

**Válasz Prof. Dr. Mizsey Péter 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. Mizsey Péter Professzor Úrnak, hogy időt és fáradságot szánt dolgozatom áttekintésére, és azt kérdésekkel és megjegyzésekkel látta el. Az opponensi véleményben megfogalmazott megjegyzésekre és kérdésekre adott válaszaimban a disszertációban is szereplő saját publikációkra való hivatkozásokat azonos címkékkel szögletes zárójelben szerepeltettem, az új hivatkozások esetén pedig a jobb olvashatóság érdekében a szöveg közben adom meg a cikkek adatait.

Válaszok az opponensi észrevételekre és megjegyzésekre

- *Meg kell jegyezzem, hogy a jelölésjegyzék koránt sem teljes, szerencsés lett volna az akronim szavak értelmét is megadni, hogy azokat ne mindig lapozgatással kelljen megkeresni, vagy az olvasónak saját jelölésjegyzéket készíteni.*

Teljes mértékben egyetértek az észrevétellel. Meglehetősen sok különböző tudományterületről származó rövidítést használtam, amelyeket rendszerint csak az első előfordulásakor definiáltam. Az ezáltal okozott kényelmetlenségért Tisztelt Bírálóm elnézését kérem.

- *Kérdésem: lát-e lehetőséget arra, hogy módszerét kiterjessze az exergia és az azzal leírható energetikai hatékonyság vizsgálatára?*

Tudomásom szerint az említett kérdéssel jelenleg elég szűk körben foglalkoznak (feltehetően amiatt, hogy mind termodinamikai mind pedig nemlineáris szabályozásméleti szempontból is eléggé speciális ismereteket igényel), de a közelmúltban születtek már bizonyítottan alkalmazható eredmények a témakörben. Az (R. D. Robinett and D. G. Wilson. Exergy and irreversible entropy production thermodynamic concepts for nonlinear control design. *International Journal of Exergy*, 6:357–387, 2009) folyóiratcikkben a szerzők kapcsolatot kerestek az általam is vizsgált – klasszikus mechanikából származó – hamiltoni leírás és a termodinamika fogalmai között. Megmutatták, hogy az exergia (amelyet a rendszer összes energiájának és a konstans környezeti hőmérséklettel megszorozott entrópiájának különbségeként írhatunk fel) és a Hamilton-függvény idő szerinti deriváltja megegyezik egymással viszonylag szigorú modellezési feltételezések esetén (elhanyagolható hő- és exergiaáram a rendszer és környezete között, a rendszer térfogatváltozás által nem végez munkát a környezeten). Ebben az esetben a Hamilton-függvény időbeli deriváltja felírható úgy, mint az exergia generálási és disszipálási sebességének különbsége. Ezzel a felbontással Ljapunov stabilitási tételének és ehhez kapcsolódó klasszikus eredmények felhasználásával feltételek adhatók a rendszer egyensúlyi pontjainak (aszimptotikus) stabilitására vagy instabilitására. A Ljapunov-értelemben optimális szabályozás ekkor úgy érhető el, hogy az exergia disszipálási sebességét maximalizáljuk. Érdekes következmény, hogy egyszerű mechanikai rendszerek PID szabályozásánál a visszacsatolás komponensei felbonthatók exergia-generáló és -disszipáló részekre. A kidolgozott elméletet először robot manipulátorok szabályozására (R.D. Robinett and

D.G. Wilson. Exergy and irreversible entropy production thermodynamic concepts for control system design: robotic servo applications. In *Proc. 2006 IEEE International Conference on Robotics and Automation – ICRA 2006*, pages 3685–3692, 2006), újabban pedig energiatárolóval ellátott megújuló energiahálózatok optimális szabályozására alkalmazták (D.G. Wilson. Renewable energy microgrid control with energy storage integration. In *2012 International Symposium on Power Electronics, Electrical Drives, Automation and Motion (SPEEDAM)*, pages 158–163, 2012). Határozottan látok tehát lehetőséget további hasznos eredmények elérésére a hamiltoni módszertan alkalmazásával az energia hatékonyság vizsgálatának és fejlesztésének területén.

- *Általános kifogásul megemlítem, hogy viszonylag kevés az igazán valós példa, de az eredmények fiktív példákon való bemutatása meggyőző.*

Teljes mértékben egyetértek a megjegyzéssel. Mentségemre szolgáljon, hogy dolgozatomban igyekeztem a saját módszertani hozzájárulás bemutatására koncentrálni, és a terjedelmi korlátok miatt a főszövegben csak viszonylag egyszerű példák bemutatására volt lehetőségem. Másrészt, ahogy a dolgozat bevezetőjében is említettem, a kvázipolinomiális és kinetikus rendszereket számítási szempontból kedvező tulajdonságú általános nemlineáris rendszerosztálynak tekintem, emiatt gyakran fizikai jelentéssel nem rendelkező, de egyéb szempontból érdekes tulajdonságú példákkal illusztráltam a bemutatott eljárásokat.

A kutatómunka során természetesen kidolgoztunk példákat valós elektromos, mechanikai, fiziko-kémiai vagy biológiai motivációjú rendszerek modelljei alapján. Ezek közül a fontosabbakat igyekszem itt felsorolni ill. egy viszonylag friss példát részletesebben bemutatni. [J14]-ben a disszertáció 3.3.1-es példájában ismertetett fermentációs modellen kívül invariánsok keresését illusztráltuk egy fizikai motivációjú Rikitake-rendszeren és egy nemlineáris áramkör modelljén. A 3.3.2 alfejezetben összefoglalt stabilizáló szabályozótervezési módszert [J15]-ben egy, a 3.3.1-es példában szereplő modellhez hasonló fermentációs folyamat példáján szemléltettük. [J16]-ban egy valós mérési adatok alapján identifikált gázturbina-modell nyomatékbecslésen alapuló adaptív szabályozására tettünk javaslatot, ahol a zéró dinamika stabilitását kvázipolinomiális alakba való átírás után tudtuk eredményesen vizsgálni. A vizsgált modellosztályok sajátosságai a paraméterbecslésben és a struktúrális identifikálhatósági analízisben is kihasználhatók, azonban ennek bemutatása már túlmutatott volna az értekezés keretein, és a disszertáció írásakor ezzel kapcsolatban fontos munkák voltak még folyamatban. [J17]-ben módszertadtunk egy GnRH neuron modell valós mérési adatok alapján történő paraméterbecslésére, [J19]-ben pedig a modell polinomiális alakba írása után megmutattuk, hogy a struktúrális identifikálhatóság feltételei bizonyos esetekben nem teljesülnek. (G. Szederkényi, J. R. Banga, and A. A. Alonso. Inference of complex biological networks: distinguishability issues and optimization-based solutions. *BMC Systems Biology*, 5:177, 2011) folyóiratcikkben az irodalomból ismert biológiai rendszerek példáján világosan illusztráltuk az egyébként ismert tényt, hogy a modelltől előzetesen rendelkezésre álló tudásnak milyen fontos szerepe van a struktúra- és paraméterbecslésben. E cikk anyagából származik a Függelék A.2.3-as példája. Ugyanitt megmutattuk egy represszilátor-modell és egy biokémiai kapcsolórendszer struktúrális egyértelműségének hiányát is. Ez utóbbit szeretném itt röviden bemutatni.

Élesztősejtekben található biokémiai kapcsolómechanizmus modellje. A modellt eredetileg (C. Conradi, D. Flockerzi, J. Raisch, and J. Stelling. Subnetwork analysis reveals dynamic features of complex (bio)chemical networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 104:19175–19180, 2007) folyóiratcikkben publikálták, ahol a rendszer változóinak, paramétereinek és működésének részletesebb leírása is megtalálható. A koncentrációkhoz tartozó állapotváltozók sorrendje azonos az eredeti cikkel:

x_1 : [Sic1], x_2 : [Sic1P], x_3 : [Clb], x_4 : [Clb·Sic1], x_5 : [Clb·Sic1P], x_6 : [Cdc14], x_7 : [Sic1P·Cdc14], x_8 : [Clb·Sic1P·Cdc14], x_9 : [Clb·Sic1·Clb].

A rendszer Y mátrixa a következő:

$$Y = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

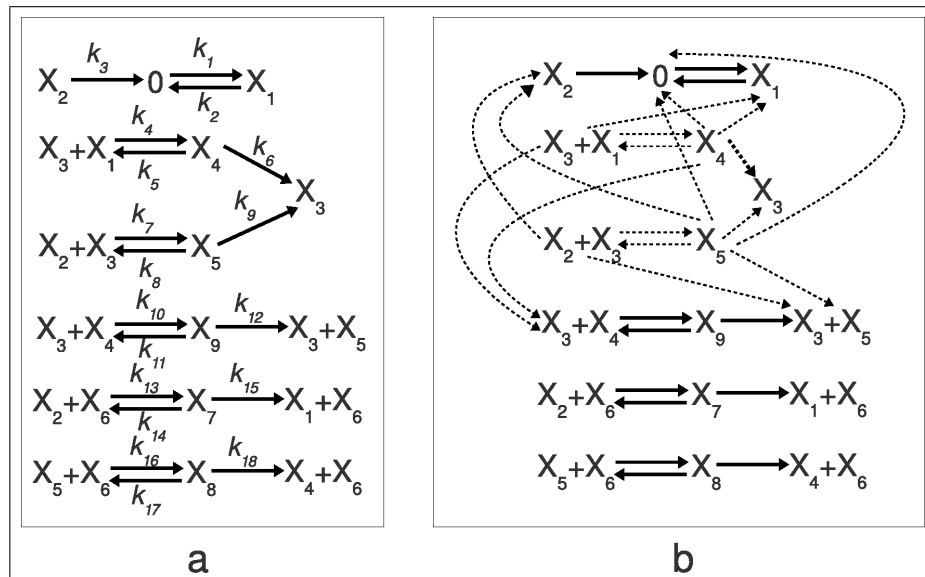
Az A_k mátrix off-diagonális elemei (azaz a reakciósebességi állandók) az alábbiak:

$$\begin{aligned} [A_k]_{2,1} &= k_3, [A_k]_{2,3} = k_2, [A_k]_{3,2} = k_1, [A_k]_{4,5} = k_5, [A_k]_{5,4} = k_4, [A_k]_{6,5} = k_6, \\ [A_k]_{6,8} &= k_9, [A_k]_{7,8} = k_8, [A_k]_{8,7} = k_7, [A_k]_{9,10} = k_{11}, [A_k]_{10,9} = k_{10}, [A_k]_{11,10} = k_{12}, \\ [A_k]_{12,13} &= k_{14}, [A_k]_{13,12} = k_{13}, [A_k]_{14,13} = k_{15}, [A_k]_{15,16} = k_{17}, [A_k]_{16,15} = k_{16}, \\ [A_k]_{17,16} &= k_{18}. \end{aligned}$$

A következő reakciósebességi értékekkel számoltunk:

$$k = [4.1 \ 3.2 \ 6.7 \ 7.3 \ 3.8 \ 2.4 \ 4.5 \ 5.1 \ 6.2 \ 7.7 \ 8.6 \ 9.5 \ 2.4 \ 4.9 \ 5.8 \ 10.2 \ 6.3 \ 8.5]^T.$$

Az eredeti reakcióhálózati struktúra és a kiszámított 28 reakcióból álló sűrű realizáció az alábbi ábra (a) ill. (b) részén látható. Utóbbin a 12 alapreakciót folytonos, a 16 nem alapreakciót szaggatott nyilak jelölik.



A dolgozatban ismertetett eljárásokkal megmutatható, hogy az egyedüli lehetséges ritka realizációs struktúra megegyezik az eredeti hálózattal, de a reakcióhálózat szerkezete nem egyértelmű. A struktúrális egyértelműség biztosítása érdekében tehát érdemes minden olyan reakciót kizárni, amely az adott alkalmazás szempontjából nem realizisztikus vagy amely ellentmond a modellezési feltételezéseknek. A jelen példában a következő négy reakció kizárása már biztosítja a struktúrális egyértelműséget: $X_5 \rightarrow X_3 + X_5$, $X_4 \rightarrow X_3 + X_4$, $X_2 + X_3 \rightarrow X_3 + X_5$, és $X_3 + X_1 \rightarrow X_3 + X_4$. Azaz 4 jól kiválasztott reakció elhagyásából már következik további 6 reakció törlése, és végül megmarad egy 18 reakcióból álló egyértelmű szerkezet.

- *Átfogó jellegű kérdésem, hogy Jelölt hogyan látja az itt bemutatott módszerek alkalmazhatóságát, kiterjesztését, illetve új, hasonló módszerek alkalmazását a parciális differenciálegyenletekkel leírható vegyésztechnológiai jelenségek vizsgálatára. Az ilyen egyenletek pl. a csőreaktorok időbeni viselkedése, diffúziós folyamatok esetének vizsgálatát, optimalizálását tenné lehetővé.*

Köszönöm a kérdést, amely közvetlenül a témakör legaktuálisabb kutatási irányaihoz kapcsolódik. Elöljáróban szeretném megjegyezni, hogy a folyamatmodellezés és különösen az elosztott paraméterű rendszerek modellezése és analízise nem szakterületem, így a kérdést rendszerelméleti aspektusból tudom megközelíteni.

Az erős tér-időbeli dinamikával rendelkező folyamatokat (melyek közé a kérdésben említett rendszerek is tartoznak) bizonyos modellezési célok mellett gyakran szükséges elosztott paraméterű rendszerként leírni. A fizikai elveken alapuló modellezés során ilyen esetekben leggyakrabban nemlineáris parciális differenciálegyenleteket kapunk. Ezeket a végtelen dimenziós modelleket nem könnyű diagnosztikai, állapotbecslési, identifikációs, folyamat-optimalizálási vagy -szabályozási feladatokhoz illeszteni. Ezen problémák gyakorlati megoldásához mindenképp valamiféle modell-redukcióra van szükség, ahol a feladat kezelhetőségét és a megvalósításhoz szükséges számítási kapacitást alapvetően meghatározza a redukált modell dimenzionalitása és komplexitása. Értekezésemben közönséges differenciálegyenletrendszerekkel leírt rendszerekkel foglalkozom, így olyan redukciós módszereket érdemes elsősorban tekinteni, amelyek ilyen modelleket eredményeznek. A legkézenfekvőbb választás valószínűleg az egyenesek módszere (method of lines), amely a véges differencia módszer speciális esete, ahol csak térben diszkrétizálunk. Ezt a módszert alkalmazva reakció-diffúzió rendszereknél, a diffúzió leírható lesz alkalmas konvekciós hálózattal (K.M. Hantos and I.T. Cameron. *Process modelling and model analysis*. Academic Press, London, 2001). A jelenleg folyó kutatásaink előzetes (és még további megerősítést igénylő) eredményei alapján ilyenkor szigorú feltételek teljesülése esetén olyan kinetikus differenciálegyenleteket kapunk, amelyek szerkezete viszonylag átlátható módon illeszkedik az eredeti folyamatrendszer struktúrájához. Ebben az esetben tehát feltehetően alkalmazhatók lesznek a disszertációban ismertetett kinetikus rendszerekre vonatkozó számítási módszerek és a reakcióhálózatok elméletének eredményei. Megjegyzem, hogy a kapott differenciálegyenletek sok egyéb esetben is kinetikussá alakíthatók, de ha teljesen elszakadunk a fizikai struktúrától, akkor nagy valószínűséggel nehezebben interpretálható eredményeket kapunk.

Szeretnék még röviden kitérni a passzivitáselmélet és a hamiltoni struktúra elosztott paraméterű rendszerek elméletében történő alkalmazására. Elosztott paraméterű folyamatrendszerek passzivitás alapú szabályozásával kapcsolatban Alonso és munkatársai értek el jelentős eredményeket termodinamikai megközelítésben (A. A.

Alonso, B. E. Ydstie, and J. R. Banga. From irreversible thermodynamics to a robust control theory for distributed process systems. *Journal of Process Control*, 12:507–517, 2002). A szerzők javaslatot tettek a nem disszipatív jelenségek visszacsatolással történő kompenzálására, és állapotbecslők tervezésére. Az értekezésben szereplő hamiltoni struktúrához leginkább illeszkedő felírást elosztott paraméterű rendszerekre van der Schaft és Maschke javasolt (A.J. van der Schaft and B.M. Maschke. Hamiltonian formulation of distributed-parameter systems with boundary energy flow. *Journal of Geometry and Physics*, 42:166–194, 2002). A keretbe sikeresen beillesztették a távíró egyenleteket, a Maxwell-egyenleteket, egy két végén kifestített rezgő húr mozgásának egyenleteit, és az ideális folyadékok áramlását leíró Euler-egyenleteket. Sajnos az ilyen rendszerek térbeli (pl. végeselem- vagy véges differencia módszerrel történő) diszkretizálása során kapott közönséges differenciálegyenletekre már általában nem teljesülnek a rendszeranalízis és szabályozótervezés szempontjából lényeges tulajdonságok, pl. az impulzus- és energiamegmaradás vagy a szimplektikus szerkezet. Ezért az utóbbi évek fontos kutatási iránya olyan diszkretizálási eljárások kidolgozása, amelyek ezeket a tulajdonságokat képesek megőrizni (M. Seslija, A.J. van der Schaft, and J.M.A. Scherpen. Discrete exterior geometry approach to structure-preserving discretization of distributed-parameter port-Hamiltonian systems. *Journal of Geometry and Physics*, 62:1509–1531, 2012).

Végezetül még egyszer köszönöm Dr. Mizsey Péter Professzor Úrnak a pozitív bírálatot, amely lehetőséget adott, hogy a disszertációban leírt eredmények szélesebb megvilágításba kerülhessenek. Megtisztelő számomra, hogy a dolgozatban ismertetett tudományos eredményeket Professzor Úr hasznos újdonságként fogadja el.

Budapest, 2012. november 12.

Szederkényi Gábor