

Válaszok
Tóth János bírálata (2014. július 1.)

a

Reakciómechanizmusok algoritmikus és matematikai vizsgálata
c. doktori értekezéséről

0) Köszönöm a Bíráló alapos és pozitív bírálatát.

1) -9) Köszönöm a dícsérő megjegyzéseket.

10)

i) Módszerünk ($\mathbb{R}^n$ vektorai) sem az atomok, sem az atomcsoportok részletesebb szerkezetét (elektron-pályák, szerkezeti képlet) *nem tudja figyelembe venni*, csak az (előjeles) mennyiségi adatokat. (Lásd még a 10.iii) és a 11.a) kérdésekre adott válaszokat is.)

ii) A dolgozat elején, a "Matematikai definíciók" fejezet elején (16-17.old.) hangsúlyozzuk: az általunk használt (Pethő Árpádtól és szerzőtársaitól *átvett*) **szimplex** fogalmunk eltér a megszokottól; a bevezető 1. fejezetben mindig kitesszük a "lineáris", "affin" ill. "geometria" jelzőket. A Bírálónak igaza van: a további fejezetekben többször használjuk jelző nélkül a szimplex fogalmát. Minden ilyen esetben kizárólag lineáris szimplexekekről van szó, ezt a 17.oldalon külön hangsúlyozzuk is. (Lásd még az v) kérdésre adott választ is.)

iii) A jelzett helyen (8.old.) valóban a Bíráló által idézett gondolatmenet szerepel. A Bíráló által jelzett problémát a 11. oldalon az 1.2.Megjegyzésben és 1.3.Példában tárgyaljuk és oldjuk meg. Igen, a 8.oldalon valóban illetett volna már hivatkoznunk a 11. oldalra.

iv) A "többszörös dózis" kifejezést a hétköznapi életből vettem át, orvosi szakkifejezés. Valóban egynél nagyobb sztöchiometriai együtthatót jelent, mint pl. $6\text{H}_2\text{O}$.

v) A ii) kérdésben említett okok miatt hagytuk el ez esetekben is a "lineáris" jelzőt.

vi) A 4.5. Tétel bizonyítása a 60-61. oldalakon, a 4.7. Tétel bizonyítása a 62-67. oldalakon található. Mint a 70. és 72. oldalakon írjuk: a 4.20. és 4.23. Tételek bizonyításai 8 illetve 10 oldal, ennyivel már nem akartuk növelni a dolgozat méretét, csak utaltunk a (honlapomon is hozzáférhető) [1998] és [2011] közleményekre:

<http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/Szalkai-1998ab-CountR3.pdf>

<http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/Szalkai-2011o-CountR4.pdf> .

vii) A 61.oldalon (4.5.Tétel bizonyítás vége) valóban egy sajnálatos előjel - **elgépelés** történt. Egy elemi összefüggés, az ún. *Vandermonde konvolúció* alapján könnyen megkapjuk (és az eredeti [1995] cikkben is ellenőrizhető) :

$$\sum_{i=0}^{\ell-1} \binom{\ell}{i} \cdot \binom{m-\ell}{n+1-i} = \binom{m}{n+1} - \binom{m-\ell}{n+1-\ell},$$

ami alapján a bizonyítás a dolgozatban leírt módon teljesen helyes.

viii) A 68.oldal előtt, a 4.1. és 4.2. alfejezetekben leírtuk az általunk ismert eredményeket párhuzamos vektorok jelenléte esetén, és megállapítottuk, hogy *miniólis* számú szimplexet pontosan akkor tartalmaz egy adott vektorhalmaz, ha a lehető legtöbb vektora párhuzamos (egymással). Ezen előzmények hatására használtuk a 4.3 alfejezet elején a "*kézenfekvő a párhuzamos vektorok kizárása*" fordulatot. A Bírálóval egyetértünk: ez valóban inkább csak **matematikai** értelemben "kézenfekvő" feltevés.

ix) A dolgozatban szereplő kifejezést szakirodalomból vettem át. Ez vegyészeti kérdés, nem tudok állást foglalni.

x) Az $\binom{M}{n+1}$ jelölés a *jelzett helyeken* valóban kicsit félreérthető, helyszűke miatt nem részleteztem.

A **második** oszlopban az *összes* szimplexet keressük, ami valóban $\binom{M}{n+1}$.

A **harmadik** oszlopban csak az S_R vektort tartalmazókat, amelyek száma így csak $\binom{M-1}{n}$.

11) a) Egy atomcsoport szerkezetét csak 3 -dimenziós *térbeli* gráffal lehet leírni. Egy reakció folyamán ezen gráfok szakadnak több részre és a részek másként kapcsolódnak ismét össze, bizonyos *kémiai* feltételek mellett. Véleményem szerint ezt a folyamatot a térbeli gráfok szét- és összekapcsolásának- és az említett kémiai feltételek pontos megismerése után lehetne axiomatikusan leírni. Ha ez után a dolgozatban említett mennyiségi eredményekhez (szimplexek száma) hasonló kérdésekre keresünk választ, akkor a *gráfelmélet* alaposabb alkalmazására van szükségünk.

Az említett módszer és vizsgálatok tanulmányozásához még nem volt elegendő időm. (Lásd még a 10.i) kérdésre adott válaszomat is.)

b) Dolgozatomban a *kiértékelési operátorok* általános lineáris algebrai tulajdonságait vizsgáltam. **Wasylkiewicz** és **Ung** *equilibriumok* és *eutektikus felületek* tanulmányozásához használják a keverékek nemlineárisan transzformált moláris Gibbs-szabad energiáját. A transzformáció:

$$X_i = \frac{x_i - v_i^T V_{\text{ref}}^{-1} \mathbf{x}_{\text{ref}}}{1 - v_{\text{tot}}^T V_{\text{ref}}^{-1} \mathbf{x}_{\text{ref}}},$$

Megállapítják, hogy "a kritikus helyeken a transzformált moláris Gibbs-szabad energiák összege nem zérus". Az alkalmazott formulából, mint például: $G = \sum n_i \mu_i$ kiderül, hogy valójában ők is kiértékelési operátorokat használnak.

Eutektikus felületekkel mi az [1999] dolgozatunkban foglalkozunk:

<http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/Szalkai-1999b-Handling.pdf>

és tervezünk még további kutatásokat is (más módszerekkel).

12)-14) Köszönöm a dicsérő megjegyzéseket.

15) i)-v) köszönöm az észrevételeket.

vi) (41. oldalon Szederkényi Gábor nevét írtam **Szépölgyi János** helyett)
Ez valóban egy **súlyos elírás**, nagyon sajnálom. Szerencsére a hivatkozásoknál (118.oldal) jól írtam, de természetesen ez nem mentesít a hiba vétsége alól.

vii) (108. oldal) Ez szintén figyelmetlenségem: angol nyelvű irodalomból vettem át, és elfelejtettem lefordíttatni (vegyész kollégáimmal).

16) Köszönöm a dicsérő megjegyzéseket.

Veszprém, 2014. július 03.

Szalkai István