

Komplex, nemlineáris dinamikájú hálózatok  
analízise és irányítása optimalizálási  
módszerekkel

Optimization-based analysis and control of complex networks

with nonlinear dynamics



Rudan János

*Doktori disszertáció tézisei*

Pázmány Péter Katolikus Egyetem  
Információs Technológiai és Bionikai Kar

Témavezetők:

Prof. Szederkényi Gábor (PPKE ITK)

Prof. Hangos Katalin (MTA SZTAKI)

Budapest, 2014.

## 1 Bevezetés

A dinamikus rendszermodellek a tudomány és technológia számtalan területén játszanak központi szerepet. A hagyományos mérnöki területeken történő alkalmazásukon túl számos biológiai folyamat és jelenség megértésére és leírására van lehetőségünk általuk [14]. Segítségükkel a rendszerek jövőbeli viselkedése - figyelembe véve a kezdeti feltételeket - előre jelezhető, így lehetőség nyílik azok analizálására és szimulációjára. A modellalkotás egyik fontos tulajdonsága az egyszerűsítés: a rendszermodell azokra a jelenségekre kell, hogy fókuszáljon, melyek meghatározóak a vizsgált rendszer dinamikájának szempontjából.

Mint ismeretes, a számítógépek számítási teljesítménye és adatfeldolgozó képessége az elmúlt évtizedek folyamán jelentősen megnövekedett, ennek folytán segítségükkel lehetőségünk nyílik nagy méretű rendszerek analizálására és irányítására is [1]. A nagy méretű, komplex, sok komponensből álló rendszerek leírására gyakran használt módszer azok hálózat alapú leírása. Az önálló komponensek és a köztük fennálló kapcsolatok azonosítása után a klasszikus hálózatelmélet eszközeit használva lehetőségünk nyílik a rendszer modelljének megalkotására. A hálózat csomópontjait a komponenseknek, míg azok kapcsolatait a hálózat összeköttetései feleltethetjük meg. Hálózatok matematikai eszközökkel történő leírásához általában a gráfelmélet eszközeit használjuk, ahol a gráf csúcsai a hálózat csomópontjainak, míg az élek az összeköttetéseknek felelnek meg. A csúcsok és élek konkrét szerepét a vizsgált rendszer tulajdonságai határozzák meg, így beszélhetünk ágensek hálózatáról (melyek mindegyike önállóan végez valamilyen általánosított számítási feladatot) illetve csővezeték-típusú hálózatokról (ahol a csúcsok csupán az élek találkozási pontjait jelölik).

A számítástudomány és -technológia, valamint az elérhető számítási és analitikus módszerek gyors fejlődésének köszönhetően az optimalizációs módszerek számos új alkalmazási területe nyílt meg a rendszer- és irányításelmélet keretein belül. Az optimális irányítás területén alkal-

mazott megoldások továbbfejlesztésre kerültek a hálózatos rendszerek irányítása céljából, mint pl. koordinált kooperatív irányítás, komplex, hálózati struktúrával rendelkező folyamatrendszerek szintézise [10], stb. Ahogy a hálózatos struktúrájú rendszerek kutatásának fókusza az adat-alapú, nagy méretű hálózatok vizsgálata felé tolódik, úgy nyernek egyre nagyobb figyelmet az optimalizálási problémák megoldására szolgáló hatékony számítási módszerek.

A jelen dolgozatban összefoglalt munka fókuszában a nagyméretű, nemlineáris dinamikával rendelkező hálózatos struktúrájú rendszerek centralizált, de párhuzamosítható optimalizációs módszereken alapuló analizise és irányítása áll. Két hálózatokon alapú modellosztályt vizsgáltam, amelyek alapvetően más megfontolásból származnak, ám mégis hasonló matematikai módszerekkel kezelhetők: egyrészt kinetikus reakcióhálózatok strukturális és dinamikus tulajdonságainak analizisét, másrészt pedig a vasúti hálózatok késéses esetben történő optimális újraütemezését vizsgáltam. Reakcióhálózatok esetén a modell hálózatos struktúrája úgy áll elő, hogy a csúcsok (kémiai) komplexeket, az irányított élek pedig reakciókat (átalakulásokat) reprezentálnak. Ezzel ellentétben a vasúti hálózatok esetében a csomópontok topologikus leképzései az állomásoknak és kereszteződéseknek, melyeket a vasúti pályaszakaszok kötnek össze. A pályaszakaszokon a vonatok az aktuális menetrendnek megfelelően közlekednek.

## 2 Az alkalmazott eszközök és módszerek

### 2.1 Optimalizációs problémák

Az optimalizációs problémák a rendszer- és irányításelmélet számos területén játszanak fontos szerepet [3]. A szabályzótervezési feladatok jelentős része egy korlátos optimalizálás, ahol a szabályzási cél a veszteségfüggvény és a rendszermodell a megszorítás. Elmondható, hogy a legtöbb optimalizálási probléma matematikai programozási feladatokra vezethető vissza, amelyek alkalmasak mind a költségfüggvények,

mind pedig a változókra vonatkozó korlátok kezelésére.

**Lineáris Programozás (LP)** egy széles körben használt módszer, igen alaposan kidolgozott elméleti háttérrel és számos szoftverben is implementált megoldási módszerekkel. A lineáris program egy konvex, korlátozásokkal ellátott optimalizációs probléma, ahol a valós értékű változók lineáris kombinációjának szélsőértékét keressük a korlátozások figyelembe vételével. Az LP probléma a következő általános formában írható fel:

$$\begin{cases} \min_x c^T x \\ Ax \leq b \\ x_i \in \mathbb{R}, i = 1, \dots, k \end{cases}$$

ahol  $x$  a valós értékű *döntési változók* egy  $k$ -dimenziós vektora. Az  $\omega$  darab, lineáris egyenlőtlenség formájában felírt korlátozást az  $A \in \mathbb{R}^{\omega \times k}$  mátrix ill. a  $b \in \mathbb{R}^k$  vektor írja le. A  $c^T x$  lineáris függvény  $c \in \mathbb{R}^k$  együtthatókkal ellátva a *célfüggvény*, amelyet minimalizálni kívánunk.

A lineáris programok megoldási módszereinek mind elméleti, mind pedig implementációs tekintetben széleskörű irodalma van. Fontos megjegyezni, hogy az ún. belső pontos módszerek használatával a lineáris programok polinom időben megoldhatók.

**Vegyes egész értékű lineáris programozás (Mixed Integer Linear Programming, MILP)** a lineáris programozás speciális esete, mikor a döntési változók egy része egész értékű. Bizonyos nemlineáris korlátozásokat vagy költségfüggvényt tartalmazó problémákat MILP-é tudunk alakítani. A MILP probléma általános alakja:

$$\begin{cases} \min_x c^T x \\ Ax \leq b \\ x_i \in \mathbb{R}, i = 1, \dots, k \\ x_j \in \mathbb{Z}, j = k + 1, \dots, l \end{cases}$$

ahol a jelölések hasonlóak az LP esethez, de a döntési változók  $l$ -dimenziós vektora  $k$  valós és  $l - k$  egész értékű elemből áll.

Ismeretes, hogy a MILP problémák megoldása NP-nehéz, így megoldásukra általában rendkívül számításigényes, heurisztikákon alapuló technikákat használunk, melyek nagyméretű probléma esetén gyakran megbízhatatlanok.

## 2.2 Kinetikus reakcióhálózatok

A kinetikus reakcióhálózatok (Kinetic Reaction Network, KRN) tömeghatás kinetikájú, determinisztikus, pozitív polinomiális rendszereket jelölnek [6]. A rendszert leíró differenciálegyenletek egy irányított gráfként kerülnek ábrázolásra (ún. reakciógráf). A gráf  $m$  darab csúcsa a komplexeket reprezentálja, melyek az  $n$  különböző anyagból állnak elő az  $Y$  komplex-kombinációs mátrix értékeinek megfelelően. A gráf súlyozott élei (melyeket az  $A_k$  Kirchhoff-mátrix ír le) a komplexek közötti reakciókat jelölik. A rendszert leíró ODE-k a következőképpen kerülnek felbontásra:  $\dot{\mathbf{x}} = M \cdot \psi(\mathbf{x}) = Y \cdot A_k \cdot \psi(\mathbf{x})$ , ahol  $M$  elemei a dinamikát leíró differenciálegyenletekben lévő monomok együtthatóit jelölik, valamint a  $\psi = [\psi_1 \dots \psi_m]^T \in \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$  vektorértékű leképezést a következőképpen definiáljuk:  $\psi_j(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^n x_i^{Y_{i,j}}$ ,  $j = 1, \dots, m$ .

**Dinamikus ekvivalencia** Ismert, hogy ugyan azt a dinamikus viselkedést több reakciógráf (ún. realizációk) is mutathatja. Két különböző reakcióhálózat *dinamikusan ekvivalens*, ha Kirchhoff-mátrixuk különböző, de ugyanazt a dinamikát írják le:  $M = Y \cdot A_k^{(1)} = Y \cdot A_k^{(2)}$ , ahol  $Y$  rögzített. Ennek értelmében definiálhatunk dinamikusan ekvivalens, de különböző struktúrájú realizációkat. *Ritka realizációnak* nevezzük a minimális, *sűrű realizációnak* a maximális számú reakciót tartalmazó hálózatokat. Egy adott dinamikához több különböző ritka realizációt tudunk meghatározni, de a sűrű realizáció egyedi szuperstruktúra, amely minden matematikailag lehetséges reakciót tartalmaz [12].

**Lineáris konjugáltság** A szakirodalomból ismert, hogy az ODE-k kinetikus tulajdonságai invariánsak a állapotváltozók átrendezésére ill. pozitív skálázására. Így a dinamikus ekvivalencia fogalma tovább

általánosítható a lineáris konjugáltság bevezetésével. Két reakcióhálózat *lineárisan konjugált*, ha (megfelelő kezdeti feltételek mellett) létezik pozitív diagonális leképezés a kinetikus egyenlet-rendszer megoldásai között [8]. Tekintsünk két kinetikus rendszert, melyeket jelöljön  $(Y, A_k)$  és  $(Y, A'_k)$ :

$$\Sigma_1: \dot{x} = Y \cdot A_k \cdot \psi(x)$$

$$\Sigma_2: \dot{\bar{x}} = Y \cdot A'_k \cdot \psi(\bar{x}),$$

ahol  $x, \bar{x} \in \mathbb{R}_+^n$ ,  $Y \in \mathbb{R}^{n \times m}$  és  $A_k, A'_k \in \mathbb{R}^{m \times m}$  Kirchhoff-mátrixok. Ha létezik  $\mathbf{d} \in \mathbb{R}_+^n$  vektor úgy, hogy  $T = \text{diag}(\mathbf{d})$  és  $x(0) = T\bar{x}(0)$  fennáll, akkor a  $\Sigma_1$  és  $\Sigma_2$  rendszerek lineárisan konjugáltak, ha  $x(t) = T\bar{x}(t) \forall t > 0$  teljesül. Továbbá megmutatható, hogy ha  $M = Y \cdot A_k$  fennáll és az  $A_k, A'_k$  mátrixok által leírt rendszerek lineárisan konjugáltak, akkor  $M = T \cdot Y \cdot A'_k$  teljesül.

A dinamikus ekvivalencia és a lineáris konjugáltság fogalma azonos, ha a  $T$  transzformáció az identitás. Szintén látható, hogy a megoldások kvalitatív tulajdonságai (az egyensúlyi pontok száma és stabilitási tulajdonságai, az anyagok megmaradása/kioltása, az invariáns terek dimenziója stb.) két lineárisan konjugált reakcióhálózat esetében mindig azonosak.

**Gyenge reverzibilitás és zéró deficiencia** A gyenge reverzibilitásnak központi szerepe van a reakcióhálózatok tekintetében, minthogy ez a fogalom a reakciógráf strukturális tulajdonságait kapcsolja össze a reakcióhálózat dinamikus viselkedésének kvalitatív tulajdonságaival. Gráfelméleti szempontból vizsgálva a gyenge reverzibilitás akkor és csak akkor áll fenn, ha a gráf minden komponense erősen összefüggő komponens, azaz amennyiben a  $C_i$  és  $C_j$  csúcsok között létezik irányított út, úgy a  $C_j$  és  $C_i$  között is létezik,  $i, j = 1 \dots m$ . Továbbá ismert, hogy egy reakcióhálózathoz tartozó  $A_k$  Kirchhoff-mátrix akkor és csak akkor gyengén reverzibilis, ha létezik egy elemenként szigorúan pozitív vektor az  $A_k$  magterében [9].

Egy adott realizáció deficienciájának a következőképpen definiált strukturális tulajdonságot nevezzük:  $\delta = m - l - s$ , ahol  $m$  a komplexek száma,  $l$  a reakciógráf komponenseinek száma és  $s = \text{rank}(\{\rho^{(i,j)}\})$ , ahol  $\rho^{(i,j)} = Y(\cdot, i) - Y(\cdot, j)$  a  $C_i$  és  $C_j$  komplexek közötti reakcióhoz tartozó ún. *reakcióvektor*,  $i, j = 1, \dots, m$ .

A *zéró deficiencia tétel* [5] kimondja, hogy amennyiben egy reakcióhálózat zéró deficienciájú és gyengén reverzibilis, akkor pontosan egy aszimptotikusan stabil egyensúlyi pontja létezik minden sztöchiometrikus kompatibilitási osztályban.

**A tömegmegmaradás** egy fontos korlátozás a fizikai jelentéssel bíró reakcióhalmazok modellezésénél. A (sztöchiometriai) tömegmegmaradást a következőképpen definiáljuk [7]: legyen  $g_v$  az  $X_v$  anyagok pozitív értékű skálázott molekulásúlya. Ha a  $C_i \rightarrow C_j$  reakció létezik a hálózatban, a következőt írhatjuk fel:  $\sum_{v=1}^n \alpha_{vi} g_v = \sum_{v=1}^n \alpha_{vj} g_v = c_s$ , ahol  $c_s$  szigorúan pozitív skalár. Definiáljuk a  $g \in \mathbb{R}_+^n$  vektort mint a skálázott molekuláris súlyokból kialakított sorvektort. Ekkor az előző egyenlet így írható:  $g \cdot Y(\cdot, i) = g \cdot Y(\cdot, j) = c_s$  ahol  $Y(\cdot, i)$  az  $Y$  mátrix  $i$ -edik oszlopát jelöli. Egy reakció teljesíti a tömegmegmaradást, ha  $g \cdot \rho^{(i,j)} = 0$ , ahol  $\rho^{(i,j)}$  a vonatkozó reakcióvektor és  $g$  szigorúan pozitív. Definiáljuk *tömegmegmaradást teljesítő reakciók halmazát* amely előbbi feltételt teljesítő reakciókat tartalmazza.

Egy KRN teljesíti a tömegmegmaradás követelményét, ha valamennyi reakciója a tömegmegmaradást teljesítő reakciók halmazában van és ezekhez létezik egy közös, szigorúan pozitív  $g$  vektor.

### 2.3 Közlekedési hálózatok

A közlekedési hálózatok érdekes és széleskörűen vizsgált példái a komplex dinamikájú hálózatoknak, ahol a hálózat struktúráját az utak (légi folyosók, vasúti vágányok, autópályák, utak) topologikus elrendezése adja, melyeken járművek mozognak. Elkerülendő a balesetek ill. közlekedési zavarok a közlekedésre gyakorolt hátrányos hatásait, különböző irányítási módszereket alkalmazunk a járművek szükség szerinti

újraütemezésére, átirányítására a hálózatban.

A vasúti hálózatok utóbbi években tapasztalható egyre növekvő terhelése komoly kihívások elé állítja a hálózatkezelőket. Komoly kutatási erőfeszítések történtek a menetrendtervezés területén azon célból, hogy a hálózatok problémamentes üzemeltetését biztosítsák, kiemelten késéses esetekben. A vonatok megfelelő újraütemezésével a késés terjedése korlátozható és a névleges működési állapot a lehető leggyorsabban visszaállítható. A szakirodalomban a késés-kezelés különböző megoldási módszerei lelhetők fel, pl. a vegyes egész értékű programozáson [11] vagy greedy módszereken alapulók [13].

Az egyik permutáció-alapú módszer max-plus algebrát használva MILP programozási feladatra vezeti vissza az optimális újraütemezés feladatát, melyet modell-prediktív szabályzási környezetben használ [2]. Az így létrehozott visszacsatolt szabályzó képes a hálózat jövőbeli viselkedésének előrejelzésére ütemes menetrend esetén, valamint a vonatok egy új, optimális követési rendjének meghatározására, hogy minimalizálja a késések összegét a predikciós horizont mentén. A modellben a vonatok vasúti szakaszok mentén, (virtuális) állomások között mozognak. A hálózatban történő események lineáris korlátozások halmozaként kerülnek leírásra. A névleges indulási és érkezési időket az eredeti menetrend definiálja, melyet késések zavarhatnak meg.

A módszer hatékonyan képes csökkenteni a késések összegét a predikciós horizont mentén, de nagy és sűrű hálózat esetén a megoldás sebességének növelése szükséges.

### 3 Új tudományos eredmények

Az értekezésben bemutatott új tudományos eredményeket az alábbi tézisekben foglalom össze. Az egyes tézisekhez megadom a hozzájuk kapcsolódó publikációkat is.

## I. tézis: Numerikusan hatékony algoritmusok kinetikus reakcióhálózatok ritka és sűrű realizációinak meghatározására.

*Két új, lineáris programozáson (LP) alapuló, polinomiális idő-komplezitással rendelkező módszert javasoltam kinetikus reakcióhálózatok dinamikusan ekvivalens alternatív realizációinak számítására. Megmutattam, hogy a javasolt módszerek segítségével nagy méretű, biológiai relevanciájú kémiai reakcióhálózatok is kezelhetők. A módszereket összehasonlítottam a szakirodalomban korábban publikált vegyes egész értékű lineáris programozáson (MILP) alapuló módszerrel és megmutattam az eredmények helyességét. Megmutattam, hogy a javasolt új módszerek a megoldás gyorsaságának tekintetében felülmúlják a MILP-alapú megoldást.*

Kapcsolódó publikációk: [J1, C3]

### I.a tézis:

*LP-alapú megoldást javasoltam kinetikus reakcióhálózatok minimális számú reakciót tartalmazó, dinamikusan ekvivalens realizációinak meghatározásához. Az ún. ritka realizációt a reakcióhálózat Kirchhoff-mátrixának oszloponkénti, L1-norma szerinti minimalizálásával számítottam.*

Az algoritmusban felhasználtam azt az eredményt, hogy a nagyméretű, alulhatározott lineáris egyenlőség-rendszerek L1-minimális leírása azok egy ritka realizációja [4]. Az így előálló LP probléma publikusan elérhető megoldók használatával hatékonyan megoldható. Megmutattam, hogy a javasolt módszer a megoldás gyorsaságának tekintetében mind a MILP-alapú, mind pedig a szakirodalomból ismert egyéb, LP alapú módszereket felülmúlja.

### I.b tézis:

*LP-alapú megoldást javasoltam kinetikus reakcióhálózatok maximális számú reakciót tartalmazó, dinamikusan ekvivalens realizációinak megha-*

tározásához, amelyekről bizonyított, hogy az adott reakciógráf összes lehetséges realizációját mint részgráfot tartalmazzák. Az ún. sűrű realizációt kiszámító algoritmus a szakirodalomból ismert MILP-alapú algoritmus relaxációján alapul: a Kirchhoff-mátrix off-diagonális elemeihez kapcsolódó valós értékű segédváltozók oszloponkénti összege kerül maximalizálásra.

A javasolt, sűrű realizációk számítását végző módszer a szakirodalomból ismert MILP-alapú megoldás továbbfejlesztéseként értelmezhető [12]. Az elvégzett mérések szerint a módszer számítási sebesség tekintetében minden más, e célra használatos módszert felülmúl. A véletlenszerűen generált KRN-eken folytatott számításokon túl egy nagyméretű, biológiailag releváns hálózatot is vizsgáltam, amely az *ErbB* intracelluláris jelátviteli útvonalat írja le. A javasolt módszer segítségével megadtam a reakcióhálózat sűrű realizációját, mely 15 különböző komplexből kiinduló 29 extra reakciót tartalmaz.

## II. tézis: Új eljárások reakcióhálózatok gyengén reverzibilis és tömegmegmaradással rendelkező realizációinak előállítására.

*Új módszereket adtam kinetikus reakcióhálózatok dinamikusan ekvivalens és lineárisan konjugált alternatív realizációinak számítására, melyek alkalmasak a reakciógráf struktúrájára és/vagy a rendszer dinamikájára vonatkozó korlátozások figyelembe vételére.*

Kapcsolódó publikációk: [J2, C1]

### II.a. tézis:

*Új, lineáris programozáson alapuló, polinomiális idő-komplexitással rendelkező módszert javasoltam kinetikus reakcióhálózatok lineárisan konjugált, gyengén reverzibilis alternatív realizációinak számítására. A javasolt módszert összehasonlítottam a szakirodalomból ismert LP- ill. MILP alapú módszerekkel és megmutattam, hogy számítási sebesség tekintetében felülmúlja azokat, így képes nagy méretű KRN-ek kezelésére*

is.

A javasolt módszer alapját a szakirodalomban korábban bemutatott módszer képezi [9]. Az ott bemutatott módszert LP formában fogalmaztam meg és kiterjesztettem a lineárisan konjugált esetekre is. Kiháztaltam a tényt, hogy két Kirchhoff mátrix strukturális azonossága (azaz, hogy a nulla és nem-nulla elemek pozíciói azonosak) megfogalmazható lineáris korlátozásként.

A javasolt módszer helyességét több különböző példán keresztül mutattam meg. A módszer előnyös számítási tulajdonságait véletlenszerűen generált KRN-eken végzett számítások összehasonlító elemzésével mutattam meg.

### II.b. tézis:

*Új, vegyes egész értékű lineáris programozáson alapuló algoritmust adtam kinetikus reakcióhálózatok tömegmegmaradással rendelkező, dinamikusan ekvivalens alternatív realizációinak számítására. Az eredmények helyességét a szakirodalomból vett példákkal igazoltam.*

A javasolt algoritmus egy MILP problémába vonja össze a tömegmegmaradást és a dinamikus ekvivalenciát biztosító feltételeket. Az így kialakuló optimalizálási probléma méretét jellemzően a bevezetett bináris segédváltozók száma határozza meg, melynek nagyságrendje  $O(m^2)$  ahol  $m$  a komplexek száma a hálózatban. A javasolt algoritmus helyességét a szakirodalomból vett példákon keresztül mutatom meg.

## III. tézis: Új megoldási módszerek közlekedési hálózatok feletti ütemezési feladatok megoldására.

*Új problémafelírást javasoltam a késéssel terhelt vasúti hálózatok feletti ütemezési feladatok megoldására használt modell-prediktív kontrollerek számára. A szabályzó olyan módon változtatja meg a vonatok követési sorrendjét, hogy a predikciós horizont mentén minimális összegű késés adódjon. A rendszermodellt lineáris korlátozások segítségével írtam fel. A szabályzási problémát vegyes egész értékű lineáris programozásként (MILP) fogalmaztam meg. Megmutattam a javasolt szabályzási módszer*

hatékonyságát és javaslatot adtam a modell érzékenységi vizsgálatára egyedi késések esetén.

Kapcsolódó publikációk: [C2, J3]

### III.a. tézis:

*Javaslatot adtam a korlátozásokat leíró mátrix újrendezésére, amely felgyorsítja a vizsgált MILP probléma megoldását abban az esetben is, ha a megoldó preprocessora használatban van. Az eljárás a korlátozások mátrixának szakasz-alapon történő újrendezésén alapszik, a mátrixban egy blokkba gyűjtve azokat a korlátozásokat, amelyek egyazon vasúti szakaszra vonatkoznak. Az eredményként kapott MILP probléma korlátozásokat leíró mátrixa tiszta blokk-diagonális struktúrával rendelkezik.*

Szimulációkat végeztem a holland vasúti hálózat modelljén. Az eredeti menetrendet komplex késési esetekkel módosítottam. A javasolt újrendezési módszert használva a MILP probléma megoldásánál 1.813-szoros sebességnövekedést értem el a rendezetlen esethez képest.

### III.b. tézis:

*Módszert adtam a modellben szereplő korlátozások egyszerűbb formára történő átalakítására. Az eredményként kapott modell egyszerűen és közvetlenül mutatja a kapcsolatokat a folytonos értékű, a vasúti hálózatban történő események időpontjait leíró változók és a bináris kontrollváltozók között. Kihasználva ezt, a modell belső struktúrájának és a hálózatban lévő események összefüggéseinek további vizsgálatára nyílik lehetőség, továbbá probléma-specifikus algoritmusokat lehet kialakítani a jelenleg használt, általános célú MILP megoldók helyettesítésére.*

A korlátozások javasolt átalakítása olyan modell-formát eredményez, ahol az események időpontját leíró változók kizárólag ismert konstansoktól és/vagy a kontrollváltozóktól függenek. Az így kapott modell több korlátozást tartalmaz, mint az eredeti modell-forma, azonban lehetőséget ad annak direkt vizsgálatára, hogy az egyes kontrollváltozóknak milyen hatása van a késés csökkentésére.

## 4 Az eredmények alkalmazása

Jelen dolgozatban komplex, nemlineáris dinamikát mutató, hálózatos struktúrájú rendszerek analizisét és irányítását vizsgáltam két problémakörön keresztül.

Új algoritmusokat javasoltam kinetikus reakcióhálózatok dinamikus ekvivalens és lineárisan konjugált alternatív realizációinak számítására strukturális és/vagy dinamikus korlátozások mellett. Az általam javasolt algoritmusok segítségével lehetőségünk nyílik nagy méretű, biológiai releváns reakcióhálózatok analizisére is. Emellett megmutattam, hogy az előírt tulajdonságokkal rendelkező realizációk keresése megvalósítható az alkalmazott optimalizációs keretben. Az így kapott optimalizációs feladatok egy részét úgy alakítottam át, hogy azok polinomiális időben megoldhatók legyenek.

Új problémaalapot javasoltam a vasúti hálózatok újraütemezését kéréses esetben végző szabályzó számára. Modell-prediktív szabályzási keretben megvalósított irányítás segítségével a névleges menetrendből származó új menetrendek előállítására lehetséges a predikciós horizont mentén számított összes késés minimalizálása céljából. A javasolt szabályzási módszer hatékonyságát széleskörű szimulációkkal igazoltam, melyekhez a holland vasúti hálózat modelljét használtam. Megmutattam, hogy alkalmazva a javasolt modell-transzformációkat, egyrészt a megfogalmazott optimalizációs problémák megoldásához szükséges idő jelentősen csökkenthető, másrészt pedig megfelelő transzformációt választva újszerű modell-struktúra hozható létre, amely probléma-specifikus megoldók kialakításának alapja lehet. Eredményeim hangsúlyozzák az optimalizálási probléma specifikus tudáson alapuló strukturált megfogalmazásának fontosságát.

## Hivatkozások

- [1] A. Barrat, M. Barthelemy, and A. Vespignani, *Dynamical processes on complex networks*, vol. 574. Cambridge University Press

- Cambridge, 2008.
- [2] T. van den Boom and B. D. Schutter, "On a model predictive control algorithm for dynamic railway network management," in *2nd International Seminar on Railway Operations Modelling and Analysis (Rail-Hannover2007)*, 2007.
- [3] S. Boyd and L. Vandenberghe, *Convex Optimization*. Cambridge University Press, 2004.
- [4] D. L. Donoho, "For most large underdetermined systems of linear equations the minimal  $l_1$ -norm solution is also the sparsest solution," *Comm. Pure Appl. Math*, vol. 59, pp. 797–829, 2004.
- [5] M. Feinberg, "Chemical reaction network structure and the stability of complex isothermal reactors - II. Multiple steady states for networks of deficiency one," *Chemical Engineering Science*, vol. 43, pp. 1–25, 1988.
- [6] M. Feinberg, *Lectures on chemical reaction networks*. Notes of lectures given at the Mathematics Research Center, University of Wisconsin, 1979.
- [7] K. M. Hangos and G. Szederkényi, "The effect of conservation on the dynamics of chemical reaction networks," in *IFAC Workshop on Thermodynamic Foundations of Mathematical Systems Theory, TFMST'13*, 2013.
- [8] M. D. Johnston and D. Siegel, "Linear conjugacy of chemical reaction networks," *Journal of Mathematical Chemistry*, vol. 49, pp. 1263–1282, 2011.
- [9] M. D. Johnston, D. Siegel, and G. Szederkényi, "A linear programming approach to weak reversibility and linear conjugacy of chemical reaction networks," *Journal of Mathematical Chemistry*, vol. 50, pp. 274–288, 2012.

- [10] L. A. Montestruque and P. J. Antsaklis, "On the model-based control of networked systems," *Automatica*, vol. 39, no. 10, pp. 1837–1843, 2003.
- [11] A. Schöbel, "A model for the delay management problem based on mixed-integer-programming," *Electr. Notes Theor. Comput. Sci.*, vol. 50, no. 1, pp. 1–10, 2001.
- [12] G. Szederkényi, "Computing sparse and dense realizations of reaction kinetic systems," *Journal of Mathematical Chemistry*, vol. 47, pp. 551–568, 2010.
- [13] J. Tornquist Krasemann, "Design of an effective algorithm for fast response to the re-scheduling of railway traffic during disturbances," *Transportation Research Part C: Emerging Technologies*, 2011.
- [14] B. P. Zeigler, H. Praehofer, and T. G. Kim, *Theory of modeling and simulation: integrating discrete event and continuous complex dynamic systems*. Academic press, 2000.

## A szerző publikációi

- [J1] **J. Rudan**, G. Szederkényi, and K. M. Hangos, "Efficiently computing alternative structures of large biochemical reaction networks using linear programming," *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, vol. 71, pp. 71–92, 2014.
- [J2] **J. Rudan**, G. Szederkényi, K. M. Hangos, and T. Péni, "Polynomial time algorithms to determine weakly reversible realizations of chemical reaction networks," *Journal of Mathematical Chemistry*, pp. 1–19, 2014.
- [J3] B. Kersbergen, **J. Rudan**, T. van den Boom, and B. D. Schutter, "Railway traffic management using switching max-plus-linear systems," *Discrete Event Dynamic Systems*, submitted.



- [C1] **J. Rudan**, G. Szederkényi, and K. M. Hangos, "Computing dynamically equivalent realizations of biochemical reaction networks with mass conservation," in *AIP Conference Proceedings*, vol. 1558, pp. 2356–2359, 2013. ISBN: 978-0-7354-1184-5.
- [C2] **J. Rudan**, B. Kersbergen, T. van den Boom, and K. M. Hangos, "Performance analysis of MILP based model predictive control algorithms for dynamic railway scheduling," in *European Control Conference (ECC2013), July 17-19 2013, Zurich*, pp. 4562–4567, 2013.
- [C3] **J. Rudan**, G. Szederkényi, and K. M. Hangos, "Effectively computing dynamically equivalent structures of large biochemical reaction networks," in *International Conference on Bioinformatics and Computational Biology – BIOCAMP 2012, Bulgaria, Varna*, p. 80, 2012.
- [C4] **J. Rudan**, K. M. Hangos, and G. Szederkényi, "Analysis and supervisory control of a pressurizer using coloured Petri nets," in *9th European Workshop on Advanced Control and Diagnosis - ACD 2011*, pp. 1–6, 2011.
- [C5] G. Szederkényi, G. Lipták, **J. Rudan**, and K. M. Hangos, "Optimization-based design of kinetic feedbacks for nonnegative polynomial systems," in *IEEE 9th International Conference of Computational Cybernetics, July 8-10, Tihany, Hungary*, pp. 67–72, 2013. ISBN: 978-1-4799-0063-3.