

Bírálat

Szederkényi Gábor

Computational Methods for the Analysis of Nonnegative Polynomial Systems

című doktori értekezéséről.

1. Általános megjegyzések

A disszertáció kémiai reakcióhálózatok különböző matematikai leírásai tulajdonságaival, és átalakítási lehetőségeivel foglalkozik. A kutatások témája korszerű, jól illeszkedik az aktuális nemzetközi trendekhez. A tézisek mind a jelölt tudományos fokozat szerzése utáni munkáin alapulnak. Az értekezés eredményei sok közleményben jelentek meg, jó színvonalú tudományos folyóiratokban. Ebből a szempontból az értekezés példaszerű.

Az értekezés a formai követelményeket teljesíti, 121+7 oldal terjedelmű. Az érdemi fejezetek hossza 99 oldal, ez már tartalmazza a jó szerkezetű, informatív bevezetést is (1. és 2. Fejezet). A 3.-6. Fejezetekben vannak az érdemi eredmények, a 7. az összefoglalást és a konklúziót tartalmazza. A dolgozatot 9 oldalnyi függelék egészíti ki, amelyben hasznos kiegészítő példák szerepelnek.

A dolgozat szerkezete világos és helyénvaló. Az angolság rendben, csak kevés hibát találtam (oldalanként néhányat), és ezek sem befolyásolták a leírtak megértését. Az egyes fejezetek eredményei mind folyóirat cikkekben, illetve könyvfejezetekben jelentek meg. A saját eredmények elkülönítése viszont nem megfelelő. A jelölt érdeme, hogy törekedett a teljességre, a dolgozat eredményei átadásához szükséges részletek tömör összefoglalására. Az ábrák segítik a leírtak megértését, de kivitelezésük nem szép, a szöveges részben megjelenőtől eltérő betűtípust, és túlzott méretű karaktereket használ a szerző.

A harmadik fejezet kvázipolinomiális rendszereket tanulmányoz. A jelölt megmutatta, hogy egy Lotka-Volterra modell pozitív egyensúlyi pontja pontosan akkor globálisan stabilis a pozitív ortánsban egy bizonyos Ljapunov függvénynel, ha van lokálisan disszipatív-hamiltoni leírás az egyensúlyi pont egy környezetében, és a Hamilton függvény diagonális kvadratikus alak.

A negyedik fejezet igazolja, hogy olyan tömeghatás kinetikájú kémiai reakcióhálózatoknak, amelyek lineárisan független reverzibilis reakciópárokból állnak, létezik pszeudo-Hamiltoni leírásuk, illetve az egyensúlyi pont körül egy lokálisan disszipatív hamiltoni leírásuk.

Az ötödik fejezet sűrű és ritka dinamikus ekvivalens realizációkat ad meg, és ezek fontos tulajdonságait vizsgálja. A számítógépes megoldás megfelelő MILP leírásokat használt. A kapott eredmények szerint egy kémiai reakcióhálózatra: a sűrű megvalósítás egyértelmű; egy kinetikus rendszer bármely dinamikus ekvivalens megvalósítása súlyozatlan reakciógráfja a sűrű megvalósítás súlyozatlan részgráfja; a kinetikus rendszerek reakciógráf szerkezete pontosan akkor egyértelmű, ha a sűrű és ritka megvalósítások egybeesnek.

És végül a hatodik fejezet dinamikus ekvivalens és lineárisan konjugált reakcióhálózatokat határoz meg különböző kívánatos tulajdonságokkal: minimális- vagy maximális számú komplexszel, teljesen reverzibilis hálózatokat, részletes- és komplex kiegyensúlyozott hálózatokat, és gyengén reverzibilis hálózatokat.

A bemutatott eredmények fontosak és meglehetősen általánosak, a kémiai rendszerek leírása és modellezése területén jól használhatók.

2. Kritikai észrevételek és kérdések

A dolgozatnak két lényeges hiányosságát látom. Az első, hogy a jelölt saját tudományos eredményei nincsenek elkülönítve. Az egyetlen erre utaló mondat amit találtam, az a Conclusions című fejezet lábjegyzete (!): I strived to include only those results in the thesis points where my contribution was essential. Szerintem ez kevés. A szakterület minden további nélkül megengedi akár az egyszerűsített közleményeket is, de az elkülöníthető eredményeket föltétlen. Az értekezés olyan eredmények leírásából kellett volna, hogy álljon, amelyek többsége a jelölt saját eredménye, és ezt a publikációs társszerzői is elismerik. Egy doktori értekezésben persze lehetnek oszthatatlan közös eredmények, de ezek – megítélésem szerint – csak kiegészítő jellegűek lehetnek. Ha csak olyan eredmények vannak egy értekezésben, amelyekben a jelölt hozzájárulása csupán lényegi, akkor ugyanezen dolgozattal más is megkaphatja a pályázott címet, hiszen neki is lehetnek ugyanezen eredményei ebben a kategóriában. Szerintem ez elfogadhatatlan.

A közvetett adatok megnyugtatóbb képet mutatnak: a jelölt a szűkebb szakterület elismert folyóirataiban közölte eredményeit. Ezek a publikációk (egy fejezethez, a 4.-hez kapcsolódók kivételével) az első szerzős cikkei voltak, és a kutatócsoport szokásai szerint láthatóan az első szerzőséggel az adott publikáció fő eredményeit elérőt jelölik.

A másik lényegi panaszom, hogy az értekezés láthatóan kerüli a pontos megfogalmazású elméleti állításokat. Körülbelül 4 oldalnyi formális elméleti állítás van benne a bizonyításokkal együtt – holott a dolgozat fő tartalma éppen hogy elméleti jellegű. A jellemző eljárás az, hogy a pontosan kimondott tulajdonságok igazolása végett egy példát mutat, azon keresztül láttatja az összefüggéseket, majd egy általános érvényű állítást mond ki ez alapján. Inkább formálisan leírt föltételek

mellett érvényes elméleti állításokat kellett volna tennie, és ezeket explicit módon bizonyítani. A jelölt is cáfol mástól származó – gondolom hasonló eljárással kapott – ilyen megállapítást. Ezek az esetek elkerülhetők lennének a formális út követésével.

Kisebb jelentőségű problémák

- A 10. oldalon a vegyes egészértékű optimalizálási feladat definíciója helytelen: értelemszerűen a változók *egy része* egész értékű. A 6. oldalon ez szöveggel helyesen volt megadva. Az előbbi helyen a $\subset$ reláció kell, és I nem lehet üres.
- A 2.1 Táblázat itt fölösleges. Esetleg egy ismeretterjesztő műben kellhetne.
- A (2.13) egyenletben már z a változó, tehát a 2.3.3 Alfejezet elején z^* kellene (vagy a (2.11) differenciálegyenlet rendszerre hivatkozni).
- A 15. oldal elején jó lett volna a symplectic structure definícióját is megadni. Ugyanitt lejjebb "... concentrated parameter *model* in the simplest case"?
- Egy egyszerű képlettel leírható, bármiféle belső bonyolultságtól mentes értékadást nem hívnék algoritmusnak (Algorithm 1).
- A 29. és a 30. oldalon eltérő írásmódja van a disszipatív Hamiltoni rendszernek.
- A 31. oldal közepén a (2.1) hivatkozás helyett (2.11) kellene.
- (3.75) és (3.77) nem egyenletek, nem kellene ezeket a sorokat külön beszámozni.
- (6.16) – (6.20) számára az i, j indexeket az $i > j$ feltétel mellett korlátozni is kellene: $i, j = 1, 2, \dots, m^2$?
- (6.47) nem lineáris programozási feladat, hanem egy lineáris egyenletrendszer.
- A 72. oldalon nyilván vagy minimalizálni, vagy maximalizálni szeretnék a reakciósebességi együtthatók L1 normáját.
- A 78. oldalon leírtak ellenére (6.1)-(6.4), (6.73)-6.74) nem ad standard lineáris programozási problémát: ez is egy lineáris egyenletrendszer előjelkorlátokkal.
- Table 6.1 valójában egy algoritmus. Ennek megfelelően kellene nevezni is.
- A 84. oldal 4.-5. sorában írt "exactly the same" helyett – gondolom – "isomorf" kellene.
- A 85. oldal alján említett optimalizálási eljárás nem volt kifejtve a 2.5.1 szakaszban.
- A 6.4.2 szakasz elején írtakkal ellentétben a MILP optimalizálási algoritmus nem volt kifejtve ebben az alfejezetben. Esetleg a feladat volt kitűzve.

- A 6.5.1 Tétel bizonyításában $\dim(\text{Ker } Y)$ -nak nem a becslései, hanem a korlátai azok, amiket használunk.
- A futásidők megadása során a másodperc jele elé szóköz kell.
- Az értekezésben a legtöbb helyen "numerical procedure/algorithm/method" helyett "computational" értendő.
- A [30] hivatkozás a szokott rendezés szerint a [32] után kellene, hogy következzen, [54] az [52] elé, [59] az [58] elé kellene, hogy kerüljön. [55] és [56] egyikében az egyik szerző neve el van gépelve. Rossz helyen van továbbá [80], [86], [90], [155] és [156] is. [90]-ben hiányzik a szerzők felsorolásából az "and". [143] és [144]-ben nem kellene azonos név a szerzőnek?
- A kiemelt matematikai képletek nagy része után hiányzik az írásjel, a pont vagy a vessző – holott a jelölt egyess esetekben ezeket helyesen alkalmazza.
- Ha valami komoly indok nincs, akkor az egy zárójelben megjelölt hivatkozásokat jobb lett volna növekvő sorrendben megadni.
- Ha konkrét fejezetről, szakaszcímről van szó, akkor azt nagy betűvel kell írni (például Chapter 7, Subsection 2.5.6) – ahogy azt helyenként a jelölt teszi is.
- Amennyiben a szövegben valahol pont szerepel, de nem mondatvégi pontként, akkor $\text{\LaTeX}$ -ben egy $\backslash$ jelet kell utána tenni (például a i.e. után).
- A kiemelt matematikai képletekben az olyan írásjelek előtt, mint a vessző vagy a pont, sok helyen van szóköz – de nem kellene.

Kérdések

1. A [J4]-[J5] cikkek, a 4. fejezet fő publikációi alapján kapott-e tudományos fokozatot azok első szerzője?
2. A gyakorlatilag nulla és a nem zérus megoldások közti numerikus (számítógépes?) különbségtételhez (5.21) miért kell a bevezetett ϵ mennyiség?
3. Miért nem lehet $\epsilon = \epsilon_2$ (6.16)-ban?

3. Összefoglalás

A leírtak alapján összefoglalóan megállapíthatom, hogy az értekezés színvonalas tudományos eredményeket tartalmazó munka, mellyel a jelölt igazolta kutatói képességét fontos és érdekes tudományos kérdések megválaszolása és azok példákkal való bemutatása terén. Az értekezés megítélésem szerint megfelel az MTA Doktori Tanácsa által előírt követelményeknek. Mindezek alapján javasolom az értekezés nyilvános vitára bocsátását és sikeres védelem esetén a jelölt számára az MTA doktora tudományos cím odaítélését.

Szeged, 2012. október 8.

Dr. Csentes Tibor
az MTA doktora