

Vélemény Szalkai István

Reakciómechanizmusok algoritmikus és matematikai vizsgálata című doktori értekezéséről

1. A dolgozat **témája** egyértelműen időszerű és érdekes: bruttó reakciók automatikus dekompozíciójára egyre inkább szükség van, hiszen a kísérletileg és numerikusan vizsgálható rendszerek egyre bonyolultabbak, így a felbontás hagyományos, manuális módszerei egyre kevésbé használhatók. Egyszerűbb, de nem kevésbé fontos (bizonyos szempontból az előző előkészítésének tekinthető) feladat annak meghatározása, hogy adott anyagfajták között milyen reakciók mehetnek végbe. A lehetséges alkalmazási területek száma nagy, ide tartozik például az égés, az anyagcsere és a légköri jelenségek modellezése, szerves és szervetlen anyagok szintézise, stb.
2. A Jelölt a vonatkozó **szakirodalmat** áttekintette és alaposan, elemző módon, kritikailag dolgozta fel; 84 tételből álló irodalomjegyzékében ismerteti a témával kapcsolatos fontosabb előzményeket is, bár éppen az újszerű megközelítés miatt ezek jelentősége nem nagy.
3. A megfogalmazott kutatási **célok** fontossága a matematikai kémia irodalmában nyilvánvaló, az eredmények az ismertekhez képest elremutatóak.
4. Az alkalmazott **módszerek** nemhogy megfelelőek és korszerűek, de a dolgozat tulajdonképpen egy új módszer kidolgozásának tekinthető. A kémiai alkalmazástól teljesen eltekintve a lineáris algebra néhány kérdésének beható vizsgálataként is felfogható az írás.
5. A Jelölt kutatási eredményeit megfelelően dolgozta fel. Maga ez a **feldolgozás** új matematikai modellek megfogalmazását, és a modellek alkalmazhatóságához szükséges algoritmusok és programok megalkotását jelentette.
6. Az eredményekből **következtetések** levonása nagyrészt a megfelelő alkalmazási terület szakemberének feladata. Másrészt itt említhető meg az, hogy a Jelölt felismerte, hogy megközelítése a választott alkalmazási területen túl – némileg meglepő módon – a matematikán belül (és a lineáris algebrán túl) is használható.
7. A **diszkusszió** (sőt az egyes fejezetek) legfontosabb részének azt tekintem, hogy a Jelölt megfogalmazott számtalan érdekes nyílt problémát, amelyek vagy az alkalmazások vagy az elmélet vagy mindkettő számára fontosak lehetnek.
8. A szerző **publikációs tevékenysége** (amit 17 elemű, folyóiratcikkből és előadászövegből álló lista mutat be) mennyiségileg a doktori értekezéseknél elvártnak sokszorosa; a dolgozatok többsége referált, színvonalas nemzetközi folyóiratban jelent meg, esetenként rangos társszerzővel.
9. **Új eredmények**
 - Polinomiális futásidejű algoritmust adott véges vektorhalmaz összes szimplexének felsorolására. (Külön kiemelem a 101. oldalon szereplő állítást, amely szerint az egyik feladatot 13 óra helyett 3 óra 21 perc alatt oldotta meg a Jelölt.)
 - Részletesen megvizsgálta a homogén és az inhomogén lineáris egyenletrendszerek minimális megoldásainak szerkezetét.
 - Alsó és felső becslést adott dimenziós és adott elemszámú szimplexek számára.

- Külön megvizsgálta azt a (kémiailag ugyan megszorítást jelentő) esetet, ahol nincsenek párhuzamos vektorok.
- Az eredmények átfogalmazása matroidokra és hipergráfokra korlátokat ad ezek köreinek illetve bázisainak számára.
- A lineáris funkcionálok kémiai jelentésének megadása érdekes hozzájárulás.
- Különösen örvendetes, hogy a szerző módszerét több konkrét mechanizmusra alkalmazta, bár még egy kicsit több kémiai elemzést is szívesen olvastam volna, és a mechanizmusok nyilván mára már kémiailag nem időszerűek. Ez a tény nem csökkenti a módszerek alkalmazhatóságát, inkább felhívja a figyelmet arra, hogy érdemes lenne a módszereket aktuális égési, biokémiai vagy más hasonlóan bonyolult mechanizmusokra (vegyészekkel szoros együttműködésben) alkalmazni.
- Bár a tézisekben nem szerepel, önálló eredménynek tekintem a fejezetek végén, illetve a 6. fejezetben önállóan megfogalmazott nyílt problémákat, amelyek kijelölik a további kutatások irányát.
- Összefoglalva: a 6 tézisben kimondott állításokat új eredményeknek fogadom el.

10. Bíráló szakmai megjegyzések

- Úgy tűnik (pl. 1. oldal, 8. oldal), hogy az izotópok közti különbség forrásának a Jelölt az elektronok számában fennálló különbséget tekinti. Ez a számításokra semmilyen hatással nincs, de kémiailag súlyos hiba.
- Sehol nem sikerült olyan definíciót találnom a *simplex* fogalmára, ahol ez ne végtelen pontthalmazt jelölne; a legegyszerűbb esetben egy szakasz, háromszög, tetraéder stb. pontjait szokás szimplexnek nevezni. Ebből mindössze annyi következik, hogy a szerző által bevezetett lineáris algebrai szimplex jelentése a megszokottól eltérő.
- 8. oldal: (1.3) egyértelműen megad egy reakciót... – Azon feltétel mellett, hogy mindkét oldalon előforduló **közvetlen katalizátorokat** nem veszünk figyelembe, tehát azonosaknak tekintjük a $X + Y \longrightarrow 2X$ és a $Y \longrightarrow X$ reakciólépéseket.
- 8. oldal, lábjegyzet és 10. oldal: a többszörös dózis kifejezést nem értem. Talán: egynél nagyobb sztöchiometriai együtthatóra utal?
- Az összefüggő elé célszerű lett volna mindenütt kiírni, hogy lineárisan, néhol (pl. 17. és 18. oldal) ennek hiánya kicsit megakasztja az olvasást.
- A 4. fejezet elején a Jelölt bizonyítás nélkül felsorol négy tételt és három következményt, amelyek közül a nehezebbeket a későbbi megismétlés alkalmával sem bizonyítja, ez disszertációkban kissé szokatlan.
- A 61. oldalon szerepel: „... $1 + \binom{m}{n+1} + \binom{m-\ell}{n+1-\ell}$. Ez a mennyiség pedig szigorúan kisebb $\binom{m}{n+1}$ -nél, ha $n + 2 \leq m$.” Ezt nagyon nem értem.
- 68. „kézenfekvő a párhuzamos vektorok kizárása” Nem kézenfekvő (vö. C_2H_2 , $3C_2H_2$, C_6H_6), de még ezek kizárásával is kémiailag értelmes feladatot kapunk. (Matematikai szempontból pedig nyilván vizsgálható ez a kérdés is.)
- 99. oldal: „ ℓ a katalizátor felületét jelöli” – egy kötőhelyet a felületen.
- 99. oldal (és a többi hasonló táblázat): a második oszlopban lévő felső becslés miért különbözik az első oszlopbeltől, ha közben M és n értéke nem változik?

11. Konkrét kérdéseim a jelölthöz:

- Hogyan lehetne az összegképleten túlmenően a kémiai szerkezetet is figyelembe venni?
- Ismertesse röviden a kiértékelési operátorra vonatkozó eredményeinek viszonyát Wasylkiewicz és Ung eredményeihez.

12. A dolgozat **felépítése** egészében véve logikusnak mondható. Az első fejezetben a szerző részletesen ismerteti az eredményeket a megértésükhöz szükséges formális definíciókkal együtt. Az irodalmi előzmények közül a legfontosabbakat a 2.4 szakasz tartalmazza, ahol a Jelölt áttekinti a hasonló algoritmusokról szóló közleményeket. A **tézisekből** az elmélyült olvasó megtudhatja az eredmények lényegét.
13. Az értekezés megértését jelentősen segítik a világos, egyértelmű **ábrák, táblázatok és pseudokódok**.
14. Az irodalmi **hivatkozások** a megfelelő helyeken és a megfelelő módon szerepelnek.
15. Következzék néhány szó a dolgozat **nyelvezetéről, stílusáról, jelöléseiről**. A (gépelési, szerkesztési, tipográfiai szempontból igen nehéz) értekezés külső alakja megfelelő. Néhány kisebb **nyelvi és formai** észrevétel következik. (A jelölt mentségére legyen mondva, hogy nem könnyű az itt fölmerült problémákat olvasható, áttekinthető módon formalizálni.)
 - m -elemű helyesen: m elemű.
 - Vandermonde – az n többször is hiányzik.
 - $\sup$, $\inf$ stb. nem kurzív.
 - Az idézőjel alul kezdődik, és fölül végződik.
 - A másodperc SI jele s.
 - 41. oldal: Blickle Tibor társszerzőjeként Szederkényi Gábor jelenik meg Szépvölgyi János helyett.
 - 108. oldal: a vegyületek neve miért angolul szerepel?
16. A Jelölt dolgozatában új modelleket fogalmazott meg, azokat vizsgálta matematikai szempontból, alkalmazásukra algoritmusokat konstruált, majd ezeket programokban realizálta, végül a programokat több kémiai feladat megoldására alkalmazta, ezzel a teljességgel mintát adott arra, hogyan kell alkalmazott matematikusi tevékenységet végezni. (Megjegyzendő azonban, hogy eredményei a lineáris algebra és a matroidelmélet szempontjából sem érdektelenek.) Matematikusi hozzáállását mutatja, hogy a fejezetek végén, sőt külön fejezetben is számos megoldatlan problémát is megfogalmazott. Mindezek alapján, természetesen figyelembe véve az elért és többnyire nemzetközi folyóiratban publikált, kézzelfogható eredményeket a dolgozat a PhD fokozat elnyeréséhez elegendő, ezért

javaslom kitűzését nyilvános védésre.

Budapest, 2014. július

(Tóth János)
habilitált egyetemi docens
a mat. tud. kandidátusa