

Válasz Dr. Tóth Gergely egyetemi docens bírálataira

Megköszönöm a bíráló alapos munkáját, kérdéseit, a kutatási terület és eredményeim méltatását. Kritikáira részletesen reagálok elosztatva az estelegesen keletkezett és megmaradt kétyeket.

Véleményét az 1., 2., 3. és 7. fejezetekkel kapcsolatosan indítja, majd a 4., 5. és 6. fejezetekkel folytatja. A tézisfüzetet nem elemezte részleteiben, mivel állítása szerint, a 6. fejezethez képest pluszban egy oldalnyi bevezetőt és egyes téziseknél maximum egy-két mondatnyi bevezető információt tartalmaz. Azonban a 6. fejezet címe szerint 'Az új tudományos eredmények tézisszerűen rendezett összefoglalása': tézisszerűen rendezett összefoglalás és nem ezt szántam a tézisek ismertetésére. A tézisfüzetemben általa említett „téziseknél maximum egy-két mondatnyi bevezető információ” a téziseim rövid megfogalmazása, amelyet az érintettek az eljárás során tömör megfogalmazásuk révén értékelhetnek.

1. Bevezetés

„Annyi megjegyzésem lenne, hogy a mai kemometriát egyre kevésbé köthetjük az analitikai kémiához”

Az analitikai kémia segítségével kvantitatív és kvalitatív kémiai információkhoz jutunk, így az említett területek szintén az analitikai kémiához sorolhatók, bár tanulmányozásuk nyilván más kémiai aldiszciplínában is megvalósíthatók. Értekezésem benyújtásakor az MTA Kémiai Tudományok Osztályán belül az Analitikai és Környezeti Kémiai Tudományos Bizottság illetékességét jelöltem meg, mivel a szakterület felsorolásában a kemometria itt szerepel.

3. Irodalmi áttekintés

Örülök, hogy bírálóm elfogadta és tetszett neki az áttekintés. Megjegyzésére, miszerint *„Talán csak azzal a kijelentéssel nem értek egyet, hogy főkomponens-elemzéshez feltétlenül skálázni kell-e a mátrixot, ha nem korrelációs vagy kovariancia mátrixból indulunk ki.”*, azt válaszolom, hogy ha a mátrix kizárólag zajkomponensű, ill. csupa nulla sorokat/oszlopokat tartalmaz, a skálázás révén mindenféleképpen kiderül az elhagyandó mátrixrészlet a nullával való osztás, vagy a végtelen nagynak tekinthető elemek észlelésével. Illetve én főképp SMCR feladatok megoldására használtam a PCA-t (SVD-t) és az absztrakt dimenziószám-csökkentése végett a megfelelő Borgen normával végrehajtott normalizálást mindenképpen el kellett végeznem.

4.1 alfejezet – P1 cikk (2005) – 1. tézispont -BP

Számítógépes geometriai módszerekkel a megengedett megoldás-tartományokat analitikusan határoztam meg háromkomponensű rendszerekben

Köszönöm, hogy bírálóm elfogadta ezt a tézispontot.

4.2 alfejezet – P2 cikk (2006) – 2. tézispont - BP

Igazoltam a természetes dualitást a minimális kényszerfeltételű görbeillesztés nélküli komponensprofil-kinyerés során

Köszönöm, hogy bírálom elfogadta ezt a tézispontot és a legfontosabbnak ítélte.

4.3 alfejezet – P3 cikk (2009) – 3. tézispont - BP

Számítottam a megengedett megoldás-tartományok határait és meghatároztam a forgatási bizonytalanság mértékét

„A módszerek összehasonlításánál nem tiszta számomra, hogy ugyanolyan normával számolt Borgen-ábrán levő terület arányok és min-max értékek szerepelnek-e a táblázatban?”

Bírálómnak helyes a kérdésselvetése, a terület-arányokat 1-normával számoltam, a 'Max-Min' értékeket pedig a Frobenius norma alkalmazásával. Így közvetlenül értékük nem hasonlítható össze, de a kvalitatív magyarázat, miszerint a területarány alkalmasabb a forgatási bizonytalanság jellemzésére, mivel a koncentráció és spektrális profilokra külön-külön számolható, igaz marad. Ráadásul a 'Max-Min' érték, ha nem nulla, semmilyen mértéket nem ad a forgatási bizonytalanságra, hiszen elképzelhetünk két olyan kémiai rendszert, amelyekre az azonos komponensre a megoldás-tartomány lehet szélesebb ('Max-Min' nagyobb) az egyik rendszerben és lehet keskenyebb ('Max-Min' kisebb) a másik rendszerben úgy, hogy a megengedett megoldás-tartományok terület aránya azonos.

Köszönöm, hogy bírálom elfogadta ezt a tézispontot.

4.4 alfejezet – P4 cikk (2009) – 4. tézispont - BP

Definiáltam a Borgen-normát és tisztáztam alkalmazhatóságát

Köszönöm, hogy bírálom elfogadta ezt a tézispontot.

4.5 alfejezet – P5 cikk (2010) – 5. tézispont - LS

Kétkomponensű rendszerek megengedett megoldás-tartomány határait értelmeztem és analitikus számítási módszert adtam meg

„Elsőre nehezen tudtam megítélni egy ilyen jellegű publikáció súlyát a nagyon speciális témája miatt”

A kemometriai szakirodalomban a rostocki informatikus-matematikus csoport megjelenése előtt inkább rácsmódszert, vagy valamilyen kifinomultabb kereső eljárást alkalmaztak, akkor is, amikor lett volna elméleti megoldás. Tanulmányomban ezt mutattam meg, és a citációk aránya sajnos igazolja, hogy az elméleti munkák kevesebb hivatkozást kapnak, mint a közelítéssel operáló gyakorlati és kevesebb matematikai képletet tartalmazó munkák.

Köszönöm, hogy bírálom elfogadta ezt a tézispontot.

4.6 alfejezet – P6 cikk (2013) – 6. tézispont - BP

Speciális rácskereső módszerrel az ismert-profil kényszerfeltétel alkalmazását dolgoztam ki a forgatási bizonytalanság csökkentésére

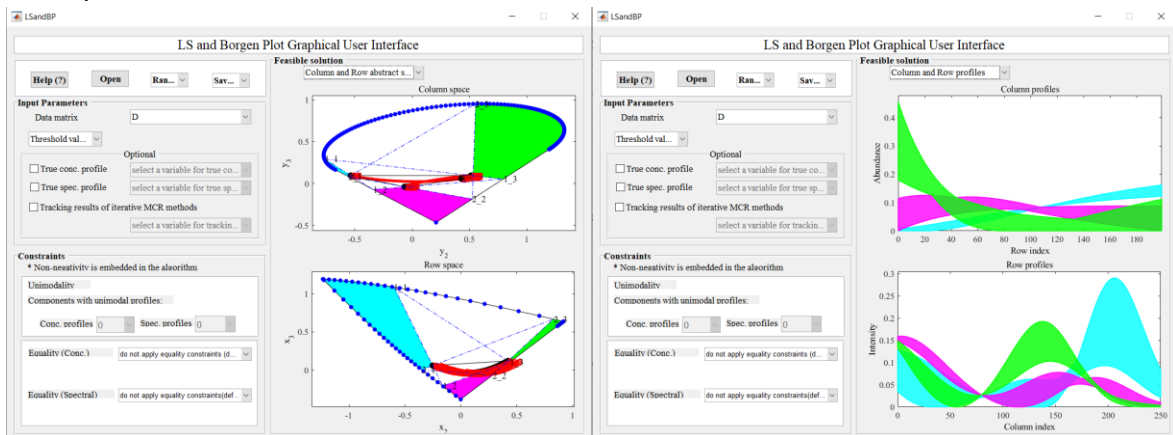
Köszönöm, hogy bírálom elfogadta ezt a tézispontot.

4.7 alfejezet – P7 cikk (2014) – 7. tézispont - LS, BP

Az ismert-profil és unimodalitás kényszerfeltételek alkalmazását dolgoztam ki dualitás alapú görbeillesztés nélküli komponensprofil-kinyeréshez

„A fejezet és a cikk összhangban van. A tézispont tartalmi szempontból egyezik azok témájával, de a más pontokkal való átfedését problémásnak látom.”

A valódi dualitás alapú Borgen grafikon elkészítését valósítottuk meg és foglaltuk össze az ezzel kapcsolatos információkat 3 komponensű rendszerekre. Korábban csak az elkülönítetten publikált elemek által rendelkezésre és ez az első olyan publikáció, ahol a szintetizáltuk az eljárást. Készítettünk egy Matlab szkriptet is, azonban gyakran talákoztunk hibajelzéssel végződő futásokkal, amiket akkor még nem értettünk, ezért nem tettük publikussá a szkriptet, de használtuk azt:



A hibaüzeneteket nagyon gyakran az adat-alapú egyértelműség generálta, amire csak később jöttünk rá.

A 2 komponensű rendszerekre az unimodalitás kényszerfeltételt; a 2-3 komponensűekre az ismert profil kényszerfeltételt implementáltuk, de most már a dualitás felhasználásával, ami jelentős előrelépés volt pl. számítási időben.

Kérem, gondolja át bírálom és fogadja el ezt a tézispontot is.

4.8 alfejezet – P8 cikk (2015) – 8. tézispont - BP

Bevezettem az adat-alapú egyértelműen meghatározható profilbecslés fogalmát és tételszerűen megadtam kimutatási lehetőségeit

Ebben az alfejezetben dolgoztuk ki az előző alfejezetben a Matlab szkriptben gondot okozó adat-alapú egyértelműséget.

Köszönöm, hogy bírálom elfogadta ezt a tézispontot.

4.9 alfejezet – P9 cikk (2016) – 9. tézispont - BP

Részletekbe menően áttekintettem és összehasonlítottam az újabb görbeillesztés nélküli komponensprofil-kinyerő módszereket

Köszönöm, hogy bírálom elfogadta ezt a tézispontot és esszenciálisnak tartja munkámat az etalonnak tekinthető Borgen grafikonok részleteinek felderítése érdekében.

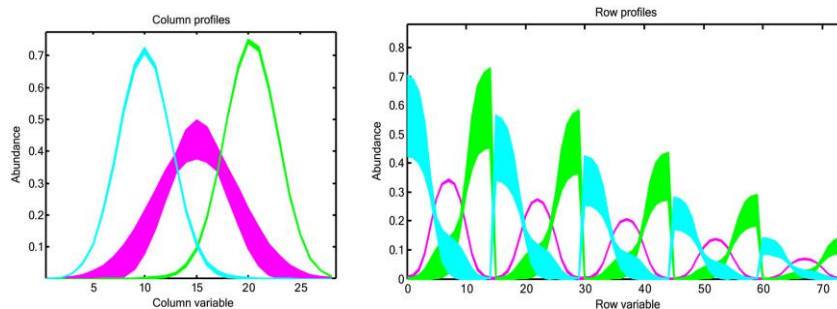
4.10 alfejezet – P10 cikk (2017) – 10. tézispont – 3D

Igazoltam, hogy Kruskal elégséges és szükséges feltétele két-, ill. háromkomponensű háromutas adat-tömbökre sérülhet és legfeljebb csak elégséges maradhat

„Ennél a pontnál merült fel bennem, hogy itt miért nem sáv jellegű megoldások szerepelnek. A dolgozatban nem, de a cikkben találtam erre utalást, de nem értettem. A következő pont a kétkomponensű esetre aztán választ adott a kérdésemre, de mi a helyzet a háromkomponensű háromutas adattömböknél a forgatási bizonytalansággal? Foglalkoztak-e itt a sávmegoldásokkal Rajkó Róberték, vagy bárki más?”

Természetesen igaza van a bírálóknak: ha a PARAFAC-nak nincs egyértelmű megoldása, akkor az automatikusan sávmegoldást jelent. Nemat Omidikia 9 hónapot töltött nálam Szegeden és rengeteg témát elindítottunk, amiknek csak egy részét tudtuk publikálni. Sajnos már nem válhattam Nemat PhD témavezetőjévé, mert két iráni professzort már korábban bejelentettek hivatalosan, de tanácsadója (PhD advisor) lehettem.

Az értekezés 97-es hivatkozása [Omidikia N, Abdollahi H, Kompany-Zareh M, Rajkó R. Trilinear self-modeling curve resolution using Borgen-Rajkó plot. Journal of Chemometrics. 2020; 34:e3161. <https://doi.org/10.1002/cem.3161>] éppen a trilineáris 3 komponensű Borgen grafikonokkal illusztrált sávmegoldásokat mutatja be, többek között:



Köszönöm, hogy bírálom elfogadta ezt a tézispontot.

4.11 alfejezet – P11 cikk (2016) – 11. tézispont – LS, 3D

Analitikusan megadtam és értelmeztem a megengedett megoldás-tartományokat kétkomponensű három-utas adattömbök esetén

„A felbontásuk, ha jól értem, univerzális és nem tartalmaz további megkötéseket, mint pl. a cikkben felsorolt módszerek, ahol a megkötések miatt látszólagosan egyértelmű felbontásokat kapnak.”

Igen, valóban, a módszerünk univerzális, és ahogy az értekezésemben is megfogalmaztam: 'Olivieri et al. [52] bevezették az U-PLS/RBL-LD (U-PLS/RBL with linear dependencies) módosítást. Ugyanazokat a kényszerfeltételeket alkalmazták, mint az MCR-ALS-hez és ezért kapták ugyanazt az eredményt. A kényszerfeltételek (korreláció és megfelelés a spécieszek között (correlation and corresponding among species), azaz kalibrációs halmaz szerepeltetése ismert koncentrációval) alkalmazása miatt működtek az algoritmusok és nem a felépítésük miatt!

Köszönöm, hogy bírálom elfogadta ezt a tézispontot.

4.12 alfejezet – P12 cikk (2020) – 12. tézispont – (LS), BP

Ritkás profil-mátrixok esetén tisztáztam az L_0 , L_1 és L_2 normák szerepét nemnegatív többváltozós görbefulválítás során

„Az alfejezetnek és az ide tartozó közleménynek megfelel a tézispont, bár a tézisben és a fejezetben nem szerepel a kétkomponensű rendszerekre vonatkozó rész.”

Azért nem szerepel, mert kétkomponensű rendszerek esetén a legritkásabb megoldások a külső határolópontok által meghatározott profilkok lesznek és ez triviálisan igaz. Azt hangsúlyoztam ki, hogy pl. a LASSO csak egyváltozós esetben találja meg a legritkásabb megoldást az L_1 és L_2 normák kombinálásával kapott célfüggvény minimalizálásával, többváltozó esetében (a triviális nemnegatív kényszerfeltétel alkalmazásával) már egyes komponensekre éppen az ellentétes (nullát egyáltalán nem tartalmazó) megoldásokat szolgáltatja.

Köszönöm, hogy bírálóm elfogadta ezt a tézispontot.

5.1 alfejezet – P13 cikk (2007) – 13. tézispont – validáció

Alternatív érvényesítési eljárást fejlesztettem a túlillesztés elkerülésére

„Az eredeti Faber és Rajkó által jegyzett cikket 2006. szeptember 27-én küldték be, 2007. május 21-én fogadták el és 2007 május 25-én jelent meg. A 16. hivatkozás egy hatszerzős jóval részletesebb cikk, amelyben Rajkó Róbert nem szerepel, csak társszerzője Faber. Ezt a cikket 2006. augusztus 7-én küldték be, 2007. március 12-én fogadták el és 2007. szeptember 4-én jelent meg. Mindkét cikk ugyanazt a módszert mutatja be, mint új és sajátfejlesztésű módszert. A P13-as cikk adatsora szerepel a Wiklund et al. (DOI: 10.1002/cem.1086) cikkben is. Nem látom át a helyzetet, de szükségesnek érzem az 5.1 fejezet és különösen a tézispont érvényességéhez, hogy pontosan ismert legyen Rajkó Róbert hozzájárulása ehhez a témához. Szóval van két átfedően megjelent cikk, egy közös szerzővel, aki nem Rajkó Róbert, és egy halom közös állítással a cikkek tudományos növmjára vonatkozóan.”

A bíráló ezen megjegyzéseivel kapcsolatban egy majdnem 20 évvel ezelőtti történetet kell rekonstruálni és rávilágítani arra, hogy a nem körültekintően összegyűjtött és/vagy értékelt információkból milyen tévutakra tévedhet az oly jószándékú ember is.

A P13-as ACA publikációnkat megelőzte egy Spectroscopy Europe megjelentetés, aminek publikálási feltételei többek között a következők: 'Spectroscopy Europe and Spectroscopy World are not peer-reviewed, however, your article will be edited carefully and, of course, very widely distributed.' és 'Authors retain the copyright in their articles, which are published under the authors' choice of Creative Commons licence.' Tehát ez a mai értelemben egy arXiv-szerű megjelentetést takar (azaz, a szerzői elsőbbséget érvényesíti szakértő bírálói és szerkesztői véleményezés és döntés nélkül), azzal a különbséggel, hogy egyéb ismertető cikkek és reklámanyagok mellett a világ nagyrészére kinyomtatva is eljuttatták. A cikk elérhető digitális formában: https://www.spectroscopyeurope.com/system/files/pdf/TD_18_5.pdf

A következő árulkodó részt tartalmazza: 'Wiklund et al.¹¹ suggested assessing the statistical significance of each individual component that enters the model. Theoretical approaches (using a t- or F-test) have been put forward but they are all based on unrealistic assumptions about the data, e.g. the absence of spectral noise, see Wiklund et al.¹¹ for examples.' [11. S. Wiklund, D. Nilsson, L. Eriksson, M. Sjöström, S. Wold and K. Faber, J.

Chemometr., submitted.] Tehát itt úgy hivatkozunk a már J. Chemometr.-be beküldött Wiklund és mtsai. kéziratra, hogy az a t- és F-teszteket javasolja alkalmazni az egyedi látens változók modellbe építéséhez, de ezek a tesztek olyan irreális feltételeket igényelnek, mint pl. a spektrumok zajmentes meghatározása.

Figyeljük meg azt is, hogy ebben a Spectroscopy Europe cikkben nem szerepel a 'szendvics-effektus' (sandwich-effect), de a tanulmányt egy 2006. október 8-án beküldött ACA cikk már hivatkozta 21-es sorszámmal <https://doi.org/10.1016/j.aca.2007.02.050>: 'One of the most important steps in developing a reliable calibration model between the NIR spectrum and the analytical data is the selection of the optimum number of latent variables (LV) or principal components (PC) to be used. There are several methods described in the literature to select this number, such as the akaike information criterion [16], bootstrap [17], [18], cross validation [11], [17], [19], ICOMP criterion for PCR [20] and conditional model dimensionality test for PLS [21].' [21 N.M. Faber, R. Rajkó Spectrosc. Eur., 18 (2006), pp. 24-28]

A megoldás a P13-as ACA publikációnkban van, mivel itt a következőképpen fogalmazunk: 'It has been observed, however, that non-significant components can be preceded and followed by (highly) significant ones [16], [23]. This phenomenon has been termed 'sandwiching' and can often be rationalized (see [24], [25], [26], [27] for in-depth discussions of this aspect).' A 16-os és 23-as cikkek Klaas Faber másik két, nagyobb csoportokkal való együttműködésének keretében készültek (Wold és Sjöström vezette csoport a svéd Umeå Egyetemen és az Andrade vezette csoport az A Coruña Egyetemen idetartozva Rutledge a párizsi mezőgazdasági kutatóintézetből). A három csoporttal csak Klaas tartotta a kapcsolatot és igyekezett úgy irányítani, hogy a randomizációs teszt kerüljön mindenhol középpontba. Ennek eredménye lett az, hogy a két nagyobb csoport több gyakorlati mérési adaton mutatta be a módszert, míg mi módszertani cikket írtunk az alapokat elmagyarázva. Klaas felkért az általa akkoriban alapított és működtetett Chemometry Consultancy 2Cy tanácsadó cég komponens-szelekció honlapjának kapcsolattartójának.

Sajnos a cég sem működik már és a honlap sem elérhető, de a Webarchive segítségével bemutatok két elmentett állapotot, egyet a kezdetekből, egyet a közelmúltból:

5.2 alfejezet – P14 cikk (2009) – 14. tézispont – BP

Az MCR-ALS algoritmus meglepő gyakorlati tulajdonságát tartam fel és az orvoslásához egy új kényszerfeltételt vezettem be

„Az alfejezetben kicsit nagyozolásnak érzem a kemometria geometriájának nevezni az LS és Borgen-ábrákat. Úgy gondolom, a többváltozós görbefulbontás az egyik fontos, de az alkalmazások száma szerint messze nem a legjelentősebb területe a kemometriának.”

A bíráló következetesen Borgen-ábrának nevezi az általam Borgen grafikonnak hívott megjelenítést. Talán ezért sem tudta elfogadni, hogy a Borgen grafikon az adtamátrix absztrakt terének egy teljes interpretációját adja, Prof.Dr. Abdollahival csak az adtamátrix mikrostruktúrájának nevezzük. Persze ehhez az kell, hogy a külső és belső konvex poligonok/politópok mellett az egyéb segédvonalak is szerepeljenek, legfőképpen a megengedett megoldás-tartományok (feasible regions) és a Borgen szimplexek.

A Borgen grafikon a kemometriai módszerek absztrakt terét jeleníti meg, így gyakorlati alkalmazása egyelőre még visszafogott, hiszen nagyon kevés gyakorló kemometriai módszer felhasználó veszi a fáradságot a mély matematikai ismeretek elsajátításához. Azonban bírálóm is lelkenedett korábban, hogy az L_0 , L_1 és L_2 normák hatásának vizsgálatakor a Borgen grafikonok (a kemometria geometriája) alkalmazása mennyire eredményes lehet: *„A munka jó szemléltetése annak, hogy az SMCR grafikus szemlélete mire képes, hogyan értelmezheti vagy kritizálhatja a néha ad hoc módon kialakult módszereket.”*

Köszönöm, hogy bírálóm elfogadta ezt a tézispontot.

5.3 alfejezet – P15 cikk (2010) – 15. tézispont – BP

NIR hiperspektrális adatok kiértékelése során alkalmazott minimális térfogat kritériummal kapcsolatban tettem kritikai megjegyzéseket

„A fejezetben, a cikkben és annak kiegészítő részében, valamint a tézisben is számos állítás szerepel. Ezek elég sommásak, átfednek a korábbiakkal és önmagukban Rajkó Róbert korábbi munkáinak ismerete nélkül nehezen is értelmezhetőek. Nem tudom, hogy az irodalmi előzmény tisztázása tézisben szerepeltethető tudományos eredmény-e.”

Azért tartottam fontosnak ezt a tézispontot megfogalmaznom, mert rávilágít arra az esetre, amikor egy már elismert, de az analitikai kémia területétől távol eső kutatónak ([José M. Bioucas Dias](#)) a szerkesztők még akkor is igazat adnak, amikor egyértelműen hibáztak.

’Elsőként azt jegyeztem meg, hogy a tiszta pixel nélküli hiperspektrumok esetére Craig [61] földtudományok területén megjelent munkáját hivatkozták, mivel ő az absztrakt térben az adatpontokat tartalmazó minimális térfogatú szimplex csúcspontjait javasolta becsülésként. Azonban Perczel et al. [62,63] már Craig előtt javasolták ugyanazon elven alapuló CCA (convex constraint analysis) módszerüket kémiai szaklapban megjelent cikkeikben.’ Erre azt a választ adták, hogy ők találtak egy korábbi Craig előadást, de egy még korábbi Perczel cikket is: Perczel, A., Hollósi, M., Tusnady, G., and Fasman, D. *Croatia Chim. Acta* 1989, 62, 189–200. <https://hrcak.srce.hr/en/175392>

Nos, van egy még korábbi, konferencia kiadványban megjelent publikáció a témában ugyanattól a csoporttól: G. Tusnady, A. Perczel, M. Hollósi: [Mixture decomposition on convex constraints for CD curves of proteins](#). pp. 340-346 in [Second International Conference](#)

[on Circular Dichroism, August 15-18, 1987, Budapest, Conference proceedings ed. by M. Kajtár; publ. by the Institute of Organic Chemistry L. Eötvös University.](#)

'Másodsorban arra hívtam fel a figyelmet, hogy a forgatási bizonytalanság nem az MCR-ALS vagy más algoritmus tulajdonsága, hanem a bilineáris adatmátrix belső sajátja!' Amit bírálóm ma már triviálisnak tart, de akkoriban, 15 évvel ezelőtt főképp a villamos-mérnöki/informatikai (IEEE) szakirodalomban egyáltalán nem volt az, de még előfordult, hogy a kemometria területén sem. Az NMF (nonnegative matrix factorization) területén csak mostanában került előtérbe és az értekezésben 100-as sorszámmal hivatkozott cikkben vezettük be a 'partial identifiability' fogalmát, mert addig csak a teljes identifikációt (a teljesen egyértelmű felbontást szolgáltató NMF megoldásokat) tanulmányozták.

'Lopes et al. a nemnegativitást alkalmazták kényszerfeltételként, valamint egy szükséges feltételt: „a szimplex minden (p-1) dimenziós oldala, azaz lapja (facet) tartalmazzon p-1 spektrális adatvektort” ... 'Rávilágítottam, hogy ez olyan erős megkötés, ami csak ritkán fordul elő a gyakorlatban.' Ezzel arra céloztam, hogy az analitikai kémiában nem az erőltetett kényszerfeltételeket kell alkalmazni pusztán azért, hogy egyértelmű megoldást kapjunk. A téveszme, hogy akár absztrakt matematikai kényszerfeltételek által is, de egyértelmű megoldást kapjunk a kemometriában manapság is hódít.

'Továbbiakban illusztráltam, hogy a koncepció, amit használtak nem minden esetben ad elfogadható eredményt: nemnegatív kényszerfeltétel alkalmazása mellett a minimális térfogatú szimplex (három komponensű rendszerek esetén minimális területű háromszög) a duális térben negatív értékeket is tartalmazó profilok absztrakt pontjait eredményezheti.' Bevezetnek egy a gyakorlatban ritkán teljesülő kényszerfeltételt, de azzal nem foglalkoznak, hogy a triviális nemnegativitás sérülhet.

'Egy további kritikus problémaként az alkalmazott normalizálást jártam körül.' Nem megismételve a részletes levezetést itt csak annyit jegyzek meg, hogy legújabb cikkemben ismét elővettem ezt a normalizálási problémát is: R. Rajkó: [On problematic practice of using normalization in self-modeling/multivariate curve resolution \(S/MCR\)](#), *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 244: 105033, 2024.

Kérem, gondolja át bírálóm és fogadja el ezt a tézispontot is.

5.4 alfejezet – P16 cikk (2006) – 16. tézispont – 3D

[Kifejlesztettem egy kemometriai módszert, amellyel a HPLC/FT-IR mérések során az eluens-hatást küszöbölhetjük ki fizikai oldószereelimináció nélkül](#)

„A fejezet elején SMCR kiértékelés is be lett ígérve, de ezt se a cikkben, és szerencsére így a tézispontban se találtam meg.”

A HPLC/FT-IR mérések során (is) előfordul az a szerencsétlen helyzet, hogy az eluensnek is van jele, spektruma. Mivel tudtuk a tiszta eluens(ek) spektrumait, akkori tudásommal nem értettem, miért nem tudjuk kinyerni az eluens elúciós profilját. Ehhez kellett elmerülnöm a Borgen grafikonok előállításába, de előtte még kifejlesztettük az OSSS-IU-PARAFAC és OSSS-IU-PARAFAC2 módszereket.

Köszönöm, hogy bírálóm elfogadta ezt a tézispontot.

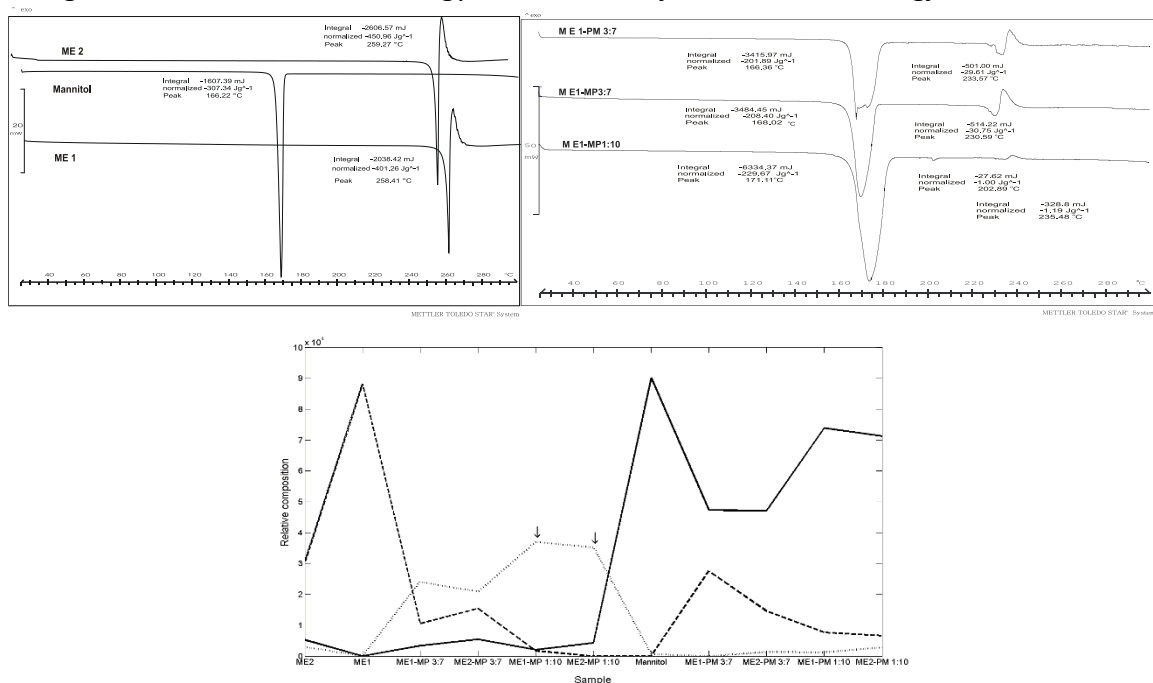
5.5 alfejezet – P17 cikk (2006) – 17. tézispont – meloxikám-mannit MCR-ALS X-ray

MCR-ALS módszert alkalmaztam a meloxikám-mannit binér rendszer fiziko-kémiai jellemzésére

„Emiatt úgy gondolom, hogy tudományos eredménynek tekintem az MCR-ALS használatát a parciális intenzitások meghatározására, de ezek arányai természetes következményei az elkészítésnek és a spektrális megjelenés nem egy új harmadik forma létezését jelenti, hanem csak vegyes parciális nagyobb súlyát.”

„A kapott harmadik görbe nem a keverék forma diffrakciós jele, hanem a vegyes parciális intenzitás függvény. A blend forma teljes jele tartalmazza mind a három parciális intenzitást.”

Bírálóm elfogadta az MCR-ALS alkalmazását tudományos eredményként, én nem is akartam többet demonstrálni ennél az értekezésemben. Azonban Parya Reisi Nassab a tanulmány első szerzője PhD disszertációjában megvédte a tanulmányban állítottakat, mivel a DSC görbék összehasonlításából egyértelműen kirajzolódik a blend megjelenése:



Az ME1-MP1:10 és ME2-MP1:10 esetében a meloxikám (szaggatott görbe) és a mannit (folytonos vonal) befolyása szinte elhanyagolható, ahogy a DSC vizsgálatnál az ME1-MP1:10 görbéje az elvándorolt és kiszélesedő csúcs után kisimul. Nyilván lehetne részletesebben is elemezni a DSC görbéket, de ez a kvalitatív kép is elegendő igazolás kell legyen.

Kérem, gondolja át bírálóm és fogadja el ezt a tézispontot is.

5.6 alfejezet – P18 cikk (2006) – 18. tézispont – meloxikám-mannit, BP, dissol.

Görbeillesztés nélküli komponensprofil-kinyerő módszert alkalmaztam meloxikám-mannit binér rendszerek kioldódási adatainak kiértékelésére

„Ha Rajkó Róbert nem a cikkenkénti tézispontok rendszerében gondolkozott volna, akkor számomra tematikailag ez és az előző tézis egybe vonható lenne.”

Sajnos ezzel nem értek egyet, mert az előző tézispont az MCR-ALS alkalmazása röntgen-diffrakciós adataira, ez viszont az SMCR használata, annak bizonyítására is, hogy ha a

PARAFAC nem használható ilyen jellegű kioldódási vizsgálatoknál, akkor milyen lehetőségeink vannak.

Köszönöm, hogy bírálom elfogadta ezt a tézispontot.

5.7 alfejezet – P19 cikk (2017) – 19. tézispont – BP

Definiáltam és értelmeztem a lokális rang-vesztés fogalmát

„Az alfejezet a cikknek csak egy részét tartalmazza, bár pont a rangvesztéses táblázat helyett jobb lett volna a cikk ábráját idevenni.”

Köszönöm, hogy bírálom elfogadta ezt a tézispontot.

5.8 alfejezet – P20 cikk (2017) – 20. tézispont – adatok tere

Dualitás alapú általánosított rang-eltüntető algoritmust fejlesztettem, kalibrációs mintában nem szereplő zavaró komponensek esetében, koncentráció meghatározáshoz, realisztikus hibabeccsléssel

„A módszer mindenféle előnye ellenére félek, hogy a műszerközpontú analitikai kémikusok miként fogják ezt alkalmazni, illetve standard módszerként implementálva lesz-e valaha. Az ötlet és a megvalósítás nem lett volna lehetséges a közreműködők igen magas absztrakciós képességei nélkül. Be kell vallanom, hogy sajnos nem értettem meg a geometriai konstrukciót részleteiben, de az eredményt hasznosnak tartom.”

Ez a fejlesztés az egyik erős bizonyítéka, hogy a Borgen grafikon a kemometria geometriája, hiszen egy multilineáris algebrai konstrukciót, azaz a két adatmátrixra épülő rang-eltüntető probléma nem iteratív módon történő megoldására kidolgozott általánosított rang-eltüntető módszert (Generalized Rank Annihilation Method, GRAM) ültettünk át sikeresen a dualitás elvének felhasználásával.

Köszönöm, hogy bírálom elfogadta ezt a tézispontot.

Végül megköszönöm, hogy a bíráló elfogadta az értekezésem alapján megfogalmazott téziseimet új tudományos eredménynek, bízom abban, hogy a 4 vitatott tézist sikerült megvédenem és eloszlatnom a miattuk keletkezett kételyeket. Köszönöm még egyszer méltatását és hogy az értekezésben összefoglalt eredményeimet elegendőnek tartja az MTA doktora cím megszerzéséhez, és javasolja a nyilvános vita kitűzését.

Szeged, 2024. június 26.



Prof.Dr. Rajkó Róbert