

Stanisław Krukowski
Instytut Wysokich Ciśnień PAN
01-142 Warszawa
ul Sokołowska 29/37

Wpłynęło dnia 2022-05-27. *AP*

Rada Naukowa
Dyscypliny Nauki Fizyczne
Uniwersytet Warszawski
w Warszawie

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Macieja Marchwianego
pt Opis własności nanostruktur niskowymiarowych za pomocą algorytmów uczenia
maszynowego**

Rozprawa doktorska mgr Macieja Marchwianego pt. „*Opis własności nanostruktur niskowymiarowych za pomocą algorytmów uczenia maszynowego*” jest poświęcona rozwojowi i zastosowaniu metod obliczeniowych opartej na sztucznej inteligencji i uczenia maszynowego do obliczeń ab initio za pomocą metody funkcjonalu gęstości (density functional theory - DFT) do układów nanowymiarowych, takich jak nanorurki borowe, nanorurki BN, struktury MXenes,

Praca doktorska mgr Marchwianego składa się z siedmiu podstawowych rozdziałów: wstępu, podstaw pojęcia uczenia maszynowego, technik obliczeniowych stosowanych w fizyce materii skondensowanej, wyników obliczeń dotyczących własności modelowanych nanomateriałów, rozdziału technicznego zawierającego opis bibliotek i programów napisanych do wykonania obliczeń oraz podsumowania.. Ponadto praca zawiera bibliografię oraz 7 dodatków, poświęconych opisowi złożonych zagadnień technik numerycznych oraz pewnych wyników. . Oznacza to że praca ma charakter metodologiczny, poświęcona jest zagadnieniom rozwoju nowych metod badawczych.

Praca zawiera bogatą bibliografię w której znajduje się 225 pozycji. Dziwne jest że nie udało się utrzymać jednego standardu zapisywania referencji, np. Ref. 101 i 102. Nawet z niejasnych powodów ref 91-96 do stron internetowych są zapisane kursywą, a Ref. 215-220 już nie. Praca nie zawiera spisu publikacji autora. W spisie referencji znalazłem pozycję 12 której pierwszym autorem jest autor rozprawy, i to wszystko. Nie ma innych informacji, w tym o pracy dydaktycznej autora. Oczywiście na Wydziale Fizyki należy zajmować się pracą dydaktyczną i autor na pewno to ma, ale jakoś nie zechciał wpisać.

Pierwszy rozdział, wstęp zawiera krótką charakterystykę rozprawy i lakoniczne omówienie kolejnych rozdziałów rozprawy. Omawia zalety metod i wskazuje na duży potencjał stosowanych metod obliczeniowych.

Drugi rozdział jest zawiera skrótowe omówienie metod obliczeniowych teorii funkcjonalu gęstości. Wprowadza podstawy metody opartej na twierdzeniach Hohenberga - Kohna oraz Kohna-Shama, czyli redukcji problemu wieloelektronowego do nieliniowego równania na funkcje jednoelektronowe. Wprowadza przybliżone wzory na funkcjonały energii korelacji i wymiany. Wspomina o metodach pseudopotencjału jako efektywnej metody do znajdowania własności układów o zwiększonej liczbie atomów. Ten rozdział jest bardzo krótki i nie zawiera nawet uproszczonego opisu metody. Jednak autor stwierdza że istnieje ogromna liczba podręczników oraz rozpraw doktorskich i habilitacyjnych zawierających opisy metod DFT więc nie ma potrzeby tego powtarzać. Zgadzam się w zupełności ze stanowiskiem autora rozprawy i nie widzę potrzeby opisywania tego samego materiału.

Kolejny rozdział zawiera części bardziej nowatorskie, mianowicie wprowadza metod uczenia maszynowego. Autor stwierdza zgodnie z istniejącym obecnie stanem rzeczy że te

metody oznaczają zastosowanie metod analizy statystycznej do budowy algorytmów znajdowania zależności w ogromnych zbiorach danych nie poddających się standardowej analizie wykonywanej przez badaczy. Różnica polega na zastosowaniu automatyzacji tego procesu. Autor omawia szereg metod analizy statystycznej i wyjaśnia w jaki sposób zautomatyzować odnajdowanie zależności, klasyfikacje, i wartościowanie algorytmów. W wyniku tego powstaje szereg algorytmów w sposób bardzo efektywny odnajdujący zależności w pozornie słabo skorelowanych zbiorach danych.

Kolejny rozdział jest zastosowaniem powyżej wymienionych metod do badań materii skondensowanej, a w szczególności do obliczeń DFT. Autor dzieli cały zakres zmiennych na 3 kategorie: eksperymentalne, obliczeniowe oraz położeniowe. Zmienne eksperymentalne służą do weryfikacji obliczeń i optymalizacji wyboru modelu. Dobrym przykładem są tu stałe sieciowe lub energie kohezji, które służą do weryfikacji parametryzacji modeli obliczeniowych stosowanych w programach DFT. To jest standardowa procedura. Zmienne obliczeniowe powstają na skutek wykonywania obliczeń. Przykładem są dane dotyczące gęstości elektronowej. Ostatnią kategorią są zmienne położeniowe. Wbrew swej nazwie nie chodzi tu o położenia atomów, a o własności układów zależne od tych położen, np. macierze kulombowskie, macierz Ewalda, itp. te dane są poddane procesowi obróbki w procedurach, tzn. w zasadzie procedurze obróbki za pomocą metod statystycznych. Istotną nowością jest różny typ danych które podlegają procedurom.

Rozdział piąty poświęcony jest zastosowaniu tych procedur do obliczeń własności wybranych układów fizycznych. Pierwszym z nich jest model nanorurek borowych. W wyniku obliczeń otrzymano energie nanorurki z dokładnością 0.95 dla energii całkowitej oraz 0.0 dla energii kohezji. Wynik otrzymano dla ogromnej liczby realizacji, rzędu 3000. Otrzymane wyniki są słabo analizowane. Np. rys 5.2 autor pokazuje 3 wykresy w których są znacząco różne zachowania. Nie zauważyłem żadnego racjonalnego wytłumaczenia tego co otrzymano. Kolejnym przykładem są nanorurki z BN. W tym przypadku już podobnych wykresów jak dla poprzedniego przypadku nie ma. Nie wiadomo dlaczego tak jest, możliwe że zabrakło dostępu do mocy obliczeniowej. Kolejnym istotnym przykładem są układy MXenes. Jest to rodzina układów dwuwymiarowych, opisywanych ogólnym wzorem $M_{n+1}X_nT_z$, gdzie M jest metalem przejściowym, X jest to atom węgla lub azotu, natomiast T_z to są grupy funkcyjne przyłączone do powierzchni, np. grupa hydroksylowa OH, itp. Geometrycznie n oznacza liczbę warstw atomów metalu położonych w płaszczyźnie, warstwy atomów C lub N są umieszczone pomiędzy atomami metalu, stąd ich liczba jest o 1 mniejsza, a grupy funkcyjne jak sama nazwa wskazuje funkcjonalizują powierzchnie zewnętrzne, tzn. drastycznie zmieniają ich własności chemiczne. Autor nie podaje energii kohezji układów MXenes, ze względu na dużą rozbieżność wyników w zbiorze treningowym. Ponadto autor zajmuje się cytotoksycznością tych układów w sposób bardzo dokładny, wykonując szereg analiz dla obecności różnych grup na powierzchni. Analiza jest wykonana bardzo szczegółowo. Należy te część ocenić bardzo wysoko także ze względu na potencjalne znaczenie tych wyników. W sumie ta część jest bardzo wartościowa choć brak energii kohezji układów MXenes zmniejsza jej znaczenie. W Dodatku są wykresy dla energii, ale zadowalającej zbieżności nie otrzymano.

Kolejny rozdział, objętościowo niewielki poświęcony jest opisowi technicznych aspektów zastosowań metod uczenia naukowego. Autor omawia biblioteki stosowane w algorytmach uczenia maszynowego. Ponadto autor omawia stworzone kody, które są umieszczone w Dodatku G. W innych dodatkach autor przytacza część wyników numerycznych. W zasadzie tak może być, ale nie wiem co to zmienia. Natomiast popieram umieszczenie kodów w tej części, to jest zrozumiałe.

W podsumowaniu autor podsumowuje wyniki otrzymane w rozprawie, podkreślając znaczenie rozwoju nowej metodologii. Jest to jasne podsumowanie znaczenia rozprawy, z

którym należy się zgodzić. Omawia również znaczenie wyników otrzymanych dla układów analizowanych w rozprawie.

Praca jest napisana dobrze, i nie zawiera dużej liczby błędów. Jednak autor wykazuje pewną denerwującą dezynwolturę jeżeli chodzi o stosowanie terminologii analiz statystycznych, co wynika z prostego faktu że autor tłumaczy pojęcia z literatury w języku angielskim i nie zawsze robi to szczęśliwie. Jest to dziwne gdyż praca powstała na Wydziale Fizyki, na którym została napisana znakomita monografia prof. Romana Nowaka, zawierająca kompletny opis metod statystycznych w ujęciu historycznym, z dodatkowym zbiorem zadań. Na przyszłość zalecam skrócić w kierunku biblioteki na Wydziale, na pewno ta pozycja tam jest. Innym problemem jest brak definicji pewnych pojęć i modeli, np. metody wektorów nośnych. Autor omawia co ten algorytm pozwala wykonać, ale nie wyjaśnia samego algorytmu. Oceniam że są te drobne usterki nie wpływające zasadniczo na wartość całej pracy. Główną wartością pracy jest implementacja nowatorskich metod uczenia maszynowego do układów fizycznych, a więc główne znaczenie tej pracy polega na zastosowaniu i rozwoju nowej metodologii. Jest to podejście dopiero rozwijane więc z tego względu należy wysoko ocenić fakt powstania tej rozprawy.

Inna rzeczą jest sama ocena rozwoju nauki w tym kierunku. Nauka to rozwój w dwu formach: zwiększenie wiedzy i zwiększenie zrozumienia. Na pewno uczenie maszynowe zwiększy to pierwsze, ale przyniesie niewiele w tym drugim aspekcie. Ale ogromnie modne to jest na całym świecie, będzie się doskonale publikowało, więc władze instytucji naukowych w Polsce, i nie tylko w Polsce będą to popierały bez wyjątku. Dlatego rozwój tym w kierunku jest zalecany młodym zdolnym i ambitnym naukowcom w celu szybkiego rozwoju karier naukowych. Nie przyniesie to rozwoju zrozumienia naukowego, ale to przecież w zasadzie nie szkodzi. Nie jest to jednak problem samego doktoranta, ale taka ogólna uwaga dotycząca nauki.

Podsumowując ocenę rozprawy doktorskiej mgr Macieja Marchwianego stwierdzam, że rozprawa spełnia wymogi Art. 187 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* (tekst jednolity: Dz.U. 2020 poz. 85 ze zm.) związane z uzyskaniem stopnia doktora. W związku z tym zgodnie z Art. 186 Ustawy wnioskuje do Rady Naukowej Dyscypliny Nauki Fizyczne na Uniwersytecie Warszawskim o dopuszczenie mgr Macieja Marchwianego do dalszych etapów procedury doktorskiej w celu uzyskania stopnia doktora nauk fizycznych. Ze względu na wkład metodologiczny dla rozwoju nowatorskich metod naukowych wnioskuje o nadanie wyróżnienia dla mgr Macieja Marchwianego za rozprawę doktorską.

St. Krukowski

Prof. dr hab. Stanisław Krukowski

Warszawa 23.05.2022 r.