

Beszámoló a Matematika és Számítástudományok Szakterület Habilitációs Bizottságának kövelményrendszere szerint

Tóth János
BME TTK MI Analízis Tanszék

Tartalomjegyzék

1. Tudományos munkásság	2
2. A publikációk pontozása	2
3. A tudományos életpálya értékelése	2
4. Oktatói munkásság	2
5. Közéleti tevékenység	4
6. Előadásjavaslatok	4
1. FÜGGELÉK: Önéletrajzok	5
2. FÜGGELÉK: Kinetikai modellek transzformációi (Tézisek)	8
3. FÜGGELÉK: Hivatkozások és néhány részletes idézet	25
4. FÜGGELÉK: Publikációk	58
5. FÜGGELÉK: Pályázatok	72
6. FÜGGELÉK: Oktatás	73
7. FÜGGELÉK: Diplomamunkák és szakdolgozatok	75
8. FÜGGELÉK: Díjnyertes tudományos diákköri dolgozatok	76
9. FÜGGELÉK: Konferenciák	77
10. FÜGGELÉK: Habilitációs előadás javasolt témái	78

1. Tudományos munkásság

1. Lásd a *Téziseket* (2. Függelék).
2. Független hivatkozások száma: 480, Hirsch-index: 11, Erdős-szám: 3. Egyesített hatás a társszerzők számával osztva: 24.5. A részleteket lásd a *Hivatkozások* felsorolásánál (3. Függelék). Társszerzőim száma 65, a legkülönbözőbb végzettségűek és nemzetiségűek.

2. A publikációk pontozása

1. A zárójelben lévő pontszámok mutatják az összesből a másodközlésekért adott pontszámot.

	Kand. előtt (másod)	Kand. után (másod)	Összesen (másod)
Kutatás	75.0 (13.2)	123.9 (5.0)	193.2 (18.2)
Oktatás	1.2 (0)	14.2 (1.5)	19.4 (1.5)
Összesen	76.2 (13.2)	138.1 (6.5)	212.6 (19.7)

2. Tehát a társszerzők számával osztott összpontszám: $\boxed{212.6}$, a kandidátusi értekezés óta (Kand. után) szerzett pontszám: $\boxed{138.1}$, ebből a kandidátusi értekezés óta szerzett pontszám oktatási anyagokra: $\boxed{18.2}$.
3. A részleteket lásd a *Publikációkban* (4. Függelék).

3. A tudományos életpálya értékelése

1. Amint a publikációs listából kiderül, jelent meg dolgozatom a leírásban szereplő kategóriájú folyóiratok többségében, mint például:
 - matematikaiakban: *Bulletin des Sciences Mathématiques; SIAM Journal on Applied Mathematics;*
 - fizikaiakban: *Physica A és Physica D; Physical Review E; Letters in Mathematical Physics; Open Systems & Information Dynamics;*
 - kémiaiakban: *Physical Chemistry, Chemical Physics; Journal of Chemical Physics; Journal of Physical Chemistry; Chemical Engineering Science;*
 - biológiaiakban: *Systems Biology, IEE Proceedings; Journal of Theoretical Biology.*
2. Fontosnak tartom, hogy tanítványaimmal közösen bekapcsolódtunk a (lektorált) elektronikus publikálás legújabb formájába is: demonstrációkat készítettünk az oktatást és a kutatást elősegítendő: <http://demonstrations.wolfram.com>.
3. Mintegy három tucatnyi hazai és nemzetközi **pályázatban** vettem részt, az esetek több mint felében témavezetőként. A BME Matematikai Intézetének pályázati felelőseként (2006-ig) segítettem egyéni és intézeti pályázati lehetőségek felkutatásában és megírásában. Jelenleg az ESF által támogatott ötéves FUNCDYN program résztvevője vagyok. A részleteket lásd a *Pályázatoknál* (5. Függelék.)

4. Oktatói munkásság

1. Az egyetem elvégzése után oktattam a SOTE-n, 1976 óta folyamatosan oktatok az ELTE TTK-n, 1989 és 1999 között a GATE Matematikai és Számítástechnikai Intézetében, 1998 óta a BME Analízis Tanszékén, tartottam előadásokat a P. & M. Curie Egyetem doktori iskolájában, illetve a Kalamazoo College-ban.
2. A végzésem óta eltelt 72 szemeszterben tartott óráim főbb témakörei:
 - Differenciálegyenletek (alapok, illetve kvalitatív elmélet; matematikusoknak: ELTE TTK; BME GTK és VBK),

- Analízis (ELTE TTK, BME VIK),
 - Matematikai modellalkotás I.–II. (sávellőadás matematikusoknak: ELTE TTK),
 - Matematikai programcsomagok (EXCEL, DERIVE, *Mathematica*, GATE, ELTE TTK, BME),
 - Matematikai statisztika (SOTE),
 - Determinisztikus és sztochasztikus formális reakciókinetika (sávellőadás matematikusoknak: ELTE TTK),
 - Kutatásmódszertan (GATE, ELTE TTK),
 - Számítástechnika (GATE).
3. Az utolsó 6 szemeszter részletes leírását az 6. Függelék (*Oktatás*) tartalmazza.
4. Mindegyik munkahelyemen számos *új tantárgy* oktatását kezdeményeztem, s ezekhez tankönyvet írtam; ezek közül kiemelendőnek tartom a következő területeket:
- differenciálegyenletek (alkalmazások és kvalitatív elmélet) (matematikusoknak: ELTE TTK, BME GTK és VBK),
 - matematikai modellezés (matematikusoknak: ELTE TTK),
 - formális reakciókinetika (matematikusoknak: ELTE TTK; matematikusoknak: BME TTK, terv),
 - kutatásmódszertan (GATE, ELTE TTK),
 - a matematikai programcsomagok (DERIVE és EXCEL, majd elsősorban a *Mathematica*) alkalmazásai (GATE, matematikusoknak: ELTE TTK, BME GTK, matematikusoknak: TTK, VIK; mindenütt sokféle szakosoknak).
5. Hét hallgató kezdett vezetésemmel *doktori tanulmányokat*, közülük egy menetközben félbeszakította, négy abszolutóriumot szerzett (de egyikük ezek közül feltehetőleg kísérletet sem fog tenni a fokozat megszerzésére), további kettő várhatóan a félév végére szerzi meg azt, egyikük doktorjelölti státuszra pályázott. Összesen több mint 10 angol nyelvű, referált folyóiratcikkük van.
6. Diplomamunkát 15 – ötéves képzésben részt vett – hallgató írt nálam. A részleteket a *Diplomamunkák és szakdolgozatok* (7. Függelék) tartalmazza.
7. Vezetésemmel 11 díjnyertes TDK-s dolgozat szerzői közül három szerzőgárda jutott az OTDK-ra, kettő dolgozatot díjaztak, a harmadik tavasszal fog szerepelni. Egy dolgozat az Európai TDK Konferencián, egy másik egy nemzetközi rendezvényen (A XI. Fiatal Műszakiak Tudományos Ülésszaka, Kolozsvár, 2006. március 24–25.) szerepelt. A részleteket a *Díjnyertes tudományos diákköri dolgozatok* (8. Függelék) tartalmazza.
8. Tankönyveim és egyetemi jegyzeteim mellett – amelyeket bel- és külföldön több oktatási intézményben is használnak – jelentős mennyiségű elektronikus oktatási anyagot készítettem, ezek közül kiemelendők:
- A középiskola és a BSc képzés közötti átmenet segítésére szolgáló *Oxford-Typotex Matematikai Kislexikon* című kötet fordítása és szerkesztése:
<http://www.tankonyvtar.hu/main.php?objectID=5800982>.
 - A *Mathematica* programmal kapcsolatos oktatás eszközei és termékei:
<http://www.math.bme.hu/~jtoth/Mma/mma.html>.
 - A *Formális reakciókinetika* szeminárium anyagai:
<http://www.math.bme.hu/~jtoth/indexhu.html#frk>.
9. 1998-tól Széchenyi Professzori Ösztöndíjban, 2002-től pedig Széchenyi István Professzori Ösztöndíjban részesültem, 2008-ban megkaptam a *Typotex Év Embere 2008* díjat.
http://www.typotex.hu/index.php?page=hirek&news_type=CURI#karacsony2008_kepek

5. Közéleti tevékenység

1. Tagja és budapesti küldöttje vagyok 2007 és 2009 között a Bolyai János Matematikai Társulatnak, tagja az Amerikai Matematikai Társaságnak és a Society for Applied and Industrial Mathematicsnek, szavazati jogú tagja vagyok az MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottságának, korábbi tagságaim az önéletrajzomban szerepelnek.
2. Szerkesztő bizottsági tagja vagyok a most indult *International Journal of Technology, Modelling and Management*, valamint az *African Journal of Mathematics and Computer Science Research* című folyóiratoknak; több folyóiratnak lektorálok rendszeresen (leggyakrabban a *Journal of Mathematical Chemistry* számára). Könyvvajánlást írtam az Elseviernek.
3. Részt vettem néhány konferencia szervezésében, lásd a *Konferenciákat* (9. Függelék).
4. Bírálókat írok az OTKA számára, felkért hasonló bírálat írására Slovak Research and Development Agency is.
5. Részt vettem egyetemi doktori, PhD, kandidátusi és akadémiai doktori eljárásokban bírálóként és bizottsági tagként (nemcsak matematikusok esetében, hanem a legkülönbözőbb, matematikát igénylő szakterületeken: informatika, fizika, kémia, biológia), több alkalommal voltam opponens és bizottsági tag a P. & M. Curie Egyetemen.

6. Előadásjavaslatok

A 10. Függelék tartalmazza a javasolt *előadásokat*, az 1. Függelékben pedig táblázatos és szöveges önéletrajzom található.

Budapest, 2009. június 5.

(Tóth János)

1. Függelék: Életrajzok

Táblázatos (amerikai stílusú) önéletrajz

Személyi adatok

Név: dr. Tóth János

Születési hely, idő: Budapest, 1947. június 9.

Lakcím: Budapest, Nánási út 6/A, II. em. 4., 1031

Telefon: 463-2314 (munkahelyi) 242-0640 (otthoni)

Családi állapot: nős, 3 gyermek apja (Ágnes Veronika, Ádám, János Pál)

Képzettség

Eötvös Loránd Tudományegyetem: okleveles matematikus 1971. (Valószínűségszámítás és matematikai statisztika)

Tudományos fokozat

Magyar Tudományos Akadémia: a matematikai tudomány kandidátusa 11.436 (1986)

Eötvös Loránd Tudományegyetem: egyetemi doktor D-197/1987.

Nyelvismeret

angol: felsőfokú Sz. 003246/1990.

eszperantó: felsőfokú 553/1968.

német: középfokú Á 1557/1979.

orosz: középfokú 2999/1973.

Munkahelyek

Munkáltatók	Beosztás	
SOTE Orvosi Vegytani Intézet	tud. ösztöndíjas gyakornok	1971-73.
SOTE Számítástechnikai Csoport	tudományos munkatárs	1973-81.
MTA Számítástechn. és Aut. Kut. Int.	tudományos munkatárs	1981-86.
MTA Számítástechn. és Aut. Kut. Int.	tudományos főmunkatárs	1986-89.
MTA Műszaki Kémiai Kut. Int.	tudományos főmunkatárs	1989-90.
GATE Matematikai és Számtech. Int.	tudományos főmunkatárs	1990-91.
Department of Chemistry Princeton University, Princeton	visiting research fellow nyaranta	1991-94.
GATE Matem. és Számítástechn. Int.	tszkv. egyetemi docens	1991-99.
BME Mat. Int. Analízis Tanszék	egyetemi docens	1999-
INERIS, Verneuil-en-Halatte, France	visiting research fellow	2003 II. félév
ELTE TTK Reakciókinetikai Csoport	külső tag	2007-

Egyéb szakmai gyakorlat

Oktatási tevékenység: ELTE (1976-), SOTE (1971-1980)

Referálás: *Math. Rev.*, *Zbl. für Math.*, *Quantitative Structure Activity Relationships* (korábban)

Lektorálás: *J. Math. Chem.*, *Periodica Mathematica*, *ACH-Models in Chemistry*, *Chemical Reviews*, *IEE Systems Biology*, *J. Biol. Systems*, *Physica D*, *NDPLS*, *Physics Letters*, *PUMA*, *EJQTD*, *J. Phys.*, *Acta Applicanda Mathematica*, *Nonlinearity*, *Alk. Mat. Lapok* stb.

Minősítések: Opponálás, bizottsági tagság egyetemi doktori, kandidátusi, akadémiai doktori és PhD védésen, háromszor külföldön (Páris, UPMC Paris 6)

Szerkesztő bizottsági tag:

- *International Journal of Technology, Modelling and Management;*
- *African Journal of Mathematics and Computer Science Research*

Szervezeti, egyesületi tagságok

MTA Számítástechnikai és Rendszerelméleti Munkabizottság: 1981–1993.

MTA Vegyész-mérnöki Rendszertechnikai Albizottsága: 1986–1993.

MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság: 1990–

GATE Mezőgazdasági Gépészmérnöki Kari Tanács tagja: 1993–96.

American Mathematical Society

Bolyai János Matematikai Társulat: küldött (két ciklusban)

Magyar Haydn Társaság

Magyar Biokémikusok Egyesülete: (korábban)

New York Academy of Sciences: (korábban)

Kitüntetések, elismerések

Farkas Gyula-díj: 1981.

Az MTA VEAB díja (társszerzővel): 1984. (Ökológiai modellezés)

Az MTA VEAB díja (társszerzővel): 1985. (Reakciókinetika)

MTA SZTAKI Intézeti Díj: 1987.

MTA SZTAKI Intézeti Díj: 1989.

Széchenyi Professzori Ösztöndíj: 1998–2001.

Széchenyi István Ösztöndíj: 2002–2005.

Alkotói szabadság 2008/2009. I. félév

TYPOTEX Év Embere 2008.

Szöveges életrajz

1947. június 9.-én születtem Budapesten. Szüleim nyugdíjasok. Feleségem, Szórád Mária Margit, okleveles vegyész, nyugdíjas. Három gyermekem van, Ágnes Veronika tánckritikus, Ádám EU-fordító, János Pál számítástechnikus.

Az Eötvös József Gimnázium elvégzése után – 11 hónap katonai szolgálat közbeiktatásával – az ELTE Természettudományi Karának matematikus szakán tanultam, ahol 1971-ben szereztem diplomát valószínűségi számítás és matematikai statisztika ágazaton, *A biológiai tanulás matematikai modelljei* című dolgozattal, amelyet Csányi Vilmos és Arató Mátyás témavezetése mellett írtam. Első munkahelyemen, a SOTE Orvosi Vegytani Intézetében a fehérjeszintézis szabályozásával foglalkoztam diplomamunkám témájának folytatásán túl. Innen a SOTE Számítástechnikai Csoportjához kerültem, ahol alkalmazott statisztikai vizsgálatok mellett először sztochasztikus, később determinisztikus reakciókinetikát kezdtem tanulmányozni. Ebben az időszakban (1972-ben) készült el a reakciók szimulálására szolgáló általános program. 1980-ban a SZTAKI Prékopa András vezette Alkalmazott Matematikai Főosztályának Statisztika Osztályán kezdtem el dolgozni, ahol a Balaton vízminőségének modellezése volt a fő téma, de résztvettem egyéb nagyobb közös munkákban is. Itt készült el Érdi Péterrel közös angol nyelvű könyvünk, amely egyszerre jelent meg a Manchester University Pressnél és a Princeton University Pressnél. A rendszerváltás körül rövid ideig az MTA Műszaki Kémiai Kutató Intézetében dolgoztam, majd a Gödöllői Agrártudományi Egyetem Számítástechnika Tanszékének vezetője lettem 1999-ig. Itt kezdtem el a *Mathematica* program oktatását, ennek eredménye Szili Lászlóval közös tankönyvünk. Koltay Tiborral módszertani órákat tartottunk, amiből szintén (Csermely Péterrel és Gergely Jánossal közösen) tankönyv született. Ezután kerültem a BME Petz Dénes vezette Analízis Tanszékére, ahol fő oktatási feladataim: közönséges és parciális differenciálegyenletek és alkalmazásainak oktatása a Vegyész- és Biomérnöki Kar hallgatóinak, a *Mathematica* program oktatása matematikus és közgazdász hallgatóknak kötelező tárgyakon belül, és minden érdeklődőnek szabadon választható tárgyként. Az ELTE TTK-n 1976 óta oktatok matematikusokat, vegyészeket, programtervezőket stb. Ennek és a műegyetemi differenciálegyenlet-oktatásnak a terméke és eszköze a Simon L. Péterrel közös differenciálegyenlet-könyv. Hosszabb időt Princetonban és Franciaországban töltöttem, rövidebb külföldi tanulmányútjaim is ide vezettek a leggyakrabban. Az oktatásban igen fontosnak tartom a leendő alkalmazott matematikusok, és a matematikához jól értő nemmatematikus szakemberek képzését. Kutató munkámban igyekszem a legkülönbözőbb képzettségű és érdeklődésű (sőt nemzetiségű) kollégákkal együttműködni, összesen 65 társszerzőm van, számos országból. Különösen örülök annak, hogy a BME Matematikai Intézetéből is több kollégával dolgozom együtt.

2. Fűggelék: Reakciókinetikai modellek transzformációi (Tézisek)

Bevezetés

Alapkérdésünk: Hogyan lehet és érdemes a formális reakciókinetika determinisztikus és sztochasztikus modelljeit transzformálni, hogy ezzel hozzájáruljunk bizonyos, gyakorlati szempontból fontos és elméletileg érdekes feladatok megoldásához? Először a változók számának csökkentésével foglalkozunk, mégpedig az összevonás módszerét alkalmazva. Ezután rátérünk egy némileg fordított feladat tárgyalására: megmutatjuk, hogy hogyan lehet egy bruttó reakciót elemi lépésekre felbontani. A következőkben néhány egzotikusnak nevezett jelenséggel foglalkozunk, amilyen például az oszcilláció és a multistabilitás. Itt tárgyalunk egy olyan jelenséget is, amely a dolgozat fő vizsgálódási területén, a homogén reakciókinetikán kívül esik, ez a Turing-instabilitás, ami a reakciódiffúzió-rendszerekben végbemenő mintázatképződés egy lehetséges mechanizmusa.

Sztochasztikus kinetikai modellekkel kapcsolatban bemutatunk egy ötletet a változók számának csökkentésére.

Egy farmakokinetikai példán megmutatjuk, hogy a különböző szintű (biokémiai, élettani és pszichológiai) modelleket miként lehet egységes keretben összefogni.

Végül pedig arról szólunk, hogy a matematikai kutatás, az oktatás és az alkalmazások egyéb területein oly jól bevált *Mathematica* program hogyan segítheti a reakciókinetika feladatainak megoldását.

A matematikai állítások, illetve újonnan bevezetett definíciók minden esetben gyakorlati alkalmazásokhoz kapcsolódnak.

A rövid szakaszcímek csak utalnak a megfelelő tézis tartalmára, nem jelentik azt, hogy a tézis lefedné az adott tudományterületet.

A matematikai értelemben vett formális tételek mellett igen gyakran heurisztikus eljárások, közelítések, sejtések, problémák, algoritmusok, programok szerepelnek. Ennek az az oka, hogy a szereplő objektumok meglehetősen bonyolultak, a szereplő függvények általában nemlineárisak. A jelen tézisek gerincét 10 kiemelt publikáció alkotja, de számos esetben szükségesnek és hasznosnak tűnt további saját közleményekre (és természetesen másokéra) is hivatkoznom.

Determinisztikus kinetikai modellek

A (homogén) formális reakciókinetika determinisztikus modelljeit az általánosság különböző szintjein vizsgáljuk. A legáltalánosabb esetben autonóm egyenletekkel foglalkozunk, azaz ilyenkor

$$M \in \mathbb{N}; \mathbf{f} \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^M, \mathbb{R}^M); \mathbf{c}_0 \in \mathbb{R}^M,$$

és tekintjük a

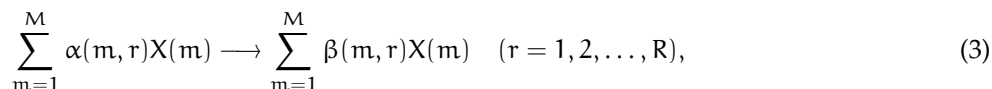
$$\dot{\mathbf{c}} = \mathbf{f} \circ \mathbf{c} \quad \mathbf{c}(0) = \mathbf{c}_0 \quad (1)$$

Cauchy-feladatot. Itt még az is kérdés lehet, hogy mikor van a teljes megoldás értelmezve az egész számegyenesen, azaz hogyan lehet kizárni a fölrobbanást [Póta, Nagy, Tóth, 2009, Csikja és Tóth, 2007]. Sokszor (például érzékenységvizsgálat esetén) érdekelhet bennünket a megoldások függése bizonyos paramétereiktől. Ehhez legyen $M, P \in \mathbb{N}; \mathbf{f} \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^{M \times P}, \mathbb{R}^M); \mathbf{c}_0 \in \mathbb{R}^M$, és tekintsük a

$$\dot{\mathbf{c}}(t, \mathbf{p}) = \mathbf{f}(\mathbf{c}(t, \mathbf{p}), \mathbf{p}) \quad \mathbf{c}(0, \mathbf{p}) = \mathbf{c}_0 \quad (2)$$

Cauchy-feladatot. Ezt néha abban a – éppen a kémiai és biológiai alkalmazások szempontjából fontos – speciális esetben vizsgáljuk, amikor a jobb oldal lineáris a paramétereikben [Kovács és Tóth, 2008].

A reakciókinetikai háttér sokkal nyilvánvalóbb a következő megfogalmazás esetén. Legyen $M, R \in \mathbb{N}; \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{N}_0^{M \times R}$, és tekintsük az alábbi **összetett kémiai reakciót**:



ahol $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha(m, r)), \boldsymbol{\beta} = (\beta(m, r))$ bizonyos természetes feltételeknek (lásd pl. [Deák és mtsai, 1992, 2.1 szakasz]) megfelelő mátrixok, elemeik a **sztochiometriai együtthatók**. Tegyük fel, hogy a fenti, r -edik **reakciólépéshez** tartozik a $w_r \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^M, \mathbb{R})$ **kinetika** – amelyre nézve szintén szokás bizonyos természetes megkövetéseket tenni [Volpert és Hugaajev, 1975, 12. fejezet] és [Szili és Tóth, 1997, 41–42. oldal]. Ezekkel az adatokkal a

(3) reakció által indukált kinetikai differenciálegyenletnek a

$$\dot{\mathbf{c}}_m(t) = f_m(\mathbf{c}(t)) := \sum_{r=1}^R (\beta(m, r) - \alpha(m, r)) w_r(\mathbf{c}(t)) \quad (m = 1, 2, \dots, M), \quad (4)$$

– röviden a $\dot{\mathbf{c}} = (\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}) \mathbf{w} \circ \mathbf{c}$ – egyenletet szokás nevezni, illetve az erre vonatkozó Cauchy-feladatot szokás vizsgálni. Különösen fontos speciális eset a **tömeghatás típusú kinetika** esete, azaz az az eset, amelynél

$$w_r(\bar{\mathbf{c}}) = k_r \prod_{p=1}^M \bar{c}_p^{\alpha(p,r)} = k_r \bar{\mathbf{c}}^{\alpha(\cdot,r)} \quad (\mathbf{w}(\bar{\mathbf{c}}) = \text{diag}(\mathbf{k}) \bar{\mathbf{c}}^\alpha = \mathbf{k} \otimes \bar{\mathbf{c}}^\alpha) \quad (5)$$

valamilyen k_r pozitív számokkal, $r = 1, 2, \dots, R$. ($A \otimes$ műveleti jel a koordinátánkénti szorzást jelöli.)

Polinomiális és kinetikai differenciálegyenletek

Szibirszkij eredményeinek fölhasználásával új bizonyítást adtunk arra a tényre, hogy a Lorenz-egyenlet ortogonális transzformációval nem transzformálható kinetikáivá [Halmschlager és mtsai, 2004]. Megmutattuk, hogy az ismert állításon túlmenően, amely szerint bármely polinomiális egyenlet másodfokú homogén jobb-oldallal bíró egyenletté transzformálható, több is igaz.

1. tétel. Ha a kiindulási egyenlet kinetikai volt, akkor a transzformált egyenlet kinetikainak választható.

Ennek az ígéretes iránynak, amely a differenciálegyenletek vizsgálatát a nemasszociatív algebrák elméletével kapcsolná össze, súlyos hiányossága, hogy az egyszerűbb alakú egyenletekben nagyon sok változó van, és nem tudunk hasznos módszereket megadni arra, hogy mit használjunk a transzformáció nyilván nem létező inverze helyett.

Determinisztikus kinetikai modellek összevonása

A reakciókinetika modelljei a gyakorlati alkalmazások (égés, anyagcsere, stb.) esetén állhatnak néhány tucat, vagy esetenként akár néhány ezer egyenletből. Ilyenkor az eredeti modell helyett törekedhetünk egy olyannak a vizsgálatára, amelyben kevesebb változó van, hogy számítástechnikai szempontból könnyebben kezelhető modellt kapjunk, amely ráadásul a folyamat lényegét jobban kiemeli. A változók számának csökkentésére sok módszer ismert, a múlt század hatvanas éve óta egyre jobban kidolgozott egyik ilyen eljárás az Aris, Wei és Kuo által a XX. század hatvanas éveiben kezdeményezett lineáris és nemlineáris **összevonás**.

Az összevonással kapcsolatban a következő feladatokat fogalmaztuk meg:

- az összevonás (lineáris és nemlineáris, közelítő és pontos) definíciója,
- szükséges és elégséges feltételek az összevonhatóságra,
- az összevonó függvény konstrukciója pontosan, közelítőleg, mellékfeltételek figyelembevételével,
- az összevonás hatásai a megoldások kvalitatív tulajdonságaira.

A **lineáris összevonást** az (1) egyenlet példáján mutatjuk be. Választunk egy $\hat{M} \leq M$ természetes számot, és azt kérdezzük, hogy van-e olyan $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{\hat{M} \times M}$ mátrix, amellyel a $\hat{\mathbf{c}} := \mathbf{M} \mathbf{c}$ függvényre autonóm differenciálegyenlet áll fenn. (A lineáris összevonással egyúttal azt is modellezzük, hogy sok esetben – például spektroszkópiai módszerekkel – bizonyos anyagok koncentrációjának csak összegét vagy lineáris kombinációját tudjuk mérni, külön-külön az egyes koncentrációkat nem.)

A (pontos) lineáris összevonást Li és Rabitz korábban meglehetősen részletesen tárgyalta, a kvalitatív közvetkezményekre való kitekintés nélkül; alább majd ez utóbbi szempontra fogunk alaposabban kitérni. A lineáris összevonás kézenfekvő általánosítása a **nemlineáris** (helyesebben: nem feltétlenül lineáris) **összevonás**, amelynél olyan $\mathbf{h} \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^M, \mathbb{R}^{\hat{M}})$ függvényt keresünk, amellyel a $\hat{\mathbf{c}} := \mathbf{h} \circ \mathbf{c}$ függvényre autonóm differenciálegyenlet áll fenn valamilyen $\hat{\mathbf{f}}$ jobb oldallal. Ilyen \mathbf{h} függvény létezésére több szükséges és elégséges feltételt adtunk meg [Li és mtsai., 1994a]. Az alábbiakban az egyszerűség kedvéért föltesszük, hogy a szereplő függvények elegendően sokszor differenciálhatóak, az egész téren értelmezve vannak; $\mathbf{f}(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$, $\mathbf{h}(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$, a \mathbf{h} függvény nem degenerált, azaz koordinátafüggvényei függetlenek, továbbá a szereplő kezdetiérték-problémák teljes megoldásai az egész számegyenesen értelmezve vannak (ami biztosan teljesül például tömegmegőrző reakciók esetén).

Az összevonhatóság feltételei.

2. tétel. ([Tóth és mtsai., 1997]) Az (1) egyenletet a $\mathbf{h} \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^M, \mathbb{R}^{\hat{M}})$ függvénnyel a $\hat{\mathbf{c}} = \hat{\mathbf{f}} \circ \hat{\mathbf{c}}$ egyenletté pontosan akkor lehet összevonni, ha

$$\mathbf{h}'\mathbf{f} = \hat{\mathbf{f}} \circ \mathbf{h} \quad (6)$$

teljesül. Fennáll továbbá az

$$\hat{\mathbf{f}} = (\mathbf{h}'\mathbf{f}) \circ \bar{\mathbf{h}} \quad (7)$$

előállítás, ahol $\bar{\mathbf{h}}$ a \mathbf{h} függvény bármelyik általánosított inverze (azaz $\mathbf{h} \circ \bar{\mathbf{h}} = \text{Id}_{\mathbb{R}^{\hat{M}}}$).

Megadható olyan feltétel is, amelyben az összevont egyenlet jobb oldala nem szerepel.

3. tétel. ([Tóth és mtsai., 1997]) Az (1) egyenletet a $\mathbf{h} \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^M, \mathbb{R}^{\hat{M}})$ függvénnyel $\hat{\mathbf{c}} = \hat{\mathbf{f}} \circ \hat{\mathbf{c}}$ alakú egyenletté pontosan akkor lehet összevonni, ha

$$\mathbf{h}'\mathbf{f} = \mathbf{h}' \circ \bar{\mathbf{h}} \circ \mathbf{h} \cdot \mathbf{f} \circ \bar{\mathbf{h}} \circ \mathbf{h} \quad (8)$$

teljesül.

Megemlítünk egy szükséges feltételt is.

4. tétel. ([Tóth és mtsai., 1997]) Ha az (1) egyenletet a $\mathbf{h} \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^M, \mathbb{R}^{\hat{M}})$ függvénnyel $\hat{\mathbf{c}} = \hat{\mathbf{f}} \circ \hat{\mathbf{c}}$ alakú egyenletté pontosan össze lehet vonni, akkor a $\mathbf{h}^{-1}\{\mathbf{0}\} := \{\bar{\mathbf{c}} \in \mathbb{R}^M; \mathbf{h}(\bar{\mathbf{c}}) = \mathbf{0}\}$ halmaz az (1) egyenlet invariáns halmaza.

Most olyan feltétel következik, amely nem tartalmazza \mathbf{h} általánosított inverzét sem.

5. tétel. ([Tóth és mtsai., 1997]) Az (1) egyenletet a $\mathbf{h} \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^M, \mathbb{R}^{\hat{M}})$ függvénnyel $\hat{\mathbf{c}} = \hat{\mathbf{f}} \circ \hat{\mathbf{c}}$ alakú egyenletté pontosan akkor lehet összevonni, ha létezik olyan $\mathbf{X} : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^{M \times L}$ mátrixértékű függvény ($L \geq M - \hat{M}$), amelynek értéke minden pontban $M - \hat{M}$ rangú, és amellyel

$$\mathbf{h}'(\bar{\mathbf{c}})\mathbf{X}(\bar{\mathbf{c}}) = \mathbf{0}, \quad (\mathbf{h}'\mathbf{f})'(\bar{\mathbf{c}})\mathbf{X}(\bar{\mathbf{c}}) = \mathbf{0} \quad (9)$$

teljesül.

A pontos nemlineáris összevonó függvények meghatározásához ezek után elegendő meghatározni az (1) egyenlet invariáns halmazait definiáló \mathbf{h} függvényeket, majd ezek közül kiválogatni azokat, amelyek teljesítik a (6), (8), (9) szükséges és elégséges feltételek valamelyikét.

Pontos nemlineáris összevonó függvény előállítására használható módszerek. Az alábbiakban az összevonó függvények konstrukciójára szolgáló módszereket ismertetünk.

Pontos nemlineáris összevonás az összevonó függvény előre megadott részével. Az alábbiakból kiderül, hogy a (9) feltétel jól használható a címben kitűzött feladat megoldására. Legyen $K < M$, és tegyük fel, hogy adott a $\mathbf{h}_1 : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^K$ függvény, amit ki akarunk egészíteni egy \mathbf{h} összevonó függvénnyé. Legyen $\mathbf{X}_1 : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^{M \times (M-K)}$ olyan függvény, amelyre $\mathbf{h}'_1(\bar{\mathbf{c}})\mathbf{X}_1(\bar{\mathbf{c}}) = \mathbf{0}$ teljesül. Ha még az is fennáll, hogy $(\mathbf{h}_1\mathbf{f})'(\bar{\mathbf{c}})\mathbf{X}_1(\bar{\mathbf{c}}) = \mathbf{0}$, akkor maga \mathbf{h}_1 alkalmas összevonó függvény. Ha nem, akkor álljon \mathbf{h}_2 a $\mathbf{h}'_1\mathbf{f}$ függvény olyan koordinátafüggvényeiből, amelyek függetlenek \mathbf{h}_1 koordinátafüggvényeitől. Legyen az új transzformáció $\mathbf{h} := \begin{bmatrix} \mathbf{h}_1 \\ \mathbf{h}_2 \end{bmatrix}$, és konstruáljunk egy olyan \mathbf{X}_2 mátrixot, amellyel $\mathbf{h}'(\bar{\mathbf{c}})\mathbf{X}_2(\bar{\mathbf{c}}) = \mathbf{0}$ teljesül. Ha még az is fennáll, hogy $(\mathbf{h}'\mathbf{f})'(\bar{\mathbf{c}})\mathbf{X}_2(\bar{\mathbf{c}}) = \mathbf{0}$, akkor \mathbf{h} már alkalmas összevonó függvény, ha nem, akkor álljon \mathbf{h}_3 a $\mathbf{h}'_2\mathbf{f}$ függvény olyan koordinátafüggvényeiből, amelyek függetlenek \mathbf{h}_1 és \mathbf{h}_2 koordinátafüggvényeitől. Legyen az új transzformáció $\mathbf{h} := \begin{bmatrix} \mathbf{h}_1 \\ \mathbf{h}_2 \\ \mathbf{h}_3 \end{bmatrix}$, és folytassuk az eljárást mindaddig, amíg olyan \mathbf{h} függvényt nem kapunk, amely teljesíti az (9) szükséges és elégséges feltételt. Ráadásul az így kapott transzformáció a \mathbf{h}_1 függvényt tartalmazók közül olyan, amely a lehető legkevesebb számú változóvá transzformálja az eredetieket.

Kapcsolat az összevonás és az első integrálok között. Az alábbiakból kiderül, hogy minden \hat{M} -dimenziós pontos összevonó függvény az eredeti rendszer \hat{M} számú független általánosított sajátfüggvényének \hat{M} számú függvényeként áll elő. Más szavakkal ez azt jelenti, hogy a pontos összevonó függvények előállításának feladata azonos az általánosított sajátfüggvények előállításának feladatával, ez utóbbi viszont globális első integrálok meghatározását igényli.

1. definíció. Az (1) egyenlet **általánosított sajátfüggvényének** nevezzük a $\psi : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}$ függvényt, ha létezik olyan $\Omega : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ függvény, amellyel $\psi'f = \Omega \circ \psi$.

Az elnevezés érthetőbbé válik, ha az $A\psi := \psi'f$ összefüggéssel bevezetjük az A lineáris parciális differenciáloperátort (amellyel nyilván $A \text{id}_{\mathbb{R}^M} = f$). Ha Ω nem a nulla függvény, akkor a ψ függvényhez található olyan $\tilde{\Psi}$ függvény (tudniillik $\frac{1}{\Omega}$ bármelyik primitív függvénye), amellyel

$$A\tilde{\Psi} \circ \psi = 1 \quad (10)$$

teljesül. Ekkor a $\tilde{\Psi}$ függvényt az A operátor (vagy az (1) egyenlet) **normált általánosított sajátfüggvényének** hívjuk. Az ilyeneket előállítandó a $A\tilde{\Psi} = 1$ kvázilineáris parciális differenciálegyenlet M számú független megoldását megkapjuk, ha meghatározzuk az

$$A\tilde{\Psi} = 1 \quad A\Phi_m = 0 \quad (m = 1, 2, \dots, M-1) \quad (11)$$

parciális differenciálegyenletrendszer olyan nemtriviális megoldását, ahol a Φ_m függvények függetlenek.

6. tétel. ([Li és mtsai., 1994a])

1. Az (1) egyenlet minden $h : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^{\hat{M}}$ összevonó függvénye előáll a fenti A operátor \hat{M} számú független általánosított normált sajátfüggvénye \hat{M} számú függvényeként.
2. A fenti A operátor bármely \hat{M} számú független általánosított normált sajátfüggvényének \hat{M} számú függvénye az (1) egyenlet összevonó függvényét definiálja.

Ha az (1) egyenlet a $h \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^M, \mathbb{R}^{\hat{M}})$ függvénnyel a $\hat{c} = \hat{f} \circ \hat{c}$ alakú egyenletté vonható össze, akkor nyilván $Ah = \hat{f} \circ h$. Ezt az összefüggést fogjuk h meghatározásához felhasználni: az általánosított sajátfüggvények ugyanis ezek szerint skaláris összevonó függvényeknek tekinthetők, a megfelelő Ω függvény pedig az összevont jobb oldalt adja. Az igazi nehézség pedig abban áll, hogy M számú független normált sajátfüggvény ismerete egyenértékű egy normált sajátfüggvény és $M-1$ számú független globális első integrál ismeretével, s az utóbbiak meghatározására általános módszer nem ismeretes. Kereshetjük azonban az általánosított normált sajátfüggvényeket (vagyis az összevonó függvényeket) speciális függvényosztályokon belül. Ha a lineáris függvények osztályát választjuk, akkor éppen visszakapjuk a lineáris összevonásra vonatkozó alapvető összefüggést, illetve az egyenletet is lineárisnak véve megkapjuk a lineáris egyenletek lineáris összevonására vonatkozó állítást.

Néhány általánosított normált sajátfüggvény meghatározása. Egy ötlet: megtehetjük, hogy lineáris összevonással kapunk egy kevesebb változós rendszert, majd ahhoz keresünk általánosított sajátfüggvényeket.

Nemlineáris szuperpozíció.

2. definíció. Legyen $M \in \mathbb{N}; \Omega \subset \mathbb{R}^{M+1}$ tartomány, $f \in \mathcal{C}^1(\Omega, \mathbb{R}^M)$. Ha az

$$y'(x) = f(x, y(x)) \quad (12)$$

egyenlet általános megoldása $x \mapsto F(y_1(x), y_2(x), \dots, y_L(x), C)$ alakú, ahol y_1, y_2, \dots, y_L a (12) egyenlet (partikuláris) megoldásai, $C \in \mathbb{R}^M$ pedig paraméterek, akkor azt mondjuk, hogy a (12) egyenlet (nemlineáris, nem feltétlenül lineáris) **szuperpozíciós elvnek** tesz eleget, vagy: megoldásai szuperpozícióval állíthatók elő.

(Nemlineáris szuperpozícióra példa a Bernoulli- és a Riccati-egyenlet megoldásainak előállítása az osztoviszony, illetve a kettősviszony állandósága alapján. Megjegyzendő, hogy a skalárértékű függvényekre vonatkozó egyenletek közül a Riccati-egyenlet a legbonyolultabb, amelyre nemlineáris szuperpozíciós elv áll fenn.)

7. tétel. (Stephani) Az (12) egyenlet megoldásai pontosan akkor állnak elő szuperpozícióval, ha létezik olyan v^1, v^2, \dots, v^R skalárértékű, és olyan $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_R$ vektorértékű függvény ($R \leq ML$), amelyekkel

$$f(p, q) = \sum_{r=1}^R v^r(p) \eta_r(q) \quad ((p, q) \in \Omega),$$

továbbá amelyekkel az $X_r := \sum_{a=1}^M \eta_r^a \partial_a$ operátorok R -dimenziós Lie-algebrát alkotnak.

1. példa. Vizsgáljuk meg azt az egyenletet, amelynek jobb oldala egyváltozós polinom:

$$y'(x) = \sum_{r=1}^R k_r y(x)^{\alpha(r)}, \quad (13)$$

ahol $R \in \mathbb{N}; k_r \in \mathbb{R}^+; \alpha(r) \in \mathbb{N}_0$. Stephani idézett tétele szerint ennek a megoldásai pontosan akkor állnak elő szuperpozícióval, ha az $X_r := y^{\alpha(r)} D$ operátorok R dimenziós Lie-algebrát alkotnak, ez pedig pontosan akkor teljesül, ha a jobb oldal másodfokú polinom. Itt az a tény, hogy az egyenlet kinetikai-e vagy sem, nem játszott szerepet.

Amikor a megoldások szuperpozícióval állnak elő, konstruálható egy, az eredeti (12) egyenlettel egyenértékű lineáris egyenlet, amelynek azután általánosított sajátfüggvényei meghatározhatók, és amiből visszatranszformálással kaphatjuk az eredeti egyenlet általánosított sajátfüggvényeit.

Lineáris rész.

8. tétel. Legyen $f(\bar{c}) = A\bar{c} + g(\bar{c})$, ahol a g függvényre fennáll, hogy: $g(0) = 0 \quad g'(0) = 0$. Akkor (1) pontos összevonásai a $\bar{c} = A\bar{c}$ lineáris egyenletnek és a $\bar{c} = g \circ c$ egyenletnek is pontos összevonásai.

Így tehát elegendő meghatároznunk a lineáris egyenlet pontos összevonásait, majd megállapítanunk, hogy azok pontos összevonásai-e a nemlineáris résszel fölírt egyenletnek is.

Pontos összevonás és sajátfüggvények. A fentiek alapján tehát ha ismert M számú független általánosított sajátfüggvény, akkor az A operátor diagonális alakra transzformálható, és minden pontos összevonó függvény az általánosított sajátfüggvények függvényeként adódik. Ha ismerünk M számú általánosított normált sajátfüggvényt, akkor az eredeti egyenlet diagonális alakra transzformálható.

Ha az általánosított sajátfüggvények egyesével nem szeparálhatók, akkor még szerepelhetnek összevonásban. Ilyenkor az operátor Jordan-alakra hozható, ami a következőket jelenti (és ami elvezethet néhány összevont alakhoz).

3. definíció. Ha ψ nem a nulla függvény, $(A\psi)(\bar{c}) = \lambda(\bar{c})\psi(\bar{c})$, és

$$(A\psi)(\bar{c})\lambda(\bar{c}) = 0, \quad (14)$$

akkor ψ az A operátor **sajátfüggvénye**, λ pedig az A operátor **sajátértéke**. A (14) egyenletnek (külön) eleget tevő λ függvény neve: **invariáns**.

9. tétel. Az $A\psi = \psi'f$ operátorhoz mindig léteznek sajátértékek és M számú független sajátfüggvény.

4. definíció. Ha a $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_l$ sajátértékekhez létezik φ_j^i ($j = 1, 2, \dots, k_i; i = 1, 2, \dots, l; \sum_{i=1}^l k_i = M$) sajátfüggvényrendszer úgy, hogy

$$\begin{aligned} A\varphi_1^i &= \lambda_i \varphi_1^i \\ A\varphi_2^i &= \lambda_i \varphi_2^i + \varphi_1^i \\ &\dots \\ A\varphi_{k_i}^i &= \lambda_i \varphi_{k_i}^i + \varphi_{k_i-1}^i, \end{aligned}$$

akkor azt mondjuk, hogy az A operátor a φ_j^i koordinátákban **Jordan-alakú**.

10. tétel. A fenti A operátorhoz léteznek olyan φ_j^i koordináták, amelyekben A **Jordan-alakú**.

Közelítő nemlineáris összevonó függvény előállítására használható módszerek. Amikor az összevonó függvény létezésére vonatkozó feltétel nem teljesül, akkor még mindig kitűzhető az a cél, hogy közelítőleg vonjunk össze egy modellt. Ilyenkor megkövetelhető az is, hogy bizonyos anyagfajták mennyisége változatlanul maradjon: ezek azok az anyagfajták, amelyek közvetlenül mérhetőek.

Szinguláris perturbáció. Speciális alakú egyenletek esetére közelítő összevonó függvényeket konstruálhatunk a szinguláris perturbáció módszerével [Li és mtsai., 1993]. Tegyük fel, hogy az egyenletünk a következő alakú:

$$\dot{\mathbf{c}} = \mathbf{a} \circ \mathbf{c} + (\mathbf{A} \circ \mathbf{c})\mathbf{z} \quad \varepsilon \dot{\mathbf{z}} = \mathbf{b} \circ \mathbf{c} + (\mathbf{B} \circ \mathbf{c})\mathbf{z}, \quad (15)$$

ahol $\mathbf{K} \in \mathbb{N}$, $\mathcal{R}_c \subset \mathbb{R}^M$, $\mathcal{R}_z \subset \mathbb{R}^K$, az $\varepsilon \in (\mathbb{R}^+)^{K \times K}$ diagonális mátrix elemei pedig a kicsi pozitív ε_k számok. Tegyük fel, hogy a $\mathbf{B}(\bar{\mathbf{c}})$ mátrix sajátértékei minden $\bar{\mathbf{c}} \in \mathbb{R}^M$ mellett negatívak, és hogy inverzét szimbolikusan ki tudjuk számolni. Olyan összevont rendszert keresünk, amely csak az \mathbf{c} függvényt tartalmazza. Vezessünk be egy φ tisztán gyors változót, leválasztva \mathbf{z} lassú részét: $\boldsymbol{\varphi} := \mathbf{z} + \mathbf{h} \circ \mathbf{c}$. Feltéve ezek után, hogy a \mathbf{h} függvény megoldása a $\varepsilon \mathbf{h}'(\mathbf{a} - \mathbf{A}\mathbf{h}) - \mathbf{B}\mathbf{h} + \mathbf{b} = \mathbf{0}$ egyenletnek, rekurzióval viszonylag könnyen meghatározhatók $\mathbf{h}(\bar{\mathbf{c}}) = \sum_{i=0}^{+\infty} \varepsilon^i \mathbf{h}_i(\bar{\mathbf{c}})$ ε szerinti hatványsorának tagjai:

$$\begin{aligned} \mathbf{h}_0 &= \mathbf{B}^{-1} \mathbf{b} \\ \mathbf{h}_i &= \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{h}_{i-1} \mathbf{a} - \sum_{j=0}^{i-1} \mathbf{h}_j' \mathbf{A} \mathbf{h}_{i-1-j}) \quad (i = 1, 2, \dots). \end{aligned} \quad (16)$$

Ezek után a $\boldsymbol{\varphi}$ függvényre vonatkozó $\varepsilon \dot{\boldsymbol{\varphi}} = (\mathbf{B} + \varepsilon \mathbf{h}' \mathbf{A}) \boldsymbol{\varphi}$ egyenletet a szinguláris perturbáció módszerével megoldva, a $\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{\tau}, \varepsilon) = \sum_{i=0}^{+\infty} \varepsilon^i \boldsymbol{\varphi}_i(\boldsymbol{\tau})$ sorban szereplő $\boldsymbol{\varphi}_i$ függvényekre kapjuk, hogy

$$\boldsymbol{\varphi}_i(\boldsymbol{\tau}) = \exp(\varepsilon^{-1} \mathbf{B}(\mathbf{c}(0)) \boldsymbol{\tau}) \mathbf{h}_i(\mathbf{c}(0)) + \int_0^{\boldsymbol{\tau}} \exp(\varepsilon^{-1} \mathbf{B}(\mathbf{c}(0))(t - s)) \varepsilon^{-1} \boldsymbol{\alpha}_{i-1}(s, \varepsilon) ds$$

ahol $\boldsymbol{\tau} := \begin{bmatrix} t/\varepsilon_1 \\ \vdots \\ t/\varepsilon_K \end{bmatrix}$ és $\boldsymbol{\alpha}_{-1}(\boldsymbol{\tau}) = \mathbf{0}$. Az eredményeket visszaírva az összevonandó (15) rendszerbe a következő összevont rendszert adódik:

$$\dot{\mathbf{c}}(t) = \mathbf{a}(\mathbf{c}(t)) - \mathbf{A}(\mathbf{c}(t))\mathbf{h}(\mathbf{c}(t)) + \mathbf{A}(\mathbf{c}(t))\boldsymbol{\varphi}(t, \varepsilon).$$

Bogajevszkij és Povzner módszere. [Li és mtsai., 1994b] és [Tomlin és mtsai., 1994] alapján közelítő nemlineáris összevonó függvényt konstruálhatunk kiegészítő feltételekkel és azok nélkül. A módszer a szinguláris perturbáció Bogajevszkij–Povzner-féle általánosítását használja. A sajátfüggvényeket vagy az általánosított sajátfüggvényeket használva bázisként az \mathbf{A} operátor valamelyik kanonikus alakra hozható. A kanonikus alakból adódnak összevont rendszerek. Ha tehát az \mathbf{A} operátort kanonikus („szép”) alakra transzformáljuk, akkor összevont rendszereket kaphatunk anélkül, hogy meg kellene határoznunk az összevonó függvény általánosított inverzét. Arra általános módszer nem ismeretes, hogy hogyan kapható meg egy operátor kanonikus alakja, de közelítő kanonikus alakok létrehozására Bogajevszkij és Povzner adott meg eljárást. A későbbiekben ezt fogjuk alkalmazni.

Az alábbiakban először is definiáljuk operátorok néhány kanonikus alakját.

5. definíció. Tegyük fel, hogy az \mathbf{A} operátorhoz létezik olyan bázis, amely a φ_i ($i = 1, 2, \dots, k$) sajátfüggvényekből és az ω_j ($j = 1, 2, \dots, p$) invariánsokból áll, ahol a φ_i sajátfüggvény $\bar{\lambda}_i$ sajátfüggvénye nem azonosan nulla, és előáll $\bar{\lambda}_i = \lambda_i \circ \omega$ alakban. Ebben a bázisban $\mathbf{A} = \text{diag}(\lambda_i \circ \omega) [\partial_{\varphi_i}]$, amire úgy utalunk, hogy az \mathbf{A} operátor **diagonális** alakú.

6. definíció. Tegyük fel, hogy az \mathbf{A} operátorhoz léteznek nem azonosan nulla $\bar{\lambda}_i$ ($i = 1, 2, \dots, l$) sajátfüggvények, amelyek előállnak $\bar{\lambda}_i = \lambda_i \circ \omega$ alakban, és minden λ_i esetére létezik k_i számú φ_j^i ($j = 1, 2, \dots, k_i$)

függvény, hogy

$$\begin{aligned} A\varphi_1^i &= \lambda_i \varphi_1^i \\ A\varphi_2^i &= \lambda_i \varphi_2^i + \varphi_1^i \\ &\dots \\ A\varphi_{k_i}^i &= \lambda_i \varphi_{k_i}^i + \varphi_{k_i-1}^i \end{aligned}$$

vagyis úgynevezett **Jordan-bázis**. Ebben a bázisban $A = \langle \mathcal{J}\varphi, \partial_\varphi \rangle$, ahol \mathcal{J} a sajátértékekhez tartozó, Jordan-blokkokból álló mátrix. Ekkor azt mondjuk, hogy az operátor **Jordan-alakú**.

A diagonális alak nyilván speciális esete a Jordan-alaknak.

7. definíció. Tegyük fel, hogy létezik olyan bázis, amelyik az $x_1^1, x_2^1, \dots, x_{k_1}^1, x_1^2, \dots, x_{k_l}^l$ függvényekből és az $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_m$ invariánsokból áll ($\sum_{i=1}^l k_i + m = M$; $m = 0$ nincs kizárva). Ebben a bázisban az A operátor **blokkdiagonális alakú**: $A = \sum_{i=1}^l \sum_{j=1}^{k_i} f_j^i(x^i) \frac{\partial}{\partial x_j^i}$.

Ez az alak $l = 1$ választással nyilván minden operátorra teljesül; akkor használjuk, ha $l > 1$.

8. definíció. Ha van olyan bázis, amely a z_1, z_2, \dots, z_k függvényekből és az $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_m$ invariánsokból áll ($k+m=M$) úgy, hogy $A = \langle \mathbf{Dz}, \partial_z \rangle$, ahol a \mathbf{D} $k \times k$ típusú mátrix elemei A invariánsai, akkor A **kvázilineáris alakú**.

Ezek után állítsuk elő az A operátort

$$A = A_0 + \varepsilon A_1 + \varepsilon^2 A_2 + \dots$$

alakban, ahol A_0 kanonikus alakú (ε nem feltétlenül kicsi). Ezek után keressünk egy olyan

$$S = \varepsilon S_1 + \varepsilon^2 S_2 + \dots$$

operátort, amellyel

$$M := e^{-S} A e^S$$

blokkdiagonális alakú, azonos blokkokkal, mint A_0 Jordan-blokkjai. Nyilván

$$A = e^S M e^{-S}$$

$$e^S = I + S + \frac{1}{2!} S^2 + \dots = I + \varepsilon S_1 + \varepsilon^2 (S_2 + \frac{1}{2!} S_1^2) + \dots$$

$$e^{-S} = I - S + \frac{1}{2!} S^2 + \dots = I - \varepsilon S_1 - \varepsilon^2 (S_2 - \frac{1}{2!} S_1^2) + \dots,$$

továbbá

$$M = M_0 + \varepsilon M_1 + \varepsilon^2 M_2 + \dots,$$

ahol

$$M_0 = A_0$$

$$M_1 = [A_0, S_1] + A_1$$

$$M_2 = [A_0, S_2] + A_2 + [A_1, S_1] + \frac{1}{2} [[A_0, S_1], S_1] + \dots,$$

továbbá $[X, Y] := XY - YX$ az X és Y operátor **kommutátora**. Ha tehát alkalmasan választjuk meg az S_i operátorokat, akkor M és A_0 kanonikus alakja hasonló lesz.

A fenti eljárást alkalmaztuk az irreverzibilis Michaelis–Menten-modellre, a számszerű adatokat speciálisan a benzoil-L-arginin etilészter tripszin katalizálta hidrolízisének esetéből vettük. Ez **mellékfeltételek nélküli** összevonást jelentett.

Kiterjesztettük a módszert arra az esetre is, amikor bizonyos anyagok mennyiségét nem akarjuk összevonni, vagyis amikor mellékfeltételekkel akarunk összevonni egy rendszert. Ezt az eljárást egy égési folyamat (hidrogén nemizoterm égése zárt edényben) egyszerűsítésére használtuk.

Az összevonással kapcsolatos rész zárásul megemlítjük, hogy igen sok nyílt problémát is megfogalmaztunk, ezek egyikét Farkas Gyula [Farkas Gy., 1999] oldotta meg. Végül pedig utalunk Farkas Gyula [Farkas Gy., 1998a, Farkas Gy., 1998b] és Horváth Zsófia [Horváth Zs., 2009] lokális és globális megfigyelhetőségre és vezérelhetőségre vonatkozó eredményeire, és megemlítjük az összevonás alkalmazását egy konkrét farmakokinetikai modell esetére [Brochot és mtsai, 2005].

Az összevonás hatása a megoldások kvalitatív tulajdonságaira. Most megvizsgáljuk, milyen hatással van az összevonás a kvalitatív tulajdonságokra.

Alapvető fontosságú a következő lineáris algebrai állítás.

1. lemma. Legyen $M, \hat{M} \in \mathbb{N}; M \geq \hat{M}$, és legyen $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{\hat{M} \times \hat{M}}$, $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{M \times M}$, és tegyük fel, hogy az $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{M \times M}$ mátrix teljes rangú. Ha $\mathbf{AM} = \mathbf{MB}$, akkor az \mathbf{A} mátrix minden sajátértéke sajátértéke egyúttal a \mathbf{B} mátrixnak is.

(Kérdés: igaz-e az állítás alkalmas változata operátorokra is?) Néhány kézenfekvő kijelentés következik [Tóth és mtsai., 1997] alapján.

11. tétel. Ha \mathbf{f} teljesíti a Lipschitz-feltételt és \mathbf{h} nemdegenerált [Tóth és mtsai., 1997, 1534. oldal] összevonó függvény, akkor a (7) képlettel értelmezett jobb oldal is teljesíti a Lipschitz-feltételt.

12. tétel. Polinomiális jobb oldal esetén lineáris összevonás nem növeli a jobb oldal fokszámát.

13. tétel. (Pozitív) invariáns halmazok képe összevonásnál pozitív invariáns halmaz, stacionárius pont képe stacionárius pont, periodikus pálya képe periodikus pálya.

Ellenpéldák mutatják, hogy azért a kép nem annyira rózsás: Az $X + Y \rightarrow 2Y$, $Y + Z \rightarrow 2Z$, $Z + X \rightarrow 2X$ **Ivanova-reakció**ból az anyagfajták koncentrációjának összeadásával konstans megoldásokkal bíró egyenletet kapunk, és a $X \rightarrow 2X$, $Y \rightarrow X + 2Y$, $X \rightarrow X + 2Z$, $Z \rightarrow Y + Z$ reakció indukált kinetikai differenciálegyenlete ugyan koordinátánként monoton megoldásokkal bír, mégis összevonható a $h(p, q, r) := (p - q, p - r)$ függvénnyel a harmonikus oszcillátor (nemkinetikai!) egyenletévé, amelyiknek minden megoldása periodikus.

A 1. lemma egyszerű következménye, hogy stacionárius pont összevonásával kapott stacionárius pontban a Jacobi-mátrix összes sajátértéke az eredeti Jacobi-mátrix sajátértékei közül kerül ki. (Lineáris összevonás esetén az állítás nemstacionárius pontokra is igaz, nemlineáris összevonásnál már nem.) Így tehát:

14. tétel. Nyelő és forrás képe nyelő és forrás. Ha az eredeti rendszer stacionárius pontja valamely paraméter függvényében mindig hiperbolikus, akkor az összevont rendszerben nem léphet föl Hopf-bifurkáció. Ha az összevont rendszerben valamely paraméter változásánál Hopf-bifurkáció lép fel, akkor a megfelelő paramétereknél az eredetiben is ugyanez a helyzet.

Ellenpélda mutatja, hogy aszimptotikusan stabilis stacionárius pont összevonható instabilissá, sőt felrobbanó rendszert is kaphatunk összevonással.

A legfontosabb állítások azok, amelyek az összevont rendszer tulajdonságaiból engednek következtetni az eredeti tulajdonságaira, hiszen tipikusan a kisebb rendszert szeretnénk vizsgálni, de a nagyobb rendszer az igazi modell. Egy ilyen eredmény:

15. tétel. Ha az összevont rendszerben egy stacionárius pont (aszimptotikusan) stabilis, akkor a megfelelő stacionárius pont az eredeti rendszerben relatíve (aszimptotikusan) stabilis.

Stacionárius pont képének kezdeti feltételek szerint érzékenysége egyszerű explicit képlettel számolható [Tóth és mtsai., 1997, 1549. oldal].

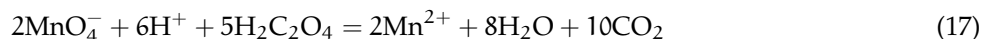
Mit mondhatunk a tranziens megoldásokról?

16. tétel. Föl nem robbanó megoldás képe nem robban föl, az összevont rendszer fölrobbanó megoldása csak fölrobbanó megoldás képe lehet.

Kiterjesztések. Az összevonást kiterjesztettük reakciódiffúzió-rendszerekre [Rózsa és Tóth, 2004], illetve diszkrét idejű determinisztikus és sztochasztikus modellekre is [Tóth és mtsai., 1995]. (A sztochasztikus modellek összevonása nyilván rokon a dinamikus faktoranalízissel.)

Bruttó reakciók felbontása

A sztöchiometria tipikus feladata a következő [Kovács és mtsai., 2004]: Adott például a



úgynevezett **bruttó** reakció, és keressük azokat a reakciólépéseket, amelyek nemnegatív egész együtthatós lineáris kombinációjaként a fenti bruttó reakció előáll. A reakciólépésekre megszorításokat szokás tenni, ezek közül a legfontosabb, hogy **elemiek** legyenek abban az értelemben, hogy reaktáns komplexeik hossza ne legyen kettőnél nagyobb.

További részletek szükségesek a feladat pontos megfogalmazásához. Általában a bruttó reakcióban szereplő anyagfajtákon kívül továbbiak is szerepelnek a felbontás reakcióiban. Első lépésként előállíthatunk az előforduló atomokból „sok” anyagfajtát, majd a vegyéssel közösen ezek közül kiválogathatjuk a reálisan tényleg előfordulókat. A következő lépésben fölírjuk az összes olyan elemi reakciót, amelynek bal oldalán és jobb oldalán is csak az összegyűjtött anyagfajták szerepelnek, és teljesítik az atomszámmegmaradás törvényét. Esetleg kiköthetjük, hogy a termékkomplexei hossza se legyen több mint kettő. A létrejött elemi reakciókat ismeretlen együtthatókkal szorozva és összeadva meg kell kapnunk a bruttó reakciót. Ez nyilván egy lineáris diophantoszi egyenletrendszert jelent. Az ilyenek elmélete a XIX. század közepén indult fejlődésnek, hatékony algoritmusok nagy rendszerek esetére viszont csak újabban állnak rendelkezésre [Vizvári B. és Tóth J., 2000, Papp és Vizvári, 2006]. Általában a feladat megoldása nagyon nem egyértelmű, ezért a (például egészértékű lineáris programozás alkalmazásával) generált előállítások közül további kritériumok segítségével szűrünk. Ezek egyike lehet, hogy Volpert eredményeit felhasználva megvizsgáljuk, végbemehetnek-e egyáltalán a reakciók adott kezdeti anyagfajták mellett. Más esetekben termodinamikai megfontolások segíthetnek, a leggyakrabban azonban az eredményeket a vegyéssel közösen elemezve tudjuk eldönteni, melyek az elfogadható felbontások. A fenti esetben például egy tipikus felbontás:

reaktáns		termék	súly
$\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4 + \text{MnO}_2$	\rightarrow	$[\text{MnO}_2, \text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4]$	4
$\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4 + [\text{MnO}_2, \text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4]$	\rightarrow	$\text{CO}_2^- + \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} + [\text{Mn}(\text{C}_2\text{O}_4)]^+$	1
$\text{C}_2\text{O}_4^{2-} + \text{Mn}^{3+}$	\rightleftharpoons	$[\text{Mn}(\text{C}_2\text{O}_4)]^+$	3
$\text{C}_2\text{O}_4^{2-} + [\text{Mn}(\text{C}_2\text{O}_4)]^+$	\rightleftharpoons	$[\text{Mn}(\text{C}_2\text{O}_4)_2]^-$	2
$[\text{Mn}(\text{C}_2\text{O}_4)]^+ + \text{MnO}_4^-$	\rightarrow	$2\text{CO}_2 + 2\text{MnO}_2$	2
2CO_2^-	\rightarrow	$\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$	2
$2[\text{Mn}(\text{C}_2\text{O}_4)_2]^-$	\rightarrow	$3\text{C}_2\text{O}_4^{2-} + 2\text{CO}_2 + 2\text{Mn}^{2+}$	1
$\text{H}^+ + [\text{MnO}_2, \text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4]$	\rightarrow	$[\text{H}^+, \text{MnO}_2, \text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4]^+$	3
$\text{H}^+ + [\text{H}^+, \text{MnO}_2, \text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4]^+$	\rightarrow	$\text{CO}_2^- + \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} + \text{Mn}^{3+}$	3

A módszert más reakciókra (hemoglobin telítődése oxigénnel) is alkalmaztuk [Vizvári B. és Tóth J., 2000] és alkalmazzuk (bizonyos brómvegyületek savas közegben végbemenő reakciói).

Egzotikus jelenségek

A hagyományos felfogás szerint a reakciók tipikus viselkedése **szabályos** abban az értelemben, hogy az anyagfajták összeöntése után valamilyen (esetleg a kezdeti mennyiségektől függő) egyértelműen meghatározott egyensúlyi állapot áll be, matematikai terminusokkal: létezik egyetlen globálisan stabilis egyensúlyi helyzet. A XX. században számos kísérlet bizonyította, hogy a formális reakciókinetikában van létjogosultságuk az **egzotikus** viselkedés – amilyen például a multistabilitás, oszcilláció, mintázatképződés, káosz – modelljeinek is.

Részletes kiegyensúlyozottság ioncsatorna-modellekben. Az idegsejtek ioncsatornáinak modellezése kapcsán fölvetődött [Colquhoun és mtsai, 2004], hogy amennyiben a folyamatokat leíró formális kémiai reakciók részletesen kiegyensúlyozottak, a sebességi együtthatók között fennálló relációk lehetővé teszik a mérések számának csökkentését. A részletes egyensúly fennállása egyszerűen ellenőrizhető (bár nem oly egyszerűen,

ahogyan az széles körben elterjedt, és ahogyan az idézett szerzők is alkalmazzák), jól kezelhető szükséges és elégséges feltételt adott erre [Feinberg, 1989]. Colquhounék nyilvánvalóan hibás eljárását elemezve megállapítottuk, hogy az ionszatorna-modellek speciális alakja miatt kapnak ők mégis helyes eredményeket. A speciális alak meghatározó jellemzőit sikerült előzetesen körülhatárolnunk [Nagy és mtsai, 2009].

Oszcilláció és multistabilitás. A reakciókinetika elmélete tele van hagyományokkal, hiedelmekkel, sejtésekkel és cáfolatokkal [Tóth, 1999]. Részletesen elemeztük ezt az [Érdi és Tóth, 1989, Section 4.2] könyvben, itt most csak néhány példát említünk. Megfordítható reakcióknak van pozitív stacionárius pontjuk (igaz), csak egy van (hamis). A zárt rendszerek egyensúlyhoz tartanak – ha ez azt jelenti, hogy megfordítható részletesen kiegyensúlyozott reakcióknak létezik egyetlen, lokálisan relatíve aszimptotikusan stabilis egyensúlyi helyzete, akkor igaz, sőt az állítás komplex kiegyensúlyozott reakciókra is kiterjeszhető. Oszcilláció csak akkor jelenik meg, ha autokatalitikus, autoinhibitorikus vagy enzimatis reakció lépés is jelen van (hamis). Visszacsatolás szükséges az oszcillációhoz (hamis), sőt autokatalízis nélkül, első- és másodrendű reakciókkal sikerült (numerikusan) káoszt generálni.

Itt arról az állításról szólunk részletesebben, amely szerint a multistacionaritás szükséges vagy elégséges feltétele lenne az oszcillációnak. A téveszme pontosabb megfogalmazása szerint ahhoz, hogy valamilyen paraméterek mellett létezzék oszcilláció egy összetett kémiai reakció determinisztikus modelljében, szükséges, hogy a paraméterek valamilyen értéke mellett több egyensúlyi helyzet létezzék. Ez a tulajdonság számos modellnél (autokatalátor, Ivanova-reakció, Lotka–Volterra-reakció, oregonátor), és számos valóságos reakciónál is teljesül, sőt ezt az összefüggést sikeresen használták oszcilláló reakciók tervezésére is. Másrészt a Farkas H.–Kertész–Noszticzius-féle **exploszió** modellel szembeni kritika azon alapult, hogy mintha az a modell nem teljesítené ezt az elvet, míg a kritika kritikája azon, hogy de igen, bizonyos paramétereknél a modellnek több egyensúlyi helyzete van.

A [Tóth, 1999] cikkben megmutattuk, hogy a fenti állítás további kiegészítések nélkül hamis, és a feltétel nem is szükséges. A Li és Wu által döntő érveként felhozott példa viszont valóban rendelkezik periodikus megoldással, amint az a Poincaré–Bendixson-féle elmélet egyszerű következményeként adódik.

A tanulság az esetből nem az, hogy a vegyészek egy nemlétező tételre alapozzák tevékenységüket, hanem az, hogy a nemlétező tétel és a modellek és a mérések viselkedése közötti szoros kapcsolat arra kell, hogy ösztökéljen bennünket, hogy megkeressük a további hallgatóságos feltételeket, amelyekkel egy igaz és hasznos állítást lehet megfogalmazni.

A témához csatlakozik még a Bendixson-tétel egy többdimenziós általánosítása [Tóth, 1987], továbbá a Póta–Tyson–Light-tétel (lényegében: két belső anyagfajta és legfeljebb másodrendű reakciók esetén a Lotka–Volterra reakció az egyedüli oszcilláló reakció) egy újabb bizonyítása, amely reményt ad a tétel esetleges általánosításaira [Schuman és Tóth, 2003], s amely a homogén másodfokú polinommal perturbált vektormezők Bautyin–Dulac–Loud–Žořadek-féle osztályozásán alapul.

Turing-féle instabilitás

Ebben a részben kivételesen nem a homogén reakciókinetika valamely problémájával foglalkozunk, hanem reakciódiffúzió-rendszerekre vonatkozó állításokat foglalunk össze. Ezek legfontosabbjaként megmutattuk elemi [Szili és Tóth, 1997] és haladottabb [Szili és Tóth, 1993] módszerekkel, hogy a Turing-féle instabilitás szükséges feltétele a keresztgátlás jelenléte. Ezek a vizsgálatok felfoghatók úgy, hogy azt tanulmányoztuk, milyen hatással van diffúzió hozzávétele egy homogen reakciókinetikai rendszer viselkedésére stabilitás szempontjából.

A vizsgált rendszer ismét a (3) reakció, de mivel a diffúziót is figyelembe akarjuk venni, ezért modellünk most az alábbi parciális differenciálegyenlet-rendszer:

$$\frac{\partial c_m(t, \mathbf{x})}{\partial t} = f_m(\mathbf{c}(t, \mathbf{x})) + D_m \frac{\partial^2 c_m(t, \mathbf{x})}{\partial x^2} \quad (m = 1, 2, \dots, M) \quad (18)$$

ami az anyagfajták $c_m(t, \cdot)$ sűrűségfüggvényére vonatkozik, és ahol a $D_m \in \mathbb{R}^+$ számok a **diffúziós együtt-hatók**, az f_m függvények pedig ugyanazok, mint a (4) egyenletnél. Az egyenlet az $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ nyílt halmazon van értelmezve, amelynek sima határa a $\partial\Omega$ halmaz. Ahhoz, hogy a feladat megoldása egyértelmű legyen, egyrészt **kezdeti feltételeket** szokás kikötni:

$$\mathbf{c}(0, \mathbf{x}) = \mathbf{c}^0(\mathbf{x}) \quad (\mathbf{x} \in \Omega), \quad (19)$$

a peremfeltételek közül pedig vagy rögzített, azaz **Dirichlet-féle feltételt** kötünk ki:

$$\mathbf{c}(t, \mathbf{x}) = \mathbf{c}^*(\mathbf{x}) \quad (\mathbf{x} \in \partial\Omega), \quad (20)$$

azaz minden időpontban előírjuk a(z időben változatlan) koncentrációt, vagy azt mondjuk, hogy a határon keresztül nem áramlik anyag, azaz zéró fluxusú vagy **Neumann-féle peremfeltételt** írunk elő:

$$\mathbf{c}(t, \mathbf{x})^\top \boldsymbol{\nu}(\mathbf{x}) = 0 \quad (\mathbf{x} \in \partial\Omega). \quad (21)$$

Érdekes és matematikai szempontból meglepő lehet az a – kísérletekből és numerikus számításokból ismert – tény, hogy elegendően nagy edény esetén a két eset között nincs lényeges különbség.

A szokásosnak megfelelően [Cavani és Farkas, 1994, 378. old.] **Turing-instabilitásról** akkor beszélünk, ha a következők teljesülnek. A homogén, diffúzió nélküli esetre vonatkozó (4) egyenletnek létezik olyan \mathbf{c}^* nemnegatív stacionárius megoldása, amelyre teljesül, hogy ennél a megoldásnál az egyenlet jobb oldalának $\mathbf{f}'(\mathbf{c}^*)$ Jacobi-mátrixa csak negatív valós részű sajátértékekkel bír. Ha a tetszőleges \mathbf{A} mátrix **spektrumát** $\sigma(\mathbf{A})$, **spektrális abszcisszáját** pedig $s(\mathbf{A}) := \max\{\Re(\lambda); \lambda \in \sigma(\mathbf{A})\}$ jelöli, akkor a feltevés:

$$s(\mathbf{f}'(\mathbf{c}^*)) < 0. \quad (22)$$

(Alább szükségünk lesz még a $\rho(\mathbf{A}) := \max\{|\lambda|; \lambda \in \sigma(\mathbf{A})\}$ **spektrális rádiuszra** is.) Kiemelendő, hogy ez a feltétel azt (is) maga után vonja, hogy a reakciódiffúzió-rendszer kicsiny, **térben homogén** perturbációja elenyészik.

Ismeretes, hogy a Laplace-operátor $\kappa_0, \kappa_1, \dots$ sajátértékei mindkét peremfeltétel esetén negatívak. Alapvető fontosságú számunkra Martin tétele, amely szerint, ha minden κ_k mellett

$$s(\mathbf{f}'(\mathbf{c}^*) + \kappa_k \mathbf{D}) < 0, \quad (23)$$

ahol $\mathbf{D} := \text{diag}(D_1, D_2, \dots, D_m)$, akkor \mathbf{c}^* globálisan egyenletesen aszimptotikusan stabilis megoldása a (18) egyenletnek. Akkor beszélünk Turing-féle instabilitásról, ha van olyan κ_k , amelyre (23) nem teljesül, (22) viszont igen. Ez az eset azért érdekes, mert ilyenkor stabilis inhomogén stacionárius állapotok (úgynevezett **Turing-mintázatok**) jöhetnek létre. A kémiaileg hasznos és értelmes állítások alapja a következő tétel:

17. tétel. Ha az $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times M}$ lényegében nemnegatív mátrix esetén $s(\mathbf{A}) < 0$, akkor tetszőleges nemnegatív \mathbf{C} diagonális mátrix esetén $s(\mathbf{A} - \mathbf{C}) < 0$.

Fő eredményünkből speciálisan következik, hogy elsőrendű reakcióban nem kaphatunk Turing-féle instabilitást. Ez az állítás annál érdekesebb, mert Epstein cikkében [Epstein, 1991] az áll, hogy

Turing ... showed that a sufficiently nonlinear set of reaction kinetics coupled to diffusion could give rise to pattern formation

Ezzel szemben viszont Turing példája $\dot{x} = 5x - 6y + 1$, $\dot{y} = 6x - 7y + 1$ éppen hogy **lineáris**, de **nemkinetikai**, ugyanis a bekeretezett tag negatív keresztthatást fejez ki [Hárs, Tóth, 1979, Tóth, Hárs, 1986].

A multisacionaritással kapcsolatos hiedelmek [Tóth, 1999] kiegészíthetők azzal a szintén nem bizonyított, szigorú értelemben pedig nyilván hamis állítással, amely szerint homogén körülmények között két stacionárius állapottal bíró reakció diffúzió jelenlétében térbeli struktúra kialakulásához vezethet.

Megjegyzendő, hogy a [Szili és Tóth, 1997] dolgozatban a kinetikai differenciálegyenletek jellemzésének a tömeghatás típusú kinetika esetén [Hárs, Tóth, 1979, Tóth, Hárs, 1986] messze túlmenő általánosítását is megadtuk.

Sztochasztikus kinetikai modellek: Egy módszer a változók számának csökkentésére

A sztochasztikus kinetikai modellek már két változó esetén is meglehetősen nehezen kezelhetők néhány alapvető állításban megfogalmazott eredményeken ([Érdi és Tóth, 1989, 109. oldal] és [Tóth és Érdi, 1992, 125–134. oldal] túlmenően. Ennélfogva érdemes bevezetni közelítő eljárásokat a változók számának csökkentésére. Az általunk javasolt egyszerű eljárás rokon a szinguláris perturbáció módszerével, tehát lényege az, hogy kiköszöböljük a gyors változót a kvázistacionárius feltevés alapján.

Különösen fontos ilyen módszerek tanulmányozása azért, mert egy egyszerűsített reakció sztochasztikus modellje és egy „nagy” reakció sztochasztikus modelljének egyszerűsített változata általában nem azonos.

Tekintsük az



reakciót, ahol a P_1 és P_2 termékek külső anyagfajták, $a, b, c, d \in \mathbb{N}_0$ sztöchiometriai együtthatók. Ha a szokásos módon bevezetjük a $P_{m,n}(t) := P(X(t) = m, Y(t) = n)$ abszolút valószínűségeket, akkor ezekre a fentiek alapján a következő egyenlet áll fenn:

$$\begin{aligned} \dot{P}_{m,n}(t) &= w_1(m-a, n-b)P_{m-a, n-b}(t) - w_1(m, n)P_{m,n}(t) \\ &+ w_2(m-c, n-d)P_{m-c, n-d}(t) - w_2(m, n)P_{m,n}(t), \end{aligned} \quad (25)$$

ahol $w_r, (r = 1, 2)$ az egyes reakciólépések sebessége. Tegyük fel, hogy az Y anyagfajta sokkal gyorsabban változik, mint az X anyagfajta, és vezessünk le egyenletet a $Q_m(t) := \sum_n P_{m,n}(t)$ valószínűségekre. A (25) egyenleteket összegezve kapjuk:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_m(t) &= E[w_1(m-a, n)|m-a]Q_{m-a}(t) - E[w_1(m, n)|m]Q_m(t) \\ &+ E[w_2(m-c, n)|m-c]Q_{m-c}(t) - E[w_2(m, n)|m]Q_m(t), \end{aligned} \quad (26)$$

ahol

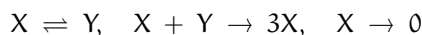
$$P_{n|m}(t) := \frac{P_{m,n}(t)}{Q_m(t)} \quad E[f|m] := \sum_n f(m, n)P_{n|m}(t) \quad (f = w_1, w_2). \quad (27)$$

A $P_{n|m}(t)$ feltételes valószínűségekre pedig azt a feltevést tesszük, hogy azt az egyenletet elégítik ki, amelyet a (25) egyenletből m értékének rögzítése mellett kapunk:

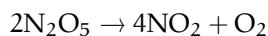
$$\begin{aligned} \dot{P}_{n|m}(t) &= w_1(m, n-b)P_{m, n-b}(t) - w_1(m, n)P_{m,n}(t) \\ &+ w_2(m, n-d)P_{m, n-d}(t) - w_2(m, n)P_{m,n}(t), \end{aligned} \quad (28)$$

A (26) és (28) egyenletből álló rendszer a (27) definíciók figyelembevételével már megoldható.

Az eljárást két konkrét példára alkalmaztuk: a P. Graytól eredő reakciócsalád egy tagjára, az



köbös autokatalátorra, és a dinitrogén-pentoxid (N_2O_5)



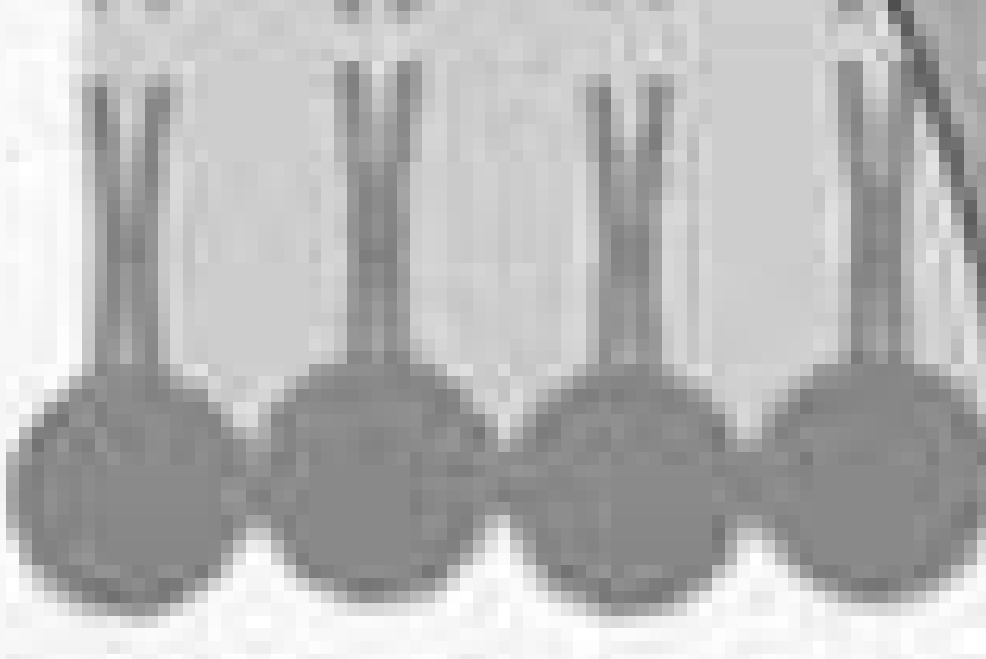
bruttó reakció szerint végbemenő **bomlásának** Oggtól eredő

reaktáns		termék	súly
N_2O_5	\rightleftharpoons	$NO_2 + NO_3$	2
$NO_2 + NO_3$	\rightarrow	$NO_2 + NO + O_2$	1
$NO_3 + NO$	\rightarrow	$2NO_2$	1

klasszikus mechanizmusára. A várható értékre és a szórásnégyzetre vonatkozó egyenletek levezethetők, de még mindig igen bonyolultak, ezért közelítő megoldásukra a van Kampen-féle Ω -sorfejtést alkalmaztuk. A várható értékre ily módon kapott egyenlet már pontosan megegyezik a determinisztikus kinetikai differenciálegyenlettel. Az eredményeket összevetettük a Degn-féle (lásd pl. [Érdi, Sipos és Tóth, 1973, Hárs, 1976]) szimuláció eredményével. A vizsgált példákban a közelítőleg számolt szórás nagyobb a szimulálással kapott szórásnál, míg az egyszerűsített reakciók sztochasztikus modelljében a szórás általában kisebb, amit az magyarázhat, hogy az egyszerűsített modell a fluktuációk forrásai közül néhányat figyelmen kívül hagy.

Különböző szintű modellek integrálása

Különböző szöbajövő potenciális hatóanyagok elektrofiziológiai és magatartásra gyakorolt hatását úgy vizsgáltuk számítógépes szimulációval, hogy a transzmitter-receptor kölcsönhatás farmakológiai módosítása részletes kinetikai modelljét és a neurobiológiai rekeszmodelleket (amelyek a Hodgkin–Huxley-egyenlet egyszerűsített változatai) egyesítettük. Ezen túlmenően egy inverz módszert is javasoltunk, amely alapján kidolgozható az idegrendszer olyan befolyásolása, amely valamilyen előre megadott időbeli mintázathoz vezet. Elemeztük a szorongással kapcsolatban álló ϑ -hullámok keletkezését és farmakológiai módosításukat. A különböző szintű modellek egyesítése a konkrét esetben abban segíthet, hogy megtaláljuk a GABA-receptorok α_1 -alegységének olyan pozitív allosztérikus modulátorait, amelyek szelektív szorongásoldók lehetnek [Érdi és Tóth, 2005, Érdi és mtsai, 2006].



1. ábra. A GABA receptor

A *Mathematica* program alkalmazásai a kémiai reakciókinetika feladatainak megoldására

Egy összetett feladat, a szaglással kapcsolatos jelek sejtbeli transzdukciója kapcsán olyan programokat készítettünk [Tóth és Rospars, 2005], amelyek automatikusan fölírják és megoldják az indukált kinetikai differenciálegyenletet. Példáink közül a ligandum-receptor kölcsönhatás egyszerű modelljei tömeghatás típusú kinetikával rendelkeztek, míg Meyernek és Stryernek a receptorok indukálta kalciumoszillációra felírt modelljében a kinetikát a Michaelis–Menten-reakcióra emlékeztető (annál kissé bonyolultabb) racionális függvények adták meg. A [Tóth, 2002] dolgozatban a megfelelő sztochasztikus modellt is szimuláljuk, de megmaradtunk a tömeghatás típusú kinetika megfelelőjénél: a Kurtz-féle kinetikánál.

Kisebb részletek vizsgálatához szintén használtuk a *Mathematicát*: mintaprogramot [Várdai és Tóth, 2008] írtunk annak tanulmányozására, hogy hogyan jelenik meg a Hopf-féle bifurkáció a Schlögl-modellben, továbbá a variációs egyenletek elemzésére a sejtciklus oszcilláló modelljei esetén [Sipos-Szabó, E. és mtsai, 2008, Pál és mtsai, 2009, Sipos-Szabó, E. és mtsai, 2009].

A reakciókinetikán túl is érdeklődésre tarthat számot az a programcsomag, amely polinomok (aszimptotikus) stabilitására vonatkozó algebrai, komplex függvénytani, számelméleti stb. módszereket foglal össze [Tóth és mtsai., 1998]. A bruttó reakciók korábbiakban már említett felbontása szintén a *Mathematica* programot használja [Vizvári B. és Tóth J., 2000, Papp és Vizvári, 2006, Kovács és mtsai., 2004]. (Lásd még ezeket is: [Nagy A. L., 2009a, Nagy A. L., 2009b, Nagy A. L., 2009c].)

Illusztrácóként mutatunk néhány példát annak igazolására, hogy *Mathematica* program segítségével a matematikai megfogalmazáshoz egészen közel álló, esetenként annál is tömörebb módon lehet programokat írni anélkül, hogy az elavult konstrukciók (**Break**, **Continue**, **Do**, **For**, **Goto**, **Label**, **Return**) bármelyikére szükségünk volna. A (4) kinetikai differenciálegyenlet jobb oldalát például a következő „programrészlet” számolja: $(\beta - \alpha) \cdot (\mathbf{k} \cdot \mathbf{t} \cdot \mathbf{m} \cdot \mathbf{c}^\alpha)$. A (2) egyenlet érzékenységi vagy variációs egyenletének jobb oldalát pedig ez

adja: $D[f[c, p], \{p\}]$.

A tézisek

1. Feltételeket adtam meg nemlineáris összevonó függvények létezésére (2.–5. tétel, [Li és mtsai., 1994a]).
2. Módszereket adtam meg nemlineáris összevonó függvények pontos és közelítő konstrukciójára mellékfeltételekkel és mellékfeltételek nélkül (6., 8., tétel, [Li és mtsai., 1993]).
3. Mevizgáltam az összevonás hatását kinetikai differenciálegyenletek megoldásainak kvalitatív tulajdonságaira (11., 12., 13., 14., 15., 16. tétel, [Tóth és mtsai., 1997]).
4. Bruttó reakciók felbontására szolgáló módszereket dolgoztam ki és alkalmaztam szerves és biokémiai reakciókra [Kovács és mtsai., 2004].
5. Homogén kinetikai modellek egzotikus viselkedésére vonatkozó pontos állításokkal igyekeztem eloszlani az irodalomban fellelhető kétértelműségeket. (1. tétel, [Gaveau és mtsai., 2000, Schuman és Tóth, 2003, Tóth, 1999]).
6. Megállapítottam, hogy a Turing-instabilitás szükséges feltétele a keresztgátlás jelenléte (17. tétel, [Szili és Tóth, 1993]).
7. Közelítő módszert dolgoztam ki a változók számának csökkentésére sztochasztikus kinetikai modellekben [Frankowicz és mtsai., 1993, Gaveau és mtsai., 2005].
8. Példát mutattam különböző szintű farmakológiai modellek integrálására és a reakciókinetikai vizsgálatok számítógépes segítésére [Érdi és Tóth, 2005, Tóth és Rospars, 2005].

A tíz kiemelt hivatkozást pirossal szedtem, másolatuk a honalpomon megtalálható.

Hivatkozások

- [Brochot és mtsai, 2005] Brochot, C., Tóth, J.; Bois, F.: Lumping in pharmacokinetics, *Journal of Pharmacokinetics and Pharmacodynamics*, **32** (5-6) (2005), 719-736.
- [Cavani és Farkas, 1994] Cavani, M.; Farkas, M.: Bifurcation in a predator-prey model with memory and diffusion: II Turing bifurcation, *Acta Math. Hungar.* **63** (1994), 375-393.
- [Colquhoun és mtsai, 2004] Colquhoun, D.; Dowsland, K. A.; Beato, M.; Plested, A. J. R.: How to impose microscopic reversibility in complex reaction mechanisms, *Biophys. J.* **86** (6) (2004), 3510-3518.
- [Csikja és Tóth, 2007] Csikja, R.; Tóth, J.: Blow up in polynomial differential equations, *Enformatika. International Journal of Applied Mathematics and Computer Sciences* **4** (2) (2007), 728-733.
- [Deák és mtsai, 1992] Deák J.; Tóth J.; Vizvári B.: Anyagmegmaradás összetett kémiai mechanizmusokban, *Alkalmazott Matematikai Lapok* **16** (1-2) (1992), 73-97.
- [Epstein, 1991] Epstein, I. R.: Nonlinear oscillations in chemical and biological systems, *Physica* **51D** (1991), 152-160.
- [Érdi és mtsai, 2006] Érdi, P.; Kiss, T.; Tóth, J.; Ujfalussy, B.; Zálányi, L.: From Systems Biology to dynamical neuropharmacology: Proposal for a new methodology, *Systems Biology, IEE Proceedings*, **153** (4), 299-308 (2006).
- [Érdi, Sipos és Tóth, 1973] Érdi P.; Sipos T.; Tóth J.: Összetett kémiai reakciók sztochasztikus szimulálása számítógéppel, *Magyar Kémiai Folyóirat* **79** (3) (1973), 97-108.
- [Érdi és Tóth, 1989] Érdi, P.; Tóth, J.: *Mathematical Models of Chemical Reactions. Theory and Applications of Deterministic and Stochastic Models*, Manchester University Press – Princeton University Press, Manchester – Princeton, 1989.
- [Érdi és Tóth, 1990] Érdi, P.; Tóth, J.: What is and what is not stated by the May-Wigner theorem?, *Journal of Theoretical Biology* **145** (1990), 137-140.

- [Érdi és Tóth, 2005] Érdi, P.; Tóth, J.: Towards a dynamic neuropharmacology: Integrating network and receptor levels, In: *Brain, Vision and Artificial Intelligence*, (M. De Gregorio, V. Di Maio, M. Frucci and C. Musio eds.), *Lecture Notes in Computer Science* **3704**, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 2005, pp. 1–14.
- [Farkas Gy., 1998a] Farkas, Gy.: Local controllability of reactions, *Journal of Mathematical Chemistry* **24** (1) (1998), 1–14.
- [Farkas Gy., 1998b] Farkas, Gy.: On local observability of reactions, *Journal of Mathematical Chemistry* **24** (1) (1998), 15–22.
- [Farkas Gy., 1999] Farkas, Gy.: Kinetic lumping schemes, *Chemical Engineering Science* **54** (1999), 3909–3915.
- [Farkas és mtsai., 1992] Farkas H.; Györgyi L.; Póta Gy.; Tóth J.: Az egzotikus kinetikai rendszerek matematikájának alapjai, In: *Nemlineáris dinamika és egzotikus kinetikai jelenségek kémiai rendszerekben*, Egyetemi jegyzet (Kézirat), (Debrecen, Budapest, Gödöllő) (Bazsa Gy. szerk.), 1992, pp. 13–116.
- [Feinberg, 1989] Feinberg, M.: Necessary and sufficient conditions for detailed balancing in mass action systems of arbitrary complexity, *Chem. Eng. Sci.* **44** (1989), 1819–1827.
- [Frankowicz és mtsai., 1993] Frankowicz, M.; Moreau, M.; Szczęsny, P. P.; Tóth, J.; Vicente, L.: Fast variables elimination in stochastic kinetics, *Journal of Physical Chemistry* **97** (1993), 1891–1895.
- [Gaveau és mtsai., 2000] Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Scenarios for self-organized criticality in dynamical systems, *Open Sys. & Information Dyn.* **7** (4) (2000), 297–308.
- [Gaveau és mtsai., 2005] Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Master equations and path-integral formulation of variational principles for reactions, In: *Variational and Extremum Principles in Macroscopic Systems*, Chapter 15, (S. Sienytucz, H. Farkas eds.), Elsevier, 2005, pp. 315–338.
- [Halmschlager és mtsai, 2004] Halmschlager, A.; Szenthe, L.; Tóth, J.: Invariants of kinetic differential equations, *Electronic Journal of the Qualitative Theory of Differential Equations*, **14** (2004), 1–14.
- [Halmschlager és Tóth, 2004] Halmschlager, A.; Tóth, J.: Über Theorie und Anwendung von polynominalen Differentialgleichungen, In: *Wissenschaftliche Mitteilungen der 16. Frühlingsakademie*, ISBN 963 214 1180, Mai 19-23, 2004, München-Wildbad Kreuth, Deutschland. Technische und Wirtschaftswissenschaftliche Universität Budapest, Institut für Ingenieurweiterbildung, Budapest, 2004, pp. 35–40.
- [Hárs, 1976] Hárs Vera: *A sztochasztikus reakciókinetika néhány kérdéséről*, (Szakdolgozat), ELTE TTK, Budapest, 1976. (Témavezető: Tóth János).
- [Hárs, Tóth, 1979] Hárs, V.; Tóth, J.: On the inverse problem of reaction kinetics, In: *Colloquia Mathematica Societatis János Bolyai*, (Szeged, Hungary, 1979) *Qualitative Theory of Differential Equations* (M. Farkas ed.), North-Holland – János Bolyai Mathematical Society, Budapest, 1981, pp. 363–379.
- [Horváth Zs., 2009] Horváth, Zsófia: Effect of lumping on controllability and observability, *Journal of Mathematical Chemistry* (in press).
- [Nagy és mtsai, 2009] Nagy, I.; Kovács, B.; Tóth, J.: Detailed balance in ion channels: Applications of Feinberg’s theorem, *React. Kinet. Catal. Lett.* **96** (2) (2009), 263–267.
- [Kovács és Tóth, 2008] Kovács, B.; Tóth, J.: Estimating reaction rate constants with neural networks, *Enformatika. International Journal of Applied Mathematics and Computer Sciences* **4** (2) (2007), 515–519.
- [Kovács és mtsai., 2004] Kovács, K.; Vizvári, B.; Riedel, M.; Tóth, J.: Decomposition of the permanganate/oxalic acid overall reaction to elementary steps based on integer programming theory, *Physical Chemistry, Chemical Physics*, **6** (6)(2004), 1236–1242.
- [Li és mtsai., 1994a] Li, G.; Rabitz, H.; Tóth, J.: A general analysis of exact nonlinear lumping in chemical kinetics, *Chemical Engineering Science* **49** (3) (1994), 343–361.
- [Li és mtsai., 1993] Li, G.; Tomlin, A. S.; Rabitz, H.; Tóth, J.: Determination of approximate lumping schemes by a singular perturbation method, *Journal of Chemical Physics* **99** (5) (1993), 3562–3574.

- [Li és mtsai., 1994b] Li, G.; Tomlin, A. S.; Rabitz, H.; Tóth, J.: A general analysis of approximate nonlinear lumping in chemical kinetics. I. Unconstrained lumping, *Journal of Chemical Physics* **101** (2) (1994), 1172–1187.
- [Nagy A. L., 2009a] Nagy A. L.: Volpert Graph from The Wolfram Demonstrations Project <http://demonstrations.wolfram.com/VolpertGraph/>
- [Nagy A. L., 2009b] Nagy A. L.: Descriptive Reaction Kinetics from The Wolfram Demonstrations Project <http://demonstrations.wolfram.com/DescriptiveReactionKinetics/>
- [Nagy A. L., 2009c] Nagy A. L.: Feinberg Horn Jackson Graph from The Wolfram Demonstrations Project <http://demonstrations.wolfram.com/FeinbergHornJacksonGraph/>
- [Papp és Vizvári, 2006] Papp, D.; Vizvári B.: Effective solution of linear Diophantine equation systems with an application in chemistry, *Journal of Mathematical Chemistry*, **39** (1) (2006), 15–31.
- [Pál és mtsai, 2009] Pál, I.; Zsély, I. Gy.; Turányi, T.; Sipos-Szabó, E.; Tóth, J.; Csikász-Nagy, A.: Sensitivity analysis of a generic cell-cycle model, *Third European Science Foundation Conference on Functional Dynamics*, Cascais, Portugal, 2–5 March, 2009.
- [Póta, Nagy, Tóth, 2009] Póta, Gy.; Nagy, I.; Tóth, J.: "End of the world" in chemical kinetics: solutions defined on finite time intervals (in preparation)
- [Rózsa és Tóth, 2004] Rózsa, Z.; Tóth, J.: Exact linear lumping in abstract spaces, *Electronic Journal of the Qualitative Theory of Differential Equations* **21** (2004), 1–20.
- [Schuman és Tóth, 2003] Schuman, B.; Tóth J.: No limit cycle in two species second order kinetics, *Bull. sci. math.* **127** (2003), 222–230.
- [Sipos-Szabó, E. és mtsai, 2008] Sipos-Szabó, E., Tóth, J., Pál, I., Zsély, I. Gy., Turányi, T., Csikász-Nagy, A.: Sensitivity analysis of a generic cell-cycle model, Poszter, *Second ESF FUNCDYN Conference on Functional Dynamics*, Rothenburg oberhalb der Tauber, Germany, 15–18 September 2008, p. 15.
- [Sipos-Szabó, E. és mtsai, 2009] Sipos-Szabó, E., Tóth, J., Csikász-Nagy, A.: Sensitivity analysis of oscillating biochemical reactions, Poszter, *Third European Science Foundation Conference on Functional Dynamics*, Cascais, Portugal, 2–5 March, 2009. (submitted)
- [Szili és Tóth, 1993] Szili, L.; Tóth, J.: Necessary condition of the Turing instability, *Physical Review E* **48** (1) (1993), 183–186.
- [Szili és Tóth, 1997] Szili, L.; Tóth, J.: On the origin of Turing instability, *Journal of Mathematical Chemistry* **22** (1) (1997), 39–53.
- [Tomlin és mtsai., 1994] Tomlin, A. S.; Li, G.; Rabitz, H.; Tóth, J.: A general analysis of approximate nonlinear lumping in chemical kinetics. II. Constrained lumping, *Journal of Chemical Physics* **101** (2) (1994), 1188–1201.
- [Tóth, 1987] Tóth, J.: Bendixson-type theorems with applications, *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* **67** (1) (1987), 31–35.
- [Tóth, 1999] Tóth, J.: Multistationarity is neither sufficient nor necessary to oscillation, *Journal of Mathematical Chemistry* **25** (4) (1999), 393–397.
- [Tóth, 2002] Tóth, J.: Formal Kinetics with Applications, 6th World Multiconference on Systemics, Cybernetics and Informatics (July 14-18, 2002, Orlando, FL, USA), Vol. **XI** (Computer Science II) (N. Callaos, M. Morgenstern and B. Sanchez eds.), pp. 573–576.
- [Tóth és Érdi, 1992] Tóth J.; Érdi P.: A sztochasztikus kinetikai modellek nélkülözhetetlensége, In: *Nemlineáris dinamika és egzotikus kinetikai jelenségek kémiai rendszerekben*, Egyetemi jegyzet (Kézirat), (Debrecen, Budapest, Gödöllő) (Bazsa Gy. szerk.), 1992, pp. 117–143.
- [Tóth, Hárs, 1986] Tóth, J.; Hárs, V.: Orthogonal transforms of the Lorenz- and Rössler-equations, *Physica* **19D** (1986), 135–144.

- [Tóth és mtsai., 1995] Tóth, J.; Li, G.; Rabitz, H.; Tomlin, A. S.: Reduction of the number of variables in dynamic models, In: *Complex Systems in Natural and Economic Sciences*, (Mátrafüred, 19–22 September, 1995.) (K. Martinás, M. Moreau eds.), ELFT, Budapest, 1996, pp. 17–34.
- [Tóth és mtsai., 1997] Tóth, J.; Li, G.; Rabitz, H.; Tomlin, A. S.: The effect of lumping and expanding on kinetic differential equations, *SIAM Journal on Applied Mathematics* **57** (6) (1997), 1531–1556.
- [Tóth és Rospars, 2005] Tóth, J.; Rospars, J.-P.: Dynamic modelling of biochemical reactions with applications to signal transduction: Principles and tools using *Mathematica*, *Biosystems* **79** (2005), 33–52.
- [Tóth és mtsai., 1998] Tóth, J.; Szili, L.; Zachár, A.: Stability of polynomials, *Mathematica in Education and Research* **7** (2) (1998), 5–12.
- [Várdai és Tóth, 2008] Várdai, J., Tóth, J.: Hopf Bifurcation in the Brusselator, from The Wolfram Demonstrations Project <http://demonstrations.wolfram.com/HopfBifurcationInTheBrusselator/>
- [Vizvári B. és Tóth J., 2000] Vizvári B.; Tóth J.: Számelméleti eljárások felhasználása bruttó mechanizmusok rejtett reakcióinak felderítésére, *Magyar Kémiai Folyóirat* **106** (10) (2000), 405–413.
- [Volpert és Huguajev, 1975] Вольперт, А. И.; Худяев, С. И.: *Анализ в классах разрывных функций и уравнение математической физики*, Наука, Москва, 1975.
- [Zachár, 1998] Zachár, A.: Comparison of transformations from nonkinetic to kinetic models, *Acta Chimica Hungarica—Models in Chemistry* **135** (3) (1998), 425–434.

3. Függelék: Hivatkozások és néhány részletes idézet

Arányi, P.; Tóth, J.: A full stochastic description of the Michaelis-Menten reaction for small systems, *Acta Biochimica et Biophysica Academiae Scientificarum Hungariae* **12** (4) (1977), 375–388.

1. Gadgil, Ch.: Stochastic modeling of biological reactions, *Journal of the Indian Institute of Science* **88** (1) (2008), 45–55.
2. Goss, P. J. E.; Peccoud, J.: Quantitative modeling of stochastic systems in molecular biology using Stochastic Petri Nets, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **95** (1998), 6750–6755.
3. Harder, A.; Roels, J. A.: Application of simple structured models in bioengineering, *Adv. Biochem. Eng.* **21** (1982), 55–103.
4. Keleti T.: *Enzimkinetika*, (Egységes jegyzet), Tankönyvkiadó, Budapest, 1985.
5. Keleti, T.: *Basic enzyme kinetics*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1986.
6. Kuhl, P. W.: Excess-substrate inhibition in enzymology and high-dose inhibition in pharmacology: a reinterpretation, *Biochem. J.* **298** (1994), 171–180.
7. Lente, G.: Stochastic kinetic models of chiral autocatalysis: A general tool for the quantitative interpretation of total asymmetric synthesis, *Journal of Physical Chemistry* (2005) **109** (48) (2005), 11058–11063.
8. Nguyen, B. T.; Dancsó, A.: A possible generalization of the Lotka-Volterra scheme, *Acta Chimica – Models in Chemistry* **136** (1/2) (1999), 15–22.
9. Pokora, O.; Lánský, P.: Statistical approach in search for optimal signal in simple olfactory neuronal models, *Mathematical Biosciences* **241** (1/2) (2008), 100–108.
10. Samoilov, M.; Plyasunov, S.; Arkin, A. P.: Stochastic amplification and signaling in enzymatic futile cycles through noise-induced bistability with oscillations, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **102** (7) (2005), 2310–2315.
11. Stéfanini, M. O.; McKane, A. J.; Newman, T. J.: Single enzyme pathways and substrate fluctuations, *Nonlinearity* **18** (2005), 1575–1595.
12. Turner, T. E.: *Stochastic and deterministic approaches to modelling in vivo biochemical kinetics*, MSc Thesis, Exeter College, Oxford, 2003.
13. Turner, T. E.; Schnell, S.; Burrage, K.: Stochastic approaches for modelling in vivo reactions, *Computational Biology and Chemistry* **28** (2004), 165–178.
14. Tzafriri, A. R.; Edelman, E. R.: Quasi-steady-state kinetics at enzyme and substrate concentrations in excess of the Michaelis–Menten constant, *Journal of Theoretical Biology* **245** (2007), 737–748.

In the extreme case of a single enzyme molecule reacting with a single substrate molecule it has been shown that the stochastic expected values can significantly deviate from the deterministic solution for certain values of the rate constants (Arányi and Tóth, 1977).

15. A bibliography for stochastic systems biology
<http://biowiki.org/StochasticBiology>
16. *Hoppe-Seyley's Zeitschrift fur physiologische Chemie* (1978), 1034.

Független idézők száma: 16.

Blickle, T.; Halász, G.; Tóth, J.: Structures, hypergraphs and knowledge representation in chemical engineering science, I. Problem formulation, *The International Journal for Artificial Intelligence in Engineering* **5** (3) (1990), 142–152.

1. Stephanopoulos, G.; Han, C.: Intelligent systems in process engineering: a review, *Comput. Chem. Engng* **20** (1996), 743–791.

Független idézők száma: 1.

Brochot, C., Tóth, J.; Bois, F.: Lumping in pharmacokinetics, *Journal of Pharmacokinetics and Pharmacodynamics*, **32** (5-6) (2005), 719-736.

1. Dokoumetzidis, A.; Aarons, L.: Proper lumping in systems biology models, *IET SYSTEMS BIOLOGY* **3** (1), 40–51.
2. Horváth, Zs.: Effect of lumping on controllability and observability, *Journal of Mathematical Chemistry* (2008).
3. Hui, J.; Lin, D.: The best scheme of dosage on multiple and rapid vein injection, *Journal of Biological Systems* **15** (3) (2007), 355–364.
4. von Kleist, M.; Huisinga, W.: Physiologically based pharmacokinetic modelling: a sub-compartmentalized model of tissue distribution, *Journal of Pharmacokinetics and Pharmacodynamics* **34** (6) (2007), 789–806.
5. Nestorov, I.: Whole-body physiologically based pharmacokinetic models, *Expert Opinion on Drug Metabolism and Toxicology* **3** (2) (2007), 235–249.
6. Wilkinson, S. J.; Benson, N.; Kell, D. B.: Proximate parameter tuning for biochemical networks with uncertain kinetic parameters, *Molecular Biosystems* **4** (1) (2008), 74–97.

Független idézők száma: 6.

Császár, A.; Érdi, P.; Jicsinszky, L.; Tóth, J.; Turányi, T.: Several exact results on deterministic exotic kinetics, *Zeitschrift für Physikalische Chemie, Leipzig* **264** (1983), 449–463.

1. Erle, D.: Nonoscillation in closed reversible chemical systems, *Journal of Mathematical Chemistry* **27** (4) (2000), 293–302.
2. Kowalski, K.: Hilbert space description of classical dynamical systems 1., *Physica A* **145** (3) (1987), 408–424.
3. Kowalski, K.: Dynamics of the Adair model for ligand-receptor binding, *Mathematical Biosciences* **97** (2) (1989), 137–144.

Független idézők száma: 3.

Csermely P., Gergely P., Koltay T., Tóth J.: *Kutatás és közlés a természettudományokban*, Osiris, Budapest, 1999, 318 p.

1. *Könyvtárak állománygyarapítási tanácsadója* (9913005) 1999/13. 6–7.
2. Az MTA Doktora cím feltételrendszere az MTA Orvos Tudományok Osztályánál pályázók részére, *MO-TESZ magazin*, (2000) (4) 46–48.
3. Beck M.: Csermely Péter, Gergely Pál, Koltay Tibor és Tóth János: *Kutatás és közlés a természettudományokban*, *Magyar Tudomány* 2000/1. 121–122.
4. Fóris Ágota: *Kutatásról nyelvészeknek* Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2008.
5. Kurtán Zsuzsa: *Szakmai nyelvhasználat*, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2003.
6. Papp Z.: A tudományos teljesítmény mérésének problémáiról, *Magyar Tudomány* **110** (2004) 232–240.
7. Sándori Zsuzsanna: *Kutatás és közlés a természettudományokban*, *Könyvtári Levelező/lap* kötet??? év??? 36–37.
8. Szabó G. T.: Ezredvégi kézikönyv jövődjé kutatóknak (a zsenik kivételével!), *Könyvtári figyelő* **45** (3) (1999) 625–630.

Független idézők száma: 8.

Deák J.; Tóth, J.; Vizvári, B.: Anyagmegmaradás összetett kémiai mechanizmusokban, *Alkalmazott Matematikai Lapok* **16** (1/2) (1992), 73–97.

1. Farkas, Gy.: Local controllability of reactions, *Journal of Mathematical Chemistry* **24** (1/3) (1998), 1–14.
2. Farkas, Gy.: On local observability of chemical systems, *Journal of Mathematical Chemistry* **24** (1/3) (1998), 15–22.

Független idézők száma: 2.

Érdi, P.; Gröbler, T.; Tóth, J.: On the classification of some classification problems, In: *Proceedings of the International Symposium on Information Physics*, Kyushu Institute of Technology, (Iizuka, Japan, Fukuoka, 1993), pp. 110–117.

1. Független idézők száma: 0.

Érdi, P.; Kiss, T.; Tóth, J.; Ujfalussy, B.; Zalányi, L.: From Systems Biology to dynamical neuropharmacology: Proposal for a new methodology, *Systems Biology, IEE Proceedings*, **153** (4), 299–308 (2006).

1. Julius, A. A.; Halasz, A. A.; Sakar, M. S.; Rubin, H. H.; Kumar, V.; Pappas, G. J.: Stochastic modeling and control of biological systems: The Lactose Regulation System of Escherichia coli, *IEEE Transactions on Circuits and Systems I: Fundamental Theory and Applications*, Accepted for future publication First Published: 2008-06-10 Digital Object Identifier: 10.1109/TCSI.2007.911346
2. Julius, A. A.; Sakar, M. S.; Bemporad, A.; Pappas, G. J.: Hybrid model predictive control of induction of Escherichia coli, This paper appears in: *Decision and Control, 2007 46th IEEE Conference on Publication Date: 12–14 Dec. 2007 On page(s): 3913–3918 Digital Object Identifier: 10.1109/CDC.2007.4434840 Current Version Published: 2008-01-21*
3. Norton, S.: Systems Biology and Galen: A historical look at combination drug therapy around the world, *Pharmacology International* **67** (2006) 14–20.
4. Anonymous: *Pharmacology International* **67** (December 2006).

Független idézők száma: 4.

Érdi, P.; Ropolyi, L.; Tóth, J.: *An alternative hypothesis for the explanation of the miniature end-plate potentials: The "Quantal Cleft Process"*, Budapest, 1977.

1. Független idézők száma: 0.

Érdi P.; Sipos T.; Tóth J.: Összetett kémiai reakciók sztochasztikus szimulálása számítógéppel, *Magyar Kémiai Folyóirat* **79** (3) (1973), 97–108.

1. Benedek P.; Váczi P.: Reakciókinetika. Differenciálegyenletek, *Magyar Kémikusok Lapja* **28** (1973), 623–632.
2. Pintácsi I.; Siegler G.; Zsakó L.: Szimulációs modellek a kémiában, *Mikrológia* **15** (1994), 1–68.

Független idézők száma: 2.

Érdi P.; Tóth J.: A kémiai reakció termodinamikájának sztochasztikus formulázásáról, In *A kémia újabb eredményei*, (Csákvári B. szerk.), **31** Akadémiai Kiadó, Budapest, 1976, pp. 177–298.

1. Holderith J.: A kémia újabb eredményei 31 (Recenzió), *Magyar Kémikusok Lapja* **32** (5) (1977), 244–245.
2. Póta, G.; Stedman, G.: Exotic behaviour of chemically reacting systems, *Acta Chimica Hungarica—Models in Chemistry* **131**(2) (1994), 229–268.
3. Póta Gy.: *Oscilláció, oligooscilláció, autokatalízis és kémiai hullámok*, (Kandidátusi értekezés), KLTE Fizikai-Kémiai Tanszék, Debrecen, 1992.
4. Veress G.: A kémia újabb eredményei 31 (Recenzió), *Magyar Kémiai Folyóirat* **84** (1978), 44 p.

Független idézők száma: 4.

Érdi, P.; Tóth, J.: Stochastic reaction kinetics: "Nonequilibrium thermodynamics" of the state space?, *Reaction Kinetics and Catalysis Letters* **4** (1) (1976), 81–85.

1. Réti, P.; Ropolyi, L.: On the geometrical structure of equilibrium chemical systems. Utilization of analogies between point mechanics and reaction kinetics, *Il Nuovo Cimento B* **94** (1) (1986), 16–28.

Független idézők száma: 1.

Érdi P.; Tóth J.: A kémiai reakciókinetika fluktuáció-disszipáció tételéről, II. Gyakorlati megjegyzések, *Magyar Kémiai Folyóirat* **83** (1) (1977), 50–51.

1. Független idézők száma: 0.

Érdi, P.; Tóth, J.: Some comments on Prigogine's theories, *Reaction Kinetics and Catalysis Letters* **11** (4) (1979), 371–375.

1. Gabrielli C.; Huet, T., Keddam, M.: Fluctuations in electrochemical systems, 1. General theory on diffusion-limited electrochemical reactions, *Journal of Chemical Physics* **99** (9) (1993), 7232–7239.

Független idézők száma: 1.

Érdi, P.; Tóth, J.: Oscillatory phenomena at the synapse, In: *Advances in Physiological Sciences*, (Satellite Conference to the XXVIII International Congress of Physiological Sciences, Budapest, July 13–19, 1980) Mathematical and Computational Methods in Physiology (L. Fedina, B. Kanyár, B. Kocsis, M. Kollai eds.), **34** Pergamon Press – Akadémiai Kiadó, Budapest, 1981, pp. 113–121.

1. Kostova, T. V.; Markov, S. M.: A model of synaptic transmission. I. Philosophy and construction, In: *Dynamic Phenomena in Neurochemistry and Neurophysics: Theoretical Aspects*, (Extended abstracts of the papers presented on the Workshop held at Budapest, Budapest, Aug. 21–23, 1984) (P. Érdi ed.), MTA KFKI, Budapest, 1985, pp. 44–47.

Független idézők száma: 1.

Érdi, P.; Tóth, J.: Anomalous stochastic kinetics, In: *Chemical reactivity in liquids. Fundamental aspects*, (Paris, Sept. 7–11 1987) (M. Moreau, and P. Turq, eds.), Plenum Press, New York and London, 1988, pp. 511–516.

1. Független idézők száma: 0.

Érdi, P.; Tóth, J.: *Mathematical Models of Chemical Reactions. Theory and Applications of Deterministic and Stochastic Models*, Manchester University Press – Princeton University Press, Manchester – Princeton, 1989.

1. *Academy Update* (New York Academy of Sciences Newsletter) (July–September 1997), 7.
2. B., N. V.: (Review) *Реферативный Журнал* **8.68.7 К**.
3. Dorninger, D.: Review, *Zentralblatt für Mathematik* **696** 509 p.
4. Horsthemke, W.: (recenzió)
5. Pilling, M. J.: Book review, *Journal of Photochemistry and Photobiology, A: Chemistry* **49** (1989), 409–411.
6. S., K.: In: Telegraphic Reviews (ed. Steen, L. A.) *The American Mathematical Monthly* **98** (1) (1991), 75–86.
7. Schiffmann, Y.: Review, *Mathematical Review* **90h:92037**.
8. Seitz W. A.: Short review, *Intl. Soc. Math. Chem. Newsletter* **7** (1989), 6 p.
9. Slutsky, B.: Review, *The New York Public Library, New Technical Books* **74**
10. Aittokallio, T.; Gyllenberg, M.; Polo, O.; Virkki, A.: Parameter estimation of a respiratory control model from noninvasive carbon dioxide measurements during sleep, *Math. Med. Biol.* **24** (2007) 225–249.
11. Aittokallio, T.; Gyllenberg, M.; Polo, O.; Toivonen, J.; Virkki, A.: Model-based analysis of mechanisms responsible for sleep-induced carbon dioxide differences, *Bulletin of Mathematical Biology* **68** (2006), 315–341.

12. Andricevic, R.; Foufoula-Georgiou, E.: Modeling kinetic non-equilibrium using the first two moments of the residence time distribution, *Stoch. Hydrol. Hydraul.* **5** (2) (1991), 155–171.
13. Araujo, M.; Havlin, S.; Larralde, H.; Stanley, H. E.: "Random-force-dominated" reaction kinetics: Reactants moving under random forces, *Phys. Rev. Lett.* **68** (12) (1992), 1791–1794.
14. Assadulli, R. M.: *Acta Chimica Hungarica – Models in Chemistry* **133** (1996), 107–.
15. Baake, E.; Baake, M.; Bock, H. G.; Briggs, K. M.: Fitting ordinary differential equations to chaotic data, *Physical Review A* **45A** (8) (1992), 5524–5529.
16. Banaji, M.: Monotonicity in chemical reaction systems, *Dynamical Systems* **24** (1) (2009), 1–30.
17. Banaji, M.; Donnell, P.; Baigen, T. S.: P matrix properties, injectivity, and stability in chemical reaction systems, *SIAM J. Appl. Math.* **67** (6) (2007), 1523–1547.
18. Becskei, A.; Kaufmann, B. B.; van Oudenaarden, A.: Contributions of low molecule number and chromosomal positioning to stochastic gene expression, *Nature Genetics* **37** (9) (2005), 937–944.
19. Bernstein, D. S.; Bhat, S. P.: Nonnegativity, reducibility, and semistability of mass action kinetics, Proc. of 38th IEEE Conf. Decision & Control, Phoenix, Arizona, USA, December 1999, pp. 2206–2211.
20. Bernstein, D. S.; Bhat, S. P.: Energy equipartition and the emergence of damping in lossless systems, Proceedings of 41st IEEE CDC, Las Vegas, 2002.
21. Bertolazzi E.: Positive and conservative schemes for mass action kinetics, *Comput. Math.* **32** (1996), 29–43.
22. Bhat, S. P.; Bernstein, D. S.: Lyapunov analysis of semistability, Proceedings of the American Control Conference San Diego, California June 1999.
23. Bhat, S. P.; Bernstein, D. S.: Nontangency-based Lyapunov tests for stability and convergence, Proceedings of the American Control Conference, Arlington, VA, June 2001, pp. 4840–4845.
24. Bhat, S. P.; Bernstein, D. S.: Nontangency-based Lyapunov tests for stability and convergence, *SIAM Journal on Control and Optimization* **42** (5) (2003), 1745–1775.
25. Blanchard, G.: *Modélisations déterministe et stochastique d'un apprentissage élémentaire*, DEA, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI, 1995.
26. Borisyuk, R.: Encyclopedia of computational neuroscience: The end of the second millennium, *Behavioral Brain Science* **23** (2000), 534–535.
27. Bothe, D.: Instantaneous limits of reversible chemical reactions in presence of macroscopic convection, *J. Differential Equations* **193** (2003) (1), 27–48.
28. Bothe, D.; Hilhorst, D.: A reaction-diffusion system with fast reversible reaction, *J. Math. Anal. Appl.* **286** (1) (2003), 125–135.
29. Brenner, D. J.; Sachs, R. K.: Generalised microdosimetric calculations of cell-to-cell variance, *Radiation Protection Dosimetry* **52** (1994), 21–24.
30. Bunge, J.; Epstein, S. S.; Peterson, D. G.: Comment on "Computational improvements reveal great bacterial diversity and high metal toxicity in soil", *Science* **313** (5789) (2006), 918.
31. Cabaniss, S. E.; Madey, G.; Leff, L.; Maurice, P. A.; Wetzel, R.: A stochastic model for the synthesis and degradation of natural organic matter. Part I. Data structures and reaction kinetics, *Biogeochemistry*, **76** (2005), 319–347.

An alternative and equally correct simulation of reaction kinetics treats the system as a set of individual molecules with reaction probabilities P (Érdi and Tóth 1989).

32. Calder, M. S.: *Stability of acyclic and mutually reversible chemical networks*, University of Waterloo, 2005.
33. Campbell, J. D.; Harrington, D. A.; Driessche, P., van den; Watmough, J.: Stability of surface mechanisms with three species and mass-action kinetics, *Journal of Mathematical Chemistry* **32** (3) (2002), 281–301.

34. Caputo, M. C.; Vasseur, A.: Global regularity of solutions to systems of reaction-diffusion with sub-quadratic growth in any dimension, http://arxiv.org/PS_cache/arxiv/pdf/0901/0901.4359v1.pdf
35. Craciun, G.; Pantea, C.; Rempala, G. A.: A dimension reduction method for inferring biochemical networks, http://arxiv.org/PS_cache/arxiv/pdf/0902/0902.4417v1.pdf
36. Craciun, G.; Pantea, C.; Rempala, G. A.: Algebraic methods for inferring biochemical networks: a maximum likelihood approach, http://arxiv.org/PS_cache/arxiv/pdf/0810/0810.0561v2.pdf
37. Chen, L.; Bastin, G.: Structural identifiability of the yield coefficient in bioprocess models when the reaction-rates are unknown, *Math. Biosci.* **132** (1) (1996), 35–67.
38. Childs, B.; Osborne, M.: Fitting solutions of ordinary differential equations to observed data, *Computational Techniques and Applications '95*, (editors R. L. May and A. K. Easton), World Scientific, pp. 193–198.
39. Chipot, M.; Hilhorst, D.; Kinderlehrer, D.; Olech, M.: Contraction in L^1 and large time behavior for a system arising in chemical reactions and molecular motors, arXiv:0808.0250 (August 2008).
40. Craciun, G.; Feinberg, M.: Multiple equilibria in complex chemical reaction networks: extensions to entrapped species models, *IEE Proc.—Syst. Biol.* **153** (4) (2006), 179–186.
41. Crampin, E. J.; McSharry, P. E.; Schnell, S.: Extracting biochemical reaction kinetics from time series data, *Lecture Notes in Computer Science* **3214** (2004), 329–336.
42. Crampin, E. J.; Schnell, S.; McSharry, P. E.: Mathematical and computational techniques to deduce complex biochemical reaction mechanisms, *Progress in Biophysics and Molecular Biology*, **86** (2004), 77–112.
43. Čupić, Ž.: Stehiometrijska mrežna analiza autokatalatora, *Nauka, tehnika, bezbednost* **11** (2) (2001), 29–37. (In Serbian).
44. Čupić, Ž.; Anić, S. R.: Terorizam u svetlu nelinearnih nauka-stehiometrijska mrežna analiza populacionih procesa, *Nauka, tehnika, bezbednost* **13** (2) (2003), 39–49. (In Serbian).
45. Desvillettes, L.; Fellner, K.: Exponential decay toward equilibrium via entropy methods for reaction-diffusion equations, *Journal of Mathematical Analysis and Applications* **319** (1) (2006), 157–176
46. Dittrich, P.; di Fenizio, P. S.: Chemical Organisation Theory, *Bulletin of Mathematical Biology* **69** (4) (2007), 1199–1231.
47. Dončić, A.: Simulating intracellular stochastic reaction-diffusion systems, MSc Thesis, not before 2003.

We recommend [Kampen, 2001] to the interested reader but [Érdi & Tóth, 1989], [Keizer, 1987] and [Nicolis & Prigogine, 1977] are also good choices.
48. Druska, C.; Dickhaus, Th.; Meyer, W.: Statistische Verfahren zur Datenvorauswertung, In: *GALA Grünenthal Applied Life Science Analysis*, (eds. A. Kless, J. Grotendorst), John von Neumann-Institut für Computing (NIC)-Serie, Band **30**, pp. 23–106.
49. Du, Jianfeng: *Modeling and optimal control of Escherichia coli genetic circuits with intrinsic stochasticity*, Thesis, University of Maryland (College Park, Md.), 2006.
50. Elf, J.: *Intracellular flows and fluctuations*, PhD Thesis, Uppsala University, 2004.
51. Elf, J.; Lötstedt, P.; Sjöberg, P.: Problems in high dimension in molecular biology, Proceedings of the 17th GAMM-Seminar, Leipzig, 2001, pp. 1–10.
52. Elf, J.; Paulsson, J.; Berg, O.; Ehrenberg, M.: Mesoscopic kinetics and its applications in protein synthesis, In: *Topics in Current Genetics: Systems Biology: Definitions and Perspectives*, (Alberghina, L.; Westerhoff, H. V. eds.), Springer Verlag, **13** (2005), pp. 95–118.
53. Even, U.: Time evolution of very high Rydberg states of large aromatic molecules. A kinetic analysis *Chem. Phys. Lett.* **210** (4-6) (1993), 416–422.
54. Eymard, R.; Hilhorst, D.; Olech, M.: Numerical approximation of a reaction-diffusion system with fast reversible reaction, http://arxiv.org/PS_cache/arxiv/pdf/0808/0808.0251v1.pdf

55. Fairén, V.; Hernández-Bermejo, B.: Mass action law conjugate representation for general chemical mechanisms, *Journal of Physical Chemistry* **100** (44) (1996), 19023–19028.
56. Fan, L. T.; Shen, B. C.; Chou, S. T.: The surface renewal theory of interphase transport: A stochastic treatment, *Chemical Engineering Science* **48** (1993), 3971–3982.
57. Farkas, Gy.: Local controllability of reactions, *Journal of Mathematical Chemistry* **24** (1/3) (1998), 1–14.
58. Farkas, Gy.: On local observability of chemical systems, *Journal of Mathematical Chemistry* **24** (1/3) (1998), 15–22.
59. Farkas, H.: *Evolúció és viselkedéstípusok kémiai és fizikai rendszerekben*, (Doktori értekezés) Budapest, 1992.
60. Farkas, H.; Noszticzius, Z.: Explosive, conservative and dissipative systems, In *Nonequilibrium Thermodynamics*, *Adv. in Thermodynamics Series*, (S. Sieniutycz and P. Salamon eds.), 1990.
61. Fedotov, S. P.; Tretyakov, M. V.: Stochastic criteria for ignition of single particles, *Combustion Science and Technology* **78** (1-3) (1991), 1–6.
62. Feres, R.: Reaction-diffusion analysis, Math 350, Department of Mathematics, www.math.wustl.edu/feres/Reactions.pdf
63. Frankowicz, M.: Synergetic aspects of chemical kinetics, In *Complex Systems in Natural and Economic Sciences*. Proceedings of the Workshop Methods of Non-Equilibrium Processes and Thermodynamics in Economics and Environment Sciences. (19–22 1995 Mátrafüred, Hungary.) (K. Martinás and M. Moreau eds.), 1996, pp. 95–104.
64. Friedman, A.; Ross, D. S.; Zhang, J.: A Stefan problem for a reaction-diffusion system, *SIAM J. Math. Anal.* **26** (1995), 1089–1122.
65. Gadgil, Ch. J.: Size-independent differences between the mean of discrete stochastic systems and the corresponding continuous deterministic systems, arxiv.org/pdf/0801.0277
66. Galligani, E.: Operator splitting methods for solving semidiscrete nonlinear diffusion problems, *Quaderni di Dipartimento* **62** (2005), 1–13.
67. Goss, P. J. E.; Peccoud, J.: Quantitative modeling of stochastic systems in molecular biology using stochastic Petri Nets, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **95** (1998), 6750–6755.
68. Goudon, Th.; Vasseur, A.: Regularity analysis for systems of reaction-diffusion equations, *Preprint* <http://www.ma.utexas.edu/users/vasseur/publications.html>
69. Haddad, W. M.; Chellaboina, V.; Hui, Q.; Nersesov, S.: Vector dissipativity theory for large-scale impulsive dynamical systems, *Mathematical Problems in Engineering* **3** (2004) 225–262.
70. Hahnfeldt, P.; Sachs, R. K.; Hlatky, L. R.: Evolution of DNA damage in irradiated cells, *Journal of Mathematical Biology* **30** (5) (1992), 493–511.
71. Harrington, D. A.; van den Driessche, P.: Stability and electrochemical impedance of mechanisms with a single adsorbed species, *Journal of Electroanalytical Chemistry*, **501** (1) (2001) 222–234 (13).
72. Hernandez, L. R.: *Stochastische Modellierung der Nanopartikelbildung in Mikroemulsionen*, Dissertation (Doktor der Ingenieurwissenschaften), Fakultät II - Fachgruppe Chemie - der Technischen Universität Berlin, 2002.
73. Heuett, W. J.; Qian, H.: Combining flux and energy balance analysis to model large-scale biochemical networks, *J. Bioinform. Comput. Biol.* **4** (6) (2006), 1227–1243.
74. Hewitt, C. G.; Wainwright, G.: Dynamic systems approach to tilted Bianchi cosmologies – Irrotational models of type V *Physical Review D* **46D** (10) (1992), 4242–4252. (30 ref.)
75. Holmes, M. H.; Bell, J.: The application of symbolic computing to chemical kinetic reaction schemes, *Journal of Computational Chemistry* **12** (10) (1991), 1223–1231.

76. Huang, Y.: Infrastructure, query optimization, data warehousing and data mining for scientific simulation, MSc Thesis, University of Notre Dame, Notre Dame, IN, 2002.
77. Jacob, Ch.; Breton, N.; Daegelen, P.; Peccoud, J.: Probability distribution of the chemical states of a closed system and thermodynamic law of mass action from kinetics. The RNA example, *Journal of Chemical Physics* **107** (1997), 2913–.
78. Kampis Gy.: Az elme dinamikus modelljei, In: (Gervain, J. és Pléh. Cs. szerk.) *A megismerés vizsgálata*, Osiris-Láthatatlan Kollégium, Budapest, 2001.
79. Khan, S.; Makkena, R.; McGeary, F.; Decker, K.; Gillis, W.; Schmidt, C.: A multi-agent system for the quantitative simulation of biological networks AAMAS '03, July 14–18, 2003, Melbourne, Australia.
- The division of a cell into multiple compartments further weakens the assumption of continuously variable concentration. Fluctuations which can arise from the inherent stochastic nature of physical systems, can be amplified and cause observable, macroscopic effects [7] when a system performs close to unstable inequilibrium.
80. Koch, E.: The theorem of common kinetic runs in homogeneous nonisothermal reaction kinetics, *Journal of Thermal Analysis* **38** (7) (1992), 1653–1669. (53 ref.)
81. Kuchanov, S. I.: Kinetics and statistics of reactions on macromolecules, In: *Mathematical Methods in Contemporary Chemistry*, Ed. S. Kuchanov, Gordon Breach, 1996, Chapter 5.
82. Kuepfer, L.; Sauer, U.: Modelling gene expression using stochastic simulation, In: *Multiscale Modelling And Simulation*, Attinger, S. (ed.), Springer Verlag, 2004, pp. 259–268.
83. Laios, I. D.; Pardue, H. L.: Kinetic study of the reaction of acetoacetate with glycine and sodium nitroprusside, *Analytical chemistry* **65** (1414) (1993), 1903–1909.
84. Lawunmi, D.: Extracting useful information from noisy exponentially decaying signal, 2005, <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0408044>
85. Lente, G.: Homogeneous chiral autocatalysis: A simple, purely stochastic kinetic model, *Journal of Physical Chemistry A* **108** (44)(2004), 9475–9478.
86. Lente, G.: Stochastic kinetic models of chiral autocatalysis: A general tool for the quantitative interpretation of total asymmetric synthesis, *Journal of Physical Chemistry* (2005) **109** (48) (2005), 11058–11063.
87. Lente, G.: The effect of parity violation on kinetic models of enantioselective autocatalysis, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **9** (2007), 6134–6141.
88. Leonard, D.; Reichl, L. E.: Stochastic analysis of a driven chemical reaction, *Journal of Chemical Physics* **92** (10) (1990), 6004–6010.
89. Lewontin, R. C.; Goss, P. J. E.: Developmental canalization, stochasticity and robustness, in: *Robust design: A repertoire of biological, ecological, and Engineering case studies* (Ed. Erica Jen), Oxford University Press, Oxford, 2005, pp. 21–44.
90. Li, H. Y.: Determination of multiple steady states in a family of allosteric models for glycolysis, *Journal of Chemical Physics* **109** (19) (1998), 8485–8493.
91. Li, H. Y.: Zero eigenvalue analysis for the determination of multiple steady states in reaction networks, *Z. Naturforsch.* **A53** (3/4) (1998), 171–177.
92. Lin, L.: *Stochastic Models of Gene Expression*, MSc Thesis, Dept. Math. Univ. South Carolina, 2005.
93. Lipkowitz, K. B.; Boyd, D. B.: Books published on the topics of computational chemistry, In: *Reviews in Computational Chemistry*, Volume 17 (eds. Lipkowitz, K. B.; Boyd, D. B.), Wiley, New York, 255–357.
94. Matolcsi, T.: On the dynamics of phase transitions, *Z. angewandte Math. Phys.* **47** (1996), 858–879.
95. Matolcsi, T.: On the mathematical structure of thermodynamics, *J. Math. Phys.* **41** (4) (2000), 2021–2042.

96. Mavelli, F.; Maestro, M.: Stochastic simulations of micellization kinetics, *Journal of Chemical Physics* **111** (9) (1999), 4310–4318.
97. Mavelli, F.; Piotto, S.; Fisciano, S. A.: Stochastic simulations of homogeneous chemically reacting systems, *Journal of Molecular Structure. Theochem* **771** (2006), 55–64.
98. Mincheva, M.; Siegel, D.: Stability of mass action reaction-diffusion systems, *Nonlinear Analysis* **56** (8) (2004), 1105–1131.
99. Mincheva, M.; Siegel, D.: Nonnegativity and positiveness of solutions to mass action reaction-diffusion systems, *Journal of Mathematical Chemistry* **42** (4) (2007), 1135–1145.
100. Mitrophanov, A. Y.; Groisman, E. A.: Positive feedback in cellular control systems, *BioEssays* **30** (6) (2008), 542–555.
101. Ng, T. W.; Wilkinson, D. J.; Boys, R. J.; Kirkwood, T. B. L.: Stochastic modelling of gene regulatory networks, *Statistics Preprint STA04* (2004)
102. Oancea, I.; Topological analysis of metabolic and regulatory networks by decomposition methods, PhD Thesis, Humboldt-Universität zu Berlin, 2003.
103. Okino, M. S.; Mavrovouniotis M. L.: Simplification of mathematical models of chemical reaction systems – Review, *Chem. Rev.* **98** (2) (1998), 391–408.
104. Okino, M. S.; Mavrovouniotis M. L.: Simplification reaction systems by time scale analysis, *Chem. Eng. Comm.* **176** (1999), 115–131.
105. Orlov, V. N.; Berry, R. S.: Power and efficiency limits for internal combustion engines via methods of finite-time thermodynamics, *J. Applied Phys.* **74** (6) (1993), 4317–4322.
106. Pahle, J.; Green, A. K.; Dixon, C. J.; Kummer, U.: Information transfer in signaling pathways: A study using coupled simulated and experimental data, *BMC Bioinformatics* **9** (2008), 139, 14 pages.
107. Pahle, J.: Stochastic simulation and analysis of biochemical networks, DISSERTATION zur Erlangung des akademischen Grades doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.) im Fach Biophysik eingereicht an der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I Humboldt-Universität zu Berlin, 31. März 2008.
108. Pahle, J.: Biochemical simulations: stochastic, approximate stochastic and hybrid approaches, *Briefings in Bioinformatics*, **10** (1) (2009), 53–64.
109. Pantea, C.; Craciun G.: Identifiability of mass action chemical reaction networks, <http://www.math.wisc.edu/~pantea/pdf/poster.pdf>
110. Papp, D.; Vizvári, B.: Effective solution of linear Diophantine equation systems with an application in chemistry, *Journal of Mathematical Chemistry* **39** (1) (2005), 15–31.
111. Parthasarathy, P. R.: The transient solution of a local-jump heterogeneous chain of diatomic systems. *J. Phys. A: Math. Gen.* **31** (1998), 6579–6588.
112. Parthasarathy, P. R.; Dharmaraja, S.: Exact transient solution of kinetics of first order reactions with end effects, *J. Math. Chem* **25** (2/3) (1999), 281–294.
113. Peccoud, J.; Jacob, C.: Theoretical uncertainty of measurements using quantitative polymerase chain reaction, *Biophys. J.* **71** (1996), 101–108.
114. Peccoud, J.; Velden, K. V.; Podlich, D.; Winkler, C.; Arthur, L.; Cooper, M.: The selective values of alleles in a molecular network model are context dependent, *Genetics* **166** (2004), 1715–1725.
115. Percus, J. K.: Small population effects in stochastic population dynamics, *Bulletin of Mathematical Biology* **67** (6) (2005), 1173–1194.
116. Pick, M.; Pousin, J.: Resolution of the Transport equation subject to constraint, *Journal of Computational and Applied Mathematics* **218** (2) (2008), 364–375.

117. Póta Gy.: *Oszcilláció, oligooszcilláció, autokatalízis és kémiai hullámok*, (Kandidátusi értekezés), KLTE Fizikai-Kémiai Tanszék, Debrecen, 1992.
118. Póta, G.; Stedman, G.: Exotic behaviour of chemically reacting systems, *Acta Chimica Hungarica—Models in Chemistry* **131**(2) (1994), 229–268.
119. de Queiroz, M. S.; Waldrop, G. L.: Modeling and numerical simulation of biotin carboxylase kinetics: Implications for half-sites reactivity, *Journal of Theoretical Biology* **246** (1) (2007), 167–175.
120. Radivoyevitch T.; Hoel, D. G.; Chen, A M.; Sachs, R. K.: Misrejoining of double-strand breaks after X-irradiation relating moderate to very high doses by a Markov model, *Radiat. Res.* **149** (1) (1998), 59–67.
121. Ramasami, P.: A concise description of an old problem: Application of matrices to obtain the balancing coefficient of chemical equations, *Journal of Mathematical Chemistry* **34** (1–2) (2003), 123–129.
122. Reis, T.: Consistent initialization and perturbation analysis for abstract differential-algebraic equations, *Math. Control Signals Syst.* **19** (2007), 255–281.
123. Sachs, R. K.; Chen, P.; Hahnfeldt, P.; Lai, D.; Hlatky, L. R.: DNA damage in non-proliferating cells subjected to ionizing irradiation at high or low dose rates, *Journal of Mathematical Biology* **31** (1993), 291–315.
124. Sachs, R. K.; Chen, P.-L.; Hahnfeldt, P. J.; Hlatky, L. R.: DNA damage caused by ionizing radiation, *Mathematical Biosciences* **112** (1992), 271–303.
125. Sachs, R. K.; Hahnfeldt, P.; Brenner, D. J.: Review: The link between low-LET dose-response relations and the underlying kinetics of damage production/repair/misrepair. *International Journal of Radiation Biology* **72** (1997), 351–374.
126. Santini, C. C.: Engineering a robust and adaptive artificial system through self-organisation and synchronisation, Department of Electronics, University of York, Submitted for the degree of Doctor of Philosophy July 27, 2007. <http://www.idi.ntnu.no/~csantini/files/santiniPhDthesis.pdf>
127. Sachs, R. K.; Levy, D.; Hahnfeldt, P.; Hlatky, L.: Quantitative analysis of radiation-induced chromosome aberrations, *Cytogenetic and Genome Research*, **204** (1-4) (2004), 142–148.
128. Savageau, M. A.: A critique of the enzymologist's test tube. In: *Fundamentals of Medical Cell Biology* (Bittar, E. E. ed.), Vol. 3a. Academic Press, New York, 1992, pp. 45–108.
129. Savageau, M.: Influence of fractal kinetics on molecular recognition, *Journal of Molecular Recognition* **6** (4) (1993), 149–157.
130. Savageau, M.: Enzyme kinetics *in vitro* and *in vivo*: Michaelis–Menten revisited, In: *Cell Chemistry and Physiology: Part I*, (Bittar, E. E. and Bittar, N. eds.), *Principles of Medical Biology*, Elsevier, 1996. pp. 93–146.

For further information on the mathematical treatment of chemical kinetics, see the thoughtful monograph by Érdi and Tóth (1989).
131. Savageau, M. A.: Development of fractal kinetic theory for enzyme-catalysed reactions and implications for the design of biochemical pathways, *Biosystems* **47** (1998), 9–36.
132. Schneider, K. R.; Wilhelm, T.: Model reduction by extended quasy-steady-state-assumption, *Journal of Mathematical Biology* **40** (5) (2000), 443–450.
133. Schnell, S.; Chappell, M. J.; Evans, N. D.; Roussel, M. R.: The mechanism distinguishability problem in biochemical kinetics: The single-enzyme, single-substrate reaction as a case study, *Comptes Rendus Biologies* **329** (1) (2006), 51–61.
134. Schuppert, A.: New approaches to data-oriented reaction modelling, 3rd Workshop on Modelling of Chemical Reaction Systems, July 24–26, 1996, Heidelberg, Germany.
135. Schuster, S.: Use and limitations of modular metabolic control analysis in medicine and biotechnology, *Journal of Physical Chemistry* **99** (1995), 8017–8023.

136. Schuster, S.: Studies on the stoichiometric structure of enzymatic reaction systems, *Theory in Biosciences* **118** (2) (1999), 125–139.
137. Schuster, S.; Höfer, T.: Determining all extreme semi-positive conservation relations in chemical-reaction systems — A test criterion for conservativity, *Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions* **87** (16) (1991), 2561–2566.
138. Schuster, S.; Pfeiffer, T.; Moldenhauer, F.; Koch, I.; Dandekar, T.: Exploring the pathway structure of metabolism: decomposition into subnetworks and application to *Mycoplasma pneumoniae*, *Bioinformatics* **18** (2) (2002), 351–361.
139. Scott, K. S.: *Chemical Chaos*, Oxford University Press, Oxford, 1991.
140. Siegel, D.; MacLean, D.: Global stability of complex balanced mechanisms, *Journal of Mathematical Chemistry* **27** (1/2) (2000), 89–110.
141. Siegel, D.; Johnston, M. D.: Linearization of complex balanced chemical reaction systems, <http://www.math.uwaterloo.ca/~mdjohnst/may16.pdf>
142. Siegel, D.; MacLean, D.; Johnston, M. D.: Reducible mass-action chemical kinetics systems, <http://www.math.uwaterloo.ca/~mdjohnst/jan08.pdf>.
143. Simon P. L.: Globally attracting domains in two-dimensional reversible chemical dynamical systems, *Annales Univ. Sci. Budapest, Sect. Comp.* **15** (1995), 179–200.
144. Sjöberg, P.: *Numerical Solution of the Fokker-Planck Approximation of the Chemical Master Equation*, IT Licentiate theses, UPPSALA UNIVERSITY, Department of Information Technology, 2005.
145. Sjöberg, P.; Lötstedt, P.; Elf, J.: Fokker–Planck approximation of the master equation in molecular biology, *Technical Reports from the Department of Information Technology*; 2005-044 és: *Computing and Visualization in Science* 10.1007/s00791-006-0045-6 **12** (1) (2009), 37–50.
146. Soloveichik, D.: *Molecules Computing: Self-Assembled Nanostructures, Molecular Automata, and Chemical Reaction Networks*, Ph D Thesis, California Institute of Technology Pasadena, California, 2008.
147. Soloveichik, D.: Robust stochastic chemical reaction networks and bounded Tau-leaping, arXiv:0803.1030v2 [cs.CC]
148. Soloveichik, D.; Cook, M.; Winfree, E.; Bruck, S.: Computation with finite stochastic chemical reaction networks, *Natural Computing* **7** (4) (2008), 615–633.
149. Šolc, M.: A stochastic model of chemical equilibrium – Case study of the reversible first order reaction, *ACH – Models in Chemistry* **136** (5-6) (1999), 647–661.
150. Šolc, M.: A stochastic model of chemical equilibrium in a system where the 2-stage consecutive reversible reaction takes place, *ACH – Models in Chemistry* **137** (4) (2000), 547–560.
151. Solc, M.: Stochastic model of the n-stage reversible first-order reaction: Relation between the time of first passage to the most probable microstate and the mean equilibrium fluctuations lifetime, *Zeitschrift für Physikalische Chemie* **216** (7) (2002), 869–893.
152. Srivastava, R.; Peterson, M. S.; Bentley, W. E.: Stochastic kinetic analysis of the Escherichia coli stress circuit using 32-targeted antisense, *Biotechnology and Bioengineering* **75** (1) (2001), 120–129.
153. Srivastava, R.; You, L.; Summers, J.; Yin, J.: Stochastic vs. deterministic modeling of intracellular viral kinetics, *Journal of Theoretical Biology* **218** (3) (2002), 309–321.
154. Szederkényi, G.: Computing sparse and dense realizations fo reaction kinetic systems, *Journal of Mathematical Chemistry* () (2009), -. DOI 10.1007/s10910-009-9525
155. Taherkhani, F.; Parsafar, G. A.; Rahimitabar, M. R.: Kinetic investigation of small systems using different algorithms, *Journal of the Iranian Chemical Society* **3** (4) (2006), 327–333.

156. Turányi, T.: Sensitivity of complex kinetic systems. Tools and applications, *Journal of Mathematical Chemistry* **5** (1990), 203–248.
157. Turányi T.: Reakciórendszerek kinetikájának számítógépes vizsgálata, *Kémiai Közlemények* **75** (1992), 97–110.
158. Turányi, T.; Tomlin, A. S.; Pilling, M. J.: On the error of the quasi-steady-state approximation, *Journal of Physical Chemistry* **97** (1) (1993), 163–172.
159. Tzafriri, A. M.; Edelman, E. R.: Endosomal receptor kinetics determine the stability of intracellular growth factor signalling complexes, *Biochem. J.* **402** (2007), 537–549.
160. Velden, K. V.; Peccoud, J.: Modeling networks of molecular interactions in the living cell: Structure, dynamics, and applications, In: *Petri Nets and Performance Models*, 2003. Proceedings. 10th International Workshop on, Pioneer Hi-Bred International, Inc.; 2003, pp. 2/5. 2003 Illinois International Multiconference on Measurement, Modelling and Evaluation of Computer-Communication Systems: PNPN, Tools, NSCM, PMCCS, September 2–7, 2003, Urbana and Monticello, Illinois.
161. Vellela, M.; Qian, H.: A Quasistationary Analysis of a Stochastic Chemical Reaction: Keizers Paradox, *Bulletin of Mathematical Biology*, **69** (2007), 1727–1746.
- Kinetics of such reactions, thus, are more realistically described by stochastic models which emphasize the discrete nature of molecular reactions and the randomness of their collisions (Érdi and Tóth, 1989).
162. Vlad, M. O.; Corlan, A. D.; Morán, F.; Spang, R.; Oefner, P.; Ross, J.: Kinetic laws, phase-phase expansions, renormalization group, blood coagulation and INR calibration, <http://web.icf.ro/response/07-M1C2-300420006.pdf>
163. Wang, H-Y.; Qian, H.: On detailed balance and reversibility of semi-Markov processes and single-molecule enzyme kinetics, *Journal of Mathematical Physics* **48** (2007), 013303 15 pages.
164. Weidlich, W.: Physics and social-science – The approach of synergetics, *Physics Reports (Review Section of Physics Letters)* **204** (1) (1991), 1–163.
165. Wessel, R.; Ball, R. C.: Statistical-theory of irreversible reacting systems, *J. Phys. A (Mathematical and General)* **24A** (2) (1991), 451–459.
166. Xiang, X.: Agent-based scientific applications and collaboration using Java, MSc Thesis, University of Notre Dame, Notre Dame, IN, 2003.
167. Zachár, A.: Comparison of transformations from nonkinetic to kinetic models, *Acta Chimica Hungarica – Models in Chemistry* **135** (3) (1998), 425–434.
168. Zauner, K. P.; Conrad, M.: Biomolecular processing of optical signals: II. Simulation tool for analysis and design, *Proceedings of SPIE*, **3402** (1998), 425–433.
169. Zevedei-Oancea, I.; Schuster, S.: Topological analysis of metabolic networks based on Petri net theory, *In Silico Biology* **3** (3) (2003), 1–20.
170. Zhang, S. Y.: *Bibliography on chaos*, World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong, 1991.
171. Zheng, Q.; Ross, J.: Comparison of deterministic and stochastic kinetics for nonlinear-systems, *Journal of Chemical Physics* **94** (5) (1991), 3644–3648.
172. Лоскутов, А. Ю.: *Синергетика и нелинейная динамика: Новые подходы к старым проблемам*, http://utc.uni-dubna.ru/~mazny/students/site2/ideal_3.htm

Független idézők száma: 163.

Érdi, P.; Tóth, J.: What is and what is not stated by the May–Wigner theorem? *Journal of Theoretical Biology* **145** (1990), 137–140.

1. MR1065500: no review

2. Drossel, B.; McKane, A. J.: Modelling food webs, In: *Handbook of Graphs and Networks*, (Bornholdt, S.; Schuster, H. G. eds.), Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., 2003, pp. 218–247.
 3. Ikegami, T.; Kaneko, K.: Evolution of host-parasitoid network through homeochaotic dynamics, *Chaos* **2** (1992), 397–407.
 4. Juhász, F.: The May-Wigner theorem for block random matrices, *GMP-5a* (1994)
 5. Kampis, G.; Gulyás, L.: Full body: The importance of the phenotype in evolution, *The American Biology Teacher* **35** (2006), 125–129.
 6. Kampis, G.; Gulyás, L.: Full body: The importance of the phenotype in evolution, *Artificial Life* **14** (3) (2008), 375–386.
 7. Quince, C.; Higgs, P. G. and McKane, A. J.: The effects of removal and addition of species on ecosystem stability, in: *Biological Evolution and Statistical Physics* (M. Lässig and A. Valleriani, eds), (Springer-Verlag, Berlin, 2002).
 8. Raghavachari, S.; Glazier, J. A.: Spatially coherent states in fractally coupled map lattices, *Phys. Rev. Lett.* **74** (16) (1995) 3297–3300.
 9. Wilhelm, T.; Heinrich, R.: Smallest chemical reaction system with Hopf bifurcation, *Journal of Mathematical Chemistry* **17** (1) (1995), 1–14.
- Független idézők száma: 8.**

Érdi P.; Tóth J. (szerk.): *Elmélet, modell, hagyomány*, MTA KFKI, Budapest, 1992, 75 p.

1. Kampis Gy.: Egy biológiai hermeneutika felé, *BUKSZ* **4** (3) (1992), 356–360.

Független idézők száma: 1.

Érdi P., Tóth J. (szerk.): *ELMOHA munkafüzet*, MTA KFKI, Budapest, 1993.

1. Pléh Cs.: Van-e jelentése a természetnek, mondanivalója a természettudománynak avagy kell-e hermeneutika a természettudományoknak?, In: *ELMOHA munkafüzet*, MTA KFKI, Budapest, 1993, pp. 1–10.

Független idézők száma: 1.

Érdi, P.; Tóth, J.: Towards a dynamic neuropharmacology: Integrating network and receptor levels, In: *Brain, Vision and Artificial Intelligence*, (M. De Gregorio, V. Di Maio, M. Frucci and C. Musio eds.), *Lecture Notes in Computer Science* **3704**, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 2005, pp. 1–14.

1. **Független idézők száma: 0.**

Érdi, P.; Tóth, J.; Hárs, V.: Some kinds of exotic phenomena in chemical systems, In *Colloquia Mathematica Societatis János Bolyai*, (Szeged, Hungary, 1979) *Qualitative Theory of Differential Equations* (M. Farkas ed.), **30** North-Holland – János Bolyai Mathematical Society, Budapest, 1981, pp. 205–229.

1. MR0680594 (84b:80010)
2. Holden, A. V.: Stochastic, quantal membrane conductances and neuronal function, In *Competition and Cooperation in Neural Nets*, *Lecture Notes in Biomathematics* (S. Amari, M. A. Arbib eds.), **45** Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1982, pp. 121–141.

Független idézők száma: 1.

Frankowicz, M.; Moreau, M.; Szczęsny, P. P.; Tóth, J.; Vicente, L.: Fast variables elimination in stochastic kinetics, *Journal of Physical Chemistry* **97** (1993), 1891–1895.

1. DelaSelva, S. M. T.; Pina, E.; Garcia-Colin L. S.: On the simple Michaelis-Menten mechanism for chemical reactions, *Journal of Mathematical Chemistry* **19** (2) (1996), 175–191.

2. Fiasconaro, A.; Spagnolo, B.; Ochab-Marcinek, A.; et al.: Co-occurrence of resonant activation and noise-enhanced stability in a model of cancer growth in the presence of immune response, *Physical Review E* **74** (4) (2006), Article Number: 041904.
3. Gomez-Uribe, C. A.; Verghese, G. C.; Tzafiriri, A. R.: Enhanced identification and exploitation of time scales for model reduction in stochastic chemical kinetics, *Journal of Chemical Physics* **129** (24), Article Number: 244112 (2008).
4. Li, H.; Cao, Y.; Petzold, L. R.; Gillespie, D. T.: Algorithms and software for stochastic simulation of biochemical reacting systems, http://www.engineering.ucsb.edu/~cse/Files/Biotechnology_Progress07.pdf
5. Pigolotti, S.; Vulpiani, A.: Coarse graining of master equations with fast and slow states, *archiv:0801.3628v2(cond-math.soft)20Apr 2008*, p.1–8.
6. Pineda, M.; Imbihl, R.; Schimansky-Geier, L.; Zülicke, Ch.: Theoretical analysis of internal fluctuations and bistability in CO oxidation on nanoscale surfaces, *J. Chem. Phys.* **124**, 044701 (2006) (11 pages).
7. Roussel, M. R., Zhu, R.: Reducing a chemical master equation by invariant manifold methods, *Journal of Chemical Physics* **121** (18) (2004), 8716–8730.
8. de la Selva, S. M. T.; Piña, E.; Garcia-Colin, L. S.: On the simple Michaelis-Menten mechanism for chemical reactions, *Journal of Mathematical Chemistry* **19** (2) (1996), 175–191.

Független idézők száma: 8.

Gaveau, B.; Martinás, K.; Moreau, M.; Tóth, J.: Entropy, extropy and information potential in stochastic systems far from equilibrium, *Physica A (Statistical Mechanics and its Applications)* **305A** (3–4) (2002), 445–466.

1. MR1928127
2. Kato, A.: On reduced dynamics of quantum-thermodynamical systems, Dr. rer. nat. thesis, Berlin, 2004.
3. Niven, R. K.: The constrained entropy and cross-entropy, *Physica A – Statistical Mechanics and its Applications*, **334** (2004), 444–458.

It is interesting to note that some workers (e.g., [18]) invoke a Kullback-Leibler cross-entropy function based on the equilibrium probabilities: $D^*(\mathbf{p}|\mathbf{p}^*) = \sum_{i=1}^s p_i \ln \frac{p_i}{p_i^*}$.
4. Niven, R. K.: Combinatorial Information Theory: I. Philosophical Basis of Cross-Entropy and Entropy, eprint arXiv:cond-mat/0512017, 12/2005, 2005cond.mat.12017N.
5. Poór, V.: A concise introduction of the extropy, *Interdisciplinary Description of Complex Systems*, **3** (2) (2005), 72–76.
6. Stepanić, J.: Social equivalent of free energy, *Interdisciplinary Description of Complex Systems*, **2** (1) (2004), 53–60.
7. Varotsos, P. A.; Sarlis, N. V.; Skordas, E. S.: Attempt to distinguish electric signals of a dichotomous nature, *Physical Review E* **68** (2003), 031106 (7 pages)

Független idézők száma: 6.

Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Decay of the metastable state in a chemical system: different predictions between discrete and continuous models, *Letters in Mathematical Physics* **37** (3) (1996), 285–292.

1. MR1392587 (97d:80009)
2. Ao, P.: Emerging of stochastic dynamical equalities and steady state thermodynamics from Darwinian dynamics, *Commun. Theor. Phys.* (Beijing, China) **49**(5) (2008) 1073–1090.
3. Assaf, M.; Kamenev, A.; Meerson, B.: On population extinction risk in the aftermath of a catastrophic event, arXiv:0803.0438v3

The Fokker-Planck equation, resulting from the van Kampen's system size expansion, cannot predict the MTE of stochastic birth-death systems with exponential accuracy. This can be traced to the failure of the Fokker-Planck equation in describing the actual probability distribution tails of these systems [4, 5, 6, 8, 9].

4. Assaf, M.; Meerson, B.: Spectral theory of metastability and extinction in a branching-annihilation reaction, *Physical Review E* **75**, 031132 (2007) (8 pages).

The master equation is rarely solvable analytically, and various approximations, often uncontrolled, are in use [4, 5], such as the Fokker-Planck equation which may suffice unless one has to deal with large deviations or extinction phenomena [7, 8, 9].

5. Drummond, A. J.; Drummond, P. D.: Extinction in a self-regulating population with demographic and environmental noise, arXiv:0807.4772v2 [q-bio.PE] 31 Jul 2008

It has the drawback that it is not accurate for small populations. This leads to exponentially large errors (Gaveau et al., 1996) for important problems like extinction times, which necessarily involve a small population.

6. Kamenev, A.; Meerson, B.: Extinction of an infectious disease: a large fluctuation in a non-equilibrium system, arXiv:0801.4900v2 [cond-mat.stat-mech]2008. Apr.2
7. Meerson, B.; Sasorov, P. V.: Noise driven unlimited population growth arXiv:0808.3854v1 [q-bio.PE]

Független idézők száma: 6.

Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Master equation and Fokker-Planck equation: Comparison of entropy and rate constants, *Letters in Mathematical Physics* **40** (2) (1997), 101–115.

1. MR1463613 (98j:82049)
2. Chang, Yi-Fang: Decrease of entropy and chemical reactions, arXiv:0807.0256v1 [physics.gen-ph]
3. Engblom, S.: Numerical Solution Methods in Stochastic Chemical Kinetics. *Acta Universitatis Upsaliensis* (Digital Comprehensive Summaries of Uppsala Dissertations from the Faculty of Science and Technology) **564** (2008), 68 pp.

However, for a given system size V , the master equation cannot always be approximated by the Fokker-Planck equation [38].

4. Meerson, B.; Sasorov, P. V.: Noise driven unlimited population growth arXiv:0808.3854v1 [q-bio.PE]

Független idézők száma: 3.

Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Dissipation of energy and information in nonequilibrium reaction-diffusion systems, *Physical Review E* **58** (11) (1998), 5351–5354.

1. MR1653548 (99f:82041)
2. Fabeni, P.; Mugnai, D.; Pazzi, G. P.; Ranfagni, A.: Decay kinetics in low-energy emission of KCl:Ti: A Jahn-Teller model interpretation, *Physical Review B* **69** (2004), 174105 (5 pages).
3. Mihóková, E.; Polák, K.; Williams, W.: Role of breathers in anomalous decay, *Physical Review E* **70**, 2004, 016610 (10 pages).
4. Nikl, M.; Nitsch, K.; Chval, J.; Somma, F.; Phani, A. R.; Santucci, S.; Giampaolo, C.; Fabeni, P.; Pazzi, G. P.; Feng, X. Q.: Optical and structural properties of ternary nanoaggregates in CsI-Pb₂ co-evaporated thin films, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **12** (2000), 1939–1946.

5. Ranfagni, A.; Fabeni, P.; Pazzi, G. P.; Mugnai, D.; Agresti, A.; Viliani, G.; Ruggeri, R.: Relaxation dynamics in the excited state of impurity centers in alkali halides, *Physical Review B* **72** (2005), 012101 (4 pages).
6. Ranfagni, A.; Mugnai, D.; Fabeni, P.; Pazzi, G. P.: Statistical dynamical validity of a Jahn-Teller model for TI luminescence, *Physical Review B* **66** (2002), 184107 (5 pages).
7. Schulman, L. S.: Semiclassical quantization of localized lattice solitons, *Physical Review A* **68** 2003, 052109 (15 pages).

Független idézők száma: 6.

Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Path integrals and non-equilibrium thermodynamics, In: *Path integrals from peV to TeV*, (Florence, 1998), World Sci. Publishing, River Edge, NJ, 1999, pp. 52–58.

1. MR1726572

Független idézők száma: 0.

Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Variational nonequilibrium thermodynamics of reaction-diffusion systems. I. The information potential, *Journal of Chemical Physics* **111** (17) (1999), 7736–7747.

1. Chang, Y-F.: Decrease of Entropy and Chemical Reactions, arXiv:0807.0256, (2008).

Recently, Gaveau, et al., [2] discussed the variational nonequilibrium thermodynamics of reaction-diffusion systems.

Független idézők száma: 0.

Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Variational nonequilibrium thermodynamics of reaction-diffusion systems. II. Path integrals, large fluctuations and rate constants, *Journal of Chemical Physics* **111** (17) (1999), 7748–7757.

1. **Független idézők száma:** 0.

Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Variational nonequilibrium thermodynamics of reaction-diffusion systems. III. Progress variables and dissipation of energy and information, *Journal of Chemical Physics* **115** (2) (2001), 680–690.

1. **Független idézők száma:** 0.

Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Information potential and transition to criticality for certain two-species systems, *Physica A* **277** (3/4) (2000), 455–468.

1. **Független idézők száma:** 0.

Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Scenarios for self-organized criticality in dynamical systems, *Open Sys. & Information Dyn.* **7** (4) (2000), 297–308.

1. MR1840278

Független idézők száma: 0.

Halász, G.; Tóth, J.; Hangos, K. M.: Energy-optimal operation conditions of a tunnel kiln, *Computers and Chemical Engineering* **12** (2/3) (1988), 183–187.

1. Kaya, S.; Küçükada, K.; Mançuhan, E.: Model-based optimization of heat recovery in the cooling zone of a tunnel kiln, *Applied Thermal Engineering* **28** (5/6) (2008), 633–641.
2. Kaya, S.; Mançuhan, E.; Küçükada, K.: Modelling and optimization of the firing zone of a tunnel kiln to predict the optimal feed locations and mass fluxes of the fuel and secondary air, *Applied Energy* **86** (3) (2009), 325–332.

Halász et al. [5] proposed one dimensional simple method for determining the energy optimal operation conditions of a tunnel kiln. It was reported that 5-8% of the used energy has been saved.

Független idézők száma: 2.

Halmschlager, A.; Szenthe, L.; Tóth, J.: Invariants of kinetic differential equations, *Electronic Journal of Qualitative Theory of Differential Equations* **14** (2004), 1–14.

1. MR2170482, előkészületben

Független idézők száma: 0.

Hangos, K. M.; Tóth, J.: Maximum likelihood estimation of reaction-rate constants, *Computers and Chemical Engineering* **12** (2/3) (1988), 135–139.

1. *Chemical Abstract*, p. 404.

2. Bailey, A. L.; Kale, L. T.; Tchir, W. J.: Investigation of ethylene 1-octene copolymerization models by C-13 NMR, *J. Appl. Polym. Sci.* **51** (3) (1994), 547–554.

3. Kárny, M.; Halousková, A.: User supplied information in the design of linear quadratic Gaussian self-tuning controllers, In: *ACASP '92 Conference*, Grenoble, 1992.

Független idézők száma: 2.

Hárs, V.; Tóth, J.: On the inverse problem of reaction kinetics, In *Colloquia Mathematica Societatis János Bolyai*, (Szeged, Hungary, 1979) *Qualitative Theory of Differential Equations* (M. Farkas ed.), **30** North-Holland – János Bolyai Mathematical Society, Budapest, 1981, pp. 363–379.

1. Császár, A.; Jicsinszky, L.; Turányi, T.: Generation of model reactions leading to limit cycle behaviour, *Reaction Kinetics and Catalysis Letters* **18** (1–2) (1981), 65–71.

2. Dancsó, A.; Farkas, H.; Farkas, M.; Szabó, Gy.: Hopf bifurcation in some chemical models, In: *Preprints of Lectures*, (International Conference on Dynamics of Exotic Phenomena in Chemistry, Hajdúszoboszló, Hungary, 22–25 Aug. 1989) The Hungarian Academy of Sciences and The Hungarian Chemical Society, Debrecen, 1989, pp. 117–122.

3. Dancsó, A.; Farkas, H.; Farkas, M.; Szabó, Gy.: Hopf bifurcation in some chemical models, *Reaction Kinetics and Catalysis Letters*, **42** (2), 325–330 (1990).

4. Dancsó, A.; Farkas, H.; Farkas, M.; Szabó, Gy.: Investigations into a class of generalized two-dimensional Lotka-Volterra schemes, *Acta Applicanda Mathematicae* **23** (2) (1991), 103–127.

5. Farkas, Gy.: Kinetic lumping schemes, *Chemical Engineering Science* **54** (17) (1999), 3909–3915.

The characterization of those polynomial differential equations that are kinetic can be found in Hárs and Tóth (1981).

6. Farkas, H.: *Evolúciós viselkedéstípusok kémiai és fizikai rendszerekben*, (Doktori értekezés) Budapest, 1992.

7. Farkas, H., Gyökér, S., Wittmann, M.: Use of the parametric representation method in bifurcation problems, *Nonlinear Vibration Problems—Zagadnienia Drganí Nieliniowych* **25** (1993), 93–101.

8. Farkas, H.; Noszticzius, Z.: Explosive, conservative and dissipative systems, In *Nonequilibrium Thermodynamics*, *Adv. in Thermodynamics Series*, (S. Sieniutycz and P. Salamon), 1990.

9. Gonzales-Gascon, F.; Salas, D. P.: On the first integrals of Lotka-Volterra systems, *Phys. Letters A* **266** (4–6) (2000), 336–340.

10. Karátson, J.; Korotov, S.: A discrete maximum principle in Hilbert space with applications to nonlinear cooperative elliptic systems, *Helsinki University of Technology Institute of Mathematics Research Reports A* **552** (2008)

11. Kowalski, K.: Universal formats for nonlinear dynamical systems, *Chem. Phys. Lett.* **209** (1993) 167–170.

12. Szederkényi, G.: Computing sparse and dense realizations for reaction kinetic systems, *Journal of Mathematical Chemistry* () (2009), -. DOI 10.1007/s10910-009-9525

Független idézők száma: 12.

Hárs V.; Tóth J.: Kaotikus és kinetikai differenciálegyenletek, *Alkalmazott Matematikai Lapok* **12** (3-4) (1986), 317–328.

1. MR0899824 (88m:58116)
2. Zhang, S. Y.: *Bibliography on chaos*, World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong, 1991.

Független idézők száma: 1.

Hárs, V.; Tóth, J.; Érdi, P.; Hámori, J.: A formal dynamic model of the development of Purkinje dendritic spines, In *Advances in Physiological Sciences*, (Satellite Conference to the XXVIII International Congress of Physiological Sciences, Budapest, July 13–19, 1980) *Mathematical and Computational Methods in Physiology* (L. Fedina, B. Kanyár, B. Kocsis, M. Kollai eds.), **34** Pergamon Press – Akadémiai Kiadó, Budapest, 1981, pp. 239–243.

1. **Független idézők száma: 0.**

Kanyár B.; Tóth J.: Lineáris differenciálegyenlet-rendszer illesztése gradiens módszerrel, *Alkalmazott Matematikai Lapok* **2** (3-4) (1976), 259–268.

1. MR0478647 (57 #18124)
2. Érdi P.: *Teremtett valóság*, Typotex Könyvkiadó, Budapest, 2000.

Független idézők száma: 1.

Kovács, K.; Vizvári, B.; Riedel, M.; Tóth, J.: Decomposition of the permanganate/oxalic acid overall reaction to elementary steps based on integer programming theory, *Physical Chemistry, Chemical Physics*, **6** (6)(2004), 1236–1242.

1. Davies, M. B.: Mechanisms of reactions in solution, *Annual Reports Section "A" (Inorganic Chemistry)* **100**, (2004), 553–591.
2. Lövgren, T.: Reaktionshastighet med permanganat, <http://school.chem.umu.se/Experiment/100>

Független idézők száma: 2.

Kutas, T.; Tóth, J.: A stochastic model of phytoplankton dynamics in the Lake Balaton, *MTA SZTAKI Working Paper MS/15* (1984), 1–42.

1. Straten, G. van: *Identification, Uncertainty Assessment and Prediction in Lake Eutrophication*, Febodruk, Enschede, 1986, 32 p.

Független idézők száma: 1.

Kutas, T.; Tóth, J.: A stochastic model of phytoplankton dynamics in Lake Balaton, *Journal of Statistical Computation and Simulation* **21** (1985), 241–264.

1. MR0876633

Független idézők száma: 0.

Kutas T.; Tóth J.: A balatoni fitoplankton dinamikájának egy sztochasztikus modellje, *Alkalmazott Matematikai Lapok* **12** (1–2) (1986), 143–159.

1. MR0891072 (88g:92038)

Független idézők száma: 0.

Li, G.; Rabitz, H.; Tóth, J.: A general analysis of exact nonlinear lumping in chemical kinetics, *Chemical Engineering Science* **49** (3) (1994), 343–361.

1. Brochot, C.: Paramétrisation des modèles physiologiques toxico/pharmacocinétiques, These, UPMC - Paris 6, 2004.

2. Chakravarti, S.; Ray, W. H.: Kinetic study of olefin polymerization with a supported metallocene catalyst. III. Ethylene homopolymerization in slurry, *Journal of Applied Polymer Science*, **81** (12) (2001), 2901–2917.
3. Farkas, Gy.: Kinetic lumping schemes, *Chemical Engineering Science* **54** (17) (1999) 3909–3915.
4. Gokulakrishnan, P.; Lawrence, A. D.; McLellan, P. J., et al.: A functional-PCA approach for analyzing and reducing complex chemical mechanisms, *Computers & Chemical Engineering* **30** (6–7) (2006), 1093–1101.
5. Gorban, A. N.; Karlin, I. V.: Method of invariant manifold for chemical kinetics, *Chemical Engineering Science* **58** (21) (2003), 4751–4768.
6. Gorban, A. N.; Karlin, I. V.; Zinovyev, A. Y.: Invariant grids for reaction kinetics, *Physica A* **333** (2004), 106–154.
7. Ho, T. C.: Modeling of reaction kinetics for petroleum fractions, Chapter 21, In: *Practical Advances in Petroleum Processing* (C. S. Hsu and Robinson, P. R. eds.), Springer, New York, 2007, pp. 653–694.
8. Ho, T. C.: Kinetic modeling of large-scale reaction systems, *Catalysis Reviews—Science and Engineering* **50** (3) (2008), 287–378.
9. Hong G. Y.; Dolg, M.; Li, L. M.: A comparison of scalar-relativistic ZORA and DKH density functional schemes: monohydrates, monooxides and monofluorides of La, Lu, Ac and Lr, *Chem. Phys. Lett.* **334** (4–6) (2001), 396–402.
10. Huang, H.; Fairweather, M.; Griffiths, J. F. et al.: A systematic lumping approach for the reduction of comprehensive kinetic models, *Proceedings of the Combustion Institute* **30**, Part 1, (2005), 1309–1316.
11. Katare, S.; Caruthers, J. M.; Delgass, W. N.; et al.: An intelligent system for reaction kinetic modeling and catalyst design, *Industrial and Engineering Chemistry Research* **43** (14) (2004), 3484–3512.
12. Kazantzis, N.: "Invariance-inducing" control of nonlinear discrete-time dynamical systems, *Journal of Nonlinear Science*, **13** (2003), 579–601.
13. Kazantzis, N.; Good, T.: Invariant manifolds and the calculation of the long-term asymptotic response of nonlinear processes using singular PDEs, *Computers and Chemical Engineering*, **26** (7) (2002), 999–1012.
14. Kazantzis, N.; Good, T.: A model-based characterization of the long-term asymptotic behavior of nonlinear discrete-time processes using map invariance, *Proceedings of the 2004 American Control Conference* **1–6** (2004), 1731–1736.
15. Kazantzis, N.; Huynh, N.; Good, T. A.: A model-based characterization of the long-term asymptotic behavior of nonlinear discrete-time processes using invariance functional equations, *Computers and Chemical Engineering*, **29** (11–12) (2005), 2346–2354.
16. Kazantzis, N.; Kravaris, C.: A new model reduction method for nonlinear dynamical systems using singular PDE theory, In: *Model Reduction and Coarse-Graining Approaches for Multiscale Phenomena*, (Workshop on Model Reduction and Coarse-Graining Approaches for Multiscale Phenomena, Aug. 24–26, 2005 Univ Leicester, Leicester, ENGLAND) (2006), pp. 3–15.
17. Lebedez, D.: Computing minimal entropy production trajectories: An approach to model reduction in chemical kinetics, *Journal of Chemical Physics* **120** (15) (2004) 6890–6897.
18. Lebedez, D.; Kammerer, J.; Brandt-Pollmann, U.: Automatic network coupling analysis for dynamical systems based on detailed kinetic models, *Physical Review E* **72**, 041911 (2005) (8 pages).
19. Law, Chung, K.; Lu, Tianfeng: Towards accommodating realistic fuel chemistry in large-scale computations, *Progress in Energy and Combustion Science*, **35** (2) (2009), 192–215.
20. Lu, T.; Law, C. K.: Toward accommodating realistic fuel chemistry in large-scale computations, *Progress in Energy and Combustion Science* **35** (2) (2009), 192–215.
21. Maria, G.: A review of algorithms and trends in kinetic model identification for chemical and biochemical systems, *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly* **18** (3) (2004), 195–222.

22. Maria, G.: New developments in (Bio)chemical kinetics numerical identification, *Revista de Chemie* **55** (8) (2004), 628–637.
23. Maria, G.: Relations between apparent and intrinsic kinetics of "programmable" drug release in human plasma, *Chemical Engineering Science* **60** (6) (2005), 1709–1723.
24. Maria, G.: Application of lumping analysis in modelling the living systems—A trade-off between simplicity and model quality, *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly* **3** (2) (2007), 235–249.
25. Mitsos, A.; Oxberry, G.M.; Barton, P.I.; Green, W. H.: Optimal automatic reaction and species elimination in kinetic mechanisms, *Combustion and Flame* **155** (1–2) (2008), 118–132.
26. Nestorov, I.: Whole-body physiologically based pharmacokinetic models, *Expert Opinion on Drug Metabolism and Toxicology* **3** (2) (2007), 235–249.
27. Okino, M. S.; Mavrovouniotis M. L.: Simplification of mathematical models of chemical reaction systems – Review, *Chem. Rev.* **98** (2) (1998), 391–408.
28. Roussel, M. R.; Fraser, S. J.: Invariant manifold methods for metabolic model reduction, *Chaos* **11** (1) (2001), 196–206.
29. Shaik, O. S.; Kammerer, J.; Gorecki, J.; Lebiedz D.: Derivation of a quantitative minimal model from a detailed elementary-step mechanism supported by mathematical coupling analysis, *Journal of Chemical Physics* **123** (23) (2005), 234103 (10 pages).
30. Tosukhowong, T.: Dynamic Real-time Optimization and Control of an Integrated Plant, Ph D thesis, School of Chemical and Biochemical Engineering, Georgia Institute of Technology, 2006.

In particular, the work by Li et al [64] applied a non-linear perturbation theory to separate the fast reaction variables from the slow variables.

31. Winckler, M.: Towards optimal criteria for trajectory-based model reduction in chemical kinetics via numerical optimization, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg Fakultät für Mathematik und Informatik, 2007.

Független idézők száma: 31.

Li, G.; Tomlin, A. S.; Rabitz, H.; Tóth, J.: Determination of approximate lumping schemes by a singular perturbation method, *Journal of Chemical Physics* **99** (5) (1993), 3562–3574.

1. Duchene, P.; Rouchon, P.: Kinetic scheme reduction via geometric singular perturbation techniques, *Chemical Engineering Science* **51** (20) (1996), 4661–4672.
2. Fraser, S. J.: Double perturbation series in the differential equations of enzyme kinetics, *Journal of Chemical Physics* **109** (2) (1998), 411–423.
3. Fraser, S. J.: Slow manifold for a bimolecular association mechanism, *Journal of Chemical Physics* **120** (2004) 3075.
4. Fraser, S. J.: Solvable model of kinetic control, *J. Chem. Phys.* **116** (4) (2002), 1277–1285.
5. Fraser, S. J.; Roussel, M. R.: Phase-plane geometries in enzyme-kinetics, *Can. J. Chem.* **72** (3) (1994), 800–812.
6. Lebiedz, D.; Kammerer, J.; Brandt-Pollmann, U.: Automatic network coupling analysis for dynamical systems based on detailed kinetic models, *Physical Review E* **72**, 041911 (2005) (8 pages).
7. Murugan, R.: Solution to Michaelis–Menten enzyme kinetic equation via undetermined gauge functions: Resolving the nonlinearity of Lineweaver–Burk plot, *Journal of Chemical Physics* **117** (9) (2002), 4178–4183.
8. Okino, M. S.; Mavrovouniotis M. L.: Simplification of mathematical models of chemical reaction systems – Review, *Chem. Rev.* **98** (2) (1998), 391–408.

9. Pinto, G. A.; Tardioli, P. W.; Cabrera-Padilla, R.Y. Galvão, C. M. A.; Giordano, R. C.; Giordano, R. L. C.: Amino acids yields during proteolysis catalyzed by carboxypeptidase A are strongly dependent on substrate pre-hydrolysis, *Biochemical Engineering Journal* **39** (2) (2008), 328–337.
10. Roussel, M. R.; Fraser, S. J.: Invariant manifold methods for metabolic model reduction, *Chaos* **11** (1) (2001), 196–206.
11. Schnell, S.; Maini, K.: Enzyme kinetics far from the standard quasi-steady state and equilibrium approximations, *Math. Comput. Model.* **35** (1–2) (2002) 137–144.
12. Sportisse, B.; Djouad, R.: Reduction of chemical kinetics in air-pollution modeling, *Journal of Computational Physics* **164** (2) (2000), 354–376.
13. Sundaram. N. J.; Wankat, P. C.: Dynamics of irreversible Michaelis–Menten kinetic mechanism, *Journal of Chemical Physics A* **102** (4) (1998), 717–721.
14. Turányi, T.: Application of repro-modelling for the reduction of combustion mechanisms, *Proc. Combust. Inst.* **25** (1995), 949–955.
15. Turányi, T.: Parametrization of reaction mechanisms using orthonormal polynomials, *Computers in Chemistry* **18** (1994), 45–54.
16. Tzafriri, A. R.: Michaelis-Menten kinetics at high enzyme concentrations, *Bulletin of Mathematical Biology* **65** (2003), 1111–1129.

Független idézők száma: 16.

Li, G.; Tomlin, A. S.; Rabitz, H.; Tóth, J.: A general analysis of approximate nonlinear lumping in chemical kinetics. I. Unconstrained lumping, *Journal of Chemical Physics* **101** (2) (1994), 1172–1187.

1. Ananthakrishna, G.: Current theoretical approaches to collective behavior of dislocations, *Physics Reports—Review Section of Physics Letters* **440** (4–6) (2007), 113–259.
2. Brochot, C.: Paramétrisation des modèles physiologiques toxico/pharmacocinétiques, These, UPMC - Paris 6, 2004.
3. Bykov, V. I.; Gorban, A. N.; Dymova, S. V.: Method of invariant manifolds for the reduction of kinetic description, *Acta Chimica Hungarica – Models in Chemistry* **134** (1) (1997), 83–95.
4. Davis, M. J.; Skodje, R. T.: Geometric investigation of low-dimensional manifolds in systems approaching equilibrium, *Journal of Chemical Physics* **111** (3) (1999), 859–874.
5. Fairweather, M.: *Computational Fluid Dynamic Techniques*, 2001 [http://cape-alliance.ucl.org.uk/CAPE-21_Definition_Phase/Report/Onlines/CFD_\(App_L\).pdf](http://cape-alliance.ucl.org.uk/CAPE-21_Definition_Phase/Report/Onlines/CFD_(App_L).pdf)
6. Fairweather, M.: *Detailed modelling of unit processes – The development of computational fluid dynamics techniques*, Discussion paper - CAPE-21 Computer Aided Process Engineering. Tools and techniques for the 21st century.
7. Ho, T. C.: Kinetic modeling of large-scale reaction systems, *Catalysis Reviews—Science and Engineering* **50** (3) (2008), 287–378.
8. Kaper, H. G.; Kaper, T. J.: Asymptotic analysis of two reduction methods for systems of chemical reactions, *Physica D* **165** (1–2) (2002), 66–93.
9. Nestorov, I.: Whole-body physiologically based pharmacokinetic models, *Expert Opinion on Drug Metabolism & Toxicology* **3** (2) (2007), 235–249.
10. Okino, M. S.; Mavrovouniotis M. L.: Simplification of mathematical models of chemical reaction systems – Review, *Chem. Rev.* **98** (2) (1998), 391–408.
11. Singh, S.: *Rational reduction of reactive flow models and efficient computation of their solutions*, PhD Thesis, Notre Dame, IN, 2003.

12. Tosukhowong, T.: Dynamic Real-time Optimization and Control of an Integrated Plant, Ph D thesis, School of Chemical and Biochemical Engineering, Georgia Institute of Technology, 2006.

The earliest approach is to lump the original model parameters into a low-dimensional one, such as the approaches proposed to simplify the kinetic models [63, 64]. In particular, the work by Li et al [64] applied a nonlinear perturbation theory to separate the fast reaction variables from the slow variables and transformed the system into a canonical form by nonlinear transformation. The fast variables are lumped and its analytical solution can be obtained by singular perturbation method. A special case where important products or initial reactant should not be lumped was also discussed in [65].

[64]:=Unconstrained [65]:=Constrained

13. Vora, N.; Daoutidis, P.: Nonlinear model reduction of chemical reaction systems, *AIChE Journal* **47** (10) (2001), 2320–2332.

Független idézők száma: 13.

Rózsa, Z.; Tóth, J.: Exact linear lumping in abstract spaces, *Electronic Journal of Qualitative Theory of Differential Equations* () (2004), 1–14.

1. MR2170489, előkészületben

Független idézők száma: 0.

Schneider, K. R.; Wegner, B.; Tóth, J. : *Qualitative analysis of a model for synaptic slow waves*, Preprint P-MATH-30/85, Akademie der Wissenschaften der DDR Karl-Weierstrass-Institut für Mathematik, Berlin, 1985, 1–20.

1. Volokitin, E. P.; Treskov, S. A.: Parametricheskii analiz kineticheskoi modeli "medlennykh" sinapticheskikh voln, *Preprint No. 20* SZUTA Matematicheskii Institut, Novosibirsk, (1987), 1–15.

Független idézők száma: 1.

Schneider, K. R.; Wegner, B.; Tóth, J.: Qualitative analysis of a model for synaptic slow waves, *Journal of Mathematical Chemistry* **1** (1987), 219–234.

1. MR0906157 (88k:92018)

Független idézők száma: 0.

Schuman, B.; Tóth J.: No limit cycle in two species second order kinetics, *Bull. sci. math.* **127** (2003), 222–230.

1. MR1988658

2. Li, J.; Tian, Y.; Zhang, W.; Miao, S. F.: Bifurcation of multiple limit cycles for a rotor-active magnetic bearings system with time-varying stiffness, *International Journal of Bifurcation and Chaos* **18** (3) (2008), 755–778.

3. Ricard, M. R.: On Turing-Hopf instabilities in reaction-diffusion systems, *Biophys. Rev. Lett.*, 2008 Pages 293-313 **3** (1/2) (2008), 267–274.

4. Egy kínai idézet: The multiple limit cycles bifurcation on a Z_2 -symmetric perturbed polynomial Hamiltonian system of degree 5

Független idézők száma: 3.

Sipos, T.; Tóth, J.; Érdi, P.: Stochastic simulation of complex chemical reactions by digital computer, I. The model, *Reaction Kinetics and Catalysis Letters* **1** (1) (1974), 113–117.

1. Neuts, M. F.: An annotated bibliography of computational probability, Part I, Mimeograph Series **443** (1976), Department of Statistics, Division of Mathematical Sciences, Purdue University, West Lafayette, Indiana.

- Vellela, M.; Qian, H.: A Quasistationary Analysis of a Stochastic Chemical Reaction: Keizers Paradox, *Bulletin of Mathematical Biology*, **69** (2007), 1727–1746.

Stochastic simulations of complex chemical reaction systems were realized in the early 1970s (Sipos et al., 1974a,b).

Független idézők száma: 2.

Sipos, T.; Tóth, J.; Érdi, P.: Stochastic simulation of complex chemical reactions by digital computer, II. Applications, *Reaction Kinetics and Catalysis Letters* **1** (2) (1974), 209–213.

- Neuts, M. F.: An annotated bibliography of computational probability, Part I, Mimeograph Series **443** (1976), Department of Statistics, Division of Mathematical Sciences, Purdue University, West Lafayette, Indiana.
- Vellela, M.; Qian, H.: A Quasistationary Analysis of a Stochastic Chemical Reaction: Keizers Paradox, *Bulletin of Mathematical Biology*, **69** (2007), 1727–1746.

Stochastic simulations of complex chemical reaction systems were realized in the early 1970s (Sipos et al., 1974a,b).

Független idézők száma: 2.

Szili, L.; Tóth, J.: Necessary condition of the Turing instability, *Physical Review E* **48** (1) (1993), 183–186.

- MR1377206
- De Wit, A.: Spatial patterns and spatiotemporal dynamics in chemical systems, *Advances in Chemical Physics* **109** (1999), 435–513.
- Dilao, R.: Turing instabilities and patterns near a Hopf bifurcation, *Applied Mathematics and Computation* **164** (2) (2005), 391–414.

Several necessary and several sufficient conditions for the existence of Turing instabilities in reaction-diffusion systems have been derived. This is the case of Szili and Tóth, [11], and...

- Érdi, P.: *Complexity explained*, Springer, Berlin, Heidelberg, 2008.
- Kiss, K.: n-Dimensional ratio-dependent predator-prey systems with diffusion, *Applied Mathematics and Computation* **205** (1) (2008), 325–335.
- Kovács, S.: Spatial inhomogeneity due to Turing bifurcation in a system of Gierer-Meinhardt type, *The Korean Journal of Computational & Applied Mathematics*, **11** (1–2) (2003), 125–141.
- Leppänen, T.; Karttunen, M.; Barrio, R. A.; Kaski, K.: Morphological transitions and bistability in Turing systems, *Physical Review E* **70** (2004), 066202 (9 pages).
- Leppänen, T.; Karttunen, M.; Barrio, R. A.; Kaski, K.: Connectivity of Turing structures, arXiv:cond-mat/0302101
- Leppänen, T.; Karttunen, M.; Barrio, R. A.; Kaski, K.: Spatio-temporal dynamics in a Turing model, http://www.lce.hut.fi/research/polymer/turing_paper6.pdf
- Matolcsi, T.: On the dynamics of phase transitions, *Z. angewandte Math. Phys.* **47** (6) (1996), 858–879.
- Matolcsi, T.: On the mathematical structure of thermodynamics, *J. Math. Phys.* **41** (4) (2000), 2021–2042.
- Plahte, E.: Pattern formation in discrete cell lattices, *Journal of Mathematical Biology* **43** (5) (2001), 411–445.

Models with more than two internal cell variables may also exhibit the Turing mechanism (see e.g. Koch and Meinhardt (1994), Szili and Toth (1995)).

- Popescu, S.: Turing structures in dc gas discharges, *Europhysics Letters*, **73** (2) (2006), 190–196.

it was demonstrated that another necessary condition for the appearance of Turing structures is the presence of cross-inhibition [16], that is an intermediate species inhibits the increase of another intermediate-species concentration.

One necessary condition for the emergence of Turing structures is the presence of cross-inhibition [16]. Analyzing eq. (4), the cross-inhibition is present if the products of the diagonal elements of the Jacobian matrix of the above system are negative [16]...

14. Póta Gy.: *Kémiai hullámok és térbeli szerkezetek reakció-diffúzió rendszerekben*, (Egyetemi jegyzet. Kézirat), Debrecen, 1996.
15. Póta, Gy.: Chemical waves and spatial structures in reaction-diffusion systems, *Acta Chimica Hungarica – Models in Chemistry* **135** (5) (1998), 677–748.
16. Póta, Gy.: *Mathematical Problems for Chemistry Students*, Amsterdam, etc. 2006.
17. Wei, G. X.; Qian, S. L.: Chemical chaotic systems derived from NSG system, *Chaos, soliton. fract.* **15** (4) (2003), 663–671.
18. Xu, W. G.; Li, Q. S: A chemical chaotic system derived from Chua's circuit, *J Chem Res-S* (6): (2002), 295–296.

Független idézők száma: 17.

Szili L.; Tóth J.: *Matematika és Mathematica*, ELTE Eötvös Kiadó, Budapest, 1996.

1. Aszalós L.: *Mathematica*. Ajánlott minden tudományágban, *Új Alaplap* (2) (1997), 59–60.
2. Egy kis korrekció, *Új Alaplap* (3) (1997), 51.
3. Bronstejn, I. N.; Szemengyajev, K. A.; Musiol, G.; Mühlrig, H.: *Matematikai kézikönyv*, TYPOTEX Kiadó, Budapest, 2000, p. 1185.
4. Hegedűs A., Orova L.-né: A Coriolis-erő szemléltetése és meghatározása, III. MOHR (1997. szept. 12–13.), (Csorba L. és Gelencsér E. szerk.), Gödöllő, 1997., pp. 20–25.
5. Horlai J.: Két „mindentudó matekos”, *Új Alaplap* (9) (1997), 12–14.
6. (Ismerető): **Szili László – Tóth János: Matematika és Mathematica** (ELTE Eötvös Kiadó, 400 oldal), *Élet és Irodalom* **40** (37) (1996) 4.
7. Karsai J.: SZILI LÁSZLÓ, TÓTH JÁNOS **Matematika és Mathematica**, 396 oldal, ELTE Eötvös Kiadó, Budapest, 1996. *Polygon* **6** (2) (1996), 97–98.
8. Karsai J.: *Matematika gyógyszerészek számára*, Szentgyörgyi Albert Orvostudományi Egyetem, Orvosi Informatikai Intézet, Szeged, 1996.
9. Karsai J.: *Impulzív jelenségek modelljei*, TYPOTEX, Budapest, 2002.
10. Kiralyfalvi Gy.: *Matematika és Mathematica, (Mathematics and Mathematica) by László Szili and János Tóth, Mathematica in Education and Research* **7** (1) (1998), 54–55.
11. Kovács A.: Komputeralgebra a tudományokban és a gyakorlatban, *Alkalmazott Matematikai Lapok* **18** (1994–98), 181–202.
12. Kovács, S.: Delay in decision making causes oscillation *Nonlinearity* **17** (2004), 2267–2274.
13. (Recenzió:) Matematika és Mathematica, *Számítástechnika* **11** (45) (1996) 30.
14. Nyékiné Gaizler Judit (szerk.): *Programozási nyelvek*, Kiskapu Kft., Budapest, 2003.
15. Popper Gy.: it Numerikus módszerek Mathematica használatával, (BME Építőmérnöki Kar), Műegyetemi Kiadó, Budapest, 2003.
16. Sch. V.: **SZILI LÁSZLÓ-TÓTH JÁNOS: Matematika és Mathematica** (Budapest, 1996, ELTE Eötvös Kiadó), *Természet Világa* (november) (1996) 528.

17. Scharnitzky V.: *Mathematica Élet és Tudomány* (41) (1996) 1294.
<http://www.sulinet.hu/eletestudomany/archiv/1996/9641/07.html>
 18. Szabó J. B.: Fizika tanítása *Mathematicával*, *Fizikai Szemle* (12) (2003), 438–440.
 19. A BME Építőmérnöki Kar, Építőmérnöki Doktori Iskola, Szerkezetépítő Programján belül a *Numerikus módszerek* c. tárgyhoz megadott irodalom,
http://minek.tuo.bme.hu/dokthab/iskola_anyagok/epitomernok/Szig-targyak-Szerkez.htm
- Független idézők száma: 19.**

Szili, L.; Tóth, J.: On the origin of Turing instability, *Journal of Mathematical Chemistry* **22** (1) (1997), 39–53.

1. MR1614183 (99d:92011)
2. Érdi, P.: *Complexity explained*, Springer, Berlin, Heidelberg, 2008.
3. Kiss, K.: n-Dimensional ratio-dependent predator-prey systems with diffusion, *Applied Mathematics and Computation* **205** (1) (2008), 325–335.
4. Póta, Gy.: *Mathematical Problems for Chemistry Students*, Elsevier, Amsterdam, etc. 2006.

Független idézők száma: 3.

Szili, L.; Tóth, J.: Numerical and symbolic applications of Mathematica, *Mathematica Pannonica* **10** (1) (1999), 83–92.

1. MR1678120: no review

Független idézők száma: 0.

Tomlin, A. S.; Li, G.; Rabitz, H.; Tóth, J.: A general analysis of approximate nonlinear lumping in chemical kinetics. II. Constrained lumping, *Journal of Chemical Physics* **101** (2) (1994), 1188–1201.

1. Ananthakrishna, G.: Current theoretical approaches to collective behavior of dislocations, *Physics Reports—Review Section of Physics Letters* **440** (4–6) (2007), 113–259.
2. Biscarini, F., Chiccoli, C., Pasini, P.; Semeria, F.; Zannoni, C.: Phase diagram and orientational order in a biaxial lattice model: A Monte Carlo study, *Physical Review Letters* **75** (1995) 1803–1806.
3. Bou-Ali, M. M.; Ecenarro, O.; Madariaga, J. A.; Santamaria, C. M.; Valencia, J. J.: Thermogravimetric measurement of the Soret coefficient of liquid mixtures, *Journal of Physics, Condensed Matter* **10** (15) (1998), 3321–3332.
4. Crawford, T. D.; Schaefer H. F. III.: An introduction to coupled cluster theory for computational chemists, *Reviews in Computational Chemistry*, **14** (2000), 33–136.
5. Davis, M. J.; Skodje, R. T.: Geometric investigation of low-dimensional manifolds in systems approaching equilibrium, *Journal of Chemical Physics* **111** (3) (1999), 859–874.
6. Ho, T. C.: Kinetic modeling of large-scale reaction systems, *Catalysis Reviews—Science and Engineering* **50** (3) (2008), 287–378.
7. Huang, H.; Fairweather, M.; Griffiths, J. F. et al.: A systematic lumping approach for the reduction of comprehensive kinetic models, *Proceedings of the Combustion Institute* **30**, Part 1, (2005), 1309–1316.
8. Kaper, H. G.; Kaper, T. J.: Asymptotic analysis of two reduction methods for systems of chemical reactions, *Physica D* **165** (1–2) (2002), 66–93.
9. Li, X.; Paldus, J.: Reduced multireference coupled cluster method IV: open-shell systems, *Molecular Physics* **98** (16) (2000), 1185–1199.

ellenőrzendő

10. Law, Chung, K.; Lu, Tianfeng: Towards accommodating realistic fuel chemistry in large-scale computations, *Progress in Energy and Combustion Science*, **35** (2) (2009), 192–215.

11. Nauta, M.; Weiland, S.; Backx, T.: A graph-based method to introduce approximations in kinetic networks, 46th IEEE Conference on Decision and Control, Dec. 12–14, 2007 New Orleans, LA, In: *Proceedings of the 46th IEEE Conference on Decision and Control*, **1–14**, (2007) pp. 6024–6029.
12. Nicolis, G., Feigin, Westerhoff *****et al.: General discussion, *Faraday Discussions* **120** (2001), 197–213.
13. Okino, M. S.; Mavrovouniotis M. L.: Simplification of mathematical models of chemical reaction systems – Review, *Chem. Rev.* **98** (2) (1998), 391–408.
14. Peris, G.; Rajadell, F.; Li, X.; Planelles, J.; Paldus, J.: Externally corrected singles and doubles coupled cluster methods for open-shell systems. II. Applications to the low lying doublet states of OH, NH₂, CH₃ and CN radicals, *Molecular Physics* **94** (1) (1998), 235–248.

ellenőrzendő

15. Singh, S.: *Rational reduction of reactive flow models and efficient computation of their solutions*, PhD Thesis, Notre Dame, IN, 2003.
16. Sportisse, B.; Djouad, R.: Reduction of chemical kinetics in air-pollution modeling, *Journal of Computational Physics* **164** (2) (2000), 354–376.
17. Tosukhowong, T.: *Dynamic Real-time Optimization and Control of an Integrated Plant*, Ph D thesis, School of Chemical and Biochemical Engineering, Georgia Institute of Technology, 2006.
18. Urban, M.; Neogrady, P.; Raab, J.; Diercksen, G. H. F.: Accuracy assesment of the ROHF-CCSD(T) calculations of dipole moments of small radicals, *Collection of Czechoslovak Chemical Communications* **63** (9) (1998), 1409–1430.

ellenőrzendő

19. Vora, N.; Daoutidis, P.: Nonlinear model reduction of chemical reaction systems, *AIChE Journal* **47** (10) (2001), 2320–2332.
20. Xia, Guoyun: *Modelling Secondary Organic Aerosol Formation using a Simple Scheme in a 3-Dimensional Air Quality Model and Performing Systematic Mechanism Reduction for a Detailed Chemical System*, Doctoral thesis, York University, June 2006 (Diane Michelangeli).

Független idézők száma: 19.

Tóth J.: Igen sok komponenst tartalmazó elegyek reakciókinetikájának alapfogalmai, In *Racionális kémiai termodinamika*, (Érdi P. szerk.), ELTE TTK Kémiai Kibernetikai Laboratórium, Budapest, 1978, pp. 172–198.

1. Érdi P.: Hierarchikus rendszerek termodinamikája, *Magyar Kémikusok Lapja* **37** (1) (1982), 19–25.

Független idézők száma: 1.

Tóth, J.: What is essential to exotic kinetic behaviour?, *Reaction Kinetics and Catalysis Letters* **9** (4) (1978), 377–381.

1. Császár, A.; Jicsinszky, L.; Turányi, T.: Generation of model reactions leading to limit cycle behaviour, *Reaction Kinetics and Catalysis Letters* **18** (1–2) (1981), 65–71.
2. Érdi P.: Hierarchikus rendszerek termodinamikája, *Magyar Kémikusok Lapja* **37** (1) (1982), 19–25.
3. Farkas, Gy.: Kinetic lumping schemes, *Chemical Engineering Science* **54** (17) (1999) 3909–3915.

We remark that for generalized compartmental systems, see Tóth (1978), it is enough to assume that the directed graph constructed above is acyclic since condition (9) is always satisfied. ... At the moment there are only partial results on this topic, we know the effect of lumping only for special reactions for instance only for generalized compartmental systems, see Tóth (1978).

4. Fränzle, S.; Markert, B.: The biological system of elements (BSE) – Part II – A theoretical model for establishing the essentially chemical elements – The application of stoichiometric network analysis to the biological system of elements, *Science of Total Environment* **249** (1–3) (2000), 223–241.

5. Póta, G.; Stedman, G.: Exotic behaviour of chemically reacting systems, *Acta Chimica Hungarica—Models in Chemistry* **131**(2) (1994), 229–268.

Független idézők száma: 5.

Tóth, J.: Gradient systems are cross-catalytic, *Reaction Kinetics and Catalysis Letters* **12** (3) (1979), 253–257.

1. Karátson, J.; Korotov, S.: A discrete maximum principle in Hilbert space with applications to nonlinear cooperative elliptic systems, *Helsinki University of Technology Institute of Mathematics Research Reports A* **552** (2008)
2. Othmer, H.: Analysis of complex reaction networks, University of Minnesota preprint, Minneapolis, December, 2003.

Tóth (1979) has obtained results on the types of systems that lead to gradient flows.

Független idézők száma: 2.

Tóth J.: A kémiai reakciókinetika direkt és inverz feladatairól, *Alkalmazott Matematikai Lapok* **7** (3-4) (1981), 253–269.

1. MR0676698 (83k:80013)

Független idézők száma: 0.

Tóth, J.: A functional equation related to random fields, *Revue Roumaine de Mathématiques Pures et Appliquées* **37** (3) (1992), 261–264.

1. MR1172278 (93g:60109)

Független idézők száma: 0.

Tóth, J.: Multistationarity is neither sufficient nor necessary to oscillation, *Journal of Mathematical Chemistry* **25** (4) (1999), 393–397.

1. MR1747433

2. Bayramov, S. K.: Enzyme isomerization and concentration oscillations in five-component biochemical systems, *Biochemistry—Moscow* **69** (3) (2004), 317–321.
3. Craciun, G.; Feinberg, M.: Multiple equilibria in complex chemical reaction networks: extensions to entrapped species models, *IEE Proceedings on Systems Biology* **153** (4) (2006), 179–186.
4. Sidhu, H. S.; Nelson, M. L.; Mercer, G. N.; Weber, R. O.: Dynamic analysis of an elementary $X+Y\rightarrow P$ reaction in a continuously stirred tank reactor, *Journal of Mathematical Chemistry* **28** (4) (2000), 353–375.
5. Wei, G. X.; Qian, S. L.: Chemical chaotic systems derived from NSG system, *Chaos, soliton. fract.* **15** (4) (2003), 663–671.
6. Xu, W. G.; Li, Q. S.: A chemical chaotic system derived from Chua's circuit, *J Chem Res-S* (6): (2002), 295–296.

Független idézők száma: 5.

Tóth J.: A formális reakciókinetika globális determinisztikus és sztochasztikus modelljéről és néhány alkalmazásáról, *MTA SZTAKI Tanulmányok* **129** (1981), 1–163.

1. MR0648076 (83k:92078)

2. Pintácsi I.; Siegler G.; Zsakó L.: Szimulációs modellek a kémiában, *Mikrológia* **15** (1994), 1–68.

Független idézők száma: 1.

Tóth J.: *A matematikai folyamatfogalmakról*, (Kézirat: kandidátusi vizsgához készült dolgozat), Budapest, 1981, 53 p.

1. Molnár I.: Evolúció és egyedfejlődés, In: *Az evolúciókutatás frontvonalai*, Evolúció (Vida G. szerk.), IV Natura, Budapest, 1984, pp. 161–280.

Független idézők száma: 1.

Tóth, J.: A mass action kinetic model of neurochemical transmission, In: *Dynamic Phenomena in Neurochemistry and Neurophysics: Theoretical Aspects*, (Budapest, Aug. 21–23, 1984) (P. Érdi ed.), MTA KFKI, Budapest, 1985, pp. 52–55.

1. Arbib, M. A.; Érdi, P.; Szentágothai, J.: *Neural organization. Structure, function and dynamics*, (A Bradford Book), The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, London, England, 1997.
2. Érdi, P.: Self-organization in the Nervous System: Some Illustrations, In *Lecture Notes in Biomathematics*, (International Symposium on Mathematical Biology, Kyoto, Japan, 1985)
3. Érdi, P.: Molecular self-organization in the nervous system, In *Dynamic Phenomena in Neurochemistry and Neurophysics: Theoretical Aspects*, (Extended abstracts of the papers presented on the Workshop held at Budapest, Budapest, Aug. 21–23, 1984) (P. Érdi ed.), MTA KFKI, Budapest, 1985, pp. 31–33.
4. Érdi, P.; Barna, Gy.: Pattern formation in neural systems I., Autorhythmicity, entrainment, quasiperiodicity and chaos in neurochemical systems, In: *Cybernetics and Systems '86*, (R. Trappl ed.), D. Reidel Publishing Company, 1986, pp. 335–342.

Független idézők száma: 4.

Tóth, J.: Structure of the state space in stochastic kinetics, In: *Proceedings of the 5th Pannonian Symposium on Mathematical Statistics*, (Visegrád, Hungary, 1985) (W. Grossman, J. Mogyoródi, I. Vincze, W. Wertz eds.), János Bolyai Mathematical Society, Budapest, 1987, pp. 361–369.

1. MR0956712 (89k:60104)

Független idézők száma: 0.

Tóth, J.: Contribution to the general treatment of random processes used in chemical reaction kinetics, In: *Transactions of the Tenth Prague Conference on Information Theory, Statistical Decision Functions, Random Processes*, Vol. B (Prague, July 7–11, 1986) Academia (Publishing House of the Czechoslovak Academy of Sciences), Prague, 1988, and Reidel, Dordrecht, 1988, pp. 373–379.

1. MR1136343 (92h:92019)

Független idézők száma: 0.

Tóth J.: Bendixson-type theorems with applications, *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* **67** (1) (1987), 31–35.

1. MR0880857 (88a:34057)

2. Erle, D. J.: A boundedness theorem with application to oscillation to oscillation of autocatalytic chemical systems, *Journal of Mathematical Chemistry* **24** (4), (1998), 365–378.

of the solutions, mainly as a prerequisite for applying the Poincare-Bendixson theorem to ... result, also valid in higher dimensions, is achieved by Toth [21]. ...

3. Erle, D. J.: Nonoscillation in closed reversible chemical systems, *Journal of Mathematical Chemistry* **27** (4) (2000), 293–302.

Tóth [12, theorem 3.2] showed nonexistence of periodic solutions in a very special case of non-reversible reactions. ...

4. Giraldo, L.; Gascon, F.: New proof and generalizations of the Demidowitsch-Schneider criterion, *Journal of Mathematical Physics* **41** (9) (2000), 6186–6192.
5. Gonzales-Gascon, F.; Salas, D. P.: On the first integrals of Lotka-Volterra systems, *Phys. Letters A* **266** (4-6) (2000), 336–340.

6. Hewitt, C. G.: An investigation of the dynamic evolution of a class of Bianchi VI-1/9. cosmological models, *Gen. Relat. G* **23** (6) (1991), 691–712. (36 ref.)

Független idézők száma: 5.

Tóth J.: Megjegyzések Márkus György: Miért nincs hermeneutikája a természettudományoknak? című írásához, In: *ELMOHA munkafüzet*, (Érdi P., Tóth J. szerk.), MTA KFKI, Budapest, 1993, pp. 1–9.

1. Pléh Cs.: Van-e jelentése a természetnek, mondanivalója a természettudománynak avagy kell-e hermeneutika a természettudományoknak?, In: *ELMOHA munkafüzet*, MTA KFKI, Budapest, 1993, pp. 1–10.

Független idézők száma: 1.

Tóth J. (szerk.): *Utólag*, Budapest, 1994.

1. Érdi, P.: The brain as a hermeneutic device, *BioSystems* (1996), 179–189.
2. Érdi P.: A kísérleti pszichológia nagy kísérlete: A McCulloch centenárium elé, *Magyar Pszichológiai Szemle* **LIII** (37) (1997/98), 1–4. 59–68.

Független idézők száma: 2.

Tóth J.; Érdi P.: A kémiai reakciókinetika fluktuáció-disszipáció tételéről, I. Elméleti megjegyzések, *Magyar Kémiai Folyóirat* **83** (1) (1977), 47–49.

1. **Független idézők száma: 0.**

Tóth, J.; Érdi, P.: Determination of reaction rate constants of complex chemical reactions from equilibrium fluctuations, In *Proceedings of the 5th Symposium on Computers in Chemical Engineering*, (Czechoslovakia, 5–9 Oct. 1977) 1977, pp. 321–324.

1. Vajda S.; Sándori Zs.; Horváth Sz. G.: Reakciósebességi állandók egyértelmű becslhetőségének egy strukturális feltétele, II. Alkalmazás lineáris és nemlineáris rendszerekre, *Magyar Kémiai Folyóirat* **85** (1979), 454–462.

Független idézők száma: 1.

Tóth J.; Érdi P.: A formális reakciókinetika modelljei, problémái és alkalmazásai, In *A kémia újabb eredményei*, (Csákvári B. szerk.), **41** Akadémiai Kiadó, Budapest, 1978, pp. 227–350.

1. Császár, A.; Jicsinszky, L.; Turányi, T.: Generation of model reactions leading to limit cycle behaviour, *Reaction Kinetics and Catalysis Letters* **18** (1–2) (1981), 65–71.
2. Póta Gy.: *Oszcilláció, oligooszcilláció, autokatalízis és kémiai hullámok*, (Kandidátusi értekezés), KLTE Fizikai-Kémiai Tanszék, Debrecen, 1992.
3. Póta, G.; Stedman, G.: Exotic behaviour of chemically reacting systems, *Acta Chimica Hungarica—Models in Chemistry* **131**(2) (1994), 229–268.
4. Ropolyi L.: A folyamat fogalmának szaktudományos és filozófiai értelmezése, In *Filozófia és szaktudományok. Tanulmányok*, (Horváth J. szerk.), Kossuth Könyvkiadó, Budapest, 1981, pp. 104–115.

Független idézők száma: 4.

Tóth J.; Érdi P.; Török T. L.: A Poisson-eloszlás jelentősége összetett kémiai reakciók sztochasztikus modelljében, *Alkalmazott Matematikai Lapok* **9** (1–2) (1983), 175–196.

1. MR0719263 (85d:80009)
2. Salma, I.; Zemplén-Papp, É.: Comparison of probabilistic models of the distribution of counts *Acta Chimica Hungarica – Models in Chemistry* **129** (1992), 383–395.

Független idézők száma: 1.

1. MR0583890 (82d:80036)
2. Emanuel, N. M.; Gál, D.: *Modeling of Oxidation Processes. Prototype: The oxidation of ethylbenzene*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1986.
3. Érdi P.: *Teremtett valóság*, Typotex Könyvkiadó, Budapest, 2000.

Független idézők száma: 2.

1. Dancsó, A.; Farkas, H.; Farkas, M.; Szabó, Gy.: Investigations into a class of generalized two-dimensional Lotka-Volterra schemes, *Acta Applicanda Mathematicae* **23** (2) (1991), 103–127.

Független idézők száma: 1.

1. MR0840032 (88d:80007)
2. Dancsó, A.; Farkas, H.; Farkas, M.; Szabó, Gy.: Investigations into a class of generalized two-dimensional Lotka-Volterra schemes, *Acta Applicanda Mathematicae* **23** (2) (1991), 103–127.
3. Érdi, P.: *Complexity explained*, Springer, Berlin, Heidelberg, 2008.
4. Farkas, H.: *Evolúciós viselkedéstípusok kémiai és fizikai rendszerekben*, (Doktori értekezés) Budapest, 1992.
5. Hernandez-Bermejo, B.; Fairén, V.: Lotka-Volterra representation of general nonlinear systems, *Math. Biosci.* **140** (1) (1997), 1–32.
6. Holden, A. V.; Muhamad, M. A.: A graphical zoo of strange and peculiar attractors, In *Chaos*, (A. V. Holden ed.), Manchester University Press, Manchester, 1986, pp. 15–35.
7. Poland, D.: Cooperative catalysis and chemical chaos—A chemical model for the Lorenz equations, *Physica D* **65** (1–2) (1993), 86–99.
8. Póta, G.; Stedman, G.: Exotic behaviour of chemically reacting systems, *Acta Chimica Hungarica—Models in Chemistry* **131**(2) (1994), 229–268.
9. Wei, G. X.; Qian, S. L.: Chemical chaotic systems derived from NSG system, *Chaos, soliton. fract.* **15** (4) (2003), 663–671.
10. Xu, W. G.; Li, Q. S.: A chemical chaotic system derived from Chua's circuit, *J Chem Res-S* (6): (2002), 295–296.
11. Zachár, A.: Comparison of transformations from nonkinetic to kinetic models, *Acta Chimica Hungarica – Models in Chemistry* **135** (3) (1998), 425–434.
12. Zhang, S. Y.: *Bibliography on chaos*, World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong, 1991.

Független idézők száma: 12.

1. MR0899823 (88h:92048)
2. Póta Gy.: *Oszcilláció, oligooszcilláció, autokatalízis és kémiai hullámok*, (Kandidátusi értekezés), KLTE Fizikai-Kémiai Tanszék, Debrecen, 1992.

Független idézők száma: 1.

Tóth, J.; Hárs, V.: Specification of oscillating chemical models starting from a given linearized form, *Theoretica Chimica Acta* **70** (2) (1986), 143–150.

1. Dancsó, A.; Farkas, H.; Farkas, M.; Szabó, Gy.: Investigations into a class of generalized two-dimensional Lotka-Volterra schemes, *Acta Applicanda Mathematicae* **23** (2) (1991), 103–127.
2. Dancsó, A.; Farkas, H.: On the "simplest" oscillating chemical system, *Periodica Polytechnica. Chemical Engineering* **33** (1989), 275–285.
3. Farkas, H.; Noszticzius, Z.; Savage, C. R.; Schelly, Z. A.: Two dimensional explodators. 2. Global analysis of the Lotka-Volterra-Brusselator (LVB) model, *Acta Physica Hungarica* **66** (1-4) (1989), 203–220.
4. Póta, G.; Stedman, G.: Exotic behaviour of chemically reacting systems, *Acta Chimica Hungarica—Models in Chemistry* **131**(2) (1994), 229–268.

Független idézők száma: 4.

Tóth, J.; Li, G.; Rabitz, H.; Tomlin, A. S.: The effect of lumping and expanding on kinetic differential equations, *SIAM Journal on Applied Mathematics* **57** (6) (1997), 1531–1556.

1. MR1484940 (98i:34072)
2. Andrew, S. M. ; Baker, Ch. T.H.; Bocharov, G. A.: Rival approaches to mathematical modelling in immunology, *Journal of Computational and Applied Mathematics* **205** (2) (2007), 669–686.

The effect of lumping and expanding the set of ODEs in a biochemical model on the transient and long-range properties of the solutions was examined in [85].
3. Brochot, C.: Parametrisation des modeles physiologiques toxico/pharmacocinetiques, These, UPMC - Paris 6, 2004.
4. Baguelin, M.; LeFèvre, J.; Richard, J. P.: How to deal with potentially huge dimensional state space: The meta-dynamics approach—application to a model of the co-evolution of bacterio-phage populations, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **205** (2) (2007), 687–695.
5. Bienasz, L. K.; Dummling, S.; Speiser, B., Wurde, M.: Use of sensitivity analysis methods in the modelling of electrochemical transients. Part 2. Model expansion and model reduction, *J. Electroanal. Chem.* **447** (1–2) (1998), 173–186.
6. Brown, R. M.: *Modeling and Deterministic Simulation of Chemical Networks Under the Law of Mass Action*, (PhD Thesis) California State University, Channel Islands (2008)

A unique analysis of the specific compositional properties of the species formation function is provided in [28]. Therein a series of necessary and sufficient conditions for what is called **lumping** and **expanding** is specified. Additionally, [28] addresses how lumping changes properties of the numerical solutions, which are either interesting from the point of view of the qualitative theory of differential equations or from the point of view of formal reaction kinetics. Investigation on this subject may lend to a better theory for mass action kinetics.

7. Gorban, A. N.; Karlin, I. V.: Method of invariant manifold for chemical kinetics, *Chemical Engineering Science* **58** (21) (2003), 4751–4768.
8. Gorban, A. N.; Karlin, I. V.; Zinovyev, A. Y.: Invariant grids for reaction kinetics, *Physica A* **333** (2004), 106–154.
9. Gorban, A. N.; Rădulescu, O.: Dynamic and static limitation in multiscale reaction networks, revisited, <http://arxiv.org/abs/physics/0703278> (2007).

More recently, sensitivity analysis and Lie group approach were applied to lumping analysis (Li & Rabitz (1989); Tóth, Li, Rabitz, & Tomlin (1997)), and more general nonlinear forms of lumped concentrations are used"

10. Horváth, Zs.: Effect of lumping on controllability and observability, *Journal of Mathematical Chemistry* (2008).

11. Huynh, N.: *Digital Control and Monitoring Methods for Nonlinear Processes*, PhD Thesis, Worcester Polytechnic Institute, 2006.
12. Huynh, N.; Kazantzis, N.: Parametric optimization of digitally controlled nonlinear reactor dynamics using Zubov-like functional equations, *Journal of Mathematical Chemistry* **38** (4) (2005), 467–487.
 In recent years, the development of powerful analytical and computational tools enabled the analysis of the dynamic behavior of complex nonlinear chemical reaction systems to be performed in a thorough and rigorous manner.
13. Kazantzis, N.; Wright, R. A.: On the nonlinear dynamic state reconstruction problem for chemical/biochemical reaction systems in the presence of model uncertainty, *Journal of Mathematical Chemistry* **36** (2) (2004), 169–190.
14. Levis, R. J.; DeWitt, M. J.: Photoexcitation, ionization, and dissociation of molecules using intense near-infrared radiation of femtosecond duration, (Feature Article), *Journal of Physical Chemistry* **103A** (33) (1999), 6493–6507.
15. Lim, J.: Stability of solutions to a reaction diffusion system based upon chemical reaction kinetics, *Journal of Mathematical Chemistry* **43** (3) (2008), 1134–1140.
16. Rădulescu, O.; Gorban, A. N.; Zinovyev, A.; Lilienbaum, A.: Robust simplifications of multiscale biochemical networks, *BMC Systems Biology*, **2** (86) (2008), 1–55.
17. Yeh, Y. L.; Liao, C. M.; Chen, J. S.; Chen, J. W.: Modelling lumped-parameter sorption kinetics and diffusion dynamics of odor-causing VOCs to dust particles, *Applied Mathematical Modelling* **25** (7) (2001), 593–611.
18. Faraday Discuss., 2002, 120, 197–213, DOI: 10.1039/b109965p

Független idézők száma: 17.

Tóth, J.; Li, G.; Rabitz, H.; Tomlin, A. S.: Reduction of the number of variables in dynamic models, In *Complex Systems in Natural and Economic Sciences*. Proceedings of the Workshop Methods of Non-Equilibrium Processes and Thermodynamics in Economics and Environment Sciences. (19–22 1995 Mátrafüred, Hungary.) (K. Martinás and M. Moreau eds.), 1996, pp. 17–34.

1. Ropolyi L.: Approaches to complexity and complex systems, In: *Complex Systems in Natural and Economic Sciences*. Proceedings of the Workshop Methods of Non-Equilibrium Processes and Thermodynamics in Economics and Environment Sciences. (19–22 1995 Mátrafüred, Hungary.) (K. Martinás and M. Moreau eds.), 1996, pp. 146–152.

Független idézők száma: 1.

Tóth, J.; Rospars, J.-P.: Dynamic modelling of biochemical reactions with applications to signal transduction: Principles and tools using *Mathematica*, *Biosystems* **79** (2005), 33–52.

1. Barnett, M. P.: Symbolic calculation in the life sciences—some trends and prospects, In: *Proceedings of the Conference Algebraic Biology*, 2005, pp. 1–18.

Független idézők száma: 1.

Tóth J., Simon P.: *Differenciálegyenletek. Bevezetés az elméletbe és az alkalmazásokba*, TYPOTEX, Budapest, 2005.

1. Garay B.: Könyvismertetés, *Alkalmazott Matematikai Lapok* **22** (2005) (megjelenőben).
2. Bege A.: *Differenciálegyenletek. Gyakorlatok és feladatok*, Preas Universitară Clujeană –Kolozsvári Egyetemi Kiadó, Cluj-Napoca, 2008.

Független idézők száma: 2.

Tóth, J.; Szili, L.; Zachár, A.: Stability of polynomials, *Mathematica in Education and Research* **7** (2) (1998), 5–12.

1. Bonanno, A.; Urpin, V.: Compressibility and local instabilities of differentially rotating magnetized gas, *The Astrophysical Journal* **662** (2007), 851–859. Burcsi, P.; Kovács, A.: An algorithm checking a necessary condition of number system constructions, *Annales Univ. Sci. Budapest, Sect. Comp.* **25** (2005), 143–152.

Független idézők száma: 1.

Tóth, J.; Török, T. L.: Poissonian stationary distribution: a degenerate case of stochastic kinetics, *Reaction Kinetics and Catalysis Letters* **13** (2) (1980), 167–171.

1. Gabrielli C.; Huet, T., Keddam, M.: Fluctuations in electrochemical systems, 1. General theory on diffusion-limited electrochemical reactions, *Journal of Chemical Physics* **99** (9) (1993), 7232–7239.

Független idézők száma: 1.

Turányi, T.; Bérces, T.; Tóth, J.: The method of quasi-stationary sensitivity analysis, *Journal of Mathematical Chemistry* **2** (4) (1988), 401–409.

1. MR0983057 (89k:80029)

Független idézők száma: 0.

Turányi, T.; Tóth, J.: Comments to an article of Frank-Kamenetski on the Quasi-Steady-State Approximation, *Acta Chimica Hungarica – Models in Chemistry* **129** (6) (1992), 903–914.

1. Griffith, J. F.: Reduced kinetic models and their application to practical combustion systems, *Progress in Energy and Combustion Science* **21** (1) (1995), 25–107.
2. Ibison, P.: Reduction and analysis of oscillatory Landolt-mechanisms, *Journal of Physical Chemistry*, **92** (15) (1992), 6321–6325.
3. Law, C. K.: Combustion at a crossroads: Status and prospects, *Proceedings of the Combustion Institute* **31** (1) (2007) 1–29.
4. Lu, T. F.; Law, C. K.: Linear time reduction of large kinetic mechanisms with directed relation graph: n-Heptane and iso-octane *Combustion and Flame* **144** (1–2) (2006), 24–36.
5. Lu, T. F.; Law, C. K.: Strategies for mechanism reduction for large hydrocarbons: n-heptane, *Combustion and Flame* **154** (1–2) (2008), 153–163.

Független idézők száma: 5.

Az összes független idézetek száma: 480.

4. Független: Publikációk

- Hazainak számítottam olyan nemzetközi szerkesztőbizottsággal is rendelkező folyóiratokat, mint amelyen például a *Mathematica Pannonica*, a *React. Kinet Catal. Lett.*, illetve a nemzeti folyóiratnak tekinthető *Revue Roumaine de Mathématiques Pures et Appliquées*.
- Recenziók, feladatmegoldások, ismeretterjesztő írások, fordítások (Arnold, Bronstejn, Hillier, Dawkins, Oxford, Szkorohod), szerkesztés (Elmoha, Oxford) nem kaptak pontot.

Könyv idegen nyelven

Könyv

1. Érdi, P.; Tóth, J.: *Mathematical Models of Chemical Reactions. Theory and Applications of Deterministic and Stochastic Models*, Manchester University Press – Princeton University Press, Manchester – Princeton, 1989.

Becsült habilitációs pontszám: 4

Tankönyvek, jegyzetek, monográfiák

Tankönyvek

1. Biró, A.; Dezső, O.; Reményi, P.; Tóth, J.: *Lecture notes on computer science*, Gödöllő, 1994, 150 p.
2. Csermely P., Gergely P., Koltay T., Tóth J.: *Kutatás és közlés a természettudományokban*, Osiris, Budapest, 1999, 318 p.

Becsült habilitációs pontszám: 2

3. Érdi P.; Tóth J. (szerk.): *Elmélet, modell, hagyomány*, MTA KFKI, Budapest, 1992, 75 p.
4. Szili L.; Tóth J.: *Matematika és Mathematica*, ELTE Eötvös Kiadó, Budapest, 1996, 396 p.

Becsült habilitációs pontszám: 4

5. Tóth J.: A formális reakciókinetika globális determinisztikus és sztochasztikus modelljéről és néhány alkalmazásáról, *MTA SZTAKI Tanulmányok* **129** (1981), 1–163.

Becsült habilitációs pontszám: 4

6. Tóth J., Simon P. L.: *Differenciálegyenletek. Bevezetés az elméletbe és az alkalmazásokba*, TYPOTEX, Budapest, 2005.

Becsült habilitációs pontszám: 4

Fordítás, szerkesztés

1. Nicholson, J.: *Oxford Concise Dictionary - Mathematics*, (A magyar kiadás főszerkesztője: Tóth J., angolból fordította: Csikja R., Klein O., Nagy I., Ladics T., Lóczy L., Szili L., Tóth J.)
<http://www.hik.hu/tankonyvtar/site/books/b10121/>

Egyetemi jegyzetek

1. Biró A.; Reményi P.; Tóth J.: *Számítástechnika*, (Jegyzet), GATE, Gödöllő, 1992, 88 p.

Becsült habilitációs pontszám: 1.333

2. Biró A.; Reményi P.; Tóth J.: *Számítástechnika I.*, ATE Mezőgazdasági Gépészmérnöki Kar, Gödöllő, 1995, 90 p.

Becsült habilitációs pontszám: 1.333

Folyóiratcikkek idegen nyelven

Cikkek

1. Arányi, P.; Tóth, J.: A full stochastic description of the Michaelis-Menten reaction for small systems, *Acta Biochimica et Biophysica Academiae Scientificarum Hungariae* **12** (4) (1977), 375–388.
Becsült habilitációs pontszám: 2
2. Blicke, T.; Halász, G.; Tóth, J.: Structures, hypergraphs and knowledge representation in chemical engineering science. I – Problem formulation, *The International Journal for Artificial Intelligence in Engineering* **5** (3) (1990), 142–152.
Becsült habilitációs pontszám: 2
3. Brochot, C., Tóth, J.; Bois, F.: Lumping in pharmacokinetics, *Journal of Pharmacokinetics and Pharmacodynamics*, **32** (5-6) (2005), 719-736.
Becsült habilitációs pontszám: 2
4. Császár, A.; Érdi, P.; Jicsinszky, L.; Tóth, J.; Turányi, T.: Several exact results on deterministic exotic kinetics, *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, Leipzig **264** (1983), 449–463.
Becsült habilitációs pontszám: 1.2
5. Csikja, R.; Tóth, J.: Blow up in polynomial differential equations, *Enformatika. International Journal of Applied Mathematics and Computer Sciences* **4** (2) (2007), 728–733.
Becsült habilitációs pontszám: 3
6. Egri, E.; Tóth, J.; Brochot, C.; Bois, F. Y.: Symbolic lumping of some catenary, mamillary and circular compartmental systems, arXiv: 0802.2806v1 [math.CA] 20 Feb 2008
7. Eső, P.; Simonovits, A.; Tóth, J.: Designing benefit rules for flexible retirement: Welfare vs. redistribution, (submitted)
8. Érdi, P.; Kiss, T.; Tóth, J.; Ujfalussy, B.; Zálányi, L.: From Systems Biology to dynamical neuropharmacology: Proposal for a new methodology, *Systems Biology, IEE Proceedings*, **153** (4), 299–308 (2006).
Becsült habilitációs pontszám: 1.2
9. Érdi, P.; Tóth, J.: Stochastic reaction kinetics: "Nonequilibrium thermodynamics" of the state space?, *Reaction Kinetics and Catalysis Letters* **4** (1) (1976), 81–85.
Becsült habilitációs pontszám: 2
10. Érdi, P.; Tóth, J.: Some comments on Prigogine's theories, *Reaction Kinetics and Catalysis Letters* **11** (4) (1979), 371–375.
Becsült habilitációs pontszám: 2
11. Érdi, P.; Tóth, J.: What is and what is not stated by the May–Wigner theorem?, *Journal of Theoretical Biology* **145** (1990), 137–140.
Becsült habilitációs pontszám: 3
12. Frankowicz, M.; Moreau, M.; Szczyński, P. P.; Tóth, J.; Vicente, L.: Fast variables elimination in stochastic kinetics, *Journal of Physical Chemistry* **97** (1993), 1891–1895.
Becsült habilitációs pontszám: 1.2
13. Gaveau, B.; Martinás, K.; Moreau, M.; Tóth, J.: Entropy, extropy and information potential in stochastic systems far from equilibrium, *Physica A (Statistical Mechanics and its Applications)* **305A** (3–4) (2002), 445–466.
Becsült habilitációs pontszám: 1.5
14. Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Decay of the metastable state: different predictions between discrete and continuous models, *Letters in Mathematical Physics* **37** (1996), 285–292.
Becsült habilitációs pontszám: 2

15. Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Master equation and Fokker–Planck equation: Comparison of entropy and rate constants, *Letters in Mathematical Physics* **40** (2) (1997), 101–115.
Becsült habilitációs pontszám: 2
16. Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Dissipation of energy and information in nonequilibrium reaction-diffusion systems, *Physical Review E* **58** (11) (1998), 5351–5354.
Becsült habilitációs pontszám: 2
17. Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Variational nonequilibrium thermodynamics of reaction-diffusion systems. I. The information potential, *Journal of Chemical Physics* **111** (17) (1999), 7736–7747.
Becsült habilitációs pontszám: 2
18. Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Variational nonequilibrium thermodynamics of reaction-diffusion systems. II. Path integrals, large fluctuations and rate constants, *Journal of Chemical Physics* **111** (17) (1999), 7748–7757.
Becsült habilitációs pontszám: 2
19. Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Information potential and transition to criticality for certain two-species systems, *Physica A* **277** (3/4) (2000), 455–468.
Becsült habilitációs pontszám: 2
20. Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Scenarios for self-organized criticality in dynamical systems, *Open Sys. & Information Dyn.* **7** (4) (2000), 297–308.
Becsült habilitációs pontszám: 2
21. Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Variational nonequilibrium thermodynamics of reaction-diffusion systems. III. Progress variables and dissipation of energy and information, *Journal of Chemical Physics* **115** (2) (2001), 680–690.
Becsült habilitációs pontszám: 2
22. Halász, G.; Tóth, J.; Hangos, K. M.: Energy–optimal operation conditions of a tunnel kiln, *Computers and Chemical Engineering* **12** (2/3) (1988), 183–187.
Becsült habilitációs pontszám: 2
23. Halmschlager, A.; Szenthe, L.; Tóth, J.: Invariants of kinetic differential equations, *Electronic Journal of Qualitative Theory of Differential Equations* **14** (2004), 1–14.
Becsült habilitációs pontszám: 1.333
24. Hangos, K. M.; Tóth, J.: Maximum likelihood estimation of reaction-rate constants, *Computers and Chemical Engineering* **12** (2/3) (1988), 135–139.
Becsült habilitációs pontszám: 3
25. Kiss, K., Tóth, J.: n-dimensional ratio-dependent predator-prey systems with memory, *Differential Equations and Dynamical Systems* (2009) – (in press) <http://arxiv.org/abs/0808.0648> ??????
26. Kovács, B.; Tóth, J.: Estimating reaction rate constants with neural networks, *Enformatika. International Journal of Applied Mathematics and Computer Sciences* **4** (2) (2007), 515–519.
Becsült habilitációs pontszám: 3
27. Kovács, K.; Vizvári, B.; Riedel, M.; Tóth, J.: Decomposition of the permanganate/oxalic acid overall reaction to elementary steps based on integer programming theory, *Physical Chemistry, Chemical Physics*, **6** (6)(2004), 1236–1242.
Becsült habilitációs pontszám: 1.5
28. Kutas, T.; Tóth, J.: A stochastic model of phytoplankton dynamics in Lake Balaton, *Journal of Statistical Computation and Simulation* **21** (1985), 241–264.
Becsült habilitációs pontszám: 3

29. Li, G.; Rabitz, H.; Tóth, J.: A general analysis of exact nonlinear lumping in chemical kinetics, *Chemical Engineering Science* **49** (3) (1994), 343–361.
Becsült habilitációs pontszám: 2
30. Li, G.; Tomlin, A. S.; Rabitz, H.; Tóth, J.: Determination of approximate lumping schemes by a singular perturbation method, *Journal of Chemical Physics* **99** (5) (1993), 3562–3574.
Becsült habilitációs pontszám: 1.5
31. Li, G.; Tomlin, A. S.; Rabitz, H.; Tóth, J.: A general analysis of approximate nonlinear lumping in chemical kinetics. I. Unconstrained lumping, *Journal of Chemical Physics* **101** (2) (1994), 1172–1187.
Becsült habilitációs pontszám: 1.5
32. Nagy, I.; Kovács, B.; Tóth, J.: Detailed balance in ion channels: Applications of Feinberg's theorem, *React. Kinet. Catal. Lett.* **96** (2) (2009) 263–267.
Becsült habilitációs pontszám: 1.3
33. Nagy, I.; Póta, Gy.; Tóth, J.: Detailed balanced and unbalanced triangle reactions, *Journal of Chemical Education* (to appear)
34. Rózsa, Z.; Tóth, J.: Exact linear lumping in abstract spaces, *Electronic Journal of Qualitative Theory of Differential Equations* **21** (2004), 1–20.
Becsült habilitációs pontszám: 2
35. Schneider, K. R.; Wegner, B.; Tóth, J.: Qualitative analysis of a model for synaptic slow waves, *Journal of Mathematical Chemistry* **1** (1987), 219–234.
Becsült habilitációs pontszám: 2
36. Schuman, B.; Tóth, J.: No limit cycle in two species second order kinetics, *Bull. sci. math.* **127** (2003), 222–230.
Becsült habilitációs pontszám: 3
37. Sipos, T.; Tóth, J.; Érdi, P.: Stochastic simulation of complex chemical reactions by digital computer, I. The model, *Reaction Kinetics and Catalysis Letters* **1** (1) (1974), 113–117.
Becsült habilitációs pontszám: 1.333
38. Sipos, T.; Tóth, J.; Érdi, P.: Stochastic simulation of complex chemical reactions by digital computer, II. Applications, *Reaction Kinetics and Catalysis Letters* **1** (2) (1974), 209–213.
Becsült habilitációs pontszám: 1.333
39. Szili, L.; Tóth, J.: Necessary condition of the Turing instability, *Physical Review E* **48** (1) (1993), 183–186.
Becsült habilitációs pontszám: 3
40. Szili, L.; Tóth, J.: On the origin of Turing instability, *Journal of Mathematical Chemistry* **22** (1) (1997), 39–53.
Becsült habilitációs pontszám: 3
41. Szili, L.; Tóth, J.: Numerical and symbolic applications of *Mathematica*, *Mathematica Pannonica* **10** (1) (1999), 83–92.
Becsült habilitációs pontszám: 2
42. Tomlin, A. S.; Li, G.; Rabitz, H.; Tóth, J.: A general analysis of approximate nonlinear lumping in chemical kinetics. II. Constrained lumping, *Journal of Chemical Physics* **101** (2) (1994), 1188–1201.
Becsült habilitációs pontszám: 1.5
43. Tóth, J.: What is essential to exotic kinetic behaviour?, *Reaction Kinetics and Catalysis Letters* **9** (4) (1978), 377–381.
Becsült habilitációs pontszám: 4

44. Tóth, J.: Gradient systems are cross-catalytic, *Reaction Kinetics and Catalysis Letters* **12** (3) (1979), 253–257.
Becsült habilitációs pontszám: 4
45. Tóth, J.: Poissonian stationary distribution in a class of detailed balanced reactions, *Reaction Kinetics and Catalysis Letters* **18** (1-2) (1981), 169–173.
Becsült habilitációs pontszám: 4
46. Tóth, J.: Elementa traktado de Wiener-filtrado, *Matematiko Translimen* **6** (1983), 21–23.
Becsült habilitációs pontszám: 4
47. Tóth, J.: Bendixson-type theorems with applications, *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* **67** (1) (1987), 31–35.
Becsült habilitációs pontszám: 6
48. Tóth, J.: A functional equation related to random fields, *Revue Roumaine de Mathématiques Pures et Appliquées* **37** (3) (1992), 261–264.
Becsült habilitációs pontszám: 4
49. Tóth, J.: On the equations of chemical kinetics, *Nonlinear Vibration Problems—Zagadnienia Drgań Nieliniowych* **25** (1993), 447–457.
Becsült habilitációs pontszám: 4
50. Tóth, J.: Multistationarity is neither sufficient nor necessary to oscillation, *Journal of Mathematical Chemistry* **25** (4) (1999), 393–397.
Becsült habilitációs pontszám: 6
51. Tóth, J.; Hárs, V.: Orthogonal transforms of the Lorenz- and Rössler-equations, *Physica* **19D** (1986), 135–144.
Becsült habilitációs pontszám: 3
52. Tóth, J.; Hárs, V.: Specification of oscillating chemical models starting from a given linearized form, *Theoretica Chimica Acta* **70** (1986), 143–150.
Becsült habilitációs pontszám: 3
53. Tóth, J.; Li, G.; Rabitz, H.; Tomlin, A. S.: The effect of lumping and expanding on kinetic differential equations, *SIAM Journal on Applied Mathematics* **57** (6) (1997), 1531–1556.
Becsült habilitációs pontszám: 1.5
54. Tóth, J.; Rospars, J.-P.: Dynamic modelling of biochemical reactions with applications to signal transduction: Principles and tools using *Mathematica*, *Biosystems* **79** (2005), 33–52.
Becsült habilitációs pontszám: 3
55. Tóth, J.; Szili, L.; Zachár, A.: Stability of polynomials, *Mathematica in Education and Research* **7** (2) (1998), 5–12.
Becsült habilitációs pontszám: 2
56. Tóth, J.; Török, T. L.: Poissonian stationary distribution: a degenerate case of stochastic kinetics, *Reaction Kinetics and Catalysis Letters* **13** (2) (1980), 167–171.
Becsült habilitációs pontszám: 2
57. Tóth, J.; Ván, P.: Applying a list of functions to an argument: a dual of Map, *Mathematica in Education and Research* **9** (3/4) (2000), 58–63.
Becsült habilitációs pontszám: 3
58. Turányi, T.; Bérces, T.; Tóth, J.: The method of quasi-stationary sensitivity analysis, *Journal of Mathematical Chemistry* **2** (4) (1988), 401–409.
Becsült habilitációs pontszám: 2

59. Turányi, T.; Tóth, J.: Comments to an article of Frank-Kamenetski on the Quasi-Steady-State Approximation, *Acta Chimica Hungarica—Models in Chemistry* **129** (6) (1992), 903–914.

Becsült habilitációs pontszám: 2

Demonstrációk

1. Csima, G.; Szirmai J.; Tóth, J.: Iso-Optic Curve of the Ellipse, from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/IsoOpticCurveOfTheEllipse/>
2. Kabai, S.; Tóth, J.: Building Frame with Catenary Roof Beams, from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/BuildingFrameWithCatenaryRoofBeams/>
3. Kabai, S.; Tóth, J.: Jefferson National Expansion Memorial, from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/JeffersonNationalExpansionMemorial/>
4. Kabai, S.; Tóth, J.: Maximum Size of Involute Gear Teeth, from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/MaximumSizeOfInvoluteGearTeeth/>
5. Várdai, J., Tóth, J.: Hopf Bifurcation in the Brusselator, from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/HopfBifurcationInTheBrusselator/>

Feladatmegoldások

2 tétel.

Folyóiratcikkek magyar nyelven

Cikkek

1. Deák J.; Tóth J.; Vizvári B.: Anyagmegmaradás összetett kémiai mechanizmusokban, *Alkalmazott Matematikai Lapok* **16** (1–2) (1992), 73–97.
Becsült habilitációs pontszám: 0.666
2. Érdi P.; Sipos T.; Tóth J.: Összetett kémiai reakciók sztochasztikus szimulálása számítógéppel, *Magyar Kémiai Folyóirat* **79** (3) (1973), 97–108.
Becsült habilitációs pontszám: 0.666
3. Érdi P.; Tóth J.: A kémiai reakciókinetika fluktuáció-disszipáció tételéről, II. Gyakorlati megjegyzések, *Magyar Kémiai Folyóirat* **83** (1) (1977), 50–51.
Becsült habilitációs pontszám: 1
4. Hárs V.; Tóth J.: Kaotikus és kinetikai differenciálegyenletek, *Alkalmazott Matematikai Lapok* **12** (3–4) (1986), 317–328.
Becsült habilitációs pontszám: 1
5. Kanyár B.; Tóth J.: Lineáris differenciálegyenlet-rendszer illesztése gradiens módszerrel, *Alkalmazott Matematikai Lapok* **2** (3–4) (1976), 259–268.
Becsült habilitációs pontszám: 1
6. Kutas T.; Tóth J.: A balatoni fitoplankton dinamikájának egy sztochasztikus modellje, *Alkalmazott Matematikai Lapok* **12** (1–2) (1986), 143–159.
Becsült habilitációs pontszám: 1

7. Rácz I.; Gyarmati L.; Tóth J.: Hidrofil és lipofil karakterű felületaktív anyagok befolyása a szalicilsav-transzport kinetikájára háromfolyadékteretes rendszer esetén, *Acta Pharmaceutica Hungarica* **47** (1977), 201–208.

Becsült habilitációs pontszám: 0.666

8. Simonovits A.; Tóth J.: Új eredmények az optimális járadékfüggvény tervezéséről, *Közgazdasági Szemle* **LIV** (2007), 628–643.

Becsült habilitációs pontszám: 1

9. Tóth J.: A kémiai reakciókinetika direkt és inverz feladatairól, *Alkalmazott Matematikai Lapok* **7** (3-4) (1981), 253–269.

Becsült habilitációs pontszám: 2

10. Tóth J.; Érdi P.: A kémiai reakciókinetika fluktuáció-disszipáció tételéről, I. Elméleti megjegyzések, *Magyar Kémiai Folyóirat* **83** (1) (1977), 47–49.

Becsült habilitációs pontszám: 1

11. Tóth J.; Érdi P.; Török T. L.: A Poisson-eloszlás jelentősége összetett kémiai reakciók sztochasztikus modelljében, *Alkalmazott Matematikai Lapok* **9** (1-2) (1983), 175–196.

Becsült habilitációs pontszám: 0.666

12. Tóth J.; Hárs V.: A rekeszrendszerek inverz feladatáról, *Alkalmazott Matematikai Lapok* **5** (1-2) (1979), 49–61.

Becsült habilitációs pontszám: 1

13. Tóth J.; Hárs V.: Oszcilláló reakciók előállítás linearizáltjukból, *Alkalmazott Matematikai Lapok* **12** (3-4) (1986), 309–316.

Becsült habilitációs pontszám: 1

14. Vizvári B.; Tóth J.: Számelméleti eljárások felhasználása bruttó mechanizmusok rejtett reakcióinak felderítésére, *Magyar Kémiai Folyóirat* **106** (10) (2000), 405–413.

Becsült habilitációs pontszám: 1

Ismertető, recenziók

2 tétel.

Feladatmegoldások

2 tétel.

Ismeretterjesztő írások

12 tétel.

Fordítás

1. Arnold L.: A kémiai reakciók matematikai modelljeinek konzisztenciájáról, *Alkalmazott Matematikai Lapok* **7** (3-4) (1981), 345–356, (Angolból fordította: Tóth J.)

Kiadványrészesetek idegen nyelven

Könyvrészesetek

1. Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Master equations and path-integral formulation of variational principles for reactions, In: *Variational and Extremum Principles in Macroscopic Systems*, Chapter 15, (S. Sienytucz, H. Farkas eds.), Elsevier, 2005, pp. 315–338.

Becsült habilitációs pontszám: 1.333

2. Tóth, J.: On some problems of modelling in reaction kinetics, In: *Bulletin of the University of Agricultural Sciences*, 75th Anniversary Edition, Vol. II, Gödöllő, (Gy. Füleky, ed.) (1995–96), pp. 51–58.

Becsült habilitációs pontszám: 2

3. Tóth, J.; Szili, L.; Érdi, P.: Chemical reaction kinetics as a prototype of nonlinear science, In: *The Paradigm of Self-Organization II*, (London) (G. J. Dalenoort ed.), Gordon and Breach, 1994, pp. 184–201.

Becsült habilitációs pontszám: 1.333

Konferenciakiadványokban megjelent hosszabb írások

1. Érdi, P.; Gröbler, T.; Tóth, J.: On the classification of some classification problems, In: *International Symposium on Information Physics*, (Iizuka, Fukuoka, Japan) Kyushu Institute of Technology, 1993, pp. 110–117.

Becsült habilitációs pontszám: 1.333

2. Érdi, P.; Réti, P.; Tóth, J.: Some investigations in qualitative reaction kinetics, In: *Proceedings of the Congress International "Contribution des Calculateurs électroniques au développement du Génie Chimique et de la Chimie Industrielle"*, (Paris, du 7 au 10 Mars, 1978) 1978, pp. 43–47.

Becsült habilitációs pontszám: 1.333

3. Érdi, P.; Tóth, J.: On the theory of reacting mixtures, In: *Proceedings of the Third Conference on Applied Chemistry. Unit Operations and Processes*, (Veszprém, Hungary, 29–31 Aug. 1977) 1977, pp. 1–8.

Becsült habilitációs pontszám: 1

4. Érdi, P.; Tóth, J.: Oscillatory phenomena at the synapse, In: *Advances in Physiological Sciences*, (Satellite Conference to the XXVIII International Congress of Physiological Sciences, Budapest, July 13–19, 1980) Mathematical and Computational Methods in Physiology (L. Fedina, B. Kanyár, B. Kocsis, M. Kollai eds.), 34 Pergamon Press – Akadémiai Kiadó, Budapest, 1981, pp. 113–121.

Becsült habilitációs pontszám: 1

5. Érdi, P.; Tóth, J.: Anomalous stochastic kinetics, In: *Chemical Reactivity in Liquids. Fundamental Aspects*, (Paris, Sept. 7–11, 1987) (M. Moreau and P. Turq eds.), Plenum Press, New York and London, 1988, pp. 511–516.

Becsült habilitációs pontszám: 2

6. Érdi, P.; Tóth, J.: Molecular computation: a dynamic approach, In: *COMBIO'94 (Summer workshop on the computational modelling in biosciences)*, (Nyíregyháza, 1994.08.23) (I. Erényi, I. Molnár, K. Tarnay eds.), RÍM Kiadó, Nyíregyháza, 1994, pp. 41–52.

Becsült habilitációs pontszám: 1

7. Érdi, P.; Tóth, J.: Towards a dynamic neuropharmacology: Integrating network and receptor levels, In: *Brain, Vision and Artificial Intelligence*, (M. De Gregorio, V. Di Maio, M. Frucci and C. Musio eds.), *Lecture Notes in Computer Science* 3704, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 2005, pp. 1–14.

Becsült habilitációs pontszám: 2

8. Érdi, P.; Tóth, J.; Hárs, V.: Some kinds of exotic phenomena in chemical systems, In: *Colloquia Mathematica Societatis János Bolyai*, (Szeged, Hungary, 1979) Qualitative Theory of Differential Equations (M. Farkas ed.), 30 North-Holland – János Bolyai Mathematical Society, Budapest, 1981, pp. 205–229.

Becsült habilitációs pontszám: 0.666

9. Garay, M. B.; Csikja, R.; Tóth, J.: Some chaotic properties of the β -hysteresis transformation, *Proc. of the 2008 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications*, Danubius Health Spa Resort Helia, Budapest, Republic of Hungary, September 7–10, 2008, pp. 191–194.
Becsült habilitációs pontszám: 0.666
10. Gaveau, B.; Moreau, M.; Tóth, J.: Path integrals and non-equilibrium thermodynamics, In: *Path integrals from peV to TeV*, (Florence, 1998), World Sci. Publishing, River Edge, NJ, 1999, pp. 52–58.
Becsült habilitációs pontszám: 1.333
11. Halmschlager, A.; Tóth, J.: Über Theorie und Anwendung von polynominalen Differentialgleichungen, In: *Wissenschaftliche Mitteilungen der 16. Frühlingsakademie*, Technische und Wirtschaftswissenschaftliche Universität Budapest, Institut für Ingenieurweiterbildung, Budapest, 2004, pp. 35–40.
Becsült habilitációs pontszám: 1
12. Hangos, K. M.; Tóth, J.: Maximum likelihood estimation of reaction rate constants, In: *Proceedings of the MATCHEM*, (Conference on Mathematical Methods in Chemical Engineering, Balatonfüred, Hungary, 5–8 May, 1986) Hungarian Chemical Society, Budapest, 1986, pp. 183–188.
Becsült habilitációs pontszám: 1
13. Hárs, V.; Tóth, J.: On the inverse problem of reaction kinetics, In: *Colloquia Mathematica Societatis János Bolyai*, (Szeged, Hungary, 1979) Qualitative Theory of Differential Equations (M. Farkas ed.), North-Holland – János Bolyai Mathematical Society, Budapest, 1981, pp. 363–379.
Becsült habilitációs pontszám: 1
14. Hárs, V.; Tóth, J.; Érdi, P.; Hámori, J.: A formal dynamic model of the development of Purkinje dendritic spines, In: *Advances in Physiological Sciences*, (Satellite Conference to the XXVIII International Congress of Physiological Sciences, Budapest, July 13–19, 1980) Mathematical and Computational Methods in Physiology (L. Fedina, B. Kanyár, B. Kocsis, M. Kollai eds.), **34** Pergamon Press – Akadémiai Kiadó, Budapest, 1981, pp. 239–243.
Becsült habilitációs pontszám: 0.5
15. Kutas, T.; Tóth, J.: Stochastic and deterministic approach to modelling a lake ecosystem, In: *Proceedings of Simulation of Systems in Biology and Medicine*, (SYSI '83, Prague, 1983) 1983.
Becsült habilitációs pontszám: 2
16. Kutas, T.; Tóth, J.: Simulation of a lake ecosystem using deterministic and stochastic models, In: *SIMULA Information*, (Proceedings of the Twelfth SIMULA User's Conference, Budapest, 29–31 Aug. 1984) Norwegian Computing Center, Oslo, 1984, pp. 107–110.
Becsült habilitációs pontszám: 2
17. Tóth, J.: A mass action kinetic model of neurochemical transmission, In: *Dynamic Phenomena in Neurochemistry and Neurophysics: Theoretical Aspects*, (Budapest, Aug. 21–23, 1984) (P. Érdi ed.), MTA KFKI, Budapest, 1985, pp. 52–55.
Becsült habilitációs pontszám: 2
18. Tóth, J.: Notes on coexistence, In: *Proceedings of the 11th International Conference on Nonlinear Oscillations*, (Budapest, Aug. 17–23, 1987) (M. Farkas, V. Kertész, G. Stépán eds.), János Bolyai Mathematical Society, Budapest, 1987, pp. 844–847.
Becsült habilitációs pontszám: 2
19. Tóth, J.: Structure of the state space in stochastic kinetics, In: *Proceedings of the 5th Pannonian Symposium on Mathematical Statistics*, (Visegrád, Hungary, 1985) (W. Grossman, J. Mogyoródi, I. Vincze, W. Wertz eds.), János Bolyai Mathematical Society, Budapest, 1987, pp. 361–369.
Becsült habilitációs pontszám: 2

20. Tóth, J.: Contribution to the general treatment of random processes used in chemical reaction kinetics, In: *Transactions of the Tenth Prague Conference on Information Theory, Statistical Decision Functions, Random Processes*, (Prague, July 7–11, 1986) Academia (Publishing House of the Czechoslovak Academy of Sciences), Prague, 1988, pp. 373–379.
Becsült habilitációs pontszám: 4
21. Tóth, J.: Formal Kinetics with Applications, 6th World Multiconference on Systemics, Cybernetics and Informatics (July 14–18, 2002, Orlando, FL, USA), Vol. XI (Computer Science II) (N. Callaos, M. Morgens-tern and B. Sanchez eds.), pp. 573–576.
Becsült habilitációs pontszám: 6
22. Tóth, J.; Brochot, C., Bois, F.: Lumping in toxicokinetics, Poster presented at the ESF REACTOR workshop "Nonlinear phenomena in chemistry" Budapest, 24–27 Jan. 2003.
http://www.phy.bme.hu/deps/chem_ph/Etc/Reactor2003/reactor2003.html
Becsült habilitációs pontszám: 0.666
23. Tóth, J.; Érdi, P.: On the theory of "pure" reaction kinetics, In: *Proceedings of the Third Conference on Applied Chemistry. Unit Operations and Processes*, (Veszprém, Hungary, 29–31 Aug. 1977) 1977, pp. 71–76.
Becsült habilitációs pontszám: 1
24. Tóth, J.; Érdi, P.: Determination of reaction rate constants of complex chemical reactions from equilibrium fluctuations, In: *Proceedings of the 5th Symposium on Computers in Chemical Engineering*, (Czechoslovakia, 5–9 Oct. 1977) 1977, pp. 321–324.
Becsült habilitációs pontszám: 2
25. Tóth, J.; Érdi, P.: Kinetic symmetries: Some hints, In: *Chemical Reactivity in Liquids. Fundamental Aspects*, (Paris, Sept. 7–11, 1987) (M. Moreau and P. Turq eds.), Plenum Press, New York and London, 1988, pp. 517–522.
Becsült habilitációs pontszám: 2
26. Tóth, J.; Érdi, P.; Sipos, T.: Stochastic simulation of complex chemical reactions by digital computer, In: *Proceedings of the 2nd Symposium on Computers in Chemical Engineering*, (Ústí nad Labem, Czechoslovakia, Nov. 1973) 1973, pp. 83–89.
Becsült habilitációs pontszám: 1.3
27. Tóth, J.; Halász, G. Gy.: Estimation of tunnel kiln parameters, In: *Proceedings of the 8th IFAC/IFORS Symposium on Identification and System Parameter Estimation*, (Beijing, 27–31 Aug. 1988) (Han-Fu Chen ed.), IFAC by Pergamon Press, China, 1988, pp. 1559–1563.
Becsült habilitációs pontszám: 3
28. Tóth, J.; Hangos, K. M.; Halász, G. Gy.: Energy-optimal operation conditions of a tunnel kiln, In: *Proceedings of the MATCHEM*, (Conference on Mathematical Methods in Chemical Engineering, Balatonfüred, Hungary, 5–8 May, 1986) Hungarian Chemical Society, Budapest, 1986, pp. 435–442.
Becsült habilitációs pontszám: 0.667
29. Tóth, J.; Kovács, K.; Vizvári, B.; Riedel, M.: Computer assisted study of the mechanism of the permanganate/oxalic acid reaction, Poster presented at the ESF REACTOR workshop "Nonlinear phenomena in chemistry" Budapest, 24–27 Jan. 2003.
http://www.phy.bme.hu/deps/chem_ph/Etc/Reactor2003/reactor2003.html
Becsült habilitációs pontszám: 0.5
30. Tóth, J.; Kutas, T.; Csáki, P.: Estimation and prediction in a stochastic lake eutrophication model, In: *Proceedings of Simulation of Systems in Biology and Medicine*, (SYSI '84, Prague, 1984) 1984.
Becsült habilitációs pontszám: 1.333

31. Tóth, J.; Li, G.; Rabitz, H.; Tomlin, A. S.: Reduction of the number of variables in dynamic models, In: *Complex Systems in Natural and Economic Sciences*, (Mátrafüred, 19–22 September, 1995.) (K. Martinás, M. Moreau eds.), ELFT, Budapest, 1996, pp. 17–34.

Becsült habilitációs pontszám: 0.5

32. Tóth, J.; Török, T. L.: Stationary distributions in stochastic kinetics, In: *Advances in Physiological Sciences*, (Satellite Conference to the XXVIII International Congress of Physiological Sciences, Budapest, July 13–19, 1980) *Mathematical and Computational Methods in Physiology* (L. Fedina, B. Kanyár, B. Kocsis, M. Kollai eds.), 34 Pergamon Press – Akadémiai Kiadó, Budapest, 1981, pp. 103–111.

Becsült habilitációs pontszám: 0.5

Konferenciakiadványokban megjelent előadáskivonatok

11 tétel.

Kiadványrészletek magyar nyelven

Könyvrészletek

1. Csermely, P.; Gergely, J.; Koltay, T.; Tóth J.: A megismerés formái stb. In: *A tudomány egésze. A magyar tudomány tudománypedagógiai szemléje. Tudománytan és kutatástan*, (Zsolnai J. szerk.), Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2005 (CD ROM).

Becsült habilitációs pontszám: 1.5

2. Érdi P.; Tóth J.: A kémiai reakció termodinamikájának sztochasztikus formulázásáról, In: *A kémia újabb eredményei*, (Csákvári B. szerk.), 31 Akadémiai Kiadó, Budapest, 1976, pp. 177–298.

Becsült habilitációs pontszám: 3

3. Tóth J.: Erről, arról, In: *Elmélet, modell, hagyomány*, (Budapest) (Érdi P., Tóth J. szerk.), MTA KFKI, Budapest, 1992, pp. 66–75.

4. Tóth J.; Érdi P.: A formális reakciókinetika modelljei, problémái és alkalmazásai, In: *A kémia újabb eredményei*, (Csákvári B. szerk.), 41 Akadémiai Kiadó, Budapest, 1978, pp. 227–350.

Becsült habilitációs pontszám: 3

Egyetemi jegyzetrészletek

1. Farkas H.; Györgyi L.; Póta Gy.; Tóth J.: Az egzotikus kinetikai rendszerek matematikájának alapjai, In: *Nemlineáris dinamika és egzotikus kinetikai jelenségek kémiai rendszerekben*, Egyetemi jegyzet (Kézirat), (Debrecen, Budapest, Gödöllő) (Bazsa Gy. szerk.), 1992, pp. 13–116.

Becsült habilitációs pontszám: 0.5

2. Tóth J.: Igen sok komponenst tartalmazó elegyek reakciókinetikájának alapfogalmai, In: *Racionális kémiai termodinamika*, (Érdi P. szerk.), ELTE TTK Kémiai Kibernetikai Laboratórium, Budapest, 1978, pp. 172–198.

Becsült habilitációs pontszám: 1

3. Tóth J.; Érdi P.: A sztochasztikus kinetikai modellek nélkülözhetetlensége, In: *Nemlineáris dinamika és egzotikus kinetikai jelenségek kémiai rendszerekben*, Egyetemi jegyzet (Kézirat), (Debrecen, Budapest, Gödöllő) (Bazsa Gy. szerk.), 1992, pp. 117–143.

Becsült habilitációs pontszám: 1

4. Tóth J.; Réti P.; Ropolyi L.; Érdi P.; Valkó P.: Megjegyzések a makroszkópikus elméleti fizika jelölésrendszeréhez, In: *Racionális kémiai termodinamika*, (Érdi P. szerk.), ELTE TTK kémiai Kibernetikai Laboratórium, Budapest, 1978, pp. 152–171.

Becsült habilitációs pontszám: 0.2

Konferenciakiadványokban megjelent hosszabb írások

1. Kutas T.; Tóth J.: A balatoni ökoszisztéma sztochasztikus és determinisztikus modellje, In: *Számítástechnikai és kibernetikai módszerek alkalmazása az orvostudományban és a biológiában*, (Győri I., Csirik J., Eller J., Madarász I. szerk.), Neumann János számítógéptudományi Társaság, Szeged, 1984, pp. 110–113.

Becsült habilitációs pontszám: 0.5

2. Szili L.; Tóth J.: A Turing-féle instabilitásról, In: *Termodinamikai előadások*, (Lámer G. szerk.), Eötvös Loránd Fizikai Társulat, Budapest, 1995, pp. 143–150.

Becsült habilitációs pontszám: 0.5

3. Tóth J.: Megjegyzések Márkus György: Miért nincs hermeneutikája a természettudományoknak? című írásához, In: *ELMOHA munkafüzet*, (Érdi P., Tóth J. szerk.), MTA KFKI, Budapest, 1993, pp. 1–9.

Konferenciakiadványokban megjelent előadáskivonatok

3 tétel.

Fordítások

1. Bronstejn, I. N.; Szemengyajev, K. A.; Musiol, G.; Mühlig, H.: *Matematikai kézikönyv, 17. fejezet: Dinamikai rendszerek és káosz*, TYPOTEX Kiadó, Budapest, 2000, pp. 808–857 (németből fordította: Tóth J.).
2. Hillier F. S.; Lieberman G. J. : *Bevezetés az operációkutatásba*, LSI, Budapest, 1995, (angolból fordította: Keresztfalvi T., Matolcsi T., Tóth J.)

Disszertációk magyar nyelven

1. Tóth J.: *A biológiai tanulás modelljeiről*, (Szakdolgozat), SOTE Orvosi Vegytani Intézet – MTA SZTAKI, Budapest, 1971. 102 p.
2. Tóth J.: *Szabályos és különös viselkedésű reakciókinetikai modellek*, (Kandidátusi értekezés), MTA SZTAKI, Budapest, 1985, 134 p.

Kéziratok idegen nyelven

14 tétel, többnyire SZTAKI Working Paperek.

Kéziratok magyar nyelven

Kéziratok

1. *Erről-arról* (Interdiszciplináris folyóirat) 1–3(197???–197???).
2. Almásy G.; Halász G. Gy.; Hangos K. M.; Nagy M.; Tóth J.; Turkey A.: *Az Atomerőművi Operátori Tanácsadó Rendszer feladatai és az alkalmazható módszerek áttekintése*, MTA SZTAKI Folytonos Folyamatok Irányítása Osztály, Budapest, 1988, 195 p.
3. Biró A.; Reményi P.; Tóth J.: *Az agrár-felsőoktatási intézmények VIII. Országos Számítástechnikai Versenye*, Gödöllő, 1993, 25 p.
4. Csatlós Á., Tóth J.: *Matematikai statisztikai eszközök és módszerek alkalmazása a minőségbiztosításban a Mathematica programcsomag segítségével*, Hódmezővásárhely – Gödöllő, 1999, kb. 100 oldal.
5. Deák J.; Tóth J.; Vizvári B.: *Tömegmegmaradás összetett kémiai mechanizmusokban*, MTA SZTAKI Report 35 (1990), 1–44.
6. Érdi P.; Tóth J.: *A CHEMOTON-elméletről*, 1974, 5 p.

7. Érdi P.; Tóth J. (szerk.): *ELMOHA munkafüzet*, MTA KFKI, Budapest, 1993.
8. Hangos K. M.; Almásy G.; Ács E.; Halász G.; Király L.; Tóth J.: *Az Operátori Tanácsadó Rendszer műszaki terve (rendszerterve)*, Budapest, 1988, 140 p.
9. Hangos K. M.; Almásy G.; Halász G. Gy.; Sztanó T.; Tóth J.; Turkey A.: *Az Operátori Tanácsadó Rendszer tudásbázisának szerkezeti terve*, MTA SZTAKI Folytonos Folyamatok Irányítása Osztály, Budapest, 1988.
10. Hangos K. M.; Turkey A.; Almásy G.; Halász G. Gy.; Tóth J.: *Az Operátori Tanácsadó Rendszer funkcionális feladatterve*, Budapest, 1988, 96 p.
11. Schneider K. R.; Wegner B.; Tóth J.: *A szinaptikus lassú hullámok egy modelljének kvalitatív vizsgálata*, Berlin – Budapest, 1987, 24 p.
12. Tóth J.: *Sztocasztikus folyamatok és differenciálegyenletek néhány kémiai és biológiai alkalmazásáról*, Budapest, 1974, 32 p.
13. Tóth J.: *Sztocasztikus és determinisztikus folyamatok biológiai alkalmazásáról*, Budapest, 197???, 27 p.
14. Tóth J.: *A matematikai folyamatfogalmakról*, (Kézirat: kandidátusi vizsgához készült dolgozat), Budapest, 1981, 53 p.
15. Tóth J. (szerk.): *Utólag*, Budapest, 1994.
16. Tóth J.: A reakciókinetika néhány problémájáról, *Manuscripta* **1** (2) (1995), 1–9.
17. Tóth J., Szili L.: Matematikai programcsomagok összehasonlítása, *Manuscripta* **1** (1) (1995), 1–34.
18. Tóth J.; Csáki P.: *Kvantális dózis-válasz görbék elemzése*, (Irodalmi áttekintés), (Készült a Számítógépes Hatóanyagtervezési Társaság felkérésére), Budapest, 1981, 41 p.
19. Tóth J.; Csáki P.: *A. O. Grigg többváltozós logit-felületet illesztő programjának ismertetése*, (Készült a számítógépes Hatóanyagtervezési Társaság felkérésére), Budapest, 1982, 19 p.
20. Tóth J.; Csáki P.: *Együttes hatások statisztikai értékelése*, (Irodalmi áttekintés), (Készült a számítógépes Hatóanyagtervezési Társaság felkérésére), Budapest, 1982, 28 p.
21. Tóth J.; Érdi P.; Török T. L.: A Poisson-eloszlás jelentősége összetett kémiai reakciók sztochasztikus modelljében, *MTA SZTAKI Working Paper MS/7* (1982), 1–50.
22. Tóth J.; Halász G.: *Szennyeződések terjedésének modellezése*, 1990, 31 p.
23. Tóth J.; Halász G.: *Áramló folyadékokban ülepedő szemcsékhez kötött szennyeződések terjedésének modellezése*, 1991, 41 p.
24. Tóth J.; Szili, L.: Differenciálegyenletek megoldása a *Mathematica* programmal (A *Numerical solution of Ordinary Differential Equations* című anyag melléklete), 199???, 27 p.

Fordítások

1. Dawkins, R.: Egyetemes biológia, 1993 *Nature*, **360** (1992), 25–26. (angolból fordította: Tóth J.) 3 p.
2. Szkorohod A. V. (Szerk. V. S. Korolyuk): *Véletlen mezők*, 1978, (Oroszból fordította: Hangos K., Tóth J., 1984) 29 p.

(Meghívásra, felkérésre tartott) újabb előadások

1. Tóth J.: A dinamikai rendszerek matematikai alapjairól, 7. MAKOG 1999. január, Visegrád.
2. Tóth J.: Kinetics, differential equations and *Mathematica*, Seminar at the Doctoral School, P. & M. Curie Univ., Paris, France, Jan. 2002.
3. Tóth J.: Deterministic and stochastic models of reaction kinetics, INERIS, Verneuil-en-Halatte, France, Jan. 2002.
4. Tóth, J.: Lumping: Reduction of the number of variables in complex models, (Applications of *Mathematica*, Minisymposium, March 19, 2002, BUTE Inst. Math. Dept. Analysis)
5. Tóth J.: *Mathematica* és komputációtudomány, Neuronhálózatok strukturális kérdései, (2002. július 1–3., Budapest, MTA KFKI).
6. Tóth, J.: Formal Kinetics with Applications, 6th World Multiconference on Systemics, Cybernetics and Informatics (July 14-18, 2002, Orlando, FL, USA).
7. Tóth, J. (keynote speaker): From Formal Reaction Kinetics to Signal Transduction & Pharmacokinetics: A Need for General Tools Biocomplexity 7, Unravelling the function and kinetics of biochemical networks: from experiments to systems biology, May 9–11, 2005, Indiana Memorial Union, Bloomington, Indiana biocomplexity.indiana.edu/events/bio7/agenda.php
8. Tóth, J.: *Mathematica*—How and why?, May 18, 2005, Kalamazoo College, MI.
9. Tóth, J.: The life of an applied mathematician in Budapest, May 2005, Kalamazoo College, MI.
10. Tóth, J.: Introduction to stochastic reaction kinetics, May 18, 2006, Kalamazoo College, MI.
11. Tóth, J.; Szili, L.: ODEs, reaction kinetics and *Mathematica*, Invited plenary lecture at the 7th International Colloquium on Numerical Analysis and Computer Science with Applications, Plovdiv, Aug. 13–17, 1998.

Egyéb újabb előadások

Sok volt.

Egyesített hatás: 65220 ezred.

Redukált hatás: 24467 ezred.

Erdős-szám: 3.

Hirsch-index: 11.

Redukált habilitációs pontszámok ezredben:

	Kand. előtt		Kand. után	
Kutatás	75030	(13166)	123897	(4999)
Oktatás	1200	(0)	14166	(1500)

5. Függelék: Pályázatok

A pályázat címe félkövér, ahol én voltam a témavezető. Nem szerepelnek itt azok az intézeti pályázatok, amelyek megszerzésében és teljesítésében pályázati felelősként vettem részt (stratégiai, IKMA, OTKA stb.) 1999 és 2006 között.

Típus	Időtartam	Cím v. tartalom
OTKA 3268	1991–1994	Térbeli struktúrák
OTKA	1993	Utazási támogatás
OTKA T014480	1994–1997	Egzotikus reakciók
FEFA	1993	<i>Mathematica</i>
FEFA	1993	Hardver
MTA-CRNS 4.2	1994–1997	Csereutazások
FM	1993	Szoláris potenciál becslése
FM	1993	Nemlin. transzp.egy.-ek I.
FM	1994	Nemlin. transzp.egy.-ek II.
FM utód	1995	Nemlin. transzp.egy.-ek III.
Pro Renovanda	1993–1994	Lecture notes on comp. sci.
MTA CNRS	1993–1996	Önszervező kritikus állapot
Pro Renovanda	1997	A kutatás eszközei
AMFK	1994–1995	Transzportjelenségek modellezése
AMFK 671/96	1996	Automatizálás oktatása
AMFK	1997	Másod- és magasabbrendű...
MKM 419/95	1995–1996	Mat. prcs-k alk.-i
TÉT Balaton F-57/96	1997	Nemlin. sztoch. módszerek
PFP-3231/1997	1997–1998	A számtech.-inf. okt. korsz.
MGK-0419/1997	1997-1998	Mat. tantárgyak fejlesztése
FKP-0941/1997	1997–1998	A mod. mat. és stat. eszközei
OTKA T 025472	1998–2000	Sztoch. rez.
	1998–2001	Széchenyi Prof. Ödij
TÉT INRA	1999–2000	Sztoch. rez. szaglórész.
MTA CRNS	1999–2001	Sztoch. kin., entrópia
TÉT F-8/1999	2000–2002	A szaglórészrendszer modellezése
	2002–2005	Széchenyi I. Ödij
OTKA T 047132		Súly. pol. approx. és alk.-ok
OTKA T 037491	2002–2005	Köz. de-ek a BME MI-ből
ESF: REACTOR	2000–2004	Far from equilibrium systems
INERIS	2001–2003	Diffgy. alk. toxik.
MTA CNRS	2002–2003	Diffvez. reakciók
PZZXH43495	2004–2005	Energy and info. in RD sys.
OTKA NK 63066	–2009	
ESF: Fucdyn	2006–2011	Functional dynamics
TÉT F-56/96	1997–??	
MTA CRNS 5071	1997ben fogadták el	Sztoch. rez.
MTA CRNS	1993 is	4.4 Sztochasztikus kinetika
MTA CRNS	1996 is	4.3 Fluktuációk szerepe

6. Függelék: Oktatás

- 2006/2007. I. félév:
 - Matematika szigorlat (villamosmérnököknek)
 - Matematikai programcsomagok műszaki alkalmazásokkal, (gazdálkodási szakos közgazdász hallgatók számára)
 - Matematika A3 (villamosmérnököknek)
 - Számítógépes implementációk 2. és 3., (matematikusoknak)
 - Felsőbb *Mathematica* (matematikus, mérnökfizikus, informatikus, bio-, gépész-, vegyész-, villamosmérnök, hallgatók számára)
 - *Mathematica* alkalmazásokkal (PhD hallgatóknak minden szakon)
 - Differenciálegyenletek alkalmazásai, (bio- és vegyészmérnök hallgatók számára, vizsgakurzus, fakultatív gyakorlat)
 - Szimbolikus programozás (0+2 óra, kötelező tárgy vegyész informatikusoknak, ELTE TTK)
- 2006/2007. II. félév: Franciaországi tanulmányút.
- 2007/2008. I. félév:
 - Matematika szigorlat (villamosmérnököknek)
 - Felsőbb *Mathematica*, (matematikus, mérnökfizikus, informatikus, bio-, gépész-, vegyész-, villamosmérnök, hallgatók számára)
 - *Mathematica* alkalmazásokkal (PhD hallgatóknak minden szakon)
 - Matematika A3 (környezetmérnököknek: diffegyenletek)
 - Számítógépes implementációk 3. (matematikusoknak)
 - Informatika 3. (matematikusoknak)
 - Matematikai programcsomagok műszaki alkalmazásokkal, (gazdálkodási szakos közgazdász hallgatók számára)
 - Differenciálegyenletek alkalmazásai, (bio- és vegyészmérnök hallgatók számára, vizsgakurzus, fakultatív gyakorlat)
- 2007/2008. II. félév:
 - Matematika szigorlat (villamosmérnököknek)
 - Alkalmazott számítógépes analízis (PhD hallgatóknak minden szakon)
 - Számítógép az alkalmazott analízisben (matematikus, mérnökfizikus, informatikus, bio-, gépész-, vegyész-, villamosmérnök, hallgatók számára)
 - Számítógépes implementációk 3. (matematikusoknak)
 - Programozási feladat 3. (matematikusoknak)
 - Matematika A3 (környezetmérnököknek: diffegyenletek)
 - Differenciálegyenletek alkalmazásai, (bio- és vegyészmérnök hallgatók számára, vizsgakurzus, fakultatív gyakorlat)
 - Matematika M1c – Transzportegyenletek (környezetmérnököknek)
 - Differenciálegyenletek műszaki és közgazdasági alkalmazásokkal, (gazdálkodási szakos közgazdász hallgatók számára, fakultatív gyakorlat, számítógépes gyakorlat)
- 2008/2009. I. félév: alkotói szabadság
- 2008/2009. II. félév:
 - Matematika ML – Transzportegyenletek (környezetmérnököknek)
 - Matematika M1c – Differenciálegyenletek (vegyészmérnök és biomérnök hallgatók számára)

- Differenciálegyenletek műszaki és közgazdasági alkalmazásokkal (gazdálkodási szakos közgazdász hallgatók számára, fakultatív gyakorlat, számítógépes gyakorlat)
- Programozási feladat 3 (matematikusoknak)
- Alkalmazott számítógépes analízis (PhD hallgatóknak minden szakon)
- Számítógép az alkalmazott analízisben (matematikus, fizikus, gépészmérnök, informatikus, villamosmérnök, vegyészmérnök, biomérnök, közgazdász hallgatók számára)

7. Függelék: Diplomamunkák és szakdolgozatok

Ötéves képzésben írt diplomamunkák

1. Arányi P.: *Biokémiai jelentőségű reakciók kinetikaikájának sztochasztikus leírása*, (Szakdolgozat), ELTE TTK, Budapest, 1976. (Témavezető: Tóth János).
2. Bárány Márta: *A regressziós függvény nemparaméteres becsléséről*, (Szakdolgozat), ELTE TTK, Budapest, 1979. (Témavezető: Tóth János).
3. Bősze B.: *Diverzitás, koncentrálttság és Pareto-elv – epidemiológiai alkalmazásokkal*, (Diplomamunka), BME TTK, Budapest, 2006. (Témavezető: Tóth János).
4. Éliás G.: *Nagy felbontású kép előállítás mozgóképekből*, (Szakdolgozat), BME TTK, Budapest, 2008 (Témavezető: Golda Bence és Tóth János).
5. Hárs Vera: *A sztochasztikus reakciókinetika néhány kérdéséről*, (Szakdolgozat), ELTE TTK, Budapest, 1976. (Témavezető: Tóth János).
6. Herman I.: *A formális reakciókinetika egy problémájáról (Folytonos komponensű reakciókinetikai modell)*, (Szakdolgozat), ELTE TTK, Budapest, 1978. (Témavezető: Tóth János).
7. Horváth Á.: *Diszkrét eloszlások többcsúcsúságának vizsgálata és alkalmazásai*, (Szakdolgozat), ELTE TTK, Budapest, 1985. (Témavezető: Tóth János).
8. Izsák F.: *Sztochasztikus rezonancia a kémiai kinetikában*, (Szakdolgozat), ELTE TTK, Budapest, 2000. (Témavezető: Tóth János).
9. Kiszely R.: *Portfóliókezelés Mathematicával*, (Szakdolgozat), ELTE TTK, Budapest, 1998. (Témavezető: Tóth János).
10. Kun A.: *Az összetett kémiai reakció determinisztikus és sztochasztikus modelljei között lévő kapcsolat vizsgálata*, (Szakdolgozat), ELTE TTK, Budapest, 1978. (Témavezető: Tóth János).
11. Papp D.: *Petri-hálón alapuló modellek analízise és alkalmazása a reakciókinetikában*, (Diplomaterv), BME VIK, Budapest, 2005. (Témavezető: Varró-Gyapay Szilvia és Tóth János).
12. Pásztor I.: *Sztochasztikus differenciálegyenletek numerikus megoldásai*, (Szakdolgozat), ELTE TTK, Budapest, 1991. (Témavezető: Tóth János).
13. Sipos Szabó Eszter: *Oscilláló (bio)kémiai modellek érzékenységeinek vizsgálata*, (Szakdolgozat), BME TTK, Budapest, 2009 (Témavezető: Tóth János).
14. Szenthe, L.: *További vizsgálatok kaotikus és kinetikai egyenletekre vonatkozóan*, (Szakdolgozat), ELTE TTK, Budapest, 1990. (Témavezető: Tóth János).
15. Wittek P.: *Információábrázolás folytonos függvényekkel*, (Szakdolgozat), BME TTK, Budapest, 2007 (Témavezető: Tóth János).

MSc-s szakdolgozatok

1. Nagy A. L.: *Kémiai reakciók sztochasztikus modellje*, (Szakdolgozat), BME TTK, Budapest, 2009 (Témavezető: Tóth János).

8. Függelék: Díjnyertes tudományos diákköri dolgozatok

1. Császár A., Jicsinszky L., Turányi T.: *Oscillációs jelenségek többkomponensű kémiai rendszerekben*, (TDK dolgozat), ELTE TTK, Budapest, 1980. – Kari III. díj. (Témavezetők: Érdi Péter, Tóth János).
2. Császár A., Turányi T.: *Különleges viselkedésű formális kinetikai modellreakciók*, (OTDK dolgozat), ELTE TTK, Budapest, 1981. – Különdíj és Európai TDK, Újvidék. (Témavezetők: Érdi Péter, Tóth János).
3. Csikja R.: *Polinomiális közönséges differenciálegyenletek megoldásainak fölrobbanása*, (TDK dolgozat), BME VIK, Budapest, 2005. – Kari II. díj. (Témavezető: Tóth János).
4. Csikja R.: *Felrobbanás vizsgálata polinomiális és kvázipolinomiális közönséges differenciálegyenletekben*, (TDK dolgozat), BME TTK, Budapest, 2006. – Kari dícséret. (Témavezető: Tóth János).
5. Csikja R.: *Hiszterézises káoszgenerátor vizsgálata*, (TDK dolgozat), BME VIK, Budapest, 2007. – Kari II. díj. (Témavezető: Garay Barnabás és Tóth János).
6. Csiszár G.: *Adatfelvételi és adatfeldolgozási módszerek a PIM modellben*, (TDK dolgozat), BME TTK, Budapest, 2003. (Témavezető: Tóth János) – Kari III. díj.
7. Kovács B.: *Neurális háló alkalmazása differenciálegyenletek paramétereinek becslésére*, (TDK dolgozat), BME VIK, Budapest, 2003. – Kari II. díj. (Témavezető: Tóth János).
8. Kovács B.: *Methods to estimate reaction rate constants: Neural networks and matrix inversion*, BME VIK, Budapest, 2005. – Kari II. díj. (Témavezető: Tóth János).
9. Papp D.: *Bruttó reakciók felbontása diszkrét matematikai eszközökkel*, (TDK dolgozat), BME TTK, Budapest, 2003. – Kari II. díj, és OTDK, Budapest, 2005, kiemelt dícséret. (Témavezető: Tóth János).
10. Sipos Szabó Eszter: *Oscilláló (bio)kémiai modellek érzékenységének vizsgálata*, BME VBK, Budapest, 2008. – Kari II. díj. (Témavezető: Tóth János és Csikász-Nagy Attila).
11. Szabó Anett: *Intracelluláris Ca^{++} -dinamika vizsgálata*, BME VBK, Budapest, 2008. – Kari dícséret. (Témavezető: Tóth János).

9. Függlék: Konferenciák

A következő magyarországi konferenciák szervezésében vettem részt:

- Nemzetközi konferencia (*Mathematical and Computational Methods in Physiology*, Satellite Conference to the XXVIII International Congress of Physiological Sciences, Budapest, July 13–19, 1980)
- Nemzetközi konferencia (*Dynamic Phenomena in Neurochemistry and Neurophysics: Theoretical Aspects*, Workshop held at Budapest, Aug. 21–23, 1984), MTA KFKI RMKI, Érdi Péterrel közösen; olyan résztvevőkkel, mint René Thom, Szentágothai János és Otto Röessler)
- Hazai konferenciasorozat (*Matematikai és Vizualizációs Programcsomagok Alkalmazóinak Baráti Társasága* (SZOTE, Karsai Jánossal közösen, több alkalommal: 1999–2003)
<http://silver.szote.u-szeged.hu/mathclub/mathclub.html>
- Nemzetközi miniszimpózium (*Applications of Mathematica, Minisymposium*, March 19, 2002, BUTE Inst. Math. Dept. Analysis)
- Hazai előadássorozat (*Neuronhálózatok strukturális kérdései*, (2002. július 1–3., Budapest, MTA KFKI RMKI, Érdi Péterrel közösen)

10. Függelék: Habilitációs előadás javasolt témái

1. Tantermi előadásom lehetséges témái (zárójelben a megfelelő nappali tagozatos tantárgy kódja és neve)
 - (a) Az Euler-féle differenciálegyenletről (BMETE90MX44 Matematika M1c, MSc képzés, VBK, vegyész- és biomérnöki szak; BMETE925313 Differenciálegyenletek műszaki és közgazdasági alkalmazásai, 5 éves képzés, GTK, gazdaságelemző szakirány; BMETE90MX44 Matematika A3, BSc képzés, VBK, környezetmérnöki szak)
 - (b) Tanácsok a *Mathematica* demonstráció elkészítéséhez (BMETE91AM10 Informatika 3, BSc képzés, TTK, matematikus szak; BMETE91AM14 Programozási feladat 3, BSc képzés, TTK, matematikus szak)
2. Tudományos előadásom témája
 - (a) Összevonás reakciókinetikai modellekben
 - (b) A Turing-féle instabilitás egy szükséges feltételéről

Az összefoglalót angol nyelven kívánom megtartani.