

令和 5 年 6 月 12 日現在

機関番号：17102

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2022

課題番号：16K16008

研究課題名(和文) 化学反応オートマトンにおける決定性計算の研究

研究課題名(英文) Deterministic computation in chemical reaction automata

研究代表者

大久保 文哉 (Okubo, Fumiya)

九州大学・システム情報科学研究所・准教授

研究者番号：40608824

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,900,000円

研究成果の概要(和文)：多重集合書き換え系において、入力記号列に対する計算が一意に定まるような決定性モデルの性質を明らかにするため、逐次的に反応を適用するような化学反応オートマトンにおける決定性の定義を行った。その基本的な性質として、決定性化学反応オートマトンの受理する言語はよく知られた形式言語である文脈自由言語とは、お互いに他を含まない比較不可能な関係であることを明らかにした。また、望ましい挙動を実現する決定性化学反応オートマトンを合成するために、化学反応オートマトンの合成・分解を定義し、それらができるための条件を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

決定性計算はチューリング機械などの従来の計算モデルにおいても重要な概念であるが、多重集合書き換え系の決定性計算は従来のモデルとは異なる定義方法が必要となり、また得られた結果の傾向も大きく異なることから、より多重集合書き換え系の研究の重要性を示している。また合成・分解に関する条件を示したことは、今後の化学反応系の合成のための理論として重要な役割を果たすと考えられる。

研究成果の概要(英文)：In order to clarify the properties of deterministic models in multiset rewriting systems in which the computation for an input symbolic sequence is uniquely determined, we defined determinism for chemical reaction automata in which reactions are applied sequentially. As a fundamental property, we found that the accepted language of deterministic chemical reaction automata is an incomparable relation with a well-known formal language, the context-free language. In order to synthesize deterministic chemical reaction automata that achieve the desired behavior, we defined the synthesis and decomposition of chemical reaction automata, and clarified the conditions under which they can be realized.

研究分野：情報学基礎理論

キーワード：決定性計算 多重集合書き換え系 化学反応オートマトン

1. 研究開始当初の背景

近年、計算理論の分野において、化学系・生物系の解析やシミュレーションへの応用を目的とした計算モデルの研究が盛んに行われている。特に反応系に関わる分子が少数の場合、反応系の動作機構をアルゴリズム論的に理解できるという点から、分子を記号で表した多重集合による計算モデルが適切であると考えられている。実際、Petri Net、Vector Addition System、P System、Chemical Reaction System といった多くの多重集合書き換え系が提案されており、反応系の振る舞いの解析やシミュレーションに用いられている。

これらの多重集合書き換え系の研究では、ある集合からある集合に到達するような多重集合のクラスはどのようなものかなどといった、到達可能な多重集合に関する問題を取り扱う研究が主に行われており、どのようにしてその多重集合に到達したか、つまり、目的の多重集合に到達するまでに起きた反応の系列の性質やその設計方法に関する議論はあまり行われてこなかった。

そこで申請者は多重集合書き換え系に言語受理機能を付与した化学反応オートマトン (Chemical Reaction Automata: 以下 CRA と略す) を提案し、オートマトン・形式言語理論を援用して、反応の系列の性質について解析を行ってきた。CRA は入力記号列を外部から与えることによって、その入力記号列に対応した反応を起こすような計算モデルである。申請者は CRA で計算される言語のクラスは形式言語の研究分野でよく知られている文脈自由言語のクラスと互いに比較不能であることを示している。

しかし、研究開始当初まで CRA の研究は非決定性の計算についてのみ行われてきた。ここで非決定性計算とは、入力文字列の受理判定の際に、数ある計算の可能性の中で1つでも正しい計算が存在すれば、受理とみなすことをいう。一方、決定性計算とは、入力文字列に対する計算が一意に定まり、それが正しい計算であれば受理とみなすことをいう。一般に、非決定性計算は決定性計算よりも表現能力は高いが、現実の計算機のモデルとしては計算が一意に定まらないことは好ましくない。また、CRA のような化学反応のモデルとしての非決定性を考えると、定義にあるように数ある計算の可能性を全てチェックし受理の判定を行うことは、現実的ではない。このような多重集合書き換え系の決定性計算について探求することは計算理論としての立場から、また化学反応の計算モデルとしての立場から、非常に重要な課題である。

2. 研究の目的

本研究では、これまでの CRA に関する研究をもとに、多重集合書き換え系の決定性計算における反応系列の性質について研究を行う。ただし、CRA における決定性計算を考える際、従来の計算理論で用いられるチューリング機械やプッシュダウンオートマトン (PDA) の場合とは異なる議論が必要である。例えば、PDA は現在の状態と記憶装置のスタックの一番上の要素、そして入力から次の状態への遷移関数が定まる。この遷移関数の行き先を一意に制限するだけで、決定性 PDA が実現できる。一方、CRA では反応の左辺に対して右辺を一意的に制限するだけでは、システム全体として決定性の CRA は実現できない。このように、多重集合書き換え系における決定性計算の概念は、これまで研究されてきた計算モデルとは大きく異なるため、計算理論の観点から、より詳細にその性質を明らかにする価値があると考えられる。このような観点から、本研究では以下の3点に関する研究を行う：

1. 計算モデルの開発：CRA をもとに、多重集合書き換え系の決定性モデルを開発する。この際、(1) 反応系列の言語を受理するモデルであること、(2) 基地のテープやスタックを記憶装置とした計算モデルの研究との比較が容易であること、(3) 実際の化学反応系の設計手法の開発への貢献やシミュレーションへの応用が実現できるようなモデルであること、の3つを開発方針として、計算モデルの設計を行う。
2. 計算モデルの性質の解析：1 で設計されたモデルの計算理論的な性質の解析を行う。特に決定性計算を行うための条件や、決定性計算によって受理される言語クラスの性質の解析、化学反応系の設計にかかわる種々のアルゴリズムの開発を行う。
3. 計算量クラスの定義と解析：1 で設計されたモデルにおける時間計算量や領域計算量との定義と、それぞれの計算量クラスによって定義された新しい計算量クラスとの比較を行う。特に既存の計算クラス (例えば P や NP) と、多重集合書き換え系によって定義された新しい計算量クラスとの比較を行う。

これらの研究によって、多重集合書き換え系における計算理論・計算量理論の確立を目指す。

3. 研究の方法

本研究では、これまで研究を行ってきた化学反応オートマトンをもとに、多重集合書き換え系に対して、決定性計算と関連する計算の概念について、定義をして導入する。これらを導入した多重集合書き換え系のいくつかのバリエーションについて、その計算論的な性質の探求を行う。さ

らに化学反応系の設計に関連した種々補アルゴリズムの開発や解析を行う。また、定義した種々の計算モデルについて、それぞれの計算量クラスを定義し、その性質の解析を行う。それぞれについて下で内容を示す。

1. モデルの開発：化学反応オートマトン(CRA)をもとに、多重集合書き換え系の計算モデルの開発を行う。その際、細かな定義の違いがモデルの性質を変えることに注意して、どのような定義が計算理論の観点や化学反応系の設計の観点から妥当性の調査を行う。具体的には以下の点を、モデル開発の際の調査対象とする。
 - (ア) 決定性計算と非決定性計算：決定性計算と非決定性計算については、研究目的で述べたように導入を行う。
 - (イ) 受理方法：最終状態に到達する、システムが停止する、など受理方法を変化させたとき、どのような違いが発生するかについても考慮する。
 - (ウ) 並列性と逐次性：反応を逐次的に適用するモデルと、いくつかの反応を同時に適用するようなモデルについても考慮する。
 - (エ) 可逆性：計算理論における可逆性は、一般的には「ある計算状況へ1ステップで到達することのできる計算状況は唯一である」という概念であり、逆決定性とも捉えることができる。可逆性は決定性計算と関係が深い概念であるため、CRA において導入を行う。
 - (オ) 空入力：CRA は入力として記号を受け取って動作を行うが、この入力として空記号列を受け取った際の動作について考慮を行う。
2. 計算能力の解明：1 で開発したモデルについて、それぞれの能力を計算理論の立場から明らかにする。モデルの定義を様々調整しながら、より適したモデルの特徴づけを目指す。
3. 基本的性質の解明：下記の観点から、モデルの形式言語理論的な性質を解明し、既存のモデルとの違いを明らかにする。
 - (ア) 決定問題：与えられた多重集合書き換え系が決定性計算を行うかの判定問題などの可解性などを明らかにする。
 - (イ) 閉包性：提案したモデルが形式言語理論における演算について綴じているかどうかを明らかにする。これらの結果は化学反応系の合成方法の開発に援用できると考えられる。
4. 多重集合書き換え系における種々のアルゴリズムの開発：3 において検討を行った決定問題や閉包性の結果をもとに、望ましい挙動を実現する反応系の自動合成のためのアルゴリズムを開発し、またその性能や有用性を検証する。

このために、まずは多重集合書き換え系である CRA をもとに、出力機能を付与した記号列変換器を定義する。一方の変換器の出力を、もう一方の変換器の入力とすることで、多重集合書き換え系における合成を定義する。この定義をもとに、ある多重集合書き換え系が、より小さい2つの多重集合書き換え系に分解することができる条件について検討する。それ以上分解できないような多重集合書き換え系を、どのように組み合わせれば、望みのモデルを合成することができるかどうかについても検討を行う。

4. 研究成果

多重集合書き換え系の決定性モデルの性質を明らかにするため、まずは逐次的に反応を適用するような CRA における決定性の定義を行なった。このモデルについて、空の入力を許す場合(-DCRASq)と許さない場合(DCRASq)の計算能力を考え、様々な言語クラスとの比較を行った。具体的には、(i) -DCRASq・DCRASqとも非決定性CRASqの計算能力より真に劣る、(ii) -DCRASq・DCRASqとも文脈自由言語族とは比較不可能であることなどを示した。-DCRASqがDCRASqによって模倣できるという意外な結果についても示した。

決定性と関連の深い可逆性CRAについても定義を行なった。DCRAの場合と同様に、空の入力を許す場合(-RCRASq)と許さない場合(RCRASq)を定義し計算能力を考えた。結果として、(iii) -RCRASq・RCRASqとも非決定性CRASqの計算能力より真に劣る、(iv) DCRASqとRCRASqは比較不可能であることなどを示した。

また、定義を行った決定性CRAと可逆性CRAについて、さらなる考察を行った。決定性CRAについて、空の入力を許す場合(-DCRASq)と許さない場合(DCRASq)の計算クラスを、可逆性CRAについて、空の入力を許す場合(-RCRASq)と許さない場合(RCRASq)の計算クラスを取り上げた。さらに、決定性かつ可逆性CRAについても、空の入力を許す場合(-DRCRASq)と許さない場合(DRCRASq)の計算クラスを考察した。特にDRCRASqについては、Angluin(1982)によって定義されているZero-Reversible Regular Languages (revREG)のクラスを包括していることを示した。revREGは正例からオートマトンの遷移規則を極限学習できるクラスとして知られており、DRCRASqにおける極限学習を考える際の足がかりにすることができると期待される。また、DRCRASqには一般の正則言語ではない言語が含まれていることも示した。

さらに、望ましい挙動の実現するCRAの合成・分解を実現するためのアルゴリズムについて考察を行った。従来の計算理論において、入力とそれに対応する出力を規定した“変換器”に関する多くの研究結果の蓄積がある。そこでの結果とCRAとの比較や応用を目指すため、まず、CRA

に出力機能を付加した化学反応変換器(CRT: Chemical Reaction Transducer)を定義した。CRTを2つのCRTに分解する手法の1つとして"Serial decomposition"を定義した。ここでは、片方のCRTの出力をもう一方の入力として受け取ることで、2つのCRTを接続し、元のCRTの振る舞いを1ステップごとに模倣することを要求している。また、CRTがSerial decompositionできるための十分条件を示した。また、1ステップごとの模倣は要求せず、入出力が元のCRTと一致するような分解手法をCRTの"Factorization"として定義した。ここでは、任意のCRTがpartially balanced languageという単純な構造を含むような変換器にFactorizationできることを示している。

既存の計算モデルとして重要である文脈自由文法CFG(また、等価なモデルであるPDA)と化学反応系の関係の考察も行った。これまでの研究から、単純に分子数を考慮したモデルでCFGを模倣することは難しいことが示唆されていたため、分子を文字列という構造を持った対象としたときのモデルについて考えた。特に、文字列における挿入演算と、他の言語とのL-reductionという演算を通して、CFGを特徴付けられることを示した。

化学反応オートマトン(CRA)における反応系列の性質を、既存の形式言語理論における結果と比較するため、CRAと等価なモデルであるChemical Reaction Regular Grammar(CRRG)を提案し、その解析を行なった。また、CRRGにおいて形式文法理論における制限付き書き換えモデルと同様の拡張を行い、文脈自由文法における制限付き書き換えモデルとの違いを明らかにした。さらに、化学反応系における並列性に関して条件を付与して計算を行う新しい方法であるmaximal-sequential mannerを提案し、この方法を用いたCRRGはTuring完全であることを示した。また、単純に分子数を考慮したモデルでCFGを模倣することは難しいことが示唆されていたことから、前年度より研究対象としている分子を文字列という構造を持った対象としたときのモデルについて考察をさらに進めている。特に、文字列における長さ1の挿入演算と、有限言語とのL-reductionという演算を通して、CFGを特徴付けられることを示した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 8件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Okubo Fumiya, Fujioka Kaoru, Yokomori Takashi	4. 巻 -
2. 論文標題 Chemical Reaction Regular Grammars	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 New Generation Computing	6. 最初と最後の頁 1-22
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s00354-022-00160-8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Fujioka Kaoru, Okubo Fumiya, Yokomori Takashi	4. 巻 -
2. 論文標題 L-reduction computation revisited	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Acta Informatica	6. 最初と最後の頁 1-18
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s00236-022-00418-0	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Yokomori Takashi, Okubo Fumiya	4. 巻 3
2. 論文標題 Theory of reaction automata: a survey	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Membrane Computing	6. 最初と最後の頁 63 ~ 85
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s41965-021-00070-6	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Okubo Fumiya, Yokomori Takashi	4. 巻 862
2. 論文標題 On the computing powers of L-reductions of insertion languages	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Theoretical Computer Science	6. 最初と最後の頁 224 ~ 235
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.tcs.2020.11.029	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Okubo Fumiya, Yokomori Takashi	4. 巻 印刷中
2. 論文標題 Decomposition and factorization of chemical reaction transducers	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Theoretical Computer Science	6. 最初と最後の頁 印刷中
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.tcs.2019.01.032	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yokomori Takashi, Okubo Fumiya	4. 巻 10936
2. 論文標題 Computing with Multisets: A Survey on Reaction Automata Theory	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Lecture Notes in Computer Science	6. 最初と最後の頁 421 ~ 431
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-319-94418-0_42	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Fumiya Okubo, Takashi Yokomori	4. 巻 30
2. 論文標題 The Computing Power of Determinism and Reversibility in Chemical Reaction Automata	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Reversibility and Universality	6. 最初と最後の頁 279-298
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-319-73216-9_13	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Fumiya Okubo, Takashi Yokomori	4. 巻 15(2)
2. 論文標題 The Computational Capability of Chemical Reaction Automata	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Natural Computing	6. 最初と最後の頁 215-224
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11047-015-9504-7	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計2件（うち招待講演 2件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名 大久保 文哉
2. 発表標題 A Theory of Chemical Reaction Computing
3. 学会等名 人工知能学会合同研究会2019（第33回ナチュラルコンピューティング研究会）（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Fumiya Okubo, Takashi Yokomori
2. 発表標題 Reaction Automata: Language Accepting Models Motivated by Chemical Reactions
3. 学会等名 The 1st International Workshop on Reaction Systems（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 （ローマ字氏名） （研究者番号）	所属研究機関・部局・職 （機関番号）	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------