

# Pontok, lapított tetraéderek, molekulák és kémiai reakciók

Haladvány Kiadvány 131030.pdf

Szalkai István  
Pannon Egyetem, Matematika Tanszék, Veszprém  
szalkai@almos.uni-pannon.hu

A nem elfajuló háromszögeket ("kétdimenziós tetraéderek"), valamint a három- és többdimenziós tetraédereket közös néven **geometriai szimplexeknek** nevezik.

**1. Definíció.** [!] *Elfajuló (vagy affín) szimplexeknek* nevezzük a háromdimenziós tér a következő ponthalmazait:

- három (különböző), egy egyenesre illeszkedő (kollineáris) pont,
- négy (különböző), egy síkra illeszkedő (koplanáris) pont, melyek közül semelyik három nincs egy egyenesen,
- öt általános pont, vagyis közülük semelyik négy nincs egy síkon.  $\square$

A következő kérdéssel középiskolásoknak is érdemes foglalkozniuk:

**2. Probléma.** [!] *Hogyan kell elhelyezni a háromdimenziós térben  $n$  pontot úgy, hogy semelyik három nincs egy egyenesen, és az  $n$  pont között található elfajuló szimplexek össz-száma a lehető legkevesebb legyen?*

A fenti problémáról csak halkan említjük meg, hogy még megoldatlan, mert nem akarjuk elriasztani az érdeklődő, ügyes középiskolásokat a megoldástól! (Nekünk eddig ugyanis nem volt elég időnk a feladattal foglalkozni.)

A probléma önmagában is érdekes, valójában egy hosszabb kutatás, a kémiai reakciók lineáris algebrai és kombinatorikai vizsgálatának egyik "gyöngyszeme". Jelen cikkünkben ezeket a vizsgálatokat és összefüggéseket mutatjuk be röviden, az érdeklődőknek elsősorban az [2012b] és [2013c] összefoglalókat, valamint [2013c] Tézisfüzetét ajánljuk. Az alapfogalmakkal [1991L], [1997] és [2001]-ben ismerkedhetünk meg.

## Bevezetés

A kémiai reakciók, mint például a legegyszerűbb



a valóságban nem egyetlen lépésben történnek, hanem nagyon sok köztes *atomsocsoport* ("molekulakezdemény", mint pl. H, H<sub>2</sub>, O, O<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, HO,

$\text{HO}_2$ ) között végbemenő több **reakciólépés (elemi reakció)** bonyolult *sorozata-ként (mechanizmus)*, így (1)-et **összetett reakciónak** hívjuk<sup>1)</sup>.

Egyik megoldandó feladatunk a következő: adott atomcsoportok közötti összes lehetséges elemi reakció listázása, majd a kapott reakciók által megvalósítható összetett reakciók megkeresése. A résztvevő lehetséges reakciók nagy (exponenciális) száma miatt a feladat még a mai gyors számítógépekkel sem egyszerű.

A reakciókban szereplő atomok rögzítése után minden atomcsoport egy-egy  $\mathbb{R}^n$  -beli vektor, a reakciók ezen vektorok lineáris kombinációi. Például (1) a következő egyenlettel írható le a  $\{H, O\}$  bázisban:

$$2 \cdot \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix} = 2 \cdot \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Természetesen az egymásból nem levezethető, vagyis *minimális* reakciókat keressük, vagyis a kiválasztott vektoroknak *minimális összefüggő* rendszert kell alkotniuk:

**3. 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.*  $\square$

(A lineáris algebra alapfogalmait röviden [1991L] és [1997] mutatja be. Ha az Olvasó nem kíván elmélyülni a lineáris algebrában, akkor csak a [!] jelű Definíciókat és Tételeket ajánljuk figyelébe.)

$\mathbb{R}^n$ -ben (vagyis legfeljebb  $n$  különböző atom esetén) minden szimplex *legfeljebb*  $n+1$  elemű, egy  $m$ -elemű vektorhalmaznak *összesen*  $\sum_{i=1}^{n+1} \binom{m}{i} = \binom{m+1}{n+2} - 1 \approx m^{n+2}$  legfeljebb ekkora méretű részhalmaza van. Az összes  $m^{n+2}$  részhalmazt nem kell mind megvizsgálnunk: [1991]-ben kifejlesztett algoritmusunk legfeljebb  $m^{n+1}$  lépés után befejeződik. Mint [1995]-ben és [2013c]-ben megmutattuk: bizonyos adathalmazokra a szimplexek száma eny-nyi, vagyis nincs gyorsabb algoritmus.

A szimplexek száma

**4. Jelölés.** *Jelölje  $\text{simp}(\mathcal{H})$  az adott  $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$  halmazban levő  $\mathcal{S} \subset \mathcal{H}$  szimplexek számát.*  $\square$

**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.*  $\square$

---

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

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

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

és a becslés éles, vagyis van olyan  $\mathcal{H}$  amelyre (2)-ban = teljesül.  $\square$

A kémia nyelvére lefordítva ez azt jelenti, hogy

**7. Tétel.** [!] Ha  $m$  molekulánk  $n$  atomból épül fel, akkor  $e$  molekulák közötti (minimális) reakciók száma pontosan akkor a legnagyobb, ha a molekulák közül bármely  $n$  **független**, vagyis közöttük nem lehetséges kémiai reakció.  $\square$

**8. Következmény.** [!] A fentiek esetén a lehetséges (minimális) reakciók száma legfeljebb  $\binom{m}{n+1}$ , és a becslés éles, vagyis van olyan  $\mathcal{H}$  amelyben pontosan ennyi (minimális) reakció van.  $\square$

A szimplexek **Sperner-családot** alkotnak (vagyis egyik szimplex sem tartalmazhat valódi részhalmazként egy másikat), így Sperner jól ismert tétele felső becslést ad  $\text{simp}(\mathcal{H})$  értékére, az 5. Tétel azonban megadja a szélsőséges  $\mathcal{H}$  vektorhalmazok szerkezetét is. Az adott atomok tehát az egyes vegyületeket nagyon "össze-vissza" mennyiségben kell, hogy felépítsék (pl. Vandermode determináns mintájára).

Következő kérdéstünk  $\text{simp}(\mathcal{H})$  minimális értéke adott elemszámú  $\mathcal{H}$  esetén.

**9. 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.  $\square$

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

$$b \cdot \binom{a+1}{2} + (n-b) \cdot \binom{a}{2} \leq \text{simp}(\mathcal{H}), \quad (3)$$

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

$$n \cdot \binom{\frac{m}{n}}{2} \leq \text{simp}(\mathcal{H}). \quad \square \quad (4)$$

A kémia nyelvére lefordítva ez azt jelenti, hogy

**11. Tétel.** [!] Ha  $m$  molekulánk  $n$  atomból épül fel, akkor  $e$  molekulák közötti (minimális) reakciók száma pontosan akkor a legkevesebb, ha kiválasztható  $n$  független molekula (ld. 7. Tétel) úgy, hogy a többi molekula valamelyik kiválasztottal **párhuzamos** (izomerje vagy többszörös adagja), és ezen párhuzamossági halmazok ("osztályok") méretei legfeljebb 1-gyel térnek el egymástól.  $\square$

**12. Következmény.** [!] A fentiek esetén a lehetséges (minimális) reakciók legkisebb számát (3) és (4) adja meg.  $\square$

Az alsó korlátot a *kizárólag* párhuzamos vektorokból (izomer molekulák vagy többszörös adagok) álló  $\mathcal{H}$  vektorhalmazok érik el. Amennyiben párhuzamos vektorokat nem engedünk meg  $\mathcal{H}$ -ban, a kérdés sokkal nehezebbé válik.

**13. Probléma.** Mennyi a  $\mathcal{H}$  halmazban levő szimplexek (minimális reakciók) minimális száma, ha  $\mathcal{H}$ -ban nincsenek párhuzamos vektorok (izomer molekulák vagy többszörös adagok) ?

A dimenziót csökkenthetjük a következő konstrukcióval:  $\mathcal{H}$  vektorait azok skalárszorosaival helyettesítjük, majd  $\mathbb{R}^n$  egy alkalmas hipersíkjával elmetszve a probléma  $n - 1$  dimenzióba kerül. Pontosabban:

**14. Definíció.** Tetszőleges  $\underline{h} \in \mathbb{R}^n$  vektorra és  $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$  halmazra legyen

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

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

Az  $n - 1$  -dimenziós  $\mathcal{P}$  hipersíkot természetes módon azonosítjuk  $\mathbb{R}^{n-1}$ -gyel. Amennyiben az  $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}^n$  halmaz (lineáris algebrai) szimplex, akkor annak  $\mathcal{S}^{\mathcal{P}} \subset \mathbb{R}^{n-1}$  képe *affin* (vagyis elfajult) szimplex, és könnyen található egy bijektív megfeleltetés  $\mathcal{H}^{\mathcal{P}} \subset \mathcal{P}$  (azaz  $\mathcal{H}^{\mathcal{P}} \subset \mathbb{R}^{n-1}$ ) és  $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^n$  között, hasonlóan  $\mathcal{H}^{\mathcal{P}}$  *affin* és  $\mathcal{H}$  *lineáris algebrai* szimplexei is megfeleltethetőek egymásnak, következésképpen

$$|\mathcal{H}^{\mathcal{P}}| = |\mathcal{H}| \quad \text{and} \quad \text{simp}_a(\mathcal{H}^{\mathcal{P}}) = \text{simp}_\ell(\mathcal{H}) . \quad (5)$$

$n = 4$  esetén  $\mathcal{H}^{\mathcal{P}} \subset \mathbb{R}^3$  affin szimplexei éppen az 1. Definíció elfajuló szimplexei, míg  $n = 3$  esetén a következő síkbeli pontthalmazok lehetnek affin szimplexek:

**15. Definíció.** [!] Tetszőleges síkbeli  $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}^2$  pontthalmaz **affin**

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

"Sajnos" az  $n = 3$  esetet már megoldottuk:

**16. Tétel.** ([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.  $\square$

Átfogalmazva síkbeli affin szimplexekre:

**17. Tétel.** [!] Tetszőleges, adott elemszámú  $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^2$  ponthalmazra, 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.  $\square$

**18. 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.  $\square$

$n = 4$  esetén csak a következő eredmény ismert:

**19. Tétel.** ([2011]) Tetszőleges, adott elemszámú  $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^4$  vektorhalmazra, ami kifeszíti  $\mathbb{R}^4$ -et,  $\mathcal{H}$ -ban nincsenek párhuzamos vektorok és  $24 \leq |\mathcal{H}|$ ,  $\text{simp}_\ell(\mathcal{H})$  pontosan akkor minimális, ha  $\mathcal{H}$  elemei két diszjunkt, 2-dimenziós síkon helyezkednek el, és a két síkon levő vektorok számának eltérése legfeljebb 1.  $\square$

A dimenzió csökkentése miatt ezzel ekvivalens:

**20. Tétel.** [!] 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.  $\square$

**21. 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.  $\square$

További problémák és sejtések

A 13. Probléma  $n \geq 5$  esetén máig megválaszolatlan. Az általános sejtés 1998-ban, számítógépes kísérletezések után fogalmazódott meg:

**22. 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 tartalmaznak (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 tartalmaznak (az eltérés legfeljebb 1), és a nagyobb indexű vektorok által kifeszített síkokon van esetleg kevesebb vektor.  $\square$

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

**23. 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 simplexezket 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 simplex.  $\square$

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

A fenti eredmények és problémák általánosíthatóak matroidokra ([1996], [2006], [2013c]) és hipergráfokra ([2013a], [2013c]) is. További vizsgálatok [2000b]-ban találhatóak.

## Hivatkozások

- [1991L] **Szalkai, I.:** *Lineáris algebra előadásvázlat*,  
<http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/LinAlgSK.pdf>
- [1991] **Szalkai, I.:** *Generating Minimal Reactions in Stoichiometry Using Linear Algebra*, Hung. J. Ind. Chem., 19 (1991), 289–292.  
[http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/HJIC\(1991\)289-292.pdf](http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/HJIC(1991)289-292.pdf)
- [1995] **Laflamme, C., Szalkai, I.:** *Counting Simplexes in  $\mathbb{R}^n$* , Hung. J. Ind. Chem. 23 (1995), 237–240.  
[http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/HJIC\(1995\)237-240.pdf](http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/HJIC(1995)237-240.pdf)
- [1996] **Dósa, Gy., Laflamme, C., Szalkai, I.:** *On the Maximal and Minimal Number of Bases and Simple Circuits in Matroids and the Extremal Constructions*, Preprint 046, Dept. Math. Univ. Veszprém, 1996.
- [1997] **Szalkai, I.:** *Lineáris algebra, sztöchiometria és kombinatorika*, Polygon VII. (1997), 35–51.  
<http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/SzI-Polygon1997-jav.pdf>
- [1997p] **Szalkai, I.:** *On the Number of Bases and Circuits in Matroids*, Colloquia Math. Soc. J. Bolyai, Conference on Extremal Graph Theory, Balatonlelle, 1997, Problem No.14.

- [1998] **Lafamme,C., Szalkai,I.:** *Counting Simplexes in  $\mathbb{R}^3$* , Electr. J. of Combinatorics vol.5 (1998) No.1, Res. Paper No. 40, 11 pp, <http://www.combinatorics.org/ojs/index.php/eljc/article/view/v5i1r40/pdf>  
**Nyomtatott változat:** J. Combin. 5 (1998), 597–607.
- [2000a] **Szalkai,I.:** *A New General Algorithmic Method in Reaction Syntheses Using Linear Algebra*, J. Math. Chemistry 28 (2000), 1–34.
- [2000b] **Szalkai,I.:** *On Valuation Operators in Stoichiometry and in Reaction Syntheses*, J. Math. Chemistry 27 (2000), 377–386.
- [2001] **Szalkai,I.:** *Diszkrét matematika és Algoritmuselmélet alapjai*, Veszprémi Egyetemi Kiadó, 2001.
- [2006] **Dósa,Gy., Szalkai,I., Lafamme,C.:** *On the Maximal and Minimal Number of Bases and Simple Circuits in Matroids and the Extremal Constructions*, Pure Math.&Appl.(PUMA) 15(2006), 383-392.  
<http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/PUMA2006.pdf>
- [2011] **Szalkai,B., Szalkai,I.:** *Counting minimal reactions with specific conditions in  $\mathbb{R}^4$* , J.of Math.Chem. 49 (2011), pp.1071-1085,  
<http://www.springerlink.com/content/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/audio/11-12/wksp_optimization/szalkai)  
[http://www.fields.utoronto.ca/programs/scientific/11-12/archive/discretegeom/wksp\\_optimization/index.html](http://www.fields.utoronto.ca/programs/scientific/11-12/archive/discretegeom/wksp_optimization/index.html)
- [2012a] **Szalkai,I., Dósa,Gy., Tuza,Zs., Szalkai,B.:** *On Minimal Solutions of Systems of Linear Equations with Applications*, Miskolc Math.Notes, 13 (2012), 529-541., [http://mat76.mat.uni-miskolc.hu/~mnotes/files/13-2/13-2-szalkai\\_501.pdf](http://mat76.mat.uni-miskolc.hu/~mnotes/files/13-2/13-2-szalkai_501.pdf)
- [2012b] **Szalkai,B., Szalkai,I.:** *Simplexes and their Applications - a Short Survey*, Miskolc Math.Notes, 14 (2013), 279-290.  
<http://mat76.mat.uni-miskolc.hu/~mnotes>
- [2013a] **Tuza,Zs., Szalkai,I.:** *Minimum Number of Affine Simplexes of Given Dimension*, Discrete Applied Math., benyújtva.
- [2013b] **Szalkai,I., Sellers,P., Pethő,Á.:** *On the Mathematical Foundation of Reaction Mechanisms*, előkészületben.
- [2013c] **Szalkai,I.:** *Reakciómechanizmusok algoritmikus és matematikai vizsgálata*, PhD dolgozat, 2013, Pannon Egyetem, Veszprém, benyújtva, Tézisek: <http://math.uni-pannon.hu/~szalkai/Tezisek-130919.pdf>