

Palla Gergely *Komplex hálózatok szerkezetének és dinamikájának feltárása és modellezése statisztikus fizikai módszerekkel* című, az MTA Doktora cím elnyeréséhez készített értekezésének bírálata

Kémikusként megtiszteltetésnek veszem, hogy Palla Gergely tág értelemben vett elméleti fizikai disszertációjának opponense lehetek. Ahhoz kétség sem férhet, hogy a jelölt technikai tudása felül múlja jelen opponensét, az értekezés egy részét disszertáció saját önképzésem céljából is figyelemmel olvastam.

Azt tudom, hogy a statisztikus fizikai apparátussal végzett hálózatok kutatás nagyon ambiciózusan a természet és társadalom számos jelenségkörét igyekszik megfogni, feltéve és remélve, hogy a hálózatok szerkezetének és dinamikájának általános törvényszerűségei vannak, és a dolgozat számos példával támasztja alá a megközelítés jogosságát és sikerességét. Mindazonáltal a dolgozat szerkezetét valamelyest véletlenszerűnek látom. Persze mindannyian tudjuk, hogy egy akadémiai disszertációban a PhD megszerzés óta eltelt időszak különböző kutatási eredményeit kell valamilyen logikai rendnek megfelelően elrendezni. Palla Gergely esetében ez az időszak mintegy tizennégy év, a disszertáció pedig öt fejezetből áll.

Az első fejezet a topológiai fázisátalakításokról szól, és bevallottan és természetesen egy remekül működő, Vicsek Tamás akadémikus nevével fémjelzett csapat munkájának eredményét mutatja be. A rögzített csúcspontszámú és súlyozatlan élből álló hálózatok sokaságának lehetséges átrendeződéseit definiálja, és a sokaság állapotait a statisztikus fizika módszereivel jellemzi. A fizikusok mesterien tudják fogalmi és matematikai apparátusukat kiterjeszteni, csak el kell hitetniük és hinnünk, hogy olyan konkrét fizikai mennyiségeknek, mint "energia" és "hőmérséklet", absztrakt rendszerekre is van szemléletes jelentésük. Van egy naív kérdésem. Úgy sejtem, az átrendeződési mechanizmus elemi lépéseit úgy konstruálták, hogy a dinamika eleget tegyen a részletes egyensúly feltételének. A kémiai reakciókinetikában szerzett tapasztalatom szerint az érdekes szituációk ott kezdődnek, amikor ezen feltétel sérül. Jelölt saját munkája az egzakt leszámolás. Lényegesen kihasználta-e itt a részletes egyensúly feltételt? Összességében a két fázis ("csillagszerű" és "rendezetlen") közötti átmenetre vonatkozó tézispont (jelesül, hogy az átmenet elsőrendű) elfogadom, az eredményeket alátámasztó 1.4 és 1.5 ábrák meggyőzőek. A logaritmikus energiafüggvénnyel kapcsolatos fejtegetéskor a Weber-Fechner törvényt nevével nevezhette volna.

A második és harmadik fejezet központi fogalma a k -klikkperkoláció. A perkoláció során fellépő (nyilván másodrendű) óriásklaszterekre vezető fázisátalakulásokat szabályos majd véletlen gráfokon mutatták be. Az Erdős-Rényi féle híres eredmények élperkolációs átalakulásokra vonatkoznak. A Vicsek csoport felismerte, hogy a klasszikus elmélet kiterjesztéseként nemcsak élek, hanem a hálózatelméletben már ismert k -klikkek (azaz egy k csúcsból álló teljes részgráfok) is perkolálódhatnak. A második fejezet a k -klikkperkoláció tulajdonságaival foglalkozik, a harmadik pedig lényegesen kihasználja az algoritmus jó tulajdonságait hálózati csoportkeresési problémákra. Vizsgálták (a definíció szerint irányítatlan) Erdős-Rényi és az irányított gráfokra való kiterjesztést is. (Utóbbiban természetesen $N(N-1)$ és nem $N(N-1)/2$ él lehetséges). A feladat a fázisátalakulás kritikus

pontjának a meghatározása. Jelölt a számítást a jólimsert Newman-Stogatz-Watts cikkben használt generátorfüggvény segítségével meghatározta a k-klikkperkoláció kritikus élbekötési valószínűségét, legalább termodinamikai határértékben. Kiegészítő szimulációkkal (2.3, 2.4 és 2.6 ábrák) meghatározta a k-klikkperkolációs klaszterek várható méretét. Ezen szép eredmények alkotják a második tézispontot.

A tudománymetriai mutatók perspektívájából nézve nyilvánvaló, hogy a Hálózati csoportkeresés k-klikkperkolációval című harmadik fejezet tárgyköre a legnépszerűbb. A hálózati csoportok (modulok, klaszterek, közösségek stb) felderítése és azonosítása elméletileg és gyakorlatilag is nagyon fontos, a módszerek fejlesztése Mark Newman és társai algoritmusainak megjelenése óta igen divatos. Izlés dolga, hiányoltam az irodalomjegyzékből SE Schaeffer Graph clustering (Computer Science Review 1(27-64)2007 cikkének említését. Nagyjából érteni vélem, hogy a k-klikkperkoláció algoritmus működését. Bár a 3.2 ábrán a futási idő méretfüggését, nem látom tisztán (a T6 cikkből sem), nem tudom, hogy tettek-e világos állítását az algoritmus időkomplexitására. Ha igen, elnézést kérek, de mit kellett volna nézmem? Nyilván végeztek a szerzők más algoritmusokkal való összehasonlítást, szívesen megnéznék egy összehasonlító táblázatot. Nem találtam különösebben szofisztikáltnak a súlyozott hálózatok súlyozatlanra való átalakításának "egyszerűen az élsúlyok elhagyásával" történő eljárását. Látni vélem a 3.6. ábra (a-d) üzenetét. Nem lepott meg nagyon, hogy a foksám eloszlást kezdetben leíró exponenciális eloszlás hatványeloszlásba megy át. Nem látom viszont tisztán, lehet, hogy az én hibám, hogy a küszöbértéket grafikus eszközökkel lehet-e megállapítani, vagy van mögötte analitikus számolás is? Olvasás közben felmerült bennem, hogy az eloszlásokra vonatkozó eredmények vajon mennyire robusztusak. Ezért aztán örültem a C.2 függeléknek, ahol áthuzalozott hálózatokra is bemutatja az elemzést. A harmadik és negyedik tézispontok tartalmazzák Jelölt szép eredményeit.

Valamelyest tájékozott voltam a negyedik fejezetben tárgyalt Időfejlődő csoportdinamika témakörrel, mert a a Jelölt és munkatársai által használt csoportfejlődési elemi mechanizmusok azonosításával szabadalmi hálózatokban a mi munkacsoportunk is foglalkozott. Talán épp ezért kaptam a megtisztelő felkérést, hogy jelen értekezést bráljam el. A kihívás legnehezebb részének egy csoport előképének a korábban azonosított csoportok közötti megtalálását látom. Észlelem, hogy a probléma megoldása, bár nem Jelölt nem nevezte meg, a Jaccard index megfelelő felhasználásával történt. Az ötödik tézispont a tranziens dinamika és az esetleges staconárius állapot meghatározására szolgáló algoritmusok leírását tartalmazza. Különösen érdekesnek látom a csoportmegszűnés jóslására vonatkozó számításokat, a 4.12 ábra szép.

Némiképpen különállónak látom az ötödik fejezetben tárgyalt Multifraktál alapú véletlengráf-modellt, és a Lovász László által javasolt alapötlet tényleges megértéséhez nincs elegendő matematikai tudásom és érzékem. Annyit felfogtam, hogy a generáló mérték megfelelő megválasztását követően el lehet jutni ismert élvalószínűségű véletlen gráfokhoz. Ha jól sejtem, előre megadott tulajdonságú véletlen gráfok gyártásához valahogy ki kell találni, hogy mi legyen a generáló mérték, és a hatodik tézispont az ezen feladat megoldására tett egy lehetséges lépését jelenti.

Opponensként azt kell megvizsgálnom, hogy Palla Gergely eredményeit elégségesnek tartom-e az MTA doktora cím elnyeréséhez, és javaslom-e a nyilvános védés kitűzését. Mind a két kérdésre határozott igennel válaszolok, és Jelöltnek gratulálok a szép eredményeiért. Elsimerésem értékét nem csökkenti egy észrevételem. A tézispont alapjául szolgáló publikációk egyikében sem utolsó szerző Jelölt, akadémiai doktori fokozatért benyújtott értekezések általában tartalmazznak olyan munkát is, ahol Jelölt az ötletgazda és diákjai végzik a számításokat. A további saját publikációk listáján látok két utolsó szerzős cikket.

Összefoglalásként kijelentem, Palla Gergely eredményeit elégségesnek tartom az MTA doktora cím elnyeréséhez, és javaslom a nyilvános védés kitűzését.


Érdi Péter,
az MTA doktora
Kalamazoo - Budapest, 2017 március - szeptember