Reakciómechanizmusok algoritmikus és matematikai vizsgálata

PhD - tézisek

Szalkai István

Pannon Egyetem,
Informatikai Tudományok Doktori Iskola
Műszaki Informatikai Kar
Matematika Tanszék,
Veszprém

2013. szeptember 19.

Bevezetés

A kémiai reakciók, mint például a legegyszerűbb

$$2H_2 + O_2 = 2H_2O \tag{1}$$

a valóságban nem egyetlen lépésben történnek, hanem nagyon sok köztes *atomcsoport* ("molekulakezdemény", mint pl. H, H_2, O, O_2, O_3, H_2O, H_2O_2, HO, HO_2) között végbemenő több **reakciólépés** (**elemi reakció**) bonyolult *sorozataként* (**mechanizmus**), így (1)-et **összetett reakció**nak hívjuk[1)].

Mind az elméleti kutatás, mind a gyakorlati technológiák szempontjából nagyon fontos *megoldandó feladatok* a következők:

I) Adott atomcsoportok közötti összes lehetséges elemi reakció listázása, vizsgálata, *majd* a kapott elemi reakciók által megvalósítható összetett (végső) reakciók megkeresése.

II) Adott kiindulási és végtermékek (**terminális molekulák**) közötti reakciókat (mint pl. (1)) eredményező összetett reakciók megkeresése (az első feladat "megfordítása").

Az első feladathoz hasonló fontos probléma még: adott (kémiai) reakciók egymás utáni *sorozata* által alkotott **mechanizmusok**, és e mechanizmusok által végső soron létrehozott (összetett) reakciók megkeresése. (Példákat a dolgozat végén találunk.)

A résztvevő lehetséges elemi reakciók és mechanizmusok nagy (exponenciális) száma miatt a feladat még a mai gyors számítógépekkel sem egyszerű.

Természetesen az egymásból nem levezethető, vagyis *minimális* reakciókat és mechanizmusokat keressük.

A matematikai nyelven megfogalmazott fogalmakat (lineáris algebrai szimplexek) és eredményeket, valamint a kifejlesztett algoritmust a fizika, matroidok (gráfok), hipergráfok körében is alkalmazhatjuk hasonló problémák kezelésére (lásd a PhD dolgozat 1.3. "*Fizikai dimenziók*" és 5. "*Matroidok és hipergráfok*" (al)fejezeteit).

A különböző szinteken levő vektorok és szimplexek közötti kapcsolatokat a 6. Fejezetben vizsgáljuk. Ha az atomoknak/reakcióknak nem csak mennyiségi (anyagmegmaradás), hanem további kémiai, fizikai jellemzőit (pl. égéshő) is figyelembe vesszük, amit *kiértékelési operátornak* nevezünk, akkor a lineáris algebra jól ismert tételeinek kapjuk újszerű alkalmazásait.

---

1) Ráadásul a vegyészek között sincs egyetértés (1) részleteit illetően, **Tóth,J., Nagy,A.L., Zsély,I.:** *Structural Analysis of Combustion Models* (arXiv:1304.7964 preprint, 2013) cikkükben többféle elméletet is részletesen összehasonlítanak.

Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozom szerzőtársaimnak és munkatársaimnak (*betűrendben*): **Bertók Botond, Dominich Sándor** (†2010), **Claude LaFlamme, Friedler Ferenc, Győri István, Norbert Herrman, Hujter Mihály, Matematika Tanszék összes kollégája, Kollárné Hunek Klára, Kristóf Tamás, Pethő Árpád** (†2012), **Tóth János,** *legfőképpen* **Hartung Ferenc** és **Tuza Zsolt** témavezetőimnek, *nem utolsósorban* pedig szeretett családomnak: **Teréz, Balázs, Zsófia, Éva**.

1. Matematikai definíciók és a főbb problémák

A reakciókban szereplő atomok rögzítése után minden atomcsoport egy-egy $\mathbb{R}^n$ -beli vektor, a reakciók ezen vektorok lineáris kombinációi. Hasonló a helyzet rögzített minimális reakciók közötti mechanizmusok esetén is. Amennyiben *minimális* reakciót illetve mechanizmust keresünk, akkor a kiválasztott vektoroknak *minimális összefüggő* rendszert kell alkotniuk:

1. Definíció. ***(1.3.D.***[2]***)*** *Egy tetszőleges $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}^n$ vektorhalmaz* ***(lineáris algebrai) szimplex****, ha* minimális összefüggő, *vagyis $\mathcal{S}$ (lineárisan) összefüggő, de bármely $\mathcal{T} \subsetneq \mathcal{S}$ valódi részhalmaza független.* $\square$

(A geometriai és affin szimplexek definícióit a PhD dolgozat 1.5., 1.6. és 1.7. pontjaiban (40.Def.) találjuk, a különböző szimplexek közötti kapcsolatot 4.18.D., 4.19.Á. -ban (38.Def., 39.Áll.) írjuk le. A különböző szimplexek összefoglalása és alkalmazásaik bemutatása [2012b] közleményünkben található.)

A lineáris algebrai szimplexek alaptulajdonságait a PhD dolgozat 1.5. alfejezetében ismertetjük.

2. Jelölés. *Egy összefüggő $\mathcal{S} = \{\mathbf{b}_1, ..., \mathbf{b}_k\} \subset \mathbb{R}^n$ vektorhalmaz közvetlenül megfeleltethető egy*

$$\sum_{j=1}^{k} x_j \cdot \mathbf{b}_j = \mathbf{0} \tag{2}$$

homogén lineáris egyenletrendszernek, melynek van nemtriviális $\mathbf{x} = [x_1, ..., x_k]$ $\in \mathbb{R}^k$ *gyöke.* $\square$

[2] Az **x.y.*.** alakú összetett hivatkozások a PhD dolgozat pontjaira mutatnak (*$\in$ {**Á,D,L,S,T**} és **x.** a fejezet sorszáma), míg az **z.*.** egyszerű hivatkozások a jelen Tézisfüzet pontjaira.

Dolgozatunkban elsősorban a következő kérdésekre kerestünk választ (részletesebben lásd a PhD dolgozat 1.6. alfejezetében):

3. Probléma. ***(1.17.P.)*** *Adjuk meg a (2) lineáris egyenletrendszer megoldáshalmazának részletes szerkezetét abban a speciális esetben, amikor* $\mathcal{S} = \{\mathbf{b}_1, ..., \mathbf{b}_k\} \subset \mathbb{R}^n$ szimplex.

4. Probléma. ***(1.18.P.)*** *Legyenek* $\mathbf{a}_1, ..., \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$ *tetszőleges, rögzített vektorok. Ha ismertek a* $\sum_{\mathbf{a}_j \in \mathcal{S}} x_j \cdot \mathbf{a}_j = \mathbf{0}$ *(homogén) lineáris egyenletrendszerek megoldáshalmazai az összes* $\mathcal{S} \subseteqq \{\mathbf{a}_1, ..., \mathbf{a}_m\}$ *szimplex esetén, akkor ezekből elő lehet-e állítani a* $\sum_{j=1}^{m} x_j \cdot \mathbf{a}_j = \mathbf{0}$ *homogén lineáris egyenletrendszer megoldáshalmazát, és hogyan?*

5. Probléma. ***(1.19.P.)*** *Tetszőleges adott* $\mathcal{H} = \{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \ldots, \mathbf{v}_m\} \subset \mathbb{R}^n$ *(véges) vektorhalmaz esetén keressük meg* gyors algoritmussal *a* $\mathcal{H}$ *-ban található* összes *minimálisan összefüggő* $\mathcal{S} \subsetneqq \mathcal{H}$ *részhalmazt, azaz szimplexet.*

Algoritmusok futásidejének kritikus pontja a lehetséges megoldások (jelen esetben a szimplexek) száma:

6. Probléma. ***(1.20.P.)*** *Adjunk* ***alsó*** *és* ***felső*** *becsléseket egy tetszőleges,* m *-elemű* $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$ *vektorhalmazban tartalmazható* $\mathcal{S} \subseteqq \mathcal{H}$ *szimplexek lehetséges számára. (A dimenzió (n) rögzítése azt is jelenti, hogy* $\mathcal{H}$ teljes dimenziós*, vagyis kifeszíti az egész* $\mathbb{R}^n$ *teret.)*

Az alsó becsléseknél a párhuzamos vektoroknak (izomer molekulák, többszörös adagok) lényeges negatív szerepük van (ld. 34. Tétel), ezért fontos és nehéz a következő:

7. Probléma. ***(1.21.P.)*** *Adjunk* ***alsó*** *becslést egy tetszőleges,* m *-elemű* $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$ *vektorhalmazban tartalmazható* $\mathcal{S} \subseteqq \mathcal{H}$ *szimplexek lehetséges számára, ha még azt is kikötjük, hogy* $\mathcal{H}$ *-ban nincsenek párhuzamos vektorok és* $\mathcal{H}$ *teljes dimenziós.*

A fenti 6. és 7. Problémákkal kapcsolatos vizsgálatokból kitűnik, hogy mind a problémák mind a megoldások általánosabb struktúrákban is felvethetők és kezelhetők:

8. Probléma. ***(1.22.P.)*** *Adjuk meg a szimplex fogalmának megfelelőjét* matroidokban*, majd adjunk* ***alsó*** *és* ***felső*** *becsléseket egy tetszőleges,* m *-elemű* $\mathcal{H}$ *részhalmazban tartalmazható* $\mathcal{S} \subseteqq \mathcal{H}$ *szimplexek lehetséges számára, ha* $\mathcal{H}$ teljes rangú.

9. Probléma. ***(1.23.P.)*** *Adjuk meg a szimplex fogalmának megfelelőjét* hipergráfokban, *majd adjunk* ***alsó*** *és* ***felső*** *becsléseket egy tetszőleges, m -elemű $\mathcal{H}$ részhalmazban található $\mathcal{S} \subsetneqq \mathcal{H}$ szimplexek lehetséges számára, a $\mathcal{H}$ -ra tett megfelelő feltételek esetén.*

Az atom-reakció-mechanizmus-... *hierarchiában* a "magasabb rendű" vektorok az "alsóbb szinten" lezajló folyamatok outputjai.

10. Probléma. ***(1.24.P.)*** *Adjunk matematikai definíciót a* ***szöchiometriai hierarchia*** *általános fogalmára, majd tanulmányozzuk annak matematikai tulajdonságait és kémiai, fizikai következményeit.*

11. Probléma. *A lineáris kombinációkon túl vegyük figyelembe a reakciók és mechanizmusok egyéb kémiai és fizikai jellemzőit.*

2. Az algoritmus és változatai

Az 5.Problémára keresünk megoldást és alkalmazásokat ([1991], [2000a]).

Az algoritmus

$\mathbb{R}^n$-ben minden szimplex *legfeljebb* $n+1$ elemű, egy m-elemű vektorhalmaznak *összesen* $\sum_{i=1}^{n+1}\binom{m}{i} = \binom{m+1}{n+2} - 1 \approx m^{n+2}$ legfeljebb ekkora méretű részhalmaza van. Az összes m^{n+2} részhalmazt nem kell mind megvizsgálnunk, mert:

12. Állítás. *Független halmazok bármely részhalmazai is függetlenek.* $\square$

A PhD dolgozat 2.1 alfejezetében ismertetett algoritmusunk a megvizsgált részhalmazok ügyes kiválogatásával (Procedure Modify eljárás) az m^{n+2} részhalmaz helyett csak m^{n+1} vizsgálatot végez. H elemei természetesen sorbarendezettek, a megvizsgálandó $S \subsetneqq H$ részhalmazok kiválasztása *lexikografikus sorrendben* történik, a módosítást pedig az "oda-vissza" ("back and forth") algoritmus mintájára oldottuk meg: lehetőleg S utolsó elemeit töröljük és H következő elemével bővítjük S-et. A Procedure Modify eljárás részletes leírása a 2.1. alfejezetben, forráskódja a 2.5. alfejezetben található.

A 12. Állítás miatt az algoritmus változatlan formában működik leszálló hipergráfokban, tehát matroidokban és gráfokban is.

13. Definíció. ***(2.5.D.) (i)*** *A $\mathcal{H} = (V, \mathcal{E})$ hipergráfot* ***leszállónak*** *nevezzük, ha tetszőleges $E, F \subsetneqq V$ részhalmazokra $E \in \mathcal{E}$ és $F \subset E$ esetén $F \in \mathcal{E}$,*
(ii) *$\mathcal{H}$* ***nem torz,*** *ha $\{v\} \in \mathcal{E}$ minden $v \in V$ esetén,*

(iii) *a fentiek esetén* $\mathcal{E}$ *elemeit* ***függetleneknek*** *nevezzük,*
(iv) *egy* $S \subsetneqq V$ *részhalmaz* ***szimplex****, ha* S *összefüggő* ($S \notin \mathcal{E}$) *de* S *bármely valódi* $T \subsetneqq S$ *részhalmaza független.* □

14. Tétel. ***(2.2.T.) (i)*** *Az algoritmus egyetlen szimplexet sem kerül el és egyiket sem sorolja fel kétszer; egyetlen részhalmazt sem vizsgál meg kétszer.*
(ii) *Az algoritmus futása minden adathalmazra a lehető leggyorsabb, vagyis minden* H *adathalmaznak csak a legszükségesebb részhalmazait vizsgálja (lexikografikus sorrendben).* □

15. Tétel. ***(2.4.T.)*** $H \subset \mathbb{R}^n$, $|H| = m$ *esetén az algoritmus legfeljebb* m^{n+1} *részhalmazát vizsgálja meg* H *-nak, a lépésszám legfeljebb* $\mathcal{O}\left(m^{n+1}\right)$*.* □

Az algoritmus tehát polinom idejű. $\mathcal{O}\left(m^{n+1}\right)$ általában nem csökkenthető, hiszen az output szélsőséges esetekben éppen ekkora, a 32. Tétel és a 33. Következmény szerint.

A tapasztalatok szerint az átlagos méretű feladatok (néhány tucat vektor $10-20$ dimenziós térben) a modern számítógépeken másodperc töredéke alatt megoldhatók, futási eredményeket a PhD dolgozat 7. Fejezetében ismertetünk.

Kiterjesztések és alkalmazások

Az eredeti algoritmus *inputjának* apró módosításával és az *output* alapos (nem bonyolult) elemzésével több, kapcsolódó probléma is azonnal megoldható, ezt a PhD dolgozat 2.2. alfejezetében ismertetjük ([2000a]).

A dimenzió csökkentése

(a) Ha egy vektor lineárisan független a többitől, akkor elhagyandó. Ez a vizsgálat csak $\mathcal{O}\left(m^2\right)$ lépés, míg a megtakarított idő majdnem $\mathcal{O}\left(m^n\right)$.
(b) Ha egy vektorban *pontosan kettő* nemnulla koordináta szerepel, akkor *ezt* a vektort elhagyhatjuk és az összes maradék vektor *dimenzióját* tudjuk 1 -gyel csökkenteni. A *kémia nyelvén* egy ilyen vektor egy $A = \lambda B$ típusú reakciót jelent, tehát az összes reakcióban A -t helyettesíthetjük λB -vel, természetesen az algoritmus futása után a redukált térben kapott minden $\mathcal{M}^-$ mechanizmust vissza kell alakítanunk az eredeti tér $\mathcal{M}$ mechanizmusává. A problémát és megoldását a 2.2.0. alfejezetben *matematikai* szempontból is megvizsgáltuk (2.6. Segédállítás és Következménye). (a) és (b) alkalmazásával a 7.7. Példa időigénye $93mp$-ről $0.01mp$-re zsugorodott!

Közvetlen reakciók keresése

Adott néhány $X_1, ..., X_k \in \mathbb{R}^N$ reakció, melyekben mind *terminális* molekulák (nyersanyagok és végtermékek), mind *nemterminális* atomcsoportok szerepelnek. Olyan $Y = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i X_i$ mechanizmusokat keresünk, amelyeknek végeredményei, az $\mathbf{Y} = \mathcal{R}(\underline{\lambda})$ overall reakciók *csak terminális* molekulákat tartalmaznak. Kiemeljük, hogy az $\mathbf{Y}$ overall reakciót sem ismerjük!

A PhD dolgozat 2.2.1. alfejezetében két megoldást is adunk a problémára, a két megoldás ekvivalenciáját is bebizonyítjuk a 2.3. alfejezetben.

Közvetlen mechanizmusok keresése

Ismert egy vagy több $\mathbf{R}$ eredmény-reakció, és ehhez a reakcióhoz vezető minimális mechanizmusokat akarjuk megkeresni. Ha csak *egyetlen* $\mathbf{R}$ reakciónk adott, akkor az adott $H := \{\mathbf{X}_1, ..., \mathbf{X}_k\}$ vektorhalmazt bővítsük az új $\mathbf{X}_{k+1} := \mathbf{R}$ vektorral, és csak az $\mathbf{R}$ -et tartalmazó szimplexeket keressük meg. Ez elegendő, hiszen minden $\sum_{j=1}^{k+1} \lambda_j \cdot \mathbf{X}_j = \mathbf{0}$ minimális lineáris kombinációban $\lambda_j \neq 0$. A kapott $\mathcal{M} := \frac{-1}{\lambda_{k+1}} \sum_{j=1}^{k} \lambda_j \cdot \mathbf{X}_j$ mechanizmus nyilván minimális. A módszer több adott $\mathbf{R}_1, \ldots, \mathbf{R}_t$ végső reakció esetén is könnyen használható. A részleteket a PhD dolgozat 2.2.2. alfejezetében találhatjuk.

Sem terminális atomcsoportok sem reakciók nem ismertek

A legnehezebb eset, amikor a terminális atomcsoportok nem ismertek, de az összes végső reakcióra van szükségünk. Futtassuk le egyszerűen az algoritmust az eredeti vektorhalmazra, ekkor a kapott szimplexekből az összes végső reakció könnyen kiolvasható, sőt eközben a megfelelő minimális mechanizmusokat is megkapjuk. Részletesen lásd a PhD dolgozat 2.2.3. alfejezetében.

A PhD dolgozat 7. "*Számítógépes eredmények*" fejezetében különböző esetekre találunk példákat és futtatási eredményeket, magyarázatokat.

Algoritmusunkat és kiterjesztéseit az irodalomban talált több más eljárásával is összehasonlítottuk a 2.4. alfejezetében.

I. TÉZIS

i) *Polinomiális* algoritmust *adtunk adott* $H \subset \mathbb{R}^n$ (*sőt* $H \subsetneq V$ *ha* $\mathcal{H} = (V, \mathcal{E})$ *leszálló, nem torz hipergráf*) *szimplexeinek lexikografikus sorrendben történő felsorolására* (PhD dolgozat 2.1. alfejezet).

ii) Bebizonyítottuk, *hogy az algoritmus minden adathalmaz esetén a legrövidebb ideig fut, mindig polinomiális időben* (2.2. és 2.4. Tételek).

iii) Megmutattuk, *hogy a dimenzió esetleges csökkentésével a futásidő bizonyos esetekben lényegesen lerövidíthető* (2.2.0. alfejezet).

iv) *Az algoritmus használhatóságát* kiterjesztettük *közvetlen reakciók és mechanizmusok keresésére, arra az esetre is, amikor sem terminális atomcsoportok sem reakciók nem ismertek* (2.2.1., 2.2.2. és 2.2.3. alfejezetek).

v) *Számítógépen megvalósítottuk az algoritmust, több irodalmi példára alkalmaztuk, és eredményeinket összehasonlítottuk más szerzők módszereivel* (7. és 2.4. (al)fejezetek). ■

3. Lineáris egyenletrendszerek

Most a 3. és 4. Problémákra keresünk válaszokat ([2012a],[2012b]). Előrebocsájtjuk, hogy homogén és inhomogén egyenletrendszerekre nagyon különböző összefüggések teljesülnek.

16. Jelölés. *Az* $A \cdot \underline{x} = \underline{b}$ *és* $A \cdot \underline{x} = \underline{0}$ *alakú lineáris egyenletrendszerek* megoldáshalmazait $M_{A,\underline{b}}$ *ill.* $M_{A,\underline{0}}$ *jelöli (*$A \in \mathbb{R}^{n\times m}$, $\underline{b} \in \mathbb{R}^n$*). Az* A *mátrix* oszlopvektorait *jelölje* $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \ldots, \underline{a}_m \in \mathbb{R}^n$, *vagyis* $A = [\underline{a}_1, \underline{a}_2, \ldots, \underline{a}_m]$. □

17. Feltétel. ***(3.2.F.) o)*** $M_{A,\underline{0}} \neq \{\underline{0}\}$ *és* $|M_{A,\underline{b}}| > 1$,
i) *A -ban nincsenek párhuzamos oszlopvektorok, speciálisan*
ii) *A egyik oszlopvektora sem $\underline{0}$,*
iii) *A -ban nincs $\underline{b}$ -vel párhuzamos oszlopvektor.* □

18. Definíció. ***(3.3.D.) (i)*** $\underline{x} \in \mathbb{R}^m$ *esetén*

$$supp\,(\underline{x}) := \{i \leq m : x_i \neq 0\} \tag{3}$$

$\underline{x}$ ***tartóhalmaza (support)****, speciálisan* $supp\,(\underline{0}) = \emptyset$.

(ii) *Tetszőleges* $M \subseteq \mathbb{R}^m$ *esetén a* $\underline{z} \in M$ nemnulla *vektornak* M *-re nézve* ***minimális tartója*** *van, ha* nincs *olyan* $\underline{y} \in M$ *nemnulla vektor, amelyre* $supp\,(\underline{y}) \subsetneqq supp\,(\underline{z})$ *teljesülne,* $\underline{z} \in M$ ***minimális*** *(*M*-re).*

(iii) *Tetszőleges* $M \subseteq \mathbb{R}^m$ *esetén*

$$M^{\min} := \{\underline{z} \in M : \underline{z} \text{ minimális tartójú}\} \ . \tag{4}$$

(iv) $M^{\min}_{A,\underline{b}}$ *és* $M^{\min}_{A,\underline{0}}$ *az* $M_{A,\underline{b}}$ *és* $M_{A,\underline{0}}$ *minimális tartójú elemeinek halmazai,* $M^{\min}_{A,\underline{b}}$ *és* $M^{\min}_{A,\underline{0}}$ *elemeit az* $A \cdot \underline{x} = \underline{b}$ *illetve az* $A \cdot \underline{x} = \underline{0}$ *egyenletrendszerek* ***minimális megoldásainak*** *nevezzük.* □

A fenti *minimális-* és a lineáris programozásban fontos *bázismegoldások* közötti kapcsolatot és különbséget a 30. Megjegyzésben részletezzük.

19. Állítás. ***(3.17.Á.)*** *Legyen* $\underline{z} \in M^{\min}_{A,\underline{0}}$ *, vagyis* $\underline{z}$ *egy* minimális *(nemnulla) megoldása az* $A \cdot \underline{z} = \underline{0}$ *egyenletnek. Ekkor az* A *együtthatómátrix* $\underline{z}$ *által "használt" oszlopvektorainak halmaza*

$$S_{\underline{z}} := \{\underline{a}_i : i \in supp\,(\underline{z})\} \subset \mathbb{R}^n \tag{5}$$

minimális *(lineárisan) összefüggő halmaz, vagyis (algebrai) szimplex.* $\square$

20. Definíció. ***(3.7.D.)*** $\underline{x} \in \mathbb{R}^m$*,* $A \in \mathbb{R}^{n\times m}$ *és* $H \subseteq \{1,\ldots,m\}$*,* $|H| = h$ *esetén* $\underline{x}$ *és* A ***megszorítása*** *a* H *halmazra:*

$$\begin{aligned} \underline{x}\,|_H &:= [x_i : i \in H] \in \mathbb{R}^h \qquad (6)\\ A\,|_H &:= [\underline{a}_i : i \in H] \in \mathbb{R}^{n\times h}\ . \qquad \square \end{aligned}$$

Homogén egyenletrendszerek

21. Tétel. ***(3.10.T.)*** *Legyen* $\underline{z} \in M^{\min}_{A,\underline{0}}$ *egy tetszőleges minimális megoldása az* $A \cdot \underline{x} = \underline{0}$ *egyenletnek,* $\underline{z} \neq \underline{0}$ *. Ekkor az*

$$\left(A\,|_{supp(\underline{z})}\right) \cdot \underline{y} = \underline{0} \tag{7}$$

egyenletnek (konstans szorzótól eltekintve) egyetlen $\underline{y} \in \mathbb{R}^h$ *(*$h = |supp\,(\underline{z})|$*) megoldása van, mégpedig*

$$\underline{y} = \lambda \cdot \underline{z}\,|_{supp(\underline{z})} \quad (\lambda \in \mathbb{R}) \qquad \square \tag{8}$$

Tehát a (7) egyenlet megoldása **egyértelmű** (skalárszorzó erejéig), amennyiben $\underline{z} \in M^{\min}_{A,\underline{0}}$ minimális. (Ld. még az 1.13. Tételt és 3.19. Következményét, a 3.21. Következményt és a 3.22. Állítást a PhD dolgozatban.)

22. Tétel. ***(3.20.T.)*** *Tetszőleges* $A \in \mathbb{R}^{n\times m}$ *mátrix* $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \ldots, \underline{a}_m$ *oszlopvektorai közül kiválasztott tetszőleges* $S \subsetneqq \{\underline{a}_1, \underline{a}_2, \ldots, \underline{a}_m\}$ szimplexhez *az* $A\underline{x} = \underline{0}$ *homogén lineáris egyenletrendszernek* van olyan $\underline{x}$ *megoldása, amely pontosan* S *elemeit használja, azaz*

$$S = \{\underline{a}_i : i \in supp\,(\underline{x})\}\ . \qquad \square \tag{9}$$

A 4. Probléma megoldása:

23. Tétel. ***(3.13.T.)*** *Az* $M^{\min}_{A,\underline{0}} \subsetneqq \mathbb{R}^m$ *halmaz generálja az* $M_{A,\underline{0}} \subsetneqq \mathbb{R}^m$ *alteret, tetszőleges* $A \in \mathbb{R}^{n\times m}$ *mátrix esetén.* $\square$

24. Következmény. ***(3.15.K.)*** *Az* $A \cdot \underline{x} = \underline{0}$ *egyenletrendszer bármely* $\underline{x} \in M_{A,\underline{0}}$ *megoldásának tartóhalmazát lefedik a minimális megoldások (tartóhalmazai):*

$$supp\,(\underline{x}) \subsetneqq \bigcup \left\{ supp\,(\underline{z}) : \underline{z} \in M^{\min}_{A,\underline{0}} \right\}\ . \qquad \square \tag{10}$$

25. Megjegyzés. $M^{\min}_{A,\underline{0}}$ *nem párhuzamos elemei lehetnek lineárisan összefüggőek. Hasznos lenne* $M^{\min}_{A,\underline{0}}$ *egy bázisát felderíteni.* $\square$

Inhomogén egyenletrendszerek

26. Tétel. ***(3.23.T.)*** *Legyen* $\underline{z} \in M^{\min}_{A,\underline{b}}$ *egy* minimális *megoldása az* $A\underline{x} = \underline{b}$ *(*$\underline{b} \neq \underline{0}$*)* inhomogén *egyenletrendszernek és legyen* $H := supp\,(\underline{z})$ *. Ekkor az*

$$(A\mid_H) \cdot \underline{y} = \underline{b} \tag{11}$$

egyenletrendszer egyetlen *megoldása* $\underline{y} = \underline{z}\mid_H$ *.* $\square$

A 4. Probléma (egyik) általánosítása és megoldása a következő:

27. Probléma. ***(3.24.P.)*** *Az* $A \cdot \underline{x} = \underline{b}$ *inhomogén egyenletrendszer összes megoldása előállítható-e minimális megoldásokból, azaz* $M^{\min}_{A,\underline{b}}$ *elemeiből?*

28. Tétel. ***(3.25.T.)*** *Mindegyik* $\underline{x} \in M_{A,\underline{b}}$ *vektor felírható mint* $M^{\min}_{A,\underline{b}}$ *néhány vektorának* affin *kombinációja* plusz *a homogén* $A \cdot \underline{x} = \underline{0}$ *egyenletrendszer egy megoldása, vagyis*

$$\underline{x} = \sum_{i=1}^{I} \alpha_i \underline{z}_i + \underline{y} \qquad \textit{ahol} \qquad \sum_{i=1}^{I} \alpha_i = 1 \tag{12}$$

és $\underline{z}_i \in M^{\min}_{A,\underline{b}}$ *minimális megoldások (*$\alpha_i \in \mathbb{R}$*) és* $\underline{y} \in M_{A,\underline{0}} \cup \{\underline{0}\}$ *.* $\square$

29. Következmény. ***(3.26.K.)*** $M^{\min}_{A,\underline{b}} \cup M^{\min}_{A,\underline{0}}$ *generálja* $M_{A,\underline{b}}$ *-t.* $\square$

Ez általánosítása a jól ismert $M_{A,\underline{b}} = \underline{z} + M_{A,\underline{0}}$ összefüggésnek, *minimális* megoldásvektorokra.

30. Megjegyzés. ***(3.18.M.)*** Minimális- és bázismegoldások kapcsolata:
Inhomogén *egyenletrendszereknél az* $\underline{x}$ *bázismegoldások az* A *együtthatómátrix - mint oszlopvektorainak halmaza -* bázisainak *felelnek meg, vagyis mindig* A *-nak* r *db oszlopvektorához tartoznak ahol* $r = r\,(A)$ *az* A *mátrix rangja. Mivel független vektorokból bármely* $\underline{b}$ *vektor legfeljebb egyféleképpen állhat elő, ezért* egy bázismegoldás pontosan akkor minimális, ha nemdegenerált.
Homogén *egyenletrendszereknél egy bázismegoldás mindig tartalmazza* A *-nak egy bázisát plusz* A *-nak pontosan egy további (oszlop)vektorát. Tehát homogén esetben minden bázismegoldás pontosan* $r+1$ *elemű,* A *-nak összefüggő oszlopaira "hivatkozik". Márpedig adott* $(r+1)$ *számú összefüggő vektor nem mindig minimális (azaz szimplex).* Megfordítva: A *-nak egy minimális megoldáshoz tartozó oszlopvektorai ugyan mindig minimális összefüggőek (azaz szimplex), de gyakran* $r+1$ *-nél kevesebben vannak.* $\square$

II. TÉZIS

i) Részletesen *megvizsgáltuk a homogén és az inhomogén lineáris egyenletrendszerek* minimális (leszűkített) *megoldáshalmazainak szerkezetét, a szimplexekhez és a teljes megoldásokhoz való viszonyukat* (3.4.- 3.10.Állítások).

ii) Homogén *egyenletrendszereknél beláttuk, hogy a minimális megoldások* ($M_{A,\underline{0}}^{\min}$) *generálják az összes megoldást* (3.13. Tétel).

iii) Inhomogén *egyenletrendszereknél beláttuk, hogy* $M_{A,\underline{b}}$ *elemei felírhatók* $M_{A,\underline{b}}^{\min}$ *néhány vektorának affin kombinációja plusz* $M_{A,\underline{0}}$ *egy eleme összegeként* (3.25. Tétel).

iv) *Leírtuk a minimális- és bázismegoldások kapcsolatát* (3.18. Megjegyzés). ■

4. $\mathbb{R}^n$ szimplexeinek száma

A 6. és 7. Problémákra keresünk válaszokat. ([1995], [1998], [2011])

31. Jelölés. ***(4.2.J.)*** **simp** $(\mathcal{H})$ *jelöli a* $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$ *halmazban levő* $\mathcal{S} \subset \mathcal{H}$ *szimplexek* ***számát.*** □

A maximum

A szimplexek **Sperner-családot alkotnak,** így Sperner jól ismert tétele felső becslést ad *simp* $(\mathcal{H})$ értékére. Azonban bennünket a szélsőséges $\mathcal{H}$ vektorhalmazok lineáris algebrai szerkezete érdekel.

32. Tétel. ***(4.5.T.**,[1995])* *Tetszőleges, adott elemszámú* $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$ *részhalmazra, ami kifeszíti* $\mathbb{R}^n$ *-et, simp*$(\mathcal{H})$ *pontosan akkor* ***maximális****, ha* $\mathcal{H}$ *bármely* n *vektora lineárisan független.* □

33. Következmény. ***(4.6.K.)*** *Tetszőleges* m *-elemű* $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$ *részhalmazra, amely kifeszíti* $\mathbb{R}^n$ *-et*

$$simp(\mathcal{H}) \leq \binom{m}{n+1} \quad , \tag{13}$$

és a becslés éles, vagyis van olyan $\mathcal{H}$ *amelyre (13)-ban* $=$ *teljesül.* □

Az adott atomok tehát az egyes vegyületeket nagyon "össze-vissza" *mennyiségben* kell, hogy felépítsék (pl. Vandermode determináns mintájára).

A minimum párhuzamos vektorokkal

34. Tétel. ***(4.7.T.,**[1995])* *Tetszőleges, adott elemszámú $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$ részhalmazra, ami kifeszíti $\mathbb{R}^n$ -et, simp$(\mathcal{H})$* ***minimális****, ha $\mathcal{H}$ vektorai n db ekvivalencia osztályba sorolhatók a "párhuzamosság" reláció alapján, ezek az osztályok méretei legfeljebb 1-gyel térnek el egymástól, és az osztályok (reprezentánsai) lineárisan függetlenek, vagyis bázist alkotnak $\mathbb{R}^n$ -ben.*

$|\mathcal{H}| \geq 2n$ *esetén ez az* egyetlen *minimális konfiguráció.* $\square$

35. Következmény. ***(4.12.K.)*** *Ha feltesszük, hogy $\mathcal{H}$ kifeszíti $\mathbb{R}^n$-et és $|\mathcal{H}| = m = an + b \quad (0 \leq b < n)$, akkor*

$$b \cdot \binom{a+1}{2} + (n-b) \cdot \binom{a}{2} \leq simp(\mathcal{H}) \ , \tag{14}$$

és a becslés éles. $m \geq 2n$ esetén a szélsőséges $\mathcal{H}$ halmaz szerkezete egyértelmű. *Amennyiben m osztható n -el, az alsó korlát egyszerűbb alakot vesz fel:*

$$n \cdot \binom{\frac{m}{n}}{2} \leq simp(\mathcal{H}) \ . \qquad \square \tag{15}$$

Megjegyezzük, hogy $n+1 \leq m < 2n-1$ esetén a minimális számú szimplexeket tartalmazó $\mathcal{H}$ halmazok szerkezete nem egyértelmű:

36. Példa. ***(4.14.P.)*** *Legyen $n+1 \leq m < 2n-1$. Rögzítsünk egy $\mathcal{K} = \left\{\underline{e_1}, ..., \underline{e_n}\right\} \subset \mathbb{R}^n$ tetszőleges bázist, és legyen $\Pi = \{\mathcal{I}_1, ..., \mathcal{I}_\ell\}$ egy tetszőleges partíciója $\mathcal{K}$ -nak, $|\mathcal{I}_j| \geq 2$ és $m = n + \ell < 2n-1$. Legyen $j \leq \ell$ esetén $\underline{v_j} := \sum_{i \in \mathcal{I}_j} \mu_i \underline{e_i}$* tetszőleges vektor, *ahol a $\mu_i \neq 0$. Mivel az 1.11. Segédállítás szerint az*

$$\mathcal{S}_j := \mathcal{I}_j \cup \left\{\underline{v_j}\right\} \qquad (j \leq \ell)$$

halmazok mind szimplexek, ezért a

$$\mathcal{H}_\Pi = \left\{\underline{e_1}, ..., \underline{e_n}\right\} \cup \left\{\underline{v_1}, ..., \underline{v_\ell}\right\}$$

halmazra $|\mathcal{H}_\Pi| = n + \ell = m$ és simp$(\mathcal{H}) = \ell$. $\square$

Az alsó korlátot a *kizárólag* párhuzamos vektorokból (izomer molekulák vagy többszörös adagok) álló $\mathcal{H}$ vektorhalmazok érik el, tehát kézenfekvő a párhuzamos vektorok kizárása.

III. TÉZIS

i) Általános felső éles *becslést adtunk adott dimenziós és elemszámú vektorhalmaz szimplexeinek számára:* $simp(\mathcal{H}) \le \binom{m}{n+1}$ és *leírtuk a szélsőséges* $\mathcal{H}$ *halmazok egyértelmű szerkezetét* (PhD dolgozat 4.5. Tétel).

ii) Általános alsó éles *becslést adtunk adott dimenziós és elemszámú vektorhalmaz szimplexeinek számára:* $b \cdot \binom{a+1}{2} + (n-b) \cdot \binom{a}{2} \le simp(\mathcal{H})$, és *bebizonyítottuk, hogy* $m \ge 2n$ *esetén a szélsőséges* $\mathcal{H}$ *halmazok szerkezete egyértelmű* (4.7. Tétel). ■

A minimum párhuzamos vektorok nélkül

A továbbiakban a következő feltétel mellett vizsgáljuk a szimplexek számának lehetséges *legkisebb* értékeit:

37. Feltétel. ***(4.16.F.)*** *A* $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$ *vektorhalmazban* nincsenek *párhuzamos vektorok, speciálisan* $\underline{0} \notin \mathcal{H}$. □

A dimenzió csökkentése

$\mathcal{H}$ vektorait azok skalárszorosaival helyettesítjük, majd $\mathbb{R}^n$ egy alkalmas hipersíkjával elmetszve a probléma $n-1$ dimenzióba kerül:

38. Definíció. ***(4.18.D.)*** Tetszőleges $\underline{h} \in \mathbb{R}^n$ *vektorra és* $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$ *halmazra*

$$\Lambda\underline{h} := \{\lambda \cdot \underline{h} : \lambda \in \mathbb{R},\ \lambda \ne 0\} \ , \quad \Lambda\mathcal{H} := \{\Lambda\underline{h} : \underline{h} \in \mathcal{H}\}$$

és tetszőleges $n-1$ *-dimenziós* $\mathcal{P} \subset \mathbb{R}^n$ *hipersíkra, ami* nem *párhuzamos* $\mathcal{H}$ *egyetlen elemével sem* $\mathcal{H}^{\mathcal{P}} := \Lambda\mathcal{H} \cap \mathcal{P}$. □

Az $n-1$ -dimenziós $\mathcal{P}$ hipersíkot természetes módon azonosítjuk $\mathbb{R}^{n-1}$-gyel.

Amennyiben az $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}^n$ halmaz (lineáris algebrai) szimplex, akkor annak $\mathcal{S}^{\mathcal{P}} \subset \mathbb{R}^{n-1}$ képe *affin* szimplex (lásd a PhD dolgozat 1.5. alfejezet 1.5., 1.6. és 1.7. Definícióiban).

39. Állítás. ***(4.19.Á.)*** *Természetes módon található egy bijektív megfeleltetés* $\mathcal{H}^{\mathcal{P}} \subset \mathcal{P}$ *(azaz* $\mathcal{H}^{\mathcal{P}} \subset \mathbb{R}^{n-1}$*) és* $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$ *között, hasonlóan* $\mathcal{H}^{\mathcal{P}}$ affin *és* $\mathcal{H}$ lineáris algebrai *szimplexei is megfeleltethetőek egymásnak, következésképpen*

$$\left|\mathcal{H}^{\mathcal{P}}\right| = |\mathcal{H}| \quad and \quad simp_a\left(\mathcal{H}^{\mathcal{P}}\right) = simp_\ell\left(\mathcal{H}\right) \ . \quad \square \tag{16}$$

(További részleteket a PhD dolgozat 4.3.1. alfejezetében találunk.)

Az $n=3$ és $n=4$ esetek szemléletesen is megfogalmazhatók:

40. Definíció. ***(1.7.D.) (i)*** *Tetszőleges síkbeli $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}^2$ ponthalmaz* ***affin***
$\triangleright$ 3 *-elemű* ***szimplex****, ha $\mathcal{S}$ három, egy egyenesbe eső pont,*
$\triangleright$ 4 *-elemű szimplex, ha $\mathcal{S}$ négy tetszőleges pont, de közülük semelyik három nem esik egy egyenesbe,*
$\triangleright$ $\mathbb{R}^2$ *-ben nincs több affin szimplex.*

(ii) *Tetszőleges térbeli $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}^3$ ponthalmaz* ***affin***
$\triangleright$ 3 *-elemű* ***szimplex****, ha $\mathcal{S}$ három, egy egyenesbe eső pont,*
$\triangleright$ 4 *-elemű szimplex, ha $\mathcal{S}$ négy, egy síkba eső pont, és közülük semelyik három nem esik egy egyenesbe,*
$\triangleright$ 5 *-elemű szimplex, ha $\mathcal{S}$ öt tetszőleges pont, de közülük semelyik négy nem esik egy síkba,*
$\triangleright$ $\mathbb{R}^3$ *-ben nincs több affin szimplex.* $\square$

$\mathbb{R}^3$ szimplexei

$\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^3$ térbeli vektorok helyett tehát síkbeli pontokról beszélhetünk.

41. Tétel. ***(4.20.T.**,[1998])* *Tetszőleges, adott elemszámú $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^3$ vektorhalmazra, ami kifeszíti $\mathbb{R}^3$ -et, $\mathcal{H}$ -ban nincsenek párhuzamos vektorok és $8 \le |\mathcal{H}|$, $simp_\ell(\mathcal{H})$ pontosan akkor minimális, ha $\mathcal{H}$ elemei két ($\mathcal{H}$ -ban) metsző síkon helyezkednek el, és az egyik síkon pontosan három $\mathcal{H}$ -beli vektor található. (Vagyis vannak $u_1, u_2, u_3 \in \mathcal{H}$ lineárisan függetlenek: $\mathcal{H}$ -nak pontosan egy további eleme esik $[u_1, u_2]$ -be, $\mathcal{H}$ összes maradék vektorát $[u_2, u_3]$ tartalmazza.)* $\square$

Átfogalmazva síkbeli affin szimplexekre:

42. Tétel. ***(4.20.T.)*** *Tetszőleges, adott elemszámú $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^2$ ponthalmazra, ami nem egy egyenesre esik és $8 \le |\mathcal{H}|$, $simp_a(\mathcal{H})$ pontosan akkor minimális, ha $\mathcal{H}$ elemei két ($\mathcal{H}$ -ban) metsző egyenesen helyezkednek el, és az egyik egyenesen pontosan három $\mathcal{H}$ -beli pont található.* $\square$

43. Következmény. ***(4.22.K.)*** *Amennyiben $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^3$ kifeszíti $\mathbb{R}^3$ -et, $\mathcal{H}$ -ban nincsenek párhuzamos vektorok és $4 \le |\mathcal{H}|$, akkor*

$$\binom{m-2}{3} + 1 + \binom{m-3}{2} \le simp(\mathcal{H}) \le \binom{m}{4} ,$$

és mindkét becslés éles. $\square$

A 8-nál kevesebb elemű optimális $\mathcal{H}$ halmazok felsorolását a PhD dolgozat 4.3.2. alfejezetének végén találjuk.

$\mathbb{R}^4$ szimplexei

44. Tétel. ***(4.23.T.**, [2011])* *Tetszőleges, adott elemszámú $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^4$ vektorhalmazra, ami kifeszíti $\mathbb{R}^4$-et, $\mathcal{H}$ -ban nincsenek párhuzamos vektorok és $24 \leq |\mathcal{H}|$, $simp_\ell(\mathcal{H})$* pontosan akkor *minimális, ha $\mathcal{H}$ elemei két diszjunkt, 2 -dimenziós síkon helyezkednek el, és a két síkon levő vektorok számának eltérése legfeljebb* 1. *(* Másképpen: *vannak $u_1, u_2, u_3, u_4 \in \mathcal{H}$ lineárisan független vektorok, amelyekre az $[u_1, u_2]$ és $[u_3, u_4]$ síkok $\mathcal{H}$-nak $\lfloor m/2 \rfloor$ illetve $\lceil m/2 \rceil$ vektorát tartalmazzák.)* □

A dimenzió csökkentése miatt ezzel ekvivalens:

45. Tétel. ***(4.24.T.)*** *Tetszőleges, adott elemszámú $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^3$ ponthalmazra, ami nincs egy síkon és $24 \leq |\mathcal{H}|$, $simp_a(\mathcal{H})$* pontosan akkor *minimális, ha $\mathcal{H}$ elemei két kitérő egyenesen helyezkednek el, és a két egyenesen levő pontok számának eltérése legfeljebb* 1 . □

46. Következmény. ***(4.25.K.)*** *Amennyiben $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^4$ kifeszíti $\mathbb{R}^4$ -et, $\mathcal{H}$ -ban nincsenek párhuzamos vektorok és $24 \leq |\mathcal{H}|$, akkor*

$$\binom{\lfloor m/2 \rfloor}{3} + \binom{\lceil m/2 \rceil}{3} \leq simp\,(\mathcal{H}) \ ,$$

és a becslés éles. □

A $4 \leq |\mathcal{H}| \leq 23$ eseteket számítógéppel lehetne megvizsgálni. Eddig csak a legfeljebb 8 -elemű $\mathcal{H}$ halmazokra sikerült ellenőriznünk, hogy a szélsőséges halmazok szerkezete csak a 44. Tételben leírt lehet.

További problémák és sejtések

A 7. Probléma $n \geq 5$ esetén máig megválaszolatlan. Az általános sejtés 1998 -ban, számítógépes kísérletezések után fogalmazódott meg:

47. Sejtés. ***(4.27.S.**, [1998])* *Tetszőleges, adott elemszámú $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$ részhalmazra, ami kifeszíti $\mathbb{R}^n$ -et, $\mathcal{H}$ -ban nincsenek párhuzamos vektorok és $\mathcal{H}$ elemszáma megfelelően nagy, $simp(\mathcal{H})$ pontosan akkor **minimális**, ha*
1) *páros n esetén $\mathcal{H}$ -ban vannak olyan $u_1, ..., u_n$ lineárisan független vektorok, amelyekre $\mathcal{H}$ összes többi eleme az $[u_1, u_2]$, $[u_3, u_4]$ ... , $[u_{n-1}, u_n]$ síkokon helyezkedik el, mégpedig ezek a síkok $\mathcal{H}$ -nak majdnem ugyanannyi vektorát tartalmazzák (az eltérés legfeljebb* 1*).*
2) *páratlan n esetén $\mathcal{H}$ -ban vannak olyan $u_1, ..., u_n$ lineárisan független vektorok és egy további $v \in [u_{n-1}, u_n]$ vektor, amelyekre $\mathcal{H}$ összes többi eleme*

az $[u_1, u_2]$ *,* $[u_3, u_4]$ *... ,* $[u_{n-2}, u_{n-1}]$ *síkokon helyezkedik el, mégpedig ezek a síkok* $\mathcal{H}$ *-nak majdnem ugyanannyi vektorát tartalmazzák (az eltérés legfeljebb* 1*), és a nagyobb indexű vektorok által kifeszített síkokon van esetleg kevesebb vektor.* □

A probléma általánosítása a gyakorlatban is fontos lehet: csak a *legalább* k molekula esetén létrejövő reakciókat keressük:

48. Probléma. ***(4.28.P.)*** ***a) változat:*** *Adott* $n, m, k \in \mathbb{N}$ *esetén azon* $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$, $|\mathcal{H}| = m$ *-elemű vektorhalmazok esetén, melyek kifeszítik* $\mathbb{R}^n$ *-et, mennyi* $simp(\mathcal{H})$ *legkisebb értéke HA csak a legalább* k *-elemű szimplexeket számoljuk, és milyen szerkezetűek ezek a szélsőséges* $\mathcal{H}$ *halmazok?*
b) változat: *ugyanaz, mint a), de feltesszük még, hogy* $\mathcal{H}$ *-ban nincs is* k *-nál kisebb méretű szimplex.* □

Lásd még a 68. és 71. Sejtéseket alább. Algoritmusunk módosításával (PhD dolgozat 2.2. alfejezet) kapcsolatban merül fel a következő:

49. Probléma. ***(4.29.P.)*** *Tetszőleges rögzített* $\mathcal{V} := \{\underline{v_1}, \ldots, \underline{v_t}\} \subset \mathbb{R}^n$ *vektorhalmaz és* $m \in \mathbb{N}$ *esetén mennyi lehet a* $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$, $|\mathcal{H}| = m$ *-elemű vektorhalmazokban (melyek kifeszítik* $\mathbb{R}^n$ *-et) a legalább egy* $\mathcal{V}$ *-beli elemet tartalmazó, vagyis az* $\mathcal{S} \cap \mathcal{V} \neq \emptyset$ *feltételt kielégítő* $\mathcal{S} \subset \mathcal{H}$ *szimplexek (akármilyen méretűek)* ***minimális*** *illetve* ***maximális*** *száma, és milyen a szélsőséges értékeket adó* $\mathcal{H}$ *halmazok* szerkezete*? (Az* $\mathcal{S} \cap \mathcal{V} \neq \emptyset$ *feltételt kielégítő* $\mathcal{S} \subset \mathcal{H}$ *szimplexek számát jelölje* $simp_{\mathcal{V}}(\mathcal{H})$*.)* □

IV. TÉZIS

i) *Csökkentettük a dimenziót párhuzamos vektorok kizárása esetén* (PhD dolgozat 4.3.1. alfejezet).
ii) $\mathbb{R}^3$ *-ban* éles alsó *becslést adtunk a szimplexek számára párhuzamos vektorok hiánya esetén, és meghatároztuk a szélsőséges halmazok szerkezeteit, amely* $|\mathcal{H}| > 8$ *esetén egyértelmű* (4.20. Tétel, [1998]).
iii) $\mathbb{R}^4$*-ben* éles alsó *becslést adtunk a szimplexek számára párhuzamos vektorok hiánya esetén és meghatároztuk a szélsőséges halmazok egyértelmű szerkezeteit* $|\mathcal{H}| \leq 8$ *és* $|\mathcal{H}| \geq 24$ *esetén* (4.23. Tétel, [2011]). ■

5. Matroidok és hipergráfok

A 8. és 9. Problémákra keresünk válaszokat.

50. Jelölés. *Általában* m *jelöli az* $\mathcal{M} = (X, \mathcal{F})$ *matroid (vagyis alaphalmazának)* ***méretét****,* n *pedig* ***rangját****,* $0 < n < m$ *.* □

Maximum matroidokban

A PhD dolgozatban leírt **1. Konstrukció** segítségével könnyen beláthatjuk:

51. Tétel. ***(5.4.T.)*** *$m = n+1$ esetén bármely matroidban pontosan* 1 kör *van. Az $m > n+1$ esetben csak az $U_{m,n}$ uniform matroid tartalmazza a legtöbb* kört, *$\binom{n+1}{m}$ számút.* $\square$

52. Tétel. ***(5.7.T.)*** *Csak $U_{m,n}$ -ben lehet maximális számú* bázis*: $\binom{m}{n}$ db.*$\square$

Minimum matroidokban

53. Tétel. ***(5.8.T.)*** *Tetszőleges m és n esetén, ha a matroidban megengedünk hurkokat is, akkor egyetlen $\mathcal{M}_o^{(m,n)}$ matroidban van a lehető legkevesebb* bázis*, nevezetesen* 1 *bázis van $\mathcal{M}_o$ -ban.* $\square$

54. Tétel. ***(5.9.T.)*** *Tetszőleges m és n esetén bármely, m elemű és n rangú matroidban legalább $n-m$* kör *van. Egy matroidban pontosan akkor van $n-m$* kör*, ha a matroid körei páronként diszjunktak.* $\square$

55. Megjegyzés. ***(5.10.T.)*** *Az 53. Tétel bizonyításában definiált $\mathcal{M}_o^{(m,n)}$ matroidban szintén $m-n$ páronként diszjunkt* kör *(hurok) található.* $\square$

A dolgozat **2.Konstrukcióját** használjuk, ha hurkokat nem engedünk meg.

56. Tétel. ***(5.13.T.)*** *Tegyük fel, hogy $\mathcal{M}$ -ben sem nagy körök sem hurkok nincsenek. Legyen $\{a_1, a_2, \ldots, a_n\}$ egy rögzített bázis, és jelölje ϑ_i az a_i elemmel párhuzamos elemek számát (a_i -t is beszámítva, $i = 1, 2, \ldots, n$). Ekkor $\mathcal{M}$ pontosan akkor tartalmaz minimális számú kört, ha $|\vartheta_i - \vartheta_j| \leq 1$ ($i \neq j$).*

57. Következmény. ***(5.14.K.)*** *Az m elemű, n rangú, hurokmentes matroidok körében* a körök minimális száma *($m = an + b$, $0 \leq b < n$ esetén) $b \cdot \binom{a+1}{2} + (n-b) \cdot \binom{a}{2}$, és ha m osztható n -el: $n \cdot \binom{\frac{m}{n}}{2}$.* $\square$

A minimális számú kört tartalmazó matroidok *szerkezete* csak $m \geq 2n$ esetén egyértelmű:

58. Tétel. ***(5.15.T.)*** *Az m méretű és n rangú, hurokmentes matroidokban pontosan akkor van minimális számú kör, ha*
a) *$m < 2n$ esetén: a körök páronként diszjunktak,*
b) *$m \geq 2n$ esetén csak* 2 *-elemű körök (párhuzamos elemek) vannak, és a párhuzamossági ekvivalenciaosztályok méretei legfeljebb csak* 1 *-gyel térnek el egymástól.* $\square$

59. Tétel. ***(5.21.T.)*** *Az m méretű és n rangú, hurokmentes matroidokban pontosan akkor van minimális számú bázis, ha van olyan $\{a_1, a_2, \ldots, a_n\}$ bázisa, amelyre $\mathcal{M}$ bármely más eleme párhuzamos a_1 -gyel.* $\square$

60. Következmény. ***(5.23.K.)*** *Hurokmentes matroidokban a bázisok minimális száma $m - n + 1$, a szélsőséges matroid szerkezete egyértelmű.* $\square$

A fenti számos eredmény ellenére a matroidok bázisainak és köreinek számát illetően az általános eset még *nyitott probléma*, amit a PhD dolgozat 5.5. alfejezetében ismertetünk.

Hipergráfok

Hipergráfok esetében már a probléma megfogalmazása sem könnyű, most csak egy egyszerű változatot ismertetünk meg és igazolunk, általánosabb eredmény [2013a]-ban várható. $\mathcal{H} = (V, \mathcal{E})$ egy hipergráf, $V \neq \emptyset$, $\mathcal{E} \subseteq \mathcal{P}(V)$.

61. Definíció. ***(5.24.,5.25.D.)*** *Tetszőleges $k \in \mathbb{N}$ természetes szám esetén*
(i) *$\mathcal{E}_k$ a k -elemű élek halmaza: $\mathcal{E}_k := \{E \in \mathcal{E} \ : \ |E| = k\}$,*
(ii) *V bármelyik k -elemű részhalmazát k* ***-csúcsnak*** *nevezzük,*
(iii) *V azon $S \subset V$ csúcshalmazait, amelyeket egyetlen $\mathcal{E}$ -beli él sem fed le:*

$$S \nsubseteq E \quad \text{minden } E \in \mathcal{E} \text{ esetén,} \tag{17}$$

általános helyzetűeknek *nevezzük ,*
(iv) *a (17) feltételt kielégítő k -csúcsok neve k* ***-gúlák****,*
(v) *a 4 -csúcsokat* ***quadnak****, a 4 -gúlákat pedig* ***tetraédereknek*** *is nevezzük,*
(vi) *az $S \subset V$ részhalmaz 4* ***-(elemű) szimplex****, ha S quad de* nem *tetraéder:*

$$S \subseteqq E \quad \text{valamely } E \in \mathcal{E} \text{ -re,} \tag{18}$$

$\mathcal{S}_4$ a 4 -elemű szimplexek halmazát jelöli.

(vii) *a $T \subset V$ 5-csúcs 5* ***-(elemű) szimplex****, ha egyik részhalmaza sem 4 -elemű szimplex:*

$$F \nsubseteqq T \quad \text{bármelyik } F \in \mathcal{S}_4 \text{ -re,} \tag{19}$$

vagy másképpen: T minden $\mathcal{E}$ -beli E élet legfeljebb 3 *pontban metsz: $|T \cap E| \leq 3$ $(E \in \mathcal{E})$, az 5 -elemű szimplexek halmazát $\mathcal{S}_5$ jelöli.* $\square$

62. Feltétel. ***(5.27.,5.29.F.)*** ***i)*** *$\mathcal{E}_\ell = \emptyset$ ha $\ell \leq 3$,*
ii) *Tetszőleges $E_1, E_2 \in \mathcal{E}$, $E_1 \neq E_2$ élekre (mérettől függetlenül)*

$$|E_1 \cap E_2| \leq 2 \ . \qquad \square \tag{20}$$

63. Probléma. ***(5.28.P.)*** *Mekkora az*

$$s\,(m) := |\mathcal{S}_4| + |\mathcal{S}_5| \tag{21}$$

összeg minimális *értéke, ha* $m := |V|$ *rögzített?*

64. Tétel. ***(5.30.T.)*** *A 62. Feltételek és* $m \geq 58$ *esetén*

$$s\,(m) \geq \binom{m}{4} - \frac{1}{6} C_1 m^3 - \mathcal{O}\left(m^2\right) \tag{22}$$

ahol $C_1 \leq 17$ *és* $m \geq 58$ *.* □

További kérdések matroidokban és hipergráfokban

65. Probléma. ***(5.33.P.)*** *Határozzuk meg rögzített méretű és rangú, hurok- és párhuzamos elemek nélküli matroidokban a bázisok és körök minimális számát, és keressük meg a szélsőséges matroidok szerkezetét!*

66. Definíció. ***(5.34.D.)*** *Egy (tetszőleges) matroid* ***derékbősége*** *a legrövidebb (legkisebb) körének hosszát jelenti.* □

67. Probléma. ***(5.35.P.)*** *Mennyi a bázisok és körök minimális száma azon matroidokban, amelyek* derékbősége k *ahol* $k \in \mathbb{N}$ *rögzített?* □

Oxley [O97] egyik idevonatkozó sejtése a következő:

68. Sejtés. ***(5.36.S., [O97])*** *Tetszőleges* m *elemű és* k *derékbőségű* $\mathcal{M}$ *matroidok esetén minimális számú köre az* $U_{m-3,k}$ *uniform matroidnak van, így*

$$1 + 3 \cdot \binom{m-3}{k-1} + 3 \cdot \binom{m-3}{k-2} + \binom{m-3}{k-3} \leq simp(\mathcal{M}) \ . \qquad \square \tag{23}$$

Végül megpróbáljuk a 64. Tétel eredményét is általánosítani.

69. Definíció. ***(5.37.D.)*** *Tetszőleges* $k \in \mathbb{N}$ *számra az* $E \in \mathcal{E}_{k+1}$ *élt* ***majdnem-szimplexnek (semi-simplex)*** *nevezzük, ha* E *-ben nincs* $\mathcal{E}_k$*-beli él, azaz* $E \not\supseteq F$ *ha* $F \in \mathcal{E}_k$ *. A* $k+1$*-elemű majdnem-szimplexek halmaza legyen*

$$\mathcal{E}^o_{k+1} \ . \qquad \square \tag{24}$$

70. Probléma. ***(5.38.P.)*** *Tetszőleges rögzített* $m, k \in \mathbb{N}$, $m = |V|$ *számokra keressük meg az alábbi összeg* minimális *értékét:*

$$s_k\,(m) := |\mathcal{E}_k| + \left|\mathcal{E}^o_{k+1}\right| \ . \tag{25}$$

71. Sejtés. ***(5.39.S.)*** *A (20) feltétel esetén, tetszőleges* k *számra*

$$s_k\,(m) \geq \binom{m}{k} - \mathcal{O}\left(m^{k-1}\right) \ . \qquad \square \tag{26}$$

További eredményeinket [2013a]-ben tervezzük közzétenni.

V. TÉZIS

i) Éles felső *becslést adtunk adott rangú és méretű matroidokban a körök és bázisok számának lehetséges értékére és meghatároztuk a szélsőséges matroidok szerkezetét* (PhD dolgozat 5.4. és 5.7. Tételek).

ii) Éles alsó *becslést adtunk adott rangú és méretű matroidokban a körök és bázisok számának lehetséges értékére*, ha hurkok *lehetnek a matroidban, és meghatároztuk a szélsőséges matroidok szerkezetét* (5.8. és 5.9. Tételek).

iii) Éles alsó *becslést adtunk adott rangú és méretű matroidokban a körök és bázisok számának lehetséges értékére*, ha párhuzamos elemek *lehetnek, hurkok nélkül* (5.13., 5.15. és 5.21. Tételek).

iv) *Hasonló* általános *kérdést fogalmaztunk meg és oldottunk meg hipergráfok körében* (5.24.,5.25. Definíciók és 5.30. Tétel). ■

6. Hierarchia és kiértékelési operátor

A 10. és 11. Problémákra keresünk válaszokat.

Ebben a fejezetben tett definíciók és tételek ugyan matematikailag egyszerűek, de a kémiában és fizikában nagyon jól hasznosíthatóak ([2000b]).

Hierarchia

A reakciók éppúgy atomcsoportok lineáris kombinációi, mint az atomcsoportok atomokból épülnek fel, és a mechanizmusok szintén lineáris kombinációi (az előbb megtalált) reakcióknak. A következő *szint* kiindulási vektorai éppen az előző szint megoldásvektorai. A problémát az izomer molekulák okozzák, melyek nem azonosak, de összegképletük azonos.

72. Definíció. ***(6.3.D.)*** *Legyenek* $\mathcal{A}_x = \left\{A_1^x, ..., A_{d_x}^x\right\}$ *tetszőleges, véges, diszjunkt halmazok ha* $x \in \mathbb{N}$, $L_x := \left\{\sum_{j=1}^{d_x} \alpha_j \cdot A_j^x : \alpha_j \in \mathbb{Z}\right\}$ *formális véges összegek és legyen*

$$\mathcal{L}_x := (L_x, +, \cdot) \tag{27}$$

az $\mathcal{A}_x$ *által* $\mathbb{Z}$ *felett generált szabad modulus (*$\mathbb{Z}$*-vektortér).*
$\mathcal{A}_x$ *elemeit* $\mathcal{A}_{x-1}$ *elemeinek lineáris kombinációiként képzeljük el, de egyenlőséget nem tehetünk, ezért van szükségünk az alábbi* Δ_x *függvényekre.*
Tetszőleges $\Delta_x^- : \mathcal{A}_x \to L_x$ $(0 < x)$ *függvények nyilván egyértelműen kiterjeszthetők*

$$\Delta_x : \mathcal{L}_x \to \mathcal{L}_{x-1} \tag{28}$$

homomorfizmussá.
A fenti $\mathcal{L}_x$ algebrákat hívjuk a ***sztöchiometriai hierarchia*** *x* ***-edik szintjének*** *és a Δ_x függvényeket közöttük* ***sztöchiometriai kapcsolatoknak,*** *ha a fenti feltételeken túl minden $1 < x$ esetén még teljesül az* ***anyagmegmaradás általánosított követelménye*** *is:*

$$\Delta_{x-1} \circ \Delta_x = O \ . \quad \square \tag{29}$$

Kiértékelési operátor

73. Definíció. ***(6.5.D.) (i)*** *Tetszőleges* véges $\{C_1, \ldots, C_n\}$ *halmaz elemeit* ***komponenseknek,*** *az elemek (bármilyen) $\underline{S} = \sum_{i=1}^n s_i \cdot C_i$ ($s_i \in \mathbb{R}$) lineáris kombinációját* ***struktúrának,*** *a struktúrák $V := \{\sum_{i=1}^n s_i \cdot C_i : s_i \in \mathbb{R}\}$ (formális) vektorterét* ***anyaghalmaznak*** *hívjuk.*
(ii) *Az $\mathcal{L} : V \to \mathbb{R}$ lineáris funkcionálokat* ***kiértékelési operátoroknak*** *nevezzük (V -t nyilván azonosítjuk $\mathbb{R}^n$-el).* $\square$

74. Tétel. ***(6.6.T.)*** *Bármely V anyaghalmazon* csak

$$\mathcal{L}(\underline{S}) = \sum_{i=1}^{n} a_i \cdot s_i \tag{30}$$

alakú kiértékelési operátorok léteznek, ahol $\underline{a} = [a_1, \ldots, a_n]^T \in \mathbb{R}^n$ az $\mathcal{L} : V \to \mathbb{R}$ operátorhoz egyértelműen *tartozó együtthatóvektor ($a_i = \mathcal{L}(C_i)$), az s_i együtthatókat a 73. Definícióban határoztuk meg.* $\square$

A fenti Tételből azonnal kapjuk Hess jólismert törvényét:

75. Tétel. ***(6.7.T.,*** Hess törvénye*) Ha az $X_1, \ldots, X_k$ reakciók súlyozott összege a nulla (üres) $\underline{O}$ mechanizmust eredményezi, akkor a $\mathcal{H}(X_1), ..., \mathcal{H}(X_k)$ reakcióhők ugyanezen lineáris kombinációja a* 0 *valós számot adja.* $\square$

Mivel $V^* \cong V^*$, így

76. Tétel. ***(6.8.T.)*** *Ha V -t n komponens alkotja, akkor* egyszerre legfeljebb n lineárisan független kiértékelési operátor *adható meg, továbbá bármelyik ilyen $\mathcal{L}_1, ..., \mathcal{L}_n$ lineárisan független kiértékelési operátor(halmaz) lineáris kombinációi előállítják az* összes *lehetséges $\mathcal{L}$ kiértékelési operátort $\mathcal{L} = \alpha_1\mathcal{L}_1 + ... + \alpha_n\mathcal{L}_n$ alakban.* $\square$

A Cauchy-Bunyakowsky-Schwarz egyenlőtlenség alapján:

77. Tétel. ***(6.9.T.)*** *Tetszőleges V anyaghalmazra és bármely $\mathcal{L} : V \to \mathbb{R}$ operátorra létezik $c \in \mathbb{R}^+$ valós szám, amelyre*

$$| \mathcal{L}(\underline{S}) | \leq c \cdot \|\underline{S}\| \tag{31}$$

tetszőleges $\underline{S} \in V$ struktúrára, ahol $\|\underline{S}\| = \sqrt{s_1^2 + \ldots + s_n^2}$, $c = \sqrt{a_1^2 + \ldots + a_n^2}$ és az s_i és a_i számokat a 72. Definícó és a 74. Tétel határozzák meg. $\square$

78. Tétel. ***(6.10.T.)*** *Amennyiben V_1 generátorrendszere $\{C_1, \ldots, C_n\}$, V_2 generátorrendszere $\{D_1, \ldots, D_m\}$, $\{C_1, \ldots, C_n\} \cap \{D_1, \ldots, D_m\} = \emptyset$ és $V = V_1 \oplus V_2$, akkor V -n kizárólag csak*

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}\,|_{V_1} \oplus \mathcal{L}\,|_{V_2} \quad , \tag{32}$$

vagyis $\mathcal{L}(\underline{S}) = \sum_{i=1}^{n} a_i \cdot s_i + \sum_{j=1}^{m} b_j \cdot t_j$ alakú operátorok lehetségesek, ahol természetesen $\underline{S} = \sum_{i=1}^{n} s_i \cdot C_i + \sum_{j=1}^{m} t_j \cdot D_j$. $\square$

79. Tétel. ***(6.11.T.)*** *Bármely két skalárszorzat, $\mathcal{A}, \mathcal{B} : V \times V \to \mathbb{R}$ esetén valamilyen $\mathcal{I} : V \to V$ automorfizmusra $\mathcal{A}(\underline{u}, \underline{v}) = \mathcal{B}(\mathcal{I}(\underline{u}), \mathcal{I}(\underline{v}))$ teljesül minden $\underline{u}, \underline{v} \in V$ vektorokra,* sőt *$\mathcal{I}$ folytonos az $\mathcal{A}$ és $\mathcal{B}$ által indukált topológiákra nézve.* $\square$

Elnagyoltan fogalmazva így azt kaptuk, hogy adott anyaghalmaz kiértékelési operátorai lényegében csak skalárszorosban térnek el egymástól.

VI. TÉZIS

i) *Általános definíciót adtunk a* sztöchiometriai hierarchia *fogalmára* (PhD dolgozat 6.3. Definíció).

ii) *A* kiértékelési operátor *definíciója* (6.5. Definíció) *után a lineáris vektorterek, funkcionálok és duális terek több, jólismert tételének megadtuk kémiai jelentését, így egyrészt már ismert kémiai összefüggéseknek kaptuk rövid matematikai bizonyítását (pl. Hess törvénye), másrészt új (egyszerű) kémiai összefüggéseket is nyertünk* (6.6. - 6.11. Tételek). $\blacksquare$

7. Példák

"Amundson" ([A66], [P90])

A következő atomcsoportok adottak:
$CO, CO_2, O_2, H_2, CH_2O, CH_3OH, C_2H_5OH, (CH_3)_2CO, CH_4, CH_3CHO, H_2O$

A fenti 11 darab 3 -dimenziós vektor között közismerten 213 szimplex létezik, melyeket algoritmusunk 0.22 másodperc alatt talált meg. Az output *eleje* (pozitív együtthatók a kiindulási, negatív együtthatók a végtermékeket jelentik):

$-2CO + 2CO_2 - O_2 = 0$,
$3CO - CO_2 + 3H_2 - C_2H_5OH = 0$,
$5CO - 2CO_2 + 3H_2 - C_2H_6CO = 0$,
$2CO - CO_2 + 2H_2 - CH_4 = 0$,
$3CO - CO_2 + 2H_2 - CH_3CHO = 0$,
$-1CO + CO_2 + H_2 - H_2O = 0$, **...** .

"Metán" ([B99], [HS83])

Metán szintézise szénmonoxidból és vízből. Az $\mathbf{S}_R$ végső (overall) reakciót kell előállítani az $S_1 - S_{15}$ lehetséges elemi reakciókból (ℓ a katalizátor felülete):

$\mathbf{S}_R$: $\mathbf{2H_2}$+$\mathbf{2CO} \rightarrow \mathbf{CH_4}$+$\mathbf{CO_2}$,
$S_1 : CO\ell + \ell = C\ell + O\ell$,
$S_2 : C\ell + H\ell = CH\ell + \ell$,
$S_3 : CH\ell + H\ell = CH_2\ell + \ell$,
$S_4 : CH_2\ell + H\ell = CH_3\ell + \ell$,
$S_5 : CH_3\ell + H\ell = CH_4 + 2\ell$,
$S_6 : OH\ell + H\ell = H_2O + 2\ell$,
$S_7 : CO_2 + \ell = CO_2\ell$,
$S_8 : CO + \ell = CO\ell$,
$S_9 : H_2 + 2\ell = 2H\ell$,
$S_{10} : CO_2\ell + H\ell = CHOO\ell + \ell$,
$S_{11} : CHOO\ell + H\ell = CHO\ell + OH\ell$,
$S_{12} : O\ell + H\ell = OH\ell + \ell$,
$S_{13} : CO\ell + O\ell = CO_2\ell + \ell$,
$S_{14} : CHOO\ell + \ell = OH\ell + CO\ell$,
$S_{15} : CO\ell + H\ell = CHO\ell + \ell$.

Az összes minimális mechanizmus (output):

1) $S_1 + S_2 + S_3 + S_4 + S_5 - S_7 + 2S_8 + 2S_9 - S_{10} - S_{11} + S_{12} + S_{15} = S_R$
2) $S_1 + S_2 + S_3 + S_4 + S_5 - S_7 + 2S_8 + 2S_9 - S_{10} + S_{12} - S_{14} = S_R$
3) $S_1 + S_2 + S_3 + S_4 + S_5 - S_7 + 2S_8 + 2S_9 + S_{13} = S_R$
4) $S_{10} + S_{11} - S_{12} + S_{13} - S_{15} = 0$
5) $S_{10} - S_{12} + S_{13} + S_{14} = 0$
6) $S_{11} - S_{14} - S_{15} = 0$

(Az utolsó három mechanizmus láthatóan nem S_R -et eredményezi, csak ún. ciklusok.)

Irodalomjegyzék

[1991] **Szalkai,I.:** *Generating Minimal Reactions in Stoichiometry Using Linear Algebra,* Hung. J. Ind. Chem.*, 19 (1991), 289–292.*
http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/HJIC(1991)289-292.pdf

[1995] **Laflamme,C., Szalkai,I.:** *Counting Simplexes in* $\mathbb{R}^n$, Hung. J. Ind. Chem. 23 (1995), 237–240.
http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/HJIC(1995)237-240.pdf

[1996] **Dósa,Gy., Laflamme,C., Szalkai,I.:** *On the Maximal and Minimal Number of Bases and Simple Circuits in Matroids and the Extremal Constructions*,Preprint 046, Dept.Math.Univ.Veszprém,1996.

[1997] **Szalkai,I.:** *Lineáris algebra, sztöchiometria és kombinatorika*, Polygon VII. (1997), 35–51.

[1997p] **Szalkai,I.:***On the Number of Bases and Circuits in Matroids*, Colloquia Math. Soc. J.Bolyai, Conference on Extremal Graph Theory, Balatonlelle, 1997, Problem No.14.

[1998] **Laflamme,C., Szalkai,I.:** *Counting Simplexes in* $\mathbb{R}^3$*,* Electr. J. of Combinatorics vol.5 (1998) No.1*,* Res. Paper No. 40, 11 pp*,*
http://www.combinatorics.org/ojs/index.php/eljc/article/view/v5i1r40/pdf
Nyomtatott változat: J. Combin. 5 (1998), 597–607.

[1999] **Szalkai,I.:** *Handling Multicomponent Systems in* $\mathbb{R}^n$, I.: *Theoretical Results,* J. Math. Chemistry 25 (1999), 31–46.

[2000a] **Szalkai,I.:** *A New General Algorithmic Method in Reaction Syntheses Using Linear Algebra,* J. Math. Chemistry 28 (2000), 1–34.

[2000b] **Szalkai,I.:** *On Valuation Operators in Stoichiometry and in Reaction Syntheses,* J. Math. Chemistry 27 (2000), 377–386.

[2001] **Szalkai,I.:** *Diszkrét matematika és Algoritmuselmélet alapjai,* Veszprémi Egyetemi Kiadó, 2001.

[2006] **Dósa,Gy., Szalkai,I., Laflamme,C.:** *On the Maximal and Minimal Number of Bases and Simple Circuits in Matroids and the Extremal Constructions*,Pure Math.&Appl.(PUMA) 15(2006), 383-392.
http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/Puma2006.pdf

[2011] **Szalkai,B., Szalkai,I.:** *Counting minimal reactions with specific conditions in* $\mathbb{R}^4$, J.of Math.Chem. 49 (2011), pp.1071-1085,
http://www.springerlink.com/content/r4w8879l7j558277/fulltext.pdf

[2011T] **Szalkai,I.:** *Counting Chemical Reactions and Simplexes in* $\mathbb{R}^4$, Workshop on Optimization, Fields Institute, Toronto (Canada), September 26-29, 2011., http://www.fields.utoronto.ca/audio/11-12/wksp_optimization/szalkai
http://www.fields.utoronto.ca/programs/scientific/11-12/archive/discretegeom/wksp_optimization/index.html

[2012a] **Szalkai,I., Dósa,Gy., Tuza,Zs., Szalkai,B.:** *On Minimal Solutions of Systems of Linear Equations with Applications*, Miskolc Math.Notes, 13 (2012), 529-541., http://mat76.mat.uni-miskolc.hu/~mnotes/files/13-2/13-2-szalkai_501.pdf

[2012b] **Szalkai,B., Szalkai,I.:** *Simplexes and their Applications - a Short Survey,* Miskolc Math.Notes, 14 (2013), 279-290.
http://mat76.mat.uni-miskolc.hu/~mnotes

[2013a] **Tuza,Zs., Szalkai,I.:** *Minimum Number of Affine Simplexes of Given Dimension*, előkészületben.

[2013b] **Szalkai,I., Sellers,P., Pethő,Á.:** *On the Mathematical Foundation of Reaction Mechanisms*, előkészületben.

A Szerző teljes publikáció listája a

http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/wwwPublikList(09)mind2012.doc

címen megtalálható.