

Válasz dr. Czakó Gábor bírálataira

Szeretném megköszönni dr. Czakó Gábor egyetemi tanárnak, az MTA doktorának, hogy elvállalta a dolgozatom bírálatát.

Köszönöm méltató szavait a témaválasztás aktualitásával kapcsolatban. Az elővédésre készült értekezésben még a végső dolgozatnál is szubjektívabban írtam le, hogy milyen események és hatások következtében váltogattam a témákat. Szerencsém volt, mert ez a kutatói bolyongás ma már kurrensnek tekinthető területekre is elvezetett.

dr. Czakó Gábor dr. Boda Dezsőhöz hasonlóan jelzi a bírálatában, hogy a korai kutatásaim ábrái gyenge minőségűek:

(Az alábbi bekezdés közös dr. Boda Dezső és dr. Czakó Gábor bírálatára adott válaszbomban.)

A korai cikkeim ábrái sajnos rossz minőségűek a dolgozatban. Az érintett cikkeket még nyomtatott formában küldtem el a kiadóknak. Az elmúlt öt évben többször történetek olyan átépítések a Kémiai Intézetben, amikor hirtelen tárolóhelyet kellett felszabadítanom, ennek estek áldozatul az addig őrzött eredeti ábrák. Bár mindig törekedtem a régebbi kutatásaim digitális archiválására, nem minden cikkhez találtam meg a beküldött ábrákat, illetve több esetben hiányos postscript fájlokat találtam csak. Meglepetés volt az is, hogy a 90-es évek cikkeinek online elérésű változatai a kiadónál többnyire rossz felbontásúak. A jogosan kritizált ábrák hagyományos digitális javítgatásával próbálkoztam, de sikertelenül. Mesterséges intelligenciás képjavítástól meg idegenkedtem.

Visszatérve dr. Czakó Gábor bírálatára:

A szerkesztéssel kapcsolatos megjegyzéseket jogosnak tartom, tényleg jobb lett volna pl. jobban elkülönülő ábraalírásokat használni. Köszönöm a tételeim szabatos összefoglalását.

Válasz a számozott kérdésekre:

1. A számítógépes kémia, sőt minden természettudományos számítógépes modellezés sajátja, hogy a módszerek és a számítógépes kapacitás állandó fejlődése miatt sokszor érdemes megismételni vagy újragondolni a korábbi számításokat. Emiatt lehet, hogy egy-egy régi munka érdektelenné válhat, esetlegesen kiderül, hogy téves vagy félrevezetően pontatlan eredményekhez és következtetésekhez vezetett. Ugyanakkor számos maradandó relevanciája lehet egy régi munkának, pl. a) felhívja a figyelmet, hogy az adott jelenség/rendszer számítógépes modellekkel is vizsgálható. b) időtálló választ ad pl. egy reakció mechanizmusára c) segít egy jelenség megértésénél, magyarázatánál d) alátámaszt egy mérési eredményt vagy elméleti sejtést e) adatot szolgáltat egy komplex folyamat későbbi modellezéséhez, tervezéséhez. f) további kutatási/fejlesztési irányt jelöl ki... Ugyanakkor sok része érdektelenné válhat egy korábbi számolásnak. Az új lehetőségek a nagyobb pontosság mellett lehetővé teszik nagyobb rendszerek és hosszabb idejű folyamatok modellezését, csökkentve a korábbi kompromisszumok esetleg nem elhanyagolható hatását. Két negatív és egy pozitív saját példát

említenék: a) A higany- elektrolit határfelület molekuláris dinamikai szimulációjakor háromféleképpen, egyre nagyobb számítógépigénnyel számoltam a Coulomb kölcsönhatást, klasszikus levágással, néhány szimulációs cella figyelembevételével és Ewald módszerrel. Kvalitatíve is más eredmény jött ki, az alkáli és halogenid ionok a higany felületről fokozatosan a vizes tömbfázisba kerültek. Mérés híján csak az számolások minősége alapján tudtam dönten, ami alapján az első két szimuláció eredménye lényegtelené vált. b) A Car-Parrinello szimulációt használó munkámnál nem volt lehetőségem az elvileg releváns salétromsav-trihidrát felületen történő adszorpciót vizsgálni, csak salétromsav-monohidrát felületet tudtam modellezni. „Szerencsém volt”, se a későbbi trihidrátra végzett számolások, se az egyre komolyabb kvantumkémiai módszerekkel végzett későbbi számolások nem sokat adtak hozzá az adott reakciók értelmezéséhez. c) A pszeudourineáz vizsgálatánál Kiss Dóra doktorandusz először csak egy kisebb rendszert vizsgált kvantumkémiai számolásokkal, majd QM/MM közelítésű rendszeren végzett szabadenergia számolásokat. Az első esetben teljesen más, utólag elfelejthető mechanizmust kaptunk az enzim működésére.

2. Köszönöm, tényleg on the fly a szokásos elnevezés.

3. Nem kellett volna abbahagynom azt kutatási irányt. Ha maradok a területen, Boda Dezső kifejezésével élve, ismert „mélyfúróvá” válhattam volna ott. Azonban más töltötte ki az időmet akkoriban, sok a hazai és ELTE-s oktatásszervezési munkát vállaltam, illetve jobban érdekelt a számomra új kemometria terület. Teljesen nem hagytam abba az inverz probléma / coarse graining témakört. PI. most fejeztem be az az előzetes számolásokat egy újabb potenciál meghatározó módszerrel kapcsolatban, ami a részecskékre ható erők eloszlása alapján illeszt. Tervezzük egy korábbi munka folytatását is Király Péterrel. Kidolgoztunk egy reprezentációt a coarse grain környezet leírására kétkomponensű Lennard-Jones rendszerek effektív egy komponensűvé váltásánál. Ennek gépi tanúlással való kombinációját a fejünkben már egy ideje tervezzük.

4. Klasszikus értelemben az átmeneti állapot egy nyeregpontra a megfelelő matematikai tulajdonságokkal. A szimulációs irodalomban ezt kiegészítően szokás használni a „dividing surface” fogalmat, ami az összes 0,5 kommittorú pont felülete. Trajektóriák elemzésénél szokás még a „saddle domain” használata is, ez a nyeregpontról a termék és/vagy a reaktáns irányába kijelölhető szakaszt jelent, amelynek specialitása, hogy energetikai szempontból viszonylag lapos és a rendszer néha egész hosszú ideig ott tartózkodik. Ez a „saddle domain” azonban a nyeregponttal együtt konkáv alakzat, nem tartalmaz minimumot. dr. Czakó Gábornak igaza van, ha itt minimum van, az nem nevezhető átmeneti állapothoz, csak közti terméknek. Még akkor se, ha alapoktatásban egy reakció energiaviszonyait gyakran mutatjuk be úgy, hogy az átmeneti állapotban aktivált komplex alakul ki. Többnyire ezek ott se átmeneti állapotok, hanem magasan fekvő minimummal rendelkező közti termékek.

5. Az 5. pontban dr. Czakó Gábor a hálózatkutatás és a kemometria kapcsolatára kérdez rá. Megpróbálok, csak ennek a szűkítésnek megfelelően válaszolni, nem ismételném azokat a részeket,

amikről a szimulációs részben már írtam. Vagyis a kinetikai Monte Carlo szimulációról, a diszkrét átmeneti állapotok elméletéről, vagy a perkolációról mind régebben divatos elemzési módszerről.

A kemometria esetében a hálózatkutatói eszközök alkalmazása felmerülhet már abban az egyszerű képben, hogy az objektumaink egy-egy csúcspontnak tekinthetők a változók sokdimenziós terében. Ha akarjuk, különböző definíciók alapján éleket is létrehozhatunk, klasszikusan a távolságmátrix alapján, vagy pl. a szeriálás témakörben bevezetett lokális hasonlóság alapján. A csúcspontok helyzete az alapja sok mintázatafelismerő (klaszterező) algoritmusnak is, pl. a nem egyenletes sűrűség szerepe jelenik meg a hierarchikus, a K-közép, és a Jarvis-Patrick algoritmusokban, illetve azok klasszifikáló változataiban is. Speciális eset pl. a Kohonen-háló klaszterezése, ahol egy alacsonyabb dimenzióban levő rácsra helyezzük át az eredeti gráfunkat. De nem csak a változótérbeli gráf elemezhető, hanem az ezt kiegészítő objektumtérbeli eset is, ahol a változók jelentik a csúcsokat. A tanító/teszt felosztásnak és a változó szelekciónak is vannak gráfon értelmezhető módszerei. Mindkét térben elvégezhető valamilyen diagonizálás is, hasonlóan a többváltozós görbefulvadásnál használt bal és jobboldali sajátvektor-sajátérték elemzésekhez. Összefoglalva, már a klasszikus kemometriai eszközökben is megjelenik valamennyi gráfelmélet, még ha nem is szokás hálózatkutatásnak nevezni és más a nevezéktana.

Egy másik terület a gépi tanulásos modellek azon része, ahol a modellek szerkezete csomópontokból és élekből áll. Ezek lehetnek akár osztályozó vagy regressziós modellek. Elsődlegesen a fa és a mesterséges idegháló alapú rendszerekre gondolok. Ezek betanítása, vizsgálata, értelmezése és magyarázata (interpretation and explanation) rengeteg hálózatkutatói elemet tartalmaz. Számos, sokszor ad hoc módszer létezik, amelyek valamilyen módon gráfon dolgoznak (lásd pl. Ajay Thampi: Interpretable AI, Manning, Shelter Island, 2022). Ezekben a hálózatként értelmezhető modelleken sokfajta definíciója lehet az éleknek, pl. a súlyok, a fluxusok, a korrelációk és a specificitás szerint. Ami erre a területre is jellemző, hogy nem direkt módon használják a hálózatkutatói szakszavait, pl. a központosság különböző eseteit. Ugyanakkor biztos, hogy tisztítaná a képet, ha pl. a növekvő gráfok hálózatkutatói eredményeit összevetnénk a fokozatosan újra parametrizált modellek viselkedésével.

Még egyszer köszönöm, hogy dr. Czákó Gábor vállalta a feladatot és alaposan átolvasta a dolgozatot. Kiemelten köszönöm a szélesebb kontextust érintő megjegyzéseit és kérdéseit, valamint a méltató szavakat.

Budapest, 2026. február 23.



/Tóth Gergely/