

Opponensi vélemény

Szederkényi Gábor

Számítási módszerek nemnegatív polinomiális rendszerek analíziséhez
(*Computational Methods for the Analysis of Nonnegative Polynomial Systems*)
c. MTA doktori értekezéséről

Témaválasztás, motivációk, problémamegközelítés

Az értekezés nemlineáris, polinomiális (vagy könnyen polinomiális formába ágyazható) dinamikus modellek analízisével foglalkozik, amelyek állapotváltozói a rendszer működése során mindvégig nemnegatívak maradnak. E rendszerosztály nagy gyakorlati jelentőséggel bír, hiszen pl. a kémiai vagy biológiai eredetű dinamikus modellek jelentős része ebbe a családba tartozik, de bizonyos közlekedési modellek is ilyen tulajdonságúak. Ezen kívül a nemnegativitás számos egyéb esetben sem jelent igazán szigorú megkötést, mivel (ahogy a szerző is tárgyalja) az általános dinamikus modellek jellemző működési tartománya egyszerű transzformációk segítségével a pozitív orthánsba vihető. E transzformációknak nyilván akkor van értelme, ha utána ki lehet használni a vizsgált rendszerosztályok modell-analízis vagy szabályozótervezés szempontjából előnyös tulajdonságait.

Az értekezés két, algebrailag még viszonylag egyszerű, de a komplex nemlineáris dinamikai jelenségek leírására tökéletesen alkalmas rendszerosztály, az ún. kvázipolinomiális (QP) ill. a tömeghatás kinetikával rendelkező biokémiai reakcióhálózatok modelljeinek analízisét tárgyalja. Meg kell jegyezni, hogy ez utóbbit a szerző általános nemlineáris rendszerosztályként tekinti, így a kifejezetten kémialag releváns tulajdonságok vizsgálata nem képezi a kutatás fő tárgyát.

A QP-modellek előnyös tulajdonságait először a matematikai fizikában írták le az 1990-es évek kezdetén. Megmutatták, hogy sima nemlinearitásokkal rendelkező dinamikus modellek nagy része algoritmikusan QP-formába írható. A QP forma algebrai szerkezete pedig nagyban megkönnyíti a stabilitásvizsgálatot vagy pl. mozgásállandók keresését. A szokásos stabilitásvizsgálat egy további beágyazáson alapul, melynek során a QP-modell klasszikus Lotka-Volterra formába transzformálható tovább, és a Ljapunov-függvény együtthatóinak meghatározása lineáris mátrixegyenlőtlenség megoldására vezet.

A reakciókinetikai hálózatokkal kapcsolatos vizsgálatok módszertana alapvetően két tényezőre épít: Először is a reakciókinetikai hálózatok matematikai elméletére, amely 1970-es évektől kezdve egészen a mai napig igen erős eredményekkel gazdagította a tudományt elsősorban a hálózati struktúra és a dinamika kvalitatív tulajdonságainak összefüggéseiről. (Nem véletlen, hogy egyre intenzívebb érdeklődés mutatkozik a kinetikai rendszerek iránt a rendszer- és irányításelméletben.) Másodszor, a reakcióhálózati modellek transzparens mátrixos felírása lehetővé teszi optimalizálási módszerek alkalmazását a hálózati struktúrák kiszámítására. Ismert tény, hogy számos irányítási és rendszeranalízissel kapcsolatos probléma korlátozott optimalizálási feladatként (is) felírható, és sokszor csak ezen a módon tudjuk a

megoldhatóságot eldönteni ill. használható megoldásokat adni az eredeti probléma nehézkes algebrai kezelhetősége miatt.

Az értekezésben hangsúlyosan megjelenik továbbá az ún. hamiltoni rendszerek tanulmányozása. E rendszerosztály eredetileg az elméleti mechanikából származik, de megmutatták, hogy megfelelő koordinátákban felírva pl. bizonyos elektromos vagy termodinamikai modellek is hamiltoni alakra hozhatók. Ily módon az általánosított energia fogalmán alapuló kapcsolat teremthető különböző alkalmazási területek dinamikus modelljei között. A hamiltoni rendszerek szabályozására rendkívül hatékony és robusztus passzivitás- illetve rendszerösszekapcsolás-alapú módszereket fejlesztettek ki, ezért is bír nagy jelentőséggel, hogy egy matematikai modellt fel tudunk-e írni ilyen formában.

Az optimalizálási módszerek kiemelt szerepe a műszaki tudományokban és ezen belül az informatikában közismert. Az optimalizáláson alapuló megoldásokat erőteljesen támogatja az utóbbi évtizedekre jellemző gyors elméleti, számítástudományi és hardveres fejlődés.

Elmondható tehát, hogy az értekezés témája időszerű, a munka 1. fejezetben felvázolt céljai a nemzetközi kutatás fókuszában vannak, és egymástól első látásra távol álló területek összekapcsolására adnak lehetőséget. A problémák megoldása során alkalmazott nemlineáris rendszerelméleti és optimalizálási megközelítés korszerű és hatékony.

Formai észrevételek

A 7 érdemi fejezetből álló dolgozat fő szövegének terjedelme 99 oldal, ehhez egy jelölésjegyzék és egy további példákat tartalmazó függelék társul. A dolgozat megfelelően struktúrált, a fejezetek beosztása arányos. A szövegszerkesztési munka jó minőségű, az ábrák többnyire informatívak. Az értekezés angol nyelven íródott, a stílus gördülékeny, a szakkifejezések használata megfelelő, az olvasás során mindössze néhány gépelési hibát találtam. A 156 elemből álló irodalomjegyzék kellően széles tájékozódási alapot jelent, tartalmazza a feldolgozott témakörök klasszikus hivatkozásai mellett a legutóbbi években született fontos eredményeket is. Külön listában szerepelnek a szerző legfontosabb publikációi, elkülönítve az értekezéshez közvetlenül kapcsolódó és egyéb cikkek; ez megkönnyíti a szerző saját eredményeinek pontos azonosítását. Ezt a szétválasztást a dolgozat szerkezete is támogatja: az irodalomból előzőleg ismert eredmények (1-2. fejezet) és a szerző (ill. társszerzőinek) hozzájárulásai (3-7. fejezet) világosan elkülönülnek. A disszertáció tehát formailag megfelel az MTA doktori értekezésekkel szembeni elvárásoknak.

Tartalmi észrevételek, kritikai megjegyzések és kérdések

1. Bevezetés

Az összesen 8 oldalas bevezető fejezet célja a szerző leírása alapján a disszertációban vizsgált problémakörök hátterének áttekintése a nemzetközi irodalom felhasználásával, illetve a kitűzött kutatási

célok megfogalmazása, egyenlőre matematikai formulák alkalmazása nélkül. Sajnos a szerző – vélhetőleg a terjedelmi korlátok és az arányossági szempontok figyelembe vétele miatt – nem fordított kellő figyelmet a kinetikai rendszerosztály elterjedtségének és alkalmazásainak bemutatására a széles műszaki területen, pedig ez nagyban növelte volna a bevezető áttekintés értékét.

2. Előzetes fogalmak és definíciók (Preliminaries)

Ez a fejezet tartalmazza a vizsgált rendszerosztályok és az alkalmazott matematikai ill. optimalizációs eszközök leírását, rögzítve egyúttal a disszertáció későbbi részeiben alkalmazott jelölésrendszert.

A fejezettel kapcsolatos megjegyzések és kérdések:

- *A 2.5.9 fejezetben a lineáris konjugáltság fogalmának leírásánál egy egyszerű diagonális transzformáció szerepel. (Ezt persze később nem nehéz beilleszteni az optimalizációs keretbe.) Mi az oka annak, hogy nem vizsgáltak egyéb transzformációkat?*
- *A 2.5.10 pontban használt omega-határpont fogalmát a szerző nem definiálja, holott ennél alapvetőbb fogalmakat is meghatároz.*
- *Mi okozza a globális attraktor sejtés bizonyításának nehézségeit?*
- *A (2.41) képletben gépelési hiba van, mert a bináris változónak minden bizonyos x kitevőjében kellene szerepelnie.*

3. Kvázipolinomiális rendszerek analízise

A 3. fejezet főleg elméleti eredményeket tartalmaz QP rendszerek analízisével kapcsolatosan. A 3.1. szakaszban a szerző megmutatja, hogy a szokásosan alkalmazott logaritmikus Ljapunov-függvénnyel globálisan stabil QP-rendszerek egyúttal lokálisan disszipatív hamiltoni struktúrával rendelkeznek, ahol a Ljapunov- és Hamilton-függvények együtthatói között egyszerű kapcsolat van. A 3.2. szakaszban a szerző bebizonyítja, hogy a QP-rendszerek stabilitásának vizsgálata monomiális idő-átskálázási transzformáció segítségével bilineáris mátrixegyenlőtlenség megoldására vezet, ahol a szeparáltan megjelenő keresett változók a transzformáció paraméterei ill. a Ljapunov-függvény együtthatói. A fejezet további két alkalmazásorientáltabb eredményt is mutat: egy QP formán alapuló invariánskereső eljárást, és egy BMI-kre alapuló stabilizáló szabályozási módszert. Ez utóbbiakból azonban nem fogalmaz meg a szerző tézist.

A fejezettel kapcsolatos megjegyzések és kérdések:

- *Sajnos a 3.1 szakasz végén leírt példák pusztán numerikusak, eléggé erőltetettnek tűnnek. Tudna-e a szerző valós fizikai tartalommal bíró példát mutatni a Ljapunov- és Hamilton-függvények kapcsolatára?*
- *Van-e bármiféle gyakorlati alkalmazási vonatkozása a 3.1 szakaszban leírt eredménynek?*

- *A 3.3.1 pontban lényegesen megváltoznak a QP rendszerek leírására használt jelölések, emiatt ez a rész nehezebben követhető. Szerencsésebb lett volna jobban egyeztetni a jelöléseket a 2. fejezetben leírtakkal.*

4. Tömeghatás kinetikájú reakcióhálózatok hamiltoni leírása

A disszertáció érdemi részének több, mint felét kitevő 4-6. fejezet kinetikai rendszerekkel foglalkozik. Ezen belül a 4. fejezet témája kinetikai rendszerek hamiltoni alakba való átírása. A fejezet eredménye, hogy a reakcióhálózatok egy speciális osztálya egy logaritmikus koordináta-transzformáció segítségével globálisan hamiltoni alakra hozható, amely a transzformált egyensúlyi pont környezetében ráadásul lokálisan disszipatív is egy globálisan konvex exponenciális jellegű Hamilton-függvénnyel.

A fejezettel kapcsolatos megjegyzések és kérdések:

- *A 4.2. szakasz címében nem szerencsés módon "lokális hamiltoni struktúra" szerepel, holott a leírt konstrukcióból úgy tűnik, hogy maga a hamiltoni struktúra (legalábbis a pozitív orthánsra nézve) globális, csak a disszipatív tulajdonság volt bizonyítható lokálisan az exponenciális Hamilton-függvénnyel.*
- *Alkalmazható-e pl. a szabályozótervezésben a megkapott hamiltoni struktúra? Végeztek-e erre vonatkozó vizsgálatokat?*

5. Tömeghatás kinetikájú reakcióhálózatok sűrű és ritka realizációi

Az 5. fejezet témája az optimalizáción alapuló reakcióhálózati struktúra-kereső algoritmusok és eredmények ismertetése, amely témakör aztán a 6. fejezetben is folytatódik. A választott optimalizálási megközelítés fő motivációját a leírás szerint egy, a témakörben jól ismert szerzőpáros 2008-ban megjelent cikkének egyik tételében elkövetett hiba adta, amelyre a szerző ellenpéldát publikált (ez meg is található a disszertáció 5.1. szakaszában). Az 5-6. fejezet optimalizálási módszerei azon a lényeges felismerésen alapulnak, hogy a kinetikus differenciálegyenletek jobb oldalának megfelelő szorzatként történő felírásával a reakciógráfot leíró mátrix Kirchhoff tulajdonsága és a dinamikus ekvivalencia lineáris korlátozásként írhatók fel, amelyek aztán megfelelő célfüggvények segítségével könnyen vegyes-egész változós (vagy egyszerű lineáris programozási) optimalizálási keretbe helyezhetők. A fejezetben a minimális és maximális számú reakciót tartalmazó (ritka és sűrű) realizációk számításához szükséges eljárásokat ismerteti a szerző. Szép eredménynek tartom annak bizonyítását, hogy a sűrű realizációk reakciógráfja egyfajta (minden egyéb lehetséges szerkezetet tartalmazó) szuperstruktúrát alkot, aminek lényeges következményei vannak.

A fejezettel kapcsolatos megjegyzések és kérdések:

- *Az 5-6. fejezet valamennyi eljárása feltételezi, hogy a komplexek halmaza (azaz az Y mátrix) előre adott. A komplexhalmaz megválasztásának azonban a példákban is látható módon alapvető hatása van a kiszámított hálózati struktúrákra. Történtek-e arra vonatkozó vizsgálatok, hogy hogyan érdemes a komplexhalmazt kiválasztani az egyes módszerekhez, illetve van-e valamilyen erre vonatkozó stratégia?*

- *Létezik-e numerikusan hatékony (egész változók alkalmazása nélküli) módszer a ritka realizációk meghatározására?*

6. További módszerek reakcióhálózati struktúrák meghatározására

A 6. fejezet további eredményeket tartalmaz a reakcióhálózati struktúrák optimalizáción alapuló számítási módszereiről. Ez a rész szerkezetileg tartozhatna akár az 5. fejezethez is (témájában annyira szorosan kapcsolódik hozzá), feltehetően arányossági okokból került külön fejezetbe. A következő problémák megoldásai olvashatók a fejezetben: minimális és maximális számú monomot (komplexet) tartalmazó, reverzibilis, részletesen ill. komplexen kiegyensúlyozott hálózati struktúrák kiszámítása. Az eredmények közül véleményem szerint kiemelkedik a gyengén reverzibilis realizációk létezésének vizsgálatára ill. az ilyen tulajdonságú struktúrák kiszámítására közölt algoritmus (6.3. alfejezet), amellyel a szerző és társszerzői minden valószínűség szerint először oldották meg ezt a kb. 30 éve már felvetett problémát. Az algoritmus egyrészt az irányított gráfok elméletén, másrészt a sűrű realizációk kedvező tulajdonságain alapul. A 6.4. szakaszból kiderül, hogy optimalizálási eszközökkel viszonylag egyszerűen kezelhető az az eset is, amikor megengedünk egy pozitív diagonális transzformációt az egyes realizációk megoldásai között (lineáris konjugáltság). Hasznos eredménynek tűnik, hogy lineáris konjugáltság esetén is (bármely pozitív diagonális állapot-transzformációra) superstruktúrát ad a sűrű realizáció szerkezete.

A fejezettel kapcsolatos megjegyzések és kérdések:

- *A fejezet címe adott tulajdonságú dinamikusan ekvivalens hálózati struktúrák számításáról szól, pedig a 6.4. szakasztól megjelennek a lineárisan konjugált hálózatok is (pedig a két fogalom a definíciók szerint határozottan elkülönítendő).*
- *A 6.4.3. példánál a szerző azt állítja, hogy a kezdeti hálózatnak bizonyíthatóan nincs gyengén reverzibilis dinamikusan ekvivalens realizációja. Egyáltalán nem derül ki viszont a disszertációból, hogy ez a bizonyítás hogyan történt.*
- *Biológiai/biokémiai alkalmazások esetén a dolgozatban szereplő példánál sok esetben jóval nagyobb méretű hálózatok kezelésére van szükség. A disszertáció azonban nem tér ki arra, hogy az egyes optimalizálási módszereknek mik a jelenlegi méretkorlátai (azaz kb. hány csúcspontból álló hálózatokkal kapcsolatos számítási feladatok oldhatók meg átlagos hardverigény mellett).*

7. Új tudományos eredmények

A 7. összefoglaló fejezet a magyar nyelvű téziszfűzetben szereplő tézispontok angol változatát tartalmazza lényegében szó szerinti fordításban. Az egyes tézispontok rendre a 3-6. fejezetekhez kapcsolódnak, és minden pontnál feltüntette a szerző a kapcsolódó publikációk listáját. Helyet kap a fejezetben ezen kívül az eredmények gyakorlati hasznosítását és a további munka lehetséges irányait tartalmazó (elégé rövid) alfejezet is.

Összefoglaló vélemény

Összefoglalásként megállapítható, hogy a jelölt a nemnegatív polinomiális rendszerek analízisének és irányításának területén jelentős önálló tudományos eredményeket ért el. Az értekezés témaköréből kellő számú színvonalas publikáció született (1 társszerzővel közösen írt könyv a Springer kiadónál, 2 könyvfejezet, 19 db impakt faktoros folyóiratcikk, 2 egyéb folyóiratcikk, 13 referált nemzetközi konferenciakiadványban megjelent cikk). Megjegyzendő, hogy a jelöltnak egyéb alkalmazási területeken (főleg erőművi rendszerek modellezése, identifikációja és irányítása témakörében) is jelentős publikációi vannak társszerzőkkel közösen. A jelölt értekezéssel kapcsolatos publikációira megfelelő számú rangos külföldi hivatkozást kapott. A dolgozat témaköréhez az utóbbi 7-8 évben legalább 3 sikeresen megvédett PhD értekezés tartozik a jelölt (társ-)témavezetésével vagy társszerzőségével. Az értekezés téziseit elfogadom, javaslom a nyilvános vita kitűzését, és sikeres védelem esetén az MTA doktora fokozat odaítélését az informatikai tudományok területén.



Prof. Dr. Rudas Imre