Válasz

Dr. Szilágyi Botond, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Egyetemi docens Preiner Sára: „Levendula illóolaj előállítása – a funkcionális változások értékelése kemometriai módszerekkel" című doktori (PhD) értekezéséről készített opponensi véleményére

Ezúton szeretném megköszönni Dr. Szilágyi Botondnak értekezésem alapos és körültekintő bírálatát, valamint az építő jellegű észrevételeit és kérdéseit.

Dr. Szilágyi Botond a doktori értekezés műhelyvitája során már részletesen megismerhette az értekezést, és az azt megelőzően elkészített bírálatában megfogalmazott észrevételeivel jelentősen hozzájárult a dolgozat továbbfejlesztéséhez és véglegesítéséhez. A disszertáció végső változatának elkészítése során figyelembe vettem mind az írásos bírálatban, mind pedig a műhelyvita során elhangzott javaslatokat és megjegyzéseket, melyeket beépítettem a dolgozat végső változatába

Az opponensi véleményben megfogalmazott kérdésekre az alábbiakban válaszolok.

„Már a házi védés során is kérdés volt az UV-Vis alapú technika alkalmazása a költséges és lassú GC-mérések kiváltására. Az ezzel kapcsolatos aggályaimat az előző körben a Jelölt eloszlatta, és a kapcsolódó részeket finomította. A téma egyre nagyobb jelentőséget kap a mérnöki gyakorlat legkülönbözőbb területein - ahogyan a jelen dolgozatban is megjelent. Kérem, fejtse ki, milyen feltételek mellett vethető be egy soft szenzor egy bizonyítottan pontos mérés - jelen esetben a GC - kiváltására, és hogyan tartható fenn a megbízhatósága a használat során. Milyen modellkarbantartásra lehet szükség, és milyen tényezők - akár az UV-Vis készülékben, akár a mérendő mintában bekövetkező változások - indokolhatnak soron kívüli modellellenőrzést? Összefoglalva: egy modellpontatlansági kockázatelemzést lenne érdekes hallani."

A soft szenzor a GC-mérés kiváltására csak abban az esetben alkalmazható megbízhatóan, ha a vizsgált minták tulajdonságai a modell felépítéséhez használt kalibrációs adathalmaz által lefedett tartományon belül maradnak. A kalibrációs tartományon kívül eső minták esetében a PLS-modell által kapott eredmények megbízhatósága jelentősen lecsökkenhet. A modell

megbízhatóságának fenntartásához érdemes időszakos referencia-ellenőrzést végezni, mely során ugyanazon mintát vagy mintákat UV-Vis és GC módszerrel is megvizsgálják és ellenőrzik, hogy a soft szenzor előre jelzési hibája továbbra is az elfogadható tartományon belül marad-e. Amennyiben szisztematikus eltérés vagy a predikciós hiba növekedése figyelhető meg, akkor a modell újra kalibrálása vagy új mintákkal történő bővítése válhat szükségessé. A bővítés történhet új, valós ipari minták bevonásával, illetve célzottan előállított, ismert koncentrációjú komponensekkel dúsított mintákkal is, ezek azonban nem feltétlenül reprezentálják megfelelően a levendulavíz összetettségéből adódó hatásokat.

Lehet indokolt soron kívüli modellellenőrzés abban az esetben, ha a mérőműszerben változások következnek be, például fényforráscsere, detektor öregedése, küvetta lecserélése vagy műszerkarbantartás. Ezek hatását megfelelő standard oldatokkal és rendszeres műszer ellenőrzéssel lehet követni. Másrészt indokolhatják az ellenőrzést a felhasznált alapanyagban bekövetkező változások is, mint az új termőhely, a levendula fajtája vagy más feldolgozási körülmény.

A legfontosabb modellpontatlansági kockázatokat tehát a kalibrációs tartományon kívül eső minták, a mérőműszer időbeli változásai, valamint az alapanyag és ennek következtében a mintamátrix összetételének megváltozásából eredő kockázatok jelentik. Ezek referencia-mérésekkel, időszakos modellvalidálással és szükség esetén a kalibrációs adatbázis bővítésével kezelhetők.

A gyakorlati alkalmazás szempontjából fontos megemlíteni, hogy a levendulavíz összetételére jelenleg nincs előírás vagy szabvány, emiatt a gyártói gyakorlatban jelenleg jellemzően nem történik összetétel-vizsgálat.

„Elfogadom, hogy a rendelkezésre álló mintahalmazzal az időjárási viszonyok tekintetében csak aggregált éves adatok felhasználására volt lehetőség. Globálisan gondolkodva ugyanakkor az az aggályom nem oszlott el teljesen, hogy az éves összesített csapadékadatok elégségesek-e a növény fejlődésében és így az illóolaj minőségében megjelenő időjárási hatások leírására - hiszen, ahogy a közelmúltban tapasztalhattuk, egy néhány hetes csapadékmentes hőhullám akkor is súlyos károkat tud okozni, és nehezen előre jelezhető hatással van a növényre mint az extrakció kiindulási anyagára, ha az éves csapadékmennyiség és csapadékmentes napok száma nem változnak érdemben. Visszatekintve az eddigi munkára, milyen adatgyűjtési irányokat javasolna egy jövőbeli vizsgálathoz, amelyben a részletesebb időjárási adatok is érdemben hasznosíthatóvá válnának?"

Az időjárási adatok gyűjtésének javítására rövidebb időablakokra bontott időjárási jellemzőket alkalmaznék. A részletesebb adatgyűjtés során például hetekben (7, 14, 21 vagy 28 napos időablakokban) értékelném a csapadék mennyiségét, a csapadékmentes napok számát és a leghosszabb száraz periódust, valamint az átlag-és maximumhőmérsékletet. Ezeket érdemes lenne nem feltétlenül naptári időszakokhoz igazítani, hanem inkább a növény fejlődési szakaszaihoz igazítani, kiemelve a betakarítást megelőző időszakot.

Ez rengeteg adatot eredményezne, így a feldolgozhatóság javítása érdekében az egyes időszakokat akár kategóriákba is lehetne sorolni, például száraz, átlagos, csapadékos vagy hőstresszes periódusként. Ugyanakkor a rövidebb időablakokra bontott eredeti számszerű meteorológiai változókat is megtartanám, mivel ezek elemzése ugyan bonyolultabb lehet, de részletesebb információt adhat a vizsgált kapcsolatokról.

Egy ilyen adatbázis lehetőséget adna akár arra is, hogy mely fejlődési szakaszokban, illetve a szüretelés előtt milyen időtartamban a legérzékenyebb a növény az egyes meteorológiai hatásokra.

Végezetül ismételten megköszönöm Dr. Szilágyi Botond alapos munkáját, a munka folytatására vonatkozó megjegyzéseket, javaslatokat és kérem válaszaim elfogadására.

Veszprém, 2026. október 5.

Tisztelettel:

.....

Preiner Sára
PhD jelölt