

ÖNÁLLÓ PROJEKT

Matematikus és Alkalmazott matematikus MSc szak

Az alábbi, Tichler Krisztiánnal együtt kiírt témakörök lehetőséget adnak az érdeklődő hallgatóknak egyéni tanulásra, kutatásra, fejlesztésre a matematika és informatika egy-egy közös területén.

A kitűzött feladatokat a jelentkező hallgatókkal – konzultáció útján – egyénileg célszerű kialakítani. A témakörök egyaránt lehetőséget adnak az elméleti vizsgálatok, a programfejlesztés és a szimulációs kísérletek irányára, illetve ezek együttes alkalmazására.

Megjegyezzük, hogy a *közelítő és véletlenített algoritmusok* témaköréből választott további feladatok is szóba jöhetnek.

1. Molekulagráfok fingerprintjeinek vizsgálata

A jelentkező hallgatók egy jelenleg is folyó kutatásba kapcsolódnának be. Az együttműködő kollégák (Fekete I., Tichler K., Kovács Péter (ChemAxon) és Tamaga I.) a molekulagráfok kódolt formájának, a fingerprinteknek a tulajdonságait vizsgálják. A feladat szerencsére hamar matematikai-informatikai természetűvé válik.

A megfelelően generált fingerprint (FP) olyan (hosszabb) 0-1 sorozat, amely megőrzi a kémiai tulajdonságokat, illetve a címkézett csúcsokkal és élekkel rendelkező gráfok strukturális tulajdonságait. Ez azt jelenti, hogy hasonló molekulák FP-jei (és csak az ilyenek) között kicsi a (pl. Hamming) távolság.

A jelenleg vizsgált témakör: a k legközelebbi szomszéd (k -NN) probléma hatékony megoldása a helyzetérzékeny hasítás (locality sensitive hashing, LSH) módszerével. Az LSH olyan véletlent használó közelítő eljárás, amely – megfelelő hasítás után – az összes FP terének csak a töredékében hajt végre keresést és jó hangolt esetben elfogadható eredményt ad: ritkán és keveset hibázik. Ennek elérése számos érdekes vizsgálati kérdést vet fel. Az elméleti megfontolások mellett a jól működő „k-nn” programunk továbbfejlesztése és a célirányos kísérletezés is része a megközelítésnek.

A témakör tanulmányozása elvezetett egy olyan elméleti problémához, amely a „stringek és fák algoritmusai”, illetve az „analitikus kombinatorika” ismert területein helyezhetők el.

2. Logikai problémamegoldó módszerek

Számos olyan feladat ismeretes, amelyeket kézenfekvő állapotterén reprezentálni. A problémateret az állapotok gráfja jeleníti meg. Az ilyen feladatokat jobbra a mesterséges intelligencia ismerteti és megoldási módszerként általában a visszalépéses keresést vagy az A^* algoritmust alkalmazzák.

Érdekes lenne megvizsgálni azt, hogy ennek a feladattípusnak a megoldására hogyan alkalmazható a matematikai logika következtető mechanizmusa, tételbizonyító rendszere. Alapvető jellemzője a logikai alapú megoldásnak, hogy keretében minden olyan ismeretet le kell írni, amely természetes háttérismeret képez számunkra (pl. az alsó kocka az asztalon van). Ugyanakkor a logika szimbolikus következtetésre képes (szemben a hagyományos módszerekkel, amelyek tételbizonyítás esetén generálják a lehetséges állapotokat és ellenőrzik a célállítást teljesülését).

Vizsgálatra kitűzött kérdések lehetnek: nagyobb lépésekben haladó következtető eljárásnak (mint amilyen az elemi rezolúció), a következtetés vezérlésének, vegyes logikai és hagyományos probléma-megoldási módszereknek a kidolgozása.

Hasonló vizsgálati cél tűzhető ki a funkcionális programozás eredeti eszköztára. Ebben, amennyire csak lehet, a rekurzív függvényekben rejlő megoldó erővel kell élni ciklusok alkalmazásával szemben, amelyet a procedurális nyelvek „kerülő úton” valósítanak meg.

A lehetséges feladatok köréből kiemelünk egyet. Az asztalra lehelyezett megadott számú, és egyedi nevekkal ellátott egybevágó kockákból kialakítható konfigurációk generálásával, a kockák pakolásával és a konfigurációkra kimondott állítások bizonyításával kapcsolatos feladatokat megoldása az egyes megközelítésekben.

Az automatikus tételbizonyítás áttekintése, a Prolog nyelven történő probléma-megoldás, illetve a logika bármely alkalmazása szóba jöhet a témaválasztás során.

Források, irodalom

Az ajánlott témakörökhöz rendelkezésre áll a kiinduló irodalom (digitális formában is), de a további irodalomkutatás hasznos lehet.