# Reverzibilis Reaction System

2019. október 24.

## Előzetes ismeretek

**Definíció.** Legyen $\mathscr{A} = (S, A)$ egy *reaction system*. Egy $\mathscr{A}$-beli *interactive process* véges sorozatok olyan $\pi = (\gamma, \delta)$ párja, amelyben $\gamma = C_0, C_1, \dots C_n$, $\delta = D_1, \dots D_n$, $n \geq 1$, ahol $C_0, \dots C_n$, $D_1, \dots D_n \subseteq S$, $D_1 = res_{\mathscr{A}}(C_0)$ és $D_i = res_{\mathscr{A}}(D_{i-1} \cup C_{i-1})$, ha $2 \leq i \leq n$.

**Definíció.** Legyen $a = (R_a,\, I_a,\, P_a)$ egy reakció, $T$ pedig egy véges halmaz. Azt mondjuk, hogy $a$ alkalmazható $T$-re, ha $R_a \subseteq T$ és $I_a \cap T = \varnothing$. Erre a továbbiakban az $a\ en\, T$ jelölést használjuk.

*Megjegyzés.* A következőkben, az egyszerűbb olvashatóság érdekében, feltesszük, hogy ha adott egy $a \in A$ reakció, akkor annak komponenseit $a$ alsó indexbe helyezésével helyezésével jelöljük, az $a = (R_a,\, I_a,\, P_a) \in A$ kifejezés kiírása nélkül.

**Definíció.** Legyen $a$ és $b$ $(a \neq b)$ két reakció. Azt mondjuk, hogy $a$ és $b$ nem alkalmazhatók együtt, ha nem létezik olyan $T$ véges halmaz, melyre egyidejűleg $a\ en\, T$ és $b\ en\, T$ teljesülne. Ekkor $R_a \cap I_b \neq \varnothing$ vagy $R_b \cap I_a \neq \varnothing$. Erre a kapcsolatra a továbbiakban az $a\ excl\, b$ jelölést alkalmazzuk.

**Definíció.** Legyen $a$ és $b$ $(a \neq b)$ két reakció. Azt mondjuk, hogy $b$ $a$-val együtt mindig alkalmazható, ha bármely $T$ véges halmazra, melyre $a\ en\ T$ teljesül, $b\ en\, T$ is teljesül. Ekkor $R_b \subseteq R_a$ és $I_b \subseteq I_a$. A továbbiakban ezt a kapcsolatot $a\ incl\, b$ módon jelöljük.

## Reverzibilis Reaction System

**Definíció.** Legyen $\mathscr{A} = (S, A)$ egy *reaction system* és $\pi$ egy olyan *interactive process* $\mathscr{A}$-ban, amelynek állapotait $sts(\pi) = W_0, W_1, \ldots W_n$ módon jelöljük. $\pi$ reverzibilis, amennyiben minden $W_i$ $(1 \leq i \leq n)$ állapotára teljesül, hogy $\nexists\, W \in \mathcal{P}(S) : res_{\mathscr{A}}(W) = W_i \ \wedge W \neq W_{i-1}$.

**Definíció.** Egy $\mathscr{A}$ *reaction system* reverzibilis, amennyiben minden $\mathscr{A}$-beli $\pi$ *interactive process* reverzibilis.

*Megjegyzés.* A továbbiakban, az általánosság elvesztése nélkül, kizárólag olyan $\mathscr{A} = (S, A)$ *reaction systemeket* fogunk tekinteni, melyek nem tartalmaznak azonos feltételek mellett alkalmazható reakciókat. Ez azt jelenti, hogy nincs két olyan $a, b \in A$ $(a \neq b)$ reakció, melyekre teljesülne, hogy $R_a = R_b$ és $I_a = I_b$.

**Tétel.** *Az $\mathscr{A} = (S, A)$ reaction system reverzibilis, amennyiben teljesülnek a következő feltételek:*

*(1) Egyértelmű, hogy egy állapot mely reakciók alkalmazásával állt elő. Azaz, tetszőleges $a, b \in A$ $(a \neq b)$ reakciópár esetén a következők egyike teljesül:*

- *$a$ és $b$ produktumai nem átfedők, azaz $P_a \cap P_b = \varnothing$.*
- *$a$ produktuma tartalmazza $b$ produktumát is, azonban $a$ és $b$ nem alkalmazhatók egyszerre, tehát $P_b \subset P_a$ és $a$ excl $b$.*
- *$a$ és $b$ produktumai megegyezők, azonban van olyan $c \in A$ reakció, mely $a$-val együtt mindig, $b$-vel együtt azonban sosem alkalmazható, és melynek produktuma tartalmaz egy vagy több, $b$ produktumában nem szereplő elemet. Ekkor $a$ incl $c$, $c$ excl $b$ és $P_b \cup P_c \neq P_b$.*

*(2) A kontextusból kapott szimbólumok nem állhatnak elő egy reakció produktumaként sem: ha $\pi = (\gamma, \delta)$ egy interactive process, ahol $\gamma = C_0, C_1, \ldots, C_n$, $n \geq 1$, akkor bármely $C_i$ kontextus és $a \in A$ reakció esetén $C_i \cap P_a = \varnothing$.*

*(3) Az állapotok minden eleme részt vesz valamilyen reakcióban: ha $\pi$ egy interactive process, ahol $sts(\pi) = W_0, W_1, \ldots, W_n$, $n \geq 1$, akkor $\bigcup_{a \in en(W_i)} R_a = W_i$, $i \leq n$.*

## Példák

### Reverzibilis bináris számláló

Reverzibilis *reaction system* felhasználásával megvalósítható egy olyan bináris számláló, melynek értéke az előrefelé számítás során növekszik, míg a hátrafelé számítás során csökken.

Először is tegyük fel, hogy adott egy $n > 0$ egész. $n$ jelenti a számláló bithosszát. Ekkor a *reaction system* alaphalmaza a következő lesz:

$$S_n = \{p_0, p_1, \ldots, p_{n-1}\} \cup \{inc\}.$$

A fenti halmaz $p_i$ elemei reprezentálják az egyes bitek beállított (azaz 1 értékű) állapotát, míg az *inc* elemmel a számláló értékének növelését válthatjuk ki.

A számábrázolás tehát a következőképpen alakul. Tegyük fel, hogy a *reaction system* egy $M \subseteq S$ állapotban van. Ekkor, ha $p_i \in M$, akkor az $i$-edik pozíción levő bit 1 értékkel, amennyiben pedig $p_i \notin M$, akkor 0 értékkel rendelkezik. Például, ha $n = 4$ és $M = \{p_2, p_0\}$, akkor a *reaction system* állapota a 0101 bináris számot írja le.

Előrefelé számítás során az *inc* elemet használhatjuk a számláló értékének eggyel történő növelésére. Egyszerű példát tekintve, ez azt jelenti, hogy amennyiben a *reaction system* egy $\{p_1, p_0, inc\}$ állapotban van, akkor valamely reakciók végrehajtása után a $\{p_2\}$ állapotba kell kerülnie.

Folytassuk tehát az említett működéshez szükséges reakciók megadásával! Legyen $n > 0$ adott, ekkor a reakciók $A_n$ halmaza a következő elemekből áll:

$$a_i = (\{inc\} \cup O_i,\ Z_i,\ O_{i+1}), \qquad 0 \leq i < 2^n - 2,$$

ahol

$$O_i = \{\ p_j\ :\ \text{a } j\text{-edik bit értéke 1 } i \text{ bináris felbontásában}\ \},$$
$$Z_i = S \setminus \{inc\} \setminus O_i.$$

Az egyes reakciók megfelelnek a számláló értékének $i$-ről $i+1$-re történő növelésének.

Az $n$-bites számlálónak megfelelő *reaction system* ekkor $\mathcal{B}_n = (S_n, A_n)$.

Tekintsünk most egy példát! Tegyük fel, hogy egy kétbites számlálót szeretnénk készíteni, azaz $n = 2$. Az $S_2$ alaphalmaz ekkor a $\{p_1, p_0, inc\}$

elemekből áll, a reakciók $A_2$ halmazát pedig az

$$\begin{aligned}
a_0 &= (\{inc\},\ \{p_1, p_0\},\ \{p_0\}),\\
a_1 &= (\{inc, p_0\},\ \{p_1\},\ \{p_1\}),\\
a_2 &= (\{inc, p_1\},\ \{p_0\},\ \{p_1, p_0\}),
\end{aligned}$$

elemek alkotják.

Ha az egymást követő kontextushalmazok sorra az *inc*növelő elemből állnak, akkor a $\mathcal{B}_2 = (S_2, A_2)$ *reaction system* a következő állapotokat fogja kiszámolni:

$$\varnothing \to \{p_0\} \to \{p_1\} \to \{p_1, p_0\}.$$

# A reverzibilitás szimulálása

A következőkben egy olyan *reaction systemet* írunk le, mely interaktív előrefelé számításokkal képes szimulálni egy, a fenti tétel szerinti reverzibilis *reaction system* előre- és hátrafelé irányba tett lépéseit.

Ez egy olyan számítási szemantikát jelenít meg, ahol tetszés szerint lehetőségünk van a megelőző lépéseink visszavonására, majd új számítási utak kiválasztására.

**Tétel.** *Legyen $\mathscr{A} = (S, A)$ egy olyan reaction system, mely a megelőző tétel szerint reverzibilis. Ekkor létezik olyan $\mathscr{R} = (T, B)$ reaction system, mely $\mathscr{A}$ reverzibilitását szimulálja, mégpedig a következőképpen.*

*A $T$ alaphalmaz az $\mathscr{A}$ reaction system alaphalmaza, kiegészülve egy speciális $\rho$ szimbólummal, mely egy szimulált visszafelé lépés kiváltására szolgál:*

$$T = S \cup \{\rho\}.$$

*A $B$ reakcióhalmaz a következő módon adott:*

$$\begin{aligned}
B &= \overrightharpoon{B} \cup \overleftharpoon{B},\\
\overrightharpoon{B} &= \{(R_a, I_a \cup \{\rho\}, P_a) : a \in A\},\\
\overleftharpoon{B} &= \{rev(a) : a \in A\},
\end{aligned}$$

*ahol a rev függvény az alábbiak szerint állít elő egy új reakciót:*

*(1) Ha $a \in A$ olyan, hogy nincs olyan $b \in A$ $(a \neq b)$, hogy $P_a \cap P_b \neq \varnothing$, akkor*

$$rev(a) = (P_a \cup \{\rho\},\, \varnothing,\, R_a).$$

*(2) Ha $a \in A$ olyan, hogy vannak olyan $b_i \in A$ $(a \neq b_i)$ reakciók, melyek mindegyikére teljesül, hogy $P_a \cap P_{b_i} \neq \varnothing$ és $P_a \neq P_{b_i}$, akkor*

$$rev(a) = (P_a \cup \{\rho\},\, \bigcup_i P_{b_i} \setminus P_a,\, R_a).$$

*(3) Ha az $a_i \in A$ $(0 \leq i < n$, ahol $n > 0$ egész) reakciók olyanok, hogy $P_{a_0} = P_{a_1} = \cdots = P_{n-1}$, és legfeljebb egy kivételével mindegyik $a_i$ reakcióhoz létezik olyan $b_i$ reakció, melyre teljesül, hogy*

$$a_i \; incl \, b_i,$$
$$b_i \; excl \, a_j \qquad 0 \leq j < n, i \neq j,$$

*akkor*

$$rev(a_i) = (P_{a_i} \cup P_{b_i} \cup \{\rho\},\, \bigcup_{\substack{0 \leq j < n \\ i \neq j}} P_{b_j},\, R_{a_i}).$$