Soliton automata: a computational model on the principle of graph matchings

Doktori értekezés tézisei

Krész Miklós

Témavezető:

Dr. Bartha Miklós

Egyetemi Docens

Szegedi Tudományegyetem

2004

Bevezetés

A molekuláris számítások elmélete napjainkban egy gyorsan fejlődő irányzat mind az elméleti mind az alkalmazás-orientált kutatások terén ([1],[27], [30]). Az egyik legígéretesebbnek tűnő alternatíva a hagyományos komputertechnológiával szemben az úgynevezett bioelektronika vagy molekuláris elektronika ([28]).

A bioelektronikus eszközök tervezése kapcsán az egyik legérdekesebb javaslattal F. L. Carter állt elő ([9]) az 1980-as években. A Carter koncepcióján alapuló úgynevezett *szoliton áramkör*ökben a kémiai komponenseket mint molekuláris szintű kapcsolóelemeket szénhidrogén-molekulaláncokkal kötnék össze, és az ezen láncokon végigvonuló úgynevezett "szoliton hullámzás" realizálná az elektronikus kapcsolásokat.

A szoliton áramkörök fejlesztése területén az 1990-es években jelentős kísérletek folytak ([19], [20], [21], és [22]), melynek során felmerült az igény, hogy egy alkalmas matematikai elmélettel támogassák ezen kapcsolóhálózatok fejlesztését és majdani verifikációját. Azonban M. P. Groves egy korai munkáját leszámítva ([18]) nem történt előrehaladás a fenti témakörben.

Ezen disszertáció a szoliton áramkörök matematikai modelljének, a szoliton automatának a vizsgálatával foglalkozik. A szoliton automata definíciója Jürgen Dassow és Helmut Jürgensen ([10]) nevéhez fűződik, akik a fenti modellt annak érdekében alkották meg, hogy a "szoliton hullámok" kapcsolóelemként való felhasználhatóságát formális matematikai keretek között lehessen vizsgálni.

Dassow és Jürgensen úttörő munkáját számos további publikáció követte a témában. A [11], [12] és [13] dolgozatokban a determinisztikus szoliton automaták néhány fontos speciális esete került leírásra a transzformációs monoid segítségével. Egy másik megközelítés alapján az erősen determinisztikus szoliton automaták homomorfan teljes osztályait jellemezte Gécseg és Jürgensen ([17]). Azonban egy olyan elmélet kifejlesztése továbbra is váratott magára, amely az alapobjektumként szolgáló szoliton gráfok struktúrális leírása segítségével alapot szolgáltatott volna a szoliton automaták további analíziséhez.

A fentiek mutatják, hogy mind az automatelmélet, mind az áramkörök tervezése szempontjából központi kérdés egy struktúrális elmélet kidolgozása. Ezen dolgozat motivációját a fenti felismerés adta és célként fogalmazódott meg, hogy a szoliton gráfok és ennek alapján a szoliton automaták egy részletes struktúrális leírását adjuk meg. A disszertációban szereplő elméleti eredmények algoritmikus következményeit is felvázoljuk, ami a szoliton áramkörök tervezésében és verifikációjában nyithat új távlatokat.

A tézisek erősen támaszkodnak az [4], [5], [6], [7], [8] és [25] munkáinkra. A [4]-ban közölt eredmények közül néhányat a disszertációban általánosabb formában mondunk ki és az algoritmikus következményeit is tárgyaljuk.

Szoliton automaták és a párosítások elmélete

A szoliton automaták analízisét a gráfokban értelmezett párosítások elméletére támaszkodva végezzük el. Egy *párosítás* alatt a gráf éleinek egy olyan M részhalmazát értjük, melyre igaz, hogy M különböző elemeinek nincs közös végpontja. A szoliton automaták és a párosítások kapcsolatára M. Bartha és E. Gombás mutatott rá a [3] dolgozatban.

A szoliton automata alapobjektuma az úgynevezett szoliton gráf, amely a megfelelő molekulalánc topológiai leírására szolgál. Ebben a modellben a gráf csúcspontjai az atomoknak (vagy az atomok egy csoportjának) felelnek meg, míg a kémiai kötéseket a gráf élei reprezentálják. Azon csúcspontokat melyek fokszáma 1 úgynevezett *külső csúcsok*ként különböztetjük meg, míg azon csúcsok, melyek fokszáma legalább 2, *belső csúcsok*nak nevezzük. A külső csúcsok a rendszer interfészeként szolgálnak, amelyen keresztül az elektronok elérhetik a molekulahálózat belső struktúráját. A belső csúcsok olyan atomoknak (vagy atomok egy csoportjának) felelnek meg, melyek pontosan egy szomszédjukhoz kapcsolódnak kettős kötéssel. Ezt a tulajdonságot a gráfmodellben a *teljes belső párosításokkal* írhatjuk le, azaz olyan párosításokkal, melyek minden belső csúcsot lefednek. A fentiekből adódóan egy *szoliton gráfot* egy olyan gráfként definiálhatunk, amely tartalmaz egy külső csúcsot, valamint rendelkezik egy teljes belső párosítással. Egy szoliton gráf teljes belső párosításaira *állapotok*ként is hivatkozunk, utalva a megfelelő molekulalánc modellezett állapotaira. A G szoliton gráf állapotainak (teljes belső párosításainak) halmazát $S(G)$ jelöli.

A szoliton átmenetek leírása érdekében a gráfmodellen definiálunk egy speciális alternáló sétát, az úgynevezett szoliton sétát, amely azt a hatást reprezentálja, amint egy szoliton hullám az útja során felcseréli a kettős és egyes kötéseket a szénhidrogén-molekulaláncban. A megfelelő gráfelméleti formalizmus érdekében vezessük be a következő jelölést: egy tetszőleges $\alpha = v_0, e_1, \ldots, e_n, v_n$ séta esetén jelölje $n_\alpha(j)$ ($j \in [n]$) az e_j él előfordulásainak a számát az $\alpha[v_0, v_j] = v_0, e_1, \ldots, e_j, v_j$ prefixben.

Definíció. A G szoliton gráf egy M állapotára vonatkozó *parciális szoliton séta* alatt egy olyan visszalépés-mentes $\alpha = v_0, e_1, \ldots, e_n, v_n$ ($n \geq 1$) sétát értünk, melyre érvényesek az alábbiak:

(a) v_0 egy külső csúcs;

(b) bármely $j \in [n-1]$ esetén, $n_\alpha(j)$ és $n_\alpha(j+1)$ paritása akkor és csakis akkor egyezik meg, ha e_j és e_{j+1} M-alternáló; azaz $e_j \in M$ és $e_{j+1} \notin M$ csak egyszerre állhat fenn.

Továbbá, egy parciális szoliton sétát *szoliton sétának* nevezünk, ha a fenti definícióban v_n szintén külső csúcs.

Az α *séta* M állapotban történő *realizálása* alatt azt értjük, hogy létrehozzuk az $S(M, \alpha)$ élhalmazt a következőképpen:

Bármely $e \in V(G)$ esetén, $e \in S(M, \alpha)$ akkor és csakis akkor, ha vagy $e \in M$ és e páros sokszor szerepel az α sétában, vagy $e \notin M$ és e páratlan sokszor szerepel az α-ban.

Igazolható, hogy amennyiben α egy szoliton séta, akkor $S(M, \alpha)$ szintén egy teljes belső párosítás lesz. Továbbá az is világos, hogy a *járhatatlan* élek – olyan élek melyek nem szerepelnek egy parciális szoliton sétában sem – nem befolyásolják a rendszer működését. Ezért bármely G szoliton gráf esetén, csak a *járható* élek (olyan élek, melyek nem járhatatlanok) játszanak szerepet a szoliton automaták leírásában. A fenti észrevételek adják a motivációt, hogy definiáljuk egy tetszőleges G szoliton gráf G^+ *járható részgráf*ját, amely alatt a járható élek által meghatározott gráfot értjük. Könnyen belátható, hogy G^+ szintén szoliton gráf.

A szoliton automata formális definíciójához szükségünk lesz egy további jelölésre:

Egy G szoliton gráf bármely M állapota és tetszőleges $v_1, v_2 \in V(G)$ külső csúcsok esetén jelölje

$$\mathcal{S}_G(M, v_1, v_2) = \{S(M, \alpha) \mid \alpha \text{ egy } M\text{-re vonatkozó szoliton séta, amely } v_1\text{-ből indul és } v_2\text{-ben fejeződik be}\}$$

Definíció. A G gráfhoz tartozó $\mathcal{A}(G) = ((S(G^+), (X \times X), \delta)$ *szoliton automata* alatt azt a nemdeterminisztikus véges automatát értjük, melyre a következők állnak fenn.

(a) G egy szoliton gráf,

(b) $\mathcal{A}(G)$ állapotainak $S(G^+)$ halmaza a G^+ állapothalmazával egyezik meg,

(c) $(X \times X)$ az input ábécé, ahol X jelöli G külső csúcsainak a halmazát,

(d) a $\delta : S(G^+) \times (X \times X) \to 2^{S(G^+)}$ átmenetfüggvény a következőképp definiált:

$$\delta(M,(v_1,v_2)) = \begin{cases} \mathcal{S}_{G^+}(M,v_1,v_2), & \text{ha } \mathcal{S}_{G^+}(M,v_1,v_2) \neq \emptyset \\ \{M\}, & \text{egyébként} \end{cases}$$

bármely $M \in S(G^+)$ és $v_1, v_2 \in X$ esetén.

Szoliton gráfok Tutte típusú jellemzése

Ebben a részben a [2] cikk eredményeit erősítjük. A fenti munka Tutte tételének ([29]) teljes belső párosításokra vonatkozó megfelelőjét tárgyalja. A klasszikus gráfelméletben korláthalmaznak (barrier) nevezzük azokat a csúcshalmazokat, melyekre a Tutte-Berge formulában egyenlőség áll fenn ([26]). Ezen fogalom nem terjeszthető ki analóg módon belső párosításokra, de az úgynevezett szétválasztó halmazok hasonló tulajdonságokat mutatnak, amennyiben maximálisak. Észrevételeinket két Tutte típusú tételben foglaljuk össze. Eredményeink megfogalmazásához szükségünk van néhány újabb definícióra .

Adott G szoliton gráf esetén azt mondjuk, hogy egy e él *megengedett* (*kötelező*), ha e szerepel G valamely (összes) teljes belső párosításában. A nem megengedett éleket *tiltott* éleknek nevezzük. A G gráf belső csúcsainak egy nemüres X halmazát *szétválasztó* halmaznak nevezzük, ha X bármely két csúcsát egy e éllel összekötve az e tiltott lesz a $G + e$ gráfban.

Legyen M a G gráf egy teljes belső párosítása. A G gráf egy e élét *M-pozitívnak* (*M-negatívnak*) nevezzük, ha $e \in M$ (illetve, ha $e \notin M$). Egy *M-alternáló vonal* a G gráfban egy olyan vonal, melyben M-pozitív és M-negatív élek váltakoznak. Azt mondjuk, hogy a v belső csúcs *elérhető* a w külső csúcsból az M állapotban, ha létezik egy w-ből v-be vezető alternáló út, amely v-nél pozitív élben végződik. *Elérhető* csúcsok alatt azon csúcsokat értjük, amelyek elérhetőek egy külső csúcsból a G valamely állapotában.

A faktor-kritikus gráfok ([26]) fogalma szintén természetes módon általánosítható: Egy összefüggő G gráfot *faktor-kritikus*nak nevezünk, ha G minden v belső csúcsához létezik egy olyan párosítás, amely a belső csúcsok közül csak v-t hagyja szabadon.

Végül, a belső csúcsok bármely X halmaza esetén a $G-X$ egy összefüggő komponensét akkor nevezzük *degenerált*nak, ha mindössze egy külső csúcsból áll.

1. Tétel.([8]) *Legyen X a G szoliton gráf belső csúcsainak egy nemüres halmaza, és jelölje $c_{\text{in}}(G,X)$ a $G - X$ azon összefüggő komponenseinek a számát, melyek csak belső csúcsokat tartalmaznak. Ekkor a következő két állítás ekvivalens.*

(i) *X egy maximális szétválasztó halmaz.*

(ii) *$G - X$ minden nem degenerált összefüggő komponense egy faktor-kritikus gráfot alkot, valamint*

(iia) $|X| = c_{\text{in}}(G, X) + 1$*, vagy*

(iib) $|X| = c_{\text{in}}(G, X)$ *és $G - X$ minden külső csúcsot tartalmazó komponense degenerált.*

Továbbá, az (iib) feltétel akkor és csak akkor áll fenn, ha X nem tartalmaz elérhető csúcsot.

2. Tétel.([8]) *Egy külső csúccsal rendelkező G gráf akkor és csakis akkor szoliton gráf, ha a belső csúcsainak bármely X részhalmaza esetén fennáll a $c^{\text{o}}_{\text{in}}(G, X) \le |X|$ egyenlőtlenség, ahol $c^{\text{o}}_{\text{in}}(G, X)$ jelöli $G - X$ azon külső csúcs nélküli összefüggő komponenseinek a számát, amelyek páratlan számú belső csúcsból állnak. Egyenlőség akkor és csakis akkor állhat fenn egy nemüres X-re, ha G nem minden összefüggő komponense külső csúcsot tartalmazó faktor-kritikus gráf. Ebben az esetben bármely olyan szétválasztó halmaz biztosítja az egyenlőséget, amely maximális arra vonatkozólag, hogy nem tartalmaz elérhető csúcsot.*

A fenti két eredmény kombinálásával a faktor-kritikus gráfok egy jellemzését kapjuk.

3. Tétel([8]) *Egy külső csúcsot tartalmazó összefüggő gráf akkor és csakis akkor faktor-kritikus, ha a belső csúcsok bármely nemüres X részhalmazára fennáll a $c^{\text{o}}_{\text{in}}(G, X) \le |X| - 1$ egyenlőtlenség. Ebben az esetben az egyenlőséget bármely maximális szétválasztó halmaz biztosítja.*

Szoliton gráfok struktúrális elmélete

Automaták kompozíciója és dekompozíciója az 1960-as évektől intenzíven tanulmányozott témaköre a számítástudománynak. Ezen kutatások fő célja, hogy a komplex rendszereket egyszerűbb automaták szorzataként jellemezze. Annak érdekében, hogy ezt a feladatot szoliton automaták esetében is megoldjuk, először a szoliton gráfok egy olyan dekompozícióját kell végrehajtanunk, amelyben a komponens gráfokra épülő automaták részben függetlenül képesek működni és megadható a komponensek kapcsolatának egy formálisan leírása. A fenti célok érdekében egy struktúrális elméletet fejlesztettünk ki, amely a szoliton gráfok elemi komponenseire épül.

A teljes belső párosítással rendelkező G gráf *elemi komponens*ei alatt a G olyan maximális részgráfjait értjük, amelyeket kizárólag megengedett élek feszítenek ki. Egy elemi komponenst *külső* vagy *belső* komponensnek hívunk attól függően, hogy tartalmaz-e külső csúcsot. Egy gráf *elemi*, ha egyetlen elemi komponensből áll.

A *teljes párosítások* (olyan párosítások, melyek minden csúcsot lefednek) elméletéből jól ismert ([26]), hogy az elemi gráfok csúcshalmazán definiálható egy kanonikus osztályozás. Ezt az eredményt teljes belső párosításokkal rendelkező elemi gráfokra általánosították a [3] dolgozat szerzői. Ezen rész első téziseként a fenti osztályozást kiterjesztjük minden olyan gráf esetére, amely rendelkezik teljes belső párosítással.

Definíció. Legyen G egy teljes belső párosítással rendelkező gráf. Ekkor tetszőleges két $u, v \in V(G)$ belső csúcs esetén, $u \sim v$ amennyiben létezik egy szétválasztó halmaz, amely mindkét csúcsot tartalmazza és az u a v-vel azonos elemi komponensbe esik.

4.Tétel([6]) *A $\sim$ reláció egy ekvivalencia reláció a G belső csúcsainak halmazán.*

A $\sim$ relációt *kanonikus ekvivalenciá*nak nevezzük, míg a $\sim$ által meghatározott osztályokra *kanonikus osztályok*ként hivatkozunk.

A fenti osztályozás alapján a járható éleket tartalmazó elemi komponensek (*járható elemi komponensek*) egy olyan struktúrába rendezhetőek, amely struktúra tükrözi a komponensek külső csúcsból induló alternáló utak (*külső alternáló utak*) által történő elérhetőségét. Ezen eredményeinket az alábbi tétel összegzi.

5. Tétel.([6]) *Egy G szoliton gráf járható elemi komponensei diszjunkt családokba rendezhetőek a következő módon.*

(i) Bármely család legfeljebb egy külső elemi komponenst tartalmaz.

(ii) Minden $\mathcal{F}$ család amely csak belső komponensekből áll pontosan egy olyan P kanonikus osztályt tartalmaz, amelyet bármely olyan külső alternáló út érint, amely az $\mathcal{F}$ valamely tagjához vezet. Továbbá bármely külső alternáló út ezen úgynevezett principális osztályt érinti először a családon belül.

(iii) Egy $\overset{*}{\mapsto}$ részbenrendezés alakítható ki a családok között, amelyben a rendezési relációt az a sorrend definiálja, amint egy tetszőleges külső alternáló út a családokat érinti. A részbenrendezés maximális elemei azon családok, amelyek tartalmaznak külső csúcsot.

(iv) Egy járható elemi komponenshez tartozó csúcs akkor és csakis akkor nem elérhető, ha egy principális kanonikus osztályban fekszik.

A fenti struktúra kialakítása után szétválasztó halmazok és faktor-kritikus gráfok segítségével jellemezzük a családokat, majd ezen eredmények felhasználásával megadunk egy algoritmust, amely az élek számában lineáris időben meghatározza bármely G szoliton gráf G^+ járható részgráfját, továbbá kialakítja a családokat és a családok közötti részbenrendezést. Az eljárás az Edmonds algoritmusnak ([14]) egy módosított változata.

6. Tétel([5]) *Bármely G szoliton gráf esetén a G^+ járható részgráf és a járható elemi komponensek családjai a $\overset{*}{\mapsto}$ részbenrendezéssel együtt egy $\mathcal{O}(|E(G)|)$ futási idejű algoritmussal meghatározhatóak.*

Szoliton automaták dekompozíciója

A szoliton áramkörök és szoliton automaták analízisével kapcsolatban a következő két kérdés vetődik fel természetszerűleg.

(a) A molekulahálózat topológiája alapján adjuk meg a rendszeren definiálható szoliton áramkör egy formális leírását (például verifikáció céljából, lsd. [18]).

(b) Jellemezzük a szoliton automaták osztályát.

A struktúrális eredményeink felhasználásával mindkét fenti problémát az *elemi szoliton automaták* (elemi gráfhoz tartozó szoliton automaták) szintjére redukáljuk.

Valójában az (a) kérdés is könnyen megfogalmazható a szoliton automaták nyelvén: adjunk egy módszert, amely a G gráfhoz rendelt szoliton automata egy formális leírását adja. Először a fenti kérdés legkézenfekvőbb megközelítését tárgyaljuk.

Automata Konstrukciós Probléma (Automaton Construction Problem – ACP): *Adott G szoliton gráf esetén konstruáljuk meg a gráfhoz rendelt automatát.*

A feladat megoldása érdekében meg kell határoznunk az állapothalmazt, valamint az átmenetfüggvényt. Az állapotok halmaza a teljes párosításokkal rendelkező páros gráfokra a [24] cikkben kidolgozott módszer egyszerű kiterjesztésével megkonstruálható.

Az átmenetfüggvény meghatározása érdekében a szoliton átmeneteket alternáló vonalak segítségével jellemeztük ([4]). Ezen karakterizáció eredményeként egy olyan eljárást kaptunk, amely tetszőleges két állapot esetén $\mathcal{O}(|V(G^+)| \cdot |E(G^+)|)$ időben eldönti, hogy van-e a két állapot között átmenet. Az elmondottak alapján a következő eredmény adódik ACP komplexitására.

7. Tétel. *Legyen G egy szoliton gráf, $n = |V(G^+)|$, $m = |E(G^+)|$ és jelölje k a G^+ állapotainak a számát. Ekkor ACP megoldható $\mathcal{O}(k^2 \cdot n \cdot m)$ időben.*

Dassow és Jürgensen a [12] munkájukban fontos speciális esetként az egy külső csúccsal rendelkező determinisztikus szoliton automaták osztályát jellemezték. A következőekben általánosítjuk eredményüket nemdeterminisztikus szoliton automatákra.

Definíció. Legyen M a G szoliton gráf egy állapota és v a G-nek egy külső csúcsa. Egy β *M-alternáló v-körút* egy olyan M-alternáló vonal, amely v-ből indul és egy β_h külső M-alternáló útból valamint egy β_c páros hossszú M-alternáló körből tevődik össze. Egy α *M-alternáló kettős v-körút* alatt M-alternáló v-körutak egy olyan (α^1, α^2) párját értjük, melyre fennáll, hogy $E(\alpha_h^1) \cap E(\alpha_c^2) = \emptyset$, $E(\alpha_h^2) \cap E(\alpha_c^1) = \emptyset$, valamint vagy $\alpha_c^1 = \alpha_c^2$ vagy $V(\alpha_c^1) \cap V(\alpha_c^2) = \emptyset$.

Definíció. Legyen $\mathcal{A} = (S, X, \delta)$ egy olyan automata, melynek ábécéje egyetlen jelből áll, azaz $X = \{x\}$. Azt mondjuk, hogy $\mathcal{A}$ egy *teljes* (*szemi-teljes*) automata, ha bármely $s \in S$ esetén $\delta(s, x) = S$ (illetve, $\delta(s, x) = S \setminus \{s\}$ feltéve, hogy $|S| > 1$) áll fenn.

8. Tétel *Legyen G egy szoliton gráf, mely egyetlen v külső csúcsot tartalmaz. Ekkor $\mathcal{A}(G)$ vagy egy teljes vagy egy szemi-teljes automata. Továbbá $\mathcal{A}(G)$ szemi-teljes akkor és csakis akkor ha G^+ egy kettős v-körutat nem tartalmazó páros gráf.*

A fenti eredmény fontos szerepet játszik a szoliton automaták elemi dekompozíciójában, melyet egy speciális α_0^{ε}-szorzat ([15], [16], [23]), az úgynevezett kanonikus szorzat segítségével adunk meg. Ezen szorzat formális definíciója azonban további előkészületeket igényel.

Definíció. Legyen $\mathcal{A}(G) = (S(G^+), X \times X, \delta)$ egy szoliton automata. Ekkor $\mathcal{A}(G)$ *kiterjesztése* alatt azt az $\mathcal{A}_e(G) = (S(G^+), X \times X, \delta_e)$ automatát értjük, ahol G bármely M állapota és a külső csúcsok bármely $(v, w) \in X \times X$ rendezett párja esetén:

$$\delta_e(M, (v, w)) = \begin{cases} \delta(M, (v, w)), & \text{ha } v \neq w \\ \delta(M, (v, w)) \cup \{M\}, & \text{egyébként} \end{cases}$$

Definíció. Legyen X_i egy ábécé és $\mathcal{A}_i = (S_i, X_i \times X_i, \delta_i)$ egy automata $i = 1, 2$ esetén. Azt mondjuk, hogy $\mathcal{A}_1$ és $\mathcal{A}_2$ *erősen izomorfak* ha létezik bijektív leképezések egy olyan $\psi = (\psi_S, \psi_X)$ párja, hogy $\psi_S : S_1 \to S_2$ és

$\psi_X : X_1 \to X_2$ kielégítik az alábbi egyenlőséget minden $s \in S_1$ és minden $x, x' \in X_1$ esetén:

$$\{\psi_S(s') \mid s' \in \delta_1(s, (x, x'))\} = \delta_2(\psi_S(s), (\psi_X(x), \psi_X(x')))$$

Azt mondjuk, hogy $\mathcal{A}_1$ és $\mathcal{A}_2$ között egy *szoliton izomorfizmus* áll fenn, ha $i = 1, 2$ esetén létezik egy $\mathcal{A}(G_i)$ szoliton automata, hogy $\mathcal{A}_i$ erősen izomorf $\mathcal{A}(G_i)$-vel, továbbá $\mathcal{A}_e(G_1)$ erősen izomorf $\mathcal{A}_e(G_2)$-vel.

A fenti fogalmak felhasználásával a következőképp definiáljuk a szükséges automata szorzatot.

Definíció. Tekintsük a $G_1, \ldots, G_n (n \in N)$ szoliton gráfokat és minden egyes $i \in [n]$ esetén jelölje $\mathcal{A}_i = (S_i, X_i \times X_i, \delta^i)$ a G_i-hez tartozó szoliton automatát, azaz $\mathcal{A}_i = \mathcal{A}(G_i)$ a δ^i átmenetfügvénnyel és az $S_i = S(G_i^+)$ állapothalmazzal. Továbbá legyen $\mathcal{L} = \{\mathcal{A}_{n+1}, \ldots, \mathcal{A}_m\}$ $(n \leq m)$ (nem szükségszerűen szoliton) automaták egy rendszere, jelölje $\mathcal{A}_j = (S_j, X_j, \delta^j)$ $(n + 1 \leq j \leq m)$, és legyen τ egy *kanonikus függőség*nek nevezett leképezés $\mathcal{L}$-ből a $G_1, \ldots, G_n$ kanonikus osztályai által alkotott halmaz hatványhalmazába. Ekkor egy a $\mathcal{Q} = \{\mathcal{A}_1, \ldots, \mathcal{A}_n\}$-ból az $\mathcal{L}$-be történő τ-hoz rendelt *kanonikus szorzat* alatt a $\mathcal{A}_e(G_1), \ldots, \mathcal{A}_e(G_n), \mathcal{A}_{n+1}, \ldots, \mathcal{A}_m$ automaták egy olyan $\phi = (\phi_1, \ldots \phi_m)$ visszacsatolási függvényhez és $X \times X$ ábécéhez tartozó szorzatát értjük, amelynek eredményeképpen előálló $\mathcal{A} = (S, X \times X, \delta)$ automatára a következök érvényesek.

(a) $X = X_1 \sqcup \ldots \sqcup X_n$, ahol minden $i \in [n]$ esetén X_i a G_i külső csúcsainak a halmazát jelöli

(b) $S = S_1 \times \ldots \times S_m$

(c) Minden $i \in [m]$ esetén ϕ_i egy olyan leképezés, melyre a következők állnak fenn:

(c1) Ha $i \leq n$, akkor $\phi_i : X \times X \to (X_i \times X_i) \cup \{\varepsilon\}$, és bármely $v, w \in X$ esetén,

$$\phi_i((v, w)) = \begin{cases} (v, w), & \text{ha } v, w \in X_i \\ \varepsilon, & \text{egyébként} \end{cases}$$

(c2) Ha $n + 1 \leq i \leq m$, akkor $\phi_i : S_1 \times \ldots \times S_n \times (X \times X) \to (X_i \times X_i) \cup \{\varepsilon\}$, és minden $M_1 \in S_1, \ldots, M_n \in S_n$, valamint $v, w \in X$ esetén, feltéve hogy $v \in X_k$ és $w \in X_l$ valamely $k, l \in [n]$-re,

$$\phi_i(M_1, \ldots, M_n, (v, w)) = \varepsilon$$

akkor és csakis akkor áll fenn, ha a következő feltételek valamelyike teljesül:

(c2/i) $\tau(\mathcal{A}_i) \cap \mathcal{P}_{G_k}(M_k, v) = \emptyset$, ahol $\mathcal{P}_{G_k}(M_k, v)$ jelöli G_k azon kanonikus osztályainak a halmazát, melyek minden csúcsa elérhető v-ből az M_k állapotban.

(c2/ii) $k \neq l$

(c2/iii) $k = l$, $v \neq w$ és $\delta^k(M_k, (v, w)) = \{M_k\}$

(d) Bármely $x, x' \in X$ és $(s_1, \ldots, s_m) \in S$ esetén,

$$\begin{aligned}\delta((s_1, \ldots, s_m), (x, x')) = {} & \delta_e^1(s_1, \phi_1((x, x'))) \times \ldots \times \delta_e^n(s_n, \phi_n((x, x')))\times \\ & \times\ \delta^{n+1}(s_{n+1}, \phi_{n+1}(s_1, \ldots, s_n, (x, x'))) \times \ldots \\ & \times\ \delta^m(s_m, \phi_m(s_1, \ldots, s_n, (x, x')))\end{aligned}$$

Továbbá, ha $n = m$ (azaz $\mathcal{L} = \emptyset$), akkor $\mathcal{A}(G_1), \ldots, \mathcal{A}(G_n)$ *diszjunkt szorzatá*ról beszélünk.

Intuitívan, egy kanonikus szorzat egy olyan speciális α_0^ε-szorzat, ahol az automaták két szinten helyezkednek el. Az alsó szinten elhelyezkedő (nem feltétlenül szoliton) automaták a felső szinten elhelyezkedő szoliton automatákhoz azok kanonikus osztályain keresztül kapcsolódnak. Ezen kapcsolódás egy úgynevezett kanonikus függőség által definiált, amely az alsó szinten levő automaták halmazából a felső szinten elhelyezkedő szoliton automaták kanonikus osztályainak hatványhalmazába történő leképezés. Egy alsó szinten levő automatában akkor indukálódik egy átmenet, ha az inputként adott csúcspár első komponenséből az automata elérhető a kanonikus függőség által meghatározott valamely kanonikus osztályon keresztül.

9. Tétel. ([4]) *Jelölje $\mathcal{C}$ azon automaták osztályát, amelyek előállnak az elemi szoliton automaták egy rendszeréből a teljes automaták egy rendszerébe történő kanonikus szorzat eredményeként. Ekkor a szoliton automaták osztálya szoliton izomorfizmus erejéig egybeesik $\mathcal{C}$-vel.*

Fontos megjegyezni, hogy a fenti tétel bizonyítása konstruktív, azaz egy módszert szolgáltat arra vonatkozólag, hogy egy tetszőleges szoliton automatát miként lehet elemi automaták kanonikus szorzatára bontani.

Az eddigi eredmények alkalmazásaként végül visszatérünk az (a) kérdésben felvetett problémához.

Automata Specifikációs Probléma (Automaton Description Problem – ADP): *Tetszőleges G szoliton gráf esetén adjuk meg a G-hez tartozó $\mathcal{A}(G)$ szoliton automata egy formális leírását.*

Világos, hogy ACP egy megoldását szolgáltatja a fenti problémának, azonban az egy külső csúccsal rendelkező szoliton automaták példaként szolgálnak arra, hogy a formális leíráshoz akár az állapotszám megadása is elegendő lehet, amennyiben az illető gráf belső struktúráját ismerjük. A [4] dolgozatban megmutattuk, hogy a fenti problémára bármely szoliton gráfban alkalmazható egy struktúrális redukció. Ezen eredmény továbbfejlesztéseként a disszertációban kidolgoztuk az úgynevezett *Elemi Struktúrális Kódolást* és megmutattuk, hogy a struktúrális kód hatékonyan ki is számítható. Egy ilyen kódolás a következőkből tevődik össze: a gráf külső elemi komponensei kiegészítve bizonyos szabályok alapján hozzáadott tiltott élekkel, az úgynevezett *áthidaló csúcsok* halmaza (csúcsok, amelyek külső elemi komponensben fekszenek és szomszédosak valamely belső komponenshez tartozó csúccsal), a külső komponensek kanonikus osztályozása, minden egyes belső komponensre annak a teljes automatának az azonosítója, amelynek állapotszáma megegyezik az adott komponens állapotszámával, és egy reláció a fenti teljes-automata kódok és a kanonikus osztályok által alkotott halmaz hatványhalmaza között. Ezen struktúra ekvivalens az eredeti automatával az ADP-re vonatkozólag, de egy alacsonyabb komplexitást biztosít.

A struktúrális kódolás formális definícióját helyszűke miatt elhagyjuk, de ismertetjük az ADP-re vonatkozó algoritmikus következményét.

10. Tétel. *Legyen G egy szoliton gráf, melynek minden külső elemi komponense polinomiális számú állapottal rendelkezik, továbbá minden elérhető C belső elemi komponense esetén polinomiális időben meghatározható C állapotainak a száma. Ekkor ADP polinomiális időben megoldható G-re.*

Determinisztikus szoliton automaták

Komplex rendszerek analízise esetén mindig egy központi kérdés, hogy meghatározzuk a rendszer azon jellemzőit, amelyek determinisztikussá teszik. A szoliton automaták belső struktúráját a 9. Tétel karakterizálja, így a determinisztikusság fogalma természetes módon kiterjeszthető: egy szoliton automata *parciálisan determinisztikus*, ha az alapobjektumát képező gráf bármely külső elemi komponense egy determinisztikus szoliton gráfot alkot. Annak érdekében, hogy a determinisztikus és parciálisan determinisztikus automatákra vonatkozó gráfstruktúra egyszerűbb leírásához jussunk, egy redukciós módszert definiálunk a gráfokon.

Definíció. A G gráf egy r *redex*e alatt olyan egymáshoz illeszkedő $e = (u, z)$ és $f = (z, v)$ éleket értünk, melyekre fennáll, hogy u és v különböző belső csúcsok, valamint z fokszáma 2. A z csúcsot a redex *középpont*jának, míg u-t és v-t a redex *szélső csúcsainak* nevezzük.

Legyen r egy redex a G gráfban. Az r *összehúzása* alatt egy új G_r gráfnak a G-ből való olyan kontsrukcióját értjük, hogy töröljük az r a középpontját és a szélső csúcsokat egybeolvasztjuk.

A fenti redukciót egy további művelettel egészíthetjük ki, az úgynevezett *belső hurokél*ek törlésével. Egy hurokélt akkor nevezünk belsőnek, ha annak a csúcsnak a fokszáma, amelyre illeszkedik legalább 4.

Definíció. Egy G gráfot *redukált*nak nevezünk, ha G nem tartalmaz sem redexet sem belső hurokélt.

Egy tetszőleges G gráfon iteratív módon végrehajtva a lehetséges redukciókat (redex összehúzás, belső hurokélek törlése), az eljárás végén egy $r(G)$ redukált gráfot kapunk. Bizonyítható, hogy $\mathcal{A}(G)$ és $\mathcal{A}(r(G))$ között létezik egy szoliton izomorfizmus, amely egyben erős izomorfizmus, ha G determinisztikus. Tehát a determinisztikus és parciálisan determinisztikus automaták analízise elvégezhető a redukált gráfok segítségével. A karakterizáció kulcsa a következő eredmény.

Definíció. Egy összefüggő hurokél-mentes gráfot *általánosított fának* nevezünk, ha nem tartalmaz páros hosszú kört.

11. Tétel([7],[25]) *Egy G elemi szoliton gráf akkor és csakis akkor determinisztikus, ha $r(G)$ egy általánosított fa.*

Ezen tétel eredményeként a determinisztikus és a parciálisan determinisztikus szoliton automaták osztálya leírható *gesztenyecsonkok* (olyan gráfok, amelyekben a külső csúcsokra illeszkedő élek belső végpontja egy közös v csúcs, amit két párhuzamos él köt össze a gráf másik belső csúcsával) és általánosított fák kanonikus és diszjunkt szorzataként.

12. Tétel. *Jelölje $\mathcal{T}$ azon szoliton automaták osztályát, melyek alapobjektuma vagy egy általánosított fa, vagy egy olyan gráf, amely egy élből és az egyik végpontján egy hurokélből áll. Továbbá jelölje $\mathcal{D}$ azon $\mathcal{A}(G)$ szoliton automaták osztályát, melyekre igaz, hogy vagy $\mathcal{A}(G)$ a $\mathcal{T}$-hez tartozik vagy G egy gesztenyecsonk. Ekkor a következők állnak fenn.*

(i) A parciálisan determinisztikus szoliton automaták osztálya szoliton izomorfizmus erejéig egybeesik azon automaták osztályával amelyek előállnak $\mathcal{T}$-beli automaták egy rendszeréből a teljes automaták egy rendszerébe történő kanonikus szorzat eredményeként.

(ii) A determinisztikus szoliton automaták osztálya erős izomorfizmus

erejéig egybeesik azon automaták osztályával amelyek előállnak $\mathcal{D}$-beli automaták diszjunkt szorzataként.

Az elemi determinisztikus gráfok fenti karakterizációja és az Elemi Struktúrális Kódolás kapcsán kifejlesztett elemi dekompozíciós eljárás ötvözésével egy $\mathcal{O}(n^3)$ futási idejű algoritmust kapunk annak eldöntésére, hogy egy szoliton gráf determinisztikus-e. Ezen algoritmus három részből áll: a gráf elemi komponenseinek meghatrározásából, a redukciós módszerből, valamint egy eljárásból, amely a redukát gráfokon a páros kör létezését ellenőrzi.

13. Tétel[25] *Legyen G egy szoliton gráf és $n = |V(G)|$. Ekkor $\mathcal{O}(n^3)$ időben eldönthető, hogy G determinisztikus-e.*

Összefoglalás

Ezen disszertációban a szoliton automatáknak egy olyan részletes struktúrális leírását adtam meg, amely a szoliton gráfokban értelmezett párosításokon alapul. Reményeim szerint ezen eredményeknek komoly hatása lesz a szoliton áramkörök gyakorlati fejlesztése során éppúgy, mint az alapkutatások területén. Az eredmények a számítástudomány és matematika több problémája kapcsán alkalmazhatóak. A teljesség igénye nélkül megemlítem a párosítások struktúrális elméletét, a hálózattervezési problémákat, illetve az ezen modell általánosításaként definiálható automaták vizsgálatát.

Bibliography

[1] A. Adamatzky, *Computing in Nonlinear Media and Automata Collectives*, IOP Publishing, Bristol-Philadelphia, 2001.

[2] M. Bartha, E. Gombás, A structure theorem for maximum internal matchings in graphs, *Information Processing Letters* **40** (1991), 289-294.

[3] M. Bartha, E. Gombás, On graphs with perfect internal matchings, *Acta Cybernetica* **12** (1995), 111-124.

[4] M. Bartha, M. Krész, Elementary decomposition of soliton automata, *Acta Cybernetica* **14** (2000), 631-652.

[5] M. Bartha, M. Krész, Isolating the families of soliton graphs, *Pure Mathematics and Applications* **13** (2002), 49–62.

[6] M. Bartha, M. Krész, Structuring the elementary components of graphs having a perfect internal matching, *Theoretical Computer Science* **299** (2003), 179–210.

[7] M. Bartha, M. Krész, Deterministic soliton automata defined by elementary graphs, in *Proceedings of the Kalmár Workshop on Logic and Computer Science* (2003) pp. 69–79.

[8] M. Bartha, M. Krész, Tutte type theorems in graphs having a perfect internal matching, *Information Processing Letters* **91** (2004), 277–284.

[9] F. L. Carter, The molecular device computer: Point of departure for large scale cellular automata, *Physica D* **10** (1984), 175–194.

[10] J. Dassow, H. Jürgensen, Soliton automata, *J. Comput. System Sci.* **40** (1990), 154-181.

[11] J. Dassow, H. Jürgensen, Soliton automata with a single exterior node, *Theoretical Computer Science* **84** (1991), 281–292.

[12] J. Dassow, H. Jürgensen, Soliton automata with at most one cycle, *Journal of Computer and System Sciences* **46** (1993), 155–197.

[13] J. Dassow, H. Jürgensen, The transition monoids of soliton trees, Research Report # 331, Department of Computer Science, The University of Western Ontario, London, Canada, 1992.

[14] J. Edmonds, Paths, trees and flowers, *Canad. J. Math.* **17** (1965), 449–467.

[15] Z. Ésik, J. Virágh, On products of automata with identity, *Acta Cybernetica* **7** (1986), 299–311.

[16] F. Gécseg, *Products of Automata*, Akademie-Verlag, Berlin, 1986.

[17] F. Gécseg, H. Jürgensen, Automata represented by products of soliton automata, *Theoretical Computer Science* **74** (1990), 163–181.

[18] M. P. Groves, Towards verification of soliton circuits, in *Molecular Electronic Devices* (F. L. Carter, R. E. Siatkowski, H. Wohltjen Ed.), North-Holland, Amsterdam, 1988, pp. 287–302.

[19] M. P. Groves, C. F. Carvalho, C. D. Marlin, and R. H. Prager, Using Soliton Circuits to Build Molecular Memories, *Australian Computer Science Communications* **15** (1993) pp. 37–45.

[20] M. P. Groves, C. D. Marlin, Using Soliton Circuits to Build Molecular Computers, *Australian Computer Science Communications* **17** (1995) pp. 188–193.

[21] M. P. Groves, C. F. Carvalho, and R. H. Prager, Switching the polyacetylene soliton, *Materials Science and Engineering* **C3** (1995) pp. 181–185.

[22] M. P. Groves, Soliton Circuit Design Using Molecular Gate Arrays, in *Proceedings of the 20th Australasian Computer Science Conference* (1997) pp. 245–252.

[23] B. Imreh, M. Ito, On α_i-product of nondeterministic automata, *Algebra Colloquium* **4** (1997), 195–202.

[24] A. Itai, M. Rodeh, S. Tanimoto, Some matching problems for bipartite graphs, *Journal of the ACM* **25** (1978), 517–525.

[25] M. Krész, Alternating cycles in soliton graphs, *WSEAS Transactions on Mathematics* **1** (2002), 165–170.

[26] L. Lovász, M. D. Plummer, *Matching Theory*, North Holland, Amsterdam, 1986.

[27] T. Sienko, A. Adamatzky, N. Rambidi, and M. Conrad (Ed.), *Molecular Computing*, The MIT Press, London, 2003.

[28] D. M. Taylor, Molecular nanostructures and their electrical probing, *Thin Solid Films* **331** (1998), 1–7.

[29] W. T. Tutte, The factorization of linear graphs, *J. London Math. Soc.* **22** (1947), 107–111.

[30] Y. M. Yin, X. Q. Lin, Progress on molecular computer, *Progress in Chemistry* **13** (2001), 337–342.

Irodalomjegyzék