

Vélemény Simon Péter „Bifurkációk komplex rendszerek differenciálegyenleteiben”

című MTA doktori értekezéséről

Az értékelést az alábbi szempontok szerint végeztem :

- a) csak a doktori mű értékelése a feladat
- b) a doktori mű be kell, hogy mutassa a pályázó tudományos munkásságának egy jellemző részét
- c) egyformán kell súlyozni a téma és az eredmények jelentőségét (fontosságát, alkalmazhatóságát, hasznosságát) az eredmények mélységével (eredetiségével, ötletességével, bonyolultságával)
- d) javasolni kell a mű elfogadását vagy elutasítását

A disszertáció sok eredményt tartalmaz, különböző témákkal foglalkozik, sokszínű a felhasznált apparátus. Így érthető, hogy nem lehetett mélyebben belemenni a témák részletes történelmi hátterébe úgy a matematikaiba mint a fizikai, kémiai és biológiaiába. Ennek ellenére a Bevezetés ill. a Tézisek első két fejezete jó és érthető képet ad úgy az addig történekről, mint a dolgozat témájáról-eredményeiről. A vizsgált modellek szinte mindig rokoníthatók valamilyen folyamattal, ez segíthet elképzelni a megfelelő PDE és ODE megoldásait és nemcsak matematikailag teszi érdekessé az eredményeket.

A következőkben azokat az eredményeket emelném ki, melyek nekem leginkább tetszettek és szerintem elérik a hasonló helyzetben elvárt színvonalat.

1. Az $\Delta u + f(u) = 0$ egyenlet radiál szimmetrikus verziója az $ru'' + (n-1)u' + rf(u) = 0$ egyenlet, ehhez járulnak az $u'(0) = 0$, $u(R) = 0$ nem-standard peremfeltételek. A kérdés is nem-standard: hány pozitív megoldása van a feladatnak?

Különböző f -ek jöhetnek szóba, pl. e^u (Liouville), u^p , $u^p + u^q$ és $u^p \pm u^{-\alpha}$, valamennyi külön vizsgálatot igényel.

A shooting módszerről, mely alkalmazása természetes, általában az a vélemény, hogy egyszerűen alkalmazható-ezt a Matlab vagy Maple kísérletekből vonják le. A valóság az, hogy ez a módszer csak egy váz, amit szinte mindig nagyon nehéz megtölteni tartalommal. Erre szép példát láthatunk a második fejezetben, mely tele van ötletekkel (a $T(c)$ függvény bevezetése, tulajdonságainak vizsgálata, Hamilton függvény bevezetése stb.). Az eredmények is jók, itt csak egyet említek meg, a 2.7 Tételt, mely az $f = u^p - u^{-\alpha}$, $n=1$ és $0 < \alpha < 1$ esettel foglalkozik: pl. ha $2\alpha - 1 < p < 1$, akkor léteznek olyan $R_1 > R_2 > 0$ számok, hogy ha $R < R_2$ nincs megoldás, $R_2 < R < R_1$ esetén kettő van, $R = R_2$ és $R > R_1$ esetén egy-egy.

2. Az $u_t = Du_{xx} + f(u)$ típusú egyenletrendszer (u=u(x,t)-vektor) klasszikus objektumok a természettudományokban, így nem csoda, hogy a PDE elmélet egyik legtöbbet vizsgált része is. Tegyük hozzá, hogy ugyanakkor nagyon kevés a teljes matematikai szigorral bebizonyított eredmény, még nem lettek megalkotva az adekvát matematikai módszerek még konkrét rendszerek esetében sem. A numerika és az egyre jobb számítógépek segítenek természetesen, pl. ha a rendszer nem függ paramétereiktől, persze általában függ, vannak (ismeretlen) bifurkációs többdimenziós felületek stb., szóval a számolással való általános képalkotás a megoldásokról többnyire reménytelen.

Közismert(?), hogy az utazó hullám (TW, travelling wave) típusú megoldások (1dim esetén $u=u(x-ct) \equiv u(z)$) kitüntetett szerepet játszanak az általános megoldások mindennemű vizsgálatában és önmagukban is érdekesek. Könnyebbséget jelent, hogy az $u(z)$ függvény(ek) most egy ODE rendszert elégítenek ki, „cserébe” lett egy új ismeretlen (c) és nem-standard peremértékek. Már az egzisztencia tétel is problémát okozhat még egyszerűbb esetekben is, rendszerekre alig van eredmény. Az igazi nehézséget mégis bizonyos TW-k stabilitásának (pl. in form and in speed) bizonyítása okozza, ez azzal függ össze, hogy ez már PDE elmélet.

Megjegyzés. A rövid - 12 oldal - harmadik fejezet az értekezés talán legszimpatikusabb része. A jelölt azonban kihagyta azokat az eredményeit, melyeket az e fejezetben ismertett módszerek és korábbi eredmények felhasználásával kapott. Így a következő helyzet alakult ki: a jelölt ismertet egy eszköztárat, eredményeket és módszereket, megad több „algoritmust”, pedagógia szempontból kiválóan megmagyarázza, hogy mi következik belőlük. Legtöbb esetben ez tükrözi tudományunk utolsó lehetőségeit.

Az égéselmélet, mely legalább felében matematika, fontos tudomány, ahol minden előrelépés duplán értékelendő. A jelölt párhuzamosan, két külön cikkben vizsgál egy kettő ill. három egyenletből álló nemlineáris PDE rendszert, melyekben az egyik ismeretlen függvény kitevőben szerepel (Arrhenius törvény). A kérdés itt is a TW-k vizsgálata több szempontból, a fő cél a láng stabilitásvizsgálata. A harmadik munka ebben a sorban egészen új, két egyenletből álló PDE rendszer mely lényeges paramétereket is tartalmaz és a környezet hőelvonását is figyelembe veszi.

Színvonalas, jó eredményekről van szó, bekerülhettek volna a disszertációba.

3. Az utóbbi öt évben tíz cikke jelent meg a jelöltnek a hálózati folyamatokról (HF). Az értekezés nagy részét ezen eredmények összefoglalása-leírása teszi ki, láthatóan az elmúlt pár évben erre a témára koncentrált leginkább és főként ezeket az eredményeket tekinti nagydoktori szintűeknek.

Az egyszerűség kedvéért átveszi a „járványterjedés” terminológiáját, ez jól működik, szemléletes is.

A 4. fejezet precíz, minimális matematika tudással is érthető bevezetést ad a témába, elmagyarázza a felhasználásra kerülő eszközök természetes voltát, fogalmakat vezet be, áttekinti az idevágó irodalom egy részét.

Egy matematikus számára a továbbiak már kevésbé érthetőek, általában a modellek hátttere nem nagyon érdekli őket, szeretik a tisztán megfogalmazott feladatokat, azok is éppen elég nehezek, ha elég okosak vagyunk, az eredményekből úgy is eldönthető, adekvát-e a modell. Esetünkben ez nem elég ahhoz, hogy reálisan értékelhessük az értekezés eredményeit és megnyugodhassunk, hogy véleményünket meg tudjuk védeni valamilyen szinten.

Meg kell értenünk, hogy bonyolult természeti jelenségek és folyamatok modellezése vagyis mennyiségileg (matematikailag) történő leírása, „megfogása” mindig is néhány kiválasztott zsenialitásán, ráérzésén múlt. Gondolhatunk a Newton, Einstein, Schrödinger egyenletekre, témánkhoz közeledve a populációdinamikából a Malthus ill. Verhulst modellekre, esetünkben pedig a Kermack-McKendrick modellre. A jó modellnek nem szabad túl bonyolultnak lenni (bonyolultat könnyű csinálni) és a létező matematikai eszközökkel kezelhetőnek kell lennie, legalább is elvileg. Az alaptörvényeket, modelleket nem lehet tisztán matematikailag levezetni (tételként bizonyítani), fenomenológiai jellegűek. Általában meghatározott körülmények között jók, helyességükről főként kísérletekkel, mérésekkel stb. lehet meggyőződni. Ha egy alapmodellel már rendelkezünk, onnan könnyebb továbblépni a különböző általánosítások felé. Itt nagy eredménynek számít az is, ha egy már létező modellt más meggondolások alapján „vezetünk le”, kihasználva bizonyos analógiákat a különböző folyamatok között.

Hogy körülbelül megértsük, miről van szó, vegyünk N embert, közülük $S(t)$ az egészséges, $I(t)$ a beteg (fertőző) emberek száma t időpillanatban. Fertőzést bármely ember kaphat. A Kermack-McKendrick modell a következő (τ -fertőzési ráta, γ -gyógyulási ráta): $S' = \gamma I - \tau SI$, $I' = \tau SI - \gamma I$. A megfelelő Cauchy feladat megoldása explicite kapható. További bővítések lehetségesek, figyelembe vehető az immun egyedek száma, születés-halálozás, életkoreloszlás stb. A determinisztikus ODE rendszer egyre bonyolódik, egyre nehezebb a megoldások vizsgálata. Az itt kapott analitikus eredmények, mint kiderül, alkalmazhatók a mean field egyenletekre is.

Ugyanakkor az emberek egyenrangúak, nem érzékeljük pl. hogy ki van ki mellett. A megfelelő objektum itt egy gráf, ezzel megadható az un. kapcsolati struktúra. A (nagy) hálózatok csak Monte-Carlo-val kezelhetők, melybe már be van építve a véletlen. Ezért is logikus olyan rendszerekre törekedni, melyben az ismeretlen egy valószínűségi változó (N hosszúságú vektorfüggvény), annak valószínűsége, hogy a rendszer (2^N állapot) adott állapotban van. (Továbbmenve, ezért is jó ötlet valójában véletlen gráfokat alkalmazni a hálózatok vizsgálatára, ld. Bollobás és Barabási munkásságát). Ez a változó kielégít egy lineáris homogén ODE rendszert, a

hozzátartozó mátrix un. blokk-tridiagonális, ami akár jó jel is lehetne numerikus szempontból, ha nem lenne túl nagy: 2^N egyenletet tartalmaz.

A helyzet egyszerűsödhet, mégpedig jelentősen, erről szól az értekezés a továbbiakban. Bevezethető (általános esetben elég bonyolultan) egy jóval kisebb ODE rendszer (vagy ami ugyanaz, egy kisebb mátrix), melynek megoldása bizonyos értelemben helyettesíti az eredeti nagy rendszer megoldását. Összevonásnak (lumping) nevezik a módszert és azon alapszik, hogy az eredeti változók bizonyos kombinációját vezeti be mint új változót. A fejezet e részében szép eredményeket, főként elégséges feltételeket láthatunk az összevonásra, ld. pl. Lemma 5.1. Az 5.1 Tétel arról szól, hogy a gráf automorfizmusai segítségével meghatározhatók az összevonható állapotok.

Másik lehetséges nagy rendszerekkel való bánásmód az átlagolás, a mean-field típusú egyenletek levezetése az I és S típusú csúcsok számának várható értékére. Kiderül (5.2 Tétel), hogy ezek a várható értékek, $[S]$ és $[I]$, egy K-McK egyenletet elégítenek ki formálisan, azonban mivel $[SI] \neq [S][I]$, több az ismeretlen mint az egyenlet, hasonlóan a turbulencia-elméletben régóta ismert lezárási problémához (closure problem). A következő 5.3 Tétel szintén mély eredmény, itt már az élek számának várható értékei is bejönnek, a bizonyítás is jóval bonyolultabb. A closure problem itt is megjelenik természetesen, ez sok esetben jól kezelhető, de ez már inkább a modellezés témához tartozik.

A hatodik fejezet a már említett nagy lineáris ODE rendszert „közelítő” ODE- vagy PDE-vel foglalkozik. Itt is a dolgok egyszerűsítése a cél. A megoldások egy súlyozott összegét kell meghatározni $r(t) = \sum_{k=1}^N r(k)p(k,t)$, ahol $p(k,t)$ annak a valószínűsége, hogy k fertőző csúcs van t időben, $r(k) = k/N$. Ha van közelítés (closure) $[IS]$ -re, akkor az I -t közelítő $\hat{I}$ -ra egyszerű ODE (egy darab egyenlet) kapható, melynek megoldása közel lesz nagy N -re a fertőzött csúcsok arányához-ez a fejezet egyik fő eredménye, ld. 6.1 Tétel. Hasonló eredményt kap a jelölt PDE-vel való közelítésre és megvan a tétel sztochasztikus analógja is.

Az előbbiek általánosítása megtörtént a momentumokra is, a közelítő momentumok szintén egyszerű ODE-t elégítenek ki, és az eredetitől szintén $1/N$ nagyságrendben térnek el. Két bizonyítási is van, az egyik félcsoport-elméleti módszereket használ.

Összefoglalva:

Javaslom a nyilvános vita kitűzését és a mű elfogadását. Simon Péter dolgozata és a PhD megvédése óta elvégzett munkássága véleményem szerint megfelel az „MTA Doktora” címhez tartozó követelményeknek.

Budapest, 2013.10.12.

Kersner Róbert