

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 3 年 5 月 21 日現在

機関番号：32689

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2020

課題番号：17K00021

研究課題名(和文) 反応オートマタ理論に基づく化学反応計算系の基礎的研究

研究課題名(英文) Chemical Reaction Computation based on Reaction Automata Theory

研究代表者

横森 貴 (Yokomori, Takashi)

早稲田大学・教育・総合科学学術院・教授

研究者番号：60139722

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 1,900,000円

研究成果の概要(和文)：化学反応における情報処理メカニズムを理解するために、多重集合ベースの計算モデル「化学反応オートマトン(Cheical Reaction Automaton:CRA)」を提案し、その計算能力やアルゴリズム論的な性質を考察した。

【研究成果の概要】(i) 任意のCRAが受理する言語Lは、ある準同型写像 h と2-局所的言語Rを用いて、 $L=h(B_n R)$ と表現可能である。() 決定性CRAと可逆的CRAの計算能力の解析結果を得た。() CR Transducerを考察し、CRTが分解可能であるための十分条件を示した。() 反応オートマトン理論に関する招待講演や国際誌でのサーベイ論文の発表を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の目的は、分子レベルでの化学反応系の振る舞いを解析するために、多重集合をベースとする構成的な離散的計算モデルを構築し、そこで得られる計算論的な知見をもとに、最終的に化学反応に基づく反応プログラミング技法を確立する事である。化学反応系のシミュレーションは実験系による実装前の予測データを得る手段として重要であるが、特に少数分子反応系の場合、状態空間を離散的な多重集合とみなす計算モデルが有効である。この離散的アプローチでは少数分子系の振る舞いに関する構成的な解析が可能となり、反応系の動作機構がアルゴリズムとして理解可能となる。また、化学反応がプログラミング可能となる等、有益な知見が得られる。

研究成果の概要(英文)：In order to understand the information processing mechanism of chemical reactions, we proposed the notion of Chemical Reaction Automata(CRAs) that is a computing model based on multiset memory, and investigated the computational capabilities and algorithmic properties of various classes of CRAs. Primary results include that (i) Any language accepted by CRA can be expressed as $L=h(B_n R)$, for some regular set R and the balanced language B_n . () The notions of determinism and reversibility of CRAs are introduced and their computational powers were analyzed. () CR Transducers(CRTs) were newly proposed and investigated, and a sufficient condition for CRTs to be decomposable was proved. () In order to disseminate the theory of reaction automata, we delivered invited lectures at international conferences and published a survey paper in an international journal.

研究分野：計算機科学

キーワード：化学反応系 受理計算モデル 言語の表現定理 オートマトン分解

1 . 研究開始当初の背景

(1) 近年 , “自然計算 (ナチュラルコンピューティング) ” とよばれる新しい計算パラダイムを探究する研究分野が注目されている . この学際領域は計算機科学のみならず生命医科学など広範な学際分野への応用が期待され , その重要性が増している .

(2) 自然計算における研究テーマは , (i) 自然から学ぶ原理に基づく新規な計算メカニズムの研究とその実現という「自然から情報処理への応用」のみならず , () 計算モデルの設計や計算機実験に基づく自然現象の理解という「情報処理から自然への応用」という双方向性を有する . さらには , () 分子レベルの情報処理デバイス群の開発を始めとするナノテクノロジーへの応用などの側面を持ち , 自然科学全般を包括する広範な研究分野へと発展するものと期待されている .

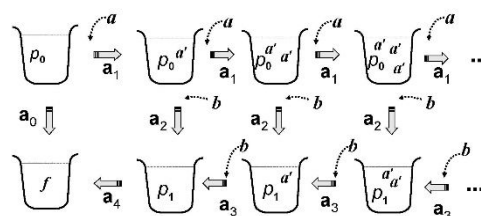
2 . 研究の目的

(1) 本研究における主な目的は , 分子レベルでの化学反応系の振る舞いを解析するために , 多重集合をベースとする構成的な離散的計算モデルを構築し , そこで見られる計算論的な知見をもとに , 最終的に化学反応に基づく反応プログラミング技法を確立する事である .

(2) . 我々が提案した化学反応オートマトン (CRA) モデルは DNA など生体ナノ高分子による実装の可能性が In Vitro 実験において示されており , 現実的な側面において重要である .

3 . 研究の方法

(1) 少分子化学反応系に対する離散モデルである反応オートマトンを , 分子構造情報までを考慮したオートマトンモデルに拡張し , その情報処理能力とモデリング能力を解析する . さらに , 反応オートマトンの変形モデルとして反応変換器を考察する .



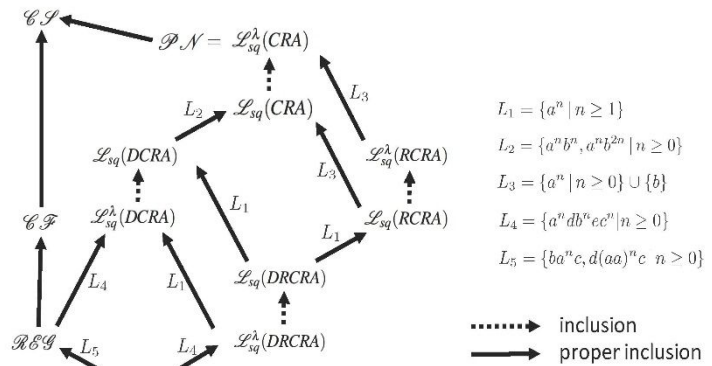
(2) 多細胞系における生体化学反応系のも

つ情報処理能力や機能発現の機序を計算論的 (アルゴリズム的) に解明するために , 複数の反応オートマタからなるネットワークモデルを考察する . これらの知見を基に化学反応プログラミングへの発展可能性を検討する .

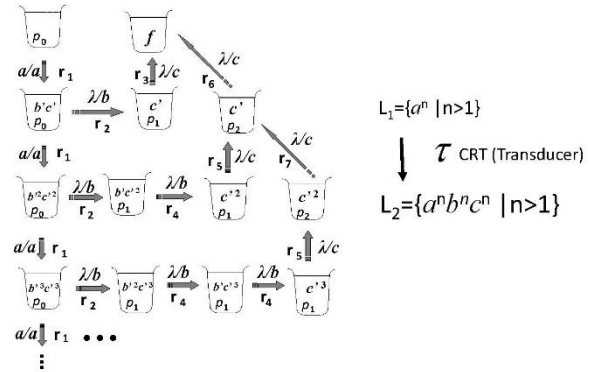
4 . 研究成果

(1) 我々の提案した計算モデル CRA が受理する言語族 CRL に対して , 以下のような代数的な表現定理が成り立つ事を示した . 即ち , 『 任意の CRA が受理する言語 L は , ある準同型写像 h と 2-局所的言語 R を用いて , $L=h(B_n \ R)$ と表現可能である . ここで , B_n は “部分 Balanced 言語” と呼ばれる固定した言語である 』 . これにより , 化学反応による計算能力に対する代数的な特徴付けが得られた . この結果はまた , 良く知られた文脈自由言語族に対する Chomsky-Schutzenberger 定理の “ CRL 版” と見做せる事で興味深い .

(2) 決定性と可逆性をもつ CRA は 実際的な局面において重要な性質である。これらの決定性 CRA と可逆的 CRA の計算能力に関する解析結果を得た。その結果を右図に示す。図における CRA はすべて -input を許す場合と許さない場合であり，反応規則の適用はすべて sequential manner に従っている。



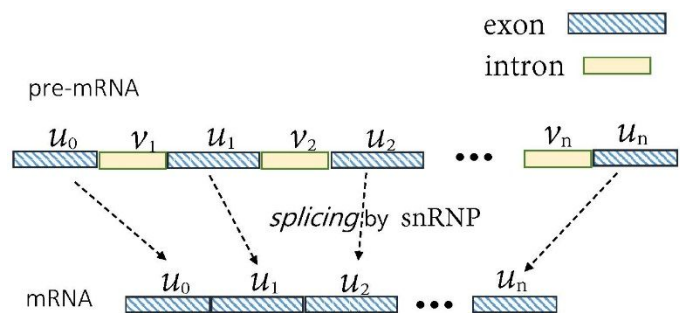
(3) CRA は記号列を受理する計算モデルとして提案されたが，これを一般化して拡張した Chemical Reaction Transducers(CRT)を新たに導入し，その記号列変換器としての代数的性質を解析した。CRT に分解 (Decomposition) と分割 (Factorization) という 2 つの概念を考察し，CRT が分解可能であるための十分条件を示した。さらに，CRT の分割に関しては「CRT は二つの a-transducer と固定された関数とに分割できる」という表現定理を導くことができた。



(4) CRA と類似した計算モデルである FAMM(Finite automata with multiset memories)を提案して，その 4 種類の制限モデルを考案して各々の計算能力を調べた。その結果それら 4 つの計算モデルの計算能力が，所謂 Chomsky 言語階層における言語族と各々一致することを示した。

(5) 我々が 2012 年に発表した反応オートマトン理論は，徐々に学界での知名度を得ているが，本研究での主要な研究課題ある化学反応オートマトン CRA に関する成果を含めて，さらなる広報活動して，サーベイ論文の発表を行った。

(6) 一般に，化学反応系に基づく自然計算モデルにおいては，DNA 分子間の“挿入と削除”が起こる事が知られている。(右図を参照)我々は，DNA からタンパク質が合成される原理であるセントラルドグマにおける“スプライシング現象”をモデル化した L-reduction という言語演算を研究し，これがもつ計算能力が(いわゆる)チューリング機械と同等であることを示した。



5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 7件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 F.Okubo and T.Yokomori	4. 巻 862
2. 論文標題 On the computing powers of L-reduction of insertion languages	5. 発行年 2020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 該当する
1. 著者名 T.Yokomori and F.Okubo	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 該当する
1. 著者名 Fumiya Okubo, Takashi Yokomori	4. 巻 777
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 Vol.777, (2019) pp.431-442.	6. 最初と最後の頁 432-442
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 オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する
1. 著者名 T.Yokomori	4. 巻 5
2. 論文標題 Natural Computing Paradigm -- A Concise Introduction	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Robotics, Networking and Artificial Life	6. 最初と最後の頁 6-9
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	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 該当する

1. 著者名 T.Yokomori and F.Okubo	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 該当する

1. 著者名 F.Okubo and T.Yokomori	4. 巻 154
2. 論文標題 Characterizations of Language Families Based on Local and Star Languages	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Fundamenta Informaticae	6. 最初と最後の頁 323-341
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 該当する

1. 著者名 F.Okubo and T.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 (Edited by A.Adamatzky)	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) なし	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 該当する

〔学会発表〕 計2件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 T.Yokomori
2. 発表標題 Natural Computing Paradigm A Concise Introduction
3. 学会等名 International Conf. on Artificial Life and Robotics 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 F.Okubo and T.Yokomori
2. 発表標題 Computing with Multisets : A Survey on Reaction Automata Theory
3. 学会等名 Computability in Europe 2018 (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
---------	---------