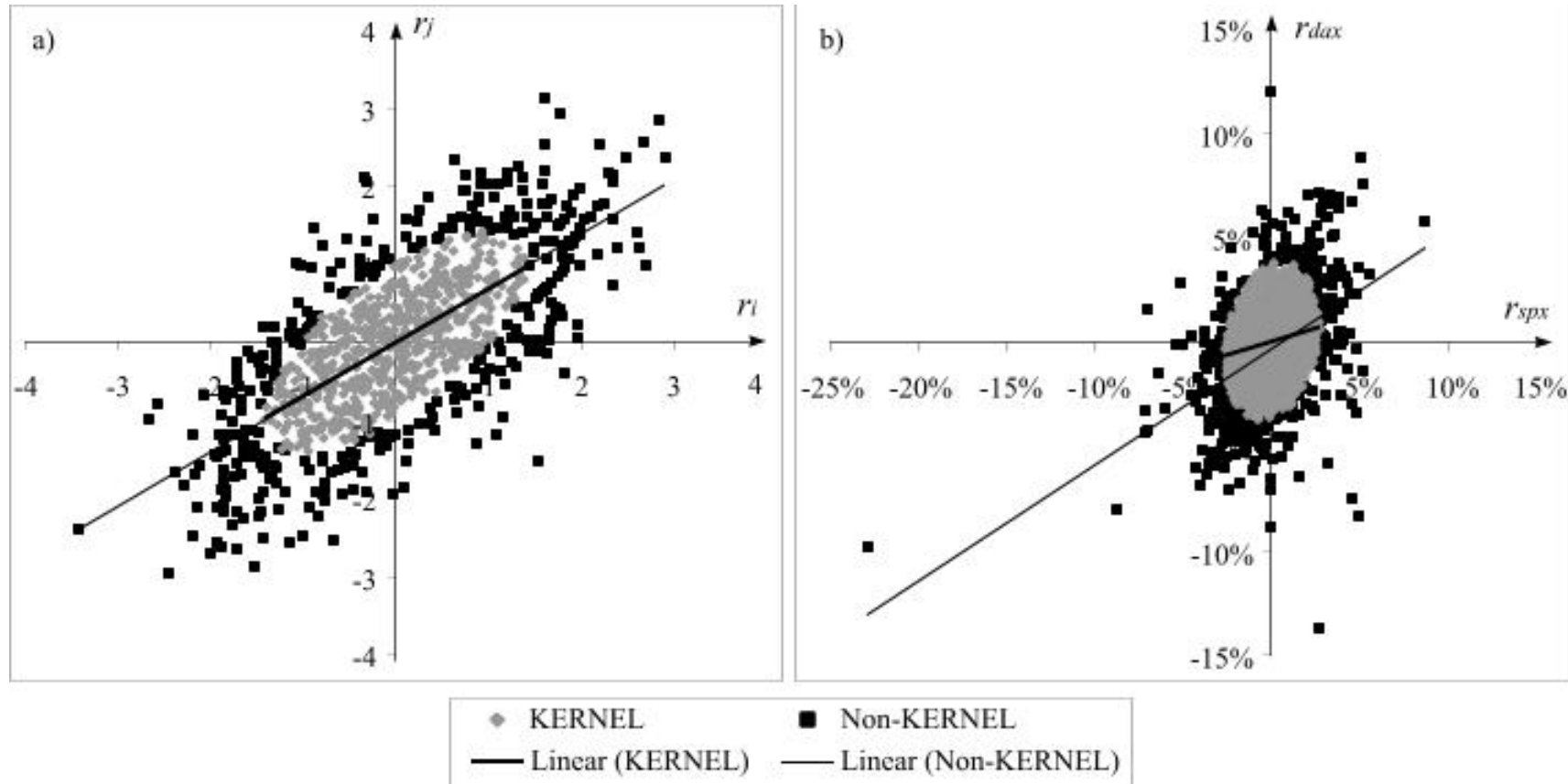
Madala muutlikkusega perioodide analüüs

- “Vaikuse-purustamise” tõenäosus
 - Super-universaalne, mitte-intuitiivne seadus: peale n päeva pikkust madala muutlikkusega perioodi on suure liikumise tõenäosus pöördvõrdeline perioodi n pikkusega
- Mitme signaaliga multifraktaalne analüüs
- Empiirika
 - Näidatud multifraktaalsuse eksisteerimist kõrgsageduslikel valuutakursside aegridadel
 - Multiskaleerumise omadused mitmetel valuuta- ning aktsiakurssidel ja ka kauplemiskogustel

Leptokurtiline portfelliteooria

- Mõiste “risk” on jagatud kaheks:
 - Gaussi- ehk kõikumise risk
 - Mitte-Gaussi ehk kukkumise risk
- Pakutud meetod minimeerib suuri kukkumisi
 - Normaaljaotuse tuum: kõik kõikumised on alla seatud parameetri (näiteks alla kolme standardhälbe)
 - Portfelli risk minimeeritakse suuremaid kõikumisi arvestades

Noise Kernel





- Täna kuulamast

Taivo Lints

Lihtsad mudelid
üllatavad tulemused

Complexity-NET, 1. nov. 2006

Keerukusteadus...

... uurib keerukust,
keerulisi süsteeme
ja keerulisi nähtusi ...

... üritades leida erinevate
valdkondade süsteemidel
ühiseid omadusi ...

... ja pakitudes välja
uudseid uurimismeetodeid
ja -vahendeid, näiteks:

- multiagentmudeliid
(~indiviidipõhised mudeliid),
- võrgu(graafi)põhine struktuuri
ja dünaamika analüüs,
- rakkautomaadid (CA),
- ja muud.

Keerukusteadus:

Keeruline käitumine
võib tekkida ka
väga lihtsatest reeglitest.



lihtsate mudelite
kasutamine/uurimine

Man soll die Dinge
so einfach wie möglich
machen,
aber nicht noch einfacher.

A. Einstein

Aga modelleerimine oli
peamiselt käsitsi tehtav
matemaatika!

lihtne \Leftrightarrow lineaarne



lihtne mudel \Rightarrow lihtne käitumine

Nüüd kasutatakse arvuteid.

lihtne \Leftrightarrow lihtsad reeglid



lihtne mudel \Rightarrow lihtne käitumine



keeruline
käitumine

Very simple wealth model (Tom Carter)

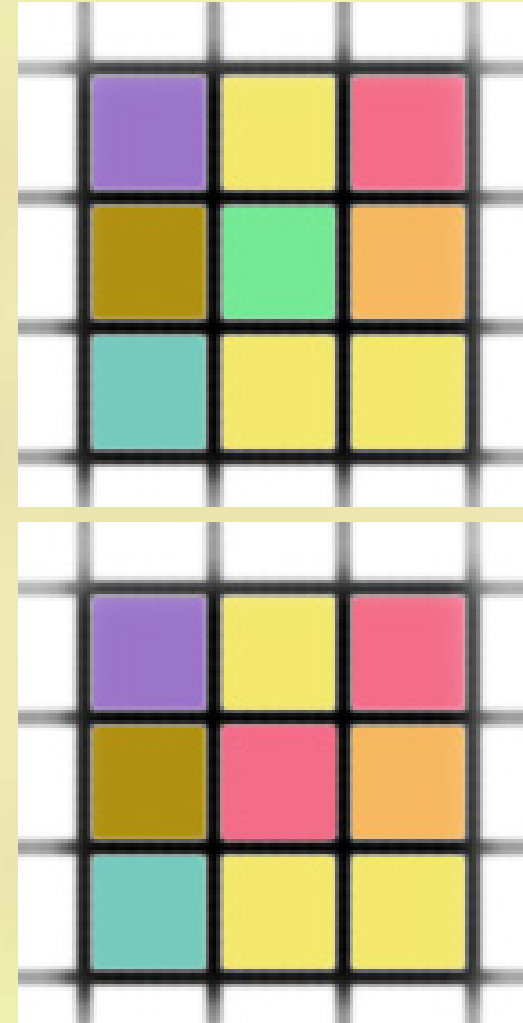
- Alguses igal agendil X dollarit.
- Igal ajasammul iga agent valib juhuslikult ühe teise agendi ja annab sellele \$1.
- Pankrot ja võlad on keelatud: kui agendil ainult \$1, siis istub ja ootab, kuni keegi juurde annab. Seejärel käitub jälle nagu ennegi.

Vants (*virtual ants*) (Chris Langton)

- Tasand on kaetud ruudustikuga.
- Vant saab olla näoga ainult põhja, lõuna, ida või lääne suunas.
- Igal ajasammul astub vant ühe ruudu edasi ja kui see ruut on:
 - valge, siis värvib mustaks ja pöörab end 90 kraadi paremale.
 - must, siis värvib valgeks ja pöörab end 90 kraadi vasemale.

Geenitriiv (juhuslik valik)

- Ruudud värvitakse juhuslikult.
- Igal ajasammul iga ruut valib juhuslikult ühe oma 8 naabrist, vaatab, mis värvi too on, ja värvib ka ennast samasuguseks.



Conway's Game of Life (1970)

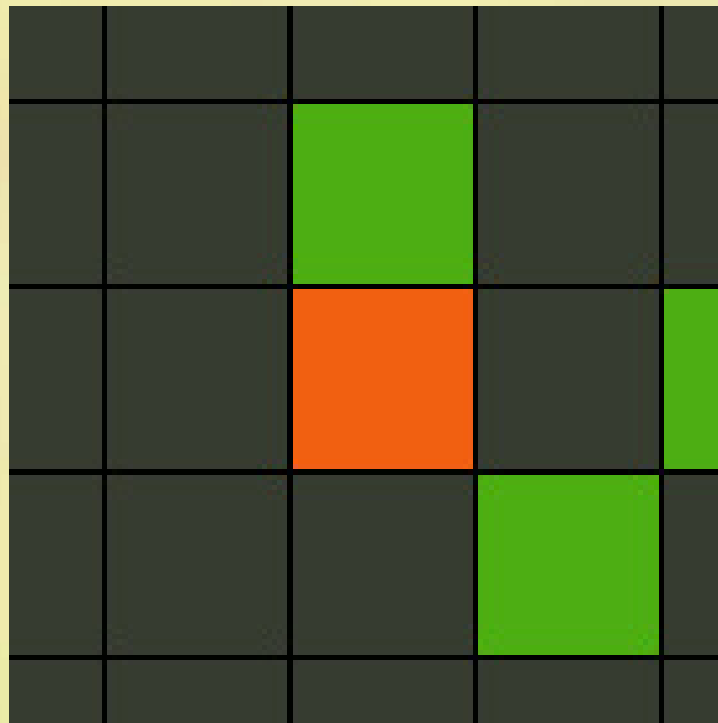
- Ruudustik mustade ("elus") ja valgete ("surnud/tühi") ruutudega.
- Igal ajasammul:
 - Iga vähem kui 2 elusa naabriga elus ruut sureb (üksindus).
 - Iga rohkem kui 3 elusa naabriga elus ruut sureb (ülerahvastatus).

Conway's Game of Life (1970)

- Iga 2 või 3 elusa naabriga elus ruut elab edasi.
- Iga täpselt 3 naabriga tühi ruut ärkab ellu.

Metsatulekahju

- Mets on jaotatud ruudustikuks.
- Tuli levib ainult külgnevatele metsaga kaetud ruutudele.



Hundid-lambad-rohi

- Liikumine kulutab looma energiat.
- Kui energia lõpeb, loom sureb.
- Hundid saavad energiat lambaid süües, lambad rohtu süües.
- Loomad paljunevad teatud tõe-
näosusega, olukorrast sõltumata.
- Söödud rohi tekib teatud aja
mööduhes tagasi.

NetLogo

wealthnet.jar

Kokkuvõte:

Keeruline käitumine
võib tekkida ka
väga lihtsatest reeglitest.

Kontakt:

taivo.net



**Küsimused?
Kommentaarid?**

Taivo Lints

Complexity-NET
European Network of Funding
Agencies – Coordination of
National Complexity Research and
Training Activities

ERA-NET Scheme
Coordination of National and Regional Activities
6th Framework Programme

Objectives

- Obtain and disseminate information related to national programmes
 - Analysis of national landscapes with focus on SWOT
 - Analysis of overall European landscape (SWOT)
 - Prepare and implement a plan for joint calls, joint training activities, use of experimental facilities, joint activities for new technologies
 - To establish and ensure effective operation of the network office, steering committee , etc
-

Related European activities

- EXYSTENCE – the complex systems network of excellence (funded by FP6 IST on Future and Emerging Technologies)
 - “Tackling Complexity in Science” (FP6, New and Emerging Science and Technology)
 - COST action “Risk” (scientists applying complexity methods in risk analysis – e.g. financial markets)
 - ESF – EUROCORES
 - European Physical Society – Division on Statistical and Nonlinear Physics
-

Form of activities

- On-going work according to national programmes
 - Three-monthly workshops to coordinate the progress of Complexity-NET (e.g. SWOT analysis, development of durable action plan) – based on national expectations, not imposed by the EU authorities
 - All the activities are based on self-evaluation of national programmes, and on national expectations on the future research
-

Participants (1)

1. The Engineering and Physical Sciences Research Council (EPSRC), the United Kingdom
 2. National Fund for Scientific Research (FNRS), Belgium
 3. Ministry of Science, Technology and Innovation (MSTI), Denmark
 4. Estonian Ministry of Education and Research (Science Competence Council) represented by Estonian Academy of Sciences, Estonia
 5. The General Secretariat for Research and Technology (GSRT), Greece
-

Participants (2)

6. National Office for Research and Technology (NKTH), Hungary
 7. Irish Research Council for Science, Engineering and Technology (IRCSET), Ireland
 8. Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR), Italy
 9. The Netherlands Organisation for Scientific Research (NOW), The Netherlands
 10. Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT), Portugal
 11. Ministry of Education and Science, Spain
-

VÄLJAVÖTE

Sixth Framework Programme
 Coordination of National and Regional Activities (ERA-NET Scheme)
 Project: European Network of Funding Agencies – Coordination of National
 Complexity Research and Training Activities (Complexity-NET)

1. Project summary

Complexity and complex systems is an emergent and rapidly growing research field with a large technological potential, in which Europe has fostered scientific excellence with extensive collaborations across Europe and abroad. Based on the need to put stronger focus on this field and to further its high growth potential, nine European Research Councils and Ministries initiated a consortium, in the form of a Specific Support Action, aiming to establish the necessary environment for coordinating nationally strategically planned research activities. The consortium has identified national research and training programmes which target or overlap on Complexity issues and established contacts with major Complexity research groups funded by the programmes and EU networks. The SSA has identified a significant need for better coordination of European activities in Complexity and Complex Systems and has demonstrated that good opportunities exist for exploiting the great growth potential there is for Complexity research. Our ambition is the formation of a nationally coordinated European setting on Complexity with the aim of further common use of experimental facilities, enhanced international training and mobility, supporting international scientific communications, promoting public dialogue and awareness, and catalysing innovation. The coordinated action proposed here is the work needed to establish this setting. The consortium will continue their collection and exchange of information and analyse and discuss the material to a level where a joint action plan can be formulated and agreed upon. The consortium also plans to expand its activities by inviting other countries, which were not part of the original SSA, to join in this proposal, thus broadening further Europe's potential to achieve a truly trans-national cooperation programme on Complexity.

2. Project objective(s) and state of the art

Strategic objectives of the consortium:

1. To obtain and disseminate information documenting Complexity related national programmes, with their respective implementation approaches and Complexity RTD landscapes. *Milestones: Month 6 for exchange of information.*
2. To work out analysis reports on the national landscapes with focus on strengths, weaknesses, opportunities and threats. *Milestones: Month 12 for completion of reports.*
3. To document and analyse the overall European Complexity RTD landscape and its strengths, weaknesses, opportunities and threats, identify and recommend strategies to exploit the opportunities and oppose the threats. *Milestones: Month 12 for exchange of information. Month 19 for completion of SWOT reports.*
4. To prepare and carry out a joint plan describing actions to be carried out in order to exploit the opportunities identified, including possible joint calls, joint training activities, use of experimental facilities, joint dissemination activities, and joint exploitation activities for new technologies. *Milestones: Month 22 for initial drafting of joint action plan. Month 33 for the implementation of transnational research activity. Month 36 for formulation of self-evaluation. Month 42 for completion of Implementation and Evaluation reports.*
5. To establish and ensure the effective operation of a dissemination and co-ordination office, and a smooth framework for the Network Steering Committee and the Work Programme and Task Management. *Milestones: Month 1 for opening of dissemination and coordination office.*

2.1 Complexity – An emerging science and technology

A simple search on the internet shows that “complexity, complex systems, complexity research or complexity science” result in millions of hits in line with a search on nanoscience or

nanotechnology. It is estimated that thousands of researchers are operating within this field with the EU.

The globalisation and the ongoing transfer of information in an increasingly knowledge based society has resulted in a great demand for:

- a) More effective analysis, decision support and process control tools for the production industry (food, materials, chemicals and drugs etc.),
- b) The development of new mathematical models to analyse complex organisms in the bio-sector and to analyse the dynamics of wind and water systems, and
- c) The development of new signal and image processing techniques, including tools for use in modern information and communication technologies.

The understanding of such complex systems and the development of new ideas, models and methods to improve and control the processes based on this knowledge is central for survival in the highly competitive global environment of the world today.

New complex methodologies, strategies and approaches are increasingly required for future social, economical and financial analyses. Processes involving many interacting components (companies, enterprises, organizations, social units, or simply people!) are generally complex, and new fields have emerged to undertake research of such complex processes. One such field e.g. is econophysics, using physical principles to deal with the complex dynamics of economy and the financial markets, based on the ample evidence available for non-standard distributions of fluctuations in prices and exchange rates. The understanding of complexity in economics through econophysics has provided the field with new technical indicators, with new insight in risk and volatility, and new measures for putting together a portfolio of stocks.

The basic research and development behind the above mentioned methods and tools has grown within the last decades to a science called Complexity, indicating the acceptance of a world that does not consist of simple linear relations but rather shows features that originate entirely from inherent nonlinearities, a world that evolves and adapts dynamically, often driven far away from simple equilibrium. A rapidly increasing number of new measuring devices and software technologies is being developed by innovative enterprises that have opened new markets, introducing the novel and exciting methods derived from complexity research.

Many complex systems behave in a fundamentally deterministic way, but their long time evolution may not be predictable from the initial conditions. Understanding therefore the concept of deterministic chaos and the complex dynamics due to nonlinearities has been central in the scientific development of the last 3 decades. Moreover, driven out of equilibrium, complex systems generate fractal structures and scale invariant distributions, leading to the discovery of anomalous transport properties and new types of phase transitions with a potentially great impact for future technologies and new material designs. The observations have given rise to new concepts such as multifractality and self-organised criticality, while entirely new non-equilibrium statistical methods have been introduced to understand the variety of complex phenomena encountered.

Complexity research has its origins in the “natural sciences” of Mathematics, Physics, Chemistry, Biology and Computer Science, but has spread by now in the realm of Economics and other Social Sciences. It is holistic and a multi-disciplinary field covering nonlinear dynamical systems, systems out of equilibrium, control theory, adaptive and self-organising systems and complex dynamical networks of interacting units. The systems investigated differ widely in character, size and time scale: From the complex process of a power station to the spreading behaviour of a micro-organism, from the fast reactions in a chemical reactor to the complex evolution of our geography and universe and from fluctuations in the sea level to fluctuations in prices and exchange rates. That this remarkable variety of phenomena can exhibit surprisingly similar features makes it plausible that

mathematical analysis and modelization can be used to improve our understanding of complex systems.

Complexity is ubiquitous, producing some of the most intriguing patterns and forms. Scientific research has traditionally examined simplified systems composed of a small number of elements in an attempt to establish principles on which they operate and, where possible, formulate a mathematical model reproducing the behaviour of the original system. In many cases, these systems are assumed to be close to an equilibrium situation and hence perturbation theory can be invoked to study their deviation from the unperturbed state. However, there is an overwhelming number of problems involving many interacting components far from equilibrium, which show remarkable properties of self - organization. In such cases, coherent structures emerge from the system as a whole, which cannot be explained by the behaviour of the single elements. Such systems, consisting of a large number of interactive elements which may organised on many scales, are known as complex systems.

The intriguing thing about complex systems is that they include examples from almost all aspects of the real and conceptual world, where interactions are associated with exchange of energy or information. Among such examples is the metabolic and signalling network in a living cell of a biological organism, growth of bacterial colonies, spread of diseases, the evolution of life encountered in ecosystems (including processes like natural selection), earthquakes, forest fires, and the evolution in financial markets and social networks. Certain chemical reactions and the transport of light, sound, fluids, and even cars and of course people generate complex phenomena like turbulence, emerging traffic jams and crowd behaviour.

In parallel to the development of a theoretical framework and the numerous experimental discoveries of complex phenomena, a wide variety of numerical techniques and mathematical models have been developed. This and the advent of powerful computers have enabled researchers to study in greater detail the emergence and development of complex systems and phenomena. ' Computers with massive data-handling capacity are constantly being updated to compute ocean and weather conditions. New and better neural network algorithms are being built and refined to imitate the learning process of our brains and adaptive robots based on artificial intelligence are constructed to solve complex problems or control complex systems. Bioinformatics programmes are developed to analyse genomic information from DNA chips in order to reveal the genetic secrets behind our cellular functions.

Complexity is one of the fastest growing research areas in the world. There is already an explosive growth in the number of scientific articles and new journals focusing on Complexity, and an equally rapidly increasing number of small and medium sized enterprises developing new tools originating from the results of complexity research, the field of complexity research. A simple search on the internet shows that "complexity, complex systems, complexity research or complexity science" result in millions of hits in line with a search on nanoscience or nanotechnology.

Especially in the U.S.A., complexity research and research training has created one of the most promising growth bases for emerging technologies capable of dealing with the increasingly complex tasks of a knowledge-based society. A strong strategic effort has been formulated and implemented in U.S.A. in order to benefit from the relatively low-cost and value - making processes taking place in the field of complexity today. As a result, many of the best young researchers as well as experienced scientists of Europe are attracted to U.S. universities and enterprises to carry out complexity research and to develop new businesses in U.S. However, Europe can no longer afford to lose ground, and effective steps must be taken immediately to improve the European situation. Coordinated complexity research and research training efforts and the development of novel and more effective solutions to the large class of complex systems and

processes characterising the technological frontline is not only necessary but also crucial in order to stay competitive in a highly globalised world.

2.2 Complex coordination

To repair the very threatening situation of being left behind in an expanding market, the Complexity-NET cooperation intends to improve the stimulation of complexity research and innovation through a dedicated strategic plan where coordination of funding for complexity research and research training in Europe is a central element in order to succeed. To this end European Research Ministers have already acknowledged the importance of the opening of national programmes as a key step forward in the construction of the European Research Area. Also, focus has been brought to the subject of complexity through CREST which has supported the ERA-NET initiative by identifying complexity as one of the top five priority areas.

The ERA-NET on complexity, called the Complexity-NET, was initiated by 9 European Research Councils and Ministries (Belgium, Denmark, Estonia, Greece, Ireland, The Netherlands, Portugal, Spain, and U.K.) in the form of a Specific Support Action, on August 1, 2004. Through an analysis of national research funding activities and funding procedures, it has been possible to define and specify a Coordinated Action on complexity, which can set the scene for a strategic funding of complexity research and research training on the European level through a joint action plan, which includes the opening of national programmes and the possibility of joint research or research training programmes. One of the steps in this action plan towards a joint European Complexity Programme is the ongoing recruitment of new partners, including new member and candidate countries.

The vision of the Complexity-NET is the creation of strategic activities that can advance the common use of experimental facilities, enhance European research training and mobility and scientific communication, (workshops, summer schools, etc.), promote public dialogue and catalyse innovation throughout Europe. In EU, where the population percentage of researchers is 10 % smaller than the U.S. percentage and the percentage of highly cited articles are about half of that of the U.S., coordination seems to be highly needed. A comparison between EU and U.S. funding shows that since 1995 public R&D investments have on the average increased four times faster in U.S., and private R&D investments have in average increased twice as fast in U.S. This further underlines the strong urgency for coordinating European funding efforts.

2.3 Related European activities

Within the last ten years, the science of complexity has become one of the newly emerging technologies at both the national and the European level. Some EU member states have begun specific national research programmes or included complexity in more general initiatives. One of the initiatives has been EXYSTENCE, the complex systems network of excellence that was funded by the FP6 1ST Programme on Future and Emerging Technologies. Another initiative is the FP6 new and emerging science and technology (NEST) initiative on 'Tackling Complexity in Science'. Yet another is the COST action "Risk", which brings together scientists applying complexity methods to quantitatively analyse risks in, e.g., financial markets. The Complexity-NET consortium is in contact with all these initiatives, which all provide very helpful steps in the process of coordinating national research and research-training programmes involving complexity researchers.

The European Science Foundation (ESF) has gained valuable experience from their EUROCORES initiative and other ERA-NET initiatives. The Complexity-NET has close contacts to ESF and direct contact to the ESF Governing Council.

The European Physical Society has formed a Division on Statistical and Nonlinear Physics (EPS-SNP) with high focus on complexity, helping with coordination and communication on the more practical level.

Both ESF and EPS-SNP are key organisers of European complexity-related conferences. The possibility to have workshops combined with major scientific events in complexity organised by ESF or EPS-SNP allows a broad dissemination of the Complexity-NET idea and added value in terms of a valuable dialogue with the complexity-science community.

The dialogue with a number of European committees provides important contributions to the development of the Complexity-NET. Among these committees are EUROHORCs (European Heads of Research Councils) and EUPRO (European Union of Physics Research Organisations).

3. Participants list

List of Participants

Partic. Role*	Partic. No.	Participant name	Participant short name	Country	Date enter project**	Date exit project**
CO	1	Engineering and Physical Sciences Research Council	EPSRC	U.K.	Month 1	Month 42
CR	2	Fonds National de la Recherche Scientifique	FNRS	Belgium	Month 1	Month 42
CR	5	Ministry of Science, Technology and Innovation	MSTI	Denmark	Month 1	Month 42
CR	4	Eesti Teaduste Akadeemia	EAS	Estonia	Month 1	Month 42
CR	5	General Secretariat for Research and Technology	GSRT	Greece	Month 1	Month 42
CR	6	National Office for Research and Technology Development	NKTH	Hungary	Month 1	Month 42
CR	7	Irish Research Council for Science, Engineering and Technology	IRCSET	Ireland	Month 1	Month 42
CR	8	Consiglio Nazionale delle Ricerche	CNR	Italy	Month 1	Month 42
CR	9	Nederlandse Organisatie voor Wetenschappelijk Onderzoek	NWO	Netherlands	Month 1	Month 42
CR	10	Fundacao para Ciencia e Tecnologia	FCT	Portugal	Month 1	Month 42
CR	11	Ministerio de Education y Ciencia	MEC	Spain	Month 1	Month 42

*CO = Coordinator
CR = Contractor

The Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS) from France and the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) from Germany will also be joining the network in an Observer status.