Válasz Backhausz Ágnes opponensi bírálatára

Egyenként válaszolok a felmerült kritikákra, kérdésekre. Először a szabad formátumban megfogalmazott észrevételekre reagálok, majd utána tételesen az opponensi kérdésekre.

A dolgozat több helyen kevésbé részletesen mutatja be, hogy az elért eredmények a szakirodalomban található cikkekhez képest miben jelent újdonságot, illetve hogy az adott problémakörrel kapcsolatban mik a legújabb ismert eredmények (a hivatkozásoknak is csak egy kisebb része vonatkozik az utóbbi 10 évben megjelent cikkekre).

Válasz: A szakirodalmi ismertetés hiányainak három oka is van: *i)* Ezeken a területeken elég nehéz új eredményeket elérni, így vannak olyan területek, ahol nincsenek érdemi eredmények hosszú ideje, *ii)* az általam vizsgált kérdésekhez lazábban kapcsolódó eredmények esetén technikailag nehéz lett volna elmagyarázni, hogy ezek az eredmények hogyan kapcsolódnak az általam vizsgált kérdésekhez, így terjedelmi problémák miatt kihagytam ezek tárgyalását, *iii)* ennek ellenére van haladás ezen a területen, és néhány komoly eredmény az értekezésem beadása után jött ki. Mindegyikre mutatok példákat.

A Latin négyzeteken bolyongó Jacobson-Matthew Markov láncot 1996-ban publikálták [10]. Random Latin négyzetek előállítására sok helyen szükség van, pl. kétfaktoros statisztikai vizsgálatok kísérlettervezésnél, ld. pl. `https://online.stat.psu.edu/stat503/lesson/4/4.3`. A Latin négyzetek nagyon reguláris diszkrét matematikai struktúrák: minden sorukban és minden oszlopukban minden szám pontosan egyszer szerepel. Számos példát látunk a szakirodalomban, hogy a regularitás segíthet Markov láncok gyors konvergenciáját bizonyítani. Ennek ellenére az elmúlt 28 évben senkinek nem sikerült bizonyítania a Jacobson-Matthew Markov lánc gyors konvergenciáját (vagy cáfolni, de az általánosan elfogadott sejtés, hogy ez a Markov lánc gyorsan kever). Egy másik példa lehet az eredmények hiányára egy saját kutatásomhoz kapcsolódó téma, a legtakarékosabb DCJ rendezési szcenáriók mintavételezése és leszámlálása. 2009-ben Braga és Stoye mutatott egy irreducibilis Markov láncot, amelyben egy lépésben három konszekutív DCJ operációt változtatunk meg [2]. Természetes sejtés, hogy ez a Markov lánc gyorsan kever. Ehelyett Eric Tannierrel csak egy sokkal bonyolultabb Markov lánc gyors keveredését tudtuk bizonyítani (ld. az értekezés 6. fejezete). A mi eredményeink részben felhasználhatóak lennének ahhoz, hogy bizonyítsuk a Braga-Stoye Markov lánc gyors keveredését. A bizonyítás hiányzó része a két genom kapcsolatát bemutató szomszédsági gráfban (41. definíció az értekezésben) levő körök rendezéséhez kapcsolódik. Ouangraoua és Bergeron 2009-ben megmutatta, hogy FP-ben van a legtakarékosabb DCJ rendező szcenáriók leszámlálása, ha a szomszédsági gráf csak körökből áll [15]. A promléma önhasonlósága miatt az ilyen esetekben polinom időben élesen egyenletes eloszlásból lehet mintavételezni (Eric Tannierrel közös munkánkban mi is kihasználtuk ezt a tényt). Ráadásul a szcenáriók leszámlálásánál enumeratív kombinatorikában nagyon jól ismert eszközöket kell használni: parkolási függvényeket, Prüfer kódokat, Catalán struktúrákat. Ráadásul nagyon sok eredmény van a szakirodalomban Catalán struktúrákon bolyongó Markov láncok gyors konvergenciájáról. Ennek ellenére a mai napig senkinek sem sikerült bizonyítani a Braga-Stoye Markov lánc gyors keveredését.

Lazán kapcsolódó eredményekre egy példa lehet Stasys Jukna Sidon halmazok bonyolultságáról végzett kutatásai, pl. [12]. Ez a következőképpen kapcsolódhat az algebrai dinamikus programozáshoz. Cedric Saule és Robert Giegerich algebrai dinamikus programozást fejlesztett ki Pareto optimalizálásra [17]. Pareto optimalizálásban minden x objektumhoz két (vagy több) függvényt rendelünk, amelyet kettő (vagy több) dimenziós vektorral írhatunk le, pl. $(f_1(x), f_2(x))$. Ezeket a vektorokat kordinátánként összehasonlítva részben rendezzük, azaz $(f_1(x), f_2(x)) \preceq (f_1(y), f_2(y))$ akkor és csak akkor ha $f_1(x) \preceq f_1(y)$ és $f_2(x) \preceq f_2(y)$. A megoldástérben azokat a pontokat keressük, amelyekhez tartozó vektorok minimálisak ebben a részbenrendezésben. Ezeket a minimális értékeket hívjuk Pareto frontnak, amik páronként nem összehasonlíthatóak, azaz egy antiláncot alkotnak a részbenrendezésben. Egy ilyen algebrai dinamikus programozás általánosítása lehet a következő. Minden részbenrendezett $(S, \times, \preceq)$ félcsoportra definiálhatunk egy $(R, \oplus, \otimes)$ félgyűrűt a következőképpen, amelyet Pareto félgyűrűnek nevezünk. R elemei a $(S, \preceq)$ részben rendezett halmaz antiláncai. Minden $A_1, A_2 \in R$-re $A_1 \oplus A_2$-t az $A_1 \cup A_2$ halmaz minimális elemeiként definiálunk. Valamint, minden $A_1, A_2 \in R$-re $A_1 \otimes A_2$ a $\{a_1 \times a_2 | a_1 \in A_1 \ \wedge a_2 \in A_2\}$ halmaz minimális elemei. Minden ilyen félgyűrű alkalmazható algebrai dinamikus programozásban, és egy ilyen dinamikus programozási algoritmus annyi félgyűrű operációt fog alkalmazni, mint más félgyűrűk esetén. Azonban ha az algebrai dinamikus programozás során a fellépő antiláncok mérete exponenciálisan nő a feladat méretével, akkor a tényleges komputáció idő is exponenciáisan nőhet. Egy érdekes kérdés, hogy milyen szükséges és elégséges feltételeket lehet adni arra, hogy a Pareto front mérete egy algebrai dinamikus programozás során kis méretű maradjon. Ez kapcsolatban lehet azzal, hogy dinamikus programozás során mekkora Sidon halmazok állnak elő. Itt nem csak nagyon laza kapcsolatról van szó, hanem még megválaszolatlan nyitott kérdések is vannak.

További lehetséges példák lehetnek lazábban kapcsolódó eredményekre a gráf pontszínezések vagy független halmazok gráfokban. Gráfok élei helyett a pontjaikat is lehet jól színezni. Bár a pont-kromatikus szám meghatározása általában NP-nehéz, azonban ha $k \geq \Delta + 2$, ahol Δ a gráf maximális foka, akkor egy nagyon egyszerű Markov láncról, a Glauber dinamikáról az a sejtés, hogy gyorsan kever a k-pontszínezéseken. Ennek nagyon bőséges irodalma van, ld. pl. [3]. A Glauber dinamika egyszerűen egy pontnak a színét változtatja meg egy lépésben. Úgyszintén Glauber dinamikának hívják azt a procedúrát, amely gráfok független halmazain bolyong, és minden lépésben vagy kivesz, vagy betesz egy pontot. Ennek is nagyon-nagyon bőséges irodalma van, ráadásul az elméleti eredmények kapcsolatban vannak végtelen reguláris fákon megadott bizonyos random folyamatokkal, amely problémakörrel a Rényi Intézet munkatársai, többek között az opponens is sokat foglalkozik. Független halmazok irányában eljuthatunk a páros gráfok független halmazaihoz, és ott egy nagyon bizarr bonyolultságelméleti osztályhoz, a #BIS-teljes problémák osztályához, amely bioinformatikai problémák körében is megjelenik, ld. pl. [16]. A példákat nagyon hosszasan lehetne tovább sorolni.

Szintén lazán kapcsolódóhat az adott fokszámsorozat egyszerű gráf realizációin bolyongó Markov láncokhoz az adott fokszámsorozat hipergráf realizációin bolyongó Markov láncok. Ennek is elég bőséges irodalma van, ld. pl. [4], de itt saját eredmények is születtek az értekezésem beadása után, ld. [13]. Az értekezés után beadott új eredmények közül még megemlíteném a Heather S. Blake által vezetett kutatócsoport eredményeit, pl. [1], akik számos eredményt értek el genomátrendeződési kérdések bonyolultságelméletében. A kutatócsoport vezető a szerzőtársam (leánykori nevén Heather Smith), a kutatócsoport egyik tagja, Garner Cohran pedig 2012-ben nálam végezte el a bioinformatikai algoritmusok kurzust a BSM-en. Ennek a kutatócsoportnak az eredményeit bizonyosan említettem volna az értekezésemben, ha azok az értekezés benyújtása előtt kijöttek volna.

Opponensi kérdések

1. *A II. részben leírt "switch" műveletnek milyen általánosításai ismertek (esetleg más, vagy speciális szerkezetű gráfokra), és ezek közül melyekre lehetnek esetleg általánosíthatók a dolgozatban bemutatott módszerek?*

   Válasz: Számos általánosítás ismert, ezekből mutatok be néhányat.

   Irányított gráfoknál definiálhatjuk a tripla switch (tripla swap) operációt, amely három irányított élt vesz ki, és három irányított élt tesz be, úgy, hogy közben minden pont kifoka és befoka megmarad. Általános esetben a tripla switch 6 ponton hat, a hat ponton levő körben a meglévő és a nem meglévő élek alternálnak, valamint az élek irányítása is alternál. Azaz v_1-ből v_2-be megy él, v_3-ból v_2-be nem megy él, v_3-ból v_4-be megy él, stb. Speciális esetekben a 6 pont közül több egybeeshet, extrém esetben csak három ponton hat egy tripla switch, ebben az esetben egy irányított háromszögnek az irányítását fordítjuk meg. Könnyen belátható, hogy a tripla switch-ek szükségesek ahhoz, hogy egy irányított fokszámsorozat bármely realizációjából bármely másik relizációjába eljuthassunk. Valóban, tekintsük azt az esetet, amikor három pont mindegyikének pontosan 1 a befoka és 1 a kifoka. Ennek az irányított fokszámsorozatnak pontosan két realizációja van, a két lehetséges irányba irányított háromszög. Az egyik realizációból csak úgy tudunk eljutni a másik realizációba, ha kivesszük az irányított háromszög mindhárom élét, majd betesszük a három másik irányú élt. Egy 2010-ben az Electronic Journal of Combinatorics-ban megjelent cikkünkben bebizonyítottuk, hogy bármely D irányított fokszámsorozat esetén D egyik realizációjából bármelyik másikba eljuthatunk switchekkel és tripla switchekkel [9]. Ez az eredmény terjedelmi okokból nem került be az értekezésbe. A doktori értekezés 72-es tételében is említett 2022-es cikkben [5] definiáljuk a P-stabilitást irányított fokszámsorozatokra, és bizonyítjuk, hogy P-stabil irányított fokszámsorozatokon a switch és tripla switch Markov lánc gyorsan kever.

   2014-ben ökológusok javasoltak egy új Markov lánc Monte Carlo algoritmust előírt sor és oszlopösszegű, random 0-1 mátrixok generálására [18], azaz adott fokszámsorozatú páros gráfok generálására. Itt egy random perturbáció egy osztály két pontját, u_1-et és u_2-t tekinti, majd generál egy random k-t egyenletesen a 0 és m között, ahol $m := \min\{|N(u_1) \setminus N(u_2)|, |N(u_2) \setminus N(u_1)|\}$. Ezután k random elemet választ mind $N(u_1) \setminus N(u_2)$, mind $N(u_2) \setminus N(u_1)$-ből, és minden $N(u_1) \setminus N(u_2)$-ből választott v-re kiveszi az (u_1, v) élt, és beteszi az (u_2, v) élt. Hasonlóan, minden $N(u_2) \setminus N(u_1)$-ből választott v-re kiveszi az (u_2, v) élt, és beteszi az (u_1, v) élt. Magyarán, k párhuzamos switch-et csinál, átfedő pontok nélkül. Csak empirikus eredményeket közöl az így kapott Markov lánc konvergenciasebességéről. Elméleti korlátot adni ennek a Markov láncnak a keveredési idejéről meglepően nehéznek tűnik, nem látom, hogy bármelyik, az értekezésben bemutatott bizonyítási technika triviálisan alkalmazható lenne.

   Egy 2017-ben megjelent cikkünkben [6] foglalkoztunk a következő problémával. Legyen adva pontok két diszjunkt halmaza, U és V. Megadunk $U \cup V$-n egy fokszámsorozatot, valamint egy k nem-negatív egészet és csak azokat a realizációit tekintjük a megadott fokszámsorozatnak, amelyekben U és V között pontosan k darab él megy. Bebizonyítottuk, hogy bármely realizációból bármely másik realizációba eljuthatunk switchek és dupla switchek segítségével. Egy dupla switch egy 8 hosszú, alternáló él-nem él körön cseréli ki az éleket nem élekre és viszont. Egyelőre nem vizsgáltuk, hogy milyen fokszámsorozatokra és előírt k élszámra tudnánk a fenti switchekből és dupla switchekből álló Markov lánc gyors konvergenciáját bizonyítani, de elképzelhetőnek tartom, hogy reguláris, félig reguláris esetleg valamilyen P-stabil esetekre ez bizonyítható. Eleve a P-stabilitás egy izgalmas kérdés, hiszen a fokszámsorozat relizációi közül csak azokat nézzük, amelyekben pontosan k él megy U és V között. Nem világos, hogy mi legyen a P-stabilitás definíciójában szereplő kismértékű perturbáció. Csak a fokokat változtathatjuk meg, vagy esetleg k-t is meg lehet változtatni? Világos, hogy ha mind U-ban mind V-ben egy pontnak eggyel változtatjuk meg a fokát, akkor k-t is változtatni kell eggyel.

Az elmúlt pár évben sokat foglalkoztunk ún. hinge-flip operációkkal, amik tekinthetőek egy fél switchnek. Egy hinge flip egy gráf (u, v_1) élét kiveszi, és behúz egy új, eddig meg nem levő (u, v_2) élt. Egy további operáció a toggle in/out, amely kivesz vagy betesz egy élt egy gráfban, és egy negyed switchnek tekinthető. Látható, hogy ezek az operációk nem tartják meg a fokszámsorozatot. Mégis számos, sokszor meglepő eredmény született az elmúlt két évben ebben az irányban. Hinge-flip-ek, toggle in/out, valamint switch operációk segítségével definiáltunk egy Markov láncot amely olyan P-stabil fokszámsorozatok halmazához tartozó összes lehetséges realizációnak az egyenletes eloszlásához konvergál gyorsan, amelyben minden i-re a fokszámsorozat-halmaz bármely két sorozatában az i-edik fokok különbségének az abszolútértéke legfeljebb 1 [7]. A switch, hinge-flip és toggle in/out operációk általánosíthatóak 3-uniform hipergráfokra. Ezek segítségével adott fokszámú random 3-uniform hipergráfokat tudtunk generálni, amivel egy érzékenyebb χ^2 statisztika háttéreloszlását tudtuk meghatározni [13].

Hinge-flipek segítségével sikerült bizonyítani, hogy bizonyos adott korlátú fokszámsorozatok mindig grafikusak, sőt, egyszerű gráfok esetén az adott korlátú mindig grafikus fokszámsorozatok és az adott korlátú P-stabil fokszámsorozatok lényegében egybeesnek. Ezek az eredmények elbírálás alatt levő kéziratokban vannak még csak meg, eredményeket értünk el egyszerű gráfok [8] és 3-uniform hipergráfok [14] esetén is.

2. *A 12. fejezet eredményei közül van-e olyan, mely általánosítható arra az esetre, ha páros gráf helyett egy több osztályból (részből) álló gráfot, például Turán-gráfot tekintünk?*

   Válasz: Ez egy nagyon jó kérdés. Az általános stratégia a 12. fejezetben szereplő problémákra, hogy először struktúrákból struktúrákba majdnem-struktúrákon át megyünk (ld. még az értekezés 12.5. ábráját), majd ezeket a majdnem-struktúrákat javítjuk. A Markov lánc, ami a struktúrák terében marad minden lépésben a struktúrát elrontja egy javítás inverzével egy majdnem-struktúrába, a majdnem-struktúrák terében lép egyet, majd ezt a majdnem struktúrát megint kijavítja (ld. az értekezés 12.5. ábráját). A javításokra most itt nem részletezett algoritmikai és valószínűségi feltételek kellenek. Gráffaktorizációk esetén a félig regularitás tűnik szükségesnek ahhoz, hogy algoritmikailag és valószínűségekben megfelelő javításokat találjunk minden majdnem-struktúrára. Páros gráfok élszínezése esetén a javítás lehetőségét az garantálja, hogy egy alternáló színű út nem záródhat be olyan körbe, amely olyan színnel fejeződik be, mint amivel kezdődik, mert minden kör páros.

Így gráffaktorizációk esetén a Turán gráfokra vagy általánosabban k-partit teljes gráfokra (nem feltétlenül kiegyensúlyozott pontosztály méretekkel) az tűnik szükséges feltételnek, hogy valamennyi osztályon az előírt fokok regulárisak legyenek. Az, hogy ezen osztályok száma 1 vagy $k-1$ vagy $\lfloor \frac{k}{2} \rfloor$ vagy egy másik érték, az egy nagyon jó kérdés, ami egy újabb kiváló undergrad kutatási téma lehet, és valamilyen pozitív eredményt nagy valószínűséggel könnyen el lehet érni.

Élszínezések esetén már nem vagyok ennyire optimista, mivel k-partit teljes gráfokban $k > 2$ esetén lehetnek páratlan hosszú körök. Itt valami további feltétel kellene az alkalmas javítások létére.

Az adott keretrendszerből valamilyen kibújás lehet az, hogy ha sikerül struktúrákon és majdnem-struktúrákon bolyongó irreducibilis Markov láncot készíteni. Ha ebben a térben a struktúrák terének a mérete a teljes térhez képest csak polinom gyorsan tart a 0-hoz a bemenő feladat méretével, akkor egy ilyen Markov lánc (feltéve, hogy gyorsan keveredik) már alkalmas lehet struktúrák hatékony mintavételezésére. Szakirodalomból ismert példa ilyen Markov láncra a páros gráfok teljes párosításain és majdnem teljes párosításain bolyongó, gyorsan keveredő Markov lánc. Páros gráfok nagy osztályára lehet bizonyítani, hogy a teljes párosítások nem elhanyagolhatóan pici részét teszik ki ennek a térnek [11]. Ha elhanyagolható részt teszik ki a struktúrák a teljes térnek, akkor még lehet pl. Parallel Temperinggel próbálkozni, de ekkor a gyors konvergencia bizonyítása lehet nagyon nehéz.

Budapest, 2024. október 16.

Miklós István

Hivatkozások

[1] Bailey, L., Blake, H.S., Cohran, G., Fox, N., Levet, M., MAhmud, R., Matson., Singgih, I., Wang, X., Wiedemann, A. (2024). Complexity and Enumeration in Models of Genome Rearrangement. In: Wu, W., Tong, G. (eds) Computing and Combinatorics. COCOON 2023. Lecture Notes in Computer Science, vol 14422. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-031-49190-0_1

[2] Braga, M.D.V., Stoye, J. (2010) The Solution Space of Sorting by DCJ. Journal of Computational Biology, 17(9):1145–1165.

[3] Delcourt, M., Perarnau, G., Postle, L. (2018) Rapid mixing of Glauber dynamics for colorings below Vigoda's 11/6 threshold, `https://arxiv.org/abs/1804.04025`

[4] Dyer,M., Greenhill, C., Kleer, P., Ross, J., Stougie, L. (2021) Sampling hypergraphs with given degrees, Discrete Mathematics, 344(11):112566

[5] Erdős, E.L., Greenhill, C., Mezei, T. R., Miklós, I., Soltész, D., Soukup, L. (2022) The mixing time of the switch Markov chains: a unified approach, Eur. J. Comb., 99:103421.

[6] Erdős, E.L., Hartke, S.G., van Iersel, L., Miklós, I. (2017) Graph Realizations Constrained by Skeleton Graphs, Electronic Journal of Combinatorics, #P2.47

[7] Erdős, P.L., Mezei, T.R., Miklós, I. (2024) Approximate Sampling of Graphs with Near-P-stable Degree Intervals , Annals of Combinatorics, 28:223-256, https://doi.org/10.1007/s00026-023-00678-8.

[8] Erdős, P.L., Miklós, I., Soukup, L. (2024) Fully graphic degree sequences and P-stable degree sequences. `https://arxiv.org/abs/2405.12013`

[9] Erdős, P.L., Miklós, I., Toroczkai, Z. (2010) A simple Havel-Hakimi type algorithm to realize graphical degree sequences of directed graphs. Elec. J. Combinatorics 17(1):R66

[10] Jacobson, M.T., Matthews, P. (1996) Generating uniformly distributed random latin squares. J. Combin. Des., 4(6):404–437.

[11] Jerrum, M., Sinclair, A. (1989) Approximating the permanent. SIAM J. Comput. 18(6):1149–1178.

[12] Jukna, S. (2016) Tropical Complexity, Sidon Sets, and Dynamic Programming, SIAM Journal on Discrete Mathematics, 30(4):1095–7146.

[13] Hubai, A., Mezei, T.R., Béres, F., Benczúr, A., Miklós, I. (2024) Constructing and sampling partite, 3-uniform hypergraphs with given degree sequence, PLoS ONE, 19(5): e0303155.

[14] Li, R., Miklós, I. (2024) Dense, irregular, yet always graphic 3-uniform hypergraph degree sequences. `https://arxiv.org/abs/2312.00555`

[15] Ouangraoua, A., Bergeron, A. (2010) Combinatorial Structure of Genome Rearrangements Scenarios. Journal of Computational Biology, 17(9):1129–1144.

[16] Ponty, Y. (2021) Ensemble Algorithms and Analytic Combinatorics in RNA Bioinformatics and Beyond, PhD thesis, `https://theses.hal.science/tel-03219977/file/HDR-Ponty.pdf`

[17] Saule, C., Giegerich, R. (2015) Pareto optimization in algebraic dynamic programming. Algorithms Mol Biol 10, 22 `https://doi.org/10.1186/s13015-015-0051-7`

[18] Strona, G., Nappo, D., Boccacci, F., Fattorini, S., San-Miguel-Ayanz, J. (2014) A fast and unbiased procedure to randomize ecological binary matrices with fixed row and column totals. Nat. Commun. 5:4114 doi: 10.1038/ncomms5114.