

Opponensi vélemény

Rajkó Róbert

„Görbeillesztés nélküli komponensprofil-kinyerés az analitikai kémiában”

című értekezéséről.

A témaválasztásról

A Self-modeling curve resolution (SMCR) technika lényege, hogy előzetes ismeretek igénye nélkül több komponens együttes hatását érthetjük meg egy mérési eljárásból származó adatok alapján. Az SMCR tehát olyan kemometriai módszereket alkalmaz, amelyek a mért jelet a hozzájáruló komponensekre bontják a következő alapelvekre támaszkodva:

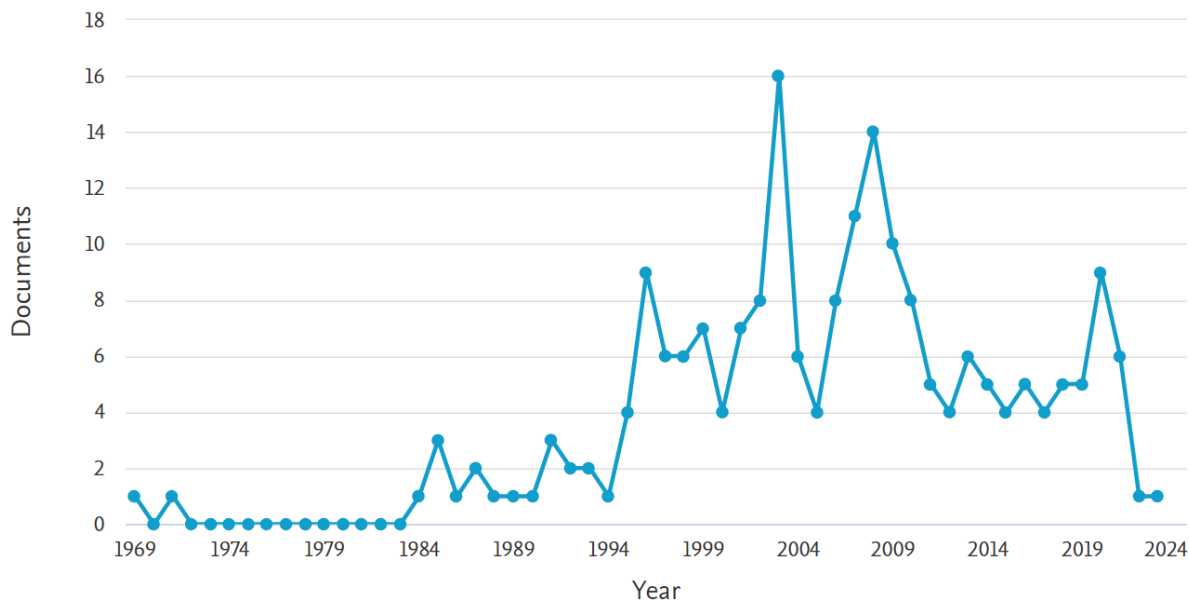
- minden komponensnek van egyedi spektruma vagy profilja.
- a koncentráció és a jel intenzitása között lineáris összefüggés van.

Az SMCR-t többcsatornás detektálással összekapcsolt kromatográfiából, mint például a GC-MS és spektroszkópiai mérésekből, például infravörös (IR) Raman- és közeli infravörös (NIR) származó adatok elemzésére.

A technika hátránya, hogy több megoldást is eredményezhet, ezért fontos a kapott eredmények validálása, illetve a többértelműség meghatározása és csökkentése (például nemnegativitási kényszerek alkalmazásával).

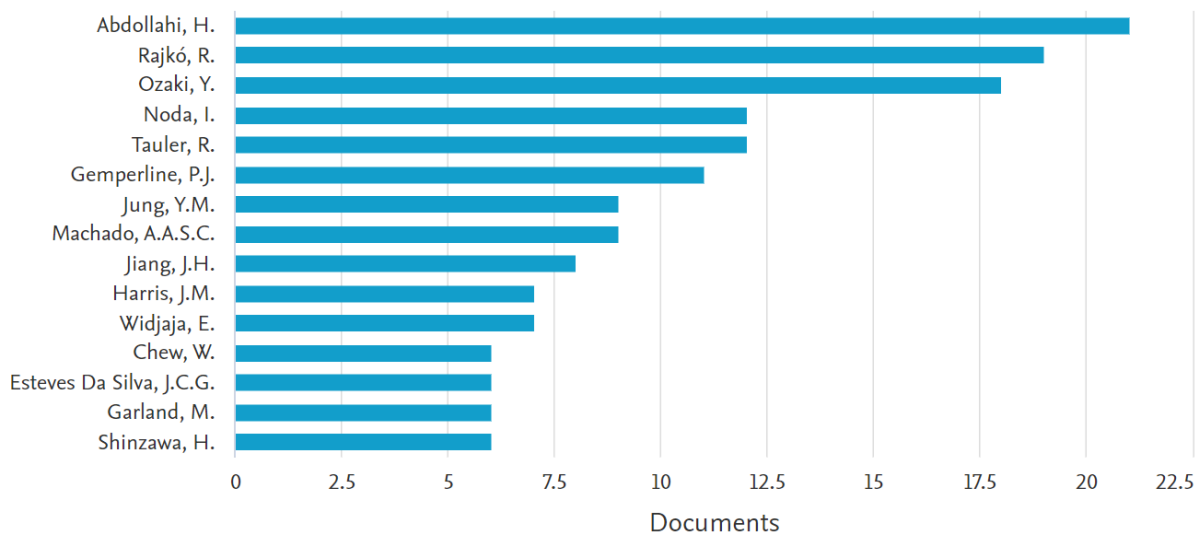
A dolgozatban ismertetett kutatás elsődleges célja e hátrányok megfelelő kezelésével a technika alkalmazhatóságának segítése.

A probléma tehát jelentős (amit az is igazol, hogy a feladat megoldására alkalmazott "Multivariate Curve Resolution" módszer széles körben alkalmazott), ugyanakkor SMCR módszer fejlesztésével kapcsolatban az érdeklődés nem csupán mérsékelt, hanem csökkenő tendenciát is mutat a Scopus adatbázis szerint (1. ábra).



1. ábra SMCR módszert tárgyaló publikációk számának időbeli alakulása a Scopus adatbázis szerint

Az eszköz elterjedtségét jól mutatja, hogy az összesen 206 tudományos publikáció elsődlegesen a szerzőhöz és iráni szerzőtársához köthető (2. ábra).



2. ábra SMCR módszert tárgyaló publikációk szerzőinek megoszlása a Scopus adatbázis szerint

Mindezek alapján a dolgozat témaválasztása elsődlegesen az általános problémakör miatt minősíthető jelentősnek.

A dolgozat szerkezete, a szerkesztés minősége

117 oldal magyar nyelvű értekezés felépítése és szerkesztése minden szempontból formabontó.

A szerző által kiválasztott értekezés alapjául szolgáló 20 publikáció mindegyikét egy-egy önálló tézisnek fogalmazta meg. A 20 publikációt a szerző két csoportra osztotta. 12 elméleti eredményt közlő cikk a negyedik fejezet 12 alfejezetében, míg a 8 gyakorlati alkalmazáshoz kapcsolódó tudományos mű az ötödik fejezet 8 alfejezetében került bemutatásra.

Sajnos az egyedi stílus egyáltalán nem válik a dolgozat előnyére. Úgy gondolom, hogy a kiválasztott 20 publikáció főbb mondanivalóinak és eredményeinek tételes besűritése 2-4 oldalas alfejezetekbe egyáltalán volt sikeres. Az alfejezetek sajnos a legtöbb esetben számomra olvashatatlanok és érthetetlenek, ugyanis a vizsgált problémák és az ábrákon látható eredmények részletes tárgyalásának hiányában általában az ábrák értelmezhetetlenek, az egyenletek megértését a legtöbb esetben a változók ismertetésének hiánya nehezíti.

Az ábrák többsége az érintett cikkekből rossz minőségben átmásolt, a tengelyfeliratok vagy a zsúfoltságnak köszönhetően kis méretük miatt olvashatatlanok, vagy hiányoznak (pl. 10. ábra), vagy a magyarázó szövegek miatt értelmezhetetlenek, vagy stílusukban, szerkesztésükben, jelentésükben inkonzisztensek.

Rettentően sajnálom, hogy a dolgozat írásakor elmaradt az eredmények integráló jellegű megfogalmazása, amely véleményem szerint ez minden MTA doktori dolgozatnál meg kell, hogy történjen. A kevesebb néha több alapelv alkalmazása sok szempontból a dolgozat hasznát szolgálta volna. Az az érzésem, hogy a szerző az eredmények mennyiségével és bonyolultságával szerette volna lenyűgözni az olvasót, ahelyett, hogy arra fókuszált volna, hogy egy élvezhetően olvasható, a téma jellegének ellenére könnyen olvasható mű szülessen.

Az eredmények publikáltsága és hivatkozottsága

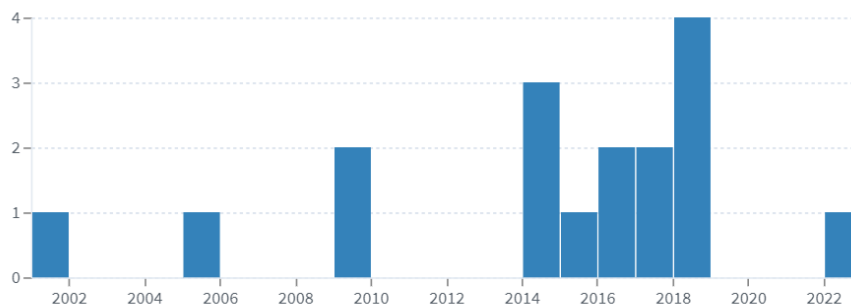
A kiválasztott 20 folyóiratcikk a kemometria területén elismert lapokban jelent meg.

A közlemények többsége első vagy utolsó szerzőségű. Az MTMT alapján az életmű összes hivatkozásainak száma 1737, kumulatív impakt faktora 157. Mindezek igazolják, hogy a szerző tudományterületének aktív és elismert résztvevője.

Ugyanakkor szeretném felhívni a figyelmet arra a más SMCR módszer kapcsán említett tényre, hogy a fejlesztett módszerek csak elenyésző mértékben vizsgáltak és alkalmazottak. Például a Google Scholar 79, Scopus 20 olyan publikációt regisztrált amelyben a dolgozat vizsgálatának alapját adó Borgen grafikon (Borgen plot) említésre kerül.

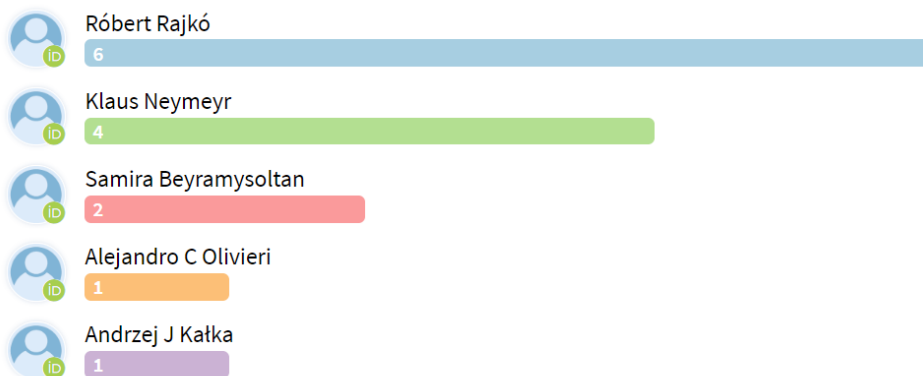
A lens.org adatbázis alapján ezek a publikációk elsődlegesen a szerzőhöz kapcsolódnak (3. ábra).

Publications over time



Highlight a selection to filter by date

Prominent Author Profiles



3. ábra A Borgen plot módszert tárgyaló publikációk számának időbeli és szerző szerinti megoszlása a Lens.org adatbázis szerint

A dolgozat felépítése és tartalma

Az értekezés hét fejezetből épül fel, melyek tartalma sajnos nem minden esetben esik egybe a fejezet címével és a szokásos módon elvárt mondanivalóval.

Bevezetés

Sajnos formabontó módon a két oldal terjedelmű bevezetés a témakör ismertetése helyett a kemometria tudományterületének szubjektív definiálását és a szerző kemometriához való viszonyát taglalja.

Célkitűzés

A második a „Célkitűzés” címet viselő fejezet - amely szintén kétoldalmi terjedelmű – ahelyett, hogy definiálná a dolgozat célját, a kutatási kérdéseket és azok jelentőségét, az előző fejezet folytatásaként az elvégzett kutatási tevékenységet ismerteti. A kutatások motivációjára, jelentőségére sajnos csak kevés utalás történik a fejezetben.

Irodalmi áttekintés

A harmadik fejezet mélyrehatóan foglalkozik a görbe nélküli komponensprofil-kinyerés irodalmával. Ez a legjobban megírt fejezet magába foglalja az elméleti alapok részletes tárgyalását, a használt matematikai háttér bemutatását. Ezt a fejezetet nagyon jól átgondoltnak így nagyon értékesnek tartom.

A negyedik, „*Mérési adatok modellezése: elméleti fejlesztése és alkalmazások*” címet viselő fejezet 12 alfejezetet tartalmaz, melyben 12 témához kapcsolódó cikk eredményét ismerteti.

Az egyes alfejezetek cikkek bővített kivonatának tekinthetők. A 4.2 alfejezet pl. két oldal terjedelemben ismereti a P2 publikációt, úgy, hogy a példa bemutatása helyett az olvasót az irodalmi hivatkozásban megadott publikáció irányába tereli. Ez a tény alátámasztja, hogy sajnos az eredmények értelmezésére és megértésére a dolgozat önmagában nagyon sok esetben nem alkalmas.

Az ábrák sajnos nem konzisztensek a jelölésekkel (pl. 3 ábra bal-jobb oldala inkonzisztens).

Rettentően nehéz olvashatóságot a jelölések bevezetésének és az egyenletek értelmezésnek hiánya eredményezi. Pl. a 4.3 fejezet amely a P3 cikk eredményeit ismerteti egyáltalán nem ismerteti, hogy mi a változók jelentése a 20 és 21 egyenletekben. A hiányos tárgyalásnak köszönhetően sajnos egyáltalán nem derül ki, hogy az SCF mérték miként függ a T rotációs mátrixtól (persze alapos megfontolásokkal minden visszafejthető, az eredeti közleményekben fellelhető, ugyanakkor véleményem szerint ez a munka egyáltalán nem várható el az olvasótól). A 2. táblázatot csupán a dolgozat alapján nem tudtam értelmezni.

Sajnos a 4.5 fejezet megértése is kihívásokat okozott számomra. Az „Eleméleti fejtegetések .. „ cím igazán volt alkalmas, hogy felhívja a figyelmem arra, hogy mi is az az érdemi mondanivaló amelyre érdemes fókuszálni az olvasás közben.

A 9. ábra „A levezetésekhez és értelmezéshez szükséges illusztrációk” címe sem adott információt arra vonatkozóan, hogy mi az érdemi mondanivalója a fejezetnek. Az ábrát sajnos azért sem tudtam értelmezni, mert a bal és jobb oldali ábrán (feltehetőleg hibásan) ugyanazok a változók szerepelnek, teljesen más tartományban.

A szűkös terjedelmet tovább csökkenti a fejezetben a teljesen felesleges MATLAB script amely semmilyen többlet információt nem tartalmaz.

A 4.6 fejezet a P6 publikációt kivonatolja. Ebben az esetben három oldalból kellene, hogy kiderüljön a tudományos eredmény újdonságtartalma és elve. A fejezet első bekezdése a SPSO optimalizációs algoritmus alkalmazásban rejlő lehetőségekre hívja fel a figyelmet. Sajnos egyáltalán nem derül ki a dolgozatból, hogy mi ennek a megoldásnak a jelentősége, célja, eredménye. Ma már számtalan populáció alapú optimalizációs eljárás érhető el. Miért ezt választotta a szerző? A 11. ábra egyáltalán nem értelmezhető számomra.

A 4.7 fejezet „Újabb fejlesztések ... „ címet viseli, amely cím sajnos ismét nem informatív. Az eredetileg 14 oldalas publikáció eredményeinek pár oldalas képeskönyvként történő ismertetése véleményem szerint szokatlan egy MTA doktora értekezés stílusától.

A cikkismertető fejezetek közül a legfurcsább a 4.9-es fejezet amely egy áttekintő cikket mutat be egy oldalon „21. ábra Az áttekintő műben bemutatott módszerek összefoglaló ábrája” című ábrával.

A 4.10 fejezet önmagában szintén érthetetlen volt számomra. A változók jelentése egyáltalán nincs ismertetve.

Az ötödik fejezet gyakorlati fejlesztésekkel és alkalmazásokkal kapcsolatos cikket foglal össze.

Az 5.2 alfejezetről már tényleg szembesültem azzal a ténnyel, hogy a dolgozat teljes mértékben olvashatatlan és érthetetlen számomra. A P14 cikket a szerző három bekezdésben ismereti, két számomra teljes mértékben áttekinthetetlen ábrával.

Az 5.5 fejezet már csak egy oldalon vázolja a P17 publikáció tartalmát, amely közlemény véleményem szerint semmilyen új tudományos eredményt nem tartalmaz a módszertan fejlesztése szempontjából.

A hatodik fejezetben a tézisek kerülnek bemutatásra. A 20 cikk ismertetője alapján készült 20 alfejezethez kapcsolódóan 20 tézis került megfogalmazásra.

A hetedik fejezet az eredmények további hasznosítási lehetőségeit tárgyalja. Sajnos ez a fejezet is egy ömlesztett kivonata a szerző dolgozat érdemi részéhez nem kapcsolódó szakmai tevékenységének. A sok bonyolultnak tűnő ábra, megfogalmazás egyáltalán nem a tudományos alaposágot és igényességet tükrözi. Az 50. ábrának már cím sem jutott. Ezeket a munkákat nem is értem, hogy miért szerepelteti a szerző (pl. TDK munka ismertetése és a kapcsolódó triviális ábra a többváltozós adatelemzés jelentőségéről egyáltalán nem a dolgozathoz illő). Az itt felsorolt információk többsége nem kapcsolódik a vizsgált tématerülethez. Ez a fejezet a címevel ellentétben tényleges kutatási kérdést nem vet fel, kutatási irányt nem jelöl ki.

A tézisekről

Sajnos a téziseknek nem csak a számossága, hanem megfogalmazásuk is szokatlan.

Az első tézis nem fogalmaz meg egy egyértelmű állítást, csupán a kutatáshoz kapcsolódó tevékenységet és az érintett cikk tartalmát ismerteti. Ennek köszönhetően formai szempontból sajnos nem tudom elfogadni a tézist, holott a kapcsolódó publikációban szereplő eredményeket jelentősnek tartom, azok véleményem szerint tézisértékűek.

A 2-12 téziseket a 9-es tézis kivételével elfogadom, jelezve, hogy ezek megfogalmazása sok esetben nem ideális, hasznosabb lett volna az eredményeket strukturálni, téziscsoportokba foglalni.

A 9 tézis egy többszerzős irodalmi áttekintéshez kapcsolódik. A módszerekre vonatkozó megállapítások korábbi publikációkban már ismertetésre kerültek, nem találtam olyan megállapítást, mely a szerzőhöz egyértelműen köthető lett volna és tézisértékű új tudományos eredményként lehetne elismerni.

A 15 tézis egy „Comments on “Near-Infrared Hyperspectral Unmixing Based on a Minimum Volume Criterion for Fast and Accurate Chemometric Characterization of Counterfeit Tablets” publikációhoz kapcsolódik. A szerzővel ellentétben úgy gondolom, hogy egy MTA doktora dolgozat esetében jóval jelentősebb tudományos eredményeket kell hogy tézisekbe foglaljunk mint egy publikációval kapcsolatos kiegészítés, amely felhívja a figyelmet az alkalmazott MCR-ALS módszer ismert hátrányaira.

A 16-17 téziseket nem fogadom el. A kapcsolódó publikációkban és alfejezetekben nem találtam a módszertanhoz kapcsolódó érdemi eredményt, a közleményekben a szerző nem a meghatározó első vagy utolsó helyen szerepel.

A 18-20 téziseket elfogadom.

Kérdések

A hatodik tézisben ismertetett módszer kapcsán az SPSO optimalizációs algoritmust alkalmazta. Sajnos a cikkben sem találtam utalást arra, hogy mi alapján határozta meg a részecskék számát? Összevetést sem találtam más optimalizációs algoritmusokkal. Mi a módszer érdemi előnye? Ma milyen technikát választana?

A 12-es tézisben/alfejezetben/publikációban ritkás profilok meghatározására fókuszál. Kérem tekintse át a számítástudományban a ritkás mátrixok kezeléséhez kapcsolódó kutatásokat és vesse össze ezekkel a munkáját. Kérem taglalja, hogy mennyire is tekinthetők ritkásnak az Ön által vizsgált problémák, illetve mennyire is igényeltek speciális algoritmusokat és megfontolásokat.

Összefoglaló értékelés

Dr. Rajkó Róbert disszertációja hiteles adatokat tartalmaz.

Az elmélyült kutatás eredményeit összegző értékes és hiteles munka, amely megfelel a Magyar Tudományos Akadémia Doktori Tanácsa által meghatározott szakmai követelményeknek.

Véleményem szerint a doktori mű nem teljesíti a Kémiai Tudományok Osztálya alábbi elvárását, miszerint *„Értekezés: az előzmények, az elvégzett munka és az eredmények részletes leírása, minden tekintetben komplett és önmagában (a mögötte álló cikkek áttanulmányozása nélkül) értelmezhető és értékelhető munka”*, ugyanis sajnos számomra dolgozat nem volt önmagában értelmezhető.

Véleményem szerint nem teljesült Kémiai Tudományok Osztályának az az elvárása sem, miszerint *A mű „tartalmaz alapos célkitűzést, részletes, tételes irodalmi előzményeket, megadja az alkalmazott módszereket és értékelési eljárásokat, az eredmények elemző tárgyalását, további kutatási ajánlásokat”*

A célkitűzés megfelelőségét a szerzővel ellentétben másként értékelem, benyomásom szerint további kutatási ajánlások érdemben nem kerültek definiálásra, az eredmények elemző tárgyalására jelentősen korlátozott módon került sor.

Természetesen nem kérdőjelezem meg, hogy a Dr. Rajkó Róbert úgy gondolta, hogy egy kitűnő dolgozatban sikerült eredményeit megfogalmaznia, tudományos publikációinak mennyisége és hivatkozásainak szép száma alapján méltó az MTA doktora cím megszerzésére.

A pályázó szakmai tudását rendkívül nagyra értékelem, tudományos eredményeinek megalapozottságát megkérdőjelezhetetlennek tartom, és úgy gondolom, hogy az általam elfogadásra javasolt tézisek értéke megfelel az MTA doktora cím kapcsán támasztott magas minőségi elvárásoknak.

Mindezek alapján- a doktori művel kapcsolatos kritikai észrevételeim ellenére- javaslom az értekezés nyilvános vitára bocsátását és sikeres védés esetén a jelölt számára az MTA doktora cím odaítélését.

Veszprém, 2024. 04. 29.

A handwritten signature in blue ink that reads "Abonyi János". The signature is written in a cursive, flowing style.

Abonyi János

Egyetemi tanár, az MTA doktora