

Reakciómechanizmusok algoritmikus és matematikai vizsgálata

PhD - tézisek

Szalkai István

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

2014. március 28.

Bevezetés

A kémiai reakciók, mint például a legegyszerűbb



reakció, a valóságban nem egyetlen lépésben történnek, hanem nagyon sok köztes *atomcsoport* ("molekulakezdemény", mint pl. H, H₂, O, O₂, O₃, H₂O, H₂O₂, HO, HO₂) között végbemenő több **reakciólépés (elemi reakció)** bonyolult *sorozataként (mechanizmus)*, így (1)-et **összetett reakciónak** hívjuk¹⁾.

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 *bruttó* (végső, összetett) reakciók megkeresése.

II) Adott bruttó reakció felbontása elemi reakciókra (az első feladat "megfordítása"), vagyis adott kiindulási és végtermékek (**terminális molekulák**) közötti reakciókat (mint pl. (1)) eredményező összetett reakciók megkeresése.

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, *kiértékelési operátornak* nevezett lineáris funkcionálok segítségével, 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 alábbi szerzőtársaimnak és munkatársaimnak (*betűrendben*): **Bertók Botond**, **Dominich Sándor** (†2010), **Dósa György**, **Claude LaFlamme**, **Friedler Ferenc**, **Győri István**, **Norbert Herrman**, **Hujter Mihály**, **Matematika Tanszék összes munkatársa**, **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**.

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

1. Matematikai definíciók és a főbb problémák

A reakciókban szereplő n számú atom rögzítése után minden atomcsoport egy-egy \mathbb{R}^n -beli vektor, a reakciók ezen vektorok lineáris kombinációi. Hasonló a helyzet, ha rögzítünk néhány (elemi) reakciót: ezek egymás utáni lejátszódásaként létrejövő mechanizmus, pontosabban e mechanizmushoz tartozó bruttó reakció az adott reakciókat jelölő vektorok lineáris kombinációi. Amennyiben *minimális* reakciót illetve mechanizmust keresünk, akkor a kiválasztott vektoroknak *minimális összefüggő* rendszert kell alkotniuk:

1. Definíció. (1.3.D.) Egy tetszőleges $S \subset \mathbb{R}^n$ vektorhalmaz (*lineáris algebrai*) *szimplex*, ha minimális összefüggő, vagyis S (lineárisan) összefüggő, de bármely 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 $S = \{\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_k\} \subset \mathbb{R}^n$ vektorhalmaz közvetlenül megfeleltethető egy olyan

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

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

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 $S = \{\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_k\} \subset \mathbb{R}^n$ szimplex.

4. Probléma. (1.18.P.) Legyenek $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$ tetszőleges, rögzített vektorok. Ha ismertek a $\sum_{\mathbf{a}_j \in S} x_j \cdot \mathbf{a}_j = \mathbf{0}$ (homogén) lineáris egyenletrendszerek megoldáshalmazai az összes $S \subseteq \{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m\}$ 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 $H = \{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_m\} \subset \mathbb{R}^n$ (véges) vektorhalmaz esetén keressük meg gyors algoritmussal a H -ban található összes minimálisan összefüggő $S \subseteq H$ 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 $H \subset \mathbb{R}^n$ vektorhalmazban tartalmazható $S \subseteq H$ szimplexek lehetséges számára. (Természetesen az n kitevő H -nak valódi dimenziója: H kifeszíti az egész \mathbb{R}^n teret (generátorrendszer), vagyis teljes dimenziós.)

Az *alsó* becsléseknél a párhuzamos vektoroknak (izomer molekulák, többszörös adagok) lényeges szerepük van (ld. 34. Tétel), ezért fontos és nehéz a 6. Probléma következő módosítása is:

7. Probléma. (1.21.P.) Adjunk *alsó* becslést egy tetszőleges, m -elemű $H \subset \mathbb{R}^n$ vektorhalmazban tartalmazható $S \subseteq H$ szimplexek lehetséges számára, ha még azt is kikötjük, hogy H -ban *nincsenek párhuzamos vektorok* (és természetesen 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 H részhalmazban tartalmazható $S \subseteq H$ szimplexek lehetséges számára, ha 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 H részhalmazban található $S \subseteq H$ szimplexek lehetséges számára, a 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* $\sum_{i=1}^{n+1} \binom{m}{i} = \binom{m+1}{n+2} - 1 = \mathcal{O}(m^{n+2})$ ($m \rightarrow \infty$) legfeljebb ekkora méretű részhalmaza van. Az összes, nagyságrendileg m^{n+2} számú 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 természetes módon sorbarendezettek, a megvizsgálandó $S \subseteq H$ 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 $E, F \subseteq V$ 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 (v nem izolált),
(iii) a fentiek esetén \mathcal{E} elemeit **függetleneknek** nevezzük,
(iv) egy $S \subseteq V$ részhalmaz **szimplex**, ha S összefüggő ($S \notin \mathcal{E}$) de S bármely valódi $T \subsetneq S$ részhalmaza független. \square

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). \square

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 $\mathcal{O}(m^{n+1})$. \square

Az algoritmus tehát polinomiális idejű. $\mathcal{O}(m^{n+1})$ 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 ismertettünk.

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 $\mathcal{O}(m^2)$ lépés, míg a megtakarított idő majdnem $\mathcal{O}(m^n)$.
(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 $X_1, \dots, X_k \in \mathbb{R}^N$ reakció, melyekben mind *terminális* (végső) molekulák (nyersanyagok és végtermékek), mind *nemterminális* (köztes) atomcsoportok szerepelnek. Olyan $Y = \sum_{i=1}^k \lambda_i X_i$ mechanizmusokat keresünk, amelyeknek végeredményei, az $\mathbf{Y} = \mathcal{R}(\underline{\lambda})$ bruttó (overall) reakciók *csak terminális* molekulákat tartalmaznak. Kiemeljük, hogy az \mathbf{Y} bruttó 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 $H := \{\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_k\}$ vektorhalmazt bővítjük 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 $\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_t$ 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 $H \subseteq V$ ha $\mathcal{H} = (V, \mathcal{E})$ leszálló, nem torz hipergráf) szimplexeinek lexicografikus 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 kerestünk 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 $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_m \in \mathbb{R}^n$, vagyis $A = [\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_m]$. □

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

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

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

(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 $\text{supp}(\underline{y}) \subsetneq \text{supp}(\underline{z})$ teljesülne, ekkor $\underline{z} \in M$ **minimális** (M -re).

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

$$M^{\min} := \{\underline{z} \in M : \underline{z} \text{ minimális tartójú}\} \quad (4)$$

(iv) $M_{A,\underline{b}}^{\min}$ és $M_{A,\underline{0}}^{\min}$ az $M_{A,\underline{b}}$ és $M_{A,\underline{0}}$ minimális tartójú elemeinek halmazai, $M_{A,\underline{b}}^{\min}$ és $M_{A,\underline{0}}^{\min}$ 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 $\underline{z} \in M_{A,0}^{\min}$, vagyis \underline{z} egy minimális (nem-nulla) megoldása az $A \cdot \underline{z} = \underline{0}$ egyenletnek. Ekkor az A együtthatómátrix \underline{z} által "használt" oszlopvektorainak halmaza

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

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 $H \subseteq \{1, \dots, m\}$, $|H| = h$ esetén \underline{x} és A **megszorítása** a H halmazra:

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

Homogén egyenletrendszerek

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

$$(A \mid_{\text{supp}(\underline{z})}) \cdot \underline{y} = \underline{0} \quad (7)$$

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

$$\underline{y} = \lambda \cdot \underline{z} \mid_{\text{supp}(\underline{z})} \quad (\lambda \in \mathbb{R}) \quad \square \quad (8)$$

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

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

$$S = \{\underline{a}_i : i \in \text{supp}(\underline{x})\} . \quad \square \quad (9)$$

A 4. Probléma megoldása:

23. Tétel. (3.13.T.) Az $M_{A,0}^{\min} \subseteq \mathbb{R}^m$ halmaz generálja az $M_{A,0} \subseteq \mathbb{R}^m$ al-teret, 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 $\underline{x} \in M_{A,0}$ megoldásának tartóhalmazát lefedik a minimális megoldások (tartóhalmazai):

$$\text{supp}(\underline{x}) \subseteq \bigcup \{ \text{supp}(\underline{z}) : \underline{z} \in M_{A,0}^{\min} \} . \quad \square \quad (10)$$

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

Inhomogén egyenletrendszerek

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

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

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 $M_{A,b}^{\min}$ elemeiből?

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

$$\underline{x} = \sum_{i=1}^I \alpha_i \underline{z}_i + \underline{y} \quad \text{ahol} \quad \sum_{i=1}^I \alpha_i = 1 \quad (12)$$

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

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

Ez általánosítása a jól ismert $M_{A,b} = \underline{z} + M_{A,0}$ 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 és 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 összefüggők (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 $(M_{A,0}^{\min})$ generálják az összes megoldást (3.13. Tétel).

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

iv) Leírtuk a minimális- és a bázismegoldások kapcsolatát (3.18. Megjegyzés). \blacksquare

4. \mathbb{R}^n szimplexeinek száma

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

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

A maximum

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

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

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

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

és a becslés éles, vagyis van olyan H amelyre (13)-ban = teljesül. \square

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

A minimum párhuzamos vektorokkal

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

$|H| \geq 2n$ esetén ez az egyetlen minimális konfiguráció. \square

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

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

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

$$n \cdot \binom{\frac{m}{n}}{2} \leq \text{simp}(H). \quad \square \quad (15)$$

Megjegyezzük, hogy $n+1 \leq m < 2n-1$ esetén a minimális számú szimplexeket tartalmazó H halmazok szerkezete nem egyértelmű, amit az alábbi példa is mutat:

36. Példa. (4.14.P.) Legyen $n+1 \leq m < 2n-1$. Rögzítsünk egy $\mathcal{K} = \{\underline{e}_1, \dots, \underline{e}_n\} \subset \mathbb{R}^n$ tetszőleges bázist, és legyen $\Pi = \{\mathcal{I}_1, \dots, \mathcal{I}_\ell\}$ 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

$$S_j := \mathcal{I}_j \cup \{\underline{v}_j\} \quad (j \leq \ell)$$

halmazok mind szimplexek, ezért a

$$H_\Pi = \{\underline{e}_1, \dots, \underline{e}_n\} \cup \{\underline{v}_1, \dots, \underline{v}_\ell\}$$

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

III. TÉZIS

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

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

A minimum párhuzamos vektorok nélkül

Az alsó korlátot a *kizárólag* párhuzamos vektorokból (izomer molekulák vagy többszörös adagok) álló H vektorhalmazok érik el, tehát kézenfekvő külön megvizsgálni a párhuzamos vektorokat nem tartalmazó H halmazokat. A továbbiakban a következő feltétel mellett vizsgáljuk a szimplexek számának lehetséges *legkisebb* értékeit:

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

A dimenzió csökkentése

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 $H \subset \mathbb{R}^n$ halmazra

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

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

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

Amennyiben az $S \subset \mathbb{R}^n$ halmaz (lineáris algebrai) szimplex, akkor annak $S^{\mathcal{P}} \subset \mathbb{R}^{n-1}$ 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 $H^{\mathcal{P}} \subset \mathcal{P}$ (azaz $H^{\mathcal{P}} \subset \mathbb{R}^{n-1}$) és $H \subset \mathbb{R}^n$ között, hasonlóan $H^{\mathcal{P}}$ affin és H lineáris algebrai szimplexei is megfeleltethetőek egymásnak, következésképpen

$$|H^{\mathcal{P}}| = |H| \quad \text{and} \quad \text{simp}_a(H^{\mathcal{P}}) = \text{simp}_\ell(H) . \quad \square \quad (16)$$

(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 $S \subset \mathbb{R}^2$ ponthalmaz **affin**

- ▷ 3 -elemű **szimplex**, ha S három, egy egyenesbe eső pont,
- ▷ 4 -elemű szimplex, ha S négy tetszőleges pont, de közülük semelyik három nem esik egy egyenesbe,
- ▷ \mathbb{R}^2 -ben nincs több affin szimplex.

(ii) Tetszőleges térbeli $S \subset \mathbb{R}^3$ ponthalmaz **affin**

- ▷ 3 -elemű **szimplex**, ha S három, egy egyenesbe eső pont,
- ▷ 4 -elemű szimplex, ha S négy, egy síkba eső pont, és közülük semelyik három nem esik egy egyenesbe,
- ▷ 5 -elemű szimplex, ha S öt tetszőleges pont, de közülük semelyik négy nem esik egy síkba,
- ▷ \mathbb{R}^3 -ben nincs több affin szimplex. \square

\mathbb{R}^3 szimplexei

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

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

Átfogalmazva síkbeli affin szimplexekre:

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

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

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

és mindkét becslés éles. \square

A 8-nál kevesebb elemű optimális 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 $H \subset \mathbb{R}^4$ vektorhalmazra, ami kifeszíti \mathbb{R}^4 -et, H -ban nincsenek párhuzamos vektorok és $24 \leq |H|$, $\text{simp}_\ell(H)$ pontosan akkor minimális, ha H elemei két diszjunkt, 2 -dimenziós síkon helyezkednek el, és a két síkon levő vektorok számának eltérése legfeljebb 1. (Másképpen: vannak $u_1, u_2, u_3, u_4 \in H$ lineárisan független vektorok, amelyekre az $[u_1, u_2]$ és $[u_3, u_4]$ síkok H -nak $\lfloor m/2 \rfloor$ illetve $\lceil m/2 \rceil$ vektorát tartalmazzák.) \square

A dimenzió csökkentése miatt ezzel ekvivalens:

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

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

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

és a becslés éles. \square

A $4 \leq |H| \leq 23$ eseteket számítógéppel lehetne megvizsgálni. Eddig csak a legfeljebb 8 -elemű 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 $H \subset \mathbb{R}^n$ részhalmazra, ami kifeszíti \mathbb{R}^n -et, H -ban nincsenek párhuzamos vektorok és H elemszáma megfelelően nagy, $\text{simp}(H)$ pontosan akkor **minimális**, ha

1) páros n esetén H -ban vannak olyan u_1, \dots, u_n lineárisan független vektorok, amelyekre 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 H -nak majdnem ugyanannyi vektorát tartalmazzák (az eltérés legfeljebb 1).

2) páratlan n esetén H -ban vannak olyan u_1, \dots, u_n lineárisan független vektorok és egy további $v \in [u_{n-1}, u_n]$ vektor, amelyekre 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 H -nak majdnem ugyanannyi vektorát tartalmazzák (az eltérés legfeljebb 1), és a nagyobb indexű vektorok által kifeszített síkokon van esetleg kevesebb vektor. \square

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 $H \subset \mathbb{R}^n$, $|H| = m$ -elemű vektorhalmazok esetén, melyek kifeszítik \mathbb{R}^n -et, mennyi $\text{simp}(H)$ legkisebb értéke HA csak a legalább k -elemű szimplexeket számoljuk, és milyen szerkezetűek ezek a szélsőséges H halmazok?

b) változat: ugyanaz, mint a), de feltesszük még, hogy H -ban nincs is k -nál kisebb méretű szimplex. \square

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 $\mathcal{V} := \{v_1, \dots, v_l\} \subset \mathbb{R}^n$ vektorhalmaz és $m \in \mathbb{N}$ esetén mennyi lehet a $H \subset \mathbb{R}^n$, $|H| = m$ -elemű vektorhalmazokban (melyek kifeszítik \mathbb{R}^n -et) a legalább egy \mathcal{V} -beli elemet tartalmazó, vagyis az $S \cap \mathcal{V} \neq \emptyset$ feltételt kielégítő $S \subset H$ szimplexek (akármilyen méretűek) **minimális** illetve **maximális** száma, és milyen a szélsőséges értékeket adó H halmazok szerkezete? (Az $S \cap \mathcal{V} \neq \emptyset$ feltételt kielégítő $S \subset H$ szimplexek számát jelölje $\text{simp}_{\mathcal{V}}(H)$.) \square

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 $|H| > 8$ 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 $|H| \leq 8$ és $|H| \geq 24$ esetén (4.23. Tétel, [2011]). \blacksquare

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**, $0 < n < m$. \square

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 $\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ egy rögzített bázis, és jelölje ϑ_i az a_i elemmel párhuzamos elemek számát (a_i -t is beszámítva, $i = 1, 2, \dots, n$). 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 $\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ 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 részalmazát k -**csúcsnak** nevezzük,
- (iii) V azon $S \subset V$ csúcshalmazait, amelyeket egyetlen \mathcal{E} -beli él sem fed le:

$$S \not\subseteq E \quad \text{minden } E \in \mathcal{E} \text{ esetén,} \quad (17)$$

általános helyzetűeknek nevezzük,

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

$$S \subseteq E \quad \text{valamely } E \in \mathcal{E} \text{-re,} \quad (18)$$

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

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

$$F \not\subseteq T \quad \text{bármelyik } F \in \mathcal{S}_4 \text{-re,} \quad (19)$$

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)

$$|E_1 \cap E_2| \leq 2. \quad \square \quad (20)$$

63. Probléma. (5.28.P.) Mekkora az

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

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

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

$$s(m) \geq \binom{m}{4} - \frac{1}{6}C_1m^3 - \mathcal{O}(m^2) \quad (22)$$

ahol $C_1 \leq 17$ és $m \geq 58$. \square

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. \square

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

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

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

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

$$\mathcal{E}_{k+1}^o . \quad \square \quad (24)$$

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

$$s_k(m) := |\mathcal{E}_k| + |\mathcal{E}_{k+1}^o| . \quad (25)$$

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

$$s_k(m) \geq \binom{m}{k} - \mathcal{O}(m^{k-1}) . \quad \square \quad (26)$$

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 $\mathcal{A}_x = \{A_1^x, \dots, A_{d_x}^x\}$ 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

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

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 $\Delta_x^- : \mathcal{A}_x \rightarrow L_x$ ($0 < x$) függvények nyilván egyértelműen kiterjeszthetők

$$\Delta_x : \mathcal{L}_x \rightarrow \mathcal{L}_{x-1} \quad (28)$$

homomorfizmussá.

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

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

Kiértékelési operátor

73. Definíció. (6.5.D.) (i) Tetszőleges véges $\{C_1, \dots, C_n\}$ 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 **anyagalmaznak** hívjuk.

(ii) Az $\mathcal{L} : V \rightarrow \mathbb{R}$ lineáris funkcionálokat **kiértékelési operátoroknak** nevezzük (V -t nyilván azonosítjuk \mathbb{R}^n -el). \square

74. Tétel. (6.6.T.) Bármely V anyagalmazon csak

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

alakú kiértékelési operátorok léteznek, ahol $\underline{a} = [a_1, \dots, a_n]^T \in \mathbb{R}^n$ az $\mathcal{L} : V \rightarrow \mathbb{R}$ 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, \dots, X_k reakciók súlyozott összege a nulla (üres) \mathcal{Q} mechanizmust eredményezi, akkor a $\mathcal{H}(X_1), \dots, \mathcal{H}(X_k)$ 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 $\mathcal{L}_1, \dots, \mathcal{L}_n$ lineárisan független kiértékelési operátor(halmaz) lineáris kombinációi előállítják az összes lehetséges \mathcal{L} kiértékelési operátort $\mathcal{L} = \alpha_1 \mathcal{L}_1 + \dots + \alpha_n \mathcal{L}_n$ alakban. \square

A Cauchy–Bunyakovsky–Schwarz-egyenlőtlenség alapján:

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

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

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

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

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

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, $\mathcal{A}, \mathcal{B} : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ esetén valamilyen $\mathcal{I} : V \rightarrow V$ 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 skalárszorosan 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:

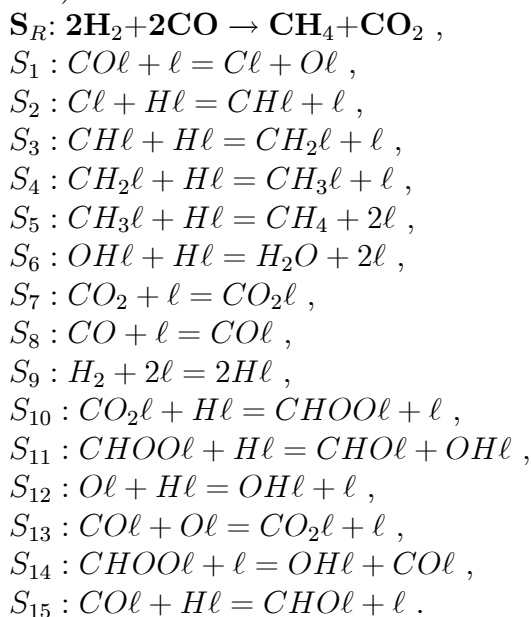
$CO, CO_2, O_2, H_2, CH_2O, CH_3OH, C_2H_5OH, (CH_3)_2CO, CH_4, CH_3CHO, H_2O$

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):

$$\begin{aligned}
 -2CO + 2CO_2 - O_2 &= 0 , \\
 3CO - CO_2 + 3H_2 - C_2H_5OH &= 0 , \\
 5CO - 2CO_2 + 3H_2 - C_2H_6CO &= 0 , \\
 2CO - CO_2 + 2H_2 - CH_4 &= 0 , \\
 3CO - CO_2 + 2H_2 - CH_3CHO &= 0 , \\
 -1CO + CO_2 + H_2 - H_2O &= 0 , \dots .
 \end{aligned}$$

"Metán" ([B99], [HS83])

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



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](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](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. <http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/Szalkai-1997b-PolygonLinAlg.pdf>
- [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.
<http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/Szalkai-1999b-Handling.pdf>
- [2000a] **Szalkai,I.:** *A New General Algorithmic Method in Reaction Syntheses Using Linear Algebra*, J. Math. Chemistry 28 (2000), 1–34.
<http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/Szalkai-2000a-NewGeneral.pdf>

- [2000b] **Szalkai,I.:** *On Valuation Operators in Stoichiometry and in Reaction Syntheses*, J. Math. Chemistry 27 (2000), 377–386.
<http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/Szalkai-2000b-Valuation.pdf>
- [2001] **Szalkai,I.:** *Diszkrét matematika és Algoritmuselmélet alapjai*, Veszprémi Egyetemi Kiadó, 2001.
- [2004] **Dósa,Gy., Szalkai,I., Laflamme,C.:** *The Maximum and Minimum Number of Circuits and Bases of Matroids*, Pure Math. & Appl. (PUMA) 15(2004), 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/r4w887917j558277/fulltext.pdf>
<http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/Szalkai-2011o-CountR4.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://math.uni-pannon.hu/~szalkai/Szalkai-2012a-Ax0-MMN.pdf>
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://math.uni-pannon.hu/~szalkai/Szalkai-2013a-MMNsummary.pdf>, <http://mat76.mat.uni-miskolc.hu/~mnotes>
- [2013a] **Tuza,Zs., Szalkai,I.:** *Minimum Number of Affine Simplexes of Given Dimension*, <http://arxiv.org/pdf/1309.6491v1.pdf> ,
Discrete Applied Mathematics - benyújtva.
- [2013b] **Szalkai,I., Sellers,P., Pethő,Á.:** *On the Mathematical Foundation of Reaction Mechanisms*, előkészületben.

Hivatkozások a fenti dolgozatokra:

[1991] (1) Tasnádi Tibor: Plazmareakciók folyamatai, szakmérnöki dolgozat, Veszprémi Egyetem, 1992.

(2) Bertók B.: Kombinatorikus algoritmus elemi reakciók lehetséges rendszereinek generálására, Diplomadolgozat, Veszprémi Egyetem, 1999.

(3) Fan, L.T., Bertók, B., Friedler, F.: Combinatorial Framework for the Systematic Generation of Reaction Pathways, presented at the AIChE Annual Meeting, Dallas, USA, Oct.31-Nov.5,1999.

(4) L.T.Fan, B.Bertók, F.Friedler, S.Shafie: Mechanisms of Ammonia-Synthesis Reaction Revisited with the Aid of a Novel Graph-Theoretic Method for Determining Candidate Mechanisms in Deriving the Rate Law of a Catalytic Reaction, Hung. J. Ind. Chem. 29 (2001), 71-80.

(5) L.T.Fan, B.Bertók, F.Friedler: A Graph-Theoretic Method to Identify Candidate Mechanisms for Deriving the Rate Law of a Catalytic Reaction, Computers and Chemistry, 26 (2002), 265-292.

(6) Bertók B.: Folyamathálózatok struktúráinak algoritmikus szintézise, PhD értekezés, Veszprémi Egyetem, 2004.

http://konyvtar.uni-pannon.hu/doktori/2003/Bertok_Botond_dissertation.pdf

(7) L.T.Fan, B.Bertók: Review of methods for catalytic reaction-pathway identification at steady state, Current Opinion in Chemical Engineering, 2013, COCHE-144, www.sciencedirect.com

[1995] (1/8) Bertók B.: Kombinatorikus algoritmus elemi reakciók lehetséges rendszereinek generálására, Diplomadolgozat, Veszprémi Egyetem, 1999.

[1998] (1/9) Bertók B.: Kombinatorikus algoritmus elemi reakciók lehetséges rendszereinek generálására, Diplomadolgozat, Veszprémi Egyetem, 1999.

[1999] (1/10) Fekete,P.: Többdimenziós szimplexek geometriai tulajdonságairól, TDK dolgozat, Veszprémi Egyetem, 1996.

(2/11) Fekete P.: Többdimenziós felületek kétdimenziós metszeteinek számítógépes megjelenítése, Szakdolgozat, Veszprémi Egyetem, 1998.

(3/12) Fekete P.: Interpolációs módszerek alkalmazásai az informatikában, Diplomadolgozat, Veszprémi Egyetem, 1999.

(4/13) Viczián G.,Láng-Lázi M., Heszberger J, Dióspatonyi I, Kollár-Hunek K.: Graphic Software for 3D consistency testing in thermodynamics, HJIC 28 (2000), 311-315.

(5/14) Marcand P,Lefebvre,L,Courvoisier L,Perez G.Counieux JJ,Coquerel G: Discontinuous isoperibolic thermal analysis (DITA) applied to organic components, J.Physique IV 11 (2001), 115-122, ISSN1155-4339.

[2000a] (1/15) Kovács K., Vízvári B., Riedel M., Tóth J.: Decomposition of the Permanganate / Oxalic Acid Overall Reaction to Elementary Steps Based on Integer Programming Theory, Physical Chemistry - Chemical Physics 6 (2004),

1236-1242 , DOI: 10.1039/b315211a, pubs.rsc.org., IDS Number: 809VI.

(2/16) Kovács K., Vízvári B., Riedel M., Tóth J.: Decomposition of the permanganate/oxalic acid overall reaction to elementary steps based on integer programming theory, RUTCOR Research Report for Operations Research, Rutgers University

(3/17) Papp D., Vízvári, B.: Effective solution of linear Diophantine equation systems with an application in chemistry, RUTCOR Research Report for Operations Research, Rutgers University 640., 28-2004. , <http://rutcor.rutgers.edu/2004.html>

(4/18) Papp D., Vízvári, B.: Effective solution of linear Diophantine equation systems with an application in chemistry, *J. of Math. Chemistry*, 39 (2006), pp.15-31. Springer, ISSN: 0259-9791;

(5/19) Haus, U., Hemmecke, R. Pokutta, S.: Reconstructing biochemical cluster networks, Arxiv preprint arxiv: 0906.1342, 2009 - arxiv.org,

http://arxiv.org/PS_cache/arxiv/pdf/0906/0906.1342v2.pdf , *J.Math.Chem.* 49 (2011), 2441–2456, DOI 10.1007/s10910-011-9892-6

(6/20) Bárány, M., Bertók, B., Imreh, Cs., Fan, L.T., Friedler, F.: On the equivalence of direct mechanisms and structurally minimal pathways, *J Math Chem* (2012) 50:1347–1361, DOI 10.1007/s10910-012-9974-0

[http://www.cs.vein.hu/cikkek/2012_JMC\(50-1347\).pdf](http://www.cs.vein.hu/cikkek/2012_JMC(50-1347).pdf)

(7/21) Anders, J., Giovanetti, V.: Thermodynamics of discrete quantum processes, *New Journal of Physics*, Volume 15, March 2013, Article number 033022

(8/22) L.T.Fan, B.Bertók: Review of methods for catalytic reaction-pathway identification at steady state, *Current Opinion in Chemical Engineering*, 2013, COCHE-144; NO. OF PAGES 8, www.sciencedirect.com

[2001] (1/23) Iványi Antal (alkotó szerkesztő): INFORMATIKAI ALGORITMUSOK I., (ELTE Informatikai kar), verzió 1H,

<http://compalg.inf.elte.hu/~tony/Elektronikus/Informatikai/01H.xml#id4486400>

(2/24) Friedl Katalin, Recski András, Simonyi Gábor: Gráfelméleti feladatok, Typotex Kft. Kiadó, 2006, 302 oldal, ISBN-13 978-963-9664-01-2,

http://www.interkonyv.hu/konyvek/Gr%C3%A1felm%C3%A9leti_feladatok?download=3068

(3/25) Bálint Attila: A logika tanításának számítógépes támogatása, PE Szakdolgozat, 2012.

[2004] (1/26) J. Rauh, T.Kahle, Nihat Ay: Support Sets in Exponential Families and Oriented Matroid Theory, Preprint 28 (2009), Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften, Leipzig,

http://www.mis.mpg.de/preprints/2009/preprint2009_28.pdf ,

(2/27) Thomas Kahle: On Boundaries of Statistical Models, PhD Thesis, Leipzig, 2010, <http://www.qucosa.de/fileadmin/data/qucosa/documents/3795/diss.pdf>

(3/28) J. Rauh, T.Kahle, Nihat Ay: Support sets in exponential families and oriented matroid theory , *International J. of Approximate Reasoning* 52 (2011) 613–626, <http://arxiv.org/pdf/0906.5462.pdf> , Elsevier

<http://www.santafe.edu/media/workingpapers/09-07-024.pdf>.

(4/29) A.Alahmadi, R.E.L.Aldred, R.Dela Cruz, P.Solé, C.Thomassen: The maximum number of minimal codewords in an $[n,k]$ -code, Arxiv preprint arXiv:1203.0728, 2012, <http://arxiv.org/pdf/1203.0728.pdf> Discrete Mathematics 313 (2013) 1569–1574, www.elsevier.com/locate/disc

(5/30) A.Alahmadi, R.E.L.Aldred, R.Dela Cruz, P.Solé, C.Thomassen: The maximum number of minimal codewords in long codes, Discrete Applied Mathematics 161 (2013) 424–429, <http://www.elsevier.com/locate/dam>

A Szerző teljes publikáció listája a

[http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/wwwPublikList\(09\)mind2012.doc](http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/wwwPublikList(09)mind2012.doc)
címen megtalálható.

Jelen téziszfüzet letölthető a

<http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/Tezisek-140328.pdf>
címről.