

Vélemény Szalkai István PhD dolgozatáról

Abonyi János, DSc

2014. június 25.

Témaválasztásról

A mérnöki munka során folyamatosan merülnek fel olyan problémák melyek a lineáris algebra eszköztárának ötletes alkalmazását igénylik. A vegyészmérnöki gyakorlat modellalkotási és elemzési feladatai gyakran motiválják a lineáris algebra eszköztárának fejlesztését, célirányos alkalmazását¹.

A PhD dolgozat tématerülete ennek tükrében kiemelt fontosságú.

A szűkebb – reakciómechanizmusok vizsgálatára vonatkozó – témaválasztás „örökzöld”. Tudomásom szerint a területet megalapozása Aris 1963-ban megjelent munkájához köthető². A modellek automatikus szintéziséhez és redukciójához szükséges eszköztár fejlesztésének ma már nem a sejtekben lejátszódó komplex folyamatok megismerése iránti igény is a hajtóereje³.

A dolgozat felépítéséről

A letisztult, világos, logikusan felépített, szépen szerkesztett dolgozat 129 oldalon 9 fejezetben foglalja össze Szalkai István e területen két évtizeden keresztül elért értekes tudományos eredményeit. A problémafelvetést követő első fejezet a matematikai alapokat, a második fejezet a független részhalmazok kiválasztására alkalmas algoritmusokat ismerteti. A harmadik fejezet a lineáris egyenletrendszerek vizsgálatára alkalmas apparátust tárgyalja. A 4. fejezet a független részhalmazok (simplexek) számára vonatkozó tételeket fogalmaz meg.

¹ Guido Buzzi-Ferraris, Flavio Manenti, Fundamentals and Linear Algebra for the Chemical Engineer, ISBN: 978-3-527-32552-8, 375 pages, March 2010

² Rutherford Aris, R. H. S. Mah, Independence of Chemical Reactions, Ind. Eng. Chem. Fundamen., 1963, 2 (2), pp 90–94, DOI: 10.1021/i160006a002, Publication Date: May 1963

³ Pl. <http://www.reactome.org>

Az 5. fejezet túlmutat a dolgozat eredeti célkitűzésén, halmazrendszerekben és hipergráfokban vizsgál a szimplexek keresésével analóg kérdéseket. A hatodik fejezet (példaértékűen) további kutatási témákat vet fel. A hetedik fejezet széles körben vizsgált esettanulmányokon keresztül igazolja az algoritmusok alkalmazhatóságát.

Az eredményekről, tézisekről

Fontosnak tartom megjegyezni, hogy csaknem minden fejezet anyagát több, az elmúlt két évtizedben megjelentetett nemzetközi referált publikáció szolgáltatja. E publikációk többsége elektronikus formában is elérhető. Ezek közül a Journal of Mathematical Chemistry –ben megjelent munkát emelném ki, melyre a google scholaron 8 hivatkozás is fellelhető.

Kérdés

Az irodalomban egyre több gráf-alapú reakcióhálózat elemzési technika bukkan fel. Mit gondol, miként lehet a dolgozatban felmutatott eredményeket kapcsolni ezekhez a megoldásokhoz?

Összefoglaló értékelés

Szalkai István mintaértékűen világos, jól felépített PhD dolgozata fontos területen önállóan elért jelentős tudományos eredményeket mutat be. A jelölt hat tézisben foglalta össze tudományos eredményeit. Minden tézis a jelölt saját eredménye, referált nemzetközi publikációval igazolt. Véleményem szerint a tézisek töredéke is PhD fokozat megszerzésének alapjául szolgálhat.

