

セルオートマトンの自己安定性とスマートマテリアル

Self-stability of cellular automata and smart materials

萩谷昌己¹ 本宮泰河¹ 矢川晃¹

Masami Hagiya¹, Taiga Hongu¹, and Akira Yagawa¹

¹東京大学情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻

¹Department of Computer Science,
Graduate School Information Science and Technology,
University of Tokyo

Abstract: In this presentation, we discuss self-stability of cellular automata in a context of implementing smart materials by molecules or reaction-diffusion systems. Self-stability is an important property of distributed systems in general. If a system is self-stable, it can recover its desirable state even under external noises or disturbances. Therefore, if a smart material is implemented as self-stable cellular automata, it gains the ability of self-repair in addition to self-organizing pattern formation and pattern recognition. We have proposed a restricted class of asynchronous cellular automata, called gellular automata, and have shown self-stability of some typical distributed algorithms in gellular automata (maze solving, 2-distance coloring and spanning tree construction). In addition to introducing those results, we also give an overview of research in DNA computing, molecular computing and molecular robotics for realizing cellular automata by molecules or reaction-diffusion systems in gel materials.

なぜセルオートマトンか

DNA コンピューティングの分野では、DNA などの分子を用いてセルオートマトンを実現する研究が盛んに行われている。なぜ、セルオートマトンなのだろうか。

分子による計算

分子による計算の最初の試みは、分子でチューリング機械を作る思考実験であった。分子チューリング機械は、歴史的には Bennett の「生体コンピュータ」に始まるだろう。その後もチューリング機械や有限オートマトンの提案は繰り返されている。たとえば、DNA オートマトンがその典型である。

しかしながら、一つの分子による計算には限界がある。そこで、溶液による計算の可能性が探求された。Adleman のデータ並列計算はこの文脈の中にあると考えられる。

以後、DNA コンピューティングの分野では、論理回路からニューラルネットワークへと研究は進んでいる。その中でシーソーゲートなどの論理ゲートが開発された。また、化学反応のモデルである CRN (chemical reaction network) は、溶液による計算のための統一的な標準モデルとして広く用いられており、

CRN による計算に関する理論的な研究も盛んに行われている。

しかし、一様な空間である溶液には、計算の限界がある。そこで、空間をセルに分割した計算モデルであるセルオートマトンを、分子を用いて実現しようとする研究が始まった。歴史的には前後するが、DNA タイルの自己組織化もセルオートマトンの一種である。各タイルが置かれる位置がセルであり、自己組織化の過程で各セルは、何もない状態からタイルが埋まった状態に遷移する。

スマートマテリアル

スマートマテリアルは、分子コンピューティングおよび分子ロボティクスのキラードアプリケーションと考えられている。セルオートマトンがマテリアルとして実装されれば、自己集合、自己組織化 (パターン形成)、さらに、自己修復 (自己安定) の機能を持ったマテリアルが実現する。さらに、パターン認識の機能を持たせることができる。たとえば、人工血管をこのようなスマートマテリアルによって実装すれば、生体内の適切な箇所人工血管が自律的に形成されるとともに、血管の変形や閉塞を認識して自己修復するだろう。

さらに、外部の刺激により適切な機能を学習する

ようなスマートマテリアルも構想することができる。たとえば、Hagiya たちは三次元のセル空間内で入出力例から論理回路を形成するセルオートマトンの設計を進めている。

なぜ離散か

以上のようなスマートマテリアルを構想するとき、なぜ離散かという疑問が湧くかもしれない。連続場でも同様の機能を実現できるのではないか。たとえば、チューリングパターンを活用することが考えられるかもしれない。

しかし、連続場の理知的な設計は一般的に極めて難しい。もちろん、連続場の設計原理を構築することも重要かつ興味深い研究テーマであるが、セルオートマトンに関するこれまでの研究の蓄積を考慮すれば、離散モデルにおいて設計を行い、その結果を連続場（反応拡散系）によって実装するアプローチは妥当と考えられる。

また、次節で述べるように、分子レベルの実装は自然に離散であるので、セルオートマトンとの親和性は高い。

セルオートマトンの実装

DNA コンピューティングの分野において、セルオートマトンを実装する試みは盛んに研究されてきたが、いまだに決め手といえるものはない。大きく、分子レベルによる実装方法と反応拡散系による実装方法が提案されている。

分子レベル

分子レベルの実装の試みとしては、2005 年の Yin, Sahu, Turberfield, Reif による提案がある[1]。この分野の著名な研究者によるものであるが、意外と引用は少ない。一次元のトラック上に一本鎖部分を持つ二本鎖 DNA を生やして、制限酵素を用いてその配列を順次変化させるという提案である。反応系は非常に複雑であり、実装の可能性は低いと考えられる。

Qian, Winfree は 2014 年に CRN on a surface を提案している[2]。ここでも、各セルは一本鎖部分を持つ二本鎖 DNA によって表現される。二本鎖のうちの一方の鎖を、鎖置換反応によって入れ替えることで、状態遷移を実現している。隣合う二つのセルが同時に状態を遷移させる。すなわち、 $A+B \rightarrow C+D$ という反応によって、A を状態とするセルは状態 C に遷移し、B を状態とするセルは状態 D に遷移する。 $A+B \rightarrow C+D$ は CRN の最も基本的な形であり、特にポピュレーションプロトコルと呼ばれている。Qian, Winfree の提案は、ポピュレーションプロトコルを表

面上の二次元のセル空間で実現しようというものである。彼らは非常に巧妙な鎖置換反応を提案しているが、実現可能性は未知である。一般に、隣り合う二分子の状態に依存して、二分子の両方を変化させる反応を設計することは容易ではない

以上で紹介したように、分子レベルの一次元と二次元の実装の提案はあるが、三次元の実装の困難さは明らかだろう。

反応拡散系

反応拡散系によってセルオートマトンを実装する提案も行われている。2014 年の Scalise, Schulman の提案が典型的である[3]。

分子ロボティクスの研究プロジェクトにおいても、村田たちが活発にゲルの中の反応拡散系によってセルオートマトンを実装することを試みてきた[4]。その過程で、ゲルによる実装を想定したセルオートマトンの計算モデルとして、ゲルオートマトンが提案された。

ゲルオートマトン

ゲルオートマトンは、非同期のセルオートマトンの制限されたモデルである[5]。各セルは、その近傍に指定された状態のセルがあるか、ないかのみによって状態遷移を行う (boolean totality)。ただし、各セルは自分と同じ状態のセルを認識することができない (non-camouflage)。また、各セルは非同期的に遷移する (asynchrony)。すなわち、遷移しても遷移しなくてもよい。

これまでに、ゲルオートマトンが十分な計算能力を持っていることが示されている。チューリング計算可能性は Yamashita et al. によって 2017 年に示された[5]。(2020 年にはジャーナル論文が発表されている[6]。)また、ポピュレーションプロトコル ($A+B \rightarrow C+D$ という形の CRN) のゲルオートマトンによるシミュレーションが可能であることは、2018 年に Yamashita, Hagiya によって示された[7]。

自己安定性

自己安定性は分散システムに関する重要な性質である。以下では、セル空間の大局的状态のことを状況と呼ぶ。

自己安定性の定義

自己安定性 (self-stability) は、安全性と到達可能性から成り立っている。

到達可能性 (reachability) とは、いかなる初期状況

からでも所望の状況に必ずたどり着くことをいう。一般的に、到達可能性は公平な実行を仮定して示される。また、初期状況に制限を付けることもある。

安全性 (safety) は、所望の状況にたどり着いたらずっと所望の状況に留まることをいう。

自己安定性は、外乱等により所望の状況が壊れても修復されることを意味し、スマートマテリアルにとって望ましい性質である。

自己安定性の議論（証明）

自己安定性を示すことは容易ではない。以下では、そのための一つのアプローチを紹介する。

まず、所望の状況の条件を、各セルの局所的な条件によって表現する。

次に、局所的な条件がセルの状態遷移によって保存されることを示す。これによって安全性が示される。

さらに、局所的な条件が満たされる状況が、公平性のもとで、必ず達成されることを示す。これによって到達可能性が示される。ただし、状況が無限の場合は、局所的な条件が満たされる部分状況が、公平性のもとで、全方向に拡大する、といった議論が必要になる。

実際に、以上のアプローチを用いてこれまでに、Yamashita, Yagawa, Hagiya によって迷路[8]、Hongu, Hagiya によって、迷路に加えて2距離彩色および全域木[9]、Yagawa, Hagiya によって同心菱形を解く、もしくは、構成するゲルオートマトンが提案され、それらの自己安定性が示されている。

課題

分子コンピューティングおよび分子ロボティクスのコンテキストにおいては、やはり、今後も実装に向けた努力を継続すべきであろう。

また、反応拡散系に加えて、分子レベルの実装も検討していくべきである。

いずれのアプローチで実装するにせよ、具体的な実装方法が開発されれば、それに適したより制限されたモデルが必要になると考えられる。その一方で、可能な実装を想定してモデルを拡張することも試みるべきである。拡張の可能性の一つとして、セル空間に方向性を導入することが考えられる。セル空間の方向性は、電場、磁場、濃度勾配などによって実装可能である。

また、ゲルオートマトンの一般的な設計原理も構築していくべきである。すなわち、目的の大域的な機能・性質を、局所的な状態遷移規則に還元する設計論が求められる。

最後に、スマートマテリアルの本格的な実装のためには、パターン認識、自己修復などに関して、効率の解析および改善のための研究が期待される。

謝辞

本研究の一部は、科研費挑戦的研究（萌芽）17K19961 の助成による。

参考文献

- [1] Peng Yin, Sudheer Sahu, Andrew J. Turberfield, John H. Reif: Design of Autonomous DNA Cellular Automata. DNA 2005: 399-416
- [2] Lulu Qian, Erik Winfree: Parallel and Scalable Computation and Spatial Dynamics with DNA-Based Chemical Reaction Networks on a Surface. DNA 2014: 114-131
- [3] Dominic Scalise, Rebecca Schulman: Emulating Cellular Automata in Chemical Reaction-Diffusion Networks. DNA 2014: 67-83
- [4] Keita Abe, Satoshi Murata: Programming Methods for DNA-Based Reaction-Diffusion Systems. New Gener. Comput. 38(2): 379-393 (2020)
- [5] Tatsuya Yamashita, Teijiro Isokawa, Ferdinand Peper, Ibuki Kawamata, Masami Hagiya: Turing-Completeness of Asynchronous Non-camouflage Cellular Automata. AUTOMATA 2017: 187-199
- [6] Tatsuya Yamashita, Teijiro Isokawa, Ferdinand Peper, Ibuki Kawamata, Masami Hagiya: Turing-completeness of asynchronous non-camouflage cellular automata. Inf. Comput. 274: 104539 (2020)
- [7] Tatsuya Yamashita and Masami Hagiya: Simulating Population Protocols by Gellular Automata, 2018 57th Annual Conference of the Society of Instrument and Control Engineers of Japan (SICE): 1579-1585
- [8] Tatsuya Yamashita, Akira Yagawa, Masami Hagiya: Self-stabilizing Gellular Automata. UCNC 2019: 272-285
- [9] Taiga Hongu, Masami Hagiya: Self-stabilizing Distributed Algorithms by Gellular Automata. AUTOMATA 2020: 86-98