



UNIWERSYTET
MIKOŁAJA KOPERNIKA
W TORUNIU

Wydział Fizyki, Astronomii
i Informatyki Stosowanej

DZIEKANAT
SEKCJA ds. DOKTORANCKICH

Instytut Fizyki UMK
Wpłynęło dnia 2022-11-14

Toruń, dn. 30 października 2022r.

prof. dr hab. Ireneusz Grabowski
Instytut Fizyki UMK
ul. Grudziądzka 5/7
87-100 Toruń
tel. +48 56 6113317
ig@fizyka.umk.pl

Recenzja rozprawy doktorskiej mgra Tomasza Tarkowskiego zatytułowanej „Przewidywanie struktury krystalicznej nanodrutów z użyciem obliczeń ewolucyjnych”

Oceniana rozprawa wykonana została pod kierunkiem prof. dr. hab. Jacka Majewskiego i dr. hab. Nevilla Gonzáleza Szewackiego na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego. Praca doktorska przedstawia wyniki badań nad zastosowaniem algorytmu genetycznego do przewidywania struktury krystalicznej nanodrutów a w szczególności nanorurek złożonych z atomów boru, przy wsparciu tego procesu obliczeniami wykonanymi w ramach wariantu teorii funkcjonału gęstości (DFT).

Teoretyczne przewidywanie struktury układów krystalicznych w tym nanodrutów jest kluczowym zagadnieniem przy badaniu właściwości tych układów i ich oddziaływania z otoczeniem. W większości przypadków przeprowadzenie wiarygodnych obliczeń i symulacji komputerowych metodami *ab initio* czy metodami DFT jest ciągle zbyt dużym wyzwaniem obliczeniowym. Algorytmy genetyczne będące jedną z ewolucyjnych metod optymalizacji, pozwalające na przeszukiwanie możliwych rozwiązań w celu znalezienia rozwiązania najlepszego lub potencjalnie najlepszego za pomocą mechanizmów ewolucji oraz doboru naturalnego, są od wielu lat z powodzeniem stosowane w tych zagadnieniach. Nanorurki złożone z atomów boru, będące uzupełnieniem dla stosunkowo dobrze poznanych nanorurek węglowych, mogą tworzyć wraz z innymi atomami (np. azotem) struktury o ciekawych właściwościach. Tak więc tematyka rozprawy jest jak najbardziej aktualna a badania i wyniki ważne i pożądane zarówno od strony poznawczej jak i potencjalnych aplikacji.

Rozprawa doktorska magistra Tomasza Tarkowskiego napisana została w języku polskim i liczy 33 strony. Pracę uzupełniają załączniki, wymienione na początku pracy i przyporządkowane do konkretnych rozdziałów. Są to między innymi kody stworzonych programów, w tym kod źródłowy biblioteki Quilè, dokumentacja tej biblioteki, wyniki testów i obliczeń oraz plik z literaturą. O ile literatura jest obszerna, w szczególności w obszarze tematyki teorii obliczeń ewolucyjnych i problemów związanych z programowaniem, i generalnie dobrze dobrana do prezentowanych zagadnień, to w przypadku metod DFT, czy wykorzystania algorytmów genetycznych do przewidywania struktury krystalicznej nanorurek złożonych z atomów boru jest już bardziej uboga.



Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu
Instytut Fizyki
ul. Grudziądzka 5/7, 87-100 Toruń
tel.: +48 56 611 33 10, fax: +48 56 622 53 97
www.ifiz.umk.pl, ifiz@fizyka.umk.pl

Praca rozpoczyna się krótkim wprowadzeniem do tematyki badań, bardziej historyczno-reporterskim niż metodologicznym. To czego brakuje, to sformułowania problemu naukowego, celu pracy i motywacji do podjęcia badań realizowanych w ramach doktoratu. Co gorsze w dalszej części pracy powyższe elementy też się nie pojawiają.

Dalsze trzy rozdziały to z założenia opis podstawowych metod wykorzystywanych w pracy, oraz podstawowe definicje i pojęcia niezbędne do zrozumienia prezentowanych w dalszej części rozwiązań, obliczeń i wyników oraz opis narzędzi programistycznych. Ta część pracy, zwłaszcza w opisie metod teoretycznych (DFT) jest jakościowo dosyć nierówna. Wprowadzenie do teorii funkcjonału gęstości w rozdziale pierwszym, jest bardzo skrótowe i pobieżne, jak na podstawowe narzędzie wykorzystywane w dalszej części pracy. Znowu brakuje motywacji, czy wyjaśnienia dlaczego i po co wykorzystuję się w tym podejściu i badaniach metodę DFT. Wśród podstawowych definicji i równań metody DFT autor „przemycza” szczegóły obliczeniowe dotyczące prowadzonych dalej symulacji, np. rodzaj funkcjonału wymiennie-korelacyjnego czy rodzaj pseudopotencjału. W trakcie obrony chciałbym usłyszeć co stało za takimi konkretnymi wyborami.

W rozdziale drugim autor definiuje podstawowe pojęcia, metody i realizacje występujące w algorytmach genetycznych, w tym mechanizmy tworzenia genotypów i mechanizmy selekcji, konieczne do zrozumienia samych metod oraz do przeprowadzenia implementacji komputerowej opisanej w kolejnym rozdziale. Opis jest ścisły matematycznie i poprawny metodologicznie.

Rozdział 3 to opis narzędzi programistycznych oraz samej implementacji biblioteki algorytmów genetycznych zrealizowanej w języku C++, łącznie z prezentacją kodu programu. Muszę przyznać, że podjęcie się i stworzenie nowej, z założenia lepszej, bardziej ogólnej i nowocześniejszej biblioteki algorytmów genetycznych było największym wyzwaniem implementacyjnym tego doktoratu, tym bardziej, że stanowiło punkt wyjściowy i bazę do konkretnego zastosowania czyli przewidywania struktury krystalicznej nanorurek. Etap ten zakończył się sukcesem, stworzono i opublikowano autorską bibliotekę Quilë a rozwiązania przyjęte przy implementacji biblioteki są oryginalne (np. stworzenie i komunikacja z bazą genotypów) i pozwalają na zwiększenie efektywności działania algorytmu. W rozdziale tym, jako przykład zastosowania i możliwości zaimplementowanej biblioteki, opisano, jak w sposób genetyczny rozwiązać zagadnienie ośmiu nieatakujących się na szachownicy hetmanów oraz, dodatkowo program, który demonstruje dryf genetyczny w kierunku maksimum po arbitralnie wybranej funkcji przystosowania.

Rozdział czwarty to opis standardowej procedury testowania i oceny jakości implementacji i skuteczności działania algorytmu genetycznego, w tym przypadku, przy użyciu znanych z literatury funkcji testowych zebranych w Tabeli 4.1. Jest to także ważny element tzw. strojenia algorytmu. Samą analizę skuteczności biblioteki w znajdowaniu optimum w zagadnieniach zmiennoprzecinkowych przeprowadzono zmieniając różne parametry procesu genetycznego. W tym celu autor stworzył trzy programy różniące się między sobą przede wszystkim użytymi operatorami rekombinacji i mutacji. Wyniki testów zebrane w Tabeli 4.2 potwierdziły standardowe (poprawne) zachowanie algorytmu genetycznego, jego efektywność, ale co najważniejsze pozwoliły na przygotowanie parametrów wykorzystanych w praktycznym zastosowaniu, będącym jak rozumiem, głównym celem badań opisanych w pracy doktorskiej i opisanym w kolejnym rozdziale.

Wreszcie Rozdział 5. to zastosowanie stworzonego algorytmu genetycznego do przewidywania struktury krystalicznej nanorurek złożonych z atomów boru. Rozdział zawiera szczegóły obliczeniowe, w tym wielkość komórki, założenia o periodyczności, sposób obliczania funkcji dostosowania – czyli konkretnych obliczeń metodą DFT, itp.. Zawiera także we wstępnej

części opis adaptacji algorytmu do konkretnego zagadnienia optymalizacyjnego. Ta część rozdziału zawiera także szczegóły dotyczące procesu samo-uzgodnionego, sposobu przeprowadzenia obliczeń, liczby iteracji, wyboru układu odniesienia dla struktur 2D i 3D., czy wreszcie generowania tzw. osobników pierwszego pokolenia. To czego brakuje mi w tej części to przede wszystkim wprowadzenia do samego problemu formowania nanorurek, analizy ich struktury, problemów obliczeniowych jakie napotykają metody typu DFT w zastosowaniu do tych zagadnień, czy wreszcie, konkretnie dotyczących nanorurek składających się z atomów Boru, w tym np. znaczenia otwartopowłokowości tego pierwiastka w przyjętej metodologii i obliczeniach. Praktycznie bez komentarza pozostawiono wybór konkretnych rozwiązań obliczeniowych.

Druga część rozdziału to prezentacja, opis i analiza uzyskanych wyników – konkretnych struktur nanorurek, złożonych z atomów boru, płaskich i wypukłych, będących wynikiem ewolucji i relaksacji. Wskazano między innymi, że najbardziej stabilne znalezione nanorurki zrelaksowane, mają tendencje do formowania motywów trójkątnych, kwadratowych lub posiadających dziury i wklęsnięcia o różnych rozmiarach. Zaprezentowano i omówiono nie tylko uzyskane struktury, ale także inne uzyskane rezultaty obliczeń takie jak energie i długości wiązań. Opis wyników i ich analiza jest wystarczająco szczegółowa choć mogłaby być bardziej dogłębna. Niestety ponownie brakuje i w tym przypadku, przynajmniej podstawowego podsumowania uzyskanych rezultatów, tym bardziej, że nie pojawia się ono także w Zakończeniu. Niemniej chcę podkreślić, że przyjęta w pracy metodologia i sposób przeprowadzenia obliczeń, prezentacji i analizy wyników jest poprawny pod względem merytorycznym i jakościowo wartościowy.

Ostatnia część pracy to „Zakończenie”. W Zakończeniu, co jest nieco zaskakujące, nie podsumowano osiągniętych rezultatów, ale za to szeroko przedstawiono problemy, które wymagają dalszych badań i udoskonaleń. Świadczy to, jak mi się wydaje, o krytycznym podejściu Autora do swoich badań i chęci dalszej pracy nad zagadnieniami. Dla mnie to także, w pewnym sensie, objaw „niecierpliwości” w prowadzeniu badań. Elementem pracy naukowca jest nie tylko stawianie pytań, rozwiązywanie problemów, ale też umiejętność i konieczność prezentacji tych wyników, niejako chwalenia się nimi, oraz formułowania wniosków pozwalających np. na wykorzystanie osiągniętych rezultatów przez innych badaczy. Ten element warsztatu badawczego Doktoranta wymaga poprawienia.

Od strony językowej i technicznej praca napisana jest w sposób zadowalający, choć sam język prezentacji chwilami jest mocno specjalistyczny i pojawia się wiele niezdefiniowanych elementów czy pojęć. Nie umniejszają one jednak jakości otrzymanych wyników i całej pracy.

W podsumowaniu pragnę stwierdzić, iż recenzowaną rozprawę doktorską mgra Tomasza Tarkowskiego oceniam pozytywnie. Podjęty przez doktoranta program badawczy dotyczy ważnej tematyki o dużym znaczeniu poznawczym i możliwościach aplikacyjnych. Mgr Tomasz Tarkowski wykazał się dużą wiedzą ogólną oraz biegłością w wykorzystaniu zaawansowanych narzędzi teoretycznych, narzędzi programistycznych i programów komputerowych, oraz przeprowadzania analizy i opracowania otrzymanych wyników. Świadczy to o umiejętności doktoranta do prowadzenia pracy naukowej, choć jak wspominałem powyżej warsztat prezentacyjny wymaga jeszcze poprawy.

W mojej ocenie wykonane prace badawcze, ilość i jakość otrzymanych wyników, w tym stworzenie nowej biblioteki algorytmów genetycznych zrealizowanej w języku C++, przetestowanie jej, dostrojenie i wreszcie wykonanie przy jej wykorzystaniu konkretnych obliczeń dla struktur krystalicznych nanorurek złożonych z atomów boru, spełnia wymagania stawiane rozprawom

doktorskim. Mój niedosyt budzi fakt słabej jakościowo prezentacji tych badań i wyników, o czym napisałem powyżej, powodujący, że duży wysiłek i otrzymane wyniki nie będą wystarczająco docenione i wykorzystane przez potencjalnego czytelnika. Niemniej, nie mam wątpliwości, że rozprawa mgra Tomasza Tarkowskiego spełnia warunki i wymagania stawiane rozprawom doktorskim w dyscyplinie nauki fizyczne i wnoszę o dopuszczenie jej autora do kolejnych etapów przewodu doktorskiego.



Ireneusz Grabowski