Válasz Prof. Dr. Csendes Tibor egyetemi tanár
Szederkényi Gábor
„Computational Methods for the Analysis of Nonnegative Polynomial Systems”
című MTA doktori disszertációjához készített bírálatára

Mindenek előtt szeretném köszönetemet kifejezni Dr. Csendes Tibor Professzor Úrnak, hogy elvállalta dolgozatom bírálatát, és a disszertációhoz lényeges kérdéseket és megjegyzéseket fűzött. Megtisztelő számomra, hogy Professzor Úr az értekezésben leírt tudományos eredményeket fontosnak és színvonalasnak tartja. A válaszadás során a disszertációban bevezetett jelöléseket alkalmazom, ill. a saját publikációkra való hivatkozásoknál a dolgozatban található címkéket használom. Az egyéb publikációk adatait szöveg közben, zárójelben adom meg.

Válaszok az opponensi észrevételekre és megjegyzésekre

- *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 egyszerzős 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 publikációi 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.*

  A dolgozat anyagának összeállításánál törekedtem az MTA Műszaki Tudományok Osztálya előírásainak betartására, amelyek szerint az „értekezés benyújtásával a kérelmező többségében azokkal a jól elkülöníthető, saját eredményekkel pályázzon az MTA Doktora cím elnyerésére, amelyeket már publikált a szakterület meghatározó nemzetközi folyóirataiban.” A 96. oldal lábjegyzetének megfogalmazása sajnos valóban szerencsétlenül sikerült, és emiatt talán félrevezető lehet. Természetesen a dolgozat érdemi részének legnagyobb része saját eredményeket tartalmaz. Az értekezésben bemutatott eredmények alapjául szolgáló közleményeket tartalmazó publikációs listában szereplő folyóirat- és konferenciacikkeknél az értekezés tudományterülete, a műszaki informatika általános szabályai szerint döntően az első szerzőhöz tartozik a publikált eredmény, és ő használhatja fel ezt saját tudományos tézis megfogalmazására. (Természetesen nem első szerzőnek is lehet jól elkülöníthető saját hozzájárulása egy publikációban.) Ennek megfelelően a 2. kivételével minden tézisponthoz tartozik egynél több első szerzős referált angol nyelvű folyóiratcikk, a 3. és 4. tézispont számítási keretét megadó [J7] cikk pedig egyszerzős. Az 1., 3. és 4. tézispontokat és a disszertáció ezekhez tartozó fejezeteit (néhány példa kivételével) alapvetően ezen elsőszerzős folyóiratcikkek felhasználásával fogalmaztam meg. (Meg kell még jegyeznem, hogy a 4.(e) tézis-alponthoz tartozó [J9] folyóiratcikken társszerzőim javaslatára a szerzőket ABC-sorrendben tüntettük fel.) A 2. tézispont alapját képező [J5] folyóiratcikknél második szerzőként szerepelek, de én vagyok a cikk levelező szerzője (corresponding author), mert én koordináltam a cikk megírását, benyújtását és a bírálatokra való válaszadást. A cikkben publikált eredmény elérése különböző tudományterületerületeken való jártasságot igényelt. Három társszerzőm elsősorban kémiai és termodinamikai oldalról járult hozzá nélkülözhetetlen módon a hamiltoni leírás megfogalmazásához, az én saját hozzájárulásom pedig a probléma rendszerelméleti felvetése, kezelése és megoldása, amelyet a 2. tézispontban fogalmaztam meg, és amelyet önálló eredménynek tartok. A [J5] közlemény témakörében megjelent [J4] cikk új eredménye pedig elsősorban Dr. Otero Murashoz kötődik (ebben a cikkben ennek megfelelően ő a levelező szerző), így azt csupán kapcsolódó publikációként jelöltem meg, az ott leírt eredményeket a disszertációban nem szerepeltettem (csak alkalmazásként utaltam rájuk), és tézispontot sem fogalmaztam meg belőlük. A disszertáció 3–6. érdemi fejezetei a társszerzőkkel közös publikációkból származó 3.2.2, 3.3, 4.2.2, 4.2.3, 6.4.2 és 6.5.1 alfejezetek ill. szakaszok kivételével (melyekből nem fogalmaztam meg tézispontot) saját számítási eredményeken és példákon alapulnak. A Függelék példáinak kiszámítása is saját munkám eredménye. Ezen kívül a 4.1 alfejezet további definíciókat és jelöléseket tartalmaz, ahogy ezt a 8. oldalon szereplő 1.3 alfejezetben is megemlítettem. A doktori eljárás során társszerzői nyilakozatot nem kellett benyújtanom.

Itt egyben válaszolnék a bírálat végén feltett, de a megjegyzéshez kapcsolódó 1. kérdésre is. A [J5] cikk eredményei bővebb termodinamikai kontextusban szerepelnek Dr. Otero Muras 2010-es PhD értekezésében (összesen 16 oldal terjedelemben a 311 oldalas disszertációban), hiszen erre a leírásra épül a [J4] cikkben leírt passzivitás alapú szabályozótervezési eljárás, amelyet részletesen ismertet az említett értekezés. (A [J4]–[J5] cikkeken kívül ugyanezen PhD értekezéshez még 6 db SCIs folyóiratcikk és 12 referált konferenciacikk tartozik, amelyekben én nem vagyok társszerző.) A [J5] cikkel kapcsolatban társszerzői nyilatkozatot nem kértek tőlem, mivel ez a vigói egyetem doktori iskolájában még azonos nemzetiségű társszerzők esetében sem szükséges.

- *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.*

  A műszaki rendszerelméletben – a tárgy több tudományterülethez való közvetlen kapcsolódása miatt – egyaránt előfordulnak az alkalmazott matematikában szokásos definíció-tétel-bizonyítás formát követő, és azokat példákkal illusztráló tárgyalásmódú, és a hagyományos mérnöki analógiás konstrukciókat követő, példák általánosításaként kimondott eredményeket tartalmazó közlemények. A dolgozat alapjául szolgáló közlemények tárgyalásmódja emiatt – természetes módon – nem egységes, hanem alkalmazkodik a befogadó folyóirat illetve konferencia jellegéhez. A dolgozat megírása során igyekeztem egységesíteni a jelöléseket, de követtem az egyes fejezetekhez tartozó publikációk leírási módját. Be kell ismernem, hogy ez az eredmények bemutatásának következetlen stílusát eredményezte, hiszen bizonyos esetekben a formális módon kimondott állítást a szokványos módon követi a bizonyítás, míg máshol az elvégzett számítások után mondtam ki az ezekhez kapcsolódó állítást. Ez utóbbi eredményeket valóban előnyösebb lett volna állítás – bizonyítás formába átírni. Ennek ellenére mindvégig törekedtem arra, hogy az egyes eredményekhez tartozó jelölések és számítások nyomonkövethetők és ellenőrizhetők legyenek. Ezt természetesen azon folyóiratok is megkövetelték, ahol az eredmények publikálása megtörtént. Így reményeim szerint – annak ellenére, hogy a Tisztelt Bírálóm által jogosan kifogásolt szerkesztési következetlenség miatt formailag nem bizonyításokhoz tartoznak – ellenőrizhető levezetéseknek ill. számítási eredményeknek tekinthetők a 3.1 alfejezetben a (3.1) – (3.13) egyenletek, a 3.2.1 és 3.2.3 szakaszok, a 4.2.1 szakasz, az 5.3 és 5.4 alfejezetek, a 6.2.1 és 6.2.2 szakaszok ill. a 6.5.2 szakasz.

A megjegyzés nyomán a dolgozat ismételt átolvasása után a következő kérdésben érzem szükségét a további pontosításnak.

Kinetikus rendszerek lineáris konjugáltsága. A disszertáció 2.5.9 alfejezetében valószínűleg túlságosan szűkszavúan vezettem be a lineáris konjugáltság fogalmát, amelyet itt az alábbiakkal szeretnék pontosítani és kiegészíteni.

Tekintsük az (Y, A_k) és (Y, A'_k) párok által megadott kinetikus rendszereket:

$$\begin{aligned} \Sigma_1 :&\ \ \dot{x} = Y \cdot A_k \cdot \psi(x) \\ \Sigma_2 :&\ \ \dot{\bar{x}} = Y \cdot A'_k \cdot \psi(\bar{x}), \end{aligned}$$

ahol $x, \bar{x} \in \bar{\mathbb{R}}^n_+$, $Y \in \mathbb{R}^{n\times m}$, továbbá $A_k, A'_k \in \mathbb{R}^{m\times m}$ Kirchhoff mátrixok, valamint $\psi(x) = [\psi_1(x)\ \psi_2(x)\ \dots\ \psi_m(x)]^T$, ahol $\psi_j(x) = \prod_{i=1}^n x_i^{Y_{ij}}$, $j = 1, \dots, m$. Ekkor Σ_1-et és Σ_2-t *lineárisan konjugált kinetikus rendszerek*nek nevezzük, ha valamely $c \in \mathbb{R}^n_+$-re $T = \mathrm{diag}(c)$ és $x(0) = T\bar{x}(0)$ esetén

$$x(t) = T\bar{x}(t)\ \forall t > 0.$$

Tegyük fel, hogy Σ_1 és Σ_2 lineárisan konjugált. Ekkor

$$\dot{\bar{x}} = T^{-1}\dot{x} = T^{-1}YA_k\psi(x) = T^{-1}YA_k\psi(T\bar{x}) = T^{-1}YA_k \cdot \mathrm{diag}(\psi(c)) \cdot \psi(\bar{x}).$$

Ebből és Σ_2 felírásából következik, hogy

$$T^{-1}YA_k \cdot \mathrm{diag}(\psi(c)) = YA'_k,$$

amiből a következő adódik:

$$YA_k = TYA'_k \cdot (\mathrm{diag}(\psi(c)))^{-1} = TYA_b,$$

ahol $A_b = A'_k \cdot (\mathrm{diag}(\psi(c)))^{-1}$, azaz $A'_k = A_b \cdot \mathrm{diag}(\psi(c))$. Látható, hogy A_b olyan Kirchhoff mátrix, amelynek szerkezete (azaz a nulla és nem nulla elemek pozíciója) megegyezik A'_k-vel, hiszen A_b úgy áll elő, hogy A'_k oszlopait pozitív skalárokkal szorozzuk.

A fenti számításokból látszik, hogy igaz még a következő is: Tekintsük a Σ_1 kinetikus rendszert, és tegyük fel, hogy létezik olyan A_b Kirchhoff mátrix és $c \in \mathbb{R}^n_+$, hogy $YA_k = TYA_b$, ahol $T = \mathrm{diag}(c)$. Ekkor létezik olyan $(Y, \bar{A}_k)$ által megadott $\bar{\Sigma}$-val jelölt kinetikus rendszer, hogy Σ_1 és $\bar{\Sigma}$ lineárisan konjugált, és $\bar{A}_k = A_b \cdot \mathrm{diag}(\psi(c))$.

A jelen kiegészítés remélhetőleg átláthatóbbá teszi a dinamikus ekvivalencia ($T = I$) és lineáris konjugáltság 5. és 6. fejezetekben leírt, optimalizálási keretben lineáris korlátozásként történő kezelését. Itt nem fordul elő az a hiba, ami a (G. Craciun and C. Pantea. Identifiability of chemical reaction networks. *Journal of Mathematical Chemistry*, 44:244–259, 2008) cikk 4.4 Tételében (amelyre ellenpéldát adtam a [J6] cikkben illetve a dolgozat 5.1 alfejezetében) jelentkezett, ahol a szerzők tévesen feltételezték, hogy a forrás-komplexekhez tartozó monomok minden esetben megjelennek a kinetikus differenciálegyenletek jobb oldalán.

- *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.*

  Elfogadom, és köszönöm a javítást.

- *A 2.1 Táblázat itt fölösleges. Esetleg egy ismeretterjesztő műben kellhetne.*

  Egyetértek az észrevétellel, az említett táblázat valóban közismert információkat tartalmaz.

- *(2.13) egyenletben már z a változó, tehát a 2.3.3 Alfejezet elején z^* kellene (vagy a (2.11) differenciálegyenlet rendszerre hivatkozni).*

  Köszönöm az észrevételt, a 2.3.3 alfejezet első bekezdésében valóban tévesen szerepel z^* helyett y^*.

- *A 15. oldal elején jó lett volna a symplectic structure definícióját is megadni. Ugyanitt lejjebb „... concentrated parameter model in the simplest case”?*

  Köszönöm az észrevételt, a szimplektikus struktúrát megadó mátrix definícióját itt pótolom.
  Legyen $Q \in \mathbb{R}^{2k\times 2k}$. Q-t szimplektikusnak nevezzük, ha valamely nemszinguláris, megfelelő méretű, ferdén szimmetrikus P-vel jelölt valós mátrixra fennáll a következő egyenlőség:

  $$Q^T PQ = P.$$

  Ha a (2.22) egyenletben $J(x)$ teljes rangú, akkor a (2.26) egyenletben

  $$J(\bar{x}) = \begin{bmatrix} 0 & I^k \\ -I^k & 0 \end{bmatrix}$$

  lesz, amelyre pl.

  $$P = J(\bar{x}) = \begin{bmatrix} 0 & I^k \\ -I^k & 0 \end{bmatrix}$$

  választása esetén igaz lesz, hogy $J^T(\bar{x})PJ(\bar{x}) = P$.

  A kifogásolt mondattal csak annyit szerettem volna leírni a 2.5.1 alfejezet első bekezdésében, hogy a legegyszerűbb modellezési feltételezésekkel élve koncentrált paraméterű, közönséges differenciálegyenletekből álló modellt használunk a kinetikai rendszerek leírására.

- *Egy egyszerű képlettel leírható, bármiféle belső bonyolultságtól mentes értékadást nem hívnék algoritmusnak (Algorithm 1).*

  Egyetértek a megjegyzéssel, az említett értékadást helyesebb lett volna eljárásnak nevezni.

- *A 29. és a 30. oldalon eltérő írásmódja van a disszipatív Hamiltoni rendszernek.* Igen, köszönöm az észrevételt. A (3.15) egyenletben valóban hiányzik az $\frac{1}{2}$-es szorzó, ami a (3.3) egyenletben még helyesen szerepelt.

- *A 31. oldal közepén a (2.1) hivatkozás helyett (2.11) kellene.*

  Köszönöm a javítást. Az említett hivatkozás hibás az értekezésben, a szövegben valóban a (2.11)-es egyenletben szereplő kvázipolinomiális rendszermodellre szerettem volna hivatkozni.

- *(3.75) és (3.77) nem egyenletek, nem kellene ezeket a sorokat külön beszámozni.*

  Igen, az említett sorok a (3.74) és (3.76) egyenletekhez tartoznak, nem kellett volna külön számot kapniuk.

- *(6.16) – (6.20) számára az i, j indexeket az $i > j$ föltétel mellett korlátozni is kellene: $i, j = 1, 2, \ldots, m^2$?*

  Igen, korlátozni kell az indexeket a következőképp: $i = 1, 2, \ldots, m$.

- *(6.47) nem lineáris programozási feladat, hanem egy lineáris egyenletrendszer. ... 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.*

  Köszönöm a helyesbítéseket, a célfüggvény hiányában valóban mindkét esetben csak lineáris egyenletrendszerről van szó.

- *A 72. oldalon nyilván vagy minimalizálni, vagy maximalizálni szeretnénk a reakciósebességi együtthatók L1 normáját.*

  Igen, a „minimize and maximize” kifejezés értelmetlen a (6.57) egyenlet alatti második bekezdésben, „minimize or maximize” lett volna a helyes megfogalmazás.

- *Table 6.1 valójában egy algoritmus. Ennek megfelelően kellene nevezni is.*

  Teljes mértékben egyetértek az észrevétellel, az algoritmus szerkesztési gondatlanság miatt került táblázatba.

- *A 84. oldal 4.-5. sorában írt „exactly the same” helyett – gondolom – „isomorf” kellene.*

  Igen, ez lett volna a helyes és pontos megfogalmazás, hiszen a két gráfnál alkalmazott jelölések különbözőek.

- *A 85. oldal alján említett optimalizálási eljárás nem volt kifejtve a 2.5.1 szakaszban.*

  A 2.5.1 szakasz megemlítése hibás hivatkozás a 85. oldalon. Helyesen a 6.1 alfejezetben szereplő (6.1)–(6.4) ill. (6.8)–(6.9) korlátozó feltételek módosításáról van szó.

- *A 6.4.2 szakasz elején írtakkal ellentétben a MILP optimalizálási algoritmus nem volt kifejtve ebben az alfejezetben. Esetleg a feladat volt kitűzve.*

  Köszönöm az észrevételt, sajnos pontatlanul fogalmaztam a dolgozatban. Valóban nem szerepel MILP megoldási algoritmus ismertetése a 6.4 alfejezetben (ez nem is célja a leírásnak), csak a probléma megfogalmazása található itt.

- *A 6.5.1 Tétel bizonyításában dim(KerY)-nak nem a becslései, hanem a korlátai azok, amiket használunk.*

  Igen, valóban ez lett volna a helyes szóhasználat.

- *Az értekezésben a legtöbb helyen „numerical procedure/algorithm/method" helyett „computational" értendő.*

  Igen, köszönettel elfogadom a megjegyzést. A „computational" jelzőt helyes alkalmazni az ismertetett eljárásokra, ahogy azt a dolgozat címében is használom.

- *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 fölsorolásából az „and". [143] és [144]-ben nem kellene azonos név a szerzőnek?*

  Köszönöm a hivatkozásokra vonatkozó észrevételeket. (A rendezési hibák oka, hogy a LaTeX dokumentumkészítő rendszer angol nyelv választása esetén nem a magyar ABC sorrendje szerint rendezi azokat a hivatkozásokat, ahol a szerzők nevében ékezetes betű szerepel, és ennek ellenőrzésére nem fordítottam kellő gondot.)

  Az [55] és [56] hivatkozásoknál a kérdéses szerző neve helyesen T. M. Rocha Filho.

  [143] és [144] szerzője valóban azonos, és legtöbb publikációján az E. D. Sontag név szerepel.

- *A futásidők megadása során a másodperc jele elé szóköz kell.*
  A kiemelt matematikai képletek nagy része után hiányzik az írásjel, a pont vagy a vessző – holott a jel ölt egyes esetekben ezeket helyesen alkalmazza.
  Ha valami komoly indok nincs, akkor az egy zárójelben megjelölt hivatkozásokat jobb lett volna növekvő sorrendben megadni.
  Ha konkrét fejezetről, szakaszról 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 LATEX-ben egy 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.

  Az összes fenti formátumra vonatkozó megjegyzést köszönettel elfogadom, és a jövőben igyekszem ezeket következetesen alkalmazni.

Kérdésekre adott válaszok

1. *A [J4]-[J5] cikkek, a 4. fejezet fő publikációi alapján kapott-e tudományos fokozatot azok első szerzője?*

   Ezt a kérdést az első megjegyzésre adott válaszomban érintettem.

2. *A gyakorlatilag nulla és a nem zérus megoldások közti numerikus (számítógépes?) különbségtételhez (5.21) miért kell a bevezetett ϵ mennyiség?*

   Valóban helyesebb lenne itt a „számítógépes különbségtétel" kifejezést használni. A kérdésre válaszolva: a standard LP és MILP problémafelírások szigorú egyenlőtlenségeket nem engednek meg. Így $\epsilon = 0$ és $i = 1, \ldots, m^2$ esetén akkor is 1-es értéket vennének fel a nem nulla reakciósebességi együtthatók nyomonkövetésére az 5.4 alfejezet (5.18) képletében bevezetett δ_i bináris változók, ha $z_i = 0$ teljesülne. ϵ megfelelő megválasztásával egyúttal biztosítható, hogy a dinamikus ekvivalenciához kapcsolódó (6.1) lineáris feltétel az A_k mátrix ϵ alatti értékeinek kinullázása után is a kívánt pontossággal teljesüljön.

3. *Miért nem lehet $\epsilon = \epsilon_2$ (6.16)-ban?*

   Köszönöm a kérdést, ϵ_2 bevezetését sajnos valóban nem indokoltam kellőképp a dolgozatban. ϵ_2 további hangolóparaméterként lehetőséget ad arra, hogy a reverzibilis reakciókhoz tartozó reakciósebességi állandók alsó korlátját ϵ-nál magasabban határozzuk meg, és (6.21) segítségével világosan elkülönítsük ezeket a nullának tekintett reakciósebességi állandóktól. Ezért definiáltam ϵ_2-t ϵ-nál nagyobbnak.

Végezetül még egyszer köszönöm Dr. Csendes Tibor Professzor Úrnak a körültekintő bírálatot, amely lehetőséget adott lényeges kérdések tisztázására. Remélem, Professzor Úr válaszaimat megfelelőnek és elfogadhatónak tartja. A dolgozatban minden igyekezetem ellenére előforduló zavaró pontatlanságok és szerkesztésbeli következetlenségek részletes felderítéséért külön köszönettel tartozom Tisztelt Bírálómnak.

Budapest, 2012. november 15.

Szederkényi Gábor