

Reakciómechanizmusok algoritmikus és matematikai vizsgálata

PhD - dolgozat

Szalkai István

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

Témavezetők:

Dr. Hartung Ferenc, DSc, Pannon Egyetem,

Dr. Tuza Zsolt, DSc, Pannon Egyetem,

2014. április 10.

Tartalomjegyzék

Tartalomjegyzék	i
0. Bevezetés	1
1. Alkalmazások és matematikai alapok	7
1.1. Reakciók	8
1.2. Mechanizmusok	10
1.3. Fizikai dimenziók	14
1.4. Lineáris egyenletrendszerek	15
1.5. Matematikai definíciók és elemi összefüggések	16
1.6. A felvetett problémák	21
2. Egy algoritmus és változatai	25
2.1. Az algoritmus	25
2.1.1. Az algoritmus sebessége	29
2.1.2. Egy általánosítás	30
2.2. Az algoritmus kiterjesztései	30
2.2.0. A dimenzió csökkentése	31
2.2.1. Közvetlen reakciók keresése	33
2.2.2. Közvetlen mechanizmusok keresése	37
2.2.3. Sem terminális atomcsoportok, sem reakciók nem is- mertek	38
2.3. Az ekvivalencia bizonyítása	38
2.4. Más algoritmusok	41
2.5. Procedure_Modify	44
3. Lineáris egyenletrendszerek vizsgálata	46
3.1. Alapvető összefüggések	47
3.2. Homogén egyenletrendszerek	50
3.3. Inhomogén egyenletrendszerek	54

4. A szimplexek száma \mathbb{R}^n -ben	57
4.1. A maximum	59
4.2. A minimum párhuzamos vektorokkal	61
4.3. A minimum párhuzamos vektorok nélkül	68
4.3.1. A dimenzió csökkentése	69
4.3.2. \mathbb{R}^3 szimplexei	70
4.3.3. \mathbb{R}^4 szimplexei	71
4.4. További problémák és sejtések	72
5. Matroidok és hipergráfok	75
5.1. Bevezetés	75
5.2. Maximum matroidokban	76
5.2.1. Körök maximális száma	76
5.2.2. Bázisok maximális száma	77
5.3. Minimum matroidokban	78
5.3.1. Hurkok	78
5.3.2. Párhuzamos elemek, hurkok nélkül	79
5.4. Hipergráfok	85
5.5. További kérdések matroidokban és hipergráfokban	89
6. További kutatási témák	91
6.1. A dimenzió bővítése	91
6.2. Pontosabb becslések	91
6.3. Más algoritmusok	92
6.4. Hierarchiák	93
6.5. A kiértékelési operátor	94
7. Számítógépes eredmények	97
7.1. Amundson	98
7.2. Ammónia 1	99
7.3. Metán	100
7.4. Ammónia 2	101
7.5. Etilénoxid	102
7.6. Metán-Metanol	105
7.7. Glükóz - Pyruvate	108
8. Tézisek, Summary of Results	111
Irodalomjegyzék	115

Kivonat

A kémiai reakciók nagyon sok köztes *atomcsoport* ("molekulakezdemény") között végbemenő **elemi reakciók** sorozatai. A lehetséges reakciók közül a *minimális* reakciókat keressük, vagyis olyanokat, amelyekben a résztvevő atomcsoportok közül egyik sem hagyható el (egyik sem felesleges). Az egyes atomcsoportokat többdimenziós vektoroknak megfelelően a vektorok *minimálisan összefüggő részhalmazait*, az ún. **lineáris algebrai szimplexeket** keressük.

A dolgozat első részében egy optimális *algoritmust* mutatunk be adott vektorhalmaz szimplexeinek megkeresésére, vagyis az adott atomcsoportok közötti összes minimális reakció felsorolására. Az algoritmust alkalmazzuk több, az irodalomban szereplő problémára, és eredményeinket összehasonlítjuk mások eredményeivel.

Megmutatjuk, hogy a *lineáris egyenletrendszerek* minimális megoldásaiból az összes megoldás előállítható, vagyis a minimális reakciókból minden reakció megkapható.

Éles *alsó és felső korlátokat* adunk adott méretű vektorhalmazban található *szimplexek* (reakciók) *számára*, külön megvizsgálva azt az esetet, amikor a vektorok között nincsenek párhuzamosak (izomer molekulák, többszörös dózisok). Részletesen leírjuk a szélsőséges vektorhalmazok (legtöbb ill. legkevesebb reakciót megvalósító atomcsoportok), általában egyértelmű szerkezetét is.

A felhasznált kombinatorikai módszerek segítségével hasonló korlátokat adunk *matroidok* és *hipergráfok* köreinek és bázisainak számára.

A *kiértékelési operátor* és közismert lineáris algebrai összefüggések segítségével a reakciók mérhető mennyiségeivel kapcsolatban fogalmazunk meg általános észrevételeket.

A dolgozatban több sejtést is megfogalmazunk.

Abstract

An Algorithmic and Mathematical Investigation of Reactions

István Szalkai, Veszprém, Hungary

Many species ("pre-molecules", represented as high dimensional vectors) and reactions (linear combinations) play role in complex chemical reactions. We call minimal linearly dependent set of vectors a **simplex**.

First we introduce an optimal *algorithm* for listing all simplexes (minimal reactions) in a given set of vectors (species). Next we show that *minimal solutions* of systems of linear equalities generate all solutions.

We give general sharp *upper* and *lower bounds* for the numbers of simplexes contained in sets of vectors, the unique structures of the extremal sets are described, too. We investigate separately the case when *no parallel vectors* are allowed. We give bounds for the number of bases and circuits in *matroids and hypergraphs* and describe the structure of the extremal configurations, too. Several conjectures are also stated.

Auszug

Algorithmische und Mathematische Untersuchungen von Reaktionen

István Szalkai, Veszprém, Ungarn

Viele Atomgruppe (z.B. pre-Moleküle oder höher-dimensionale Vektoren) und Basis-Reaktionen (Linearkombinationen) spielen eine Rolle in komplexen chemischen Reaktionen. Wir nennen eine minimal linear abhängige Menge von Vektoren einen *Simplex*.

Zuerst stellen wir einen optimalen *Algorithmus* zum Auffinden aller Simplexe (minimale Reaktionen) in jeder gegebenen Menge von Vektoren (Spezies) vor. Danach zeigen wir, dass *minimale Lösungen* von linearen Gleichungssystemen alle Lösungen erzeugen.

Wir bestimmen *scharfe untere* und *obere Schranken* für die Anzahl von Simplexen, die in einer Vektormenge enthalten sind. Ebenfalls beschreiben wir die eindeutige Struktur dieser extremalen Mengen. Separat untersuchen wir den Fall, wenn keine *parallelen Vektoren* (isomäre Moleküle) erlaubt sind. Wir berechnen scharfe untere und obere Schranken für die Anzahl von Basen und Kreisen in *Matroiden* und *Hypergraphen* mit extremaler Struktur.

Zuletzt weisen wir auf ungelöste Probleme hin und listen einige Vermutungen auf.

0. fejezet

Bevezetés

A *kémiai reakciók*, mint például a legegyszerűbb



reakció, a valóságban nem egyetlen lépésben történnek, hanem nagyon sok köztes **atomcsoport** (instabil molekula, "molekulakezdemény", pl. H, H₂, O, O₂, O₃, H₂O, H₂O₂, HO, HO₂) között végbemenő több (40-50) **reakciólépés** (**elemi reakció**) bonyolult *sorozataként*, így (1)-et **összetett** (vagy **kémiai**) **reakciónak**, vagy csak egyszerűen **reakciónak** hívjuk¹⁾. Módszerünk az *izotópokat* (elektrontöbblet vagy -hiány) is figyelembe veszi. Az elemi reakciók jelenléte és sorozatai ugyan magától értetődő természetes jelenségek, de mind az elméleti kutatás, mind a gyakorlati technológiák elé nagy nehézséget állítanak, hiszen összetettebb reakciók (többlépcsős eljárások) esetén a folyamat bonyolultsága és a résztvevő atomcsoportok száma exponenciálisan növekszik!

A főbb megoldandó feladatok tehát 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 elemi reakciók sorozatainak, vagyis 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.

¹⁾ Ráadásul a vegyészek között sincs egyetértés (1) részleteit illetően, [TNZs13]-ben többféle elméletet is részletesen összehasonlítanak.

Természetesen a felesleges atomcsoportokat nem tartalmazó, vagyis a *minimális* reakciókat keressük. Hasonlóan csak olyan mechanizmusokat vizsgálunk, amelyek felesleges reakciókat nem sorolnak fel.

Mint említettük, a jelen levő atomcsoportok és (rész-) reakciók *nagy* (exponenciális) *száma* miatt a fenti feladatok megoldása még a modern számítógépek és az algoritmuselmélet korszerű eredményei ellenére sem várható a közeljövőben.

1. Alapfogalmak és alkalmazások

Vizsgálati módszerünk elsősorban a lineáris algebra fogalmaira és módszereire épül. Több lineáris algebrai bevezető mű is utal egyszerűbb kémiai alkalmazásokra, mint például [BM10].

Mindegyik atomcsoportnak és molekulának egy-egy vektort feleltetünk meg (a résztvevő atomok és atomi részecskék és sorrendjük rögzítése mellett, a *dimenzió* az atomok és részecskék együttes száma). Ekkor minden (elemi és összetett) reakció ezen vektorok lineáris kombinációja, melynek végeredménye $\underline{0}$, az anyagmegmaradás törvénye szerint²⁾. Így feladatunk nem más, mint adott homogén lineáris egyenletrendszerek *minimális* megoldásait (amiben a nemnulla ismeretlenek halmaza nem csökkenthető) megkeresni.

Röviden: **lineáris algebrai szimplexnek** nevezzük \mathbb{R}^n *minimális összefüggő* $T \subset \mathbb{R}^n$ részhalmazait, vagyis T lineárisan összefüggő, de bármely $S \subsetneq T$ valódi részhalmaza független. Dolgozatunkban elsősorban lineáris algebrai szimplexekkel foglalkozunk, ezért a "lineáris" jelzőt legtöbbször *nem írjuk le*.

Az általunk bevezetett fogalmak és a problémák pontosabb matematikai alakját az 1.5. "Matematikai definíciók és elemi összefüggések" és az 1.6. "A felvetett problémák" alfejezetekben mutatjuk be, elsősorban az 1.7. Definícióban és az 1.24. Problémában.

Reakciómechanizmusok átfogóbb vizsgálatát (pl. dinamika, egyéb fizikai jellemzők) *Turányi Tamás* [T10] könyvében ismerhetjük meg, mi csak a fenti, lineáris algebrai modellel foglalkozunk.

Az 1.3., 1.4. alfejezetekben és az 5. "Matroidok és hipergráfok" fejezetben a szimplex fogalmát általánosítjuk, hiszen a használt lineáris algebrai modell, a lineáris algebra nyelvén felvetett és megoldott problémák más tudományterületeken is relevánsak (fizika, matroidok, halmazrendszerek, stb.).

²⁾ A nem megfordítható reakciók irányának problémájával az 1.1. és 1.2. Megjegyzésekben foglalkozunk.

2. Az algoritmus

A 2. "Egy algoritmus és változatai" fejezetben gyakorlati szempontból közelítjük meg a szimplexek problémáját. Az általunk 1991-ben kidolgozott és 2000-ben továbbfejlesztett algoritmust dolgozatunk 2.1. "Az algoritmus" alfejezetében ismertetjük.

Algoritmusunk alapváltozata tetszőleges, véges $H \subset \mathbb{R}^n$ részhalmaz esetén megkeresi a H -ban levő összes $T \subseteq H$ szimplexet. Kiemeljük, hogy algoritmusunk *teljesen automatikus* (nem igényel heurisztikát, emberi beavatkozást), az adathalmazra semmilyen megkötésünk nincs sem méretében sem szerkezetében, és a feladathoz mérten a lehető leggyorsabb.

Mint a 2.1.2. és 2.2. alfejezetekben megmutatjuk, algoritmusunk (vagy az adathalmaz) apróbb módosítások után sok más kémiai és egyéb feladat megoldására is azonnal használható.

Természetesen a közölt algoritmus helyességét és sebességét is megvizsgáljuk a 2.2. és 2.3. Tételekben. Röviden: megmutatjuk *egyrészt*, hogy az algoritmus egyetlen szimplexet sem kerül el, *sőt* minden H esetén a lehető leggyorsabb (csak a legszükségesebb részhalmazokat vizsgálja meg), *másrészt* az algoritmus lépésszáma legfeljebb

$$\mathcal{O}(|H|^{n+1}), \quad (2)$$

azaz polinomiális futásidejű, tehát gyors. (\mathcal{O} magyarázatát az 1.21. Definícióban találhatjuk.)

A 7. fejezetben konkrét (irodalomból vett) példákon keresztül mutatjuk be az algoritmus és változatainak működését és sebességét.

A probléma matematikai és algoritmikus megoldására rengeteg közlemény jelent meg az utóbbi évtizedekben, most csak néhányat említünk meg (betűrendben) *Aris-Mah* [A65a], [A65b], [AM63], *Bárány-Bertók-Fan-Imreh-Friedler* [B99], [FBF99], [FBF02], [B03], [BBIFF12], *Blickle-Novák-Szépölgyi* [BN76], [BSz75], [BSz76], *Chevalier-Melenk-Warnatz* [CMW90], *Deák-Kovács-Nagy-Papp-Riedel-Rospars-Tóth-Vizvári-Zsély* [DTV92], [KVRT04], [PV06], [TNZs13], *Fishtik-Alexander-Datta* [FAD99], [FD99], *Gadewar-Doherty-Malone* [GDM01], *Happel-Otarod-Sellers* [HS83], [HOS90], [S84], [S10], *Haus-Hemmecke-Pokutta* [HHP09], *Lielmezs* [L65], *Maria* [M05], Oláh [O87], *Pethő Árpád* (†2012) [P64], [P67c] [P68], [P90], [P93], [P95], *Smith-Missen* [SM00], *Szederkényi-Hangos-Péni* [Sz10], [SzHP11], *Szirtes* [Sz06], megemlítjük még a [R14] honlapot is. A főbb publikációk elemzését algoritmusunk részletes bemutatása után, a 2.4. "Más algoritmusok" alfejezetben írjuk le.

Javasoljuk még *Srinivasan* [S13] művét, ahol a matematikai programcsomagok és a lineáris algebra kapcsolatának mélyebb vizsgálatát találhatjuk.

3. Lineáris egyenletrendszerek

A 3. Fejezetben igazoljuk a szimplexek és keresésük létjogosultságát, vizsgálataink *Pethő Árpád* [P90]-ben megjelent eredményeinek továbbfejlesztései.

Mint említettük: a szimplexek (minimális reakciók) pontosan a homogén lineáris egyenletrendszerek olyan megoldásvektorai, amelyekben a nemnulla komponensek halmaza nem csökkenthető (precízen ld. a 3.3. Definícióban). *Elegendő csak a minimális megoldásokkal (reakciókkal) foglalkoznunk?*

Vagyis: előállítható-e minden megoldásvektor a minimális megoldásokból? Az igentő választ a 3.13. Tételben találjuk.

4. A szimplexek száma

Hány szimplex lehet egy adott (véges) $H \subset \mathbb{R}^n$ vektorhalmazban?

A 4. Fejezetben erre a kérdésre keressük a választ, és a szélsőséges (extremális) H halmazok szerkezetét is meghatározzuk. (A válasz nyilván H elemszámától és a dimenziótól (n) függ, és persze érdemes feltennünk, hogy H teljes dimenziós, azaz kifeszíti \mathbb{R}^n -et.)

A 4.5. és 4.7. Tételekben és a 4.14. Példában sikerült meghatároznunk a legtöbb és legkevesebb szimplexet tartalmazó vektorhalmazok szerkezetét, a számszerű következtetést a 4.15. Következményben találjuk. Kiemeljük, hogy a maximum

$$\binom{|H|}{n+1} = \mathcal{O}(|H|^{n+1}) \quad (3)$$

bizonyos H halmazok esetén megvalósul, így algoritmusunk (2) -ben igazolt futásideje nem csökkenthető. (A 7. Fejezetben mindegyik példában feltüntetjük a 4.5. és 4.7. Tételekben nyert minimális és maximális értékeket is.)

A 4.7. Tételben szereplő, *minimális* számú szimplexet tartalmazó H halmazokban rengeteg párhuzamos vektor található, ami kémiaiilag ugyan nem lehetetlen (izomer molekulák, többszörös dózisok), de a sok alkalmazásban elkerülendő. Ezért érdemes vizsgálatainkat külön olyan H halmazokra szorítkozva is lefolytatni, amelyekben *nincsenek párhuzamos vektorok*. (Ekkor nyilván a szimplexek számának alsó becslése növekszik, ami az algoritmus lépésgényét igazolja.) Párhuzamos vektorok tiltása esetén a probléma sokkal nehezebbé válik: 15 évi kutatás után mindössze csak az $n = 3$ és $n = 4$ eseteket sikerült igazolni! Az eredményeket a 4.20. és 4.23. Tételekben ismertetjük, a bizonyítások [1998] és [2011]-ben található meg. Az általános, számítógép segítségével kapott sejtést a 4.4. alfejezet 4.27. Sejtése tartalmazza, a sejtés $n \geq 5$ esetben máig megoldatlan. Ismét hangsúlyozzuk, hogy mind fenti eredményeink, mind az általános Sejtés leírja a szélsőséges halmazok *egyértelmű* szerkezetét is!

Még érdekesebb (és nehezebb) kérdést fogalmazunk meg az 5.35. Problémában: "Mennyi a szimplexek számának legkisebb értéke, ha csak legalább k -elemű szimplexek lehetnek H -ban?"

5. Matroidok

A felvetett problémák és megoldásaik (algoritmus, bizonyítások) szemmel láthatóan a lineáris terek műveleteit nem, csak a függetlenség alapvető tulajdonságait használja. Ezért a dolgozat főbb problémáit és eredményeit a matroidok és hipergráfok (halmazrendszerek) nyelvén is megfogalmazzuk és igazoljuk az 5. Fejezetben. Röviden: adott rangú matroidban megadjuk a *körök* és *bázisok* számának lehetséges legkisebb és legnagyobb értékeit, és természetesen leírjuk a szélsőséges matroidok szerkezetét is. \mathbb{R}^n -hez hasonlóan itt is meg kell különböztetnünk a hurkokat ill. párhuzamos elemeket nem tartalmazó struktúrákat: a 4.28. Probléma matroidos változata az 5.36. Sejtés. (Matroidok alaptulajdonságait például [2001]-ban is megtalálhatjuk.)

Érdekességképpen megemlítjük, hogy itt ismertetett ([2006]) eredményeink a kódelméletben is felhasználhatók (pl. [AADST13a], [AADST13b], [AADOST14]).

6. A kiértékelési operátor

A molekulák és atomcsoportok különböző kémiai és fizikai tulajdonságai (tömeg, energia, stb.) általában additívak és homogének, vagyis lineáris funkcionálok, amiket most *kiértékelési operátoroknak* nevezünk. A 6.5. alfejezetben a kiértékelési operátorok néhány tulajdonságát írjuk le, a lineáris algebra jól ismert összefüggései alapján.

Kutatásunk független *Ung-Doherty-Wasykiewicz* [UD95a], [UD95b], [W00], [WU00] megközelítési módjától.

7. További kérdések

A 6. Fejezetben a megválaszolatlanul maradt kérdéseken túl néhány további, folyamatban levő kutatási témát vázolunk, mint például az atomok-reakciók-mechanizmusok- *hierarchia* általános definícióját és vizsgálatát, vagy az [1999] közleményben megjelent vizsgálatok folytatását.

8. Egyéb algoritmusok

Számítógép segítségét dolgozatunk más részeiben is igénybe vettük: a 4.23. Tétel $4 \leq |H| \leq 23$ eseteinek vizsgálatához és a 4.27. Sejtés felállításához is. Ezeket a programokat speciálisan a jelzett problémák vizsgálatához írtuk, nem részei dolgozatunknak, még nem publikáltuk őket.

9. Közleményeink

A dolgozatunkban ismertetett eredményeket és problémákat az [1991], [1995], [1996], [1997], [1997p], [1998], [1999], [2000a], [2000b], [2001], [2006], [2011], [2011T], [2012a], [2012b], [2013a] és [2013b] közleményeinkben jelentettük meg illetve tervezzük megjelentetni.

Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozom szerzőtársaimnak és munkatársaimnak:

Pethő Árpád (†2012) professzornak (Universität Hannover, Institut für Technische Chemie), aki felkeltette érdeklődésemet a téma iránt, hannoveri ösztöndíjam alatt 1995-ben és utána folyamatosan szakmai és baráti kapcsolatban álltunk haláláig,

Claude LaFlamme professzornak és **Jianzhong Meng** diákjának, (The University Calgary, Department of Mathematics, Canada) 1994-ben Calgaryban tett látogatásom alatti konzultációkért, és azóta folytatott szakmai levelezéséért,

Norbert Herrman professzornak (Universität Hannover, Institut für Angewandte Mathematik) folyamatos szakmai és baráti támogatásáért,

Friedler Ferenc professzornak (Pannon Egyetem, Rendszer- és Számítástudományi Tanszék) szakmai és baráti támogatásáért,

Hujter Mihály, Kollárné Hunek Klára és **Tóth János** (Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem) munkatársaimnak és barátainak,

Abonyi János, Bertók Botond, Dominich Sándor (†2010) és **Kristóf Tamás** (Pannon Egyetem, Veszprém) munkatársaimnak,

Győri István professzornak, valamint a Pannon Egyetem **Matematika Tanszék összes kollégájának,**

legfőképpen pedig **Tuza Zsolt** professzornak (Pannon Egyetem, Rendszer- és Számítástudományi Tanszék) és **Hartung Ferenc** professzornak (Pannon Egyetem Matematika Tanszék) több éven keresztül nyújtott folyamatos szakmai konzultációjáért és baráti támogatásáért,

és nem utolsósorban szeretett családomnak: **Teréz** feleségemnek és **Balázs, Zsófia, Éva** gyermekeimnek, végtelen türelmükért, megértésükért!

Tudományos eredményeimet és jelen dolgozatomat **Nagyszüleimtől** kapott sok szeretetnek köszönhetem.

1. fejezet

Alkalmazások és matematikai alapok

A téma legelső (általunk ismert) közleményei [A65a], [A65b] és [AM63], a jelen dolgozatunkban használt matematikai modell először [P90] és [1991] -ben jelent meg, mely hasonlít többek között Sellers és társai [S84] és [HOS90] megközelítési módszeréhez is.

Lineáris algebrai modellünket elsősorban reakciók és mechanizmusok leírására használjuk, ahol csak az anyagmegmaradás törvényét vesszük figyelembe, egyéb kémiai lehetőségeket és megkötéseket nem. Más felhasználási lehetőségeket (pl. fizikában) is megemlítünk, elsősorban Pethő Árpád nyomán. Mindegyik alkalmazás \mathbb{R}^n -beli vektorok lineáris kombinációit vizsgálja, és a *minimális* megoldások (minimális reakciók, mechanizmusok, dimenzió nélküli csoportok, stb.) lineárisan összefüggő, de (a halmazelméleti tartalmazásra nézve) *minimális* részhalmazait keresi, amiket *lineáris algebrai szimplexek*-nek hívunk.

Tehát a dolgozatunk 1.5., 2. és 4. (al)fejezeteiben ismertetett fogalmak, algoritmus és számszerű becslések használhatóak az 1.1., 1.2., 1.3., 5 és 6. (al)fejezetekben is.

Bevezetéképpen néhány példával szemléltetjük az általános lineáris algebrai fogalmakat.

1.1. Reakciók

Legyenek adottak az A_1, \dots, A_m molekulák (vagy atomcsoportok) amelyek az E_1, \dots, E_n atomokból és atomi részecskékből épülnek fel:

$$A_j = \sum_{i=1}^n a_{i,j} \cdot E_i \quad (j = 1, \dots, m) \quad (1.1)$$

ahol $a_{i,j} \in \mathbb{N}$ ($j = 1, \dots, m, i = 1, \dots, n$). Az A_j molekulát nyilván az

$$\mathbf{A}_j := [a_{1,j}, \dots, a_{n,j}]^T \in \mathbb{R}^n \quad (1.2)$$

vektorral azonosítjuk, ha az $\{E_1, \dots, E_n\}$ halmazt – mint bázist – előzőleg már rögzítettük¹⁾. Amennyiben különböző izotópokat is szeretnénk megkülönböztetni, akkor feleltessük meg egyik bázisvektort az elektronnak, és a szükséges elektrontöbblet vagy -hiányt ebben a koordinátában jelöljük.

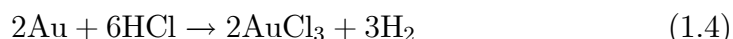
Sajnos ezzel a módszerrel az azonos összegképletű, de eltérő szerkezetű (izomer) molekulákat nem tudjuk megkülönböztetni.

A vegyületek egy tetszőleges $\{A_j : j \in S\}$ részhalmazában ($S \subseteq \{1, \dots, m\}$) akkor és csak akkor jöhet létre kémiai reakció (az anyagmegmaradás elve szerint), ha a

$$\sum_{j \in S} x_j \cdot \mathbf{A}_j = \mathbf{0} \quad (1.3)$$

homogén lineáris egyenletrendszernek *van nemtriviális* megoldása $x_j \in \mathbb{R}$ ($j \in S$). Megfordítva, egy tetszőleges $\mathbf{x} = [x_j : j \in S]$ megoldás egyértelműen megad egy kémiai reakciót az $\{A_j : j \in S\}$ vegyületek között²⁾.

Természetesen a fenti elméleti úton felírt reakciók nem mindegyike valósul meg hétköznapi körülmények között, mint például a



reakció sem.

1.1. Megjegyzés. Szokás szerint az (1.3) egyenletrendszer \mathbf{x} megoldásvektoraiban a negatív x_j együtthatójú A_j molekulacsoportok a kiindulási anyagok

¹⁾ az $\mathbf{A}_j \in \mathbb{R}^n$ vektorok és az A_j molekulák közötti fenti megfeleltetés nem bijektív, hiszen izomer molekulák, izotópok, többszörös dózisok, stb. megkülönböztetése nehéz, a 6.4. alfejezet Δ_x függvényeit ezért kell bevezetnünk. Dolgozatunkban azonban erre a megkülönböztetésre nem lesz szükségünk.

²⁾ Mindegyik x_j megoldás racionális szám, hiszen az \mathbf{A}_j vektorok együtthatói egészek, de ez a tény lényegtelen vizsgálatainkban.

(reaktánsok) míg a pozitív együtthatójú molekulák a (vég)termékek. Azonban $-\mathbf{x}$ is megoldása (1.3)-nek, vagyis a reakció iránya végül is csak kémiai módszerekkel lehetséges (a számítógép outputját utólag szelektálva).

Ez a kérdés mechanizmusok esetében lesz lényeges, erre a problémára az 1.2. Megjegyzésben adunk választ.

Tudjuk, hogy az (1.3) lineáris egyenletrendszernek pontosan akkor van nemtriviális megoldása, ha az $\mathcal{S} = \{\mathbf{A}_j : j \in S\}$ vektorok *lineárisan összefüggenek*.

Ha csak azokat a **minimális** (elemi) **reakciókat** akarjuk tekinteni, melyekben az összes $\{A_j : j \in S\}$ vegyület ténylegesen részt vesz, vagyis egyiket sem hagyhatjuk el (vagyis nem adtunk meg közöttük feleslegeseket, más szóval a reakció tovább már nem egyszerűsíthető), akkor célszerű \mathcal{S} *minden* (valódi) részhalmazáról kikötnünk, hogy lineárisan *független* legyen. Az ilyen $\mathcal{S} \subseteq \mathbb{R}^n$ vektorhalmazokat hívjuk (lineáris algebrai) **szimplexeknek** (lásd 1.7. Definíció). Mivel az \mathcal{S} vektorhalmaz és elemeinek S indexhalmaza között egy-egyértelmű kapcsolat van, ezért a továbbiakban csak S -et írunk \mathcal{S} helyett.

A speciális alakú (1.3) lineáris egyenletrendszerek (S szimplex) összefüggéseit a 3. "Lineáris egyenletrendszerek vizsgálata" Fejezetben részletesen ismertetjük, az alábbiakban csak a legszükségesebb tényeket írjuk le.

Mivel több különböző $S \subset \{\mathbf{A}_j : j = 1, \dots, m\}$ részhalmaz esetén vizsgáljuk az (1.3) egyenletrendszerek megoldásait, az egymás közötti összehasonlítás (és a mechanizmusok további vizsgálata végett) célszerű ezen *mind-egyik* $\mathbf{x}_S = [x_j : j \in S]$ megoldás *helyett* azon $\mathbf{x}_S^+ \in \mathbb{R}^m$ rögzített dimenziójú vektorokat tekintenünk, amelyeknek S -beli komponensei megegyeznek \mathbf{x}_S megfelelő komponenseivel, míg az S -től különbözőek mind 0 -ák: $\mathbf{x}_S^+|_S = \mathbf{x}_S$ és $(\mathbf{x}_S^+)_i = 0$ ha $i \notin S$. Így \mathbf{x}_S^+ mindig megoldása lesz az

$$\sum_{j=1}^m x_j \cdot \mathbf{A}_j = \mathbf{0} \quad (1.5)$$

egyenletrendszernek, sőt \mathbf{x}_S^+ -ből egyértelműen vissza lehet keresni \mathbf{x}_S -et, hiszen minden S szimplex esetén (1.3) egyetlen megoldásának sincs 0 komponense, sőt \mathbf{x} (skalárszorostól eltekintve) egyértelmű. (Lásd a 3.17. Állítást és a 3.19. Következményt a 3. "Lineáris egyenletrendszerek vizsgálata" Fejezetben.)

Rögtön felmerül a kérdés: az összes adott $\{A_j : j \in S\}$ vegyületek közötti összes reakciót, vagyis az (1.5) egyenletrendszer összes lehetséges megoldását elő tudjuk-e állítani az $S \subseteq \{\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_m\}$ szimplexekhez tartozó (1.3) egyenletrendszerek által megadott megoldásokból, azaz *minimális reakciókból*. Erre a

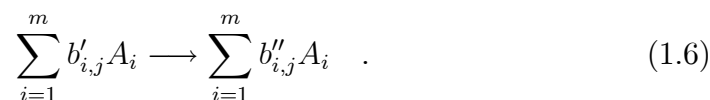
kérdésre a megnyugtató választ a 3. "Lineáris egyenletrendszerek vizsgálata" fejezetben a 3.13. Tételben adjuk meg ([2012a] közleményünk alapján).

Megjegyezzük, hogy dolgozatunkban elsősorban az S vektorhalmazokkal (előállításuk, kapcsolatuk és számuk) és a hozzájuk tartozó \mathbf{x}_S^+ vektorok szerkezetével foglalkozunk, vagyis az (1.5) ill. (1.3) egyenletrendszerek megoldási módszereivel már nem.

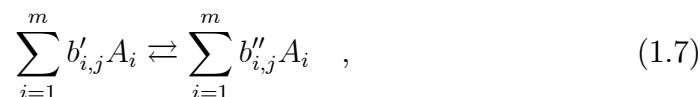
Elsősorban a 4. "A szimplexek száma \mathbb{R}^n -ben" alfejezetben párhuzamos vektorokkal is kell foglalkoznunk. Molekulák esetében a párhuzamosság legtöbbször izomer molekulákat vagy nagyobb dózist jelent, de előfordulnak egyéb kémiai különbségek is (pl. O_2 és O_3).

1.2. Mechanizmusok

Adott X_1, \dots, X_k reakciókból felépíthető \mathcal{M} mechanizmusok nem csak a reakciók "egymás utáni történése", hanem azok lineáris kombinációi, így mindegyik X_j reakciónak egy $\mathbf{X}_j \in \mathbb{R}^m$ vektort feleltetünk meg (az előző alfejezethez hasonlóan). Tegyük fel, hogy az X_1, \dots, X_k reakciókban az A_1, \dots, A_m molekulák (atomcsoportok, stb.) vesznek részt. Ekkor az X_j reakció szokásos sztöchiometriai alakja



Amennyiben a reakció megfordítható, vagyis



alakú, akkor (matematikailag) átrendezhetjük

$$\sum_{i=1}^m (b''_{i,j} - b'_{i,j}) A_i = \sum_{i=1}^m b_{i,j} A_i = 0 \quad , \quad (1.8)$$

és az X_j reakciónak megfeleltetjük a

$$\mathbf{X}_j = [b_{1,j}, \dots, b_{m,j}]^T \in \mathbb{R}^m \quad (1.9)$$

vektort, ahol a komponensek $b_{i,j} \in \mathbb{Z}$ egész számok. tehát az (1.8) egyenlet helyett az

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X}_j = \underline{0} \quad (1.10)$$

homogén lineáris egyenletrendszert kapjuk, ahol $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ oszlopai az A_1, \dots, A_m atomcsoportoknak (1.1) és (1.2) szerint megfeleltetett vektorok.

A (megfordítható) reakciókat tehát ugyanúgy írhatjuk le molekulák segítségével, mint a molekulákat atomokkal.

1.2. Megjegyzés. A nem megfordítható reakciók (1.6) -ben felírt irányát a fenti módon (közvetlenül) nem tudjuk "kódolni" \mathbb{R}^m -beli vektorokkal, de a dimenzió növelésével igen. Szokás e célból az \mathbf{X}_j vektor helyett a $b'_{i,j}$ és $b''_{i,j}$ együtthatókat külön $B_1 = [b'_{1,j}, \dots, b'_{m,j}]^T$ és $B_2 = [b''_{1,j}, \dots, b''_{m,j}]^T$ vektorokban tárolni, és (1.8) ill. (1.9) helyett az

$$\mathbf{A} \cdot B_1 = \mathbf{A} \cdot B_2$$

egyenletrendszert tekinteni. Sajnos ekkor két vektort kell kezelnünk az \mathbf{X}_j vektor helyett.

Mivel a dolgozatunkban bemutatott módszerek és eredmények tetszőleges dimenziós vektorhalmazra alkalmazhatók, ezért a következő módszert ajánljuk: az $\mathbf{X}_j \in \mathbb{R}^m$ vektorok helyett tekintsük az

$$\mathbf{X}'_j := \begin{bmatrix} -B_1 \\ B_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2m}$$

vektorokat, azaz mindegyik A_i atomcsoportnak megfeleltetünk egy "be" és egy "ki" változatot. Ekkor az (1.10) egyenletrendszer helyett a négyszer nagyobb

$$[\mathbf{A}, \mathbf{A}] \cdot \mathbf{X}'_j = 0 \tag{1.11}$$

egyenletrendszert kell megoldanunk. Továbbá minden A_i vegyülethez el kell készítenünk egy "be \leftarrow ki" reakciót is: legyen az új \mathbf{X}_i^A vektor i -edik komponense 1, $m + i$ -edik komponense -1 , és az összes többi komponense 0 ($i = 1, \dots, m$). Természetesen a \mathbf{Z}_0 "start" és a \mathbf{Z}_1 "cél" reakciókat is ennek megfelelően módosítanunk kell.

Bár ez a módszer a dimenziót kétszeresére növeli, de módszereink és algoritmusunk változtatás nélkül futtathatók az $\{\mathbf{X}'_1, \dots, \mathbf{X}'_k, \mathbf{X}_1^A, \dots, \mathbf{X}_m^A, \mathbf{Z}'_0, \mathbf{Z}'_1\}$ vektorokkal.

1.3. Példa. Az $\mathbf{X}_1 : a + b \rightarrow 2a$ és az $\mathbf{X}_2 : b \rightarrow a$ reakciólépéseknek megfelelő új vektoraink

$$\mathbf{X}'_1 = [-1, -1, 0, \dots, 2, 0, 0, \dots]^T, \quad \mathbf{X}'_2 = [0, -1, 0, \dots, 1, 0, 0, \dots]^T,$$

az a és b vegyületekhez tartozó "be \leftarrow ki" reakciók

$$\mathbf{X}_a^A = [1, 0, 0, \dots, -1, 0, 0, \dots]^T \text{ és } \mathbf{X}_b^A = [0, 1, 0, \dots, 0, -1, 0, \dots]^T.$$

A 6.4. "Hierarchiák" alfejezetben lesz szükségünk a következő egyszerű észrevételre: az anyagmegmaradás törvénye szerint

$$\mathbf{A}\mathbf{X}_j = \mathbf{0} \quad (1.12)$$

minden $j = 1, \dots, k$ indexre, ahol az $\mathbf{A} := [A_1, \dots, A_m] \in \mathbb{R}^{n \times m}$ mátrix "kódolja" az A_1, \dots, A_m molekulák összegképleteit a rögzített $\{E_1, \dots, E_n\}$ elemhalmazon.

1.4. Megjegyzés. Az előző alfejezet folytatásaként célszerű az \mathbf{x}^+ vektorokkal foglalkoznunk, hiszen az X_1, \dots, X_k vektorok az (1.3) egyenletrendszer³⁾ (egyértelmű minimális) megoldásvektorai⁴⁾. Az X_1, \dots, X_k (oszlop)vektorokból álló $\mathbf{N} \in \mathbb{R}^{m \times k}$ mátrixot **sztoichiometriai mátrix**nak nevezik, nyilván

$$\mathbf{A}\mathbf{N} = \mathbf{0} .$$

\mathbf{N} oszlopai a megoldáshalmaz vektorai, reakciók, vagyis generáló illetve független tulajdonságuk generáló ill. független reakciókat jelentenek (lehet | nem lehet belőlük a többi reakciót előállítani).

\mathbf{N} sorai az adott vegyületek együtthatói az egyes reakciókban.

Most vizsgáljuk meg az (1.9)-ben definiált vektorok lineáris kombinációit.

Bármilyen egész (vagy racionális) együtthatójú

$$\mathcal{M} = \sum_{j=1}^k \lambda_j \cdot X_j \quad (1.13)$$

lineáris kombináció egy (lehetséges) \mathcal{M} **mechanizmust** jelöl, negatív együtthatójú X_j reakcióknak visszafelé "kell" végbemenniük. \mathcal{M} illetve (1.13) helyett röviden a

$$\underline{\lambda} := [\lambda_1, \dots, \lambda_k]^T \in \mathbb{Z}^k \quad (1.14)$$

vektort írhatjuk. Bár az \mathcal{M} mechanizmus (lényege) egyértelműen visszafejtethető a $\underline{\lambda} \in \mathbb{Z}^k$ vektorból, de természetesen nem minden $\underline{\lambda} \in \mathbb{Z}^k$ vektornak megfelelő reakciómechanizmus jöhet létre a valóságban.

A további vizsgálatokhoz meg kell különböztetnünk az (1.13) -beli \mathcal{M} mechanizmustól az \mathcal{M} által **eredményezett bruttó (overall) reakciót**, amit $\mathcal{R}(\mathcal{M})$ vagy $\mathcal{R}(\underline{\lambda})$ -val jelölünk:

$$\mathcal{R}(\underline{\lambda}) := \sum_{j=1}^k \lambda_j \mathbf{X}_j \in \mathbb{R}^m \quad (1.15)$$

³⁾ valójában (1.5) megoldásai

⁴⁾ k értékének becslésével a 4. "A szimplexek száma \mathbb{R}^n -ben" Fejezetben foglalkozunk, hiszen minden szimplexhez egyértelműen tartozik egy \mathbf{x}^+ vektor (skalárszorosoktól eltekintve), amik között ráadásul nincsenek párhuzamosak.

(ld. pl. [S84]), ami az összes $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_k$ reakciót egymás után $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ -szor elvégezve kapott végeredményt jelenti⁵⁾.

A fenti modell az \mathcal{M} mechanizmusban ((1.13),(1.15)) résztvevő reakciók *sorrendjét* nem veszi figyelembe, most csak Bertók Botond [B99] és [B03] gráfelméleti megközelítéseire hivatkozunk. A mechanizmus *kezdő-, köztes- és végtermékeinek* megkülönböztetésével sem foglalkozunk (ld. pl. [HOS90], [HS83]).

A mechanizmust **direkt** vagy **minimális mechanizmusnak** ([HS83]), **direkt útnak** (**path**, Milner) vagy **körmentes** (cycle-free) **mechanizmusnak** ([S84]) nevezzük, ha a benne résztvevő X_i reakciók egyike sem felesleges, nem hagyható el, vagyis a $\underline{\lambda}$ együtthatóvektor nemnulla komponenseinek

$$S(\underline{\lambda}) := \{j \mid \lambda_j \neq 0, 1 \leq j \leq k\} \quad (1.16)$$

halmaza⁶⁾ *nem csökkenhető* (minimális) úgy, hogy a végeredmény, az $\mathcal{R}(\underline{\lambda})$ overall reakció ne változzék. Más szavakkal: *nincs* olyan $S' \subsetneq S(\underline{\lambda})$ valódi részhalmaz amelyre $S(\underline{\mu}) = S'$ és $\mathcal{R}(\underline{\mu}) = \alpha \cdot \mathcal{R}(\underline{\lambda})$ teljesülne valamilyen $\underline{\mu} \in \mathbb{Z}^k$ együtthatóvektorra és $\alpha \in \mathbb{Q}$ racionális számra. Ebben az esetben a $\underline{\lambda}$ együtthatóvektornak megfelelő $\mathcal{R}(\underline{\lambda})$ **reakciót egyszerűnek** vagy **minimálisnak** hívjuk.

A most bevezetett elnevezések szerint: tetszőleges $S \subseteq \{1, \dots, k\}$ indexhalmazra a

$$\sum_{j \in S} y_j \mathbf{X}_j = \mathbf{0} \quad (1.17)$$

lineáris egyenletrendszer $\underline{y} := [y_{j_1}, \dots, y_{j_s}]$ megoldásához *pontosan akkor* tartozik *minimális mechanizmus*, ha az $\mathcal{S} = \{\mathbf{X}_j : j \in S\} \subset \mathbb{R}^m$ halmaz (lineáris algebrai) *simplex*, ismét. (Az $S \subseteq \{1, \dots, k\}$ és $\mathcal{S} \subseteq \{\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_k\}$ halmazok között könnyű egy-egy értelmű megfeleltetést találni.)

A 2. "Egy algoritmus és változatai" fejezetben ismertetett algoritmus nem csak az összes szimplexet képes megkeresni, hanem kis változtatás után például egy adott (végső) reakciót eredményező összes minimális mechanizmust, vagy megadott kiindulási-, köztes- és végső- molekulák esetén az összes eredményezett (overall) reakciót is (ld. a 2.2. "Az algoritmus kiterjesztései" alfejezetben).

Algoritmusunk konkrét számítógépes futtatásai, elemzésük és irodalmi összehasonlításai a 7. "Számítógépes eredmények" fejezetben találhatóak.

Párhuzamos (skalárszoros) reakciók nagyobb mennyiségben lejátszódó folyamatokat jelentenek.

⁵⁾ Matematikai hasonlattal: ha $\mathcal{B} := \{\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_k\} \subset \mathbb{R}^m$ független vektorrendszer, akkor az $\mathcal{R}(\underline{\lambda}) \in \mathbb{R}^m$ vektornak a \mathcal{B} bázisra vonatkozó koordinátái éppen $\underline{\lambda} = [\lambda_1, \dots, \lambda_k]$.

⁶⁾ $S(\underline{\lambda})$ -t a 3. fejezetben $\text{supp}(\underline{\lambda})$ -val jelöljük.

Az atomok-reakciók-mechanizmusok hierarchia sorozat tovább is folytatható (ügyelve az (1.12) és hasonló feltételekre), mint Pethő Árpád már [P90] -ben felvetette. Jelenleg folyó kutatásunkat a 6.4. "Hierarchiák" alfejezetben vázoljuk.

1.3. Fizikai dimenziók

Így is hívják fizikusok az *összetett mértékegységeket*. A lineáris algebra és a szimplexek ezirányú alkalmazását először Pethő Árpád írta le [P90] -ben.

Rögzítsünk n *alapidimenziót* (például tömeg, hossz, idő, stb.), E_1, \dots, E_n , és tekintsünk m *összetett* (származtatott) mennyiséget, A_1, \dots, A_m -et, amelyekre

$$A_j = \prod_{i=1}^n E_i^{a_{i,j}} \quad (j = 1, \dots, m) \quad (1.18)$$

ahol $a_{i,j} \in \mathbb{Z}$ ($1 \leq j \leq m$, $1 \leq i \leq n$). Az A_j mennyiségnek nyilván az

$$\mathbf{A}_j := [a_{1,j}, \dots, a_{n,j}]^T \in \mathbb{R}^n$$

vektort feleltetjük meg.

Ekkor néhány kiválasztott $\{A_j : j \in S\}$ mennyiségből ($S \subseteq \{1, \dots, m\}$) *pontosan akkor* készíthető egy (lehetséges) **dimenzió nélküli** mennyiség (group), vagyis valós szám az

$$\prod_{j \in S} A_j^{x_j} = 1 \quad (1.19)$$

összefüggés alapján, ha a

$$\sum_{j \in S} x_j \cdot \mathbf{A}_j = \mathbf{0} \quad (1.20)$$

homogén lineáris egyenletrendszernek van nemtriviális $x_j \in \mathbb{Q}$ ($j \in S$) megoldása.

(1.20)-nak pontosan akkor létezik minimális megoldása, vagyis amelyből egyetlen A_j sem hagyható el (nem felesleges), ha az $\mathcal{S} := \{\mathbf{A}_j : j \in S\}$ vektorhalmaz minimálisan összefüggő, vagyis *simplex*!

1.5. Példa. *Ha egy melegített csőben folyadék áramlik, és a hőátadást is figyelembe vesszük a cső anyaga és a folyadék között, akkor a következő mennyiségeket tekinthetjük (amelyeket vektor formában is felírtunk a legutolsó oszlop-*

ban az $\{m, \ell, t, T\}$ bázisban):

$A_1 = d$ (ℓ)	<i>csőátmérő</i>	$\mathbf{A}_1 = [0, 1, 0, 0]$	
$A_2 = v$ (ℓ/t)	<i>lineáris sebesség</i>	$\mathbf{A}_2 = [0, 1, -1, 0]$	
$A_3 = \rho$ (m/ℓ^3)	<i>folyadék sűrűség</i>	$\mathbf{A}_3 = [1, -3, 0, 0]$	
$A_4 = \nu$ ($m/\ell t$)	<i>viszkozitás</i>	$\mathbf{A}_4 = [1, -1, -1, 0]$	(1.21)
$A_5 = \kappa$ ($\ell^2/t^2 T$)	<i>hőkapacitás</i>	$\mathbf{A}_5 = [0, 2, -2, -1]$	
$A_6 = \lambda$ ($m/t^3 T$)	<i>hőátadás együttható</i>	$\mathbf{A}_6 = [1, 0, -3, -1]$	
$A_7 = \mu$ ($m\ell/t^3 T$)	<i>hővezetés</i>	$\mathbf{A}_7 = [1, 1, -3, -1]$	

Ekkor például

$$\mathbf{X}_1 = [0, 0, 0, 1, 1, 0, -1]$$

egy dimenzió nélküli csoport, ami a

$$\nu \cdot \kappa = \mu \cdot c$$

egyenlőségnek felel meg valamely $c \in \mathbb{R}$ konstansra. \square

1.4. Lineáris egyenletrendszerek

Tekintsünk egy

$$A \cdot \underline{x} = \underline{0} \tag{1.22}$$

homogén lineáris egyenletrendszert, ahol $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$. A oszlopvektorait jelöljük $\underline{a}_1, \dots, \underline{a}_m$ -el. Egy tetszőleges $\underline{x} \in \mathbb{R}^m$ megoldásvektorra tekintünk A azon oszlopvektorainak halmazát, amelyeket \underline{x} ténylegesen használ, vagyis amelyek i indexére az x_i komponens nullától különböző⁷⁾:

$$S_{\underline{x}} := \{\underline{a}_i : x_i \neq 0\} \subset \mathbb{R}^n \quad . \tag{1.23}$$

Nagyon sok $\underline{x} \in \mathbb{R}^m$ nemtriviális megoldásvektor közül választhatunk, de az előző alfejezetek hatására vizsgáljunk olyanokat, amelyek A -nak minimális oszlopát használják. Ez alatt azt értjük, hogy $S_{\underline{x}}$ -ből nem lehet egyetlen vektort sem elhagyni úgy, hogy a maradék vektoroknak még maradjon $\underline{0}$ -t eredményező nemtriviális lineáris kombinációja, vagyis (nem precíz jelölésekkel): az

$$[S_{\underline{x}} \setminus \{\underline{a}_j\}] \cdot \underline{y} = \underline{0} \tag{1.24}$$

egyenletrendszereknek egyetlen $\underline{a}_j \in S_{\underline{x}}$ vektorra sincs nemtriviális \underline{y} megoldása.

Könnyen felismerhetjük, hogy a fenti (1.22)–(1.24) feltételek pontosan azt jelentik, hogy az $S_{\underline{x}}$ halmaz lineárisan összefüggő, de minden $S_{\underline{x}} \setminus \{\underline{a}_j\}$ (valódi) részhalmaza független, vagyis ismét: **szimplex!**

⁷⁾ a 3. fejezet jelöléseivel $S_{\underline{x}} = \{\underline{a}_i : i \in \text{supp}(\underline{x})\}$.

Lineáris egyenletrendszerekkel, valamint a szimplexek és az \underline{x} megoldásvektorok kapcsolatával részletesen a 3. "Lineáris egyenletrendszerek vizsgálata" fejezetben foglalkozunk. Például a fenti (1.22)–(1.24) gondolatmenetet a 3.17. Állítás pontosítja.

A következő 1.5. alfejezetben a szimplexek definícióit és elemi tulajdonságait ismertetjük.

1.5. Matematikai definíciók és elemi összefüggések

1.6. Jelölés. (i) \mathbb{R}^n vektorait \mathbf{x} , \underline{x} vagy \vec{x} jelekkel írjuk, de egy-egy alfejezetben egységes írásmódot alkalmazunk.

(ii) Az $\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_m \in \mathbb{R}^n$ vektorok által **kifeszített (generált) alteret** $[\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_m]$ -el jelöljük. \square

Az előző alfejezetekben már megfogalmaztuk a következő, általános (lineáris algebrai) fogalmat (ld. pl. [P90], [1991] vagy [1995]):

1.7. Definíció. 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

1.8. Megjegyzés. (i) Nyilván $\underline{0} \notin \mathcal{S}$. Bármely két párhuzamos (nemnulla) vektor szimplexet alkot. Három egységű $\underline{u}, \underline{v}, \underline{w}$ vektor pontosan akkor szimplex, ha közülük semelyik kettő nem párhuzamos, vagyis $\alpha \underline{u} + \beta \underline{v} + \gamma \underline{w} = \underline{0}$ ahol α, β, γ egyike sem 0. Sőt, négy általános helyzetű vektor (semelyik három nem egységű) is szimplex. Tehát már három dimenzióban is az \mathcal{S} szimplexek elemszáma nagyon sokféle lehet.

Megjegyezzük még, hogy ha egy $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$ vektorrendszernek vesszük egy (véges) $G \subset \mathcal{H}$ generátorrendszerét és egy $\underline{h} \in \mathcal{H} \setminus G$ elemét, akkor a $G \cup \{\underline{h}\}$ vektorhalmaz ugyan összefüggő, de nem feltétlenül szimplex, hiszen lehetséges, hogy $G \cup \{\underline{h}\}$ -nek van valódi összefüggő részhalmaza.

A szimplexek szerkezetét például az 1.17. Tételben ismerhetjük meg.

(ii) \mathbb{R}^n helyett matroidot tekintve a megfelelő részhalmazt **körnek (circuit)** nevezik (ld. pl. [R89], [2001] vagy [2006]). \square

Mivel a matematikában több objektumot nevezünk *szimplexnek*, az előző fogalomhoz kapcsolódó néhány definíciót alább felsorolunk. Hangsúlyozzuk azonban, hogy dolgozatunkban elsősorban *lineáris algebrai szimplexekkel* foglalkozunk, ezért a "lineáris" jelzőt legtöbbször *nem írjuk le*.

1.9. Definíció. \mathbb{R}^n bármely $n + 1$ általános helyzetű pontja (amelyek egy teljes n -dimenziós poliéder csúcsai) **geometriai szimplex**. \square

1.10. Definíció. \mathbb{R}^n bármely $\{\underline{s}_1, \underline{s}_2, \dots, \underline{s}_k\} \subset \mathbb{R}^n$ részhalmaza **affin szimplex**, ha $k \geq 3$, az

$$\{\underline{s}_1 - \underline{s}_k, \underline{s}_2 - \underline{s}_k, \dots, \underline{s}_{k-1} - \underline{s}_k\} \quad (1.25)$$

halmaz lineárisan összefüggő és \mathcal{S} -nek nincs olyan valódi részhalmaza, amely affin szimplex lenne. \square

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

1.11. Definíció. (i) Tetszőleges síkbeli $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}^2$ ponthalmaz **affin**

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

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

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

A lineáris algebrai és affin szimplexek közötti kapcsolatot a 4.3.1. "A dimenzió csökkentése" alfejezet 4.18. Definíciójában és 4.19. Állításában ismertetjük, mely az azt követő alfejezetben lesz segítségünkre.

A különböző szimplexek összefoglalása és alkalmazásaik bemutatása [2012b] közleményünkben található.

Hangsúlyozzuk, hogy dolgozatunkban elsősorban *lineáris algebrai szimplexekkel* foglalkozunk, ezért a jelző nélküli megnevezés *mindig lineáris algebrai szimplexet* jelöl!

Az alábbiakban a lineáris algebrai szimplexek legfontosabb tulajdonságait vizsgáljuk meg.

1.12. Segédállítás. Bármely $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$ összefüggő halmaz tartalmaz (legalább egy) $\mathcal{S} \subseteq \mathcal{H}$ szimplexet. \square

1.13. Segédállítás. Ha $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$ összefüggő, $\mathcal{F} \subset \mathcal{H}$ független halmazok, akkor létezik $\mathcal{F} \subset \mathcal{S} \subseteq \mathcal{H}$ szimplex. \square

1.14. Segédállítás. *Bármely két különböző $\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2$ szimplexre*

$$\mathcal{S}_1 \not\subseteq \mathcal{S}_2 \text{ és } \mathcal{S}_2 \not\subseteq \mathcal{S}_1, \quad (1.26)$$

*vagyis szimplexek bármely $\mathcal{S}_1, \dots, \mathcal{S}_k$ halmaza **Sperner-tulajdonságú**, azaz **Sperner-rendszert** alkot.*

Bizonyítás. Az 1.7. Definíció alapján magától értetődő. ■

A szimplexek (1.26) tulajdonságát sokszor említés nélkül használjuk. A szimplexek *egymáshoz való viszonyára* az 1.18. Állításban még visszatérünk, előtte azonban részletesebben meg kell vizsgálnunk, hogy mely halmazok a szimplexek.

1.15. Segédállítás. *Bármely $U = \{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m, \mathbf{v}\} \subset \mathbb{R}^n$ vektorhalmaz pontosan akkor szimplex, ha U összefüggő, az $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m\}$ részhalmaza független, \mathbf{v} felírható az $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m\}$ vektorokból, és minden*

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^m \alpha_i \mathbf{u}_i \quad (1.27)$$

alakú összefüggésben az összes α_i együttható 0 -tól különböző. Továbbá az $\alpha_1, \dots, \alpha_m$ együtthatók egyértelműek.

Bizonyítás. Legyen U szimplex. Ekkor \mathbf{v} biztosan felírható (1.27) alakban hiszen az $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m\}$ halmaz független de U összefüggő.

Független $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m\}$ halmaz esetén jólismert, hogy az (1.27) egyenletben az együtthatók egyértelműek.

Ha a Segédállítás feltételei teljesülnek, akkor U szimplex tulajdonságához már csak azt kell megmutatnunk, hogy $U \setminus \{\mathbf{u}_i\}$ független minden $i \leq m$ esetén. Ha valamely i_0 indexre $U \setminus \{\mathbf{u}_{i_0}\}$ összefüggő, akkor az

$$\beta_v \cdot \mathbf{v} + \sum_{i \neq i_0} \beta_i \mathbf{u}_i = \mathbf{0} \quad (1.28)$$

egyenletben egyrészt $\beta_v \neq 0$ hiszen az $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m\}$ halmaz független, másrészt átalakítás után

$$\mathbf{v} = \sum_{i \neq i_0} \frac{\beta_i}{\beta_v} \mathbf{u}_i \quad (1.29)$$

ellentmond (1.27) -nek, mert $\alpha_{i_0} = 0$. Tehát U szimplex. ■

Az 1.15. Segédállításban a \mathbf{v} vektornak nincs kitüntetett szerepe, a Segédállítás mindössze csak azt állítja, hogy az (1.27) összefüggést elegendő *egyetlen* \mathbf{v} vektorra ellenőrizni.

1.16. Következmény. Bármely $U = \{\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_k\} \subset \mathbb{R}^n$ vektorhalmaz pontosan akkor szimplex, ha bármelyik $\mathbf{w}_j \in U$ vektor egyértelműen állítható elő a többiből

$$\mathbf{w}_j = \sum_{\ell \neq j} \gamma_\ell \mathbf{w}_\ell \quad (1.30)$$

alakban.

Bizonyítás. Legyen U szimplex. Ha valamelyik \mathbf{w}_j vektor nem áll elő (1.30) alakban a $W := U \setminus \{\mathbf{w}_j\}$ halmazból, akkor W függetlensége miatt a $W \cup \{\mathbf{w}_j\} = U$ halmaz is független lenne. Továbbá, W függetlenségéből az (1.30) -beli együtthetők egyértelműsége is következik.

Megfordítva: a (1.30) feltételből következik, hogy U összefüggő, az (1.30) -beli együtthetők egyértelműségéből pedig az $U \setminus \{\mathbf{w}_j\}$ halmazok függetlensége. ■

A szimplexek következő jellemzése mind elméletileg mind az alkalmazások körében lényeges szereppel bír.

1.17. Tétel. ([2012a]) Egy (nemüres) $S = \{v_1, v_2, \dots, v_k\} \subset \mathbb{R}^n$ vektorhalmaz pontosan akkor szimplex, ha létezik nemtriviális

$$\gamma_1 v_1 + \gamma_2 v_2 + \dots + \gamma_k v_k = \underline{0}, \quad (1.31)$$

lineáris kombináció, és minden ilyen lineáris kombinációban

$$\gamma_i \neq 0 \quad \text{minden } i \leq k \text{ esetén.} \quad (1.32)$$

Továbbá, az (1.31) lineáris kombináció egyértelmű konstans szorzók erejéig, azaz bármilyen

$$\gamma'_1 v_1 + \gamma'_2 v_2 + \dots + \gamma'_k v_k = \underline{0} \quad (1.33)$$

lineáris kombináció esetén szükségképpen

$$[\gamma'_1, \gamma'_2, \dots, \gamma'_k] = \lambda \cdot [\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_k] \quad (1.34)$$

valamely $\lambda \in \mathbb{R}$ számra (vagyis a $[\gamma'_1, \gamma'_2, \dots, \gamma'_k]$ és $[\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_k]$ vektorok párhuzamosak).

Bizonyítás. Ha S szimplex, akkor az (1.31) lineáris kombináció létezik, mert S összefüggő, S minimalitása miatt pedig $\gamma_i \neq 0$ minden $i \leq k$ indexre.

Tegyük fel, hogy az (1.31) és az (1.33) egyenleteknek vannak olyan $[\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_k]$ illetve $[\gamma'_1, \gamma'_2, \dots, \gamma'_k]$ megoldásai, amelyekre (1.34) egyetlen $\lambda \in \mathbb{R}$ számra sem teljesül. Nyilván $\gamma_1 \neq 0$ és $\gamma'_1 \neq 0$. Ekkor az (1.31)

egyenlet megfelelő skalárszorosából az (1.33) egyenlet skalárszorosát kivonva $\underline{0}$ vektort kapunk: a

$$\gamma'_1 \cdot (1.31) - \gamma_1 \cdot (1.33) = \underline{0} \quad (1.35)$$

lineáris kombinációban a $\underline{v}_1 \in S$ vektor nem szerepel, ami ellentmond S minimalitásának.

Másfelől, (1.31) alapján S lineárisan összefüggő. Nyilván S pontosan akkor *nem* minimális ha létezik olyan (1.31) lineáris kombináció, amelyben $\gamma_i = 0$ valamely $i \leq k$ indexre. Tehát (1.31) egyértelműsége, az (1.34) egyenlet értelmében, és az (1.32) feltétellel együtt biztosítja, hogy S minimálisan lineárisan összefüggő, vagyis szimplex. ■

Most folytatjuk az 1.14. Segédállításban megkezdett, a szimplexek egymáshoz való viszonyának vizsgálatát.

1.18. Állítás. *Legyen $\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2$ tetszőleges, két különböző szimplex.*

(i) *Ekkor bármely $\mathbf{v} \in \mathcal{S}_1 \cap \mathcal{S}_2$ vektor esetén a*

$$(\mathcal{S}_1 \cup \mathcal{S}_2) \setminus \{\mathbf{v}\} \quad (1.36)$$

halmaz lineárisan összefüggő.

(ii) *Következésképpen a fenti (1.36) halmaz tartalmaz szimplexet:*

$$\mathcal{S}_3 \subseteq (\mathcal{S}_1 \cup \mathcal{S}_2) \setminus \{\mathbf{v}\} \quad (1.37)$$

Bizonyítás. (i) Az 1.15 Segédállítás és 1.16. Következmény szerint az

$$\mathbf{v} = \sum_{\mathbf{u} \in \mathcal{S}_1 \setminus \{\mathbf{v}\}} \gamma_{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{u} = \sum_{\mathbf{w} \in \mathcal{S}_2 \setminus \{\mathbf{v}\}} \gamma_{\mathbf{w}} \cdot \mathbf{w} \quad (1.38)$$

egyenlőségekben egyik együttható sem 0, ahonnan

$$\mathbf{0} = \sum_{\mathbf{u} \in \mathcal{S}_1 \setminus \{\mathbf{v}\}} \gamma_{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{u} - \sum_{\mathbf{w} \in \mathcal{S}_2 \setminus \{\mathbf{v}\}} \gamma_{\mathbf{w}} \cdot \mathbf{w} \quad (1.39)$$

ami igazolja az $(\mathcal{S}_1 \cup \mathcal{S}_2) \setminus \{\mathbf{v}\}$ halmaz összefüggését, hiszen $\mathcal{S}_1 \neq \mathcal{S}_2$.

(ii) egyszerűen következik (i) -ből. ■

1.19. Megjegyzés. *Szimplexek és a homogén lineáris egyenletrendszerek minimális megoldásai között egy-egy-értelmű megfeleltetés (bijekció) található, amit később a 3.20. Tételben és a 3.21. Következményben vizsgálunk meg részletesebben.*

1.20. Megjegyzés. (1.36) és (1.37) nem általánosítható már tovább: az $\mathcal{S}_1 \triangle \mathcal{S}_2$ szimmetrikus differencia már lehet független halmaz, mint a következő egyszerű példa mutatja: legyenek $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \mathbf{d} \in \mathbb{R}^2$ páronként nem párhuzamos vektorok, és legyen $\mathcal{S}_1 := \{\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}\}$, $\mathcal{S}_2 := \{\mathbf{b}, \mathbf{c}, \mathbf{d}\}$. \square

Algoritmusunk sebességét (körülbelüli lépésszámát) a 2.1.1. alfejezetben az alábbi jelölések segítségével írhatjuk le pontosan (ld. [CLR97]):

1.21. Definíció. Tetszőleges $f, g : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{N}$ függvények esetén

(i) $f = \mathcal{O}(g)$ (olv.: **nagy ordó**, **"big oh"**), ha valamely $c \in \mathbb{R}^+$ pozitív konstansra és $n_0 \in \mathbb{N}$ küszöbindexre

$$\frac{f(n)}{g(n)} < c, \quad (1.40)$$

vagyis

$$f(n) < c \cdot g(n) \quad (1.41)$$

teljesül minden $n \geq n_0$ természetes számra,

(ii) $f = \Theta(g)$ ha valamely $c_1, c_2 \in \mathbb{R}^+$ pozitív konstansokra és $n_0 \in \mathbb{N}$ küszöbindexre

$$c_1 < \frac{f(n)}{g(n)} < c_2, \quad (1.42)$$

vagyis

$$c_1 \cdot g(n) < f(n) < c_2 \cdot g(n) \quad (1.43)$$

ha $n \geq n_0$, $n \in \mathbb{N}$. \square

[CLR97, 2.1.2.Fejezet] -ben is megemlítik, hogy a szakirodalomban több helyen nem tesznek különbséget \mathcal{O} és Θ között.

1.6. A felvetett problémák

A fenti definíciók és alapvető tulajdonságok után már precízen meg tudjuk fogalmazni dolgozatunk főbb célkitűzéseit.

Az ismertetett példákban felmerülő számtalan homogén lineáris egyenletrendszer ((1.3), (1.5), (1.17), (1.20)) alapján szükséges ezen egyenletrendszerek minimális megoldásainak, vagyis szimplexekre épülő *speciális* vizsgálata. Többek között a következő problémák merülnek fel:

1.22. Probléma. Legyen $\mathcal{S} = \{\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_k\} \subset \mathbb{R}^n$ egy tetszőleges szimplex. Adjuk meg a

$$\sum_{\mathbf{b}_j \in \mathcal{S}} x_j \cdot \mathbf{b}_j = \mathbf{0} \quad (1.44)$$

(homogén) lineáris egyenletrendszer megoldáshalmazának szerkezetét.

Most a szokásos "egydimenziós altere \mathbb{R}^n -nek" válasznál részletesebb vizsgálatra gondolunk.

1.23. Probléma. Legyenek $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$ tetszőleges, rögzített vektorok. Ha ismertek a

$$\sum_{\mathbf{a}_j \in \mathcal{S}} x_j \cdot \mathbf{a}_j = \mathbf{0} \quad (1.45)$$

(homogén) lineáris egyenletrendszerek megoldáshalmazai az összes $\mathcal{S} \subseteq \{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m\}$ szimplex esetén, akkor ezekből elő lehet-e állítani a

$$\sum_{j=1}^m x_j \cdot \mathbf{a}_j = \mathbf{0} \quad (1.46)$$

homogén lineáris egyenletrendszer megoldáshalmazát, és hogyan?

A fenti problémákra a 3. "Lineáris egyenletrendszerek vizsgálata" fejezetben adunk részletes választ, a szüksége definíciók után például a 3.12. Problémában és a 3.13. Tételben.

A gyakorlati életben a minimális reakciók és mechanizmusok felsorolása a további kémiai vizsgálatok kezdő lépése.

1.24. Probléma. Tetszőleges adott $\mathcal{H} = \{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_m\} \subset \mathbb{R}^n$ (véges) vektorhalmaz esetén keressük meg a \mathcal{H} -ban található összes minimálisan összefüggő $\mathcal{S} \subseteq \mathcal{H}$ részhalmazt, azaz szimplexet.

1991-ben ([1991]) megjelent és 2001-ben ([2000a]) hasonló problémák megoldására is képes, kibővített algoritmusunkat, valamint az irodalomban fellelhető, hasonló problémákra készült megoldásokat a 2. "Egy algoritmus és változatai" fejezetben ismertetjük. A 7. "Számítógépes eredmények" fejezetben konkrét irodalmi példákön mutatjuk be algoritmusunk teljesítményét és hasonlítjuk össze más publikált megoldási módszerekkel.

Algoritmusok futásidejének kritikus pontja a lehetséges megoldások, jelen esetben a szimplexek (minimális reakciók, mechanizmusok) száma.

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

Éles felső korlátot és párhuzamos vektorok esetén éles alsó korlátot sikerült adnunk 1995-ben ([1995], illetve 4.5. és 4.7. Tétel). Természetesen a szimplexek méretei nagyon változatosak lehetnek, a tér egyik bázisával sincs semmi kapcsolatuk. A 7. "Számítógépes eredmények" fejezetben példákat találunk: kevés szimplexet tartalmazó többdimenziós nagyméretű vektorhalmazokra, és sok szimplexet tartalmazó alacsonyabb dimenziós kisméretű vektorhalmazokra is. Ez azt mutatja, hogy egy adott vektorhalmazban levő szimplexek számát nagyon nehéz pontosan megbecsülni.

Mint [1995] -ben kiderült, az alsó becsléseknél a párhuzamos vektoroknak (izomer molekulák, többszörös adagok) lényeges szerepük van (ld. 4.7. Tétel). Nem csak matematikailag érdekes (és nehéz) a párhuzamos vektorok nélküli vektorhalmazok esete, ezért ezt a problémát külön is megfogalmazzuk:

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

Amennyiben \mathcal{H} -ban nem engedünk meg párhuzamos vektorokat, az alsó korlát lényegesen megemelkedik, azonban a precíz matematikai vizsgálatok nagyon nehezzé válnak: csak az \mathbb{R}^3 és \mathbb{R}^4 esetekre sikerült végleges választ adnunk 1998 és 2011-ben ([1998], [2011]). A részleteket a 4.3. "A minimum párhuzamos vektorok nélkül" alfejezetben ismertetjük.

A fenti 1.25. és 1.26. Problémákkal kapcsolatos, a 4. Fejezetben adott matematikai vizsgálatokból kitűnik, hogy mind a problémák mind a megoldások nem csak (véges dimenziós) vektorterekben, hanem általánosabb struktúrákban is felvethetők és kezelhetők:

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

A problémát 1996 -ban oldottuk meg ([1996], [2006]), a megoldást az 5. "Matroidok és hipergráfok" Fejezetben ismertetjük. (A matroidok definícióit és alaptulajdonságait megtaláljuk Recski András [R89] vagy Szalkai István [2001] könyveiben.)

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

A probléma kutatása jelenleg is folyik, az eddigi eredményeket az 5. "Matroidok és hipergráfok" fejezet végén ismertetjük és [2013a] cikkünkben tervezzük közzétenni.

Már a "Mechanizmusok" alfejezet elején észrevettük az atom-reakció-mechanizmus-... "hierarchiát": a "magasabb rendű" vektorok az "alsóbb szinten" lezajló folyamatok outputjai, tehát bizonyos feltételeknek már eleget tesznek. (Lásd például (1.3), (1.13), (1.12).) A "hierarchia" fogalmára azonban még nem adtunk precíz matematikai meghatározást!

1.29. Probléma. *Adjunk matematikai definíciót a **szöchiometriai hierarchia** fogalmára, majd tanulmányozzuk annak matematikai tulajdonságait és kémiai, fizikai következményeit.*

A kutatás néhány kezdeti eredményét a 6.4. "Hierarchiák" alfejezetben ismertetjük, [2013b]-ben tervezzük közzétenni.

Kémiai reakciók és mechanizmusok folyamán több kvantitatív jellemzőt is mérhetünk, melyek többsége az alkotórészek tulajdonságainak ismeretében kiszámítható, ezeket [P95] után **kiértékelési operátor**-nak (*valuation operator*) hívunk. A lineáris funkcionálok elmélete alapján [2000b]-ban részletesen megvizsgáltuk a *kiértékelési operátor* tulajdonságait, ezeket az eredményeket a 6.5. alfejezetben ismertetjük.

2. fejezet

Egy algoritmus és változatai

Ebben a fejezetben először az [1991]-ben megjelent általános, lineáris algebrai algoritmust ismertetjük, melynek eredeti célja az előző fejezetben ismertetett 1.24. Probléma megoldása, vagyis tetszőleges $H \subset \mathbb{R}^n$ véges vektorhalmazban található összes szimplex felsorolása. Az algoritmus általánosabb halmazrendszerekre is használható (például matroidok), erről a 2.1.2. "Egy általánosítás" alfejezetben olvashatunk. Az algoritmus sebességét a 2.1.1. alfejezetben vizsgáljuk.

Az 1. "Alkalmazások és matematikai alapok" Fejezetben ismertetett kémiai problémák megoldását, mint közvetlen reakciók és mechanizmusok vagy dimenzió nélküli mennyiségek keresését a 2.2. "Az algoritmus kiterjesztései" alfejezetben ismertetjük. Ezek a problémák az algoritmus apró módosításával megoldhatók.

Algoritmusunkat más megoldási módszerekkel a 2.4. "Más algoritmusok" alfejezetben hasonlítjuk össze, részletes futási eredményeket a 7. "Számítógépes eredmények" Fejezetben mutatunk be.

2.1. Az algoritmus

Az input tehát egy tetszőleges, véges $H \subseteq \mathbb{R}^n$ vektorhalmaz, mérete tetszőleges, legyen $M := |H|$. (Az egyszerűség végett H elemei helyett csak sorszámait írjuk $\{1, 2, \dots, M\}$.)

Az összes $S \subseteq H$ szimplexet szeretnénk felsorolni, ismétlés nélkül, lehetőleg egyszerűen és kevés idő alatt.

Bár \mathbb{R}^n -ben minden szimplex legfeljebb $n + 1$ elemű, mégsem célszerű H összes, legfeljebb $n + 1$ elemű részhalmazát kipróbálnunk, hiszen ekkor a

szükséges vizsgálatok száma

$$\sum_{i=1}^{n+1} \binom{M}{i} = \binom{M+1}{n+2} - 1 = \mathcal{O}(M^{n+2}) \quad (2.1)$$

lenne ($\mathcal{O}(\cdot)$ értelmezését az 1.21. Definícióban találjuk). A 2.3. Állításban belátjuk, hogy az alább következő, PROCEDURE MODIFY eljárás alapuló algoritmusunk a legrosszabb esetben is csak $\mathcal{O}(M^{n+1})$ lépést igényel. A 4. "A szimplexek száma \mathbb{R}^n -ben" fejezet 4.6. Következménye szerint bizonyos H halmazokra nem is létezhet ennél gyorsabb algoritmus.

"Természetesen" nem kell H összes (legfeljebb $n+1$ -elemű) részhamazát mind megvizsgálunk, a szimplexek 1.14. Segédállításban említett, és a lineárisan független halmazok jól ismert alaptulajdonságai miatt:

2.1. Állítás. (i) *Független halmazok bármely részhamazai is függetlenek,*
(ii) *összefüggő (nem független) halmazt tartalmazó bármely halmaz is összefüggő.* \square

Nyilvánvalóan (ii) következik (i)-ből, csak a teljesség miatt írtuk le.

Az algoritmus lényege: H mely részhamazait és milyen sorrendben "vesz-szük elő", hogy megvizsgáljuk minimális összefüggőség szempontjából, melyik legyen a következő vizsgálandó részhamaz? Mivel ehhez a döntéshez csak a 2.1. Állítás (i) és (ii) tulajdonságait használjuk fel, az (i)-ben említett "függetlenséget" vizsgáló PROCEDURE-FUGGETLEN részprogram az algoritmus számára lényegtelen. Az algoritmust könnyen általánosíthatjuk más halmazrendszerekre is, erről bővebben a 2.1.2. "Egy általánosítás" alfejezetben olvashatunk.

H részhamazainak vizsgálata, és így a szimplexek felsorolása is, *lexikografikus sorrendben* történik, a módosítást pedig az "oda-vissza" ("back and forth") algoritmus mintájára oldottuk meg. H elemeit "a"-tól kezdődően egy-egy karakterrel azonosítjuk, így az éppen vizsgált $S \subseteq H$ részhamaz elemeit (nekik megfelelő karaktereket) egy **szimplex**[] nevű *karakterfüzérben* tároljuk (S nem feltétlenül szimplex). Hangsúlyozzuk, hogy **szimplex**[]-ben a vektorok felsorolása mindig az *eredeti*, H -beli *sorrendben* történik!

A **szimplex**[] karakterfüzérben a vektorhalmaz állandó módosítását könnyen tudjuk nyomon követni, hiszen legtöbbször csak a legvégén levő néhány karaktert (vagyis a nekik megfelelő S -beli vektorokat) módosítjuk. Technikailag S végére egy információs karaktert fűzünk, amely karakterek a következők lehetnek:

" "	(szóköz)	- S -et még nem vizsgáltuk
"i"		- S független
"d"		- S valamely <i>valódi</i> részhalmaza összefüggő
"s"		- S szimplex

Az S vektorhalmaz módosítását, ami az algoritmus "lelke", a PROCEDURE MODIFY rutin végzi. A főprogram mindig csak már "ellenőrzött" vektorhalmazt küld PROCEDURE MODIFY -nak, vagyis PROCEDURE MODIFY indulásakor **szimplex**[] utolsó, információs karaktere (fenti tábla) sohasem " " (szóköz).

Technikailag PROCEDURE MODIFY a **szimplex**[] füzér utolsó karaktere alapján csak a **szimplex**[] füzért módosítja, legtöbbször csak a végén levő pár karaktert, majd **szimplex**[] végére a " " szóközt fűzi, és visszaküldi a módosított **szimplex**[] füzért a főprogramnak. A főprogram megvizsgálja a **szimplex**[] -ben leírt vektorhalmazt ("i" vagy "d" vagy "s"), "s" esetén ki-nyomtatja. A főprogram nyilván a PROCEDURE-FUGGETLEN eljárás alapján vizsgálja a **szimplex**[] füzért, tehát *nem csak lineáris algebrai szimplexek megkeresésére használható*.

PROCEDURE MODIFY és a főprogram nyilván felváltva működnek egészen addig, amíg H végére érnek, vagyis amikor S már csak H utolsó vektorait tartalmazza és "i" vagy "s" lesz. Minden megtalált S szimplex esetén a főprogram megoldja a megfelelő (1.3) homogén lineáris egyenletrendszer, vagyis megkeresi az S -hez tartozó minimális reakciót is.

PROCEDURE MODIFY -t a következőképpen építettük fel (a részletes programlistát a 2.5. alfejezetben közöljük). $M = |H|$ jelöli az adott vektorok (összes) számát. **szimplex**[] utolsó karaktere kivételével egy éppen megvizsgált $S \subseteq H$ vektorhalmazt kódol, tehát

$$\mathbf{szimplex}[] \subset \{1, 2, \dots, M, " ", "i", "d", "s"\} \quad . \quad (2.2)$$

Az alábbiakban \mathbf{c} egy tetszőleges karaktert jelöl, $\mathbf{k}, \mathbf{t} \leq M$ tetszőleges számok, és

$$\mathbf{T} \subseteq \{1, 2, \dots, t - 1\} \quad (2.3)$$

tetszőleges részhalmaz, ha t már rögzített.

A PROCEDURE MODIFY eljárás pseudokódja a következő (a részletes Pascal-programot a 2.5. alfejezetben találjuk):

PROCEDURE MODIFY

```

szimplex[ ] := {1} ;
while not end do begin
/*1*/
  if szimplex[ ] = { $k, k + 1, \dots, M, c$ } and  $c \neq "d"$  then END;
/*2*/
  if szimplex[ ] = { $k, k + 1, \dots, M, "d"$ }
  then  $S := \{k, k + 1, \dots, M - 2, M, " "$ };
/*3*/
  if szimplex[ ] = { $T, t, M, c$ } then  $S := \{T, t + 1, " "$ };
/*4*/
  if szimplex[ ] = { $T, t, "i"$ } then  $S := \{T, t, t + 1, " "$ };
/*5*/
  if szimplex[ ] = { $T, t, "d"$ } then  $S := \{T, t + 1, " "$ };
/*6*/
  if szimplex[ ] = { $T, t, "s"$ } then  $S := \{T, t + 1, " "$ };
end ;

```

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

Bizonyítás. Látható, hogy a program H részhalmazait valóban *lexikografikus* sorrendben veszi sorra, így egyet sem hagy ki és egyet sem vizsgál meg kétszer. Azt kell még ellenőriznünk, hogy ha esetleg átugor néhány részhalmazt, akkor sem hagy ki szimplexekeket. Pontosabban: a *kihagyott részhalmazok*

- vagy valódi részhalmazként tartalmazznak "d" vagy "s" halmazokat,
- vagy ők valódi részhalmazai "i" vagy "s" halmazoknak.

(i) A rutin **if** utasításait egyenként elemezzük.

/*1*/ Ha H egy végszeletében nincs összefüggő valódi részhalmaz, akkor ebben a végszeletben már nincs újabb szimplex, a lexikografikusan ezután következő részhalmazok pedig mind részhalmazok.

/*2*/ H -nak a tekintett $\{k, k + 1, \dots, M\}$ végszeletében van összefüggő valódi részhalmaz. M csak úgy kerülhetett a vizsgálandó részhalmazba, hogy az *előtte* vizsgált $\{k, k + 1, \dots, M - 1\}$ részhalmaz *független* volt. Ezért természetes, hogy a következő vizsgálandó részhalmaz $\{k, k + 1, \dots, M - 2, M\}$

legyen, vagyis a (lexikografikus sorrendben) kihagyott részhalmazokban biztosan nincs szimplex.

*/3** és */4** esetekben a lexikografikusan rákövetkező részhalmazokra lépünk.

*/5** és */6** esetekben átugorjuk a $\{T, t\}$ -vel kezdődő, vagyis a $\{T, t\}$ -t tartalmazó halmazokat. Mivel $\{T, t\}$ típusa "d" vagy "s", ezért a kihagyott halmazokban biztosan nincs szimplex.

(ii) A fenti elemzés szerint a program minden esetben a lehető legtöbb részhalmazt ugorja át lexikografikus sorrendben. ■

2.1.1. Az algoritmus sebessége

Az algoritmus sebességét (lépésszám) elsősorban az határozza meg, hogy hány $T \subseteq H$ részhalmazra kell ellenőriznünk T lineáris összefüggőségét, pontosabban szimplex-tulajdonságát?

2.3. Tétel. *Ha $H \subset \mathbb{R}^n$ és $M = |H|$, akkor az algoritmus legfeljebb M^{n+1} részhalmazát vizsgálja meg H -nak, vagyis a lépésszám legfeljebb¹⁾ $\mathcal{O}(M^{n+1})$.*

Bizonyítás. Mivel n a tér dimenziója, ezért bármely szimplex legfeljebb $n + 1$ -elemű, vagyis H -ban legfeljebb M^{n+1} szimplex lehetséges. A Vandermode-determinánsok létezése, valamint a 4.5. Tétel és a 4.6. Következmény miatt ez a maximális érték bármely $M \in \mathbb{N}$ esetén megvalósul bizonyos H halmazok esetén.

Másrészt, a program által vizsgált részhalmazok legfeljebb $n + 1$ -eleműek, hiszen ekkora részhalmazok már biztosan lineárisan összefüggnek \mathbb{R}^n -ben. Ekkor a PROCEDURE-FUGGETLEN részprogram "d" vagy "s" jelzést tesz a **szimplex**[] karakterfüzér végére, vagyis a PROCEDURE MODIFY részprogram már biztosan nem növeli az ekkora, már megvizsgált részhalmaz méretét. ■

Tehát algoritmusunk futásideje polinomiális függvénye M -nek, a vektorok számának.

A lépésszám nagy, de $\mathcal{O}(M^{n+1})$ mérete általában nem csökkenthető, hiszen az output szélsőséges esetekben éppen M^{n+1} méretű. Ezt a kérdést a 4.1. "A maximum" alfejezet 4.5. Tételében és 4.6. Következményében vizsgáljuk meg részletesen.

A fenti becslésekkel összhangban, a tapasztalatok szerint is az átlagos méretű feladatok (néhány tucat vektor 10 – 20 dimenziós térben, vagyis 10 – 20 elemből felépülő néhány tucat vegyület) a modern számítógépeken

¹⁾ $\mathcal{O}(\cdot)$ pontos jelentését az 1.21. Definícióban találjuk

másodperc töredéke alatt megoldhatók. Futtatásainkhoz egy régi, Packard Bell IBM -kompatibilis, 366 MHz CPU órajelű számítógépet használtunk, 16 MB RAM, Windows 98 DOS ablakban, Turbo Pascal 6.0 fordítóval készített program futtatásához. Már ezek a kísérletek is pillanatok alatt eredményre vezettek, ezért nem próbálkoztunk modernebb gépekkel. Modernebb gépek és újabb (bonyolultabb) operációs rendszerek vagy fordítók által készített programok várhatóan nem lassabban oldják meg ugyanezeket a feladatokat. Futási eredményeinket a 7. "Számítógépes eredmények" fejezetben ismertetjük és elemezzük.

2.1.2. Egy általánosítás

Mint láttuk, az előző alfejezetben ismertetett algoritmusunk a "függetlenség", "összefüggőség" és "simplex" fogalmaknak kizárólag csak a 2.1. Állításban megfogalmazott (i) és (ii) tulajdonságait használja fel, tehát nem csak lineáris algebrai szimplexek megkeresésére használhatjuk. Mindössze csak a PROCEDURE-FUGGETLEN részprogramot kell módosítanunk, ami egyébként a program többi része szempontjából lényegtelen, egy "ismeretlen fekete doboz" is lehet. A **simplex**[] karakterfüzér és a PROCEDURE MODIFY részprogram változatlan maradhat.

Tehát például egy akármilyen (X, \mathcal{F}) matroid tetszőleges (véges) $H \subseteq X$ részhalmazában megkereshetjük az összes $C \subseteq H$ kört, vagy akár a 2.1. Állításhoz hasonló, alábbi tulajdonságot kielégítő "leszálló, nem torz" (V, \mathcal{E}) hipergráf tetszőleges (véges) $H \subseteq V$ részhalmazában megkereshetjük az összes $S \subseteq H$ szimplexet.

2.4. Definíció. (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 szintén $F \in \mathcal{E}$,
(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 $S \subseteq V$ részhalmaz **simplex**, ha S összefüggő ($S \notin \mathcal{E}$) de S bármely valódi $T \subsetneq S$ részhalmaza független. \square

Az algoritmus természetesen $\mathcal{O}(M^{n+1})$ futásidejű, ha n jelöli az \mathcal{M} matroid rangját, vagy a (fenti tulajdonságú) \mathcal{H} hipergráfban \mathcal{E} elemei legfeljebb n -eleműek.

2.2. Az algoritmus kiterjesztései

Az (eredeti) algoritmus *inputjának* apró módosításával több, kapcsolódó probléma is megoldható. Elsősorban a reakciómechanizmusok különböző kérdé-

seivel foglalkozunk, természetesen az algoritmus más, lineáris algebrai vagy matroidelméleti kérdések vizsgálatához is alakítható. Ebben az alfejezetben ismertetett eredményeink [2000a] -ben jelentek meg.

Az alábbi alfejezetekben leírt eljárások könnyebb megértése végett a 7. "Számítógépes eredmények" Fejezet 7.5-7.7 Példáit részletes magyarázatokkal láttuk el.

2.2.0. A dimenzió csökkentése

Néhány egyszerű észrevétellel az *input* méretét és így az algoritmus futásidőjét hatékonyan csökkenthetjük.

(a) Ha egy vektor (reakció) lineárisan független a többitől, akkor elhagyandó, hiszen egy szimplexnek sem eleme. Egy ilyen előzetes vizsgálat ugyan hosszúnak tűnhet, de mindössze csak $\mathcal{O}(M^2)$ lépés, míg a megtakarított idő majdnem $\mathcal{O}(M^n)$. Ez már kb. 30 db 30 dimenziós vektor adathalmaz esetén jelentős megtakarítás!

Egy létező kirívó példa a *metán-metanol* reakció [HOS90]-ben (lásd a 7. "Számítógépes eredmények" Fejezet 7.6. Példáját), ahol az S_9 és S_{11} reakciók mindegyike tartalmaz egy-egy olyan vegyületet (C_2H_6 ill. CH_3OCH_3), vagyis egy-egy olyan koordinátát, amelyek egyetlen más reakcióban sem szerepelnek. Nem meglepő, hogy S_9 és S_{11} egyike sem szerepel sem [HOS90, Table X]-ben, sem jelen dolgozat 7.6. Példája végeredményei között.

(b) Ha egy vektorban (reakcióban) *pontosan kettő* nemnulla koordináta szerepel (csak *kettő* vegyület reakciója), akkor *ezt* a vektort elhagyhatjuk és az összes maradék vektor *dimenzióját* tudjuk 1 -el csökkenteni.

A *kémia nyelvén* egy ilyen vektor egy

$$A = \lambda B \tag{2.4}$$

típusú reakciót jelent²⁾, például $C_6H_6 = 3C_2H_2$. Ha külön megjegyezzük a (2.4) egyenletet, akkor az összes reakcióban (vektorban) az A vegyületet helyettesíthetjük λB -vel, ezután pedig már nincs is szükségünk az A vegyületre (koordinátára), vagyis valóban sikerült a dimenziót (és a vektorok számát is) 1 -el csökkentenünk. Természetesen az algoritmus futása után a redukált térben kapott minden \mathcal{M}^- mechanizmust vissza kell alakítanunk az eredeti térbe, vagyis ki kell esetleg bővítenünk a (2.4) egyenlettel, amennyiben B szerepel \mathcal{M}^- valamelyik reakciójában. (Amennyiben az így kapott \mathcal{M} nem minimális, az algoritmus pillanatok alatt megkeresi minimális részalmazait.)

²⁾ Ez nem csak azt jelenti, hogy az A és B vegyületekben az elemek aránya ugyanaz, hanem át is tudnak egymásba alakulni, hiszen ezért szerepel (2.4) az adott reakciólistában!

Vizsgáljuk meg a fenti eljárást *matematikai* szempontból is, általánosan.

Konstrukció a dimenzió csökkentésére:

Tegyük fel, hogy az $\mathbf{X} = [x_1, \dots, x_N]^T \in \mathbb{R}^N$ vektornak *pontosan kettő* koordinátája nem nulla:

$$x_u = \lambda \cdot x_v \quad \text{és} \quad x_i = 0 \quad \text{ha } i \neq u, v \quad (2.5)$$

ahol $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ és $x_v \neq 0$, és tegyük fel, hogy $u < v$.

Ekkor tetszőleges $\mathbf{Y} = [y_1, \dots, y_N]^T \in \mathbb{R}^N$ adott vektor v -dik koordinátájának λ -szorosát vonjuk ki az u -dik koordinátájából, majd töröljük \mathbf{Y} -nak v -dik koordinátáját, az így kapott vektort jelöljük \mathbf{Y}^- -al:

$$\mathbf{Y}^- := [y_1, \dots, y_u - \lambda \cdot y_v, \dots, y_{v-1}, y_{v+1}, \dots, y_N]^T \in \mathbb{R}^{N-1}, \quad (2.6)$$

nyilván $\mathbf{X}^- = \mathbf{0}$.

Legyen végül adott $H \subset \mathbb{R}^N$ vektorhalmaz esetén

$$H^- := \{\mathbf{Y}^- \mid \mathbf{Y} \in H, \mathbf{Y} \neq \mathbf{X}\} \subseteq \mathbb{R}^{N-1}. \quad (2.7)$$

□

2.5. Segédállítás. *Tetszőleges* $S^- \subseteq \mathbb{R}^{N-1}$ *részhalmoz pontosan akkor lineárisan független, ha* $S \cup \{\mathbf{X}\}$ *lineárisan független, ahol* $S := \{\mathbf{Y} \mid \mathbf{Y}^- \in S^-\}$.

Bizonyítás. Legyen $S := \{\mathbf{Y}_i \mid i \leq t\}$. Mivel az \mathbf{Y} vektoroknak csak az u -dik koordinátái változtak meg, és \mathbf{X} többi koordinátái mind 0, ezért elegendő csak az u -dik koordinátákra figyelniük.

\mathbf{Y}_i^- -nak u -dik koordinátája $y_u^i - \lambda \cdot y_v^i$ ahol y_u^i jelöli \mathbf{Y}_i megfelelő koordinátáját. Ekkor tetszőleges $\mu_1, \dots, \mu_t \in \mathbb{R}$ együtthatókra

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^t \mu_i \mathbf{Y}_i^- &= \mathbf{0} \iff \sum_{i=1}^t \mu_i (y_u^i - \lambda \cdot y_v^i) = 0 \\ &\iff \sum_{i=1}^t \mu_i y_u^i = \lambda \cdot \sum_{i=1}^t \mu_i y_v^i =: c \\ &\iff \sum_{i=1}^t \mu_i \mathbf{Y}_i = \frac{c}{x_u} \cdot \mathbf{X}. \end{aligned}$$

■

2.6. Következmény. Tetszőleges $S^- \subseteq \mathbb{R}^{N-1}$ részhalmaz esetén az " S^- szimplex " tulajdonság ekvivalens mind (i), mind (ii) -vel:

(i) $S \cup \{\mathbf{X}\}$ összefüggő, de bármely valódi $S \setminus \{\mathbf{Y}\} \cup \{\mathbf{X}\}$ részhalmaza független, ahol $\mathbf{Y} \neq \mathbf{X}$,

(ii) vagy $S \cup \{\mathbf{X}\}$ szimplex, vagy S összefüggő, de ez utóbbi esetben S^- -nek van olyan $T \subset S$ részhalmaza, amely szimplex és \mathbf{X} -et nem tartalmazza.

□

A fenti Következmény alapján bármely adott H halmazban a szimplexek keresését egyszerűsíthetjük (az algoritmust gyorsíthatjuk): elegendő a H^- -beli $S^- \subseteq H^-$ szimplexeket megkeresnünk, majd $S \cup \{\mathbf{X}\}$ néhány részhalmazát megvizsgálunk.

Megemlítjük, hogy (2.4) a kémia nyelvén kissé más típusú problémákat vet fel, mi azonban csak az eredeti algoritmikus matematikai problémával foglalkozunk (összes H -beli szimplex megkeresése).

A fenti redukció hatását a 7. "Számítógépes eredmények" fejezet 7.7. "Glucose - pyruvate átalakítás" példában szemléltetjük (a feladat [HOS90, Table X]-ből származik). Eredetileg adott volt 14 vektor a 13 -dimenziós térben, mi először bevezettünk újabb 3 technikai vektort (ezen technikai vektorok magyarázatát és szerepét a 3.2.1.i) alfejezetben ismertetjük). A kapott 13 -dimenziós feladatot számítógépünk 93 másodperc alatt oldotta meg (7.7. Táblázat első fele). A (2.6) és (2.7) -ben leírt dimenzió-csökkentés hatására (nyolc $A = \lambda B$ típusú reakciót küszöböltünk ki) már csak 9 vektort kaptunk a 6 -dimenziós térben, amit ugyanazon számítógép 0.10 másodperc (!) alatt oldott meg (7.7. Táblázat középső fele). Egy újabb redukció hatására a futásidő 0.01 másodpercre zsugorodott! (A módosított feladat végeredményéből az eredeti probléma megoldásának *dekódolása* is 0.1 másodpercnél kevesebb időt igényelt.)

2.2.1. Közvetlen reakciók keresése

Adott néhány (valóságos) reakció, $X_1, \dots, X_k \in \mathbb{R}^N$, melyben mind *terminális* molekulák (nyersanyagok és végtermékek), mind *nemterminális*, vagyis *köztes* ("intermediate") rész-molekulák (atomcsoportok) szerepelnek. Az adott X_1, \dots, X_k reakciók között keresünk olyan $\sum_{i=1}^k \lambda_i X_i$ mechanizmusokat, amelyeknek végeredményei, az

$$\mathbf{Y} = \mathcal{R}(\underline{\lambda}) \quad (2.8)$$

overall reakciók *csak terminális* molekulákat tartalmaznak. (A terminológiát [HS83] alapján az 1.2. "Mechanizmusok" alfejezetben ismertettük.) Kiemeljük,

hogy az \mathbf{Y} overall reakciót sem ismerjük! Célunk tehát az összes, X_1, \dots, X_k -ből megvalósítható, csak terminális anyagokat tartalmazó *minimális* \mathbf{Y} reakció (és a hozzájuk vezető mechanizmusok) megkeresése, az ilyen \mathbf{Y} reakciókat **közvetlen** -nek ("direct", "cycle-free", "steady state") hívjuk. Minimális reakciómechanizmus végeredménye nyilván minimális reakció.

A 7. Fejezet 7.5. példájában, és a jelen 2.2.1. alfejezet végén részletesen tárgyaljuk a fenti problémát és annak az alábbi (i) pontban leírt megoldási módszerét.

(i) Első megoldás

Mivel ismerjük a terminális molekulákat, így az Algoritmus alapváltozatával megkereshetnénk ezen *molekulák közötti* összes (lehetséges) R_ℓ reakciót ($\ell \in L$), azonban mi garantálja azt, hogy az adott X_i reakciók valamely *mechanizmusa* meg is valósítja valamelyik R_ℓ reakciót?

Ehelyett először bővítsük ki az adott $\{\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_k\} \subseteq \mathbb{R}^N$ vektorhalmazt néhány új, "ideális" $\mathbf{V}_t \in \mathbb{R}^N$ vektorral, amik segítségével szétválaszthatjuk a terminális és nemterminális molekulákat: \mathbf{V}_t legyen éppen a t -edik kanonikus bázisvektor (t -edik koordinátája 1, többi koordinátája 0), minden olyan $t \in T$ koordináta-indexre, amely terminális molekulának felel meg (hiszen az \mathbb{R}^N -beli vektorok koordinátái az adott molekuláknak és atomcsoportoknak felelnek meg), tehát $T \subseteq \{1, \dots, N\}$.

Futtassuk le algoritmusunkat a

$$H := \{\mathbf{V}_t : t \in T\} \cup \{\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_k\} \quad (2.9)$$

vektorhalmazra. Ekkor bármely

$$\sum_{j=1}^k \lambda_j \cdot \mathbf{X}_j + \sum_{t \in T} \mu_t \cdot \mathbf{V}_t = \mathbf{0} \quad (2.10)$$

(minimális) mechanizmusból megkaphatjuk a keresett

$$\mathbf{R} := - \sum_{t \in T} \mu_t \cdot \mathbf{V}_t \quad (2.11)$$

(minimális) közvetlen reakciót, ahol természetesen a kiinduló atomcsoportokat negatív, az előállított termékeket pedig pozitív előjel mutatja. Ekkor az

$$\mathcal{M} := \sum_{j=1}^k \lambda_j \cdot \mathbf{X}_j \quad (2.12)$$

mechanizmushoz pontosan az

$$\mathcal{R}(\mathcal{M}) = \mathbf{R} \quad (2.13)$$

közvetlen reakció tartozik. \square

Természetesen H -nak csak olyan $S \subseteq H$ szimplexeit kell figyelembe vennünk, amelyek *legalább egy új* \mathbf{V}_t vektort tartalmaznak. Mivel az algoritmus H részhalmazait lexikografikus sorrendben vizsgálja, és (2.9)-ben a \mathbf{V}_t vektorok a sor elején állnak, ez könnyen megoldható, a futásidő nem növekszik meg indokolatlanul.

A későbbi (iii) pontban egy másik, kétfázisú megoldást mutatunk az *összes* minimális közvetlen reakciót eredményező minimális mechanizmus megkeresésére, bár a most ismertetett módszer egy közvetlen, egyfázisú módszer erre a problémára. A 2.3. alfejezetben szigorú matematikai módszerekkel belátjuk, hogy a fenti, (i) és a későbbi (iii) pontokban adott módszerek *ugyanazt* az eredménylistát adják! Következésképpen a fenti, (2.9)-(2.12) egyenlőségeken alapuló módszer valóban megad *minden* minimális mechanizmust és reakciót.

Mint említettük, az algoritmus lexikografikus sorrendje miatt a futásidő optimális szinten tartható. Összehasonlításképpen több változat idejét is megmértük néhány esetben. A lehetőségek: a (2.9) bővítés után megkeresük az

$$\text{összes szimplexet } H \text{ -ban,} \quad (\text{VarAll})$$

vagy

$$\text{csak a } \{\mathbf{V}_j : j \in T\} \text{ vektorokat metsző szimplexeket,} \quad (\text{VarOnly})$$

vagy

$$\text{csak a } \{\mathbf{X}_i : i \leq k\} \text{ halmazbeli szimplexeket.} \quad (\text{VarOrig})$$

Ha $v(\)$ jelöli az egyes esetek futásidejét, akkor nyilván

$$\nu(\text{VarAll}) = \nu(\text{VarOnly}) + \nu(\text{VarOrig}), \quad (2.14)$$

amit a 7. "Számítógépes eredmények" fejezet 7.5.-7.7. Táblázataiban is megfigyelhetünk.

(ii) Megjegyzések

Nem feledkezhetünk meg az *anyagmegmaradás* törvényéről sem az \mathcal{M} mechanizmus illetve az eredményezett \mathbf{R} reakció (ld.(2.11)-(2.13)) kapcsán. *Sztöchiometriai* módon gondolkodva ez a követelmény automatikusan teljesül, hiszen az összes kiindulási adott reakció (vektor) kielégíti a törvényt, következésképpen lineáris kombinációjuk is.

Matematikai nyelven az

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{R} = \mathbf{0} \quad (2.15)$$

egyenlőség a követelmény, ahol a $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times N}$ mátrix "kódolja" az összes, a feladatban szereplő atomcsoport összegképletét, és $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^N$. A (2.15) összefüggés azonnal nem következik (2.11) -ből, de (2.10) alapján

$$\mathbf{R} = \sum_{j=1}^k \lambda_j \cdot \mathbf{X}_j, \quad (2.16)$$

és így a

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{X}_j = \mathbf{0} \quad (\forall j \leq k)$$

feltétel alapján nyilván

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{R} = \sum_{j=1}^k \lambda_j \mathbf{B} \cdot \mathbf{X}_j = \mathbf{0} .$$

(iii) Második megoldás

Most az összes minimális *közvetlen* mechanizmus és reakció megkeresésére egy alternatív lehetőséget vizsgálunk meg.

Először is keressük meg az összes lehetséges minimális reakciót a terminális atomcsoportok között, az 1.2. "*Mechanizmusok*" alfejezetben leírtak szerint. Ezután, mindegyik minimális reakcióhoz egyesével keressük meg a minimális *közvetlen* mechanizmusokat az eredeti (adott) reakciók felhasználásával - ennek technikai részleteit a következő, 2.2.2. "*Közvetlen mechanizmusok keresése*" alfejezetben ismertetjük. \square

Ez a módszer több, kisebb dimenziós feladat algoritmikus megoldását jelenti (és közöttük adatátvitelt), egyetlen nagyobb dimenziós feladat helyett. Ráadásul az első fázisban olyan minimális reakciókat is találhatunk, amelyeket az adott reakciók segítségével nem lehet megvalósítani, vagyis a második fázis eredmény nélkül fut le!

Konkrét futási eredményeket a 7. "*Számítógépes eredmények*" fejezet 7.5-7.7. Példában mutatunk.

A 7.5. Problémában eredetileg 7 reakcióvektor S_1, \dots, S_7 adott az $N = 10$ dimenziós térben, az 5 terminális atomcsoport 3 elemből épül fel. Az algoritmus első fázisa a terminális atomcsoportok közötti lehetséges d_1, \dots, d_4 reakciókat keresi meg (lásd (i)), ennek számítási részleteit a 7.5. Táblázat első "Terminális molekulák" oszlopában találhatjuk.

A második oszlopban láthatjuk a lehetséges mechanizmusok keresését, az eredeti reakciók között, másképpen a

$$\lambda_1 S_1 + \dots + \lambda_7 S_7 = \underline{0} \quad (2.17)$$

egyenlet megoldásait.

A harmadik és negyedik oszlopokban az új $\mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_5$ vektorokkal számolunk (i) szerint. A futásidők összehasonlítása végett az algoritmussal először az összes szimplexet megkerestettük, másodsor csak a legalább egyik \mathbf{V}_i vektort tartalmazókat. A 12 mechanizmust így 1.87 illetve 1.80 másodperc alatt megtaláltuk!

2.2.2. Közvetlen mechanizmusok keresése

Ebben az alfejezetben feltesszük, hogy ismert egy vagy több \mathbf{R} eredményreakció ("resulting/overall reaction"), és ehhez a reakcióhoz vezető minimális mechanizmusokat ("direct steady state mechanisms") 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. Mivel az összes \mathbf{R} -et eredményező mechanizmus (2.16)-ben az eltűnő

$$\sum_{j=1}^{k+1} \lambda_j \cdot \mathbf{X}_j = \mathbf{0} \quad (2.18)$$

lineáris kombinációval ([S84]-ben ciklus, "cycle") egyenértékű, így a keresett mechanizmus

$$\mathcal{M} := \frac{-1}{\lambda_{k+1}} \sum_{j=1}^k \lambda_j \cdot \mathbf{X}_j \quad (2.19)$$

hiszen az általa meghatározott végső reakció éppen $\mathcal{R}(\mathcal{M}) = \mathbf{R}$. \mathcal{M} nyilván minimális.

Egy apróság: mivel csak az \mathbf{X}_{k+1} vektort tartalmazó szimplexeket keressük (amit természetesen lexikografikusan a sor elejére teszünk), a 4. "A szimplexek száma \mathbb{R}^n -ben" fejezetben nyert felső becslést csak k vektorra

kell alkalmaznunk, vagyis a becült futásidő körülbelül

$$\frac{k-n}{k+1} = 1 - \frac{n+1}{k+1} \quad (2.20)$$

szorzótényezővel csökkenthető.

Az előző módosítás több adott $\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_t$ végső reakció esetén is használható. Ezen reakciókkal bővítjük a H halmazt, és csak a *pontosan egy* \mathbf{R}_i reakciót tartalmazó S szimplexeket tekintjük. Ez utóbbi feltétel ellenőrzése nem nehéz, hiszen az $\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_t$ reakciókat a H halmaz *elejére* helyezzük, és az algoritmus lexikografikus sorrendben vizsgálja a (kibővített) H halmazt.

Nagy (vagyis k -hoz mérhető) t esetén azonban meggondolandó, hogy az $\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_t$ reakciókkal *egyeseivel* bővítsük a H halmazt, és a módosított algoritmust *külön-külön* futtassuk le a $H \cup \{\mathbf{R}_i\}$ halmazokra.

2.2.3. 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 (2.18) és (2.19) -hoz hasonlóan kiolvasható, sőt eközben a megfelelő minimális mechanizmusokat is megkaptuk. További számításokra nincs szükségünk.

A 7. "Számítógépes eredmények" fejezetben különböző esetekre találunk példákat és futtatási eredményeket.

2.3. Az ekvivalencia bizonyítása

Ideje matematikai eszközökkel bebizonyítanunk az algoritmus 2.2.1. alfejezet (i) és (iii) pontjaiban leírt változatainak *ekvivalenciáját*, vagyis hogy a kapott közvetlen reakciók és minimális mechanizmusok halmaza mindkét változatban *ugyanaz*.

Legyen a kiindulási vektorhalmaz

$$\{\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_k\} \subseteq \mathbb{R}^n, \quad (2.21)$$

és legyen

$$\{\mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_t\} \subseteq \mathbb{R}^n$$

tetszőleges lineárisan független vektorhalmaz, $t \leq n$, végül legyen

$$H := \{\mathbf{X}_j : j \leq k\} \cup \{\mathbf{V}_i : i \leq t\} .$$

Most a H és a

$$\{\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_k\} \cup \{\mathbf{S}_R\} \quad (2.22)$$

halmazok szimplexeinek ekvivalenciáját (egymásból számolhatóságát) kell belátnunk "bizonyos" $\mathbf{S}_R \in \mathbb{R}^n$ vektorok esetén:

2.7. Tétel. Tetszőleges $S \subseteq H$,

$$S = \{\mathbf{X}_j : j \in K\} \cup \{\mathbf{V}_i : i \in T\} \quad (2.23)$$

($K \subseteq \{1, \dots, k\}$, $T \subseteq \{1, \dots, t\}$) szimplex és az

$$\mathbf{S}_R := - \sum_{j \in K} \mu_j \cdot \mathbf{X}_j = \sum_{i \in T} \lambda_i \cdot \mathbf{V}_i \quad (2.24)$$

vektor (μ_j, λ_i megfelelő valós számok) esetén az

$$S' := \{\mathbf{X}_j : j \in K\} \cup \{\mathbf{S}_R\} \quad (2.25)$$

halmaz szintén szimplex.

Bizonyítás. Mivel S minimálisan összefüggő, ezért a (2.24) együtthatók mind különböznek 0 -tól, így az 1.15. Segédállítás bizonyítja jelen tételünket.

■

A fenti Tétel szerint az (iii) változattal megtalált megoldásokat (szimplexeiket) az (i) változat is megtalálja. A 2.8. Tétel megfordítását alább igazoljuk, ami azonban nem igaz tetszőleges H halmazra és S' szimplexre: szükségünk van még az alábbi (*1*)-(*5*) feltételekre is.

(*1*)

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{X}_j = \mathbf{0} \quad (\forall j \leq k) \quad (2.26)$$

teljesül valamilyen rögzített (tetszőleges) $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mátrixra, de ezt nem követeljük meg a \mathbf{V}_i ($i \leq t$) vektorokra. Legyenek \mathbf{B} oszlopvektorai

$$\{\mathbf{b}_i : i \leq n\} \subseteq \mathbb{R}^m . \quad (2.27)$$

(*2*) A \mathbf{V}_i ($i \leq t$) vektorok éppen \mathbb{R}^n első t kanonikus bázisvektorai.

Ekkor persze

(*3*)

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{V}_i = \mathbf{b}_i \quad (\forall i \leq t) . \quad (2.28)$$

(*4*) Ha az \mathbf{S}_R vektor kielégíti (2.24)-t, akkor megköveteljük, hogy a

$$S' = \{\mathbf{X}_j : j \in K\} \cup \{\mathbf{S}_R\} \quad (2.29)$$

halmaz szimplex. (Ekkor a 2.2.1. alfejezet (iii) pontja szerint a

$$\{\mathbf{b}_i : i \in T\} \subseteq \mathbb{R}^m \quad (2.30)$$

halmaz szintén szimplex.)

Megemlítjük, hogy (2.24) alapján

$$\underline{\mathbf{0}} = \mathbf{B} \cdot \sum_{j \in K} \mu_j \mathbf{X}_j = \sum_{i \in T} \lambda_i \mathbf{B} \cdot \mathbf{V}_i = \sum_{i \in T} \lambda_i \mathbf{b}_i , \quad (2.31)$$

ami szerint $\{\mathbf{b}_i : i \in T\}$ független bármely, (2.24)-t kielégítő \mathbf{S}_R vektortól.

(*5*) A $T \subseteq \{1, \dots, t\}$ halmaz *minimális* abban az értelemben, hogy semmilyen $T' \subsetneq T$ és $L \subseteq \{1, \dots, k\}$ halmazokra nem teljesülhet az

$$\sum_{j \in L} \mu'_j \mathbf{X}_j = \sum_{i \in T} \lambda'_i \mathbf{V}_i \quad (2.32)$$

egyenlőség.

Most bebizonyítjuk a 2.7. Tétel megfordítását.

2.8. Tétel. *Legyen*

$$S' = \{\mathbf{X}_j : j \in K\} \cup \{\mathbf{S}_R\} \subseteq \mathbb{R}^n \quad (2.33)$$

*tetszőleges szimplex, ahol a \mathbf{S}_R vektor kielégíti (2.24)-at és az (*1*)-(*5*) feltételeket. Ekkor az*

$$S := \{\mathbf{X}_j : j \in K\} \cup \{\mathbf{V}_i : i \in T\} \quad (2.34)$$

halmaz szintén szimplex.

Bizonyítás. S nyilván összefüggő (2.24) miatt.

Bármely $i_0 \in T$ esetén az $S \setminus \{\mathbf{V}_{i_0}\}$ halmazok függetlenek (2.32) minimalitási tulajdonsága miatt, hiszen (*4*) alapján T nem üres.

Legyen most $j_0 \in K$ tetszőleges, rögzített, és tegyük fel indirekte, hogy a $S \setminus \{\mathbf{X}_{j_0}\}$ halmaz összefüggő. Legyen ekkor

$$\mathbf{S}_Q := - \sum_{j \in K} \mu'_j \mathbf{X}_j = \sum_{i \in T} \lambda'_i \mathbf{V}_i \quad (2.35)$$

valamely $\mu'_j, \lambda'_i \in \mathbb{R}$ számokra, persze $\mu'_{j_0} = 0$. (2.31) -hoz hasonlóan kapjuk, hogy

$$\mathbf{0} = -\mathbf{B} \cdot \sum_{j \in K} \mu'_j \mathbf{X}_j = \sum_{i \in T} \lambda'_i \mathbf{B} \cdot \mathbf{v}_i = \sum_{i \in T} \lambda'_i \mathbf{b}_i. \quad (2.36)$$

Mivel $\{b_i : i \in T\}$ szimplex, ezért a

$$\underline{\mathbf{0}} = \sum_{i \in T} \gamma_i \mathbf{b}_i \quad (2.37)$$

homogén lineáris egyenletrendszer megoldásai az 1.17. Tétel alapján egymással párhuzamosak. Így a (2.31) és (2.36) egyenlőségekben szereplő $[\lambda_i : i \in T]^T$ és $[\lambda'_i : i \in T]^T$ együttható vektorok párhuzamosak, amiből (2.24) és (2.35) alapján $S_Q \parallel S_R$ következik, vagyis $S_Q = \tau \cdot S_R$ valamely $\tau \in \mathbb{R}$ számra. Ez ellentmondás, (2.24) és (2.35) ismételt alkalmazásával, hiszen a feltétel szerint az $\{\mathbf{X}_j : j \in K\}$ vektorok lineárisan függetlenek, $\mu'_{j_0} = 0$ de $\mu_j \neq 0$ ha $j \neq j_0$ és $S_Q \neq \underline{\mathbf{0}}$. ■

A 2.8. Tétel biztosítja, hogy algoritmusunknak a 2.2.1. Alfejezet (i) pontjában leírt változata mindazon közvetlen minimális reakciót és mechanizmust ("minimal overall reaction" és "direct mechanism") megtalálja, amit a (iii) pontban leírt változat.

2.4. Más algoritmusok

Ebben az alfejezetben áttekintjük az irodalomban található főbb algoritmusokat, melyek reakciókkal vagy mechanizmusokkal kapcsolatos problémákat oldanak meg. Előrebocsájtjuk, hogy a kipróbált inputok esetén algoritmusunk és az irodalomban megadott eljárások végeredménye minden esetben megegyezett.

Aris-Mah [A65a], [A65b], [AM63] cikkei az elsők között foglalkoznak reakciók sztöchiometriájával. Független reakciók számát határozzák meg kevés számú kísérlet segítségével, amit a Gibbs-törvény segítségével ellenőriznek. A sztöchiometriai mátrixot nemszinguláris lineáris transzformációkkal számítják ki.

Kumar-Pethő [KP85] és **Chevalier-Melenk-Warnatz** [CMW90] művekben a Szerzők mindössze *egyetlen* példát és megoldását említenek, sem általános algoritmust sem nagyobb méretű feladatot nem ismertetnek.

Blickle-Novák [BN76] Adott atomokból felépülő atomcsoportok lehetséges szerkezeteit próbálják meg előállítani számítógép segítségével. **Blickle-Szederkényi** [BSz75] és [BSz76] lehetséges reakcióutakat és sztöchiometriai

egyenletek megoldását keresnek. Általános algoritmus helyett példákat mutatnak, kiválasztott generátorrendszer oszlopokkal (reaktánsok) állítják elő a többi oszlopvektort (termékek). A kapott vektorrendszerek nem feltétlenül alkotnak szimplexeket.

Oláh [O87] elsődleges célja annak megmutatása, hogy egy mechanizmus elemi reakciói gyakorlatilag függetlenek. Módszere a reakcióidők reciprokait vizsgálja, elsősorban kémiai és fizikai megfontolásokat használ.

Happel-Sellers-Otarod [HOS90] eljárása reakciómechanizmusokat állít elő, főleg elemi mátrixműveletek és lineáris egyenletek lineáris kombinációinak (elimináció) felhasználásával. Az egyenletrendszer redukálása után a megoldáshalmaz bázisait heurisztikusan határozza meg. Módszerük elsősorban elméleti, a számolás irányítása nem automatikus, kizárólag csak (kémiai) reakciómechanizmusok előállítására használható, szimplexek általános keresésére nem. A Szerzők nem ismertetik az algoritmus részleteit.

Bertók–Bárány-Fan-Friedler-Imreh [B99], [FBF99], [FBFS01], [B03], [FBF02], [BBIFF12] -ben gráfelméleti eszközökkel fogalmazzák meg a problémát: irányított páros gráf (*P-gráf* vagy *PNS-hálózat*) csúcs-osztályain megkülönböztetik az atomcsoportokat és a közöttük létrejövő reakciókat. Az irányított élek a reakciók lefolyását (reagensek és termékek) jelzik, a 7.1. ábrán látható módon. A minimális reakciók a gráfban a kezdő atomcsoportoktól a végtermékekig húzódó körmentes utak, melyeket a Szerzők lényegében lineáris programozás segítségével találnak meg. A 7. "Számítógépes eredmények" fejezet több példáját a fenti művekből vettük át, a fenti művek és jelen dolgozat futásidői nagyságrendben megegyeznek.

Amennyiben csak a minimális (körmentes) mechanizmusban résztvevő reakciók *halmazára* vagyunk kíváncsiak, a reakciók *sorrendjére* nem, akkor a jelen dolgozatban ismertetett lineáris algebrai modell és algoritmikus megoldás elegendő. A megoldásvektor pozitív és negatív komponensei a mechanizmus által megvalósított (végső) reakció be- és kimeneti atomcsoportjait és azok mennyiségét mutatják, *ezen* információ leolvasásához nincs szükségünk gráfokra.

Kovács-Vizvári-Riedel-Tóth [KVRT04] *kettő* külön-külön megoldandó feladattal foglalkozik: a lehetséges elemi reakciók előállítása atomcsoportokból, majd az adott bruttó reakció felbontása adott elemi reakciókra. Matematikailag és algoritmikus szempontból ez a két feladat (és megoldásuk is) persze nagyon hasonló, az első outputja adja a második inputját. Bár a cikk kizárólag egyetlen mechanizmussal (permanganate/oxalic acid) foglalkozik, általános, szisztematikus módszert próbál kidolgozni. Elsősorban egész értékű programozást és kémiai megfontolásokat alkalmaz.

Az első feladat megoldásához az n lehetséges molekula (atomcsoport) esetén felírja az összes, legegyszerűbb $M = 2n + \binom{n}{2}$ köztes reakció Diophantikus egyenletrendszerét, melynek \mathcal{M} megoldáshalmaza (lehetséges elemi reakciók) adja azt az egyenletrendszert a második feladathoz, melynek megoldásai a keresett felbontások. \mathcal{M} hatalmas mérete a probléma, ami kémiai megfontolásokkal csökkenthető. \mathcal{M} Hilbert bázisa segítségével a számítások részben automatizálhatók. A szerzők a MATHEMATICA programcsomagot használják.

A számítások gyorsítására az atomcsoportokat és a reakciókat *szintekbe* rendezik, amivel a programot minden iterációs lépésben eddig még nem használt reakciók alkalmazására kényszerítik, amivel az eddigiektől eltérő reakciók találhatók.

A számítások folyamán kémiai megfontolásokkal többször is csökkentik a feladat méretét, tehát nem tisztán matematikai algoritmusról van szó.

Papp-Vizvári [PV06] szintén reakciófelbontással foglalkozik, az előbb elemzett [KVRT04]-hez hasonlóan két problémával. A lineáris Diophantikus egyenletrendszerek³⁾ (LDE) elméletét használva (a Contejean-Devie algoritmus továbbfejlesztésével), lineáris programozási (LP) módszerekkel a (legújabb) MATHEMATICA programcsomag segítségével vizsgálják nem nagy rendszereket, ismert kémiai példákon kipróbálva. Az összes lehetséges reakció nagy száma itt is a probléma fő forrása.

Mivel az LDE megoldásaira, vagyis a felbontásokra jó elméleti felső *becsléseket* kapnak, így az LP -vel kapott valós megoldások segítségével megkaphatók az LDE egész megoldásai, nem csekély számítási nehézség árán.

Haus-Hemmecke-Pokutta [HHP09] az *állapot-gráfok* ($S \subset Z^n$ állapotok, $M \subset Z^n$ átmenetek) kontrakciójával (megfordítható reakciók) kapott **cluster-gráfok** segítségével közelítik meg a problémát. A gráf elemzésével, számítógép-algebrai programcsomagokkal átalakítják a problémát algebraivá (polinomgyűrű ideáljai), amit Gröbner bázis segítségével oldanak meg. A végső megoldás a <http://cocoa.dima.unige.it> címen található, kommutatív algebraira kifejlesztett programcsomag alkalmazásával kapható meg.

A fenti algoritmusok output-listái (természetesen) azonosak, vagy könnyen egymásba átalakíthatóak. Tapasztalataink szerint sem a (reális időn belül) megoldható feladatok méretei, sem a futásidők nem különböznek lényegesen saját eredményeink és az irodalomban ismertetett eredmények között.

Szederkényi-Hangos-Péni [Sz10] és [SzHP11] reakciók dinamikájával és hálózataival foglalkozik, az atomszerkezeten túl figyelembe veszi az anyagok

³⁾ Adott, tetszőleges lineáris Diophantikus egyenletrendszernek van-e gyöke, ami NP-teljes probléma.

koncentrációját is, a reakciók sebességét differenciálegyenletekkel írja le.

A [R14] honlapon nagyméretű adatbázisokat és egy általános, sokrétű programot kínálnak a szerzők, azonban az algoritmus részleteiről semmit sem tudtunk kideríteni.

A 6.3. alfejezetben gráfelméleti algoritmusokat is elemzünk.

2.5. Procedure `_Modify`

Most bemutatjuk a 2.1. alfejezetben ismertetett algoritmus főbb rutinjának teljes forráskódját.

```
meretx := M ;           { input vektorok száma }

PROCEDURE MODIFY;      { a vektorlista módosítása }

var hossz,elso,utolso : integer ;
label ret ;
begin
  hossz := length(szimplex) ;
  elso := ord(szimplex[1]) - 64 ;
  utolso := ord(szimplex[hossz-1]) - 64 ;
  if szimplex[hossz]=' ' then goto ret ;      { nem tesztelt }
  if (elso+hossz-2=utolso) and (utolso=meretx) and ('d' <> szimplex[hossz])
    then begin      { végsorozat }
      vege := true ;      { program vége }
      goto ret ;
    end ;
  if (elso+hossz-2=utolso) and (utolso=meretx) and ('d'=szimplex[hossz])
    then begin      { végsorozat }
      utolso := ord(szimplex[hossz-2]) + 1 ;      { új utolsó elem }
      sstr := copy(szimplex,1,hossz-3) + char(utolso) + ' ' ;
      szimplex := sstr ;
      goto ret ;
    end ;
  if utolso=meretx then      { elérte a végét }
    begin      { nem végsorozat }
      utolso := ord(szimplex[hossz-2]) + 1 ;      { új utolsó elem }
      sstr := copy(szimplex,1,hossz-3) ;
      szimplex := sstr + chr(utolso) + ' ' ;
      goto ret ;
```

```
    end ;  
    if szimplex[hossz]='i' then      { független => bővítés }  
        begin  
            szimplex[hossz] := chr(utolso+64+1) ;  
            szimplex := szimplex + ' ' ;  
            goto ret ;  
        end ;  
    if szimplex[hossz]='d' then      { összefüggő => új utolsó elem }  
        begin  
            szimplex[hossz-1] := char(ord(szimplex[hossz-1])+1) ;  
            szimplex[hossz] := ' ' ;  
            goto ret ;  
        end ;  
    if szimplex[hossz]='s' then      { szimplex => végét módosítja }  
        begin  
            szimplex[hossz-1] := char(ord(szimplex[hossz-1])+1); { végét növeli }  
            goto ret ;  
        end ;  
ret : ;  
end ;      { proc.modify }
```

3. fejezet

Lineáris egyenletrendszerek vizsgálata

Lineáris egyenletrendszerekkel szinte minden tudományterületen találkozunk. Gyakorlati alkalmazásoknál (mind a homogén, mind az inhomogén egyenletrendszereknél) legtöbbször az "alapsmegoldásokat" részesítjük előnyben: amikor is az együtthatómátrix lehető legkevesebb oszlopvektorát használva érjük el (lineáris kombinációval) a $\underline{0}$ illetve a \underline{b} vektort.

Jelen fejezetben a (3.1) és (3.2) lineáris egyenletrendszerek *minimális megoldásaival* foglalkozunk, ami alatt azt értjük, hogy egy \underline{x} megoldásvektor az A együtthatómátrix lehető legkevesebb oszlopvektorát használja, lásd 3.3. Definíció. (Az általunk vizsgált *minimális megoldások* és a közismert *bázismegoldások* közötti kapcsolatot és különbségeket a 3.18. Megjegyzésben részletezzük.)

A minimális megoldások halmazának szerkezetét a 3.6. és a 3.17.-3.22. Állításokban vizsgáljuk, a minimális és az összes megoldás közötti kapcsolatot pedig a 3.9. Állításban és a 3.10., 3.23. Tételekben. A 3.12. és 3.24. pontokban megfogalmazott problémákra a 3.13. és 3.25. Tételekben adunk választ, mely szerint elegendő csak a minimális megoldásokat megkeresnünk, ezekből (3.1) illetve (3.2) minden megoldása lineáris kombinációval megkapható. Az 1. "Alkalmazások és matematikai alapok" fejezetben említett *sztoichiometriai* alkalmazások nyelvén ez például azt jelenti, hogy *minimális* reakciók lineáris kombinációiként már minden reakció megkapható.

Mivel a 2. "Egy algoritmus és változatai" fejezetben ismertetett algoritmusunk az összes minimális reakciót (szimplexet) megtalálja polinomiális idő alatt, amely reakciók a jelen fejezet eredményei szerint az összes reakciót generálják, így megnyugtató választ tudunk adni például a [HS83], [HOS90], [FBF99], [B99] közlemények alapvető kérdésére.

A jelen fejezetben ismertetett eredményeink [2012a]-ban jelentek meg és

nagymértékben általánosítják Pethő Árpád [P67m] vizsgálatait.

3.1. Alapvető összefüggések

3.1. Jelölés. Az

$$A \cdot \underline{x} = \underline{b} \quad (3.1)$$

és

$$A \cdot \underline{x} = \underline{0} \quad (3.2)$$

alakú lineáris egyenletrendszereket, és megoldáshalmazait:

$$M_{A,\underline{b}} := \{\underline{x} \in \mathbb{R}^m : A \cdot \underline{x} = \underline{b}\} \quad (3.3)$$

illetve

$$M_{A,\underline{0}} := \{\underline{x} \in \mathbb{R}^m : A \cdot \underline{x} = \underline{0}\} . \quad (3.4)$$

vizsgáljuk, ahol $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $\underline{b} \in \mathbb{R}^n$ adottak, $\underline{x} \in \mathbb{R}^m$ a keresett megoldásvektorok. Nyilván csak az $M_{A,\underline{0}} \neq \{\underline{0}\}$ és $|M_{A,\underline{b}}| > 1$ esetek érdekesek számunkra. Az A együtthatómátrix oszlopvektorait jelölje $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_m \in \mathbb{R}^n$, vagyis

$$A = [\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_m] . \quad (3.5)$$

□

Alábbi feltételeink nem csak matematikai egyszerűsítéseket szolgálnak, például a sztöchiometriában valódi jelentéssel is bírnak:

3.2. Feltétel. Az egész fejezetben feltesszük, hogy

i) A -ban nincsenek párhuzamos oszlopvektorok, speciálisan

ii) A egyik oszlopvektora sem $\underline{0}$.

Az inhomogén ($\underline{b} \neq \underline{0}$) esetben még feltesszük azt is, hogy

iii) A -ban nincs \underline{b} -vel párhuzamos oszlopvektor. □

Az A együtthatómátrixnak azon oszlopvektorait szeretnénk vizsgálni, amelyek egy-egy \underline{x} megoldás(vektor) során ténylegesen részt vesznek a (3.1) lineáris kombinációban.

3.3. Definíció. (i) Tetszőleges $\underline{x} \in \mathbb{R}^m$ vektor esetén legyen

$$\text{supp}(\underline{x}) := \{i \leq m : x_i \neq 0\} \quad (3.6)$$

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

(ii) Vektorok tetszőleges (véges vagy végtelen) $M \subseteq \mathbb{R}^m$ halmaza esetén a $\underline{z} \in M$ nemnulla vektornak M -re nézve **minimális tartója** van, ha a $\text{supp}(\underline{z})$ halmaz M elemeinek tartóhalmazai között minimális.

Másképpen: ha nincs olyan $\underline{y} \in M$ nemnulla vektor, amelyre $\text{supp}(\underline{y}) \subsetneq \text{supp}(\underline{z})$ teljesülne.

Az ilyen $\underline{z} \in M$ vektort röviden (M -re) **minimális**-nak hívunk.

(iii) Vektorok tetszőleges $M \subseteq \mathbb{R}^m$ halmaza esetén jelölje M^{\min} az (M -re) minimális vektorok halmazát, vagyis legyen

$$M^{\min} := \{\underline{z} \in M : \underline{z} \text{ minimális}\} . \quad (3.7)$$

(iv) Természetesen $M_{A,\underline{b}}^{\min}$ és $M_{A,\underline{0}}^{\min}$ a (3.1) illetve (3.2) egyenletrendszerek megoldáshalmazainak minimális elemeinek halmazait jelölik. $M_{A,\underline{b}}^{\min}$ és $M_{A,\underline{0}}^{\min}$ elemeit a (3.1) illetve (3.2) egyenletrendszerek **minimális megoldásainak** nevezzük. \square

A fenti minimális- és a lineáris programozásban fontos bázismegoldások közötti kapcsolatot és különbséget a 3.18. Megjegyzésben részletezzük.

A (3.1) és (3.2) egyenletrendszerek \underline{x} megoldásvektorai az A együtthatómátrixnak nyilván csak a $\text{supp}(\underline{x})$ -hoz "tartozó" oszlopvektorait használják. Ezt az összefüggést a 3.7. Definícióban és a 3.9. Állításban fogalmazzuk meg pontosabban.

Az alábbi egyszerű észrevételeket a későbbiekben sokszor használjuk.

3.4. Állítás. A 3.2. Feltétel három pontjára az alábbi ekvivalens tulajdonságok teljesülnek.

A (3.2) homogén egyenlet esetében:

$$3.2(i) \iff |\text{supp}(\underline{x})| \geq 3 \text{ ha } \underline{x} \in M_{A,\underline{0}} \setminus \{\underline{0}\} ,$$

$$3.2(ii) \iff |\text{supp}(\underline{x})| \geq 2 \text{ ha } \underline{x} \in M_{A,\underline{0}} \setminus \{\underline{0}\} ,$$

a (3.1) ($\underline{b} \neq \underline{0}$) inhomogén egyenlet esetében:

$$3.2(iii) \iff |\text{supp}(\underline{x})| \geq 2 \text{ ha } \underline{x} \in M_{A,\underline{b}} . \quad \square$$

3.5. Állítás. A (3.2) homogén egyenlet bármely nemtriviális $\underline{x} \in M_{A,\underline{0}}$ megoldásához létezik egy minimális $\underline{z} \in M_{A,\underline{0}}^{\min}$ megoldás, amelyre

$$\text{supp}(\underline{z}) \subseteq \text{supp}(\underline{x}) . \quad (3.8)$$

Ugyanez igaz a (3.1) egyenlet bármely $\underline{x} \in M_{A,\underline{b}}$ és megfelelő $\underline{z} \in M_{A,\underline{b}}^{\min}$ megoldásaira is. \square

3.6. Állítás. Bármely $M \subseteq \mathbb{R}^m$ vektorhalmaz esetén a $\text{supp}(\underline{z}) \subseteq \{1, 2, \dots, m\}$ halmazok, ahol $\underline{z} \in M^{\min}$ minimális, **Sperner rendszert** alkotnak: bármely (különböző) $\underline{z}_1, \underline{z}_2 \in M^{\min}$ minimális vektorokra

$$\text{supp}(\underline{z}_1) \not\subseteq \text{supp}(\underline{z}_2) \text{ és } \text{supp}(\underline{z}_2) \not\subseteq \text{supp}(\underline{z}_1) . \quad \square \quad (3.9)$$

Az \underline{x} megoldásvektor nemnulla komponenseit és az A együtthatómátrix ezeknek megfelelő oszlopvektorait akarjuk vizsgálni. A vizsgálatok egyszerűsítése érdekében még egy fogalmat és jelölést vezetünk be.

3.7. Definíció. Tetszőleges $\underline{x} \in \mathbb{R}^m$ vektor, $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ mátrix és $H \subseteq \{1, \dots, m\}$ indexhalmaz esetén \underline{x} és A **megszorítása** a H halmazra:

$$\underline{x} |_H := [x_i : i \in H] \quad (3.10)$$

és

$$A |_H := [a_i : i \in H] , \quad (3.11)$$

tehát $\underline{x} |_H \in \mathbb{R}^h$ és $A |_H \in \mathbb{R}^{n \times h}$ ahol $h = |H|$. \square

Nyilvánvalóan

3.8. Állítás. Tetszőleges rögzített $\underline{x} \in \mathbb{R}^m$ esetén a

$$\begin{aligned} \mu_{\underline{x}} : \mathcal{P}\{1, \dots, m\} &\longrightarrow \mathbb{R}^n \\ \mu_{\underline{x}} : H &\longmapsto (A |_H) \cdot (\underline{x} |_H) \end{aligned} \quad (3.12)$$

halmazfüggvény ($H \subseteq \{1, \dots, m\}$) *additív*. \square

$\underline{x} |_{\text{supp}(\underline{x})}$ és \underline{x} között a következő megfeleltetés létezik:

3.9. Állítás. Ha $\underline{x} \in \mathbb{R}^m$ megoldása az $A \cdot \underline{x} = \underline{b}$ egyenletnek, akkor $\underline{x} |_{\text{supp}(\underline{x})}$ kielégíti az

$$(A |_{\text{supp}(\underline{x})}) \cdot (\underline{x} |_{\text{supp}(\underline{x})}) = \underline{b} \quad (3.13)$$

egyenletet.

Másrészt, ha $H \subseteq \{1, \dots, m\}$ tetszőleges indexhalmaz és $\underline{y} \in \mathbb{R}^h$ ($h = |H|$) megoldása az

$$(A |_H) \cdot \underline{y} = \underline{b} \quad (3.14)$$

egyenletnek, akkor van legalább egy olyan $\underline{x} \in \mathbb{R}^m$ megoldása az $A \cdot \underline{x} = \underline{b}$ (3.1) egyenletnek, amelyre

$$\underline{y} = \underline{x} |_H . \quad (3.15)$$

(Többek között $\text{supp}(\underline{x}) \subseteq H$ feltehető, de általában nem szükséges.) \square

Vegyük észre, hogy a (3.15) egyenlőséget kielégítő \underline{x} általában nem egyértelmű.

A fenti 3.9. Állítást később általánosítjuk homogén egyenletrendszerre a 3.10. Tételben, inhomogén egyenletrendszerre a 3.23. Tételben. Megjegyezzük, hogy ezek az eredmények nagyon különbözőek.

3.2. Homogén egyenletrendszerek

A 3.9. Állítás általánosítása homogén egyenletrendszerekre a következő.

3.10. Tétel. Legyen $\underline{z} \in M_{A,0}^{\min}$ egy tetszőleges minimális megoldása a (3.2) egyenletnek, $\underline{z} \neq \underline{0}$. Ekkor az

$$(A|_{\text{supp}(\underline{z})}) \cdot \underline{y} = \underline{0} \quad (3.16)$$

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

$$\underline{y} = \lambda \cdot \underline{z}|_{\text{supp}(\underline{z})} \quad (3.17)$$

ahol $\lambda \in \mathbb{R}$ tetszőleges.

Bizonyítás. Nyilván $\underline{y}_1 := \underline{z}|_{\text{supp}(\underline{z})} \in \mathbb{R}^h$ megoldása (3.16)-nek, és \underline{y}_1 -nek egyetlen komponense sem 0.

Tegyük fel most, hogy $\underline{y}_2 \in \mathbb{R}^h$ egy olyan nemtriviális megoldása a (3.16) egyenletnek, amely $\lambda \cdot \underline{z}$ -től *különbözik* bármely $\lambda \in \mathbb{R}$ szám esetén. Mivel $\underline{y}_2 \neq \underline{0}$, ezért \underline{y}_2 -nek valamelyik i -edik komponense nemnulla, $i \in \text{supp}(\underline{z})$ feltehető. Ekkor találunk olyan $\nu \in \mathbb{R}$ számot, amelyre a

$$\underline{z}_2 := \underline{y}_1 - \nu \cdot \underline{y}_2$$

vektor i -edik komponense *nulla*.

Ha $\underline{z}_2 = \underline{0}$, akkor $\underline{y}_1 \parallel \underline{y}_2$, vagyis (3.17) teljesül.

Ha $\underline{z}_2 \neq \underline{0}$, akkor $\underline{z}_2 \in \mathbb{R}^h$ és $\text{supp}(\underline{z}_2) \subsetneq \text{supp}(\underline{z})$, ami ellentmondás, hiszen \underline{z} minimális. ■

3.11. Megjegyzés. Homogén egyenletrendszerek esetében az \underline{x} és $\lambda \underline{x}$ vektorokat **azonosaknak tekinthetjük** az összes $\lambda \in \mathbb{R}$ szám esetén.

Vizsgálatainkban azonban nem említjük a $\underline{0} \in \mathbb{R}^m$ vektort (3.2) megoldásai között.

A 3.10. Tétel szerint a (3.16) egyenlet megoldása **egyértelmű** (skalárszorozó erejéig), amennyiben $\underline{z} \in M_{A,0}^{\min}$ minimális. □

Homogén egyenletrendszerekre megfogalmazva kérdésünk a következő:

3.12. Probléma. A homogén $A \cdot \underline{x} = \underline{0}$ egyenletrendszer összes megoldását generálják-e a minimális megoldások, azaz $M_{A,0}^{\min} \subset \mathbb{R}^m$ generálja-e az $M_{A,0}$ alteret?

Inhomogén egyenletrendszerekre a hasonló kérdés pontos megfogalmazása a 3.24. Problémában olvasható.

Az alábbi Tétel megnyugtató választ ad a 3.12. Problémára.

3.13. Tétel. *Igen, $M_{A,0}^{\min}$ generálja az $M_{A,0}$ alteret, tetszőleges $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ mátrix esetén.*

Bizonyítás. Azt kell megmutatnunk, hogy tetszőleges $\underline{x} \in M_{A,0}$ megoldásvektor előáll $M_{A,0}^{\min}$ -beli vektorok lineáris kombinációjaként.

Teljes indukcióval haladunk $\text{supp}(\underline{x})$ mérete alapján, $\underline{x} \neq \underline{0}$ nyilván feltehető. Az $\underline{x} \in M_{A,0}^{\min}$ eset nyilvánvaló.

Legyen $\underline{x} \notin M_{A,0}^{\min}$ tetszőleges, és válasszunk egy olyan $\underline{z} \in M_{A,0}^{\min}$ minimális vektort, amelyre

$$\emptyset \neq \text{supp}(\underline{z}) \subsetneq \text{supp}(\underline{x}) \quad (3.18)$$

teljesül. Tetszőleges $k \in \text{supp}(\underline{z})$ index esetén az

$$\underline{x}' := \underline{x} - \frac{x_k}{z_k} \cdot \underline{z} \quad (3.19)$$

vektor is megoldása (3.2) -nak, és $\text{supp}(\underline{z})$ definíciója alapján $z_k \neq 0$, $x'_k = 0$ (azaz $k \notin \text{supp}(\underline{x}')$), ezért

$$\text{supp}(\underline{x}') \subsetneq \text{supp}(\underline{x}) . \quad (3.20)$$

Továbbá $\underline{x}' \neq \underline{0}$, hiszen $\underline{x}' = \underline{0}$ esetén $\underline{x} \parallel \underline{z}$ lenne, de $\underline{x} \notin M_{A,0}^{\min}$.

Az indukciós feltevés miatt tudjuk, hogy \underline{x}' lineáris kombinációja $M_{A,0}^{\min}$ -beli vektoroknak, így (3.19) és $\underline{z} \in M_{A,0}^{\min}$ miatt \underline{x} is előáll $M_{A,0}^{\min}$ -beli vektorok lineáris kombinációjaként. ■

3.14. Megjegyzés. $M_{A,0}^{\min}$ nem párhuzamos elemei lehetnek lineárisan összefüggőek. Hasznos lenne $M_{A,0}^{\min}$ egy bázisát felderíteni, erre a kérdésre még nem kerestünk választ. □

A 3.13. Tétel eredményéből mellékesen az alábbi összefüggés is azonnal következik.

3.15. Következmény. *A (3.2) egyenletrendszer bármely $\underline{x} \in M_{A,0}$ megoldásának tartóhalmazát lefedik a minimális megoldások (tartóhalmazai):*

$$\text{supp}(\underline{x}) \subseteq \bigcup \{ \text{supp}(\underline{z}) : \underline{z} \in M_{A,0}^{\min} \} . \quad \square \quad (3.21)$$

A (3.21) tartalmazás a 3.5. Állításból még nem következik.

Általában azonban az A együtthatómátrixnak *nem mindegyik* oszlopvektora vesz részt *valamely* megoldásban. A sztöchiometria nyelvén ez például azt jelenti, hogy molekulák adott halmazában lehetnek olyanok is, melyek egyetlen reakcióban sem vesznek részt.

A következő állításokban ezt a problémát vizsgáljuk meg kicsit részletesebben.

3.16. Állítás. *Tetszőleges $i \leq m$ indexre az együtthatómátrix \underline{a}_i oszlopvektora pontosan akkor vesz részt valamely $\underline{x} \in M_{A,0}$ megoldásban (vagyis $i \in \text{supp}(\underline{x})$), ha \underline{a}_i lineárisan függ a többi $\{\underline{a}_1, \dots, \underline{a}_{i-1}, \underline{a}_{i+1}, \dots, \underline{a}_m\}$ oszlopvektortól.*

Bizonyítás. Tetszőleges $\underline{x} \in M_{A,0}$ megoldásvektorra és $i \leq m$ indexre az $A\underline{x} = \underline{0}$ egyenlőség ekvivalens az

$$x_i \cdot \underline{a}_i = - \sum_{j \neq i} x_j \cdot \underline{a}_j \quad (3.22)$$

egyenlettel. Az $i \in \text{supp}(\underline{x})$ feltevés jelentése $x_i \neq 0$, ami így ekvivalens azal, hogy \underline{a}_i lineárisan függ a $\{\underline{a}_1, \dots, \underline{a}_{i-1}, \underline{a}_{i+1}, \dots, \underline{a}_m\}$ vektoroktól, hiszen a 3.2.(ii) Feltétel szerint $\underline{a}_i \neq \underline{0}$. ■

Most vizsgáljuk meg a minimális megoldások *belső* szerkezetét.

3.17. Állítás. *Legyen $\underline{z} \in M_{A,0}^{\min}$, 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*

$$S_{\underline{z}} := \{\underline{a}_i : i \in \text{supp}(\underline{z})\} \subset \mathbb{R}^n \quad (3.23)$$

minimális (lineárisan) összefüggő halmaz, vagyis (algebrai) szimplex.

Bizonyítás. $S_{\underline{z}}$ lineárisan összefüggő $A \cdot \underline{z} = \underline{0}$ miatt. \underline{z} minimalitása miatt $S_{\underline{z}}$ egyetlen $T \subsetneq S_{\underline{z}}$ valódi részhalmaza sem lehet összefüggő. ■

A fenti összefüggés szerint a szimplexek "természetes" módon lépnek fel homogén lineáris egyenletrendszeréknél, pontosabban a minimális megoldásokkal azonosíthatók!

A szimplexeket az 1.7. Definícióban definiáltuk, alaptulajdonságaikat az 1.5. "Matematikai definíciók és elemi összefüggések" alfejezetben ismertettük. Mielőtt részletesen megvizsgálánánk a szimplexek és a minimális megoldások kapcsolatát, előtte tekintsük át a közismert **bázismegoldások** és a 3.3. Definícióban bevezetett **minimális megoldások** közötti különbséget!

3.18. Megjegyzés. Inhomogén (3.1) egyenletrendszeréknél 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 (3.2) egyenletrendszeréknél egy bázismegoldás mindig tartalmazza A -nak egy bázisát plusz A -nak pontosan egy további (oszlop)vektorát ([P67m]). 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

Az 1.17. Tétel segítségével az 3.9. Állítás a következőképpen általánosítható $M_{A,0}$ minimális elemeire. (Lásd még a 3.11. Megjegyzést is.)

3.19. Következmény. Tetszőleges $\underline{z}, \underline{y} \in M_{A,0}^{\min}$ minimális megoldásokra

$$\text{supp}(\underline{z}) = \text{supp}(\underline{y}) \iff \underline{z} \parallel \underline{y} \quad , \quad (3.24)$$

tehát a minimális megoldások tartóhalmazaikon egyértelműek (skalárszorostól eltekintve).

Bizonyítás. Az állítás következik a 3.17. Állításból és a 3.10. és 1.17. Tételből. \blacksquare

A fenti eredményt inhomogén egyenletrendszerekre a 3.23. Tételben terjesztjük ki.

Az 1.17. Tételből egyszerűen következik:

3.20. Tétel. Tetszőleges $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $A = [\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_m]$ mátrix (ld.(3.5)) 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

$$S = \{\underline{a}_i : i \in \text{supp}(\underline{x})\} \quad . \quad (3.25)$$

\square

A 3.10. Tétel szerint az $A\underline{x} = \underline{0}$ homogén lineáris egyenletrendszer \underline{x} minimális megoldása skalárszoró erejéig **egyértelmű** ha $\text{supp}(\underline{x})$ rögzített ((3.25) alapján).

3.21. Következmény. A 3.17. Állítás és a fenti 3.20. Tétel alapján egy-egy értelmű megfeleltetés van egy rögzített $\{\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_m\}$ halmazban található algebrai **szimplexek** és az $A\underline{x} = \underline{0}$ homogén lineáris egyenletrendszerek ($A = [\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_m]$) **minimális megoldásai** között, vagyis a következőkben azonosíthatjuk őket. \square

Az említett egy-egy értelmű megfeleltetés alapján az 1. Fejezet 1.18. Állításának átfogalmazásával könnyen megkapható az alábbi összefüggés:

3.22. Állítás. Ha $z_1, z_2 \in M_{A,0}^{\min}$ olyan minimális megoldásai az $A \cdot \underline{x} = \underline{0}$ egyenletnek, amelyekre

$$\text{supp}(z_1) \cap \text{supp}(z_2) \neq \emptyset, \quad (3.26)$$

akkor tetszőleges $j \in \text{supp}(z_1) \cap \text{supp}(z_2)$ indexre található egy olyan (szintén) minimális $z_3 \in M_{A,0}^{\min}$ megoldás, amelyre

$$j \notin \text{supp}(z_3) \subseteq \text{supp}(z_1) \cap \text{supp}(z_2). \quad \square \quad (3.27)$$

3.3. Inhomogén egyenletrendszerek

Először a 3.9. Állítást és a 3.19. Következményt terjesztjük ki inhomogén egyenletrendszerekre.

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

$$(A|_H) \cdot \underline{y} = \underline{b} \quad (3.28)$$

egyenletrendszer egyetlen megoldása $\underline{y} = \underline{z}|_H$.

Bizonyítás. Legyen $\underline{y}_1 := \underline{z}|_H \in \mathbb{R}^h$ ($h = |H|$), nyilván \underline{y}_1 -nek egyetlen koordinátája sem $\bar{0}$. Legyen továbbá (3.28) egy másik megoldása $\underline{y}_2 \in \mathbb{R}^h$, melynek például az i_0 -adik koordinátája ($i_0 \in \text{supp}(z)$) különbözik \underline{y}_1 ugyanezen koordinátájától. z minimalitása miatt \underline{y}_2 -nek sem lehet 0 koordinátája. Bármely $\alpha \in \mathbb{R}$ számra a

$$\underline{v} = \alpha \cdot \underline{y}_1 + (1 - \alpha) \cdot \underline{y}_2 \quad (3.29)$$

vektorok kielégítik (3.28)-et, így a fentiek miatt egy megfelelő α számra \underline{v} -nek az i_0 -adik koordinátája 0, de ekkor $\text{supp}(\underline{v}) \subsetneq \text{supp}(z)$, ami ellentmond z minimalitásának. \blacksquare

A 3.12. Probléma (egyik) általánosítása a következő.

3.24. Probléma. Az $A \cdot \underline{x} = \underline{b}$ inhomogén egyenletrendszer összes megoldása előállítható-e minimális megoldásokból, azaz $M_{A,\underline{b}}^{\min}$ generálja-e $M_{A,\underline{b}}$ -t?

A választ az alábbi eredmény adja meg:

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

$$\underline{x} = \sum_{i=1}^I \alpha_i \underline{z}_i + \underline{y} \quad \text{ahol} \quad \sum_{i=1}^I \alpha_i = 1 \quad (3.30)$$

és $\underline{z}_i \in M_{A,\underline{b}}^{\min}$ minimális megoldások ($i = 1, \dots, I$, $\alpha_i \in \mathbb{R}$) és $\underline{y} \in M_{A,\underline{0}} \cup \{\underline{0}\}$.

Bizonyítás. Legyen $\underline{x} \in M_{A,\underline{b}}$ egy megoldásvektor. A (3.30) összefüggést $\text{supp}(\underline{x})$ mérete szerinti indukcióval igazoljuk. $\underline{x} \neq \underline{0}$ nyilván feltehető.

Az $\underline{x} \in M_{A,\underline{b}}^{\min}$ eset nyilvánvaló.

Az $\underline{x} \notin M_{A,\underline{b}}^{\min}$ esetben válasszunk egy olyan $\underline{z} \in M_{A,\underline{b}}^{\min}$ minimális vektort, amelyre

$$\text{supp}(\underline{z}) \subsetneq \text{supp}(\underline{x}) . \quad (3.31)$$

Ilyen \underline{z} biztosan található, hiszen \underline{x} nem minimális és $\text{supp}(\underline{x}) \neq \emptyset$.

a) eset: Ha van olyan $\underline{z} \in M_{A,\underline{b}}^{\min}$, amelynek valamely k -edik koordinátája ($k \in \text{supp}(\underline{z})$) különbözik \underline{x} ugyanezen koordinátájától, $z_k \neq x_k$, és $z_k \neq 0$, akkor tekintsük az

$$\underline{x}' := \left(\underline{x} - \frac{x_k}{z_k} \cdot \underline{z} \right) \cdot \frac{1}{1 - \frac{x_k}{z_k}} = (\underline{x} - \beta \underline{z}) \cdot \frac{1}{1 - \beta} \quad (3.32)$$

vektort. \underline{x}' affin lineáris kombinációja \underline{x} és \underline{z} -nek, így megoldása az $A \cdot \underline{x} = \underline{b}$ egyenletrendszernek. Mivel $x'_k = 0$ (azaz $k \notin \text{supp}(\underline{x}')$), ezért

$$\text{supp}(\underline{x}') \subsetneq \text{supp}(\underline{x}) , \quad (3.33)$$

továbbá $\underline{x}' \neq \underline{0}$ (3.31) alapján. Az indukciós feltevés alapján \underline{x}' is affin lineáris kombinációja $M_{A,\underline{b}}^{\min}$ -beli vektoroknak plusz $\underline{y}' \in M_{A,\underline{0}} \cup \{\underline{0}\}$:

$$\underline{x}' = \sum_{i=1}^{I'} \alpha'_i \underline{z}'_i + \underline{y}' \quad \text{ahol} \quad \sum_{i=1}^{I'} \alpha'_i = 1 . \quad (3.34)$$

(3.32) és (3.34) alapján

$$\underline{x} = (1 - \beta) \underline{x}' + \beta \underline{z} = (1 - \beta) \sum_{i=1}^{I'} \alpha'_i \underline{z}'_i + \beta \underline{z} + (1 - \beta) \underline{y}' \quad (3.35)$$

ami szintén affin lineáris kombinációja $M_{A,\underline{b}}^{\min}$ -beli vektoroknak plusz egy $M_{A,\underline{0}} \cup \{\underline{0}\}$ -beli vektornak.

b) eset: Ha

$$\underline{x}|_{\text{supp}(\underline{z})} = \underline{z}|_{\text{supp}(\underline{z})} \quad (3.36)$$

minden olyan $\underline{z} \in M_{A,\underline{b}}^{\min}$ vektorra, ami kielégíti (3.31)-t, akkor rögzítsünk egy ilyen (tetszőleges) $\underline{z} \in M_{A,\underline{b}}^{\min}$ vektort. (3.36) és a 3.8. Állítás alapján

$$A|_{\text{supp}(\underline{z})} \cdot \underline{x}|_{\text{supp}(\underline{z})} = A|_{\text{supp}(\underline{z})} \cdot \underline{z}|_{\text{supp}(\underline{z})} = \underline{b} \quad (3.37)$$

ahonnan

$$(A|_{\text{supp}(\underline{x}) \setminus \text{supp}(\underline{z})}) \cdot (\underline{x}|_{\text{supp}(\underline{x}) \setminus \text{supp}(\underline{z})}) = \underline{0} . \quad (3.38)$$

Ha

$$\underline{y} := \underline{x}|_{\text{supp}(\underline{x}) \setminus \text{supp}(\underline{z})} , \quad (3.39)$$

akkor $\underline{y} \in M_{A,\underline{0}} \cup \{\underline{0}\}$, és

$$\text{supp}(\underline{z}) \cap \text{supp}(\underline{y}) = \emptyset \quad (3.40)$$

miatt $\underline{x} = \underline{z} + \underline{y}$ kielégíti a (3.30) feltételt, ami bizonyítja tételünket. ■

A 3.25. Tétel általánosítja a jólismert

$$M_{A,\underline{b}} = \underline{z} + M_{A,\underline{0}} \quad (3.41)$$

összefüggést *minimális* megoldásvektorokra. Továbbá, a 3.13. Tétellel együtt kapjuk:

3.26. Következmény. $M_{A,\underline{b}}^{\min} \cup M_{A,\underline{0}}^{\min}$ generálja $M_{A,\underline{b}}$ -t. □

4. fejezet

A szimplexek száma \mathbb{R}^n -ben

Bármilyen algoritmikus megoldás (számítógépes futtatás) előtt nem felelkezhetünk meg a lehetséges output, futásidő becsléséről, ezért jelen fejezetben a következő kérdéssel foglalkozunk:

4.1. Probléma. *Adott $n, m \in \mathbb{N}$ esetén az n -dimenziós $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$, $|\mathcal{H}| = m$ -elemű vektorhalmazok hány $\mathcal{S} \subset \mathcal{H}$ szimplexet tartalmazhatnak - legalább és legfeljebb - és milyen szerkezetűek a szélsőséges (extremális) \mathcal{H} halmazok, vagyis amelyek a legtöbb illetve legkevesebb \mathcal{S} szimplexet tartalmazzák? Természetesen \mathcal{H} teljes dimenziós, vagyis kifeszíti \mathbb{R}^n -et (és így $m \geq n$).*

Másképpen: a minimális reakciók számát próbáljuk megbecsülni alulról és felülről, ha csak a résztvevő vegyületek száma (m) és az azokban szereplő atomok száma (n) ismert.

Hangsúlyozzuk, hogy elsősorban a szélsőséges \mathcal{H} halmazok szerkezetét igyekszünk felderíteni, a tartalmazott szimplexek száma ennek már csak következménye.

A következő jelöléseket használjuk:

4.2. Jelölés. (i) $\text{simp}(\mathcal{H})$ jelöli a $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$ vektorhalmazban levő $\mathcal{S} \subset \mathcal{H}$ szimplexek számát.

(ii) Tetszőleges $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}^n$ vektorhalmaz esetén $[\mathcal{S}]$ jelöli az \mathcal{S} által **kifeszített alteret** ("algebrai lezárt" vagy "lineáris burok").

(iii) A **kis szimplexek** pontosan kettő (párhuzamos) vektort tartalmaznak, a **nagy szimplexek** legalább három elemből állnak. A k -elemű szimplexeket röviden **k -szimplex** -nek hívjuk. \square

Fejezetünk főbb eredményei az alábbiak, melyek a [1995], [1998] és [2011] cikkekben jelentek meg:

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

4.7. Tétel ([1995]): *Tetszőleges, adott elemszámú $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$ részhalmazra, ami kifeszíti \mathbb{R}^n -et $\text{simp}(\mathcal{H})$ **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

4.15. Következmény: *Ha $\mathcal{H} \subseteq \mathbb{R}^n$ kifeszíti \mathbb{R}^n -et és $|\mathcal{H}| = m$ ahol $m = an + b$, $0 \leq b < n$ és $a \geq 1$, akkor*

$$b \cdot \binom{a+1}{2} + (n-b) \cdot \binom{a}{2} \leq \text{simp}(\mathcal{H}) \leq \binom{m}{n+1}, \quad (4.1)$$

továbbá $\text{simp}(\mathcal{H})$ a lehetséges alsó és felső értékeket kizárólag a fenti tételekben leírt esetekben veheti fel.

Amennyiben m osztható n -el, (4.1) egyszerűbb alakot vesz fel:

$$n \cdot \binom{\frac{m}{n}}{2} \leq \text{simp}(\mathcal{H}) \leq \binom{m}{n+1}. \quad \square$$

A 4.5. Tétel szerint az adott atomok tehát az egyes vegyületeket nagyon "össze-vissza" mennyiségben kell, hogy felépítsék (pl. Vandermode determináns mintájára).

A felső becslést a párhuzamos vektorok megtiltása nem befolyásolja, az alsó becslésben viszont kizárólag párhuzamos vektorok (kis szimplexek) játszó a főszerepet. Ha csak nagy szimplexek létezését követeljük meg \mathcal{H} -ban (vagyis \mathcal{H} -ban nem engedünk meg párhuzamos vektorokat), akkor $\text{simp}(\mathcal{H})$ értékének alsó becslése nagyon nehézé válik, mindössze az \mathbb{R}^3 és \mathbb{R}^4 esetekben van teljes eredményünk. Az általános problémát, és máig nyitott sejtésünket a legutolsó alfejezetben ismertetjük (ld. 4.26. Probléma és 4.27. Sejtés).

4.20. Tétel ([1998]): *Tetszőleges, adott elemszámú $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^3$ részhalmazra, ami kifeszíti \mathbb{R}^3 -et, \mathcal{H} -ban nincsenek párhuzamos vektorok és $8 \leq |\mathcal{H}|$, $\text{simp}(\mathcal{H})$ 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. Másképpen: \mathcal{H} -ban vannak olyan u_1, u_2, u_3 lineárisan független vektorok, amelyekre \mathcal{H} -nak pontosan egy további eleme esik $[u_1, u_2]$ -be, és \mathcal{H} összes maradék vektorát $[u_2, u_3]$ tartalmazza.* \square

4.22. Következmény: Amennyiben $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^3$ kifeszíti \mathbb{R}^3 -et, \mathcal{H} -ban nincsenek párhuzamos vektorok és $8 \leq |\mathcal{H}|$, akkor

$$\binom{m-2}{3} + 1 + \binom{m-3}{2} \leq \text{simp}(\mathcal{H}) \quad . \quad \square \quad (4.2)$$

A legfeljebb 7 -elemű \mathcal{H} halmazokat a 4.20. Tétel után vizsgáljuk meg.

Egy évtizednyi kutatás és teljesen új módszerek segítségével sikerült egy fokkal tovább lépniük:

4.23. Tétel ([2011]): Tetszőleges, adott elemszámú $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^4$ részhalmazra, ami kifeszíti \mathbb{R}^4 -et, \mathcal{H} -ban nincsenek párhuzamos vektorok és $24 \leq |\mathcal{H}|$, $\text{simp}(\mathcal{H})$ 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: \mathcal{H} -ban vannak olyan u_1, u_2, u_3, u_4 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. \square

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

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

A legfeljebb 23 -elemű \mathcal{H} halmazokat a 4.23. Tétel után vizsgáljuk meg.

4.1. A maximum

Mivel a szimplexek *minimálisan* összefüggő részhalmazok, ezért szimplexek bármilyen $S_1, \dots, S_\ell \subseteq H$ rendszere nyilván teljesíti az

$$S_i \not\subseteq S_j \quad (\forall i, j \leq \ell, i \neq j) \quad (4.3)$$

ú.n. **Sperner-tulajdonságot**, így Sperner jól ismert tétele alapján (pl. [2001]) máris felső becslést adhatunk bármilyen \mathcal{H} halmazban a tartalmazott szimplexek számára:

4.3. Tétel. (Sperner, 1930) Legyen H tetszőleges halmaz, $|H| = m$ és $k \leq \frac{m}{2}$. Ha az $S_1, \dots, S_\ell \subseteq H$ részhalmazok legfeljebb k eleműek és kielégítik a (4.3) feltételt, akkor $\ell \leq \binom{m}{k}$. \square

4.4. Következmény. Tetszőleges $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$, $|H| = m$ vektorhalmaz esetén

$$\text{simp}(\mathcal{H}) \leq \binom{m}{n+1}. \quad \square \quad (4.4)$$

Hangsúlyozzuk azonban, hogy bennünket a szélsőséges \mathcal{H} vektorhalmazok lineáris algebrai szerkezete érdekel. Bár ez kihámozható Sperner tételének részleteiből, a közvetlen vizsgálat részletesebb magyarázatot ad számunkra.

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

Bizonyítás. Legyen $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$ tetszőleges (rögzített) m -elemű vektorhalmaz. Válasszunk $\mathcal{V} = \{v_1, v_2, \dots, v_n\} \subseteq \mathcal{H}$ bázisát \mathbb{R}^n -nek. Tegyük fel, hogy egy $u \in \mathcal{H} \setminus \mathcal{V}$ vektort tartalmazza \mathcal{H} -nak egy legfeljebb n elemű összefüggő részhalmaza. Válasszunk ekkor egy olyan $u' \in \mathbb{R}^n$ vektort, amely \mathcal{H} -nak $n-1$ -elemű részhalmazai által generált alterek egyikében sincs. Cseréljük \mathcal{H} -ban u -t u' -re:

$$\mathcal{H}' := (\mathcal{H} \setminus \{u\}) \cup \{u'\},$$

akkor megmutatjuk, hogy $|\mathcal{H}'| = |\mathcal{H}|$ és $\text{simp}(\mathcal{H}') \geq \text{simp}(\mathcal{H})$.

Legyen $\mathcal{S} = \{u_1, u_2, \dots, u_k\} \subseteq \mathcal{H}$ tetszőleges szimplex \mathcal{H} -ban. Ha $u \notin \mathcal{S}$ akkor $\mathcal{S}' := \mathcal{S}$ szimplex \mathcal{H}' -ben is. Ha pedig $u = u_i \in \mathcal{S}$ akkor $\mathcal{S} \setminus \{u_i\}$ független halmaz, ezért van \mathcal{V} -nek van $n-k+1$ elemű \mathcal{V}' részhalmaza, amelyre $\mathcal{S} \setminus \{u_i\} \cup \mathcal{V}'$ ismét bázisa \mathbb{R}^n -nek. De ekkor

$$\mathcal{S}' := \mathcal{S} \setminus \{u_i\} \cup \mathcal{V}' \cup \{u'\}$$

egy új szimplex \mathcal{H}' -ban. A most definiált $\mathcal{S} \rightarrow \mathcal{S}'$ leképezés injektív, ezért $\text{simp}(\mathcal{H}') \geq \text{simp}(\mathcal{H})$.

A fenti konstrukciót legfeljebb m -szer elvégezve olyan $\mathcal{H}^{(m)} \subset \mathbb{R}^n$ vektorhalmazhoz jutunk, amelyben csak $n+1$ -elemű szimplexek vannak és $\text{simp}(\mathcal{H}^{(m)}) \geq \text{simp}(\mathcal{H})$.

Ebből az is következik, hogy $\text{simp}(\mathcal{H})$ maximális abban az esetben, ha \mathcal{H} bármely n eleme lineárisan független. Ekkor $\text{simp}(\mathcal{H}) = \binom{m}{n+1}$.

Már csak azt kell igazolnunk, hogy minden más esetben $\text{simp}(\mathcal{H})$ értéke ennél határozottan kisebb.

Legyen $\mathcal{S} \subseteq \mathcal{H}$ egy (rögzített) ℓ elemű szimplex, $\ell \leq n$. A bizonyítás előző részében leírt konstrukciót ismételtén (legfeljebb $m-\ell$ -szer) elvégezve kapjuk, hogy egyetlen $u \in \mathcal{H} \setminus \mathcal{S}$ vektor sem tartozik $\mathcal{H} \setminus \{u\}$ elemei közül bármely $n-1$ db által generált altérhez.

Mindezekből könnyen kapunk felső becslést $\text{simp}(\mathcal{H})$ értékére: \mathcal{S} saját maga (amit megőriztünk), továbbá csak $n+1$ -elemű szimplexek, amelyek \mathcal{S} -nek legfeljebb $\ell-1$ elemét tartalmazhatják:

$$\text{simp}(\mathcal{H}) \leq 1 + \sum_{i=0}^{\ell-1} \binom{\ell}{i} \cdot \binom{m-\ell}{n+1-i} = 1 + \binom{m}{n+1} + \binom{m-\ell}{n+1-\ell} .$$

Ez a mennyiség pedig szigorúan kisebb $\binom{m}{n+1}$ -nél ha $n+2 \leq m$.

$m=n$ esetén $\text{simp}(\mathcal{H})=0$, $m=n+1$ esetén pedig minden $2 \leq k \leq n+1$ számhoz található olyan \mathcal{H}_k , amely pontosan egy k -simplexet tartalmaz, azaz $\text{simp}(\mathcal{H}_k)=1$.

A bizonyítást befejeztük. ■

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

$$\text{simp}(\mathcal{H}) \leq \binom{m}{n+1} , \quad (4.5)$$

és a becslés éles, vagyis van olyan \mathcal{H} amelyre (4.5)-ben = teljesül. □

Bizonyítás. (4.5) nyilvánvaló a 4.5. Tétel alapján.

A Vandermode determinánsok kifejtéséből adódik, hogy *tetszőleges, páronként különböző* $q_1, \dots, q_m \in \mathbb{R}$ valós számok esetén a

$$\underline{h}_i := [1, q_i, q_i^2, \dots, q_i^{n-1}] \in \mathbb{R}^n \quad (i = 1, \dots, m) \quad (4.6)$$

vektorok közül *bármely* n lineárisan független, vagyis

$$\text{simp}\{h_1, \dots, h_m\} = \binom{m}{n+1} . \quad (4.7)$$

■

4.2. A minimum párhuzamos vektorokkal

A most következő vizsgálatok szerint $\text{simp}(\mathcal{H})$ értéke akkor a lehető legkisebb adott méretű $\mathcal{H} \subseteq \mathbb{R}^n$ részhalmazoknál, ha \mathcal{H} a lehető legtöbb párhuzamos vektort tartalmazza (ld. 4.7. Tétel). Mint eddig is, a szélsőséges \mathcal{H} halmazok lineáris algebrai szerkezete (és annak egyértelműsége) is érdekel bennünket.

Mivel mind a gyakorlati (kémiai) alkalmazásoknál mind az elméleti (matematikai) vizsgálatoknál a párhuzamos vektorok sok gondot okoznak, a párhuzamos vektorok nélküli esetekkel a következő alfejezetekben külön foglalkozunk.

4.7. Tétel. ([1995]) Tetszőleges, adott elemszámú $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$ részhalmazra, ami kifeszíti \mathbb{R}^n -et, $\text{simp}(\mathcal{H})$ **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.

Az ismertett minimális szerkezet nyilván egyértelmű.

Bizonyítás. Legyenek n, m rögzítettek, $m \geq n$. Tegyük fel, hogy $\mathcal{H} \subseteq \mathbb{R}^n$ olyan m -elemű vektorhalmaz, amely \mathcal{H} kifeszíti \mathbb{R}^n -et, és az adott n, m paraméterekkel $\text{simp}(\mathcal{H})$ a lehető legkisebb.

Legyenek $\theta_1, \dots, \theta_p \subseteq \mathcal{H}$ párhuzamos vektorok diszjunkt, összes halmazai, vagyis az ekvivalencia osztályok. Válasszunk mindegyik osztályból egy-egy reprezentánst: $\vec{\theta}_i \in \theta_i$.

Több segédállításra van szükségünk, a szükséges fogalmakat a 4.2. Jelölésben ismertettük. ■

4.8. Segédállítás. Ha $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$ kifeszíti \mathbb{R}^n -et és $\text{simp}(\mathcal{H})$ minimális, akkor (0) \mathcal{H} -nak a nagy szimplexekben felhasznált vektorai más szimplexekben nem szerepelhetnek, így többek között

- (1) a nagy szimplexekben szereplő ekvivalenciaosztályok mind egyeleműek,
- (2) a nagy szimplexek diszjunktak.

Bizonyítás. Tehát

$$\mathcal{H} = \bigcup_{i=1}^p \theta_i, \quad (4.8)$$

nyilván $p \geq n+1$, és tegyük fel, hogy van $\mathcal{S} = \{\vec{\theta}_i : i \in \mathcal{I}\} \subset \mathcal{H}$ nagy szimplex, $|\mathcal{I}| \geq 3$ és rögzítsük a $\vec{\theta}_1, \vec{\theta}_2 \in \mathcal{S}$ vektorokat. Használjuk a következő jelöléseket:

$k :=$ azon (összes) nagy szimplexek száma, amelyek $\vec{\theta}_1$ és $\vec{\theta}_2$ mindegyikét tartalmazzák,

$k_1 :=$ csak $\vec{\theta}_1$ -et tartalmazó ($\vec{\theta}_2$ -öt nem) nagy szimplexek száma,

$k_2 :=$ csak $\vec{\theta}_2$ -öt tartalmazó ($\vec{\theta}_1$ -et nem) nagy szimplexek száma,

nyilván $k_1 \geq k_2 \geq 0$ feltehető.

Könnyen belátható, hogy

$$k \geq \prod_{i \in \mathcal{I} \setminus \{1,2\}} |\theta_i| \quad (4.9)$$

hiszen a fenti egyenlőtlenség jobb oldalán csak az \mathcal{S} -hez "hasznos", $\vec{\theta}_1$ és $\vec{\theta}_2$ -öt tartalmazó nagy szimplexeket számoljuk össze.

Töröljük most \mathcal{H} -ből θ_1 összes elemét és ugyanennyi elemmel bővítjük a θ_2 osztályt, az így kapott halmazt jelöljük \mathcal{H}' -el. Sietünk megjegyezni, hogy \mathcal{H}' is kifeszíti \mathbb{R}^n -et, hiszen $\vec{\theta}_1$ lineáris kombinációja \mathcal{S} többi elemének (1.16. Következmény).

Továbbá, ez a módosítás csak azon szimplexek számát változtatja, amelyek az θ_1 vagy θ_2 osztály valamely elemét tartalmazták. A módosítás előtt \mathcal{H} -ban

$$\binom{|\theta_1|}{2} + k_1 \cdot |\theta_1| + \binom{|\theta_2|}{2} + k_2 \cdot |\theta_2| + k \cdot |\theta_1| \cdot |\theta_2|$$

ilyen szimplex volt, a módosítás után \mathcal{H}' -ben

$$\binom{|\theta_1| + |\theta_2|}{2} + k_2 \cdot (|\theta_1| + |\theta_2|)$$

ilyen szimplex lett összesen, a többi szimplex nem változott.

Ha $\text{simp}(\mathcal{H})$ minimális volt, akkor

$$\binom{|\theta_1|}{2} + k_1 \cdot |\theta_1| + \binom{|\theta_2|}{2} + k_2 \cdot |\theta_2| + k \cdot |\theta_1| \cdot |\theta_2| \leq \binom{|\theta_1| + |\theta_2|}{2} + k_2 (|\theta_1| + |\theta_2|),$$

elemi átalakítások után

$$k_1 - k_2 \leq |\theta_2| \cdot (1 - k)$$

ahonnan $k = 1$ (mert $k \geq 1$) és $k_1 = k_2$. Így (4.9) alapján

$$1 = k \geq \prod_{i \in \mathcal{I} \setminus \{1,2\}} |\theta_i|$$

ahonnan $|\theta_i| = 1$ minden $i \in \mathcal{I} \setminus \{1,2\}$ esetén. Mivel θ_1 és θ_2 nem kitüntetett osztályok, így a szimmetria miatt $|\theta_1| = |\theta_2| = 1$. Beláttuk az (i1) állítást.

Ha tehát egy $\underline{v} \in \mathcal{H}$ vektor két különböző nagy szimplexnek is eleme: $\underline{v} \in \mathcal{S}_1 \cap \mathcal{S}_2$, akkor a

$$(\mathcal{S}_1 \cup \mathcal{S}_2) \setminus \{\underline{v}\}$$

halmaz lineárisan összefüggő, párhuzamos vektorokat nem tartalmaz, ezért van benne egy

$$\mathcal{S}' \subset (\mathcal{S}_1 \cup \mathcal{S}_2) \setminus \{\underline{v}\}$$

nagy szimplex. Ekkor \mathcal{S}' legalább kettő elemet tartalmaz vagy \mathcal{S}_1 vagy \mathcal{S}_2 -ből, amely két elemet \mathcal{S}' és \mathcal{S}_1 vagy \mathcal{S}_2 is tartalmazza, ez pedig ellentmond az előző részben bizonyított $k = 1$ követelménynek. Ez bizonyítja (2) -öt.

(0) nyilván következik (1) és (2) -ből, hiszen (1) a kis-, (2) a nagy szimplexeket "tiltja le".

A 4.8. Segédállítást ezzel bebizonyítottuk. ■

4.9. Segédállítás. *Ha \mathcal{H} kifeszíti \mathbb{R}^n -et, $|\mathcal{H}| = m$, $\text{simp}(\mathcal{H})$ minimális, akkor feltehető, hogy \mathcal{H} -ban egyáltalában nincs nagy szimplex.*

Bizonyítás. Ha $\mathcal{S} \subset \mathcal{H}$ egy nagy szimplex, akkor \mathcal{S} akármelyik elemét kicserélhetjük egy olyan új vektorra, ami \mathcal{S} valamely megmaradt elemével párhuzamos, a módosítás után \mathcal{H}' is kifeszíti \mathbb{R}^n -et, hiszen az \mathcal{S} szimplexnek csak egyik elemét töröltük (ami a többivel pótolható, 1.16. Következmény). Ezalatt $\text{simp}(\mathcal{H})$ változatlan marad, mert (i) értelmében csak \mathcal{S} -beli szimplexek változhatnak, \mathcal{S} -ben pedig mindössze csak \mathcal{S} helyett keletkezett egy kételemű szimplex. ■

A fenti eredmény csak azt mutatja, hogy minimális szimplexet tartalmazó \mathcal{H} halmazok között nagy szimplex nélküliek is találhatóak. Csak a 4.13. Segédállításban fogjuk megmutatni, hogy $m \geq 2n$ esetén minimális \mathcal{H} halmazokban egyáltalában nem lehet nagy szimplex.

Most foglalkozzunk *csak* a kis szimplexekkel (párhuzamos vektorpárokkal). Ha feltesszük, hogy \mathcal{H} -ban nincs nagy szimplex, akkor a minimális konfiguráció *egyértelműsége* már könnyen igazolható.

4.10. Segédállítás. *Ha feltesszük, hogy \mathcal{H} kifeszíti \mathbb{R}^n -et, $|\mathcal{H}| = m$, $\text{simp}(\mathcal{H})$ minimális, és \mathcal{H} csak kis szimplexeket tartalmaz, akkor \mathcal{H} párhuzamossági ekvivalencia osztályainak méretei legfeljebb csak 1 -el térhetnek el egymástól.*

Bizonyítás. A szimplexek száma a feltételek szerint

$$\sum_{i=1}^p \binom{|\theta_i|}{2}. \quad (4.10)$$

Ha valamely $i, j \leq p$ indexekre $|\theta_i| > |\theta_j| + 1$, akkor tegyünk át egy vektort a θ_i halmazból a θ_j halmazba. A szimplexek száma szigorúan növekszik, hiszen

$$\binom{\theta_i}{2} + \binom{\theta_j}{2} > \binom{\theta_i - 1}{2} + \binom{\theta_j + 1}{2}. \quad (4.11)$$

■

4.11. Következmény. *Ha feltesszük, hogy \mathcal{H} kifeszíti \mathbb{R}^n -et, $|\mathcal{H}| = m$, $\text{simp}(\mathcal{H})$ minimális, és \mathcal{H} csak kis szimplexeket tartalmaz, akkor \mathcal{H} szerkezete egyértelmű.*

Bizonyítás. Tudjuk (4.8) alapján

$$\mathcal{H} = \bigcup_{i=1}^n \theta_i \quad ,$$

és $p = n$, mert \mathcal{H} -ban nincs nagy szimplex.

A 4.10. Segédállítás miatt, $m = an + b$ ($0 \leq b < n$, $1 \leq a$) esetén csak

$$\begin{aligned} |\theta_1| &= |\theta_2| = \dots |\theta_b| = a + 1 \quad , \\ |\theta_{b+1}| &= |\theta_{b+2}| = \dots |\theta_n| = a \quad , \end{aligned} \quad (4.12)$$

méretű ekvivalenciaosztályok lehetnek \mathcal{H} -ban.

ami alapján

$$\text{simp}(\mathcal{H}) = b \cdot \binom{a+1}{2} + (n-b) \cdot \binom{a}{2} .$$

A szigorú (4.11) egyenlőség igazolja, hogy a minimális konfiguráció egyértelmű, ha \mathcal{H} -ban nincs nagy szimplex. ■

A fenti (4.12) feltételekből már könnyen meghatározhatjuk a szimplexek számának (abszolút) legkisebb értékét *tetszőleges* m esetén:

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

$$b \cdot \binom{a+1}{2} + (n-b) \cdot \binom{a}{2} \leq \text{simp}(\mathcal{H}) \quad , \quad (4.13)$$

és a becslés éles. □

A nagy- és kis szimplexek egymásra gyakorolt hatásából (ld. az alábbi 4.13. Segédállítás) adódik , hogy $n+1 \leq m < 2n-1$ esetén a minimális \mathcal{H} halmazok szerkezete *nem egyértelmű*. A 4.14. Példában a 4.11. Következményben leírtaktól eltérő szerkezetű, de ugyanannyi szimplexet tartalmazó \mathcal{H} halmazokat mutatunk be.

Most rátérünk a 4.7. Tétel hiányzó részének bizonyítására:

4.13. Segédállítás. *Ha \mathcal{H} -ban van nagy szimplex, akkor $\text{simp}(\mathcal{H})$ nem lehet minimális, adott $m = |\mathcal{H}| \geq 2n$ elemszám esetén.*

Bizonyítás. A 4.8. Segédállítást folytatjuk. Legyenek $\mathcal{S}_1, \dots, \mathcal{S}_r$ a \mathcal{H} halmaz (összes) nagy szimplexei ($1 \leq r$), valamint $\theta_1, \dots, \theta_q \subseteq \mathcal{H}$ azon

párhuzamossági ekvivalencia osztályai, melyek *diszjunktak* az \mathcal{S}_i halmazoktól, vagyis

$$\mathcal{H} = \bigcup_{j=1}^r \mathcal{S}_j \cup \bigcup_{i=t}^p \theta_i \quad (4.14)$$

és az uniókban diszjunkt halmazok vesznek részt.

Válasszunk mindegyik \mathcal{S}_j szimplexből egy $\underline{s}_j \in \mathcal{S}_j$ vektort és mindegyik θ_i osztályból egy-egy $\vec{\theta}_i \in \theta_i$ reprezentánst. Ekkor

(1) A

$$T_\theta := \left\{ \vec{\theta}_i : t \leq i \leq p \right\} \quad (4.15)$$

halmaz lineárisan független vektorokból áll. Ellenkező esetben ugyanis tartalmazna egy szimplexet, ami nagy szimplex lenne, hiszen T_θ -ben nincsenek párhuzamos vektorok, ráadásul az $\mathcal{S}_1, \dots, \mathcal{S}_r$ -től különböző lenne.

(2) Ugyanilyen okok miatt a

$$T_{\mathcal{S}} := \bigcup_{j=1}^r \left(\mathcal{S}_j \setminus \left\{ \underline{s}_j \right\} \right) \quad (4.16)$$

halmaz is független vektorokból áll, hiszen ellenkező esetben a benne levő szimplex nagy lenne (4.8. (1) miatt) és így ellentmondana 4.8. (2)-nek.

(3) A fentiek miatt $T_{\mathcal{S}} \cup T_\theta$ is független vektorokból áll, hiszen a benne levő szimplex nagy lenne és metszené valamelyik \mathcal{S}_j nagy szimplexet.

Könnyen belátható az is, hogy $|T_{\mathcal{S}} \cup T_\theta| = n$, tehát $T_{\mathcal{S}} \cup T_\theta$ bázisa \mathbb{R}^n -nek ("H kifeszíti \mathbb{R}^n -et").

(4) Mivel (például) \mathcal{S}_1 kevesebb vektort tartalmaz mint a fenti bázisból "elfoglalt" kétszerese, és $m = |\mathcal{H}| \geq 2n$, ezért van olyan θ_i osztály (például θ_t), melynek mérete legalább 3.

Legyen

$$\mathcal{S}_1 = \{ \underline{u}_1, \dots, \underline{u}_s \} \quad (3 \leq s) \quad (4.17)$$

és most tegyük át egy vektort θ_t -ből \mathcal{S}_1 -be úgy, hogy az új vektor legyen párhuzamos \underline{u}_1 -gyel, \underline{u}_s helyett pedig egy \underline{u}_2 -vel párhuzamos vektort vegyünk \mathcal{S}_1 -ben. Az (1)-(3) tulajdonságok miatt csak az \mathcal{S}_1 és θ_t -beli szimplexek (száma) változott.

A módosítás előtt az ilyen szimplexek száma

$$1 + \binom{|\theta_t|}{2} \quad (4.18)$$

volt, a módosítás után pedig

$$2 + \binom{|\theta_t| - 1}{2} \quad (4.19)$$

lett. $|\theta_t| \geq 3$ miatt könnyen belátható, hogy

$$1 + \binom{|\theta_t|}{2} > 2 + \binom{|\theta_t| - 1}{2} \quad (4.20)$$

vagyis $\text{simp}(\mathcal{H})$ nem lehetett minimális. ■

A fenti 4.13. Segédállítással teljessé tettük a 4.7. Tétel bizonyítását. ■

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

4.14. Példa. 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

$$\{\mathcal{I}_1, \dots, \mathcal{I}_\ell\} \subseteq \mathcal{K}$$

a \mathcal{K} bázis egy tetszőleges partíciója. Tegyük fel, hogy $1 \leq j \leq \ell$ esetén az \mathcal{I}_j osztályok legalább kételeműek, tehát $1 \leq k \leq \frac{n}{2}$ és $k \leq \ell \leq n - 1$. Mindegyik \mathcal{I}_j ($j \leq \ell$) osztályhoz készítsünk még egy (tetszőleges)

$$\underline{v}_j := \sum_{i \in \mathcal{I}_j} \mu_i \underline{e}_i \quad (j \leq \ell)$$

vektort, ahol a μ_i együtthatók egyike sem 0. Az 1.15 Segédállítás szerint az

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

halmazok mind szimplexek.

Ezek alapján a

$$\mathcal{H} = \{\underline{e}_1, \dots, \underline{e}_n\} \cup \{\underline{v}_1, \dots, \underline{v}_\ell\}$$

vektorhalmaznak $m = n + \ell < 2n - 1$ eleme van, $\text{simp}(\mathcal{H}) = \ell$ szimplexe megegyezőleg (4.13)-el ($a = 1$, $b = \ell$), és k nagy szimplexe! □

Eddig eredményeink (4.5. és 4.7. Tételek) alapján $\text{simp}(\mathcal{H})$ az alábbi korlátok között mozoghat (a szélsőséges értékeket is feveheti):

4.15. Következmény. Ha $\mathcal{H} \subseteq \mathbb{R}^n$ kifeszíti \mathbb{R}^n -et és $|\mathcal{H}| = m$ ahol $m = an + b$, $0 \leq b < n$ és $a \geq 1$, akkor

$$b \cdot \binom{a+1}{2} + (n-b) \cdot \binom{a}{2} \leq \text{simp}(\mathcal{H}) \leq \binom{m}{n+1} . \quad (4.21)$$

továbbá $\text{simp}(\mathcal{H})$ a lehetséges alsó és felső értékeket kizárólag a 4.5. illetve a 4.7. Tételekben leírt esetekben veheti fel.

Amennyiben m osztható n -el, (4.21) egyszerűbb alakot vesz fel:

$$n \cdot \binom{\frac{m}{n}}{2} \leq \text{simp}(\mathcal{H}) \leq \binom{m}{n+1}, \quad (4.22)$$

és mindkét becslés éles. \square

Sajnos a fenti korlátok eléggé messze esnek egymástól. A felső korlátot eddig még nem sikerült ésszerű (gyakorlati) korlátozásokkal csökkentenünk. Az alsó korlátot a *kizárólag* párhuzamos vektorokból (izomer molekulák vagy többszörös adagok) álló \mathcal{H} vektorhalmazok érik el, tehát kézenfekvő a párhuzamos vektorok kizárása, általánosabban pedig a kis szimplexek nélküli halmazok vizsgálata. A következő alfejezetekben ezzel foglalkozunk \mathbb{R}^n -ben, általánosabb vizsgálatainkról és sejtéseinkről a 4.4. "További sejtések" alfejezetben és az 5. "Matroidok és hipergráfok" fejezetben számolunk be.

4.3. A minimum párhuzamos vektorok nélkül

Ebben az alfejezetben a következő feltétel mellett vizsgáljuk a szimplexek számának lehetséges legkisebb értékeit:

4.16. Feltétel. A $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$ vektorhalmazban nincsenek párhuzamos vektorok. Speciálisan $\underline{0} \notin \mathcal{H}$. \square

A fenti feltétel ekvivalens azzal, hogy \mathcal{H} -ban nincsenek 1 és 2 -elemű szimplexek.

A következő általános probléma $n = 3$ és $n = 4$ speciális eseteire adunk megoldást:

4.17. Probléma. Adott $n, m \in \mathbb{N}$ esetén azon $|\mathcal{H}| = m$ -elemű vektorhalmazok esetén, melyek kifeszítik \mathbb{R}^n -et és teljesítik a 4.16. Feltételt, mennyi $\text{simp}(\mathcal{H})$ legkisebb értéke, és milyen szerkezetűek ezek a szélsőséges \mathcal{H} halmazok?

A 4.16. Feltétel lehetővé teszi a dimenzió csökkentését, ami az $n = 3$ és $n = 4$ esetekben különösen hasznos.

4.3.1. A dimenzió csökkentése

Hangsúlyozzuk, hogy módszerünk csak a 4.16. Feltétel esetén működik! Ekkor azonban \mathcal{H} mindegyik vektorát annak bármelyik skalárszorosával helyettesíthetjük, majd \mathbb{R}^n egy alkalmas hipersíkjával elmetszve ezeket a skalárral szorzott vektorokat, máris egy $n - 1$ dimenziós térben vagyunk. Az alábbi definíciók írják le pontosan a vázolt konstrukciót.

4.18. Definíció. Tetszőleges $\underline{h} \in \mathbb{R}^n$ vektorra legyen

$$\Lambda \underline{h} := \{\lambda \cdot \underline{h} : \lambda \in \mathbb{R}, \lambda \neq 0\} \quad (4.23)$$

és tetszőleges $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$ halmazra

$$\Lambda \mathcal{H} := \{\Lambda \underline{h} : \underline{h} \in \mathcal{H}\} . \quad (4.24)$$

és ha $\mathcal{P} \subset \mathbb{R}^n$ egy tetszőleges $n - 1$ -dimenziós (affin) hipersík, ami nem párhuzamos \mathcal{H} egyetlen elemével sem, akkor legyen

$$\mathcal{H}^{\mathcal{P}} := \Lambda \mathcal{H} \cap \mathcal{P} \quad (4.25)$$

□

Véges vagy megszámlálhatóan végtelen \mathcal{H} esetén \mathcal{P} nyilván létezik.

Mivel az $n - 1$ -dimenziós \mathcal{P} hipersíkot természetes módon azonosítjuk \mathbb{R}^{n-1} -gyel, tetszőleges $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}^n$ halmazok $\mathcal{S}^{\mathcal{P}} \subset \mathcal{P}$ képeit is \mathbb{R}^{n-1} részhalmazaként értelmezhetjük. (Valójában \mathbb{R}^n részhalmazait a $P(\mathbb{R}^n)$ projektív térbe képezzük le.)

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, ez az 1.5. "Matematikai definíciók és elemi összefüggések" alfejezet 1.7., 1.10. és 1.11. Definíciói alapján könnyen belátható.

Az $n = 3$ and $n = 4$ esetekben a fentiek alapján könnyen megfogalmazhatjuk eredményeinket, hiszen a 2- és 3- dimenziós terek affin szimplexei egyszerű geometriai objektumok (lásd az 1.11. Definíciót).

4.19. Állítás. 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, következőképpen

$$|\mathcal{H}^{\mathcal{P}}| = |\mathcal{H}| \quad \text{and} \quad \text{simp}_a(\mathcal{H}^{\mathcal{P}}) = \text{simp}_\ell(\mathcal{H}) . \quad \square \quad (4.26)$$

4.3.2. \mathbb{R}^3 szimplexei

A dimenzió csökkentése után térbeli vektorok helyett síkbeli pontokról beszélhetünk. Sajnos a szélsőséges konfiguráció megtalálása és helyességének bizonyítása már nem ennyire egyszerű.

4.20. Tétel. ([1998], 1998) *Tetszőleges, adott elemszámú $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^3$ vektorhalmazra, ami kifeszíti \mathbb{R}^3 -et, \mathcal{H} -ban nincsenek párhuzamos vektorok és $8 \leq |\mathcal{H}|$, $\text{simp}_\ell(\mathcal{H})$ 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.*

Másképpen: \mathcal{H} -ban vannak olyan u_1, u_2, u_3 lineárisan független vektorok, amelyekre \mathcal{H} -nak pontosan egy további eleme esik $[u_1, u_2]$ -be, és \mathcal{H} összes maradék vektorát $[u_2, u_3]$ tartalmazza. \square

Átfogalmazva síkbeli affin szimplexekre:

4.21. Tétel. ([1998]) *Tetszőleges, adott elemszámú $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^2$ pontthalmazra, ami nem egy egyenesre esik és $8 \leq |\mathcal{H}|$, $\text{simp}_a(\mathcal{H})$ 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*

Sajnos a fenti tétel bizonyítása meglehetősen hosszú (8 oldal). Ötlete röviden a következő: ha \mathcal{H} pontjai sok egyenesre "szóródnak" szét, akkor óvatosan megpróbáljuk a pontokat egy egyenesre átpakolni, mialatt a szimplexek száma csökken. Sok esetet kell megvizsgálnunk (például két egyenes metszéspontja \mathcal{H} -hoz tartozik avagy sem), a szimplexek száma és annak változása sem egyszerű számítási feladat. A részletek [1998] cikkünkben megtalálhatók.

A fenti Tételből könnyen kiszámolhatjuk az új alsó korlátot:

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

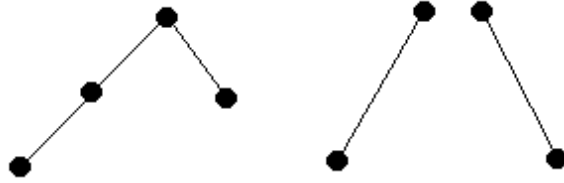
$$\binom{m-2}{3} + 1 + \binom{m-3}{2} \leq \text{simp}(\mathcal{H}) \leq \binom{m}{4},$$

és mindkét becslés éles. \square

Végül, a teljesség céljából felsoroljuk a 8 -nál kevesebb elemű optimális \mathcal{H} halmazokat. (Az ábrákon a pontok \mathbb{R}^3 -beli vektorokat, az egyenes szakaszok kétdimenziós síkokat jelölnek.)

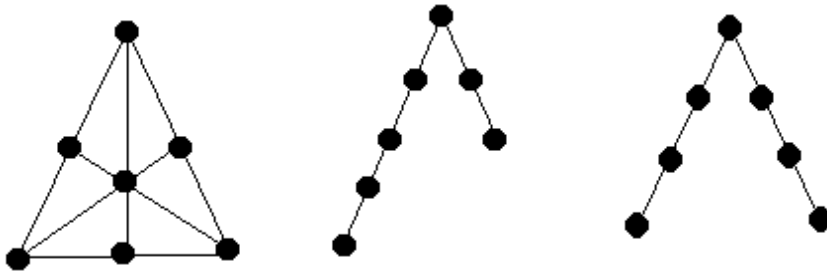
$|\mathcal{H}| = 3$ esetén a feltételek miatt $\text{simp}(\mathcal{H}) = 0$.

$|\mathcal{H}| = 4$ esetén *kettő* optimális elhelyezés van, $\text{simp}(\mathcal{H}) = 1$:



Két optimális elhelyezés $|\mathcal{H}| = 4$ esetén

$|\mathcal{H}| = 7$ esetén három optimális elhelyezés van, $\text{simp}(\mathcal{H}) = 17$:



Három optimális elhelyezés $|\mathcal{H}| = 7$ esetén

4.3.3. \mathbb{R}^4 szimplexei

Egy évtizednyi kutatás és teljesen új módszerek segítségével sikerült egy fokkal tovább lépniük:

4.23. Tétel. ([2011], 2010) Tetszőleges, adott elemszámú $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^4$ vektorhalmazra, ami kifeszíti \mathbb{R}^4 -et, \mathcal{H} -ban nincsenek párhuzamos vektorok és $24 \leq |\mathcal{H}|$, $\text{simp}_\ell(\mathcal{H})$ 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: \mathcal{H} -ban vannak olyan u_1, u_2, u_3, u_4 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. \square

A dimenzió csökkentése után elegendő térbeli ponthalmazokról és affin szimplexekekről beszélnünk:

4.24. Tétel. ([2011]) *Tetszőleges, adott elemszámú $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^3$ ponthalmazra, ami nincs egy síkon és $24 \leq |\mathcal{H}|$, $\text{simp}_a(\mathcal{H})$ pontosan akkor minimális, ha \mathcal{H} elemei két kitérő egyenesen helyezkednek el, és a két egyenesen levő pontok számának eltérése legfeljebb 1.* \square

A \mathcal{H} -ban levő szimplexek vizsgálata (a fenti Tétel bizonyítása) több részletben, különböző esetek szétválasztásával történik: \mathcal{H} -ban van-e 5 -elemű szimplex vagy nincs; \mathcal{H} elemei közül hány helyezkedik el egy olyan tetraéder élegyenesein, lapsíkjaiban illetve ezeken kívül, melynek négy csúcsa \mathcal{H} -nak négy rögzített pontja; \mathcal{H} -ból választott ponthármasok kiterjeszthetők-e szimplexszé, végül \mathcal{H} elemei kettő vagy több egyenesen helyezkednek el (az egyes eseteken belül általában további sok alesetet is meg kellett vizsgálnunk). A bizonyítás körülbelül 10 oldal, jelen dolgozatunkban nincs helyünk részletesen ismertetni, [2011] -ben megtalálhatóak a részletek.

A $4 \leq |\mathcal{H}| \leq 23$ esetekre elméleti eredményeink még nincsenek, számítógéppel lehetne ezeket az eseteket külön-külön megvizsgálni. Azonban eddigi próbálkozásaink csak legfeljebb 8 -elemű \mathcal{H} halmazok lehetséges elhelyezkedéseit tudták megvizsgálni, többnapos futás után, de az eredmények kiértékelése (izomorf halmazok kiszűrése) szintén sok időt vesz igénybe, mind kézzel, mind segédprogrammal.

A 4.23. Tétel alapján már könnyen adhatunk alsó becslést bármilyen 4 -dimenziós vektorhalmazban levő szimplexek számára:

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

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

és a becslés éles. \square

4.4. További problémák és sejtések

A fentiek alapján legelső, teljességében még meg nem válaszolt kérdésünk a 4.17. Probléma:

4.26. Probléma. *Adott $n, m \in \mathbb{N}$ esetén azon $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$, $|\mathcal{H}| = m$ -elemű vektorhalmazok esetén, melyek kifeszítik \mathbb{R}^n -et és \mathcal{H} -ban nincsenek párhuzamos vektorok, mennyi $\text{simp}(\mathcal{H})$ legkisebb értéke, és milyen szerkezetűek ezek a szélsőséges \mathcal{H} halmazok?*

Az általános sejtés 1998 -ban, számítógépes kísérletezések után fogalmazódott meg:

4.27. Sejtés. ([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, $\text{simp}(\mathcal{H})$ pontosan akkor **minimális**, ha*

1) *páros n esetén \mathcal{H} -ban vannak olyan u_1, \dots, 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, \dots, 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. \square*

A párhuzamos vektorok izomer molekulákat vagy többszörös adagokat jelentenek, nélkülük egy reakciómechanizmusban (vektorhalmazban) a szimplexek mérete legalább 3 . Matematikailag a következő, még általánosabb lépés a következő: csak *legalább k -elemű* szimplexeket keresünk, vagyis csak bonyolult (legalább k molekula esetén létrejövő) reakciókat.

4.28. Probléma. 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 $\text{simp}(\mathcal{H})$ 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. \square*

Nem meglepő módon a fenti probléma megközelítése matroidok és hipergráfok segítségével lehetséges, amivel a következő fejezet 5.35. Problémájában és 5.36. Sejtésében ismertetünk.

Gyakorlatban sokszor csak egy vagy néhány adott *végterméket* eredményező, vagy csak néhány kitüntetett *reakciót* tartalmazó minimális mechanizmusok (szimplexek) érdekelnek bennünket. Vektorok nyelvén ez a következőképpen hangzik:

4.29. Probléma. *Tetszőleges rögzített*

$$\mathcal{V} := \{\underline{v}_1, \dots, \underline{v}_t\} \subset \mathbb{R}^n \quad (4.27)$$

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

$$\mathcal{S} \cap \mathcal{V} \neq \emptyset \quad (4.28)$$

feltételt kielégítő $\mathcal{S} \subset \mathcal{H}$ simplexelek (akármilyen méretűek) **minimális** illetve **maximális** száma, és milyen a szélsőséges értékeket adó \mathcal{H} halmazok szerkezete?

A (4.28) feltételt kielégítő $\mathcal{S} \subset \mathcal{H}$ simplexelek számát jelölje $\text{simp}_{\mathcal{V}}(\mathcal{H})$. \square

A fenti becslések jól jönnének módosított algoritmusunk futásidejének elméleti becsléséhez.

5. fejezet

Matroidok és hipergráfok

Jelen fejezetben a lineáris algebrai szimplexek általánosításaival foglalkozunk. A műveleteket figyelmen kívül hagyva matroidok köreinek és bázisainak struktúráját vizsgáljuk, majd a fejezet végén általános halmazrendszerekben, vagyis hipergráfokban fogalmazzunk és oldunk meg egy hasonló kérdést.

A fejezetben ismertetett eredmények [1996], [2006] és [2013a] dolgozatainkban jelentek meg illetve fognak megjelenni.

5.1. Bevezetés

\mathbb{R}^n (lineáris algebrai) szimplexeinek *definíciójában* (ld. 1.7.) az $+$ és \cdot műveletek egyáltalában nem játszottak szerepet, csak a *független* halmazok, sőt \mathbb{R}^n helyett bármilyen vektorteret is vehetnénk. A matroidok definíciójában éppen csak a *függetlenség* fogalma szerepel, tehát már az általunk vizsgált szimplex-tulajdonság is csupán matroid-elméleti fogalom. Ráadásul, a matroidok közös általánosításai nem csak a lineáris tereknek, hanem gráfoknak, bizonyos halmazrendszereknek is, stb. (A matroidok alapfogalmait [2001]-ben is megtaláljuk, részletes ismertetésüket például Recski András [R89] vagy Oxley [O92] könyveiben.)

Célunk a következő probléma megoldása (matroidokban és gráfokban a minimális összefüggő részhalmazokat **köröknek** nevezik):

5.1. Probléma. *Adott méretű és rangú matroidokban mi a körök és bázisok számának minimális és maximális értéke, és milyen szerkezetű matroidokban találhatóak ezek a minimális illetve maximális mennyiségek?*

A maximum esetet teljesen sikerült megoldanunk, a minimális esetre csak abban az esetben, ha párhuzamos elemeket és hurkokat is megengedünk a

matroidban. (Főbb eredményeink az 5.4., 5.7., 5.8., 5.9., 5.13., 5.14., 5.15., 5.21. és 5.23. Tételekben találhatóak.)

Ismét kiemeljük, hogy a körök és bázisok maximális száma Sperner tételeiből is könnyen következik, azonban mi a szélsőséges matroidok *szerkezetére* is kíváncsiak vagyunk!

Hasonló kérdésekkel foglalkozó dolgozatot nem sikerült találnunk az irodalomban, csak Murty "ekvikardinális" matroidokkal (amikor minden kör azonos méretű) foglalkozó [M71] cikkét.

Azonban Rauha, Kahlea, Aya [RKA11] cikkükben "közelítő döntésekhez" alkalmazzák [2006] -ben megjelent eredményeinket, vagyis az alábbiakat.

5.2. Jelölés. Általában m jelöli az $\mathcal{M} = (X, \mathcal{F})$ matroid (vagyis alaphalmaza) *méretét*, n pedig *rangját*. \square

Mivel az $m = n$ eset nyilvánvaló, ezért feltesszük, hogy $0 < n < m$. Az alábbi elnevezés hasznos lesz vizsgálatainkban:

5.3. Definíció. Egy kör *kicsi*, ha legfeljebb 2 elemű, máskor *nagy*. \square

5.2. Maximum matroidokban

Körök és bázisok maximális számával és a szélsőséges esetek szerkezetével foglalkozunk, a matroid mérete m , rangja n .

5.2.1. Körök maximális száma

Eredményeinket az alábbi Tételben foglalhatjuk össze:

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

Bizonyítás. Először vizsgáljunk meg az alábbi konstrukciót, amivel az $\mathcal{M} = (X, \mathcal{F})$ matroidból egy szabad elem kicserélésevel egy új $\mathcal{M}' = (X', \mathcal{F}')$ matroidot kapunk.

1. Konstrukció: Rögzítsünk egy tetszőleges $u \in X$ elemet. Az $\mathcal{M} \setminus \{u\}$ matroidhoz adjunk egy szabad u' elemet, az így kapott matroid legyen \mathcal{M}' (lásd pl. [O92, Section 7.2]). Vagyis legyen $\mathcal{M}' := (X', \mathcal{F}')$ ahol

$$X' := X \setminus \{u\} \cup \{u'\} \tag{5.1}$$

és

$$\mathcal{F}' := \{f \in \mathcal{F} : f \subseteq X \setminus \{u\}\} \cup \{f \cup \{u'\} : f \in \mathcal{F}, f \subseteq X \setminus \{u\}, |f| \leq n-1\} . \quad (5.2)$$

Könnyen ellenőrizhető, hogy \mathcal{M}' és \mathcal{M} rangja ugyanakkora, továbbá az új u' elem \mathcal{M}' egyetlen kis körének sem eleme. Sőt, ha $X \setminus \{u\}$ valamelyik elemét \mathcal{M} egyetlen kis köre sem tartalmazza, akkor ugyanez igaz \mathcal{M}' -ben is. Továbbá \mathcal{M}' -nek legalább annyi köre van, mint \mathcal{M} -nek.

A bizonyítást a következő Segédállításban folytatjuk. ■

5.5. Segédállítás. $m > n + 1$ esetén az \mathcal{M} -beli körök száma $\binom{n+1}{m}$ -nél szigorúan kisebb, ha \mathcal{M} -ben van $n + 1$ -nél kisebb méretű kör.

Bizonyítás. Legyen $K \subseteq X$ egy rögzített $\ell \leq n$ elemű kör. A fenti 1. Konstruktóit egymás után $m - \ell$ -szer ismételten alkalmazva mindegyik $u \in X \setminus K$ elemet egy új u' -re cseréljük. A körök száma nem csökken, sőt K kivételével az összes kör legalább $n + 1$ elemű. Tehát a körök száma legfeljebb

$$1 + \sum_{i=0}^{\ell-1} \binom{\ell}{i} \binom{m-\ell}{n+1-i} = 1 + \binom{m}{n+1} - \binom{m-\ell}{n+1-\ell} \quad (5.3)$$

ami $m > n + 1$ esetén $\binom{m}{n+1}$ -nél tényleg kisebb. ■

Az 5.4. Tétel bizonyítása már csak egy lépés:

Bizonyítás. (5.4. Tétel) Az $m = n + 1$ esetben mindenképpen van egy $\{u_1, u_2, \dots, u_n\} \subset X$ bázis, így az $S = \{u_1, u_2, \dots, u_n, v\}$ halmazban pontosan egy kör van.

Az $m > n + 1$ esetben, az 5.5. Segédállítás alapján \mathcal{M} -ben csak $n + 1$ elemű körök lehetnek. A maximum nyilván csak az $U_{m,n}$ uniform matroidban lehetséges. ■

5.2.2. Bázisok maximális száma

Szerencsére a fenti 1. Konstruktó a bázisok számát sem csökkenti, és ismét csak $U_{m,n}$ -ben van maximális számú bázis.

5.6. Segédállítás. Az 1. Konstruktó a bázisok számát nem csökkenti.

Bizonyítás. Legyen $B \subseteq X$ egy bázis. Ha $u \notin B$, akkor (5.2) alapján B \mathcal{M}' -ben is bázis. Ha pedig $u \in B$, akkor pedig $B \setminus \{u\} \cup \{u'\}$ egy új bázis \mathcal{M}' -ben, szintén (5.2) alapján.

Tehát \mathcal{M} minden bázisához injektív módon sikerült \mathcal{M}' egy-egy bázisát megfeleltetnünk. ■

5.7. Tétel. Csak $U_{m,n}$ -ben lehet maximális számú bázis, nevezetesen $\binom{m}{n}$ sok.

Bizonyítás. Megmutatjuk, hogy amennyiben van \mathcal{M} -ben $n+1$ -nél kisebb méretű kör, akkor a bázisok száma $\binom{n+1}{m}$ -nél szigorúan kisebb.

Legyen tehát $K \subseteq X$ egy rögzített $\ell \leq n$ elemű kör. Az 1. Konstruktíót egymás után $m - \ell$ -szer ismételten alkalmazva mindegyik $u \in X \setminus K$ elemet egy új u' -re cseréljük, a bázisok száma nem csökken, sőt \mathcal{M}' bázisai pontosan a K -t nem tartalmazó n -elemű (X -nek) részhalmazai. Az ilyen részhalmazok száma

$$\sum_{i=0}^{\ell-1} \binom{\ell}{i} \binom{m-\ell}{n-i} = \binom{m}{n} - \binom{m-\ell}{n-\ell} \quad (5.4)$$

ami $m > n+1$ esetén $\binom{m}{n+1}$ -nél tényleg kisebb. ■

5.3. Minimum matroidokban

Ebben az alfejezetben körök és bázisok számára *alsó* becsléseket keresünk. A felső becsléssel ellentétben, a szélsőérték függ attól, hogy hurkok és párhuzamos elemek lehetnek-e a matroidban, ezeket az eseteket az 5.3.1. és 5.3.2. alfejezetekben külön vizsgáljuk. A szélsőséges konfigurációk szerkezetét ismét sikerül meghatároznunk, azonban a (lineáris algebrai) szimplexekhez hasonlóan nyitott marad a hurkok és párhuzamos elemek nélküli matroidok esete.

5.3.1. Hurkok

Ebben az alfejezetben a matroidban megengedünk egyelemű összefüggő részhalmazokat (hurkokat) is, melyek mind egyelemű körök is.

$m = n$ esetén a matroidban egyáltalában nincs kör és csak egy bázis van, tehát a továbbiakban feltesszük, hogy $m > n$.

5.8. Tétel. 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.

Bizonyítás. Legyen $\mathcal{M}_o^{(m,n)} := (X_o, \mathcal{F}_o)$ a következő, m elemű és n rangú matroid:

$$X_o = \{u_1, \dots, u_n, v_1, \dots, v_{m-n}\} \quad (5.5)$$

ahol $B := \{u_1, \dots, u_n\}$ az egyetlen bázis, és v_1, \dots, v_{m-n} mind hurkok, és $\mathcal{M}_o^{(m,n)}$ -ban nincs más kör.

Azt kell megmutatnunk, hogy bármely más matroidban egynél több bázis van.

Ha \mathcal{M} különbözik $\mathcal{M}_o^{(m,n)}$ -től, akkor legyen K egy legalább kételemű kör \mathcal{M} -ben. $K \setminus B$ bármely eleme független, ami kiterjeszthető \mathcal{M} egy újabb bázisává. ■

5.9. Tétel. *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.*

Bizonyítás. Legyen B egy rögzített bázis \mathcal{M} -ben. Tetszőleges $u \in X \setminus B$ elemhez van (pontosan egy) u -t tartalmazó kör található $B \cup \{u\}$ -ban, a gyenge köraxióma alapján. Ezek szerint \mathcal{M} -ben legalább $m - n$ kör van.

Ha \mathcal{M} -ben pontosan $m - n$ kör van, akkor legyen

$$X \setminus B := \{v_1, v_2, \dots, v_{m-n}\} \quad (5.6)$$

és $1 \leq i \leq m - n$ esetén legyen a fenti kör K_i . $\{v_i\} \subseteq K_i \subseteq B \cup \{v_i\}$ miatt ezek a körök különbözőek. Ha K_α és K_β -nek lenne közös u eleme ($\alpha \neq \beta$), akkor az erős köraxióma alapján a $K_\alpha \cup K_\beta \setminus \{u\}$ halmazban is lenne egy K kör, ami az összes K_i ($1 \leq i \leq m - n$) körtől különböző lenne, ellentmondás. ■

5.10. Megjegyzés. *Az 5.8. Tétel bizonyításában definiált $\mathcal{M}_o^{(m,n)}$ matroidban szintén $m - n$ páronként diszjunkt kör, pontosabban hurok található. □*

5.3.2. Párhuzamos elemek, hurkok nélkül

Az alábbiakban \mathcal{M} -ben hurkok (egyelemű körök) nem lehetnek, de párhuzamos elemek (vagyis kételemű körök) igen. Az ilyen tulajdonságú matroidok között keressük a minimális sok kört illetve bázist tartalmazókat. Ehhez az alábbi Konstrukció lesz számunkra hasznos: segítségével a matroid köreinek és bázisainak számát tudjuk csökkenteni, sőt a szélsőséges matroidok szerkezetét is le tudjuk írni.

2. Konstrukció: Legyen $u_1 \in X$ egy olyan rögzített elem, melyet X -ből elhagyva X rangja nem csökken, azaz

$$r(X) = r(X \setminus \{u_1\}) , \quad (5.7)$$

például, ha u egy körnek eleme.

Rögzítsünk továbbá egy másik $u_2 \in X$ és egy új $u' \notin X$ elemet. Ekkor az $\mathcal{M}' := (X', \mathcal{F}')$ matroidot a következőképpen definiáljuk: legyen

$$X' := X \setminus \{u_1\} \cup \{u'\} \quad (5.8)$$

és

$$\mathcal{F}' := \{f \in \mathcal{F} : f \subseteq X \setminus \{u_1\}\} \cup \{f \cup \{u'\} : f \cup \{u_2\} \in \mathcal{F}, f \subseteq X \setminus \{u_1, u_2\}\} . \quad (5.9)$$

□

A fenti konstrukciót legtöbbször akkor használjuk, ha u_1 és u_2 egyazon kör elemei, (5.8) célja a kör megszüntetése.

5.11. Segédállítás. $\mathcal{M}' = (X', \mathcal{F}')$ ismét m -elemű és n -rangú matroid.

Bizonyítás. $|X'| = |X| = m$ nyilvánvaló, (5.7) miatt X azaz \mathcal{M} rangja sem csökken.

"Már csak" azt kell ellenőriznünk, hogy \mathcal{M}' szintén egy matroid, vagyis \mathcal{F}' független halmazrendszer. Elegendő a kicserélési axiómát ellenőriznünk: ha $f_1, f_2 \in \mathcal{F}'$ és $|f_1| < |f_2|$ akkor valamely $e \in f_2 \setminus f_1$ elemre $f_1 \cup \{e\} \in \mathcal{F}'$.

Négy esetet kell megvizsgálnunk attól függően, hogy $u' \in f_i$ ($i = 1, 2$) vagy sem, egyedül az $u' \notin f_1$ és $u' \in f_2$ eset érdekes. Ekkor $f_1 \in \mathcal{F}$ de $u_1 \notin f_1$, és $f'_2 = f_2 \setminus \{u'\}$ miatt $f'_2 \cup \{u_2\} \in \mathcal{F}$ és $f'_2 \subseteq S \setminus \{u_1, u_2\}$. De $|f_1| < |f'_2 \cup \{u_2\}|$, tehát találhatunk olyan $e \in f'_2 \cup \{u_2\} \setminus f_1$ elemet, amelyre $f_1 \cup \{e\} \in \mathcal{F}$. $e = u_2$ esetén az $f_1 \cup \{u'\}$, $e \neq u_2$ esetén pedig az $f_1 \cup \{e\}$ halmaz megfelelő. ■

Az alábbiakban a 2. Konstrukció körök és bázisok számára gyakorolt hatását vizsgáljuk.

KÖRÖK

A szélsőséges matroidok szerkezetének feltárásához a lehetséges u_1 elem kiválasztását kell közelebbről megvizsgálnunk.

5.12. Segédállítás. Legyenek $u_1, u_2 \in X$ valamely nagy kör elemei, és jelölje k_i az u_i -t tartalmazó de u_j -t elkerülő körök számát ($i = 1, 2, i \neq j$). Ha $k_1 \geq k_2$, akkor \mathcal{M} -ből u_1 -et törölve, és egy új, u_2 -vel párhuzamos u' elemmel bővítve (a 2. Konstrukció szerint) \mathcal{M} -ben a körök száma nem növekszik.

Bizonyítás. Jelölje k_{12} azon körök számát, amelyek mind u_1 -et mind u_2 -t tartalmazzák. A 2. Konstrukció folyamán pontosan az u_1 -et tartalmazó

köröket szüntettük meg, vagyis $k_1 + k_{12}$ számú kört. A keletkezett körök pedig a következők: az $\{u_2, u'\}$ kételemű kör, valamint az u_2 helyett u' -t tartalmazó, u_1 -et elkerülő körök, ami k_2 db. A változás $k_2 + 1 - k_1 - k_{12} \leq 0$ hiszen $k_1 \geq k_2$ és $k_{12} \geq 1$.

A $k_1 = k_2$, $k_{12} = 1$ esetben a körök száma nem változik. ■

A 2. Konstrukció ismételt alkalmazásával nagy kört nem tartalmazó matroidot kapunk, az ilyen matroidok között tehát találunk minimális számú kört tartalmazókat. A következő Tételek szerint más szerkezetű matroidokban nem lehet minimális számú kör.

5.13. Tétel. *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*

$$|\vartheta_i - \vartheta_j| \leq 1 \quad \text{ha } i \neq j. \quad (5.10)$$

Bizonyítás. Az \mathcal{M} -re tett feltételek és a gyenge köraxióma miatt X minden eleme pontosan egy a_i elemmel párhuzamos, így

$$\sum_{i=1}^n \vartheta_i = m = |\mathcal{M}|. \quad (5.11)$$

Tegyük fel indirekte, hogy $\vartheta_j > \vartheta_\ell + 1$ valamely $j, \ell \leq n$ esetén. A 2. Konstrukció segítségével töröljük a_j -t és pótoljuk egy új, a_ℓ -el párhuzamos elemmel. \mathcal{M} -ben nem voltak nagy körök, a körök száma \mathcal{M} -ben

$$\binom{\vartheta_j}{2} + \binom{\vartheta_\ell}{2} + \sum_{i \neq j, \ell} \binom{\vartheta_i}{2} \quad (5.12)$$

volt, ami \mathcal{M}' -ben

$$\binom{\vartheta_j - 1}{2} + \binom{\vartheta_\ell + 1}{2} + \sum_{i \neq j, \ell} \binom{\vartheta_i}{2} \quad (5.13)$$

lett. (5.12) < (5.13) miatt a körök száma csökkent. ■

5.14. Következmény. *Az m elemű, n rangú, hurokmentes matroidok körében a körök minimális száma ($m = an + b$, $0 \leq b < n$ esetén)*

$$b \cdot \binom{a+1}{2} + (n-b) \cdot \binom{a}{2}, \quad (5.14)$$

és ha m osztható n -el:

$$n \cdot \binom{\frac{m}{n}}{2}. \quad \square \quad (5.15)$$

A minimális számú kört tartalmazó matroidok *pontos szerkezetét* is le tudjuk írni: kis méret ($m < 2n$) esetén több lehetőség is van, de a nagyméretű ($m \geq 2n$) matroidok felépítése egyértelmű.

5.15. Tétel. *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.

Könnyen látható, hogy az a) feltétel többféleképpen is teljesíthető, míg a b) -t kielégítő matroidok valójában izomorfak.

Az 5.15. Tétel bizonyításához több Segédállítóra van szükségünk.

5.16. Segédállítás. *Ha van \mathcal{M} -ben legalább két nagy kör, akkor legfeljebb egy közös elemük lehet.*

Bizonyítás. Ha K és L nagy körök és $u_1, u_2 \in K \cap L$, $u_1 \neq u_2$, akkor az 5.12. Segédállítás bizonyításában írtak és $k_{12} \geq 2$ szerint \mathcal{M} -ben a körök száma nem lehet minimális. ■

5.17. Segédállítás. *Ha K nagy kör és $u \notin K$ tetszőleges eleme, akkor vagy u párhuzamos K valamely elemével, vagy u -t egyetlen olyan nagy kör sem tartalmazza, amelynek K -val van közös eleme.*

Bizonyítás. Tegyük fel, hogy L nagy kör, mely metszi K -t és tartalmazza u -t. Az 5.16. Segédállítás alapján $K \cap L = \{v\}$. Az erős köraxióma miatt van olyan $H \subseteq K \cup L \setminus \{v\}$ kör, mely tartalmazza u -t.

Ha H nagy, akkor $H \cap L$ és $H \cap K$ közül legalább az egyiknek legalább két eleme van, ami ellentmond az 5.16. Segédállításnak.

Ha H kicsi, akkor u párhuzamos K valamely elemével. ■

5.18. Segédállítás. *Nagy körök elemei nem lehetnek párhuzamosak a matroid egyetlen elemével sem.*

Bizonyítás. Tegyük fel, hogy $K = \{u_1, u_2, \dots, u_p\}$ nagy kör ($p \geq 3$) és $u_1 \parallel u'_1$ valamely $u'_1 \neq u_1$ elemre. Megmutatjuk, hogy ekkor $K' := \{u'_1, u_2, \dots, u_p\}$ is nagy kör \mathcal{M} -ben, ami persze ellentmond az 5.16. Segédállításnak.

Ha $K' \in \mathcal{F}$, akkor K' kiterjeszhető lenne egy B bázissá, de akkor $B \cup \{u_1\}$ -ben K és $\{u_1, u'_1\}$ két különböző kör lenne, ellentmondásban a gyenge köraxiómával.

Azonban K' minden valódi részhalmaza \mathcal{F} -hez tartozik, hiszen ellenkező esetben tartalmazna egy $L \subset K$ kört, amely az 5.16. Segédállítás miatt csak kicsi lehetne. Ez pedig ellentmondás, hiszen $u_1 \parallel u'_1$. ■

A fenti segédállítás alapján minden nagy kör feltétlenül diszjunkt minden más (kicsi vagy nagy) körtől. Így már csak a kicsi körök vannak hátra.

5.19. Segédállítás. *Ha van nagy kör, akkor nincs három (páronként) párhuzamos elem \mathcal{M} -ben.*

Bizonyítás. Legyen K nagy kör és tegyük fel, hogy \mathcal{M} -ben van három párhuzamos elem. Az 5.18. Segédállítás alapján feltehetjük, hogy ez a három elem egyike sem tartozik K -hoz. Legyen egyikük u_1 , u_2 pedig K egy tetszőleges eleme. A 2. Konstrukcióval cseréljük ki u_1 -et egy u_2 -vel párhuzamos új, u'_2 elemre (u_1 teljesíti a Konstrukció feltételeit, hiszen \mathcal{M} -ben nincs hurok).

Az 5.12. Segédállítás gondolatmenetét és jelöléseit alkalmazva kapjuk, hogy $k_2 = 1$, hiszen u_2 csak K -ban található. $k_1 \geq 2$, hiszen u_1 -el legalább két elem párhuzamos. Végül $k_{12} = 0$, mert az 5.17. Segédállítás miatt u_1 nincs egyetlen nagy körben, ami K -t metszi, és nem párhuzamos K egyetlen elemével sem, az 5.18. Segédállítás miatt.

A 2. Konstrukció folyamán tehát k_1 kör szűnt meg, de csak az $\{u_2, u'_2\}$ és $K \setminus \{u_2\} \cup \{u'_2\}$ körök keletkeztek, tehát $1 + 1 - k_1 \leq 0$ miatt a körök száma nem növekedett.

Ekkor azonban az 5.18. Segédállítás bizonyításában leírtak szerint \mathcal{M} köreinek száma csökkenthető, vagyis eredetileg \mathcal{M} -ben a körök száma nem lehetett minimális. ■

Most rátérhetünk az 5.15. Tétel bizonyítására.

Bizonyítás. (5.15. Tétel) Ha \mathcal{M} -ben van nagy kör, akkor az összes kör diszjunkt, az 5.16.-5.19. Segédállítások alapján. Legyen most B egy rögzített bázis. $X \setminus B$ mindegyik u eleme esetén $B \cup \{u\}$ -ban van kör, ami B -nek legalább egyik elemét tartalmazza. Ezek a körök diszjunktak, ezért ebben az esetben $|X \setminus B| = m - n \leq n$ vagyis $m \leq 2n$.

Tehát $m \geq 2n$ esetén \mathcal{M} -ben nem lehet nagy kör. Ekkor használhatjuk az 5.13. Tételt: a párhuzamossági ekvivalenciaosztályok méretei legfeljebb csak 1-gyel térnek el egymástól. ■

5.20. Megjegyzés. *A fenti bizonyítás utolsó bekezdése szerint $m \geq 2n$ esetén a minimális számú kört tartalmazó hurokmentes matroidok szerkezete egyértelmű.*

BÁZISOK

Az alábbi eredmény szerint a minimális számú *bázis*t tartalmazó hurokmentes matroidok szerkezete is egyértelmű.

5.21. Tétel. *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.*

Ismét a 2. Konstrukciót fogjuk használni a minimális bázisszám eléréséhez, ennek jogosságát az alábbi Segédállításban igazoljuk.

5.22. Segédállítás. *Legyen K nagy kör \mathcal{M} -ben és $u_1, u_2 \in K$. Jelölje ℓ_1 az u_1 -et tartalmazó de u_2 -t elkerülő bázisok számát, és ℓ_2 hasonlóan u_2 -re, továbbá legyen $\ell_1 \geq \ell_2$. Ekkor u_1 -et törölve és egy új, u_2 -vel párhuzamos elemre cserélve a 2. Konstrukció szerint, a bázisok száma szigorúan csökken.*

Bizonyítás. Jelölje ℓ_{12} az u_1 és u_2 mindegyikét tartalmazó bázisok számát. u_1 törlésekor pontosan $\ell_1 + \ell_{12}$ bázis szűnik meg, míg az u_2 -vel párhuzamos új elem hozzávételével ℓ_2 új bázis keletkezik.

Az $\{u_1, u_2\}$ halmaz független mivel K nagy kör, tehát $\ell_{12} \geq 1$, ami $\ell_1 \geq \ell_2$ miatt bizonyítja, hogy a bázisok száma szigorúan csökkent. ■

A fenti 5.22. Segédállítás alapján \mathcal{M} -ben nem lehet nagy kör. Ez alapján már az 5.21. Tétel bebizonyítható.

Bizonyítás. (5.21. Tétel) Legyen $B = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ egy tetszőleges rögzített bázis. $X \setminus B$ bármely u elemére $B \cup \{u\}$ -ban van kör, vagyis u valamelyik a_i báziselemmel párhuzamos, hiszen \mathcal{M} -ben nincs nagy kör. Jelölje k_i az a_i -vel párhuzamos elemek számát (a_i -t is hozzávéve), nyilván

$$\sum_{i=1}^n k_i = m. \quad (5.16)$$

A bázisok száma így

$$\prod_{i=1}^n k_i \quad (5.17)$$

ami $k_\ell \geq k_j \geq 2$ esetén tovább csökkenthető: egy a_j -vel párhuzamos elemet törölünk és egy új, a_ℓ -el párhuzamos elemet bevezetünk. A bázisok száma ezután

$$\prod_{i \neq j, \ell}^n k_i \cdot (k_j - 1) \cdot (k_\ell + 1) \quad (5.18)$$

lesz, ami (5.17)-nél szigorúan kisebb. Tehát egy kivétellel az összes k_i csak 1 lehet. ■

5.23. Következmény. *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 az 5.5. "További kérdések matroidokban és hipergráfokban" alfejezetben ismertetünk.

5.4. Hipergráfok

Hipergráfok esetében már a probléma megfogalmazása sem könnyű, most csak egy egyszerű változatot ismertetünk meg és igazolunk.

Alapötletünk a következő: a 4.3.2. " \mathbb{R}^3 szimplexei" alfejezethez hasonlóan, a (háromdimenziós) térben 4- és 5-elemű szimplexekeket vizsgálva ha még a 3-elemű szimplexekeket is kizárjuk, akkor mekkora lehet a szimplexekek száma, ezt jelöljük $s(m)$ -el (5.26)-ban.

Legyen $\mathcal{H} = (V, \mathcal{E})$ egy hipergráf, $V \neq \emptyset$, $\mathcal{E} \subseteq \mathcal{P}(V)$.

5.24. Definíció. *Tetszőleges $k \in \mathbb{N}$ természetes szám esetén legyen*

(i) \mathcal{E}_k a k -elemű élek halmaza:

$$\mathcal{E}_k := \{E \in \mathcal{E} : |E| = k\}, \quad (5.19)$$

(ii) V bármelyik k -elemű részhalmazát k -**csúcsnak** nevezzük,

(iii) V azon $S \subset V$ csúcsalmazait, amelyeket egyetlen \mathcal{E} -beli él sem fed le:

$$S \not\subseteq E \quad \text{minden } E \in \mathcal{E} \text{ esetén}, \quad (5.20)$$

általános helyzetűeknek nevezzük,

(iv) az (5.20) feltételt kielégítő k -csúcsok neve k -**gúlának**,

(v) a 4-csúcsokat **quadnak**, a 4-gúlánkat pedig **tetraédereknek** is nevezzük.

\square

5.25. Definíció. (vi) Az $S \subset V$ részhalmaz 4-(elemű) **szimplex**, ha S quad de nem tetraéder, vagyis

$$S \subseteq E \quad \text{valamely } E \in \mathcal{E} \text{-re}, \quad (5.21)$$

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

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

$$F \not\subseteq T \quad \text{bármelyik } F \in \mathcal{S}_4 \text{-re}, \quad (5.22)$$

vagy másképpen: T minden \mathcal{E} -beli E élet legfeljebb 3 pontban metsz:

$$|T \cap E| \leq 3 \quad \text{minden } E \in \mathcal{E} \text{ -re,} \quad (5.23)$$

az 5 -elemű szimplexek halmazát \mathcal{S}_5 jelöli. \square

5.26. Megjegyzés. A 4 -csúcsok közül pontosan a 4 -elemű szimplexet fedik \mathcal{E} -beli élek, speciálisan

$$\mathcal{E}_4 \subseteq \mathcal{S}_4 . \quad (5.24)$$

\square

Mivel a fenti definíciókban és az alfejezet hátralevő részében a legfeljebb 3 -elemű élek nem játszanak szerepet, ezért a kis éleket elhagyhatjuk, vagyis feltehetjük:

5.27. Feltétel.

$$\mathcal{E}_\ell = \emptyset \quad \text{ha } \ell \leq 3 . \quad \square \quad (5.25)$$

A következő problémát fogjuk megoldani.

5.28. Probléma. Mekkora az

$$s(m) := |\mathcal{S}_4| + |\mathcal{S}_5| \quad (5.26)$$

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

Sajnos az alábbi korlátozásra is szükségünk van:

5.29. Feltétel. Tetszőleges $E_1, E_2 \in \mathcal{E}$, $E_1 \neq E_2$ élekre (mérettől függetlenül)

$$|E_1 \cap E_2| \leq 2 . \quad \square \quad (5.27)$$

Eredményünk a következő:

5.30. Tétel. Az 5.27. és 5.29. Feltételek és $m \geq 58$ esetén

$$s(m) \geq \binom{m}{4} - \frac{1}{6}C_1m^3 - \mathcal{O}(m^2) \quad (5.28)$$

ahol $C_1 \leq 17$ és $m \geq 58$.

Néhány technikai jelölést és elnevezést fogunk használni.

5.31. Definíció. (i) Legyenek $x, y, z \in V$ tetszőleges különböző pontok. A $P \in \mathcal{E}$ élt az $\{x, y, z\}$ ponthármas által **kifeszített (hiper-) síknak** nevezük, és $[x, y, z]$ -el jelöljük, ha $x, y, z \in P$. Amennyiben ilyen P nem található, akkor $[x, y, z] = \emptyset$ -t írunk. \mathcal{E} elemeit általában **síkoknak** nevezük.

(ii) Tetszőleges $T = \{x_1, x_2, x_3, x_4\} \subset V$ tetraéder esetén az $[x_1, x_2, x_3]$, $[x_1, x_2, x_4]$, $[x_1, x_3, x_4]$ és $[x_2, x_3, x_4]$ síkokat a tetraéder **lapjainak** vagy **oldalainak** nevezük, halmazelméleti **úniójukat** $U \{x_1, x_2, x_3, x_4\}$ jelöli:

$$U \{x_1, x_2, x_3, x_4\} := [x_1, x_2, x_3] \cup [x_1, x_2, x_4] \cup [x_1, x_3, x_4] \cup [x_2, x_3, x_4] . \quad (5.29)$$

□

5.32. Megjegyzés. Az (5.27) feltétel alapján a kifeszített hipersík mindig egyértelmű, természetesen az $[x, y, z] = \emptyset$ eset is előfordulhat. □

Bizonyítás. (5.30. Tétel) Két esetet különböztetünk meg.

I. eset. Tegyük fel, hogy bármely $\{x_1, x_2, x_3, x_4\} \subset V$ tetraéder V -nek legalább 5 pontját nem fedi le, azaz

$$|V \setminus U \{x_1, x_2, x_3, x_4\}| \geq 5 . \quad (5.30)$$

Ez esetben bármely $\{x_1, x_2, x_3, x_4\} \subset V$ tetraédert legalább öt $y_i \in V \setminus U \{x_1, x_2, x_3, x_4\}$ ponttal ki tudjuk egészíteni 5 -elemű szimplexszé.

Hány 5 -elemű szimplexünk van ebben az esetben összesen? Az előző mondat szerint minden 5 -elemű $\{z_1, z_2, z_3, z_4, z_5\}$ szimplexet legfeljebb ötször számoltunk össze (mindegyik z_j lehetett y_i).

Mennyi lehet $s(m)$ - a (bármekkora) szimplexek összes száma? Legalább $\binom{m}{4}$, amennyi 4 -csúcs van V -ben. Valóban: minden 4 -csúcs vagy egy 4 -elemű szimplex, vagy (lévén tetraéder) generál legalább egy új 5 -elemű szimplexet.

II. eset. Van (legalább egy) $T := \{x_1, x_2, x_3, x_4\} \subset V$ tetraéder, amelyre (5.30) nem teljesül, azaz

$$|V \setminus U \{x_1, x_2, x_3, x_4\}| \leq 4 . \quad (5.31)$$

Jelöljük $U \{x_1, x_2, x_3, x_4\}$ (5.29)-ben szereplő síkjait P_1, P_2, P_3, P_4 -el, $P_j \in \mathcal{E}$, vagyis

$$U \{x_1, x_2, x_3, x_4\} = P_1 \cup P_2 \cup P_3 \cup P_4 . \quad (5.32)$$

Ekkor V néhány elemét elhagyhatjuk vizsgálatainkból:

(†) $V \setminus U \{x_1, x_2, x_3, x_4\}$ elemeit: ez legfeljebb 4 pont,

(‡) T oldalainak metszéspontjait: ezek pontosan a x_1, x_2, x_3, x_4 pontok, az (5.27) feltétel miatt.

Ekkor a P_1, P_2, P_3, P_4 síkoknak is három-három pontját elhagytuk, legyenek $P_1^-, P_2^-, P_3^-, P_4^-$ a megmaradt halmazok, vagyis legyen

$$P_i^- := P_i \setminus \{x_1, x_2, x_3, x_4\} \quad (i \leq 4). \quad (5.33)$$

Ezek után azon P_i^- halmazokat is hagyjuk el, amelyekben legfeljebb 3 elem maradt.

Vegyük észre, hogy legalább egy P_i^- halmaz megmaradt, hiszen $m > 4 + 4 + 4 \cdot 3 = 20$. Jelölje C_1 az elhagyott pontok számát, a fentiek szerint

$$C_1 \leq 4 + 4 + 3 \cdot 3 = 17. \quad (5.34)$$

A maradék ponthalmaz legyen $V^- \subseteq V$, a fentiek szerint

$$V^- = P_1^- \cup \dots \cup P_j^- \quad (5.35)$$

valamely $1 \leq j \leq 4$ számra.

Megmutatjuk, hogy még mindig sok 4- és 5-elemű szimplex maradt (a törölt és elrontott szimplexeket tehát nem számoljuk).

1. aleset: Ha csak egy P_1^- halmazunk maradt ($j = 1$), akkor csak 4-elemű szimplexeink maradtak, de P_1^- bármely pontnégyese szimplex, így

$$s(m) \geq \binom{m - C_1}{4}. \quad (5.36)$$

Az egyszerű

$$\binom{m}{4} - \binom{m - C_1}{4} = \frac{1}{6}C_1 m^3 + \mathcal{O}(m^2) \quad (5.37)$$

átalakítás igazolja az (5.28) becslést.

2. aleset: Legalább kettő de legfeljebb négy P_1^-, \dots, P_j^- sík nem üres (5.35) -ben, ezek tartalmazzák az összes maradék pontot.

Ez esetben is megmutatjuk, az I. esethez hasonlóan, hogy:

(*) "*bármely $Y \subset V^-$ tetraéder legalább öt ponttal kiegészíthető 5-elemű szimplexszé*".

Ugyanis tetszőleges $Y = \{y_1, y_2, y_3, y_4\} \subset V^-$ tetraéder esetén egy $z \in V^- \setminus Y$ pont az y_1, y_2, y_3, y_4 pontokkal pontosan akkor *nem* alkot 5-elemű szimplexet, ha z -t Y -nek *valamelyik* oldala tartalmazza, vagyis $z \in U\{y_1, y_2, y_3, y_4\}$. Y -nak négy oldala van, az összes pont a P_1^-, \dots, P_j^- síkon van ($j \leq 4$), ezért a kizárt z pontok száma (5.27) szerint (az y_1, y_2, y_3, y_4 pontokkal együtt) legfeljebb $4^2 \cdot 2 + 4 = 36$.

Tehát (*) biztosan teljesül

$$m - C_1 > 4 + 4^2 \cdot 2 + 5 = 41 \quad (5.38)$$

vagyis (5.34) alapján

$$m > 17 + 41 = 58 \quad (5.39)$$

esetén. Minden 5 -elemű $\{z_1, z_2, z_3, z_4, z_5\}$ szimplexet tehát legfeljebb ötször számoltunk össze: mindegyik z_k lehetett y_i . Ekkor pedig, az I. esethez hasonlóan

$$s(m) \geq \binom{m - C_1}{4} \quad (5.40)$$

hiszen minden 4 -csúcs vagy egy 4 -elemű szimplex, vagy (lévén tetraéder) generál legalább egy új 5 -elemű szimplexet. (5.37) alapján ebben az esetben is igazoltuk az (5.28) összefüggést. ■

5.5. További kérdések matroidokban és hipergráfokban

Hurok- és párhuzamos elemek nélküli matroidokban még nem sikerült a bázisok és körök minimális számát megállapítanunk.

5.33. Probléma. *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!* □

Az előző 4. "A szimplexek száma \mathbb{R}^n -ben" fejezet 4.28. Problémájához hasonlóan a fenti probléma általánosabban is felvethető.

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

5.35. Probléma. *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:

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

$$1 + 3 \cdot \binom{m-3}{k-1} + 3 \cdot \binom{m-3}{k-2} + \binom{m-3}{k-3} \leq \text{simp}(\mathcal{M}) . \quad \square \quad (5.41)$$

Végezetül megpróbáljuk az 5.30. Tétel eredményét is általánosítani.

5.37. Definíció. 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

$$E \not\supseteq F \quad \text{ha } F \in \mathcal{E}_k . \quad (5.42)$$

A $k + 1$ -elemű majdnem-szimplexek halmaza legyen

$$\mathcal{E}_{k+1}^o . \quad \square \quad (5.43)$$

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

$$s_k(m) := |\mathcal{E}_k| + |\mathcal{E}_{k+1}^o| . \quad (5.44)$$

5.39. Sejtés. A

$$|E_1 \cap E_2| \leq 2 \quad \text{ha } E_1, E_2 \in \mathcal{E} \quad (5.45)$$

feltétel esetén, tetszőleges k számra

$$s_k(m) \geq \binom{m}{k} - \mathcal{O}(m^{k-1}) . \quad \square \quad (5.46)$$

6. fejezet

További kutatási témák

Ebben a fejezetben az értekezésben már nem tárgyalt további kutatásainkat, problémafelvetéseket, valamint az értekezés témájához lazán kapcsolódó egyéb eredményeinket foglaljuk össze nagyon röviden. További eredmények [1999]-ban találhatóak.

6.1. A dimenzió bővítése

A 2.2.1. "Közvetlen reakciók keresése" alfejezet (i) pontjában adathalmazunkat új ("ideális") vektorokkal bővítettük a terminális és nemterminális molekulák szétválasztása céljából. Ez a bővítés nyilvánvalóan megnövelheti az algoritmus futásidejét ("valamit valamiért").

6.1. Probléma. *Vizsgáljuk meg a 2.2.1. alfejezet (i) pontjában leírt bővítés hatását az algoritmus futásidejére, és amennyiben szükséges, a futásidő csökkentésének lehetőségét.* \square

6.2. Pontosabb becslések

Mint a 4. "A szimplexek száma \mathbb{R}^n -ben" fejezet 4.4. alfejezetében említettük, $\text{simp}(\mathcal{H})$ legkisebb értékére még aszimptotikus becsléseink sincsenek abban az esetben, amikor \mathcal{H} -ban nincsenek párhuzamos vektorok, a 4.27. Sejtés és a 4.28., 4.28. Problémák máig megoldatlanok.

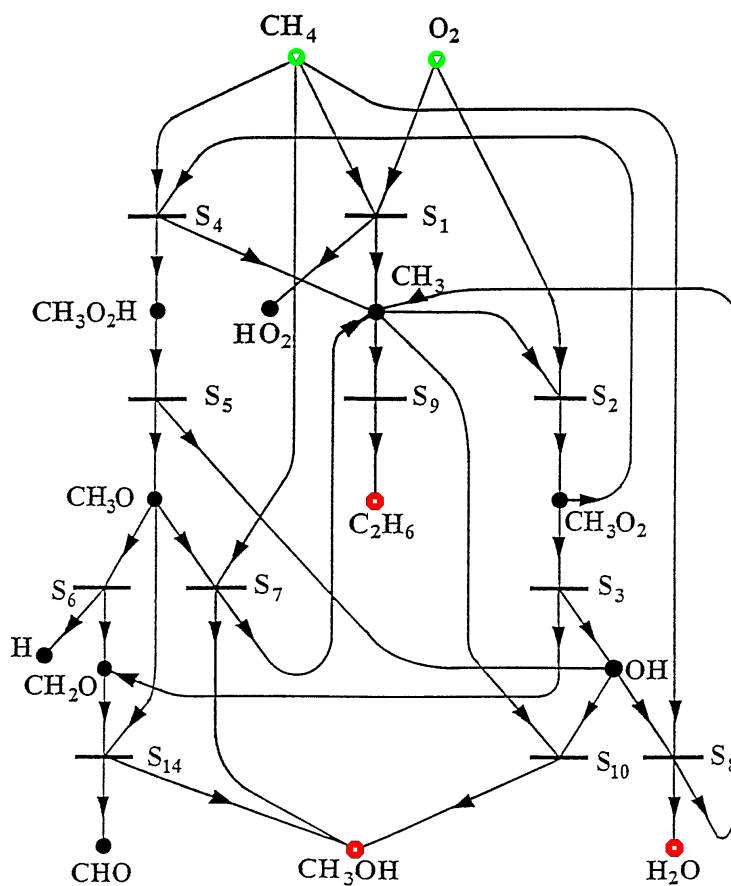
Az \mathbb{R}^n -beli, lineáris algebrai megoldatlan problémák és sejtések megfelelőit az 5.5. alfejezetben gyűjtöttük össze.

6.3. Más algoritmusok

Amint a 2.4. "Más algoritmusok" alfejezetben említettük, reakciómechanizmusok gráfelméleti, számelméleti és lineáris programozás módszerekkel is eredményesen vizsgálhatók. Fontos lenne a lineáris algebrai és a fenti módszerek kapcsolatának mélyebb vizsgálata.

6.2. Probléma. *Tanulmányozzuk az értekezésben és a 2.4. alfejezetben említett módszerek és eredmények kapcsolatát.* □

Például a *P-gráfokban* (ld. ábra) tárolt információk is leírhatók lineáris algebrai módszerekkel és viszont. (A bemutatott *Petri-gráf* azonos a reakció *Volpert-gráfjával*, teljesen egyenértékű a gyakran alkalmazott *Feinberg-Horn-Jackson-gráffal*.)



Egy P-gráf ([B99])

6.4. Hierarchiák

A figyelmes Olvasó bizonyára már észrevette, hogy a reakciók éppúgy atomcsoportok lineáris kombinációi, mint ahogyan az atomcsoportok felépülnek az atomokból, és a mechanizmusok szintén lineáris kombinációi az előbb megtalált reakcióknak. (Reakcióknál és mechanizmusoknál mi a minimális lineáris kombinációkat keressük.)

Mivel a következő *szint* kiindulási "anyagai" (vektorai) éppen az előző szint "végtermékei" (megoldáshalmaz vektorai), ezért kézenfekvő a szomszédos és távolabbi szintek (hierarchiák) vektorai közötti kapcsolatok mélyebb vizsgálata. Pethő Árpád (†2012) személyes beszélgetései és P.H.Sellers [S02] levelei alapján az alábbi megközelítés a kiindulópontja [2013b] cikkünknek.

Legyenek $x \in \mathbb{N}$ esetén $\mathcal{A}_x = \{A_1^x, \dots, A_{d_x}^x\}$ *tetszőleges*, véges, diszjunkt halmazok, és

$$\mathcal{L}_x := (L_x, +, \cdot) \quad (6.1)$$

jelölje az \mathcal{A}_x által \mathbb{Z} felett generált szabad modulust (+ és \cdot komponensenkénti összeadás és skalárral való szorzás), ahol

$$L_x := \left\{ \sum_{j=1}^{d_x} \alpha_j \cdot A_j^x : \alpha_j \in \mathbb{Z} \right\}. \quad (6.2)$$

Bár \mathcal{A}_x elemeit \mathcal{A}_{x-1} elemeinek lineáris kombinációiként képzeljük el, *egyenlőséget nem tehetünk* \mathcal{A}_x elemei és a lineáris kombinációk közé, hiszen pl. izomer molekuláknak vagy más sorrendben lejátszódó mechanizmusoknak *ugyanazon* lineáris kombinációk felelnek meg. Ezért van szükségünk az alábbi Δ_x függvényekre.

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

$$\Delta_x : \mathcal{L}_x \rightarrow \mathcal{L}_{x-1} \quad (6.3)$$

homomorfizmussá az

$$\Delta_x \left(\sum_{j=1}^{d_x} \alpha_{i,j} \cdot A_i^x \right) := \sum_{j=1}^{d_x} \alpha_{i,j} \cdot \Delta_x^-(A_i^x) \quad (\alpha_j \in \mathbb{Z}) \quad (6.4)$$

egyenlőségekkel.

6.3. Definíció. A fenti \mathcal{L}_x algebrákat hívjuk a *sztochiometriai hierarchia x -edik szintjének* és a Δ_x függvényeket közöttük *sztochiometriai kapcsolatoknak*, ha a fenti (6.1) - (6.4) feltételeken túl minden $1 < x$ esetén még teljesül az *anyagmegmaradás általánosított követelménye* is:

$$\Delta_{x-1} \circ \Delta_x = O \quad (6.5)$$

vagyis

$$\Delta_{x-1} \left(\Delta_x \left(\sum_{j=1}^{d_x} \alpha_{i,j} \cdot A_i^x \right) \right) = \underline{0} = \sum_{j=1}^{d_{x-2}} 0 \cdot A_i^{x-2} . \quad \square \quad (6.6)$$

6.4. Probléma. *Tanulmányozzuk a sztöchiometriai hierarchiák algebrai tulajdonságait, a szintek kapcsolatait, és mindezek kémiai vonatkozásait, alkalmazásait, stb.* \square

6.5. A kiértékelési operátor

Az általunk "csak" vektorokként tekintett kémiai objektumok (atomcsoportok, reakciók) rengeteg mennyiségi mutatója is fontos a kémiában és a fizikában (pl. móltömeg, reakcióhő, Gibbs szabad entalpia, Reynold -szám, mértékegységek, stb., ld. pl. [RS66] és [2000b] bevezetésében). Ezek a mennyiségek (legtöbbször) additívák és homogének, vagyis lineáris $\mathcal{L} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ leképezések (funkcionálok). [2000b]-ban a lineáris funkcionálok jól ismert eredményeinek kémiai felhasználhatóságát mutattuk be, most csak néhány eredményt közlünk. Eredményeink különböznek Wasylkiewicz-Ung [W00] és [WU00]-ben megjelent eredményeitől.

6.5. Definíció. (i) *Tetszőleges véges*

$$\{C_1, \dots, C_n\} \quad (6.7)$$

*halmaz elemeit **komponenseknek**, az elemek (bármilyen)*

$$\underline{S} = \sum_{i=1}^n s_i \cdot C_i \quad (s_i \in \mathbb{R}) \quad (6.8)$$

*lineáris kombinációját **struktúrának**, a struktúrák*

$$V := \left\{ \sum_{i=1}^n s_i \cdot C_i : s_i \in \mathbb{R} \right\} \quad (6.9)$$

*(formális) vektorteret **anyagalmaznak** hívjuk.*

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

A linearitás azonnali természetes következménye:

6.6. Tétel. *Bármely V anyaghalmazon csak*

$$\mathcal{L}(\underline{S}) = \sum_{i=1}^n a_i \cdot s_i \quad (6.10)$$

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 (6.8)-ben definiáltuk. \square

A fenti Tételből azonnal kapjuk Hess közismert termodinamikai törvényének egysoros bizonyítását:

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

Bizonyítás. Ha $\sum_{j=1}^k \lambda_j X_j = \underline{\mathcal{O}}$, akkor

$$\sum_{j=1}^k \lambda_j \mathcal{H}(X_j) = \mathcal{H}\left(\sum_{j=1}^k \lambda_j X_j\right) = \mathcal{H}(\underline{\mathcal{O}}) = 0. \quad (6.11)$$

■

Közismert, hogy véges dimenziójú V vektorterek V^* duális tere izomorf az eredeti térrel, ezért könnyen belátható:

6.8. Tétel. *Ha V -t n komponens alkotja (6.9)-ben, 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*

$$\mathcal{L} = \alpha_1 \mathcal{L}_1 + \dots + \alpha_n \mathcal{L}_n \quad (6.12)$$

alakban. \square

A Cauchy-Bunyakovsky-Schwarz egyenlőtlenséget az Euklideszi skalárszorzatra alkalmazva azonnal *felső korlátot* kapunk $\mathcal{L}(\underline{S})$ értékeire:

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

$$|\mathcal{L}(\underline{S})| \leq c \cdot \|\underline{S}\| \quad (6.13)$$

tetszőleges $\underline{S} \in V$ struktúrára, ahol

$$\|\underline{S}\| = \sqrt{s_1^2 + \dots + s_n^2} \quad \text{és} \quad c = \sqrt{a_1^2 + \dots + a_n^2} \quad (6.14)$$

és az s_i és a_i számokat (6.8) és (6.10) határozzák meg. \square

Sajnos mindegyik \mathcal{L} lineáris funkcionál magtere nem csak a $\underline{0}$ vektort tartalmazza, ezért még $|\mathcal{L}|$ -re sem alkalmazhatjuk a véges dimenziós terek normáinak korlátosságára és topológiai ekvivalenciájára vonatkozó tételeket.

Amennyiben kutatásunkat új komponensekkel bővítjük, régebbi számításainkat nem kell sutba dobnunk: a $V_{régi} \oplus V_{új}$ direkt összeget kell használnunk, hiszen $\underline{v} = \underline{v}_1 + \underline{v}_2 \in V_1 \oplus V_2$ esetén $\mathcal{L}(\underline{v}) = \mathcal{L}_1(\underline{v}_1) + \mathcal{L}_2(\underline{v}_2)$. Sőt, bármely $\mathcal{L} : V_1 \oplus V_2 \rightarrow \mathbb{R}$ funkcionál könnyen és egyértelműen felbontható az előző $\mathcal{L} = \mathcal{L}_1 \oplus \mathcal{L}_2$ alakban.

A fenti gondolatmenet egy *nagyon* egyszerű következmény:

6.10. Tétel. 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

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}|_{V_1} \oplus \mathcal{L}|_{V_2} \quad , \quad (6.15)$$

vagyis

$$\mathcal{L}(\underline{S}) = \sum_{i=1}^n a_i \cdot s_i + \sum_{j=1}^m b_j \cdot t_j \quad (6.16)$$

alakú operátorok lehetségesek, ahol természetesen

$$\underline{S} = \sum_{i=1}^n s_i \cdot C_i + \sum_{j=1}^m t_j \cdot D_j \quad . \quad (6.17)$$

□

Idézzük fel Riesz F. *Reprezentációs tételét* az alábbi közismert tétel mellett:

6.11. Tétel. Bármely két skalárszorzat, $\mathcal{A}, \mathcal{B} : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ esetén valamilyen $\mathcal{I} : V \rightarrow V$ automorfizmusra

$$\mathcal{A}(\underline{u}, \underline{v}) = \mathcal{B}(\mathcal{I}(\underline{u}), \mathcal{I}(\underline{v})) \quad (6.18)$$

teljesül minden $\underline{u}, \underline{v} \in V$ vektorokra,

sőt \mathcal{I} folytonos az \mathcal{A} és \mathcal{B} által indukált topológiákra nézve. □

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

A fenti észrevételek ugyan matematikailag egyszerűek, de a kémiában és fizikában nagyon jól hasznosíthatóak, további alkalmazásokat [2000b]-ben találunk.

7. fejezet

Számítógépes eredmények

Ebben a fejezetben néhány konkrét feladatot oldunk meg a 2. ”*Egy algoritmus és változatai*” fejezetben bemutatott algoritmus segítségével. Elemezzük az algoritmus változatainak alkalmazhatóságát és a futásidőket is, ezáltal nem csak a 2., hanem a 4. ”*A szimplexek száma \mathbb{R}^n -ben*” fejezetben ismertetett elméleti eredményeket is összehasonlíthatjuk a gyakorlati adatokkal.

Mint a 2. Fejezetben hangsúlyoztuk, az algoritmus mindig polinomiális idő alatt megtalálja az összes minimális reakciót illetve mechanizmust (szimplexeket). Bár a kitevő elég nagy lehet (dimenzió+1), közepes méretű feladatok (pár tucat vektor 10-20 dimenzióban) esetén a futásidő általában a másodperc töredéke, párszáz vektor esetén is egy óránál kevesebb. Ez utóbbi soknak tűnhet, de a 2.1. ”*Az algoritmus*” alfejezet 2.2. Tételében és a 2.1.1. ”*Az algoritmus sebessége*” alfejezetben is beláttuk: az algoritmus nem vizsgál felesleges részhalmazokat, vagyis lényegesen már nem gyorsítható!

A táblázatokban szereplő számítási adatok Packard-Bell PC számítógépre vonatkoznak, 366 MHz órajelű Pentium II. processzorral, Windows 98 operációs rendszerrel, a Pascal nyelven írt programot Borland Turbo 6.0 fordítóval állítottuk össze. Közismert, hogy nagyobb órajelű gépek újabb (bonyolultabb) operációs rendszerrel általában nem végzik el a számításokat több nagyságrenddel rövidebb idő alatt, ezért mi az általunk vizsgált közepes méretű példák esetében bizonyító erejűnek ítéljük meg a mi gépünkön végzett számítási kísérleteket.

Amennyiben a feladatban egy S_R eredményvektor (közvetlen reakció) is adott, a 2.2.1. ”*Közvetlen reakciók keresése*” alfejezetben említetteknek megfelelően a programot többféleképpen futtattuk: csak az eredeti $\{\mathbf{X}_i : i \leq k\}$ halmaz szimplexeit, csak az S_R vektort tartalmazó, illetve az összes szimplexet megkeresve a futásidőt rendre $\nu(VarOrig)$, $\nu(VarOnly)$ illetve $\nu(VarAll)$

jelöli. Ezzel kísérletileg is igazoltuk a 2.2.1. Alfejezet (2.14) összefüggését:

$$\nu(VarAll) = \nu(VarOnly) + \nu(VarOrig) .$$

Numerikus példáink nagy részét Happel-Otarod-Sellers [HOS90] és Bertók [B99], [B03] dolgozataiból vettük át, akik más algoritmusokkal hasonló futás-időket értek el. Pethő és Kumar [KP85] csak végeredmény listát közölnek, számítási módszerek leírása nélkül.

7.1. Amundson

Legelső példánk Amundson [A66]-ből származik, Pethő [P90]-ban is megtalálható.

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 (pl. [P90]), melyeket algoritmusunk 0.22 másodperc alatt talált meg.

Mivel az eredeti vektorok között párhuzamosak *nem* szerepelnek, ezért a szimplexek számának, vagyis az algoritmus futási idejének alsó becslésére, a 4.3. alfejezet 4.22. Következményének képletét használhatjuk.

N (vektortér dimenziója)	3
n (a H által kifeszített altér dimenziója)	3
M (input vektorok száma: $ H $)	11
$simp(H)$ (szimplexek tényleges száma)	213
$1 + \binom{M-2}{3} + \binom{M-3}{2}$ (alsó becslés)	$113 \leq$
$\binom{M}{n+1}$ (felső becslés)	≤ 330
t (futásidő [mp])	0.22 mp
H vizsgált részhalmazainak száma	502

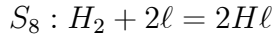
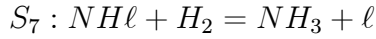
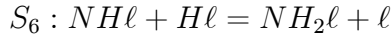
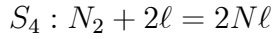
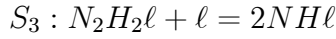
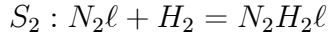
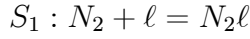
”Amundson”

7.1. Táblázat

7.2. Ammónia 1

Következő példánk elnevezése [HOS90] -ben "Ammonia", mely [B99] 4. példája.

$S_1 - S_9$ a lehetséges elemi reakciók, S_R a kívánt végeredmény (overall) reakció:



ahol ℓ a katalizátor felületét jelöli.

Algoritmusunk a következő minimális mechanizmusokat találta:

$$1) 3S_1 + 3S_2 + 3S_3 - 2S_4 - 4S_5 + 2S_6 + 2S_9 = S_R$$

$$2) S_1 + S_2 + S_3 + 2S_6 + 2S_8 + 2S_9 = S_R$$

$$3) S_1 + S_2 + S_3 + 2S_7 = S_R$$

$$4) S_4 + 2S_5 - S_6 + 3S_7 - S_9 = S_R$$

$$5) S_4 + 2S_5 + 2S_6 + 3S_8 + 2S_9 = S_R$$

$$6) S_4 + 2S_5 + 2S_7 + S_8 = S_R$$

$$7) -S_1 - S_2 - S_3 + S_4 + 2S_5 - S_6 + S_7 - S_9 = 0$$

$$8) S_1 + S_2 + S_3 - S_4 - 2S_5 - S_8 = 0$$

$$9) -S_6 + S_7 - S_8 - S_9 = 0$$

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

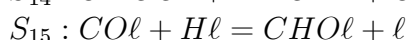
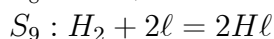
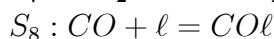
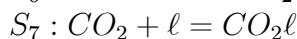
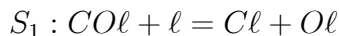
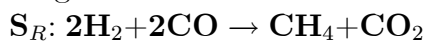
	Összesen	Csak S_R -et tartalmazók
N (a vektortér dimenziója)	10	10
n (a H által kifeszített altér dimenziója)	7	7
M (input vektorok száma: $ H $)	10	10
$\text{simp}(H)$ (szimplexek száma)	9	6
$b \cdot \binom{a+1}{2} + (n-b) \cdot \binom{a}{2}$ (alsó becslés)	$3 \leq$	$1 \leq$
$\binom{M}{n+1}$ (felső becslés)	≤ 45	≤ 36
t (futásidő [mp])	0.44 mp	0.28 mp
H vizsgált részalmazainak száma	969	473

"Ammónia 1"

7.2. Táblázat

7.3. Metán

Harmadik példánk metán szintézise szénmonoxid és vízből, Bertók [B99] ötödik példája, mely eredetileg [HS83]-ből származik. A végső (overall) és a lehetséges elemi reakciók a következők:



Az összes minimális mechanizmus (output):

$$1) S_1 + S_2 + S_3 + S_4 + S_5 - S_7 + 2S_8 + 2S_9 - S_{10} - S_{11} + S_{12} + S_{15} = S_R$$

$$2) S_1 + S_2 + S_3 + S_4 + S_5 - S_7 + 2S_8 + 2S_9 - S_{10} + S_{12} - S_{14} = S_R$$

$$3) S_1 + S_2 + S_3 + S_4 + S_5 - S_7 + 2S_8 + 2S_9 + S_{13} = S_R$$

$$4) S_{10} + S_{11} - S_{12} + S_{13} - S_{15} = 0$$

$$5) S_{10} - S_{12} + S_{13} + S_{14} = 0$$

$$6) S_{11} - S_{14} - S_{15} = 0$$

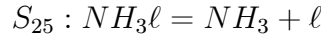
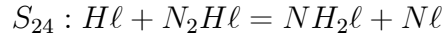
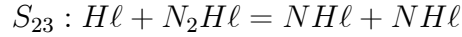
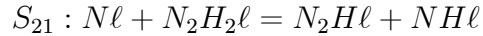
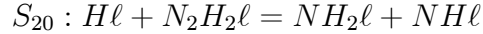
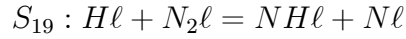
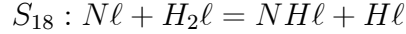
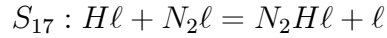
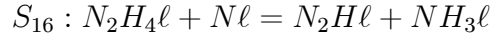
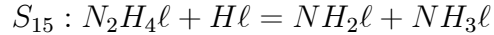
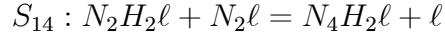
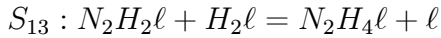
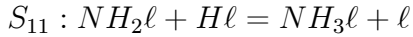
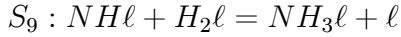
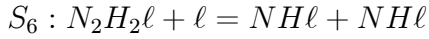
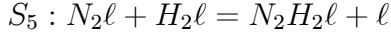
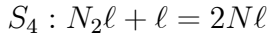
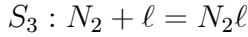
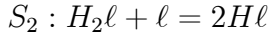
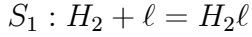
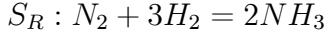
	Összesen	Csak S_R -t tartalmazók
N (vektortér dimenziója)	17	17
n (a H által kifeszített altér dimenziója)	13	13
M (input vektorok száma: $ H $)	16	16
$\text{simp}(H)$ (szimplexek száma)	6	3
$b \cdot \binom{a+1}{2} + (n-b) \cdot \binom{a}{2}$ (alsó becslés)	$4 \leq$	$1 \leq$
$\binom{M}{n+1}$ (felső becslés)	≤ 120	≤ 105
t (futásidő [mp])	78.60 s	43.28 s
H vizsgált részhalmazainak száma	63 429	31 697

”Metán”

7.3. Táblázat

7.4. Ammónia 2

Az Ammóniaszintézis következő változatával [B99] és [FBF99]-ban találkoztunk. A végső (overall) és a lehetséges elemi reakciók a következők (S_{22} technikai okok miatt maradt ki):



Számításainkat az alábbi Táblázat tartalmazza:

	Összesen	Csak S_R -t tartalmazók
N (vektortér dimenziója)	15	15
n (a H által kifeszített altér dimenziója)	14	14
M (input vektorok száma: $ H $)	25	25
$\text{simp}(H)$ (szimplexek száma)	5, 609	3, 585
$b \cdot \binom{a+1}{2} + (n-b) \cdot \binom{a}{2}$ (alsó becslés)	$11 \leq$	$1 \leq$
$\binom{M}{n+1}$ (felső becslés)	$\leq 3\,268\,760$	$\leq 1\,961\,256$
t (futásidő [mp])	$2.1 \cdot 10^4 \text{ mp}$ $\approx 5h50p$	$1.2 \cdot 10^4 \text{ mp}$ $\approx 3h21p$
H vizsgált részhalmazainak száma	10 664 430	2 846 629

"Ammónia 2"

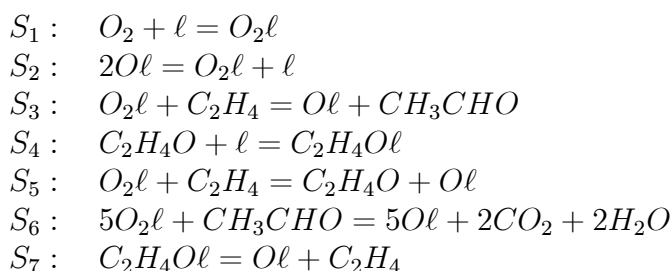
7.4. Táblázat

Bertók [B99] ugyanazon output listát kapta mint mi, futásideje 13 óra szemben a fenti 3 óra 21 perc idővel.

A következő három példával a 2.2. "Az algoritmus kiterjesztései" alfejezetben írt módosítások hatását szemléltetjük.

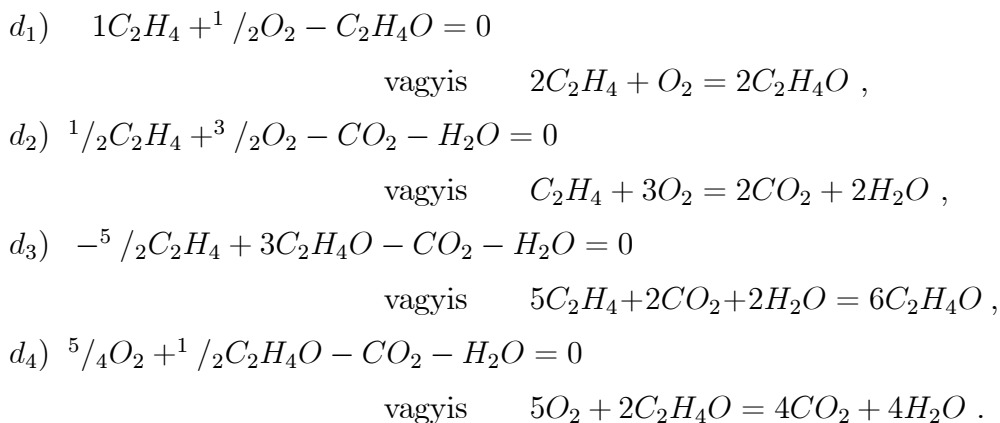
7.5. Etilénoxid

Első példánk [HOS90] "Ethylene Oxide Synthesis" példája. Adottak a következő reakciók (X_i helyett S_i jelöléssel):



ahol a végleges (terminális) molekulák C_2H_4O , C_2H_4 , O_2 , CO_2 , H_2O , a többi köztes (aktív) atomcsoport.

Ezen terminális molekulák között Algoritmusunk alapváltozata 0.00 sec alatt megtalálta az összes *elméletileg lehetséges* minimális reakciót (az S_1, \dots, S_7 reakciókkal most még nem foglalkozunk):



ami megegyezik [HOS90] eredményével. A futási adatokat a 7.5. Táblázatban láthatjuk.

A 7.5. Táblázat második oszlopa az eredeti vektorok (S_1, \dots, S_7) közötti, üres reakciót ($\underline{0}$ vektort) eredményező mechanizmusok keresését mutatja. Mivel az algoritmus talált (legalább egy) ilyen mechanizmust (m_{12}), ezért S_1, \dots, S_7 lineárisan összefüggők.

Most bevezetjük az új V_1, \dots, V_5 vektorokat (minden terminális molekulához egy-egy) a 2.2.1. alfejezet (i) pontja szerint, majd az $S_1, \dots, S_7, V_1, \dots, V_5$

vektorok között megkeressük a szimplexeket. Az alábbi minimális mechanizmusokat kaptuk (és megadtuk az általuk megvalósított overall reakciókat is):

$$m_1 : {}^7/6C_2H_4 + O_2 - C_2H_4O - {}^1/3CO_2 - {}^1/3H_2O + S_1 + {}^1/6S_3 - S_4 + {}^1/6S_6 - S_7 = 0$$

$$\text{vagyis } d_5 = -S_1 - {}^1/6S_3 + S_4 - {}^1/6S_6 + S_7 ,$$

$$m_2 : C_2H_4 + {}^1/2O_2 - C_2H_4O + {}^1/2S_1 - {}^1/2S_2 - S_4 - S_7 = 0$$

$$\text{vagyis } d_1 = -{}^1/2S_1 + {}^1/2S_2 + S_4 + S_7 ,$$

$$m_3 : -C_2H_4 - {}^1/2O_2 + C_2H_4O - {}^1/2S_1 - {}^1/2S_2 - S_5 = 0$$

$$\text{vagyis } d_1 = -{}^1/2S_1 - {}^1/2S_2 - S_5 ,$$

$$m_4 : 2C_2H_4 + O_2 - 2C_2H_4O + S_1 - S_4 + S_5 - S_7 = 0$$

$$\text{vagyis } 2d_1 = -S_1 + S_4 - S_5 + S_7 ,$$

$$m_5 : -C_2H_4 - 3O_2 + 2CO_2 + 2H_2O - 3S_1 - 3S_2 - S_3 - S_6 = 0$$

$$\text{vagyis } 2d_2 = -3S_1 - 3S_2 - S_3 - S_6 ,$$

$$m_6 : {}^1/3C_2H_4 + O_2 - {}^2/3CO_2 - {}^2/3H_2O + S_1 + {}^1/3S_3 - S_4 - S_5 + {}^1/3S_6 - S_7 = 0$$

$$\text{vagyis } \frac{2}{3}d_2 = -S_1 - {}^1/3S_3 + S_4 + S_5 - {}^1/3S_6 + S_7$$

$$m_7 : {}^5/6C_2H_4 - C_2H_4O + {}^1/3CO_2 + {}^1/3H_2O - S_2 - {}^1/6S_3 - S_4 - {}^1/6S_6 - S_7 = 0$$

$$\text{vagyis } \frac{1}{3}d_3 = -S_2 - {}^1/6S_3 - S_4 - {}^1/6S_6 - S_7 ,$$

$$m_8 : 5C_2H_4 - 6C_2H_4O + 2CO_2 + 2H_2O - S_3 + 6S_5 - S_6 = 0$$

$$\text{vagyis } 2d_3 = -S_3 + 6S_5 - S_6 ,$$

$$m_9 : -{}^5/2O_2 - C_2H_4O + 2CO_2 + 2H_2O - {}^5/2S_1 - {}^7/2S_2 - S_3 - S_4 - S_6 - S_7 = 0$$

$$\text{vagyis } 2d_4 = -{}^5/2S_1 - {}^7/2S_2 - S_3 - S_4 - S_6 - S_7 ,$$

$$m_{10} : -{}^5/2O_2 - C_2H_4O + 2CO_2 + 2H_2O - {}^5/2S_1 - {}^5/2S_2 - S_3 + S_5 - S_6 = 0$$

$$\text{vagyis } 2d_4 = -{}^5/2S_1 - {}^5/2S_2 - S_3 + S_5 - S_6 ,$$

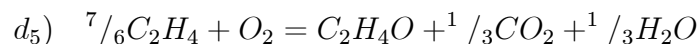
$$m_{11} : O_2 + {}^2/5C_2H_4O - {}^4/5CO_2 - {}^4/5H_2O + S_1 + {}^2/5S_3 - S_4 - {}^7/5S_5 + {}^2/5S_6 - S_7 = 0$$

$$\text{vagyis } \frac{4}{5}d_4 = -S_1 - {}^2/5S_3 + S_4 + {}^7/5S_5 - {}^2/5S_6 + S_7 ,$$

$$m_{12} : -S_2 - S_4 - S_5 - S_7 = \underline{0} .$$

Megjegyezzük, hogy [HOS90] VII.Táblázata csak a d_1 és d_3 minimális (direkt) reakciókhoz tartozó mechanizmusokat tartalmazza, (m_2, d_1) és (m_3, d_1) sorai azonosak.

Továbbá, a



reakció is megkapható a fenti m_1 mechanizmusból, de mivel *nem minimális*, ezért nem is szerepel a d_1, d_2, d_3, d_4 reakciók között (amiket algoritmusunk számított ki a terminális molekulák összegképletei alapján).

A 7.5. Táblázat harmadik és negyedik oszlopa az m_1, \dots, m_{12} mechanizmusok keresésének adatait mutatja. A futási időt nem befolyásolja lényegesen, hogy az összes szimplexet megkeressük, vagy csak az új V_1, \dots, V_5 vektorok valamelyikét tartalmazókat.

A negyedik oszlop kivételével az alsó és felső korlátokat (LB, UB) is ki tudtuk számítani a 4. Fejezet alapján.

A 2.2.1. alfejezet (2.14) formulája,

$$\nu(VarAll) = \nu(VarOnly) + \nu(VarOrig)$$

is ellenőrizhető a táblázatban.

	Terminális molekulák	Csak reakciók	A fiktív	V_i vektorokkal
			Összes szimplex	Csak V_i -vel
N	3	10	10	10
n	3	6	9	9
M	5	7	12	12
$simp(H)$	4	1	12	11
LB	$2 \leq$	$1 \leq$	$3 \leq$	
UB	≤ 5	≤ 1	≤ 66	
t	0.00 mp	0.06 mp	1.87 mp	1.80 mp
chk	18	102	4 000	3 898

N = a vektortér dimenziója

M = az input vektorok száma = $|H|$

$LB = b \cdot \binom{a+1}{2} + (n-b) \cdot \binom{a}{2}$ (alsó becslés)

t = futási idő [mp]

n = a H által feszített dimenzió

$simp(H)$ = szimplexek száma

$UB = \binom{M}{n+1}$ (felső becslés)

chk = H vizsgált részhalmazainak száma

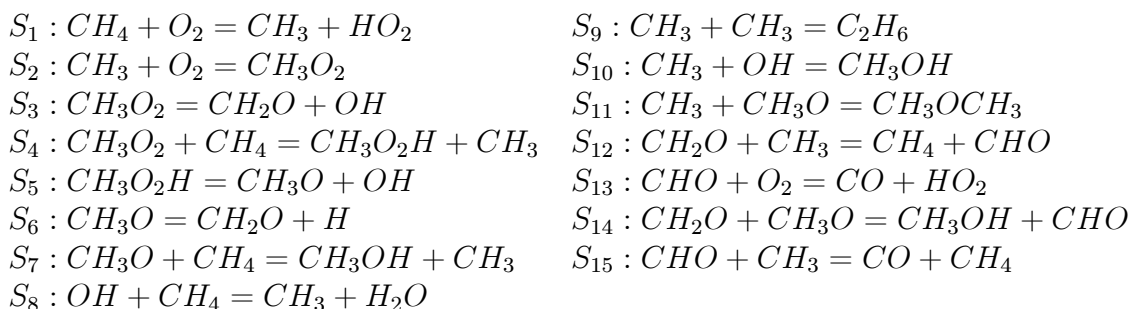
"Etilénoxid"

7.5. Táblázat

7.6. Metán-Metanol

Következő példánk [HOS90]-ben szerepel "Methane to Methanol Conversion" néven.

A következő reakciók adottak:



ahol a terminális molekulák CH_4 , O_2 , CH_3OH , CO és H_2O .

A 7.6. Táblázat első oszlopában ismét a terminális molekulák közötti (összes) direkt overall reakció szerepel, a második oszlopban az S_1, \dots, S_{15} reakciók közötti üres (0) mechanizmus.

Mivel a C_2H_6 és CH_3OCH molekulák csak az S_9 és S_{11} reakciókban szerepelnek, ezért e reakciókat reprezentáló vektorok lineárisan függetlenek a többitől, vagyis a 2.2. alfejezetben leírt módon ezt a két vektort elhagyhatjuk, és az összes vektor dimenzióját csökkenthetjük kettővel. Összehasonlítás céljából lefuttattuk a programot az eredeti és a redukált adathalmazzal is, ezeket a Táblázat két része mutatja: a futási idő 27 percről 5 percre zsugorodott!

A táblázat oszlopai ismét a különböző számítások adatait mutatják, az előző, "Etilénoxid" példában megismert módon.

Ha az input az S_1, \dots, S_{15} és V_1, \dots, V_5 vektorok redukált halmaza (a táblázat két utolsó oszlopa), a következő mechanizmusokat kapjuk:

$$\begin{array}{l}
 m_1 : -2CH_4 - 2O_2 + CH_3OH + CO + 2H_2O + S_1 - 2S_2 - S_3 - S_4 - S_5 - S_7 - \\
 2S_8 - S_{12} - S_{13} = 0 \\
 m_2 : -2CH_4 - 2O_2 + CH_3OH + CO + 2H_2O + S_1 - 2S_2 - S_3 - S_4 - S_5 - \\
 2S_8 - S_{13} - S_{14} = 0 \\
 m_3 : -2CH_4 - 2O_2 + CH_3OH + CO + 2H_2O - 2S_2 - S_3 - S_4 - S_5 - S_7 - \\
 2S_8 - S_{12} - S_{15} = 0 \\
 m_4 : -2CH_4 - 2O_2 + CH_3OH + CO + 2H_2O - 2S_2 - S_3 - S_4 - S_5 - 2S_8 - \\
 S_{14} - S_{15} = 0 \\
 m_5 : -2CH_4 - O_2 + 2CH_3OH - S_2 - S_4 - S_5 - S_7 - S_{10} = 0 \\
 m_6 : -2CH_4 - O_2 + 2CH_3OH - S_2 - S_4 - S_5 - S_{10} + S_{12} - S_{14} = 0
 \end{array}$$

$$\begin{aligned}
m_7 &: -CH_4 -^6/4O_2 + CO + 2H_2O + S_1 -^6/4S_2 - S_3 -^2/4S_4 -^2/4S_5 \\
&-^2/4S_7 - 2S_8 +^2/4S_{10} - S_{12} - S_{13} = 0 \\
m_8 &: -CH_4 -^6/4O_2 + CO + 2H_2O + S_1 -^6/4S_2 - S_3 -^2/4S_4 -^2/4S_5 \\
&+^2/4S_7 - 2S_8 +^2/4S_{10} - S_{13} - S_{14} = 0 \\
m_9 &: -2CH_4 - 3O_2 + 2CO + 4H_2O + 2S_1 - 3S_2 - 2S_3 - S_4 - S_5 - 4S_8 + \\
&S_{10} - S_{12} - 2S_{13} - S_{14} = 0 \\
m_{10} &: -CH_4 -^6/4O_2 + CO + 2H_2O -^6/4S_2 - S_3 -^2/4S_4 -^2/4S_5 -^2/4S_7 - \\
&2S_8 +^2/4S_{10} - S_{12} - S_{15} = 0 \\
m_{11} &: -CH_4 -^6/4O_2 + CO + 2H_2O -^6/4S_2 - S_3 -^2/4S_4 -^2/4S_5 +^2/4S_7 - \\
&2S_8 +^2/4S_{10} - S_{14} - S_{15} = 0 \\
m_{12} &: -CH_4 -^3/2O_2 + CO + 2H_2O -^3/2S_2 - S_3 -^1/2S_4 -^1/2S_5 - 2S_8 \\
&+^1/2S_{10} -^1/2S_{12} -^1/2S_{14} - S_{15} = 0 \\
m_{13} &: 2CH_4 - 3CH_3OH + CO + 2H_2O + S_1 - S_3 + S_4 + S_5 + S_7 - 2S_8 + \\
&2S_{10} - S_{12} - S_{13} = 0 \\
m_{14} &: 2CH_4 - 3CH_3OH + CO + 2H_2O + S_1 - S_3 + S_4 + S_5 + 2S_7 - 2S_8 + \\
&2S_{10} - S_{13} - S_{14} = 0 \\
m_{15} &: -2CH_4 + 3CH_3OH - CO - 2H_2O - S_1 + S_3 - S_4 - S_5 + 2S_8 - \\
&2S_{10} + 2S_{12} + S_{13} - S_{14} = 0 \\
m_{16} &: 2CH_4 - 3CH_3OH + CO + 2H_2O - S_3 + S_4 + S_5 + S_7 - 2S_8 + 2S_{10} - \\
&S_{12} - S_{15} = 0 \\
m_{17} &: 2CH_4 - 3CH_3OH + CO + 2H_2O - S_3 + S_4 + S_5 + 2S_7 - 2S_8 + 2S_{10} - \\
&S_{14} - S_{15} = 0 \\
m_{18} &: 2CH_4 - 3CH_3OH + CO + 2H_2O - S_3 + S_4 + S_5 - 2S_8 + 2S_{10} - \\
&2S_{12} + S_{14} - S_{15} = 0 \\
m_{19} &: -O_2 - CH_3OH + CO + 2H_2O + S_1 - S_2 - S_3 + S_7 - 2S_8 + S_{10} - \\
&S_{13} - S_{14} = 0 \\
m_{20} &: -O_2 - CH_3OH + CO + 2H_2O + S_1 - S_2 - S_3 - 2S_8 + S_{10} - S_{12} - S_{13} = 0 \\
m_{21} &: -O_2 - CH_3OH + CO + 2H_2O - S_2 - S_3 + S_7 - 2S_8 + S_{10} - S_{14} - S_{15} = 0 \\
m_{22} &: -O_2 - CH_3OH + CO + 2H_2O - S_2 - S_3 - 2S_8 + S_{10} - S_{12} - S_{15} = 0 \\
m_{23} &: -S_1 + S_{13} - S_{15} = 0 \\
m_{24} &: S_7 + S_{12} - S_{14} = 0 .
\end{aligned}$$

A fenti lista futási adatait az alábbi táblázatok tartalmazzák:

az egyszerűsítés (redukció) előtt:

	Terminális molekulák	Csak reakciók	A fiktív V_i vektorokkal	
			Összes szimplex	Csak V_i -vel
N	3	16	16	16
n	3	13	16	16
M	5	15	20	20
$\text{simp}(H)$	4	2	24	22
LB	$2 \leq$	$2 \leq$	$4 \leq$	
UB	≤ 5	≤ 15	≤ 1140	
t	0.00mp	30.38mp	1353mp $\approx 22p$	1323mp $\approx 22p$
chk	18	30 473	978 297	947 824

az egyszerűsítés (redukció) után:

	Csak reakciók	A fiktív V_i vektorokkal	
		Összes szimplex	Csak V_i -vel
N	14	14	14
n	11	14	14
M	13	18	18
$\text{simp}(H)$	2	24	22
LB	$2 \leq$	$4 \leq$	
UB	≤ 13	≤ 816	
t	5.49 mp	263 mp $\approx 4 p$	257 mp $\approx 4 p$
chk	7 623	244 611	236 988

N = a vektortér dimenziója

M = az input vektorok száma = $|H|$

$LB = b \cdot \binom{a+1}{2} + (n-b) \cdot \binom{a}{2}$ (alsó becslés)

t = futási idő [mp]

n = a H által feszített dimenzió

$\text{simp}(H)$ = szimplexek száma

$UB = \binom{M}{n+1}$ (felső becslés)

chk = H vizsgált részhalmazainak száma

”Metán-Metanol átalakítás”

7.6. Táblázat

7.7. Glükóz - Pyruvate

Utolsó példánk [HOS90]-ban "*Conversion of Glucose to Pyruvate*" név alatt szerepel. A felhasználható atomcsoportokat a következő betűkkel jelöljük:

C = carbon dioxide	$N = 6 - P$ gluconate
D = dihydroxyacetone P	P = pyruvate
E = erythrose $4 - P$	R = ribose $5 - P$
F = fructose $6 - P$	S = sedoheptulose $7 - P$
G = glucose $6 - P$	X = xylulose $5 - P$
K = 2-keto-3-deoxy $6 - P$ gluconate	Y = glyceraldehyde $3 - P$
L = ribulose $5 - P$	

a terminális molekulák G , P és C .

A reakciók eredeti listája:

$S_1 : R + X = S + Y$	$S_8 : N = K$
$S_2 : L = R$	$S_9 : L = X$
$S_3 : N = L + C$	$S_{10} : E + X = Y + F$
$S_4 : G = N$	$S_{11} : Y = P$
$S_5 : F = D + Y$	$S_{12} : D = P$
$S_6 : G = F$	$S_{13} : K = Y + P$
$S_7 : D = Y$	$S_{14} : S + Y = E + F$

Mint a 2.2. alfejezetben megvizsgáltuk: a hat $A = \lambda B$ típusú reakció mindegyike elhagyható, a megmaradt vektorok megfelelő módosításával, így a vektorok száma és a dimenzió is nagymértékben csökken. Hangsúlyozzuk, hogy a V_1, V_2, V_3 fiktív vektorokat a fenti redukció *előtt* kell bevezetnünk, hiszen ezen vektorok koordinátái is módosulnak. A módosítás *után* a következő vektorokat (oszlopok) kapjuk:

V_1^-	V_2^-	V_3^-	S_1^-	S_3^-	S_5^-	S_{10}^-	S_{13}^-	S_{14}^-
0	0	0	1	0	2	1	2	-1
0	1	0	0	1	0	0	0	0
0	0	1	-2	1	0	-1	0	0
1	0	0	0	-1	-1	1	-1	1
0	0	0	1	0	0	0	0	-1
0	0	0	0	0	0	-1	0	1

a sorok rendre a P, C, X, K, S, E atomcsoportoknak felelnek meg.

Ezzel a transzformációval a futási időt $93mp$ -ről $0.10mp$ -re sikerült csökkentenünk!

A 7.7. Táblázatban *mindhárom* futás adatait megadjuk: az eredeti, az első és a második redukció után, rendre a 2., 5. és az utolsó előtti oszlopban. (A V_1, V_2, V_3 új vektorok a G, P, C atomcsoportoknak felelnek meg.) Mivel a redukciós lépések során G eliminálódott, ezért szerepelnek V_1^-, \dots, S_{14}^- vektorok a táblázatban.

A eredeti (output) mechanizmusok:

$$\begin{aligned}
m_1 &: -1/2G + P + C - S_3 - S_4 + 1/2S_5 + 1/2S_6 + 1/2S_7 - S_9 - S_{13} = 0 \\
m_2 &: -G + 2P + C - S_3 - S_4 + S_7 - S_9 - S_{12} - S_{13} = 0 \\
m_3 &: -G + 2P + C - S_3 - S_4 - S_9 - S_{11} - S_{13} = 0 \\
m_4 &: -1/2G + P - S_4 + 1/2S_5 + 1/2S_6 + 1/2S_7 - S_8 - S_{13} = 0 \\
m_5 &: -G + 2P - S_4 + S_7 - S_8 - S_{12} - S_{13} = 0 \\
m_6 &: -G + 2P - S_4 - S_8 - S_{11} - S_{13} = 0 \\
m_7 &: -1/2G + P - 1/2S_5 - 1/2S_6 - 1/2S_7 - S_{11} = 0 \\
m_8 &: -1/2G + P - 1/2S_5 - 1/2S_6 + 1/2S_7 - S_{12} = 0 \\
m_9 &: -G + 2P - S_5 - S_6 - S_{11} - S_{12} = 0 \\
m_{10} &: C - S_3 - S_4 + S_5 + S_6 + S_7 - S_9 + S_{11} - S_{13} = 0 \\
m_{11} &: C - S_3 - S_4 + S_5 + S_6 - S_9 + S_{12} - S_{13} = 0 \\
m_{12} &: C - S_3 + S_8 - S_9 = 0 \\
m_{13} &: -S_4 + S_5 + S_6 + S_7 - S_8 + S_{11} - S_{13} = 0 \\
m_{14} &: -S_4 + S_5 + S_6 - S_8 + S_{12} - S_{13} = 0 \\
m_{15} &: S_7 + S_{11} - S_{12} = 0
\end{aligned}$$

Az első redukció után:

$$\begin{aligned}
m_1^- &: -V_1^- + V_2^- + V_3^- - S_3^- = 0 \\
m_2^- &: -1/2V_1^- + 3V_2^- - S_1^- - 3S_3^- + 1/2S_5^- - S_{10}^- - S_{14}^- = 0 \\
m_3^- &: -1/2V_1^- + 3V_2^- - S_1^- - 3S_3^- - S_{10}^- + 1/2S_{13}^- - S_{14}^- = 0 \\
m_4^- &: 5/2V_1^- - 3V_3^- - S_1^- + 1/2S_5^- - S_{10}^- - S_{14}^- = 0 \\
m_5^- &: 5/2V_1^- - 3V_3^- - S_1^- - S_{10}^- + 1/2S_{13}^- - S_{14}^- = 0 \\
m_6^- &: 5/2V_2^- - 1/2V_3^- - S_1^- - 5/2S_3^- + 1/2S_5^- - S_{10}^- - S_{14}^- = 0 \\
m_7^- &: 5/2V_2^- - 1/2V_3^- - S_1^- - 5/2S_3^- - S_{10}^- + 1/2S_{13}^- - S_{14}^- = 0 \\
m_8^- &: S_5^- - S_{13}^- = 0
\end{aligned}$$

Mivel $S_5^- \parallel S_{13}^-$, ráadásul mindkét vektor $A = \lambda B$ alakú, ezért hasznos még egy redukciót alkalmaznunk. Ez a második egyszerűsítés utáni futás adatait a 7.7. Táblázat utolsó három oszlopa tartalmazza. A kapott mechanizmusok:

$$\begin{aligned}
m_1^= &: -V_1^= + V_2^= + V_3^= - S_3^= = 0 \\
m_2^= &: 1/2V_1^= + 3V_2^= - S_1^= - 3S_3^= - S_{10}^= - S_{14}^= = 0 \\
m_3^= &: 5/2V_1^= - 3V_3^= - S_1^= - S_{10}^= - S_{14}^= = 0 \\
m_4^= &: 5/2V_2^= - 1/2V_3^= - S_1^= - 5/2S_3^= - S_{10}^= - S_{14}^= = 0
\end{aligned}$$

Ebben a példában nem végeztünk külön számításokat a kizárólag terminális molekulákat tartalmazó reakciómechanizmusok felkutatására.

eredeti reakciók:

	Csak reakciók	A fiktív V_i vektorokkal	
		Összes szimplex	Csak V_i -vel
N	13	13	13
n	12	13	13
M	14	17	17
$\text{simp}(H)$	3	15	12
LB	$2 \leq$	$4 \leq$	
UB	≤ 14	≤ 680	
t	8.00mp	93.00mp	85.00mp
chk	14 600	107 368	92 768

az első redukció után:

	Csak reakciók	A fiktív V_i vektorokkal	
		Összes szimplex	Csak V_i -vel
N	6	6	6
n	5	6	6
M	6	9	9
$\text{simp}(H)$	1	8	7
LB	$1 \leq$	$3 \leq$	
UB	≤ 1	≤ 36	
t	0.00s	0.10s	0.10s
chk	52	418	366

a második redukció után:

	Csak reakciók	A fiktív V_i vektorokkal	
		Összes szimplex	Csak V_i -vel
N	5	5	5
n	4	5	5
M	4	7	7
$\text{simp}(H)$	0	4	4
LB	$0 \leq$	$2 \leq$	
UB	≤ 0	≤ 7	
t	0.00mp	0.00mp	0.00mp
chk	5	65	60

”Glükóz”

7.7. Táblázat

8. fejezet

Tézisek, Summary of Results

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 (2.1. alfejezet, [1991]).

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, [2000a]).

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

II. TÉZIS

i) *Részletesen megvizsgáltuk a homogén és az inhomogén lineáris egyenletrendszerek minimális (leszűkített) megoldáshalmazainak szerkezetét, a szimplexekhez és a teljes megoldásokhoz való viszonyukat* ([2012b]).

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 affín kombinációja plusz $M_{A,0}$ egy eleme összegeként* (3.25. Tétel).

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

■

III. TÉZIS

i) Általános felső éles becslést adtunk adott dimenziós és elemszámú $H \subset \mathbb{R}^n$ vektorhalmazok szimplexeinek számára: $\text{simp}(H) \leq \binom{m}{n+1}$ és leírtuk a szélsőséges halmazok egyértelmű szerkezetét (4.5. Tétel, [1995]).

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, [1995]). ■

IV. TÉZIS

i) Csökkentettük a dimenziót párhuzamos vektorok kizárása esetén (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]). ■

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 (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). ■

VI. TÉZIS

i) Általános definíciót adtunk a sztöchiometriai hierarchia fogalmára (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 tétele), másrészt új (egyszerű) kémiai összefüggéseket is nyertünk (6.6. - 6.11. Tételek). ■

Summary of Results

I.

i) A *polynomial algorithm* was developed for listing all simplexes contained in any given set $H \subset \mathbb{R}^n$ (moreover, in any $H \subseteq V$ where $\mathcal{H} = (V, \mathcal{E})$ is a descending, not deformed hypergraph) in lexicographical order (Subsection 2.1, [1991]).

ii) It was proved, that the algorithm finds the simplexes *in the fewest steps for any dataset* $H \subseteq \mathbb{R}^n$ (Theorems 2.2 and 2.4).

iii) It was revealed, that *reducing the dimension* of the data in H can save up to 90% of running time in certain cases (Subsection 2.2.0).

iv) *Extensions of the algorithm* for finding direct reactions and mechanisms were given, even in the case when both terminal species and reactions are unknown (Subsections 2.2.1, 2.2.2 and 2.2.3, [2000a]).

v) An *implementation of the algorithm* in Pascal was constructed and *several runs* were made for problems we found in the literature, our outputs were compared to other authors' results (Subsection 2.4 and Section 7). ■

II.

i) A thoroughful investigation of the *structure of sets of minimal solutions* both of homogeneous and inhomogeneous sets of linear equalities was done. We also revealed the *connection* of these solutions to the simplexes and the unconstrained solutions (Section 3, [2012b]).

ii) Namely, *in the homogeneous case* the minimal solutions (elements of $M_{A,0}^{\min}$) generate all the solutions (Theorem 3.13). *In the inhomogeneous case* all solution can be written as the sum of an *affine* combination of some elements of $M_{A,b}^{\min}$ plus one element of $M_{A,0}$ (Theorem 3.25).

iii) The relations between *minimal- and base solutions* is explained in Remark 3.18. ■

III.

i) The *general sharp upper bound* for the numbers of simplexes contained in sets $H \subset \mathbb{R}^n$ of given size ($|H| = m$) was found: $\text{simp}(H) \leq \binom{m}{n+1}$,

assuming H spans \mathbb{R}^n . Moreover, the *unique structure of the extremal sets* H is also described (Theorem 4.5, [1995]).

ii) General *sharp lower bound* was found: $b \cdot \binom{a+1}{2} + (n-b) \cdot \binom{a}{2} \leq \text{simp}(H)$ where $m = a \cdot n + b$, $0 \leq b < n$. We proved, that *the structure of the extremal sets* for $m \geq 2n$ is *unique* (Theorem 4.7, [1995]). ■

IV.

i) Assuming that H does not contain paralel elements, we reduced first the dimension of the elements in H (Subsection 4.3.1).

ii) In the case $H \subset \mathbb{R}^3$, $|H| \geq 8$ and H does not contain paralel elements *we gave the sharp lower bound* for $\text{simp}(H)$ and we also determined *the unique structure of the extremal sets* $H \subset \mathbb{R}^3$ which span \mathbb{R}^3 (Theorem 4.20, [1998]).

iii) In the case $H \subset \mathbb{R}^4$ and H does not contain paralel elements *we gave the sharp lower bound* for $\text{simp}(H)$ for $|H| \geq 24$, and we also determined *the unique structure of the extreme sets* $H \subset \mathbb{R}^4$ of full dimension (Theorem 4.23, [2011]). ■

V.

Sharp upper bound was given for the number of circles and bases in matroids of given size and rank, moreover the structure of the extremal matroids was described (Theorems 5.4 and 5.7).

Sharp lower bound was given for the number of circles and bases in the case *loops are allowed* in matroids, the structure of the extremal matroids was described, too (Theorems 5.8 and 5.9).

Sharp lower bound was given for the number of circles and bases in the case *paralel elements are allowed but no loops* (Theorems 5.13, 5.15, 5.21).

A similar *general question* was formulated and solved *for hypergraphs* (Definitions 5.24, 5.25 and Theorem 5.30). ■

VI.

i) A *general definition of stoichiometric hierarchy* was given in Definition 6.3.

ii) The general notion of *valuation operator* was stated in Definition 6.5. We used this notion to give *chemical meanings* for several (wellknown) theorems in linear algebra, so we obtained both *short mathematical proof* for Hess' law and also formulated *new Statements* in chemistry (Theorems 6.6 through 6.11). ■

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.
- [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, 11pp, **IF** 0.638
<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. **IF** 1.303
- [2000a] **Szalkai,I.:** *A New General Algorithmic Method in Reaction Syntheses Using Linear Algebra*, J.Math.Chemistry 28 (2000),1–34.**IF** 1.303
- [2000b] **Szalkai,I.:** *On Valuation Operators in Stoichiometry and in Reaction Syntheses*, J. Math. Chemistry 27 (2000), 377–386. **IF** 1.303
- [2001] **Szalkai,I.:** *Diszkrét matematika és Algoritmuselmélet alapjai*, Veszprémi Egyetemi Kiadó, 2001.

- [2006] **Dósa, Gy., Szalkai, I., Laflamme, C.:** *The Maximum and Minimum Number of Circuits and Bases of Matroids*, 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.Math.Chem. 49 (2011), pp.1071-1085, **IF** 1.303 <http://www.springerlink.com/content/r4w887917j558277/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. **IF** 0.351, 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. **IF** 0.351 <http://mat76.mat.uni-miskolc.hu/~mnotes>
- [2013a] **Tuza, Zs., Szalkai, I.:** *Minimum Number of Affine Simplexes of Given Dimension*, Discr. Appl. Math. közlésre elfogadva, **IF** 0.718 <http://arxiv.org/abs/1309.6491>
- [2013b] **Szalkai, I., Sellers, P., Pethő, Á.:** *On the Mathematical Foundation of Reaction Mechanisms*, előkészületben.
- [A65a] **Aris, R.:** *D. Prolegomena to the rational analysis of systems of chemical reactions*, Arch. Rational Mech. Anal. 19 (1965), 81-99.,
Recent edition: Process Systems Engineering, Vol. 1: Mathematical Modeling — A Chemical Engineer's Perspective, 1999, 149-169.
- [A65b] **Aris, R.:** *E. Prolegomena to the rational analysis of systems of chemical reactions II. Some addenda*, Arch. Rational Mech. Anal. 27 (1968), 356-364.,
Recent edition: Process Systems Engineering, Vol. 1: Mathematical Modeling — A Chemical Engineer's Perspective, 1999, 170-179.

- [A66] **Amundson, N.R.:** *Mathematical Methods in Chemical Engineering, Matrices and Their Applications*, Prentice Hall, Englewood Cliffs 1966, pp. 53–54.
- [A87] **Anderson, I.:** *Combinatorics of Finite Sets*, Oxford Sci. Publ., Clarendon Press, Oxford Univ. Press, Oxford, 1987.
- [A02] **Avis:** *The program "Irs"*, <http://www.mcgill.ca/~avis/C/Irs.html>
- [AADST13a] **Alahmadi, A., Aldred, R.E.L., Dela Cruz, R., Solé, P., Thomassen, C.:** *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 Math. 313 (2013) 1569–1574.
- [AADST13b] **Alahmadi, A., Aldred, R.E.L., Dela Cruz, R., Solé, P., Thomassen, C.:** *The maximum number of minimal codewords in long codes*, Discrete Applied Math. 161 (2013) 424–429.
- [AADOST14] **Alahmadi, A., Aldred, R.E.L., Dela Cruz, R., Ok, S., Solé, P., Thomassen, C.:** *The minimum number of minimal codewords in an $[n, k]$ -code and in graphic codes*, Discrete Applied Math., submitted.
- [AM63] **Aris, R., Mah, R.:** *Independence of Chemical Reactions*, Ind. Eng. Chem. Fund. 2 (1963), 90–94., DOI: 10.1021/i160006a002
- [B99] **Bertók, B.:** *Kombinatorikus algoritmus elemi reakciók lehetséges rendszereinek generálására*, Diplomadolgozat, Veszprémi Egyetem, 1999.
- [B03] **Bertók, B.:** *Folyamathálózatok struktúráinak algoritmikus szintézise*, PhD értekezés, Veszprémi Egyetem, 2003.
http://konyvtar.uni-pannon.hu/doktori/2003/Bertok_Botond_dissertation.pdf
- [BBIFF12] **Barany, M., Bertok, B., Imreh, Cs., Fan, L.T., Friedler, F.:** *On the equivalence of direct mechanisms and structurally minimal pathways*, J. Math. Chem. 50 (2012), 1347–1361.
- [BM10] **Buzzi-Ferraris, G., Manenti, F.:** *Fundamentals and Linear Algebra for the Chemical Engineer*, Wiley VCH, 2010, ISBN: 978-3-527-32552-8

- [BN76] **Blickle, T., Novák, B.:** *Computer Algorithm for the Determination of one Structure of Chemical Compounds*, Hung. J. Ind. Chem. 4S (1976), 73-78.
- [BSz75] **Blickle, T., Szépvölgyi, J.:** *Adott vegyületekből felépíthető sztöchiometriai egyenletek megadása*, MTA VEAB Monográfiái 1, (1975), 77-85.
- [BSz76] **Blickle, T., Szépvölgyi J.:** *Determination of stoichiometric equations constructable from given compounds*, Hung. J. Ind. Chem. 4S (1976), 79-86.
- [CLR97] **Cormen, T.H., Leiserson, Ch.E., Rivest, R.L.:** *Algoritmusok*, Műszaki Kiadó, 1997.
- [CMW90] **Chevalier, C., Melenk, H., Warnatz, J.:** *Automatic Generation of Reaction Mechanisms for Description of Oxidation of Higher Hydrocarbons*, Preprint of Konrad-Zuse Zentrum, Berlin, 1990.
- [D62] **Doležalik, V.:** *Hasonlóság és modellezés a kémiai technológiában*, Műszaki Kiadó, Budapest, 1962.
- [DTV92] **Deák Jenő, Tóth János, Vizvári Béla:** *Anyagmegmaradás összetett kémiai mechanizmusokban*, Alkalmazott Mat. Lapok, 16 (1992), 73-98.
- [FAD99] **Fishtik, I., Alexander, A., Datta, R.:** *Enumeration and Discrimination of Mechanisms in Heterogeneous Catalysis Based on Response Reactions and Unity Bond Index-Quadratic Exponential Potential (UBI-QEP) Method*, Surface Science, 430 (1999), 1-17.
- [FBF99] **Fan, L.T., Bertók, B., Friedler, F.:** *Combinatorial Framework for the Systematic Generation of Reaction Pathways*, presented at the AIChE Annual Meeting, Dallas, TX, USA, Oct.31–Nov.5, 1999.
- [FBFS01] **Fan, L.T., Bertók, B., Friedler, F., Shafe, S.:** *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.
- [FBF02] **Fan, L.T., Bertók, B., Friedler, F.:** *A Graph-Theoretic Method to Identify Candidate Mechanisms for Deriving the Rate Law of a Catalytic Reaction*, Comp. and Chem. 26 (2002), 265-292.

- [FD99] **Fishtik,I., Datta,R.:** *On the Use of Response Reactions in the Kinetic Model of Complex Heterogeneous Catalytic Reactions*, React.Kin. and the Dev. of Catal.Proc., ed. Gromment, G.F and Waught, K.C., Elsevier Sci. Publ., 1999.
- [GDM01] **Gadewar,S., Doherty,M., Malone,M.:** *A systematic method for reaction invariants and mole balances for complex chemistries*, Comp. and Chem. Eng. 25 (2001) 1199–1217.
- [H73] **Horiuti,J.:** *Theory of Reaction Rates Based on Stoichiometric Number Concept*, Ann. NY.Acad. Sci. 213 (1973), 5–30.
- [HK62] **Hammes,C.G., Kochavi,D.:** *Studies of the Enzyme Hexokinase*, J.Am. Chem.Soc., 84 (1962), 2069-2079.
- [HHP09] **Haus,U., Hemmecke,R., Pokutta,S.:** *Reconstructing biochemical cluster networks*, J.Math.Chem. 49 (2011), 2441-2456.
http://arxiv.org/PS_cache/arxiv/pdf/0906/0906.1342v2.pdf
- [HOS90] **Happel,J., Otarod,M., Sellers,P.H.:** *Mechanistic Study of Chemical Reaction Systems*, Ind.Eng.Chem.Res. 29 (1990), 1057–1067.
- [HS82] **Happel,J., Sellers,P.H.:** *Multiple Reaction Mechanisms in Catalysis*, I&EC Fundamentals, 21 (1982), 67-76.
- [HS83] **Happel,J., Sellers,P.H.:** *Analysis of the Possible Mechanisms for a Catalytic Reaction System*, Adv.in Catal, 32(1983), 273–323.
- [HS89] **Happel,J., Sellers,P.H.:** *The Characterization of Complex Systems of Chemical Reactions*, Chem. Eng. Comm. 83 (1989), 221-240.
- [HS91] **Happel,J., Sellers,P.H.:** *A Mechanistic Study of Some Oscillatory Reactions*, J. Phys. Chemistry 95 (1991), 7740-7742.
- [HS95] **Happel,J., Sellers,P.H.:** *New Perspective on the Kinetics of Enzyme Catalysis*, J. Phys. Chemistry 99 (1995), 6595-6600.
- [KP85] **Kumar,S., Pethő,Á.:** *Note on a Combinatorial Problem for the Stoichiometry of Chemical Reactions*, Intern. Chem. Eng. 25 (1985), 767–769.
- [KSG02] **Klamt,S., Schuster,S., Gilles,E.D.:** *Calculability Analysis in Underdetermined Metabolic Networks Illustrated by a Model of the Central Metabolism in Purple Nonsulfur Bacteria*, Biotechn. and Bioeng. 77 (2002), 734–751.

- [KVRT04] **Kovács,K., Vizvári,B., Riedel,M., Tóth,J.:** *Decomposition of the permanganate/oxalic acid overall reaction to elementary steps based on integer programming theory*, Phys.Chem.-Chem.Phys. 6 (2004), 1236-1242, IDS Nu.809VI, ISSN: 1463-9076
- [L65] **Lielmezs, J.:** *On the linear independence of chemical reactions and normalized stoichiometry*, Chem. Eng. Sci. 20(1965), 363-364.
- [M71] **Murty,U.S.R.:** *Equicardinal Matroids*, J.Combin. Th., B. 11 (1971), 120-126.
- [M05] **Maria,G.:** *Relations between apparent and intrinsic kinetics of “programmable” drug release in human plasma*, Chem. Eng. Sci. 60 (2005) 1709 – 1723.
- [MK99] **Merényi,L., Kristóf,T.:** *Construction of Thermodynamic Stability Diagrams*, Zeitschrift f. Physikalische Chemie 209 (1999), 171-179.
- [NPT12] **Nagy,A.L., Papp,D., Tóth,J.:** *ReactionKinetics–A Mathematica package with applications*, Chemical Engineering Science 83 (1), (2012) 12-23, http://scholar.google.hu/citations?view_op=view_citation&hl=hu&user=_6V4DdoAAAAJ&cstart=40&citation_for_view=_6V4DdoAAAAJ:fPk4N6BV_jEC
- [O87] **Oláh,K.:** *Independence of chemical reactions*, React. Kin. Catal. Letters, 33 (1987), 9-15, DOI: 10.1007/BF02066692
- [O92] **Oxley,J.G.:** *Matroid Theory*, Oxford University Press, New York, 1992.
- [O97] **Oxley,J.G.:** *Személyes közlés*, 1997.
- [P64] **Pethő,Á.:** *Zur Theorie der Stöchiometrie Chemischer Reaktionssysteme*, Wissenschaftl. Zeitschr. 6 (1964), 13-15.
- [P67c] **Pethő,Á.:** *Algebraic Treatment of a Class of Chemical Reactions in Stoichiometry*, Acta Chim.Acad.Sci.Hungaricae 54 (1967), 107-117.
- [P67m] **Pethő,Á.:** *On a Class of Solutions of Algebraic Homogeneous Linear Equations*, Acta Math. Acad. Sci. Hungaricae 18 (1967), 19–23.
- [P68] **Pethő,Á.:** *Kémiai reakciók egy osztályának algebrai elemzése*, Magyar Kémiai Folyóirat 74 (1968), 488–491.

- [P90] **Pethő,Á.:** *The Linear Relationship Between Stoichiometry and Dimensional Analysis*, Chem. Eng. Technol. 13 (1990), 328–332.
- [P93] **Pethő,Á.:** *Mathematical Discussion of the Application of Hess's Law*, Hung. J. Ind. Chem., 21 (1993), 35–38.
- [P95] **Pethő,Á.:** *Further Remarks on the Analogy Between Stoichiometry and Dimensional Analysis: The Valuation Operation*, Hung. J. Ind. Chem., 23 (1995), 229–231.
- [PGy51] **Pethő,Á., Győry,K.:** *Homogén lineáris egyenletrendszerek "sok" zérust tartalmazó megoldásairól*, Mat. Lapok 3-4 (1951), 267-273.
- [PV06] **Papp D., Vizvári,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
- [R89] **Recski,A.:** *Matroid Theory and its Applications*, Akadémiai Kiadó Press, Budapest, 1989.
- [R14] *The Software REACTOME*, <http://www.reactome.org>
- [RKA11] **Rauha,J., Kahlea,T., Aya,N.:** *Support sets in exponential families and oriented matroid theory*, International J. of Approximate Reasoning 52 (2011) 613–626.
- [RS66] **Reid,R.C., Sherwood,T.K.:** *The Properties of Gases and Liquids*, McGraw Hill, 1966.
- [S83] **Sellers,P.H.:** *The Classification of Chemical Mechanisms from a Geometric Viewpoint*, Studies in Physical and Theor. Chem. 28 (1983), 420-429.
- [S84] **Sellers,P.H.:** *Combinatorial Classification of Chemical Mechanisms*, SIAM J.Appl.Math, 44 (1984), 784–792.
- [S98] **Sellers,P.H.:** *Mathematical Tools for a Reaction Database in Biology*, Graph Th. Notes of NY 35 (1998), 22-31.
- [S02] **Sellers,P.H.:** *Levelek, 2002 - 2012.*
- [S10] **Sellers,P.H.:** *Torsion in Biochemical Reaction Networks*, J. Math. Chem. (2010), 1287–1302.
- [S13] **Srinivasan,R.:** *Span, linear independence, basis and dimension*, <http://www.ma.utexas.edu/users/rav/M341.Summer13/M341.BasisNotes.pdf>

- [SM00] **Smith, W.R., Missen, R.W.:** *What is chemical stoichiometry?*, Chem. Eng. Edu. 2000, 26-32.
- [SP54] **Schay, G., Pethő, Á.:** *Mathematische Diskussion der Anwendung des Hess'schen Satzes*, Acta Chim. Acad. Sci. Hungaricae 4 (1954), 21–35.
- [SP62] **Schay, G., Pethő, Á.:** *Über die mathematischen Grundlagen der Stöchiometrie*, Acta Chim. Acad. Sci. Hungaricae 32 (1962), 59–67.
- [Sz69] **Szücs, E.:** *A hasonlóságelmélet alkalmazása - modellkísérletek*, Műszaki Kiadó, Budapest, 1969.
- [Sz06] **Szirtes, T.:** *Dimenzióanalízis és alkalmazott modellelmélet*, TYPOTEX, Budapest, 2006.
- [Sz10] **Szederkényi, G.:** *Computing sparse and dense realizations of reaction kinetic systems*, J. Math. Chem. 47 (2010), 551–568., DOI 10.1007/s10910-009-9525-5, <http://link.springer.com/article/10.1007/s10910-009-9525-5>
- [SzHP11] **Szederkényi, G., Hangos, K., Péni, T.:** *Maximal and minimal realizations of reaction kinetic systems: computation and properties*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 65 (2011), 309-332., <http://scholar.google.hu/citations?user=y1OkCnwAAAAJ&hl=hu&oi=sra>, <http://arxiv.org/abs/1005.2913>
- [T71] **Temkin, M.I.:** *The Kinetics of Steady-State Complex Reactions*, Int. Chem. Eng. 11 (1971), 709–717.
- [T10] **Turányi Tamás:** *Reakciómechanizmusok vizsgálata*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 2010.
- [TDV92] **Tóth, J., Deák, J., Vizvári, B.:** *Anyagmegmaradás összetett kémiai mechanizmusokban*, Alk. Mat. Lapok 16 (1992), 73-97.
- [TE78] **Tóth, J., Érdi, P.:** *A formális reakciókinetika modelljei, problémái és alkalmazásai*, A kémia újabb eredményei, 41.kötet, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1978, 227-350.
- [TE89] **Tóth, J., Érdi, P.:** *Mathematical Models of Chemical Reactions. Theory and Applications of Deterministic and Stochastic Models*, Manchester Univ. Press and Princeton Univ. Press, 1989.

- [TLRT97] **Tóth,J., Li,G., Rabitz,H., Tomlin,A.S.:** *The Effect of Lumping and Expanding on Kinetic Differential Equations*, SIAM J.Appl. Math., 57 (1997), 1531-1556.
- [TNZs13] **Tóth,J., Nagy,A.L., Zsély,I.:** *Structural Analysis of Combustion Models*, arXiv preprint arXiv:1304.7964 (2013), http://scholar.google.hu/citations?view_op=view_citation&hl=hu&user=_6V4DdoAAAAJ&cstart=60&citation_for_view=_6V4DdoAAAAJ:sSrBHYA8nusC
- [TR05] **Tóth,J., Rospars,J.P.:** *Dynamic Modeling of Biochemical Reactions with Applications to Signal Transduction: Principles and Tools using Mathematica*, Biosystems 79 (1-3), (2005) 33-52, <http://www.math.bme.hu/~jtoth/pubtexts/TothRospars.pdf>
- [UD95a] **Ung,S., Doherty,M.:** *Vapor-liquid phase equilibrium in systems with multiple chemical reactions*, Chem. Eng. Sci. 50 (1995), 23–48.
- [UD95b] **Ung,S., Doherty,M.:** *Theory of phase equilibria in multireaction systems*, Chem. Eng. Sci. 50 (1995), 3201–3216.
- [W00] **Wasykiewicz,S.:** *Transformed molar Gibbs free energy of mixing in multireaction systems*, Chem. Eng. Sci. 55 (2000), 5177–5182.
- [WU00] **Wasykiewicz,S., Ung,S.:** *Global phase stability analysis for heterogeneous reactive mixtures and calculation of reactive liquid–liquid and vapor–liquid–liquid equilibria*, Fluid Phase Equil. 175 (2000), 253–272.