負触媒を持つ抽象化学系の計算万能性

1M－5

米津光浩　中西正和
慶應義塾大学 理工学研究科 計算機科学科

1. はじめに

化学反応にヒントを得て計算モデルを構築しようという試みはいくつかある。プロダクションシステムの自己組織化を化学反応に見立てた金田の化学的キャスティングモデル (CCM)[1]、並行計算の理論的記述に化学反応メタファを生かした Berry、Boudol の化学抽象機械 CHAM(CHemical Abstract Machine)[2] などであり、またペトリネットとの対応も古くから指摘されている [3]。我々は特に創発計算を目指した化学反応のモデル化を試みてきている [4][5]。

本稿では、最も基本的な抽象化学系と、その拡張である負触媒を持つ系について述べる。抽象化学系では特にセルオートマトンが記述可能であることを指摘し、負触媒を持つ系では特に抑止アークつきペトリネットとの等価性と計算万能性を指摘する。

2. 抽象化学系 $\langle M, R, S\rangle$

抽象化学系は化学反応をモデル化した計算モデルであり、基本系はペトリネットと等価な能力を持つ。ペトリネットはチューリング等価でないから、抽象化学系は計算万能ではない。抽象化学系に正触媒を持たせても、その能力は依然ペトリネット等価でしかない。

2.1 定義

M … 分子の集合

R … 反応式 ($\langle S_1, S_2\rangle$、S_1, S_2は M上の多重集合) の集合 (S_1は反応式の左辺、S_2は反応式の右辺に相当する)

S … 初期分子の (多重) 集合

例

$M \cdots \{B, C, D, E\}$

$R \cdots \{\langle\{B, C\}, \{D\}\rangle, \langle\{D\}, \{C, E\}\rangle\}$

$S \cdots \{B, C\}$

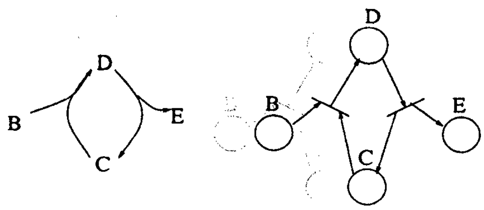

図 1: $R \cdots \{\langle\{B, C\}, \{D\}\rangle, \langle\{D\}, \{C, E\}\rangle\}$ の反応の様子 (左) とペトリネットによる表現 (右)

2.2 基本系の遷移システム意味論

基本系 $\langle M, R, S\rangle$ の意味を S を初期状態とする多重集合遷移システム (multiset transition system)(M, R) で与える [6]。

多重集合遷移システム (M, R) はペトリネットに正確に対応する [3](図 1)。M がプレースの集合、R がトランジションの集合である。

2.3 抽象化学系によるセルオートマトンの記述

抽象化学系によって、セルオートマトンを記述することが出来る[1]。ここでは 1 次元 3 近傍のモデルを記述する。局所遷移関数 $f = \{\langle 000, ?\rangle, \langle 001, ?\rangle, \cdots\}$ とし、セル空間のサイズを n とする。各セルに、各セル毎に異なる 6 種類の分子を割り当て、以下のように記述できる。

$$M = \bigcup_{i=1}^{n}\{M_0^i, M_1^i, C_{00}^i, C_{01}^i, C_{10}^i, C_{11}^i\}$$

$$R = \{\langle\{M_x^{2i}, M_y^{2i+1}\}, \{C_{xy}^{2i}, C_{yx}^{2i+1}\}\rangle | x, y \in \{0, 1\}\} \cup$$
$$\{\langle\{C_{xy}^{2i}, C_{zw}^{2i-1}\}, \{M_{f(zxy)}^{2i}, M_{f(wzx)}^{2i-1}\}\rangle | x, y, z, w \in \{0, 1\}\}$$

[1]ただし、完全な大域同期は取ることが出来ない [7]。

Computational universality of the abstract chemical system with negative catalysts

Mitsuhiro YONEZU
Masakazu NAKANISHI
Department of Computer Science, Graduate School of Science and Technology, Keio University 3-14-1 Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama, Kanagawa 223, Japan

3. 負触媒を持つ抽象化学系 $\langle M, R', S\rangle$

反応に負触媒が関わるように抽象化学系を拡張する。負触媒になる分子が一つでも存在する時はその反応は発火できないことにする。

3.1 定義

M … 分子の集合

R' … 反応式 ($\langle S_1, S_2, S_3\rangle$、$S_1, S_2$は M上の多重集合、S_3は M上の集合) の集合 (S_1は反応式の左辺、S_2は反応式の右辺、S_3はその反応の負触媒に相当する)

S … 初期分子の (多重) 集合

例

$$M \cdots \{B, C, D, E\}$$

$$R' \cdots \{\langle\{B, C\}, \{D\}, \{E\}\rangle\}$$

$$S \cdots \{B, C\}$$

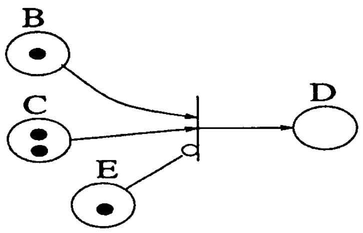

図 2: 反応式 $R' \cdots \{\langle\{B, C\}, \{D\}, \{E\}\rangle\}$ の抑止アークつきペトリネット表現 (B, C が揃っていても Eに石がありトランジションノードの発火を抑制している)

3.2 計算万能性

定理 負触媒を持つ抽象化学系は計算万能 (チューリング等価) である

負触媒を持つ抽象化学系は抑止アークつきペトリネットに正確に対応する。抑止アークつきペトリネットは計算万能であるから [3]、負触媒を持つ抽象化学系は計算万能である。

4. 結論および今後の課題

抽象化学系を定義し、その意味論を与えた。また、セルオートマトンが抽象化学系で記述できることを示した。抽象化学系に負触媒を導入した系を定義し、抑止アークつきペトリネットとの等価性、計算万能性を示した。負触媒というごく自然な拡張で計算万能性が得られた。

CHAM における膜規則のようなものを導入した系を定義し、その振舞いを調べていくことが今後の課題である。

A 多重集合に関する諸定義

多重集合の定義

多重集合 S は可算集合 D_Sと写像$\phi_S : D_S \to \mathrm{N} \cup \{\omega\}$ によって定義される。ここで$\mathrm{N} = \{1, 2, 3, \ldots\}$は正整数の集合。習慣により、$x \notin D_S \Rightarrow \phi_S(x) = 0$ と定義する。

$D_S \subseteq D$ のとき、S は D **上の多重集合** (*multiset over* D) という。

多重集合遷移システム (多重集合書換え系)

を対 (D, T) で定義する。ここで、D は (通常の) 集合、T は D 上の多重集合 S_1, S_2 の対によって与えられる**基礎遷移** (basic transition) の集合。

より正確には $\to$ は以下の公理と規則により定義される。

S_1, S_2, S が D 上の多重集合である時：

1. $(S_1, S_2) \in T$ ならば $S_1 \to S_2$
2. $S_1 \to S_2$ ならば $S_1 \cup S \to S_2 \cup S$

参考文献

[1] 金田泰. 創発的計算のためのモデル CCM による動的なグラフ彩色. 人工知能学会並列人工知能研究会 SIG-PPAI-9401, 1994.

[2] G. Berry and G. Boudol. The chemical abstract machine. *Theoretical Computer Science*, Vol. 96, pp. 217–248, 1992.

[3] J. L. Peterson. *Petri net theory and the modeling of systems.* Prentice-Hall, 1981. (市川惇信・小林重信訳、『ペトリネット入門』、共立出版、1984).

[4] 米津光浩, 中西正和. 多段創発計算モデルの提案. 第 51 回 情報処理学会 全国大会, 1995.

[5] 米津光浩, 中西正和. 自己組織化する計算の理論について. 第 37 回プログラミングシンポジウム報告書. 情報処理学会, 1 1996.

[6] 米津光浩, 中西正和. 創発計算の意味論について. MACC'95(パネル・セッション), 12 1995.

[7] 吉田威典, 米津光浩, 中西正和. 可逆 CA 空間上への BBM の埋め込み. 第 52 回 情報処理学会 全国大会, 3 1996.