

Válasz dr. Jedlovsky Pál bírálatára

Szeretném megköszönni dr. Jedlovsky Pál egyetemi tanárnak, az MTA doktorának, hogy elvállalta a dolgozatom bírálatát.

A tételes kérdések és megjegyzések előtt Jedlovsky Pál több irányból elemzi a dolgozatomat. Ezek közül a legnagyobb hangsúlyt a dolgozat szerkezete kapja. A téma előjön dr. Boda Dezső bírálatában is, így részben közös választ írtam erre a kérdésre. Függetlenül attól, hogy míg dr. Boda Dezső kompromisszumként elfogadta a függelékben szószedetbe sűrített elméleti és módszerleírásokat, dr. Jedlovsky Pál ezt nem tartotta megfelelő döntésnek.

(Az alábbi bekezdés közös dr. Boda Dezső és dr. Jedlovsky Pál bírálatára adott válaszomban.)

Dolgozatomat eredetileg a hagyományos szerkezetben szerettem volna megírni, ahol témánként irodalmi összefoglaló és módszerleírás szerepel a saját eredmények bemutatása és értelmezése előtt. Publikációim válogatásakor jöttem rá, hogy legalább 8-10 különálló irodalmi és módszerleírási rész kellene a saját eredmények bemutatása elé. Következő változatként abban gondolkodtam, hogy a módszerleírási részeket függelékbe helyezzem tagoltan, pl. diffrakciós mérések, statisztikus mechanika, szimulációs módszerek, kvantumkémiai módszerek, numerikus matematikai módszerek, klasszikus kemometriai módszerek, gépi tanulási módszerek címszavak alá. Elkezdtem az irodalmi összefoglaló fejezetek és a függelékbe szánt módszerleírási részek írását, de még tömör fogalmazás esetén is látszott, hogy a jelenleginek kb. a kétszeresére nőne a dolgozat terjedelme, messze nagyobbra, mint az MTA értekezések javasolt mérete. Az előbírálatra készült dolgozatom tagolása már a mostani volt, de még függelék nélkül. Héberger Károly előbírálom javasolta, hogy térjek át a hagyományos szerkezetre, viszont a terjedelem miatt úgy gondolta, hogy csak a kemometriai részből írjak dolgozatot. Baranyai András előbírálom viszont pont a korábbi munkáimat tartotta fajsúlyosnak. Az ellentmondó javaslatok hatására jutottam el az unortodox szószedetes megoldáshoz, mind az elméleti, mind a módszerleírásokra vonatkozóan. Sőt, még ördöggént kezelt wikipédiás címszavakat is megadtam a szószedetben. Miért gondoltam/gondolom ezt egy járható útnak? Úgy látom, hogy ma már elvétve található olyan fiatalabb kolléga, aki egy monográfia átolvasásával kezdi egy terület megismerését, vagy akár naponta kézikönyvként használna szakkönyvet. Elsődleges információforrássá az internetre feltöltött anyagok váltak, beleértve a kétes jogdíjú és a szövegben kereshető verzióit a szakkönyveknek. Én is így dolgozom ma már, pedig rendelkezésemre áll Baranyai András és Szepesváry Pál impozáns szakkönyvgyűjteménye.

Visszatérve dr. Jedlovsky Pál bírálatához:

Az értekezés személyes hangvétele, főleg az adott kutatás elindulásáról „sztorizgatás” nem csak dr. Jedlovsky Pált zavarta. Az elővédésre készített dolgozat még „sztorizgatóbb” volt. Valamennyire megfogadtam az ismerősök akkori tanácsát és több körben is „gyomláltam” a dolgozatot. A személyes

hangvétele jelenléte, a klasszikus didaktikus elméleti és módszerleírás hiánya és a szószedetes megoldás összefügg azzal a kérdéssel is, hogy kinek írtam ezt a dolgozatot. Az MTA doktori eljárás számomra legfőképpen egy keretet adott arra, hogy több mint 30 évnyi kutatásaimat áttekintsem, elsődlegesen saját magam számára. Közel 60 évesen számomra már nem a kutatói életpályamodellen való előrelépés volt a motiváló erő. Próbáltam az MTA doktori eljárás szabályait tiszteletben tartani, de mint a bírálók is észlelték, nem mindig sikerült. A szakmám elején pl. Baranyai András kandidátusi értekezése volt a legjobb forrás a szimulációs terület megismeréséhez. Ahogy már említettem, ma az internet, mint elsődleges információ forrás idején, kevesebb értelmét látom a monográfia jellegű értekezéseknek. Megjegyzem, hasonló változások előtt állunk a hagyományos publikációk esetében is, szerintem 5-10 éven belül irrelevánssá válik a publikációk és a tudománymetria mai rendszere.

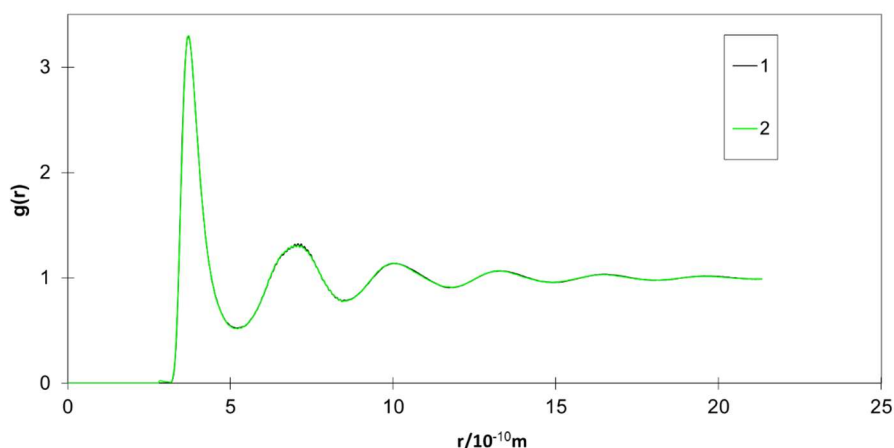
1) Az első tételes kérdés/megjegyzés összefügg a bíráló 3. oldal alján levő utolsó két mondatával. *„A jelölthöz hasonlóan abban az időben az RMC módszer is a helyét kereste. Ezt mára megtalálta, a diffrakciós kísérleteket végző kutatók adatfeldolgozó, kísérletkiértékelő arzenáljába került több más hasonló célt szolgáló módszerrel (Empirical Potential Monte Carlo) együtt, így mára e munkák jelentősége csekély.”* Az idézetben szereplő „abban az időben” egy hosszú folyamatot jelentett. Az RMC őscikk 1988-ban jelent meg. 1998-ban még neves újságokban jelentek meg cikkek pl. mindenható új RMC variánsokról, ezek egyikére volt a válaszuk az 1999-es kommentünk [s21]. Ebben a kommentben tételesen soroltuk fel, hogy mit tud az RMC és mit nem. Vagyis az akkori kutatások pont azt a célt szolgálták, hogy a helyére kerüljön az RMC. Ilyen szempontból a régi RMC-s kutatásaink jelentőségét ma sem érzem csekélynek, hiszen az RMC valós értékeinek bemutatásával maradandó hatással töltötték be a szerepüket a cikkeink. A bíráló szerint az RMC felhasználók egy része és az alternatív módszereket fejlesztők „implicit” módon hittek az RMC konfigurációk kanonikus sokaságnak megfelelő voltában. Úgy gondolom, hogy a mi explicit véleményünk segített, hogy ez a bújtatott feltételezés eltűnjön a szakirodalomból. Még a 2000-es évek közepén is kérdés volt, hogy az RMC jellegű megközelítés vagy a potenciálmeghatározás a jövő útja. Baranyai Andrással 2005-ben egyértelműen a potenciálmeghatározás mellett voksoltunk [s32], elméleti és szimulációs eredményekkel alátámasztva. A téma kevés kutatót érintett, de pl. Gregory Rutledge, az MIT professzora emiatt a 2005-s cikk miatt kereste a kapcsolatot velünk.

2) Elnézést, a második esetben elírtam a hidrofóbot és hidrofilt. A mag a hidrofób rész, a lelógó láncok hidrophil jellegűek.

3) Az általunk fejlesztett FSCF-MNDO Monte Carlo módszert 8-300 atomot tartalmazó rendszerekre alkalmaztuk. A kvantumkémiailag direkt számolás következtében nem volt szükség a kor intramolekuláris (kötő) rendszereit elég egyszerűen leíró molekulamechanikai erőterekre. Bízunk abban, hogy képes olyan konfigurációk kezelésére is, amelyek extrémabb helyzeteket tartalmaznak,

mint amelyekre a molekulamechanikai erőtereket illesztették. A középső MNDO alrendszerben lehetséges volt a polarizáció, pontosabban szabadon alakulhatott ki az adott konfigurációnak megfelelő elektronsűrűség. A vizsgált feszült amorf rendszerekben ez fontos volt a pontos leíráshoz, sőt a távlati célként gondolt fehérje aktív centrumok esetében új lehetőség lett volna. A 90-es évek második felében a CPMD, majd a BOMD szimulációknál olyan módszertani fejlesztések történtek, hogy az azokkal vizsgálható rendszerek mérete megközelítette az általunk az egyetemi gépeken elvégezhető FSCF-MNDO Monte Carlo szimulációk rendszerméretét, valamint idővel megjelentek a BOMD QM/MM variánsai.

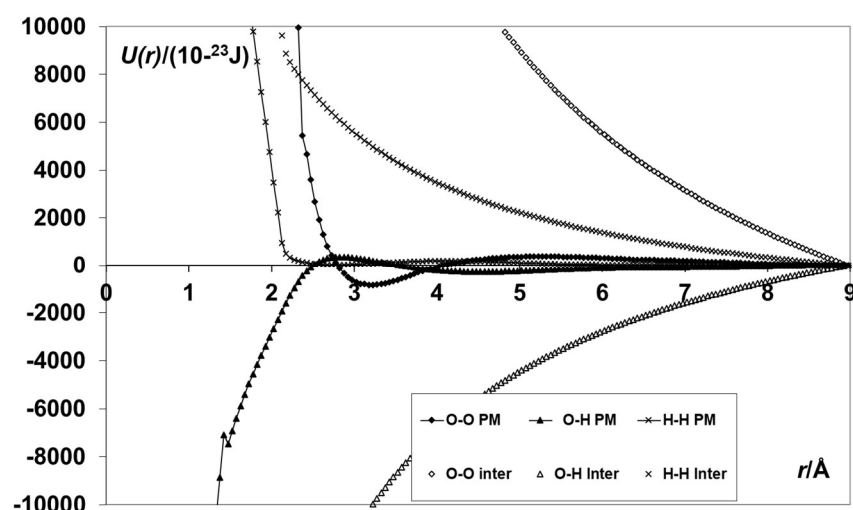
4) Elnézést, elírtam a feliratot. A jobboldali ábrán a legjobb párpotenciált akartam bemutatni, amit a meglehetősen önkényesen kombinált $S(q)$ négyzetes és $g(r)$ negyedik hatványos célfüggvény esetében kaptam. Némi kutakodással találtam egy olyan poszterről származó ábrát, ahol a legjobb RMC-BGY potenciállal kapott párkorrelációs függvény szerepel az eredetivel együtt.



1. ábra Párbólkorrelációs függvények: 1. Monte Carlo szimuláció az eredeti LJ potenciállal 2. MC szimuláció az RMC konfigurációkra történt BGY módszerrel kapott legjobb tabulált potenciállal.

5-6) A BJH vízmodellre való alkalmazáskor több kihívást egyszerre kellett megoldania a PM módszernek. Ezek egyike volt a parciális függvények szeparálásának kérdése. A cikkben nem szerepelt, de voltak olyan számolások, ahol láttuk, hogy a kétkomponensű Lennard-Jones rendszerre jól működik a módszer. A cikkben már csak a kétkomponensű rendszer egy komponensűre való redukciójának a kérdéseivel foglalkoztunk. A másik nagy kihívás az volt, hogy a BJH vízmodell esetében egy nem csak párbólcsönhatásokkal leírt rendszerről volt szó. Az intramolekuláris rész energiájának a számolása az OH távolságok és HH szög egyensúlyi értékeitől való eltérését mutató három változó függvényében felírt hiányos 4-ed fokú polinom formájában történt. (A dolgozatban tévesen harmadfokút írtam.) Ez azt jelenti, hogy a BJH vízmodell párbólcsönhatásra bontható intermolekuláris részét keverjük egy párbólcsönhatásra nem bontható

intramolekuláris résszel, mindemellett három parciálisra is bontanunk kell, sőt ezt még össze is hasonlíthatjuk az eredeti kölcsönhatások diszperziós és Coulomb részeivel. dr. Jedlovsky Pál állításával ellentétben úgy gondolom, hogy a PM módszer megoldotta ezt a feladatot olyan értelemben, hogy létrehozott három olyan parciális párpotenciált, amely új modellel az eredetivel kielégítően egyező párkorrelációs függvényeket adott (4.15. ábra). A parciális párpotenciálokból kettő az intramolekuláris részen is rendelkezett minimummal Ugyanakkor a kapott parciális párpotenciálok intermolekuláris része és az eredeti diszperziós és Coulomb tagot tartalmazó párpotenciálok mégse voltak kapcsolatba hozhatóak. A bíráló kérésére elkészítettem a 4.16. ábrának azt a változatát, ahol az eredeti BJH intermolekuláris járulékok egyesítve vannak, de ahogy az eredeti 4.16. ábrán is látszik, a két járulék nagyságrendje eltérő. Úgy gondolom, hogy a hatalmas parciális Coulomb járulékok valahogy kioltják egymást a szintén nagyenergiájú intramolekuláris kötöttség miatt. A PM módszer nem képes a járulékok felbontására, mivel vezérlő elve egy legkisebb négyzetes eltérés minimalizálása és nem fizikai alapok felismerése. Ebben az esetben 200 molekulára átlagolt távolsághisztogramokon számoltam. A PM módszer nem számol a különböző molekulák egyedi hisztogramjával és az ott megjelenő korrelációkkal, amelyek az intra- és intermolekuláris részeket is csatolják. Mindemellett az intramolekuláris rész többrészecske potenciáljának a tökéletlen projekciója is valamilyen módon belép az intermolekuláris részre, amit talán a folyadékok integrálméletének klasztersorfejtésével lehetne szemléltetni. Sőt, a PM módszer diszkrétizált megoldása miatt a felosztásokon belüli elhelyezkedések korrelációja eleve hiányzik, ami nagyságrendileg eltérő potenciálok között már problémát okozhat. Összegezve: a csatolt két- és többrészecske potenciálokkal leírt rendszer esetében a kapott PM potenciál jól visszaadja a szerkezetet, de az eredeti hozzájárulások nem szeparálhatóak. Az alkáli-halogenid olvadékokra a PM használata annyiban különbözne, hogy ott nincs többrészecske potenciálból párkölcsönhatásra vonatkozó projekció. Ugyanakkor, a felosztásokon belüli korreláció várhatóan jelentősebb, mint a Lennard-Jones esetben. Szóval jó eredményekre számíthatunk, de csak akkor, ha kis delta értékek lennének a felosztásnál. Az eredeti cikkben valamennyire részletezem ezt a kérdést, ott megemlítem azt is, hogy a szeparált kölcsönhatásokra külön-külön PM módszert alkalmazva elég jól visszakaphatóak voltak a szeparált energiajárulékok. Kihasznlom az alkalmat egy általános megjegyzéshez: Oktatáskor is ki szoktam emelni, hogy a klasszikus képben a Coulomb és diszperziós felbontás önkényes, teljesen eltérő felosztásokkal is közel ugyanazt az eredményt lehet elérni (vö. vízmodellek eltérő parciális töltése). Ezért elvileg hibás megközelítésnek tekintem, amikor az eredeti modell önkényes felbontása alapján pl. biológiai rendszerek modellezésekor elektrosztatikus és van der Waals kölcsönhatásokra klasszifikálják a kialakuló molekuláris kölcsönhatásokat.



2. ábra. A PM módszerrel levezetett parciális párpotenciálok és a BJH vízmodell intermolekuláris párpotenciáljai.

7) Elnézést, elírtam. Az 5.1 egyenlet a korai munkákban használt lokális távolság definíciója: eukleidészi távolság és az adott esetben két indexű. Az 5.2 és 5.3 egyenletek a később bevezetett lokális hasonlóság számolását definiálják, ahol az 5.2 egyenletben egy skálázott távolság szerepel, három indexű, ami a hasonlóság számolásakor használt köztes mennyiség.

8) A Neumann-féle trend teszt kritikus értékeit normál eloszlású adatok esetére szokás meghatározni. A tört értéke nem korreláló adatokra 2. Az irodalomban táblázatos adatokat adnak meg, mert bonyolult a pontos érték számolása amiatt, hogy a számláló és a nevező ugyanabból a mintából van számolva. A szakirodalomban két közelítő formula is szerepel (Sachs, Angewandte Statistik, p. 481, 7. kiadás, 1991, Springer, Berlin). Mindkettő valamilyen módon standard normáeloszlásra konvertálja az értéket a centrális határeloszlás tételét figyelembevéve. A táblázatos értékkel összevetve pontosabb közelítő formula:

$$d_{Ncrit} = 2 - 2z \sqrt{\frac{n-2}{(n-1)(n+1)}} \quad (1)$$

n a mintaszám, z a standard normál eloszlásra számolható érték, pl. 5%-os egyoldalú esetre 1,645.

1. táblázat Neumann-féle trendteszt kritikus értékei alsó egyoldalú 0,05 szignifikanciára

n	közelítő egyenlet	Sachs könyv táblázata
4	0,7987	0,7805
10	1,0648	1,0623
20	1,3012	1,2996
30	1,4194	1,4183
50	1,5440	1,5437

Még egyszer köszönöm, hogy dr. Jedlovsky Pál vállalta a feladatot és alaposan átolvasta a dolgozatot. Köszönöm a számos észrevételt és javítást. Sejtettem, hogy az általam választott szószedetes megoldás nehezíti a dolgozat megértését és értékelését, különösen a bírálóktól távoli területeknél. Elfogadom, dr. Jedlovsky Pál ezzel kapcsolatos véleményét, bár makacs emberként megreszkíroznám, hogy ugyanebben a formában írnám meg legközelebb is.

Budapest, 2026. február 23.



/Tóth Gergely/