

Doktori (PhD) értekezés tézisei

Reverzibilis reakciórendszerek

Bagossy Attila

Témavezető: Dr. Vaszil György



DEBRECENI EGYETEM

Informatikai Tudományok Doktori Iskola

Debrecen, 2024

E disszertációban a reakciórendszerek (Reaction Systems) nevű számítási modell reverzibilitását vizsgáló kutatásunkat mutatjuk be. Munkánk kiindulópontját a módosíthatatlan, definíció szerinti reakciórendszerek megfordíthatósága jelentette, visszalépéses (backtracking) reverzibilitás formájában. Mivel az így kapott számítási modell igen korlátos (ami a vele leírható számításokat illeti), következő lépésként megfelelő módosításokkal lazítottunk az eredeti definíción, annak érdekében, hogy növeljük a modell intuitív számítási erejét. E variánsok továbbra is megtartották az interaktív folyamatok szekvenciális, szinkronizált működését. Mivel a kutatásunk motivációja a különböző reverzibilitási paradigmák vizsgálata volt egyazon számítási modellen belül, így a munkát ismét a reakciórendszerek alapdefiníciójának módosításával folytattuk. A módosításokon keresztül a konkurens számítások lehetőségét szerettük volna megteremteni, ennek megfelelően a további vizsgálódásaink alapját a közvetlenül kommunikáló reakciórendszerek (Communicating Reaction Systems with Direct Communication) egy variánsa jelentette. E modell több, hagyományos reakciórendszert rendez egy virtuális gráfba, lehetővé téve közöttük a szinkronizálatlan kommunikációt, ezáltal a konkurens számításokat. Így már megvizsgálhattunk egy újabb reverzibilitási paradigmát, a konkurens rendszerekben alkalmazható okozati konzisztens (causal consistent) reverzibilitást.

Reakciórendszerek

A reakciórendszerek (Reaction Systems) nevű számítási modellt Ehrenfeucht és Rozenberg definiálta, azzal a motivációval, hogy az élő sejtekben zajló biokémiai folyamatok vizs-

gálatára egy formális keretrendszert adjanak [3]. A számítás reakciók alkalmazásával halad előre, újabb és újabb, állapotoknak (state) nevezett véges szimbólumhalmazokat létrehozva. Minden reakció három véges halmazból áll: A reagensek halmaza (reactants) elősegíti, míg az ezzel diszjunkt tiltó szimbólumok halmaza (inhibitors) gátolja a reakció alkalmazását. Végül, a reakció sikeres végrehajtása előállítja a produktumokat (products).

A modell fenti leírásából észrevehető, hogy mindig szimbólumok véges halmazával dolgozunk. Azaz, egy szimbólum vagy rendelkezésre áll (és akkor elégséges mennyiség van belőle), vagy teljesen hiányzik; egynél több semmiből sem lehet. Ebből kifolyólag a reakciók konfliktusmentesek (non-conflicting), mind az elősegítést, mind a gátlást illetően. Ez azt jelenti, hogy hiába használja több reakció ugyanazokat a szimbólumokat reagensként, mindet alkalmazhatjuk. Hasonlóan, bár ugyanazt a produktumot képezheti több reakció is, végül csupán egy lehet majd belőle.

A reakciók alkalmazását az úgynevezett interaktív folyamatok (interactive process) foglalják keretbe, melyek két összetevőből állnak. Egyfelől, a reakciókat újra és újra végrehajtjuk a létrejövő produktumokra. Másfelől, a kapott produktumokat kiegészíthetjük tetszőleges bemeneti szimbólumokkal, lépésről lépésre interaktívan befolyásolva a folyamatot.

A következőkben formálisan is bevezetjük ezeket a fogalmakat.

Legyen S szimbólumok véges halmaza, melyet *háttérhalmaznak* nevezünk (background set). Az S feletti *reakciók* rendezett $a = (R_a, I_a, P_a)$ hármasok, ahol minden halmaz S részhalmaza. R_a a *reagensek*, I_a a *tiltó szimbólumok*, míg P_a

a *produktumok* véges halmaza.

Minden *reakciórendszer* egy rendezett $\mathcal{A} = (S, A)$ pár, ahol S a háttérhalmaz, míg A S feletti reakciók véges halmaza.

Legyen $\mathcal{A} = (S, A)$ egy reakciórendszer. Egy \mathcal{A} feletti *interaktív folyamat* egy véges sorozatokból álló $\pi = (\gamma, \delta)$ pár, melyben $\gamma = C_0, \dots, C_n$ a *kontextus sorozat* és $\delta = D_0, \dots, D_n$ az *eredmény sorozat*. Az eredmény sorozat első eleme definíció szerint az üres halmaz ($D_0 = \emptyset$), az egy-mást követő eredményhalmazokat pedig reakciók alkalmazásával állítjuk elő $D_i = \text{res}_A(D_{i-1} \cup C_{i-1})$ ($1 \leq i \leq n$) módon. A kontextusok és az eredmények uniójából felírhatjuk az *állapot sorozatot* $\text{sts}(\pi) = W_0, \dots, W_n$ formában, ahol $W_i = C_i \cup D_i$ for $0 \leq i \leq n$.

Kontrollálatlan visszalépés reakciórendsze- rekben

Kutatásunk első lépését a kontrollálatlan visszalépéses reverzibilitás (uncontrolled backtracking) megvalósítása jelentette. Mindezt a modell jelentősebb módosítása nélkül szerttük volna megtenni, elkerülve például a külső memória használatát.

Bár a reakciórendszerek halmazalapú definíciója és az ebből fakadó konfliktusmentes reakciók lehetővé teszik a párhuzamos végrehajtást a reakciók alkalmazásának szintjén, ugyanakkor az interaktív folyamatok lineáris állapotsorozatai nem támogatják a konkurens viselkedést. Mindezek eredményeként egy szekvenciális működéssel bíró számítási eszközt kapunk, mely rendkívül közel áll a véges állapotátmeneti rendszerekhez, illetve véges automatákhoz. Az

ilyen jellegű számítási modellekben a reverzibilitás természetesen adódik, mint hátrafele determinizmus. Azaz, a számítás megfordítható, amennyiben minden konfigurációnak (vagy állapotnak) pontosan egy őse van, pontosan egy másik konfigurációból érhető el. Ekkor a számítás megfordítása csupán sorozatos visszalépéseket jelent az őállapotokon át, egészen a kívánt állapotig.

Definíció. Legyen $\mathcal{A} = (S, A)$ egy reakciórendszer és $\pi = (\gamma, \delta)$ egy interaktív folyamat \mathcal{A} -ban, ahol $\gamma = C_0, C_1, \dots, C_n$ és $\text{sts}(\pi) = W_0, W_1, \dots, W_n$.

A W_i , $1 \leq i \leq n$, állapotnak *több őse van, ha léteznek olyan $W'_{i-1}, C'_{i-1} \subseteq S$ halmazok, hogy $W'_{i-1} \neq W_{i-1}$ ugyanakkor $\text{res}_A(W'_{i-1}) \cup C'_{i-1} = W_i$. Ezzel szemben, ha nincs ilyen W'_{i-1} halmaz, akkor W_i egyértelmű őssel rendelkezik.*

A π interaktív folyamat *reverzibilis, ha minden W_i , $1 \leq i \leq n$ állapot őse egyértelmű.*

Ha követjük a reverzibilitás általános definícióját, akkor minden állapotnak egyértelmű őssel kell bírnia. Ugyanakkor, ha ezt az üres halmazra is értelmezzük, akkor olyan visszalépések állhatnak elő, melyek a semmiből hoznak létre valamit, ellentmondva ezzel az intuíciónknak. Az ilyen esetek elkerülésére a következőkben csak azokat az interaktív folyamatokat tekintettük, melyekben az üres eredményhalmaz nem áll elő.

Definíció. Legyen \mathcal{A} egy reakciórendszer és $\pi = (\gamma, \delta)$ egy interaktív folyamat \mathcal{A} -ban, oly módon, hogy $\delta = D_0, D_1, \dots, D_n$. Azt mondjuk, hogy π *nem-újrainduló ha $D_i \neq \emptyset$, $1 \leq i \leq n$.*

Definíció. Az \mathcal{A} reakciórendszer *reverzibilis*, ha minden \mathcal{A} -beli nem-újrainduló interaktív folyamat reverzibilis.

E definíciókra építve, az első tézisünk a reakciórendszerek visszalépéses reverzibilitására ad szükséges és elégséges feltételeket (3.1 tétel., melynek alapját a 3.1-3.3. lemmák és a 3.1-3.2. következmények képezik).

Tézis 1

Legyen $\mathcal{A} = (S, A)$ egy reakciórendszer és $S = \Sigma_p \cup \Sigma_c$, ahol Σ_p az eredmény ábécé, míg Σ_c a bemeneti ábécé (ahol Σ_p és Σ_c nem feltétlenül diszjunkt halmazok). \mathcal{A} akkor és csak akkor reverzibilis, ha a következők teljesülnek:

- (1) Különböző, együttesen alkalmazható reakciók különböző eredményeket állítanak elő.
- (2) A háttérhalmaz különböző, nem-üres részhalmazain különböző reakciók alkalmazhatók.
- (3) Nincs két olyan eredményhalmaz, mely csak Σ_c -beli elemekben különbözik egymástól.

Kontrollált visszalépés reakciórendszerekben

A kontrollálatlan reverzibilitást megvalósító számítási rendszerek a hátrafelé lépéseknek csupán a hogyanját írják le, ugyanakkor nem definiálják, hogy mikor haladjon előre és mikor hátra a számítási folyamat. Ennek eredményeként egy nondeterminisztikus modellt kapunk, melyben a számítás

iránya bármikor megváltozhat. Ezt elkerülendő, kutatásunkat a kontrollált reverzibilitás megvalósításával folytattuk.

A reakciórendszerek számításai, definíció szerint, interaktívak: a környezet bármely lépésben tetszőleges szimbólumokkal befolyásolhatja a rendszer által alkalmazott reakciókat. Ezt kihasználva, a környezet, mint külső kontroll, meghatározhatja akár a számítás irányát is. Megvalósításunkban bevezettük a visszagörgetést megjelenítő ρ szimbólumot, mely, ha megjelenik a bemeneten, egy hátrafelé lépést vált ki. Ezzel szemben, ha a ρ szimbólum nincs jelen, akkor a rendszer előrefelé fog számolni.

A fenti elv szerint működő rendszereket szimulátoroknak (simulator) neveztük el, hiszen egy reverzibilis reakciórendszer számítását szimulálják, előre és hátra mozogva annak állapotai között, a környezeti bemenet ρ szimbólumai által vezérelve.

Az ilyen szimulátor rendszerek interaktív folyamatait felbonthatjuk egy vagy több részsorozatra. Az első ilyen sorozat mindig a szimulált (azaz, eredeti, reverzibilis) reakciórendszer egy előrefelé számításának felel meg. Ezt követően, a második sorozat már egy hátrafelé számítás lesz, visszavonva a korábbi előrefelé sorozat egy vagy több lépését. A többi részsorozat pedig ugyanezen minta szerint alternál az eredeti rendszer előrefelé és hátrafelé számításai között.

Definíció. Legyen \mathcal{A} egy reakciórendszer, $\pi = (\gamma, \delta)$ egy \mathcal{A} -beli interaktív folyamat, melyben $\gamma = C_0, \dots, C_n$, $\delta = D_0, \dots, D_n$ és $\rho \in S$ a háttérhalmaz egy szimbóluma. π egy *jólformált szimuláló interaktív folyamat* ha az alábbiak teljesülnek bármely $0 \leq i \leq n$ esetén:

- Ha $D_i \subseteq \Sigma_c$, akkor $\rho \notin C_i$.

- Ha $\rho \in C_i$, akkor $C_i = \{\rho\}$.

Definíció. Legyen $\mathcal{A} = (S, A)$ és $\mathcal{B} = (S \cup \{\rho\}, B)$ két reakciórendszer. \mathcal{B} *interaktívan szimulálja* \mathcal{A} interaktív folyamatait, ha az alábbiak teljesülnek.

- (1) Bármely \mathcal{A} -beli π interaktív folyamathoz létezik olyan σ jólformált szimuláló interaktív folyamat \mathcal{B} -ben, hogy $\text{sts}(\pi) = \text{sts}(\sigma)$.
- (2) Bármely \mathcal{B} -beli σ jólformált szimuláló interaktív folyamat felbontható \mathcal{A} -beli előre- és hátrafelé számítások egymást felváltva követő részsorozataira.

A fenti definíció szerint a szimulátor rendszerek tartalmazzák az eredeti, szimulált rendszerek számításait, továbbá képesek a szimulált rendszerek állapotai között tetszőlegesen előre- és hátrafelé lépni.

A disszertáció második tézisében a szimulátor reakciórendszerek létrehozását mondjuk ki (4.1. tétel, melynek alapját a 4.1-4.3. lemmák képezik).

Tézis 2

Bármely $\mathcal{A} = (S, A)$ reverzibilis reakciórendszerhez készíthetünk egy \mathcal{B} reakciórendszert, mely interaktívan szimulálja \mathcal{A} lépéseit, ha S -t kiegészítjük a visszalépést kiváltó ρ szimbólummal, A -t pedig az \mathcal{A} -beli állapotok egyértelmű őseit előállító inverz reakciókkal.

A visszalépéses reakciórendszerek átmeneti gráfjai

A reverzibilis reakciórendszerek definiálása után természetesen adódott a kutatásunk következő lépése, mégpedig a kapott számítási eszköz képességeinek vizsgálata. Ugyanakkor, eltekintve a modell számítási erejének precíz leírásától, inkább egy intuitív megoldást választottunk, alapul véve az úgynevezett átmeneti gráfokat (transition graphs). Egy ilyen gráf tartalmazza egy rendszer összes interaktív folyamatát, ezáltal alkalmas eszköz a rendszer számítási képességeinek körülírására.

Az átmeneti gráfokat elsőként Genova és munkatársai vezették be [4], a következő módon: a csúcsok a háttérhalmaz egy-egy részhalmazát jelentik meg, míg élt akkor húzhatunk két ilyen halmaz közé, ha az egyikből reakciók alkalmazásával előáll a másik. A disszertációban használt átmeneti gráf-definíció ettől azonban némiképp eltér. Elsőként a csúcsok tekintetében, melyek a kiinduló halmazból elérhető eredményhalmazokat fogják reprezentálni. A második különbséget pedig az élek címkézése jelenti. Mivel definíciónkban szerettük volna kihangsúlyozni a bemenet jelentőségét, ezért az éleket a környezettől kapott bemeneti szimbólumokkal címkéztük. Két csúcs közé akkor húzhatunk egy ilyen, címkézett élt, amennyiben a kezdeti csúcs és a címke uniója az él végződő csúcsát állítja elő.

Definíció. Az $\mathcal{A} = (S, A)$ reakciórendszer átmeneti gráfja egy olyan $TG_{\mathcal{A}} = (V, E)$ gráf, melyben a csúcsok V halmaza minden elérhető eredményhalmazhoz tartalmaz egy csúcsot, míg az E halmaz akkor tartalmaz egy D és D' közé húzott

irányított élt, ha $\text{res}_A(D \cup C) = D'$ (ahol C az él címkéje).

A disszertáció harmadik tézise a különböző reverzibilis reakciórendszer-variánsok átmeneti gráfjaival kapcsolatos. A tézis első fele az alábbi (az 5.1. és 5.2. tétel alapján).

Tézis 3.A

A reverzibilis reakciórendszerek átmeneti gráfjai irányított fák, melyekben minden él a fa gyökerével ellentétes irányba mutat.

Továbbá, ha megengedjük a tetszőleges kezdeti halmazokat, akkor az átmeneti gráf egy irányított kör is lehet, mely kör minden csúcsa egy irányított fa gyökerére (ahol minden él a fa gyökerével ellentétes irányba mutat).

A megelőzőkben a reverzibilitást az egyes állapotok egyértelmű ősein keresztül definiáltuk: amennyiben egy adott állapot csakis egyetlen eredmény-bemenet kombinációval állítható elő, akkor azt mondjuk, hogy egyértelmű őssel rendelkezik. Ahogy azt a tézis első feléből láthattuk, a reverzibilitás e definíciója igen egyszerű gráfokat eredményez. Ennek folytán kutatásunkat egy, a véges automaták által inspirált, megengedőbb reverzibilitás-fogalommal folytattuk, melyet visszatekintő reverzibilitásnak (reversibility with look-behind) neveztünk el. A visszatekintő reverzibilis reakciórendszerek nemcsak az aktuális állapotot, hanem a megelőzőleg kapott bemenetet is látják. Ugyanazt az állapotot tehát több irányból is elérhetjük reverzibilis módon, feltéve, hogy a bemenetek eltérnek. Ezáltal egy olyan számítási eszközt kapunk, mely a véges állapot-átmeneti rendszerekhez hasonló (mely modell annyiban tér el a véges automatáktól,

hogy nem rendelkezik kitüntetett kezdő és elfogadó állapotokkal). Az ehhez kapcsolódó eredményeinket a harmadik tézis második fele foglalja össze (5.1. állítás, az 5.3. és 5.4. tétel alapján)

Tézis 3.B

A reverzibilis véges állapot-átmeneti rendszerek állapot-átmeneti gráfjai megfelelnek a reverzibilis visszatekintő reakciórendszerek átmeneti gráfjainak. Ennek fordítottja is igaz, miszerint bármely reverzibilis visszatekintő reakciórendszer átmeneti gráfja megfeleltethető egy reverzibilis véges állapot-átmeneti rendszer állapot-átmeneti gráfjának.

Reverzibilitás kommunikáló reakciórendszerekben

A kutatómunkánk elsődleges célja és motivációja a reverzibilitás különböző paradigmáinak vizsgálata volt. E motiváció mentén, a visszalépéses reverzibilitás után a figyelmünket egy másik paradigmára, az okozati konzisztenciára (causal consistency) fordítottuk. A reverzibilitás mint visszalépés olyan modellek esetén jó választás, melyekben a legutoljára végrehajtott számítási lépés egyértelmű. Konkurens modellekben, ugyanakkor, nem állíthatunk fel szigorú időrendi sorrendet az egyes lépések között. Ezáltal a visszalépés sem követhet egyetlen, kötött sorrendet.

A Danos és Krivine [2] által bevezetett okozati konzisztencia pontosan a konkurens számítások reverzibilitására ad megoldást. Mindezt úgy teszi, hogy az időbeli sorrendet fel-

cseréli a műveletek ok-okozati viszonyok mentén történő rendezésével. Azaz, egy lépést akkor vonhatunk vissza, ha előbb annak minden következményét visszavontuk.

Mivel az okozati konzisztencia a konkurenciára és az ok-okozati viszonyokra építve definiálja a reverzibilitást, ezért először megfelelő módon ki kellett bővítenünk a reakciórendszerek eredeti felírását. Ehhez a Csuhaj-Varjú és Sethy által bevezetett közvetlenül kommunikáló reakciórendszereket (Communicating Reaction Systems with Direct Communication, cdcR systems) vettük alapul [1]. E modell tetszőleges számú reakciórendszerből képez egy virtuális gráfot, melynek csúcsai (amiket komponenseknek hívunk) szabadon küldhetnek és fogadhatnak egymás között szimbólumokat. Mindazonáltal, hiába lesz így elosztott a modell, a működése továbbra is szinkronizált, ellehetetlenítve a konkurens viselkedést.

Pontosan a szinkronizációnak köszönhetően, a cdcR rendszerek a hagyományos reakciórendszerek particionált variánsai lesznek, melyet alátámaszt a kettő közötti átírás is [1]. Ezen átírás lényege, hogy egy cdcR rendszer bármely globális állapota megfeleltethető egy hagyományos reakciórendszer valamely állapotának. A reverzibilitás szempontjából tekintve, mindez azt jelenti, hogy ha megmutatjuk, hogy egy globális állapot egyértelmű őssel rendelkezik, akkor ugyanez igaz lesz az átírt állapotra is. Ennek pedig a legkézenfekvőbb módja, ha cdcR rendszert egyenként reverzibilis komponensekből állítjuk össze. A disszertáció negyedik tézisének első fele ezt az eredményt foglalja össze (6.1. és 6.2. állítás).

Tézis 4.A

Ha egy szinkronizált közvetlenül kommunikáló reakciórendszer (cdcR rendszer) komponensei reverzibilis reakciórendszerek, akkor a kommunikáló rendszer is reverzibilis, ugyanakkor vannak olyan reverzibilis cdcR rendszerek is, melyeknek nem minden komponense reverzibilis.

Az okozati konzisztencia egyik alapeleme a konkurencia, ezért a következőkben definiáltuk a cdcR rendszerek egy konkurens variánsát, melyet közvetlenül kommunikáló elosztott reakciórendszernek (Distributed Communicating Reaction Systems, d-cdcR systems) neveztünk el. A d-cdcR rendszerek bevezetik a blokkolt (blocking) számításokat és az aktív komponenseket, megszüntetve ezzel a globális szinkronizációt. Egy komponens blokkolt állapotban van, amennyiben nem rendelkezik alkalmazható reakciókkal. Ezzel szemben, aktívak lesznek azok a komponensek, melyeket a külső kontroll továbblépésre jelöl ki. Természetesen, lesznek olyan komponensek is, melyek se nem blokkoltak, se nem aktívak: a tétlen (idle) komponensek rendelkeznek ugyan alkalmazható reakciókkal, ugyanakkor nem jelöli ki őket a külső kontroll a továbblépésre.

Miután lehetővé tettük a konkurens számításokat, immár foglalkozhattunk a reverzibilitás megvalósításával. Informális definíciónk szerint, egy okozati konzisztens modellben csak akkor vonhatunk vissza egy lépést, ha annak minden következményét visszavontuk. De mit is jelent az, hogy következmény? Ha az \mathcal{A} komponens kommunikál a \mathcal{B} komponenssel, mely aztán további számításokat végez, akkor nem folytathatjuk \mathcal{A} lépéseinek visszavonásával. Azt megelőző-

en ugyanis előbb \mathcal{B} számításait kell visszaléptetnünk, hiszen azokhoz \mathcal{B} felhasználta az \mathcal{A} -tól kapott szimbólumokat. Azaz, \mathcal{B} számítása az \mathcal{A} -val folytatott kommunikáció következménye.

Elsőként a komponenseken belüli következményeket tekintettük. Mivel az egyes komponensek hagyományos, szekvenciális működésű reakciórendszerek, ezért a következmények szerinti visszavonás egybeesik a számítási lépések végrehajtási sorrendjével. Azaz, csak a visszalépéses reverzibilitást kell megkövetelnünk. Második lépésként az előző bekezdés példájában is szereplő kommunikációs interakciókat kellett kezelnünk. Ezt a küldött és a fogadott szimbólumok rögzítésével tettük meg, a következő módon. Minden komponens rendelkezik két veremcsaláddal, melyeket *send*-nek és *recv*-nek neveztünk el. Ha a j -edik számítási lépésben az \mathcal{A}_i komponens szimbólumokat küld az \mathcal{A}_k komponensnek, akkor a következő lépésben az \mathcal{A}_i rendszer D_{j+1}^i eredményhalmazát felrakjuk a rendszer k -t nyilvántartó veremére, melyet $send_{j+1}^{i,k}$ jelöl. A komponenseken belüli visszalépéses reverzibilitás megköveteli az egyértelmű ősöket, ami miatt nem jelenhetnek meg körök a számításokban. Emiatt a *send* veremre helyezett halmaz pontosan azt rögzíti, amikor a kommunikáció történt. A *recv* veremek hasonlóan működnek, egyetlen kivétellel: ezek ugyanis a fogadott szimbólumokat is tárolják, rögzítendő, hogy a visszalépéskor mely elemeket kell eltávolítani.

A fenti megvalósítást aztán áthelyeztük Lanese, Phillips és Ulidowski keretrendszerébe, mely véges állapot-átmeneti rendszerekre írja fel az okozati konzisztencia feltételeit [5]. Ennek eredménye a disszertáció negyedik tézisének második fele (7.2. állítás, a 7.1. állítás és a 7.1-7.6. lemmák alapján).

Tézis 4.B

Ha egy közvetlenül kommunikáló elosztott reakciórendszer komponensei reverzibilis reakciórendszerek, akkor a komponensek közötti kommunikáció rögzítésével okozati konzisztens elosztott rendszereket kapunk

Hivatkozások

- [1] Erzsébet Csuhaj-Varjú és Pramod Kumar Sethy. „Communicating Reaction Systems with Direct Communication”. *Membrane Computing*. Szerk. Rudolf Freund és tsai. Cham: Springer International Publishing, 2021, 17–30. old. ISBN: 978-3-030-77102-7.
- [2] Vincent Danos és Jean Krivine. „Reversible Communicating Systems”. en. *CONCUR 2004 - Concurrency Theory*. Szerk. Philippa Gardner és Nobuko Yoshida. Lecture Notes in Computer Science. Berlin, Heidelberg: Springer, 2004, 292–307. old. ISBN: 9783540286448. DOI: 10.1007/978-3-540-28644-8_19.
- [3] A. Ehrenfeucht és G. Rozenberg. „Reaction Systems”. *Fundam. Inf.* 75.1–4 (2007. jan.), 263–280. old. ISSN: 0169-2968.
- [4] Daniela Genova, Hendrik Jan Hoogeboom és Nataša Jonoska. „A graph isomorphism condition and equivalence of reaction systems”. *Theoretical Computer Science* 701 (2017), 109–119. old.
- [5] Ivan Lanese, Iain Phillips és Irek Ulidowski. „An Axiomatic Approach to Reversible Computation”. *Foundations of Software Science and Computation Structures*. Szerk. Jean Goubault-Larrecq és Barbara König. Cham: Springer International Publishing, 2020, 442–461. old. ISBN: 978-3-030-45231-5.

A jelölt kapcsolódó közleményei

- [J1] Attila Bagossy és György Vaszil. „Controlled reversibility in communicating reaction systems”. *Theoretical Computer Science* 926 (2022), 3–20. old. ISSN: 0304-3975. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.tcs.2022.05.030>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304397522003528>.
- [J2] Attila Bagossy és György Vaszil. „Simulating reversible computation with reaction systems”. *Journal of Membrane Computing* 2 (2020. okt.), 179–193. old. DOI: 10.1007/s41965-020-00049-9.
- [I1] Attila Bagossy és György Vaszil. „Transition Graphs of Reversible Reaction Systems”. *Membrane Computing*. Szerk. Rudolf Freund és tsai. Cham: Springer International Publishing, 2021, 1–16. old. ISBN: 978-3-030-77102-7.



Nyilvántartási szám: DEENK/459/2023.PL
Tárgy: PhD Publikációs Lista

Jelölt: Bagossy Attila

Doktori Iskola: Informatikai Tudományok Doktori Iskola

MTMT azonosító: 10090527

A PhD értekezés alapjául szolgáló közlemények

Idegen nyelvű, külföldi könyvrészletek (1)

1. **Bagossy, A.**, Vaszil, G.: Transition Graphs of Reversible Reaction Systems.

In: Membrane Computing, 21st International Conference, CMC 2020, Virtual Event, September 14-18, 2020, Revised Selected Papers. Eds.: Rudolf Freund, Tseren-Onolt Ishdorj, Grzegorz Rozenberg, Arto Salomaa, Claudio Zandron, Springer, Cham, 1-16, 2021, (Lecture Notes in Computer Science, ISSN 0302-9743 ; 12687) ISBN: 9783030771010

Idegen nyelvű tudományos közlemények külföldi folyóiratban (2)

2. **Bagossy, A.**, Vaszil, G.: Controlled reversibility in communicating reaction systems.

Theor. Comput. Sci. 926, 3-20, 2022. ISSN: 0304-3975.

DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.tcs.2022.05.030>

IF: 1.1

3. **Bagossy, A.**, Vaszil, G.: Simulating reversible computation with reaction systems.

J. Membr. Comput. 2 (3), 179-193, 2020. ISSN: 2523-8906.

DOI: <http://dx.doi.org/10.1007/s41965-020-00049-9>



Short thesis for the degree of doctor of
philosophy (PhD)

Reversible Reaction Systems

by Attila Bagossy

Supervisor: Dr. György Vaszil



UNIVERSITY OF DEBRECEN
Doctoral School of Informatics

Debrecen, 2024

This dissertation presents our research on the reversibility of Reaction Systems. This research started with a straightforward question about defining reversibility for the ordinary, unmodified model of Reaction Systems. Then, facing the limitations of the resulting computational devices, we made sufficient modifications to increase their intuitive computational power while still working with a sequential, synchronous model and a matching paradigm of reversibility. As our initial motivation was rooted in exploring the reversibility of computation, we wanted to experiment with different paradigms within the same model. Therefore, we examined another modified version of Reaction Systems, which organizes several interconnected components into a virtual graph. By removing synchronization between the components and enabling concurrent actions, we could implement a paradigm of reversibility suited for concurrent and distributed models.

Reaction Systems

Reaction Systems are natural computational models by Ehrenfeucht and Rozenberg [3] aiming to provide a formal framework for investigating the biochemical reactions inside living cells. Computation goes forward by applying reactions to a set of entities, called a state, creating a new state. Each reaction has a set of reactants facilitating its application and a disjoint set of inhibitors blocking the reaction from occurring. Successfully applying a reaction results in its products.

The model of Reaction Systems is entirely set-based, taking a qualitative approach to resources. Consequently, reactions are non-conflicting, both on their consuming and producing ends. Regarding facilitation, reactions can be enabled

even if their reactant sets overlap, allowing each to produce results. Then, the results are also non-conflicting, thanks to the set-based nature of the model.

The subsequent application of reactions to the resulting products is called an interactive process. It is interactive because, apart from the results of the previously applied reactions, each state may also incorporate arbitrary entities as input. Such an interactive process is a finite sequence of steps in which new states are created rather than transformed from the previous states. The no-permanency concept governs the creation of new states: if any reaction in the current step does not produce a given entity and is not present in the following input, it will disappear.

In what follows, we briefly introduce the formal counterparts of the above notions.

Let S denote a finite set of entities, called the *background set*. A *reaction* a is a triplet of finite sets $a = (R_a, I_a, P_a)$ where each set is a subset of S . The sets R_a, I_a and P_a contain the *reactants*, *inhibitors* and *products* of the reaction.

A *reaction system* is an ordered pair $\mathcal{A} = (S, A)$. The background set S is a finite set of entities, while A is the set of reactions.

An *interactive process* in a reaction system $\mathcal{A} = (S, A)$ is a pair $\pi = (\gamma, \delta)$ of finite sequences, such that γ is the *context sequence*, and δ is the *result sequence*, defined as $\delta = D_0, D_1, \dots, D_m$, where $D_0 = \emptyset$ and $D_i = \text{res}_A(D_{i-1} \cup C_{i-1})$ for all $1 \leq i \leq m$. We also define $\text{sts}(\pi)$ as the *state sequence* by $\text{sts}(\pi) = W_0, W_1, \dots, W_m$, where $W_i = C_i \cup D_i$ for $0 \leq i \leq m$.

Uncontrolled Backtracking in Reaction Systems

The first steps in our research were defining reversible Reaction Systems in terms of uncontrolled backtracking. We aimed to interpret the notion of backward determinism in the framework of reaction systems without any foundational modifications or extensions.

While the quantitative and non-conflicting nature of reactions allow for their parallel application, interactive processes offer a linear series of subsequent computational steps disallowing concurrent behavior. Such a way of functioning leads to a sequential model, very close to finite transition systems (or finite automata). The concept of reversibility in the context of these types of computational models is relatively straightforward. A model is reversible if it is “backward deterministic”, that is, if each of its computational configurations (or states) has at most one predecessor, or in other words, no state is accessible from two distinct states. In such a model, we can reverse computation by backtracking our way through the predecessor states to the desired state.

Definition. Let $\mathcal{A} = (S, A)$ be a reaction system and $\pi = (\gamma, \delta)$ be an interactive process in \mathcal{A} , such that $\gamma = C_0, C_1, \dots, C_n$ and $\text{sts}(\pi) = W_0, W_1, \dots, W_n$.

A state W_i , $1 \leq i \leq n$, has *multiple predecessors* if there exists $W'_{i-1}, C'_{i-1} \subseteq S$ such that $W'_{i-1} \neq W_{i-1}$, but $\text{res}_A(W'_{i-1}) \cup C'_{i-1} = W_i$. If there is no such W'_{i-1} , then W_i has a *unique predecessor*.

The interactive process π is *reversible*, if every state W_i , $1 \leq i \leq n$, has a unique predecessor.

According to the general notion of reversibility, every state must have a unique predecessor. However, reversing execution from such an empty result set would be equivalent to obtaining “something from nothing”. Therefore, we only considered processes in which this restart does not occur.

Definition. Let \mathcal{A} be a reaction system and $\pi = (\gamma, \delta)$ be an interactive process in \mathcal{A} such that $\delta = D_0, D_1, \dots, D_n$. The interactive process π is *non-restarting* if $D_i \neq \emptyset$, $1 \leq i \leq n$.

Definition. A *reaction system* \mathcal{A} is *reversible*, if every non-restarting interactive process in \mathcal{A} is reversible.

Then, our first thesis is concerned with the necessary and sufficient conditions for the reversibility of Reaction Systems (Theorem 3.1, based on Lemmas 3.1-3.3 and Corollaries 3.1, 3.2).

Thesis 1

Let $\mathcal{A} = (S, A)$ be a reaction system with $S = \Sigma_p \cup \Sigma_c$ where Σ_p is the product alphabet and Σ_c is the context alphabet (Σ_p and Σ_c are not necessarily disjoint). \mathcal{A} is reversible, if and only if the following conditions hold.

- (1) Different sets of jointly enabled reactions result in different products.
- (2) Different, non-empty subsets of the background set enable different reactions.
- (3) There are no two result sets such that the two sets only differ by items in Σ_c .

Controlled Backtracking in Reaction Systems

Models that implement uncontrolled reversibility only define the *how* of backward computation, but they give no hint about *when* the direction of computation should change. Hence, forward and backward steps can freely come after each other, resulting in a non-deterministic model. Thus, we continued our research by adding external control over the direction of the computation.

We exploited the interactive nature of Reaction Systems by making the environmental input control the direction of the computation. The system performs a backward computation when a rollback symbol, ρ , is present in the context. Conversely, the absence of ρ signals a forward computation.

Since the above control over reversibility extends the reversible model, we called the resulting computational devices simulators. They are simulators as they are able to compute the backward and forward steps of an underlying uncontrolled system while extending it with external control.

In such a system, interactive processes can be split into one or more subsequences. The first one always represents a forward computation of the simulated system. Then, the second subsequence corresponds to a backward computation, undoing some actions computed by the first subsequence. Afterward, another forward subsequence follows, and so on.

Definition. Let \mathcal{A} be a reaction system, $\pi = (\gamma, \delta)$ be an interactive process in \mathcal{A} , with $\gamma = C_0, \dots, C_n$, $\delta = D_0, \dots, D_n$, and let $\rho \in S$ be a special entity in the background set. π is a *well-formed simulating interactive process* if the following

conditions hold for every $0 \leq i \leq n$:

- If $D_i \subseteq \Sigma_c$, then $\rho \notin C_i$.
- If $\rho \in C_i$, then $C_i = \{\rho\}$.

Definition. Let $\mathcal{A} = (S, A)$ and $\mathcal{B} = (S \cup \{\rho\}, B)$ be two reaction systems. The system \mathcal{B} *interactively simulates* the interactive processes of \mathcal{A} if the following conditions hold.

- (1) For every interactive process π in \mathcal{A} , there is a well-formed simulating interactive process σ in \mathcal{B} such that $\text{sts}(\pi) = \text{sts}(\sigma)$.
- (2) Every well-formed simulating interactive process σ in \mathcal{B} can be split into an alternating series of forward and backward interactive processes in \mathcal{A} .

According to the above definition, the simulating system can compute everything that the original simulated system is capable of computing; furthermore, it can traverse back and forth among the states of the simulated system.

The second thesis of the dissertation is the construction of simulator systems from existing reversible systems (Theorem 4.1, based on Lemmas 4.1-4.3).

Thesis 2

For any reversible reaction system $\mathcal{A} = (S, A)$, we can construct a reaction system \mathcal{B} that interactively simulates \mathcal{A} by extending S with a rollback symbol ρ and A with a set of inverse reactions, producing the unique predecessors of the states of \mathcal{A} .

Transition Graphs of Backtracking Reaction Systems

As reversible reaction systems seem relatively restricted, our subsequent research question was determining the class of the possible computations they can perform. However, instead of precisely defining their computational capabilities, we took a more intuitive route by constructing and examining the so-called transition graphs of the different models. Given a system, such a graph contains every state of every interactive process. Thus, by studying these graphs, we can estimate the model's intuitive computational power.

Transition graphs were first introduced in [4] as vertices representing the subsets of the background set connected by directed edges equivalent to the relation of “can be obtained from”. Our definition restricts the vertices to result sets reachable from the initial empty result set. A further change is the labeling of the edges. Since we wished to emphasize the role of the input, our definition labels edges with inputs from the environment. Such an edge is drawn between two vertices if reactions are applied to the union of the source vertex, and the label produces the destination vertex.

Definition. Let $\mathcal{A} = (S, A)$ be reaction system. The *transition graph* of \mathcal{A} is the graph $\text{TG}_{\mathcal{A}} = (V, E)$, where V is the set of vertices containing a vertex for each reachable result set, and E is the set of edges with a directed edge from D to D' if $\text{res}_{\mathcal{A}}(D \cup C) = D'$ where C is the edge label.

Our third thesis is related to the transition graphs of reversible variants. The first part of the thesis is the following (Theorems 5.1 and 5.2).

Thesis 3.A

The transition graph of a reversible reaction system is either a single vertex or a directed rooted tree with all the edges pointing away from the root.

If arbitrary initial product sets are allowed, the transition graph can also be a directed cycle, such that each vertex of the cycle can be the root of a tree with edges pointing away from the cycle.

Our notion of reversibility revolves around the unique predecessors of state sets. If a combination of reaction results and context entities has precisely one way to be produced, then it has a unique predecessor. To relax these constraints, we introduced reversibility with lookbehind, inspired by finite state automata. These systems can inspect both the current state and the previous context set; consequently, multiple states can produce the same result sets, given that they include distinct contexts. As a result, we get a computational device that is similar to reversible finite transition systems. This is summarized in the second part of the thesis (Proposition 5.1, based on Theorems 5.3 and 5.4).

Thesis 3.B

The state transition graph of any reversible finite transition system corresponds to the transition graph of a reaction system reversible with lookbehind. Vice-versa, the transition graph of any reaction system reversible with lookbehind corresponds to the state transition graph of a reversible finite transition system.

Reversibility in Communicating Reaction Systems

Our initial motivation was experimenting with different reversibility paradigms, so we focused on causal consistency after backtracking. Backtracking is best suited for computational models in which the concept of the last action is well-defined. Once we introduce concurrency, however, the definition of the last action is not that clear anymore. As many computations might have occurred in the system concurrently, imposing a single, exact ordering on backward actions would be overly restricting.

A paradigm that pairs concurrency and reversibility is called causal-consistent reversibility, introduced by Danos and Krivine [2]. Causal-consistent reversibility establishes an ordering based on the causal dependencies between the actions, relating reversibility and causality. It says that we can only reverse a computational step once we reverse all of its consequences. Thus, the concept of consequence (contrary to backtracking’s concept of “last performed action”) is fundamental to constructing models according to this paradigm.

Since causal consistency relates reversibility and concurrency, we first needed an appropriate extension to the base model. Thus, we investigated Communicating Reaction Systems with Direct Communication (cdcR Systems), initially defined by Csuhaaj-Varjú and Sethy [1]. This model organizes an arbitrary number of reaction systems into a virtual graph. The individual systems (called components) can communicate with each other by sending and receiving products. Nevertheless, the computational steps are synchronous, resulting in a lack of concurrency.

Because of its synchronous computational behavior, a cdcR system is essentially a compartmentalized version of a single reaction system with a straightforward encoding between the two (as shown by Csuhaj-Varjú and Sethy in [1]). Every global state of the cdcR system translates to a state in an ordinary reaction system. Therefore, by showing that the global state has a unique predecessor, we guarantee the same for the translated state, resulting in backward determinism. The most straightforward approach is constructing the system only from individually reversible components; however, this is not a requirement. The first part of the fourth thesis of the dissertation summarizes these results (Propositions 6.1 and 6.2).

Thesis 4.A

If the components of a synchronized communicating reaction system (cdcR system) are reversible reaction systems, then the communicating system is backtrack-ing reversible, but cdcR systems with non-reversible components might also be reversible.

The first step away from backtracking was defining a concurrent modification of cdcR systems called Distributed cdcR Systems (d-cdcR Systems). We did so using two ingredients. First, we removed the synchronization between component interactive processes by allowing external control to decide which components should compute. Second, we introduced the notion of blocking, which refers to a component's inability to step forward. If a component cannot apply any reactions, we say it is blocked and cannot continue with its computation.

After enabling concurrent computation, we focused on our approach to reversibility. On a high level, the definition of causal consistency says that we can reverse any action that has no consequences left. Even without the precise notion of consequence, we can imagine the following scenario: if component \mathcal{A} communicates with component \mathcal{B} , which, in turn, proceeds computing, then one cannot reverse the communication from component \mathcal{A} immediately. Before that, one must undo the subsequent steps of \mathcal{B} , computed using the symbols received from \mathcal{A} . On the other hand, components that do not communicate with each other can be reversed in any order.

Thus, we first needed to ensure that the individual components were reversible. We did so by requiring that each component of a reversible d-cdcR system is locally reversible (as in the case of the backtracking Reaction Systems). As a result, we ensure a uniquely determined predecessor for each result set that might occur. The second part is recording the communication flow between the components. We do so by introducing two stack families for each system component: *send* and *recv*. Given a step j , if the component \mathcal{A}_i applies reactions that result in products targeting some other component \mathcal{A}_k , then, in the next step $j + 1$, the new result set of \mathcal{A}_i , D_{j+1}^i is placed onto its *sent-to-k* stack, $send_{j+1}^{i,k}$. Since our definition of reversibility and, in particular, unique predecessors forbids computational cycles, the result set placed onto a *send* stack precisely determines when the component sent the symbols. Therefore, using the *send* stacks, we can keep track of the targets and times of outgoing communications. The *recv* stacks work similarly with an important exception: they also record the received symbols. Hence,

each entry contains the result set in which component \mathcal{A}_i received the communication and the actual symbols sent by the origin, \mathcal{A}_k .

We paired the above ideas with the axiomatic framework of Lanese, Phillips, and Ulidowski, based on labeled transition systems [5]. In this framework, they provide a set of axioms and then derive more complex properties from them. The idea is that, given a computational model, it is sufficient to verify these individual axioms rather than to provide elaborate proofs for properties, such as causal consistency, directly. This approach forms the basis of the second part of the fourth thesis (Proposition 7.2, based on Proposition 7.1 and Lemmas 7.1-7.6).

Thesis 4.B

If the components of a distributed communicating reaction system (d-cdcR system) are reversible reaction systems, then by using stacks to record the communication between the components, we can obtain a causally consistent distributed system.

References

- [1] Erzsébet Csuhaj-Varjú and Pramod Kumar Sethy. „Communicating Reaction Systems with Direct Communication”. In: *Membrane Computing*. Ed. by Rudolf Freund et al. Cham: Springer International Publishing, 2021, pp. 17–30. ISBN: 978-3-030-77102-7.
- [2] Vincent Danos and Jean Krivine. „Reversible Communicating Systems”. en. In: *CONCUR 2004 - Concurrency Theory*. Ed. by Philippa Gardner and Nobuko Yoshida. Lecture Notes in Computer Science. Berlin, Heidelberg: Springer, 2004, pp. 292–307. ISBN: 9783540286448. DOI: 10.1007/978-3-540-28644-8_19.
- [3] A. Ehrenfeucht and G. Rozenberg. „Reaction Systems”. In: *Fundam. Inf.* 75.1–4 (Jan. 2007), pp. 263–280. ISSN: 0169-2968.
- [4] Daniela Genova, Hendrik Jan Hoogeboom, and Nataša Jonoska. „A graph isomorphism condition and equivalence of reaction systems”. In: *Theoretical Computer Science* 701 (2017), pp. 109–119.
- [5] Ivan Lanese, Iain Phillips, and Irek Ulidowski. „An Axiomatic Approach to Reversible Computation”. In: *Foundations of Software Science and Computation Structures*. Ed. by Jean Goubault-Larrecq and Barbara König. Cham: Springer International Publishing, 2020, pp. 442–461. ISBN: 978-3-030-45231-5.

List of relevant publications

- [J1] Attila Bagossy and György Vaszil. „Controlled reversibility in communicating reaction systems”. In: *Theoretical Computer Science* 926 (2022), pp. 3–20. ISSN: 0304-3975. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.tcs.2022.05.030>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304397522003528>.
- [J2] Attila Bagossy and György Vaszil. „Simulating reversible computation with reaction systems”. In: *Journal of Membrane Computing* 2 (Oct. 2020), pp. 179–193. DOI: 10.1007/s41965-020-00049-9.
- [I1] Attila Bagossy and György Vaszil. „Transition Graphs of Reversible Reaction Systems”. In: *Membrane Computing*. Ed. by Rudolf Freund et al. Cham: Springer International Publishing, 2021, pp. 1–16. ISBN: 978-3-030-77102-7.



Registry number: DEENK/459/2023.PL
Subject: PhD Publication List

Candidate: Attila Bagossy
Doctoral School: Doctoral School of Informatics
MTMT ID: 10090527

List of publications related to the dissertation

Foreign language international book chapters (1)

1. **Bagossy, A.**, Vaszil, G.: Transition Graphs of Reversible Reaction Systems.
In: Membrane Computing, 21st International Conference, CMC 2020, Virtual Event, September 14-18, 2020, Revised Selected Papers. Eds.: Rudolf Freund, Tseren-Onolt Ishdorj, Grzegorz Rozenberg, Arto Salomaa, Claudio Zandron, Springer, Cham, 1-16, 2021, (Lecture Notes in Computer Science, ISSN 0302-9743 ; 12687) ISBN: 9783030771010

Foreign language scientific articles in international journals (2)

2. **Bagossy, A.**, Vaszil, G.: Controlled reversibility in communicating reaction systems.
Theor. Comput. Sci. 926, 3-20, 2022. ISSN: 0304-3975.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.tcs.2022.05.030>
IF: 1.1
3. **Bagossy, A.**, Vaszil, G.: Simulating reversible computation with reaction systems.
J. Membr. Comput. 2 (3), 179-193, 2020. ISSN: 2523-8906.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1007/s41965-020-00049-9>

