Reverzibilis Reaction System

2019. október 29.

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 $\gamma = C_0, C_1, \ldots C_n$, $\delta = D_1, \ldots D_n$, $n \geq 1$, ahol $C_0, \ldots C_n$, $D_1, \ldots D_n \subseteq S$, $D_1 = res_{\mathscr{A}}(C_0)$ 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 π egy olyan *interactive process* $\mathscr{A}$-ban, amelynek állapotait $sts(\pi) = W_0, W_1, \ldots W_n$ módon jelöljük. π 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 π *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 és b produktumai átfedők, azonban megkülönböztethetők, azaz $P_a \cap P_b \neq \varnothing$ és $P_a \not\subset P_b$ és $P_b \not\subset P_A$.*
- *a és b produktumai között tartalmazás áll fent, azonban a és b nem alkalmazhatók egyszerre, tehát $P_a \subset P_b \vee P_b \subset P_a$ 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 π 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 ciklikus bináris számláló, melynek értéke az előrefelé számítás során növekszik, míg a hátrafelé számítás során csökken. A ciklikusság azt jelenti, hogy a legnagyobb ábrázolható érték további növelése a 0 értéket, míg a 0 érték további csökkentése a legnagyobb ábrázolható értéket eredményezi.

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

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

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 z elem jelenti a számláló 0 értékét.

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:

$$\begin{aligned} a_0 &= (\{inc, z\},\ O_{2^n-1},\ O_1) \\ a_i &= (\{inc\} \cup O_i,\ Z_i,\ O_{i+1}), \qquad 1 \leq i < 2^n - 2, \\ a_{2^n-1} &= (\{inc\} \cup O_{2^n-1},\ \{z\},\ \{z\}) \end{aligned}$$

ahol

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

Az egyes reakciók megfelelnek a számláló értékének i-ről $i+1$-re történő növelésének (kivétel az utolsó reakció, mely a számláló átfordulását eredményezi).

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 $\{p_1, p_0, inc, z\}$ elemekből áll, a reakciók A_2 halmazát pedig az

$$\begin{aligned}
a_0 &= (\{inc, z\},\ \{p_0, p_1\},\ \{p_0\}),\\
a_1 &= (\{inc, p_0\},\ \{z, p_1\},\ \{p_1\}),\\
a_2 &= (\{inc, p_1\},\ \{z, p_0\},\ \{p_1, p_0\}),\\
a_3 &= (\{inc, p_0, p_1\},\ \{z\},\ \{z\})
\end{aligned}$$

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:

$$\{z\} \to \{p_0\} \to \{p_1\} \to \{p_1, p_0\} \to \{z\} \to \cdots$$

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 ρ 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:

- *Ha* $a \in A$ *olyan, hogy bármely* $b \in A$ $(a \neq b)$ *reakció esetén* $P_a \cap P_b = \varnothing$, *akkor*

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

- *Egyébként, vegyük az* $a \in A$ *reakcióhoz a következő halmazokat:*

$$\begin{aligned} I &= \{\, i \in A \;:\; a \; incl \; i \,\}, \\ C &= \{\, (r, c) \in A \times A \;:\; P_r = P_a \wedge r \; incl \; c \wedge a \; excl \; c \,\}, \\ W &= \{\, w \in A \;:\; P_a \subset P_w \,\}. \end{aligned}$$

Ezekből képezzük az új reakciót alkotó komponenseket:

$$\begin{aligned} R_{rev} &= P_a \cup \{\rho\} \cup \bigcup_{i \in I} P_i, \\ I_{rev} &= \bigcup_{(r,c) \in C} P_c \cup \bigcup_{w \in W} P_w \setminus P_a, \\ P_{rev} &= R_a, \end{aligned}$$

melyeket felhasználva

$$rev(a) = (R_{rev},\, I_{rev},\, P_{rev}).$$