

Bírálat Dr. Tóth Gergely MTA Doktori értekezéséről

A bíráló unortodox dolgot tart a kezében. Ennek az az oka, hogy kis túlzással minden egyes cikkhez önálló irodalmi összefoglaló és módszerleírás kellene. Ennek eredményeképpen egy olyan dolgozat született, amelyben a szerző mintegy elemzi a saját munkáját egyszerre objektív módon, irodalmi háttérbe ágyazva, és egyszerre szubjektív megjegyzésekkel gazdagon megspékelve. Ez utóbbi jelentősen segít az olvasásban, de a módszertanok részletes leírásának bevallott és kényszerű elhagyása miatt a bírálónak hamar le kellett mondania a dolgozatban bemutatott tudományos eredmények alapos megértéséről. Pontosabban voltak olyan fejezetek, amik közelebb álltak hozzám és nem voltam teljesen elveszve (az első két témakör) és volt egy olyan, ahol teljes vakrepülést végeztem (a kemometria). Az egyetemen egyetlen matematika tárgyból voltam kettes, és az a Numerikus analízis volt, máshogy van tehát összerakva az agyam, mint a jelölté.

A következőkben igyekszem elvégezni a dolgom és tesztek néhány bíráló illetve dicsérő megjegyzést a dolgozatról magáról, de előrebocsátom, hogy a dolgozat fő céljának azt tekintem, hogy a szerző bemutassa az életművét (legalábbis azt a részét, ami a dolgozat címéhez kapcsolódik), perspektívába helyezze azt, ismertesse a véleményét még akkor is, ha az a cikkek megírása óta változott (erre több példa is található a dolgozatban), illetve hogy bemutassa, hogy intelligens, összegző, az évtizedek tapasztalatát érett és tömör diszkusszióba sűrítő módon tud megnyilvánulni saját munkásságáról és a tudományos kutatásról általában.

Mert hogy kaptunk a dolgozatban megjegyzéseket ez utóbbira rendesen, amikért különösen hálás voltam. Pont ezek a megjegyzések mutatják a szerző kritikai gondolkodásra való képességét illetve az alázatos hozzáállásra való hajlamát egyaránt.

A dolgozat tehát alapvetően három részre tagolódik.

Az első részben főként a fordított Monte Carlo szimulációt, mint fluidumok diffrakciós méréseiből nyert adatokból információt kinyerő módszert használja alapként statisztikus mechanikai megközelítéssel olyan kérdéseket feszegetve, mint a kapott eredmények (konfigurációk) egyértelműsége, a valós viszonyok reprezentálásának mértéke illetve a hagyományos statisztikus mechanikai sokaságokhoz való viszonya. Az itt bemutatott eredményét, miszerint a párkorrelációs függvény meghatározza a saját fluktuációját, a szerző a legjelentősebbek között tartja számon.

A második rész a statisztikus mechanika inverz problémájáról szól, azaz arról hogy milyen módszerekkel lehet kölcsönhatási potenciálokat fejleszteni a makroszkopikus (termodinamikai, szerkezeti) jellemzők ismeretében. Ehhez kvantummechanikai számításokat éppúgy felhasznált a szerző, mint szemiempírikus módszereket, a fordított Monte Carlo-t, illetve mesterséges ideghálókat. Ez utóbbinál is kitűnik, hogy sok esetben a jelölt nagy mértékben megelőzte a korát. Ennek a kutatási iránynak egy központi eleme a multiskálás megközelítés illetve a coarse graining (örömmel láttam azon hazai workshopok hangsúlyozását, amelyek egyikén ezt a témát is átbeszéltük). Saját módszerfejlesztéseit ezen a területen külön kiemelte a szerző, mint büszkeségre okot adó eredményeket.

A harmadik részben a Szepesváry Pál hatására a kemometria területére tett kirándulásáról ad számot a szerző. Itt részben arról van szó, hogy miként lehet az adatmátrixokat úgy átrendezni, hogy azután

akár táblázatban, akár vizuálisan ábrázolva korábban rejtett trendeket, hasonlóságokat, klasztereket lehessen azonosítani. Ez az eljárás szeriálás néven ismeretes. Ezt rendkívül érdekesnek találtam, mivel mátrixokkal én is foglalkozom, de nem szoktam turkálni bennük és vizualizálni őket. Meghökkenő, hogy ez az egyszerű „trükk” nem volt benne a köztudatban. Az adatbázisok értelmezésére felállított modellek külső és belső validációjára vonatkozó kutatásaira is nagyon büszke a szerző, és a dolgozatból is az szűrődött le, hogy mintha ezeket nagyobb kedvvel elemezte volna. Ehhez talán az is hozzájárul, hogy időben ezek állnak legközelebb a jelenhez.

Ezeknek a témaköröknek a közös nevezője a dolgozat címében összegződik: „Adatok értelmezése szimulációkkal és a többváltozós statisztika eszközeivel a kémiában”. A szerzőnek számos publikációja van ezen a halmazon kívül is, a dolgozat azonban csak azokból a publikációkból készült, amelyek ebbe a logikába beleillettek.

A dolgozat stílusa élvezetes, jól egyensúlyozza a száraz diszkussziót és a személyes jellegű megjegyzéseket, sztorizásokat. Elütések, nyelvtani hibák előfordulnak, de ezzel inkább nem foglalkoznék. Van néhány szemet szűrő szerkesztési hiba, mint például, hogy a cím a 24. oldal aljára került. Nagyon jó, hogy a végére bekerültek a függelékek, amik megkönnyítik az olvasást, de nem helyettesítik a hiányzó módszertani leírásokat. Persze ha ezek a leírások benne lennének a dolgozatban, kétszer ilyen hosszú lenne, és akkor a bíráló amiatt panaszkodna. Nagyon kényes egyensúlyt kellett itt megtalálni, a szerző által választott függelékes módszer egy jó kompromisszum.

Az egyenletek számozása fura, szebb lett volna jobbra kihúzva, de ezek szerint a szerzőnek más az ízlése. Ahol kevésbé lehet ízlésről vitatkozni, az az ábrák minősége. Míg az újabb keletkezésű kemometria fejezeteknél színes és látványos ábrák voltak, a régebbi fordított Monte Carlo (3.) fejezetben csupa fekete-fehér, feltételezésem szerint cikkekben kimásolt ábrával találkoztam, ahol sokszor problémát okozott a különböző vonaltípusok kisilabizálása. Csak hogy legyen valami irgum-burgum jellegű megjegyzésem is: itt nem ártott volna valami pluszmunka.

Nagyon rokonszenves volt, hogy a szerző a dolgozatban lépten-nyomon utal az oktatásra, a hallgatókhoz való viszonyra. Az Összefoglalásban külön kiemeli, hogy mely eredményeit tekinti „játékosnak”, és emiatt az oktatásban különösen használhatónak: ezek a karbamid-növekedés és a szeriálás.

Míg a dolgozatban megjelenő témákat a közös eszköztár fogja össze, maguk a témák rendkívül vegyesek. Ebből egy sokoldalú kutató képe bontakozik ki, aki szinte játszi könnyedséggel kezd új kutatási témába, ha éppen az érdekli vagy ha éppen egy szobába kerül egy Szepesváry Pállal. A rengeteg mélyfúró mellé több ilyen emberre lenne szükségünk. Megjegyzem, hogy rendkívül káros gyakorlatnak tartom, hogy a pályázati rendszerek ezt a hozzáállást nem preferálják.

A sokoldalúság eredménye az, hogy a szerző 20 tézispontot alkotott. Kijelentem, hogy minden a 20 tézist új tudományos eredménynek fogadom el.

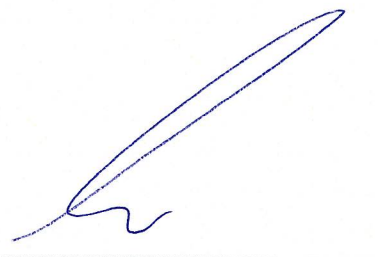
Habár a feladatom a dolgozat bírálata volt, engedtessek meg néhány szubjektív megjegyzés magáról a jelöltről. Abban a szerencsés helyzetben vagyok, hogy része lehetek annak a hazai tudományos közösségnek, ami a számítógépes fizikai kémia területén szorgoskodik évtizedek óta. Ez egy

nemzetközileg jegyzett jó hangulatú közösség, ahol az emberek jó szakmai és személyes viszonyban vannak egymással, számíthatunk egymásra, rendszeresen találkozunk konferenciákon, különböző védéseken, illetve a jelölt által jogosan méltatott workshopokon. Ebben a társaságban Tóth Gergelynek jelentős tekintélye van. Amit mond, arra oda kell figyelni. A tudományos kutatáshoz való hozzáállása véleményem szerint példaértékű, emiatt a fiatalabb nemzedékek számára is egy követendő példát állít.

Összefoglalva, az értekezés mind tartalmi, mind pedig formai szempontból messzemenően eleget tesz az MTA doktora fokozat megszerzésével szemben támasztott követelményeknek. Javaslom az értekezés nyilvános vitára bocsátását, és sikeres védelem esetén az MTA Doktora fokozat odaítélését.

Kérdéseim nincsenek.

Veszprém, 2026.02.11



Dr. Boda Dezső
egyetemi tanár