

Prof. dr hab. Adam Kiejna
Wydział Fizyki i Astronomii
Uniwersytetu Wrocławskiego

Wrocław, 15 czerwca 2022 r.

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

Praca została wykonana na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego pod kierunkiem prof. dr. hab. Jacka A. Majewskiego i promotora pomocniczego dr Magdaleny Popielskiej (Birowskiej). Rozprawa liczy 107 stron i jest podzielona na siedem rozdziałów. Zawiera 32. ilustracje i wykresy, 27 tablic, obszerny spis literatury liczący 225 pozycji oraz siedem dodatków podających szczegóły obliczeń. Uzupełniają ją streszczenia w języku polskim i angielskim oraz spisy rysunków, tablic i stosowanych oznaczeń.

Metody uczenia maszynowego zdobyły już wyróżniającą się pozycję w badaniach materiałów, szczególnie w kontekście przewidywania i modelowania właściwości materiałów w skali atomowej. W uczeniu maszynowym wyniki uzyskane z obliczeń teoretycznych i danych doświadczalnych są wykorzystywane do konstruowania modeli zastępczych, które pozwalają przewidywać te same własności dla nowych struktur i do bardziej skomplikowanych problemów w większej skali, z podobną dokładnością, ale szybciej i znacznie mniejszym kosztem. Pomimo osiągniętego wzrostu zrozumienia, jak metody uczenia maszynowego powinny być adaptowane do specyficznych wymagań tej dziedziny badań, nie wypracowano jeszcze standardowych procedur ich stosowania. Celem badań przedstawionych w rozprawie było zbadanie możliwości wykorzystania narzędzi opartych na algorytmach uczenia maszynowego do przewidywania własności trzech rodzajów nanomateriałów: jednowymiarowych nanorurek boru i azotku boru oraz dwuwymiarowych węglików tytanu – materiałów z rodziny MXenes. Badania dotyczyły przewidywania energii całkowitej i energii kohezji tych układów oraz cytotoksyczności w przypadku związków MXenes. Przedstawione wyniki bazują na danych pochodzących ze wszystkich obecnie dostępnych źródeł: prac doświadczalnych, wyników symulacji komputerowych z zewnętrznych baz danych i symulacji numerycznych w ramach teorii funkcjonału gęstości (ang. DFT) przeprowadzonych przez kandydata dla celów tej pracy.

Nanorurki borowe są atrakcyjnymi materiałami do wykorzystania w licznych zastosowaniach. Spośród wielu możliwych geometrii nanorurek borowych najczęściej badana jest zwinięta struktura, analogicznego do grafenu, dwuwymiarowego boru – borofenu. Inne możliwe geometrie nie są przebadane z powodu dużych wymagań czasu obliczeniowego. Procedura wytwarzania nanorurek boru poprzez zwijanie borofenu umożliwia uproszczenie zadania do określenia dwóch parametrów nanorurki ale jednocześnie ogranicza przestrzeń możliwych geometrii. Pełne określenie optymalnej geometrii wymagałoby wykonania

optymalizacji dla wielu różnych i niezależnych początkowych geometrii przy użyciu teorii funkcjonału gęstości co jest trudne do zrealizowania ze względu na wymagania obliczeniowe.

Nanorurki z azotku boru cechują się nietoksycznością i wysoką biokompatybilnością co umożliwia ich potencjalne wykorzystanie w biomedycynie i diagnostyce medycznej. Geometria nanorurek azotku boru jest bardzo podobna do nanorurek węglowych i opiera się na zwiniętej monowarstwie o geometrii sieci hexagonalnej lub kilku takich warstw dla nanorurek wielowarstwowych. Stabilność innych geometrii ułożenia atomów w nanorurce do tej pory nie została dokładnie zbadana. Dlatego, otwartym pozostaje pytanie, jaka jest ich optymalna geometria. Określenie geometrii komplikuje się znacząco w porównaniu do czystych nanorurek borowych, ze względu na konieczność uwzględnienia składu procentowego obydwu pierwiastków oraz ich konfiguracji w nanorurce.

Struktury warstwowe z rodziny MXenes są opisywane ogólnym wzorem $M_{n+1}X_nT_z$, gdzie M oznacza metal przejściowy, X oznacza węgiel lub azot, $n = 1, 2, 3, \dots$, a T_z oznacza grupy funkcyjne na powierzchni. Od momentu zsyntetyzowania ich pierwszego przedstawiciela, $Ti_3C_2T_z$, badania nad tymi materiałami przeżywają szybki rozwój. Szczególnie obiecujące są zastosowania w medycynie ze względu na przewidywane właściwości przeciwbakteryjne. Dotychczasowe badania pokazały, że właściwości toksykologiczne zależą od różnic w stechiometrii wielowarstwowego $Ti_3C_2T_z$ i Ti_3CT_z . Na ich cytotoksyczność oraz stabilność wpływają także parametry makroskopowe takie jak grubość płatków MXenes. Wyzwaniem stojącym przed badaczami jest szybkie i wiarygodne wyodrębnienie struktur o najwyższym potencjale zastosowania w medycynie i najniższym zagrożeniu cytotoksykologicznym.

We wstępie kandydat nakreślił tematykę oraz cel i zakres rozprawy. Rozdział drugi przedstawia omówienie podstaw teorii funkcjonału gęstości, która jest wdrożona w pakietach programowych Quantum Espresso i VASP, wykorzystywanych przez kandydata, odpowiednio do generowania zbioru danych dla nanorurek oraz wytworzenia danych teoretycznych dotyczących MXenes na podstawie otwartej bazy danych Materials Project. Generalnie, przedstawiony opis jest merytorycznie poprawny i świadczy o dobrej znajomości metod DFT przez kandydata, ale występują w nim pewne nieścisłości, głównie o charakterze redakcyjnym. Tytuł podrozdziału 2.1 nie odpowiada jego zawartości, bowiem nie przedstawiono w nim DFT lecz ogólny hamiltonian dla układu oddziałujących elektronów w polu potencjału zewnętrznego, w przybliżeniu Born-Oppenheimera (co byłoby tu warte przypomnienia). Elementy DFT, takie jak twierdzenie Hohenberga-Kohna, metoda Kohna-Shama wyznaczania energii stanu podstawowego i samouzgodnionego obliczania gęstości elektronowej stanu podstawowego oraz najważniejsze klasy przybliżeń postaci funkcjonału energii wymiany i korelacji są przedstawione w dalszych podrozdziałach. Przy opisie układu równań Kohna-Shama brak jest wyraźnego stwierdzenia, że w jego skład wchodzi także gęstość elektronowa, zdefiniowana wzorem (2.12) jako suma gęstości jednocząstkowych. Przy omawianiu przybliżenia LDA (str. 7) mylnie zmieniono oznaczenie lokalnej gęstości jednorodnego gazu elektronowego z ρ na n . W rozdz. 2.5 kandydat przedstawił metodę

pseudopotencjału. Odnosząc się do przedstawionego opisu należy go nieco skorygować. Na str. 10 kandydat napisał, że największą korzyścią z używania w obliczeniach pseudopotencjałów jest zastąpienie osobliwego potencjału kulombowskiego w obszarze rdzenia przez gładki pseudopotencjał. Otóż pseudopotencjał nie musi być gładki (*vide* potencjał modelowy Ashrofta) lecz powinien być słaby by generować wolnozmienną pseudofunkcję falową, która może być przybliżona tylko niewielką liczbą fal płaskich. Podobnie, korekty wymaga pierwsze zdanie w rozdziale 2.6 (str. 11) opisującym oddziaływanie jąder: „... lub ekranowanych przez elektrony rdzeniowe jąder, czyli dodatnich jonów o liczbach atomowych ...”, które jest mylące i powinno brzmieć: „... lub jąder ekranowanych przez elektrony dodatnich rdzeni jonowych o walencyjności ...”.

Rozdział trzeci przedstawia wprowadzenie do metodyki uczenia maszynowego. Omówiono w nim podobieństwa i różnice pomiędzy metodami statystycznymi i metodami uczenia maszynowego, podział algorytmów uczenia maszynowego, podstawowe pojęcia statystyki i teorii informacji, terminologię i ogólną metodologię uczenia maszynowego. Przedstawiono także klasyfikację i opis podstawowych algorytmów, najważniejsze rodzaje metryk (miar) służących do oceny jakości testowanego algorytmu i wyboru wartości charakterystycznych dla niego hiperparametrów, sposoby wyboru odpowiedniego zbioru i kontrolę jakości (walidacji) modelu, rodzaje zmiennych i metody ich budowania oraz wyboru zmiennych istotnych, techniki wyboru algorytmu. Rozdział jest napisany jasno ale w tekście brakuje odniesień do zamieszczonych w nim rysunków 3.1, 3.2, 3.4 i 3.5. Algorytmy i techniki opisane w tym rozdziale mogą być stosowane do zagadnień dowolnego typu. Dlatego, po korekcie, rozdział ten można polecać jako doskonałe źródło, dla każdego kto chce się zapoznać z metodami uczenia maszynowego.

W rozdziale 4. przedstawiono techniki i algorytmy charakterystyczne dla uczenia maszynowego w fizyce materii skondensowanej. Omówiono stosowane zestawy zmiennych, ich podział na zmienne doświadczalne, zmienne obliczeniowe i zmienne położeńowe. Przedyskutowano własności i cechy jakimi muszą się charakteryzować zmienne niezależne by dobrze reprezentowały układ fizyczny. Kandydat przedstawił najpopularniejsze zmienne położeńowe (takie jak: macierz kulombowska, macierz Ewalda, macierz sinusoid, funkcje symetrii, ważone funkcje symetrii, odcisk atomowy, wielociałowa reprezentacja tensorowa, gładkie nałożenie położeń atomów, momenty rozkładów) i omówił sposoby ich budowy na podstawie położeń atomów w układzie. Omówił także techniki pracy z małolicznymi oraz z niezbalansowanymi zbiorami danych i charakterystyczne algorytmy.

Zasadniczą część rozprawy stanowi rozdział 5. Podzielono go na trzy podrozdziały, w których przedstawiono proces budowania modeli i otrzymane wyniki dla przewidywanych nowych struktur, dla każdego z trzech rodzajów badanych nanomateriałów. Na początku każdego z podrozdziałów zostały przedstawione podstawowe informacje o badanym układzie. Podstawowym zadaniem było określenie stabilności nowych nanostruktur. Jego realizacja polegała na przeszukiwaniu przestrzeni możliwych konformacji i badaniu ich energii

całkowitej oraz energii kohezji w celu znalezienia optymalnej geometrii. W przypadku materiałów MXenes przeprowadzono również badania cytotoksyczności. Dla każdego z nanomateriałów opisano generowanie zbioru treningowego danych. Dla nanorurek borowych i nanorurek azotku boru zbudowano model pozwalający na wygenerowanie losowych geometrii nanorurek, które posłużyły do utworzenia pliku wsadowego do obliczeń DFT energii całkowitej przy pomocy pakietu Quantum Espresso. Przed rozpoczęciem symulacji dokonano doboru parametrów obliczeń na podstawie testów zbieżności, których wyniki przedstawiono w Dodatku A. Wyniki testów pozwalają stwierdzić, że dobór parametrów i obliczenia DFT zostały przeprowadzone starannie i zgodnie z zasadami sztuki. Badania nad opisem energii oraz stabilności nanorurek za pomocą algorytmów uczenia maszynowego wykonano na danych pochodzących z 4000 symulacji numerycznych, dla każdego z dwóch rodzajów nanorurek. Baza danych zawierała geometrię układów oraz ich energię całkowitą i energię kohezji. W celu zbudowania najlepszego modelu pozwalającego na przewidywanie stabilności nanorurek, w funkcji położenia atomów w układzie, przetestowano 13 algorytmów uczenia maszynowego, dla różnych zestawów zmiennych położeniowych. Do walidacji jakości modelu użyto dwóch metryk: współczynnika determinacji (R^2) oraz średniego błędu kwadratowego (MES). Dla nanorurek borowych i nanorurek azotku boru, najlepsze ze stworzonych modeli energii całkowitej i energii kohezji wykazują dokładność odpowiednio na poziomie 0,95 i 0,92 dla energii całkowitej (mierzone metryką R^2 obliczaną za pomocą 10-krotnego testowania krzyżowego) oraz 0,90 i 0,87 dla energii kohezji. Dla nanorurek borowych, najwyższą dokładność osiągnęły modele oparte na drzewach losowych i reprezentacji położenia atomów za pomocą macierzy kulombowskiej, zaś dla nanorurek azotku boru modele oparte na lesie losowym dla reprezentacji położenia atomów za pomocą macierzy kulombowskiej lub macierzy Ewalda.

W rozdz. 5.3 przedstawiono wyniki badań nad możliwością zastosowania algorytmów uczenia maszynowego do analizy własności struktur dwuwymiarowych i zbudowania modeli opisujących energię kohezji oraz cytotoksyczność materiałów MXenes. Na potrzeby tych badań wygenerowano zbiory danych pochodzących zarówno ze źródeł doświadczalnych jak i z obliczeń numerycznych. Pierwszy z tych zbiorów zawierał makroskopowy opis oraz wyniki pomiarów cytotoksyczności zsyntetyzowanych próbek. Zbiór teoretyczny zawierał informacje o geometrii i energii całkowitej otrzymane w wyniku obliczeń DFT, wykonanych programem VASP, pochodzące z bazy danych Materials Project. Oryginalny zbiór zawierał 61 obserwacji. Przeanalizowano niezależnie, każdy z modeli wykorzystujących jeden z trzech zbiorów danych MXenes: dane doświadczalne, dane teoretyczne oraz zbiór powstały z połączenia danych doświadczalnych i teoretycznych. Po zbudowaniu szeregu modeli opartych na algorytmach uczenia maszynowego i przetestowaniu metod reprezentacji geometrii układów okazało się, że zbiór doświadczalny oraz jego rozszerzenie o dane teoretyczne dają bardzo zbliżoną dokładność. Pozwala to wnioskować, że geometria układów MXenes nie ma wpływu na ich cytotoksyczność. Natomiast z analizy istotności zmiennych wynika, że najważniejsze cechy MXenes wpływające na ich cytotoksyczność są związane z obecnością

na ich powierzchni tlenków metali i atomów litu. Najdokładniejszy ze zbudowanych modeli, o dokładności obliczanej metryką R^2 na poziomie 0,92, został użyty do przewidzenia cytotoksyczności nieprzebadanych jeszcze doświadczalnie związków MXenes. Okazało się, że modele stworzone jedynie na bazie danych teoretycznych nie pozwoliły zbudować wiarygodnego modelu cytotoksyczności. Fakt ten potwierdza tezę o braku wpływu geometrii związków MXenes na ich cytotoksyczność. W końcowej części tego rozdziału, kandydat dokonał porównania wyników przewidywania energii kohezji dla nanorurek i związków MXenes oraz przedstawił dyskusję poprawności opracowanych modeli przy użyciu wielu algorytmów uczenia maszynowego oraz reprezentacji układów fizycznych. Za najważniejsze osiągnięcie kandydata uważam opisanie mechanizmu toksyczności materiałów MXenes.

W rozdziale szóstym przedstawiono omówienie narzędzi technicznych stosowanych w obliczeniach: biblioteki numeryczne w języku Python i podstawowe kody opracowane przez kandydata wykorzystywane przy tworzeniu modeli opartych na uczeniu maszynowym, budowie zmiennych położeniowych i zrównoleglaniu obliczeń. Podane są także informacje o skalowalności kodu Quantum Espresso. Rozdział ten uzupełnia 7 dodatków, umieszczonych na końcu rozprawy, w których przedstawiono szczegóły techniczne obliczeń: wyniki doboru optymalnych parametrów obliczeń dla kodu Quantum Espresso, wartości liczbowe średniego błędu kwadratowego (MSE) przewidywania energii całkowitej i energii kohezji nanorurek borowych oraz nanorurek azotku boru, opis zmiennych w zbiorze doświadczalnym MXenes, obliczone energie kohezji MXenes, analizę dokładności przewidywania energii kohezji dla MXenes w zależności od liczby zmiennych i listingi kodów stosowanych w obliczeniach. Rozdział siódmy zawiera podsumowanie wyników rozprawy.

Rozprawa jest napisana na ogół jasno i poprawnym językiem ale wymaga korekty redakcyjnej w celu usunięcia licznych drobnych usterek, pomyłek językowych i literowych, które wymieniam z obowiązku recenzenta na dołączonej liście. Trochę razi nadużywanie anglicyzmów i żargonu informatycznego, np. str. 36, rozdz. 3.10.2: „preprocesing” zamiast „przygotowanie wstępne”, „formaty inputów” zamiast „formaty danych wejściowych”. Kandydat wydaje się mieć problemy z odmianą nazwisk obcych. Te uchybienia językowe i redakcyjne nie umniejszają mojej wysokiej oceny wartości merytorycznej rozprawy.

Podsumowując, rozprawa przedstawia wyniki szeroko zakrojonych badań przeprowadzonych w oparciu o szybko rozwijającą się metodologię uczenia maszynowego, zastosowaną do opisu i przewidywania własności intensywnie badanych, niskowymiarowych nanostruktur. Stwarzając oryginalne połączenie danych eksperymentalnych z danymi teoretycznymi, pochodzącymi z ponad 8500 symulacji DFT wykonanych przez kandydata oraz z otwartych baz danych, w oparciu o najbardziej zaawansowane algorytmy uczenia maszynowego, zbudowano modele pozwalające na realistyczne przewidywanie ich energii całkowitej, energii kohezji oraz toksyczności. Na szczególną uwagę zasługują wyniki opisujące mechanizm toksyczności materiałów Mxenes, które zostały opublikowane w czasopiśmie *Materials* (2020), w pracy wieloautorskiej, ale – jak wynika z oświadczeń autorów – przy zasadniczym

wkładzie kandydata w opracowanie metodologii badań, oprogramowania, przeprowadzenie badań, analizę formalną danych i wyników. Uważam, że ze względu na nakład pracy włożony przez kandydata w zaadaptowanie i wdrożenie metodologii uczenia maszynowego do problemu przewidywania własności niskowymiarowych nanostruktur, jak również zakres przeprowadzonych obliczeń i otrzymane wyniki, rozprawa zasługuje na wyróżnienie.

W konkluzji stwierdzam, że przedłożona rozprawa mgra Macieja Marchwianego spełnia wszystkie wymagania ustawowe i zwyczajowe stawiane rozprawom doktorskim. Rozprawa prezentuje wysoki poziom ogólnej wiedzy teoretycznej kandydata w dyscyplinie Nauki Fizyczne oraz umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej. Przedmiotem tej rozprawy doktorskiej jest oryginalne rozwiązanie problemu naukowego. Dlatego wnoszę o dopuszczenie pana mgr. Macieja Marchwianego do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

A. Kępczo

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Macieja E. Marchwianego
Lista zauważonych drobnych pomylek językowych, literowych i redakcyjnych

Strona _linia dół ^linia góra

- V⁸⁻¹² wymianno-korelacyjna ← Powinno być: wymiennie-korelacyjna
- VI¹⁸ ściel ← Powinno być: ściśle
- VI²⁻³ funkcją falową ← Powinno być: funkcja falowa
- VI₄ funkcja ← Powinno być: funkcja
- VII⁷ uch ← Powinno być: ich
- VII⁹ modele modele ← Powinno być: modele
- VIII¹¹ algorithmshave ← Powinno być: algorithms have
- VIII¹³ ave ← Powinno być: have
- VIII₃ explanation ← Powinno być: explanation
- str. 2, przedostatni akapit: zła numeracja rozdziałów.
- 3⁴ oddziaływujących ← Powinno być: oddziałujących
- 3¹¹ jak materii ← Powinno być: jak i materii
- 3₁₅ operator ← Powinno być: operatora
- 3₁₄ operator oddziaływania ← Powinno być: operatora energii oddziaływania
- We wzorze (2.3), w argumentie V : x_N ← Powinno być: r_N
- 4² Operator oddziaływania ← Powinno być: Operator energii oddziaływania
- 4⁹ otrzymanie kontrolowanie dokładnych przybliżeń ← Powinno być: ???
- 4₁₂ ... funkcyjonału $F(\rho)$ jest użycie uniwersalnej definicji Mel Levy ... ← Powinno być:
... uniwersalnego funkcyjonału $F(\rho)$ jest użycie ogólnej definicji Levy'ego ...
- 5₃ ze schematem Mel Levy ... ← Powinno być: ze schematem Levy'ego ...
- 6⁴⁻⁶ ... ponieważ minimalizacja ..., wyznaczniki Slatra ... ← zdanie niegramatyczne
- 6₅ ... zdefiniowanym poprzez hamiltonianie... ← Powinno być: ... zdefiniowany
poprzez hamiltonian ...
- 6₁ samouzgoniony ← Powinno być: samouzgodniony
- str. 7. W pierwszym akapicie rozdziału 2.4, gęstość ρ mylnie oznaczono jako n .
- Wzór (2.22), pod całką: $\varepsilon(\dots)$ ← Powinno być: $\varepsilon_{xc}(\dots)$
- 7₇ ... od J. P. Purdue i W. Yue ← Powinno być: ... od Perdew i Wanga
- Wzór (2.24): $\sinh^{-1}$ ← Powinno być: arsinh
- 8³⁻⁴ powinno być: ... z funkcją f_x uproszczoną przez Perdew, Burke i Ernzerhafa (PBE)
- 9₆ inertnych ← Powinno być: inercyjnych
- 10⁷ jest suma ← Powinno być: jest sumą
- 10₁₅ rysunek 3.1 ← Powinno być: rysunek 2.1
- 10₁₀ Concerving ← Powinno być: Conserving

11 ¹²	pseopotencjału	← Powinno być:	pseudopotencjału
11 ₁₇	oddziaływając	← Powinno być:	oddziałując
Wzór (2.33): R_{β}		← Powinno być:	R_{β}
13 ₁₄	preprocesowanie	← Powinno być:	wstępna obróbka
15 ₁₃	opisywana	← Powinno być:	opisywaną
15 ₈	zmienna	← Powinno być:	zmienną
16 ₁₅	inżyniera	← Powinno być:	inżynieria
16 ₁₁	Inżyniera	← Powinno być:	Inżynieria
18 ⁴	zdefiniowany jaki:	← Powinno być:	zdefiniowany jako:
18 ₇	błąd średniokwadratowy	← Powinno być:	średni błąd kwadratowy
19 ⁴	Błąd średniokwadratowy	← Powinno być:	Średni błąd kwadratowy
19 ⁷	zdefiniowana	← Powinno być:	zdefiniowany
19 ₄	bliższe jedynce	← Powinno być:	bliższe jedności
19 ₁₀	bliższe jedynce	← Powinno być:	bliższe jedności
19 ₁₄	0.1 eV	← Powinno być:	0,1 eV
21 ¹³	są nie równo liczne.	← Powinno być:	są nierównoliczne.
21 ₂	z poza	← Powinno być:	spoza
22 ³	go ze posiadanych	← Powinno być:	go z posiadanych
22 ⁷	Służący on	← Powinno być:	Służy on
22 ⁸	zmiennych wpływa	← Powinno być:	zmiennych i wpływa
27 ₁₁	będziemy	← Powinno być:	będą
29 ₁₉	uroszczenia	← Powinno być:	uproszczenia
36 ₂	wariancję	← Powinno być:	wariancji
37 ₇	z poza	← Powinno być:	spoza
30 ⁵	drzewa najpopularniejsze	← Powinno być:	drzewa. Najpopularniejsze
30 ⁸	po czy	← Powinno być:	po czym
30 ⁹	drzewa, jeśli zmiana	← Powinno być:	drzewa. Jeśli zmiana
31 ₈	zmiennie	← Powinno być:	zmiennej
35 ¹¹	iteracyjne	← Powinno być:	iteracyjnie
35 ₆	anormalna.	← Powinno być:	anomalna.
36 ₈	formaty inputów	← Powinno być:	formaty plików wsadowych
36 ₂	wariancję	← Powinno być:	wariancji
37 ₇	z poza	← Powinno być:	spoza
39 ²²⁻²³	dokonywany jest wybór	← Powinno być:	podejmowana jest decyzja
43 ₁₉	informacje	← Powinno być:	informację
45 ⁷	nie posiadających	← Powinno być:	nieposiadających
45 ¹¹	oraz raz zmianami	← Powinno być:	oraz zmianami
47 ₁₀	fFunkcje	← Powinno być:	funkcje
49 ¹⁵	nie jest używa	← Powinno być:	nie jest używana
50 ₂₀	zbór	← Powinno być:	zbiór
51 ¹⁹	jakiś aspekt	← Powinno być:	jakiś aspekt

51 ₁₀	zbiórów treningowych	← Powinno być:	zbiorów treningowych
54 ₁₂	borophene'u	← Powinno być:	borofenu
56 ²³	R2 oraz MES.	← Powinno być:	R2 oraz MSE.
56 ₁₉	pozwala kreślić	← Powinno być:	pozwala określić
57 ₇	zbiega do	← Powinno być:	zbiega się do
57 ¹¹ , 61 ⁵ , 63 ₁₆ , 64 ₁₉	nie opisującemu	← Powinno być:	nieopisującemu
61 ⁸	refRF	← Powinno być:	regRF
62 ₁₀	dwu składnikowy	← Powinno być:	dwuskładnikowy
63 ⁹	Zakres	← Powinno być:	Zakresy
64 ¹³⁻¹⁴	nonorurek	← Powinno być:	nanorurek
64 ₁₅	refRF	← Powinno być:	regRF
67 ₁₉	ilości	← Powinno być:	liczby
67 ₁₂	zmiennych niezalanych	← Powinno być:	zmiennych niezależnych
69 ³	ewalda	← Powinno być:	Ewalda
69 ₁₇	Ważone	← Powinno być:	ważone
74 ²⁴	funkcje	← Powinno być:	funkcję
74 ₂₅	obserwacje	← Powinno być:	obserwację
75 ₆	ewalda	← Powinno być:	Ewalda
76 ₈	Funkcje symetrii i Ważone	← Powinno być:	funkcje symetrii i ważne
77 ₁₀	modyfikacje powierzchniowa.	← Powinno być:	modyfikacje powierzchni.
78 ₇	ewalda	← Powinno być:	Ewalda
79 ₁₇₋₁₆	Funkcje symetrii i Ważonych funkcje	← Powinno być:	funkcji symetrii i ważonych funkcji
79 ₈ , 79 ₆	Odcisku	← Powinno być:	odcisku
81 ⁵	mogą możliwe	← Powinno być:	możliwe
81 ₁₆	poprawianie	← Powinno być:	poprawnie
89 ⁶	Macierzy Kulombowskiej, Macierzy Ewalda oraz Macierzy	← Powinno być:	macierzy kulombowskiej, macierzy Ewalda oraz macierzy
89 ¹⁹	mechanizmy	← Powinno być:	mechanizm
89 ²¹	nie jest one	← Powinno być:	nie jest ono
89 ₁₉	kodu równoległych obliczenia.	← Powinno być:	kodu obliczeń równoległych.
91 ¹⁴	Niniejszej praca	← Powinno być:	Niniejsza praca
92 ⁶⁻⁷	energje całkowita oraz energie kohezji	← Powinno być:	energię całkowitą oraz energię kohezji
92 ¹²	mierzona metryka R2 obliczana	← Powinno być:	mierzona metryką R2 obliczaną
92 ₁₂	geometrie układu	← Powinno być:	geometrię układu
93 ⁵	prowadza do	← Powinno być:	prowadzą do

A. Kozma