

Warszawa, dn. 14 czerwca 2022 r.

DZIEKANAT
SEKCJA ds. DOKTORANCKICH

Wpłynęło dnia ..2022..-06-..2..0.. 

Prof. Janusz Szczepański
Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN
Zakład Informatyki i Nauk Obliczeniowych

Recenzja Rozprawy Doktorskiej

Tytuł: „Przewidywanie struktury krystalicznej nanodrutów z użyciem obliczeń ewolucyjnych”

Autor: mgr Tomasz Tarkowski

Promotorzy:

prof. dr hab. Jacek A. Majewski

Instytut Fizyki Teoretycznej UW

dr hab. Nevill González Szwacki

Instytut Fizyki Doświadczalnej UW

Niniejsza Recenzja została przygotowana w odpowiedzi na pismo WF-531-10/2022 Przewodniczącego Rady Naukowej Dyscypliny Nauki Fizyczne Uniwersytetu Warszawskiego prof. dr hab. Wojciecha Satuły.

Wstęp

W ostatnich latach do rozwiązywania bardzo złożonych problemów wynikających z różnych dziedzin, takich jak ekonomia, inżynieria, polityka, zarządzanie szeroko wykorzystywane są algorytmy metaheurystyczne. Większość algorytmów metaheurystycznych jest inspirowana procesem ewolucji biologicznej, zachowaniem populacji, zachowaniem roju i prawami fizyki. Przewidywanie struktur współczesnych materiałów, ośrodków o niestandardowych własnościach, jest jednym z takich problemów, stawia przed współczesną nauką nowe wyzwania. Ze względu na złożoność tych problemów, ograniczone możliwości zastosowania metod analitycznych, kluczowe staje się rozwinięcie i wykorzystanie technik komputerowych. Wymaga to z kolei zastosowania niestandardowych metod, znacznie zwiększających skuteczność symulacji komputerowych, metod związanych z szeroko rozumianą inteligencją obliczeniową, w szczególności algorytmów ewolucyjnych.

I. Zawartość i Ocena Rozprawy

W wielu układach biologicznych, ale także fizycznych pełny opis układu wymaga rozważenia olbrzymiej przestrzeni stanów. Zagadnienia związane ze strukturą takich układów wymagają z kolei rozwiązania problemów optymalizacyjnych, co przy olbrzymiej przestrzeni stanów powoduje, że przeszukiwanie brute-force, czy też przeszukiwanie losowe jest dalece nieskuteczne. Dlatego każda bardziej skuteczna, poparta dowodami (częściowo choćby nawet heurystycznymi argumentami) metoda może mieć bardzo duże znaczenie.

Przedmiotem Rozprawy jest opracowanie i implementacja efektywnych wariantów algorytmu genetycznego (AG) pozwalających rozwiązywać problemy optymalizacyjne w fizyce ciała stałego, w szczególności przewidywać struktury krystaliczne nanodrutów. Nanodrutu są to długie, quasi-jednowymiarowe obiekty o średnicach w skali nano, które budzą duże zainteresowanie, ponieważ stanowią wyjątkowe układy do badania zjawisk fizycznych w nanoskali.

Autor Rozprawy jest współautorem 7 artykułów opublikowanych w tak **renomowanych czasopismach** jak: Physical Review Applied (kwartył Q1, baza WoS), ACS Photonics (Q1), FLATCHEM (Q2), Physical Review B (Q2) oraz trzech artykułów w Acta Physica Polonica A,

w których analizowane są m. in. problemy związane z własnościami materiałów w kontekście ich struktury krystalicznej (badanie właściwości strukturalnych i względnej stabilności fragmentów struktur planarnych i borowych, własności optyczne rozproszonych nanocząstek, rozkład energii wiązania warstw boru, luki energetyczne).

Rozprawa składa się z 7 następujących części:

Wstęp (ciekawie napisany)

1. Teoria funkcjonału gęstości
2. Algorytm genetyczny
3. Implementacja algorytmu genetycznego
4. Analiza z użyciem funkcji testowych
5. Przewidywanie struktury krystalicznej

Zakończenie

Kolejne części zostały przedstawione w zwarty i ciekawy sposób, zaś części 1-5 starano się opisać z matematyczną precyzją, definiując kolejne pojęcia i zastosowane operatory.

Sposób działania algorytmów genetycznych nieprzypadkowo przypomina zjawisko ewolucji biologicznej, ponieważ ich twórca profesor psychologii, elektrotechniki i informatyki John Henry Holland właśnie z biologii czerpał inspiracje do swoich prac. Najogólniej rzecz ujmując opracowanie danego algorytmu genetycznego wymaga zdefiniowania trzech kroków:

1. Dla danego problemu (układ fizyczny, układ biologiczny) określenia **funkcji celu** lub stosując inną terminologię **funkcji przystosowania** (stanowiącej miarę jakości w **problemie optymalizacyjnym**).
2. Przyjęcie **reprezentacji symbolicznej** (geny i konsekwentnie genotypy) dla obiektów badanego układu fizycznego (fenotypów), innymi słowy określenie przestrzeni genomów.
3. **Zdefiniowanie operatorów genetycznych**, odpowiedników operacji mutacji i krzyżowania działających na genotypach oraz określenie metody selekcji kolejnych pokoleń.

Samo uruchomienie i działanie algorytmu genetycznego (AG) polega kolejno na:

- a) Określeniu (wybraniu, wylosowaniu) **pokolenia początkowego** (podzbioru genotypów) oraz zdefiniowaniu **kryterium stopu** dla algorytmu w procesie iteracji.
- b) **Zastosowaniu operatorów genetycznych** w odniesieniu do bieżącego pokolenia (zastosowanie operatorów wariacji w terminologii przyjętej w Rozprawie).
- c) **Zastosowaniu procedury selekcji** z wykorzystaniem funkcji przystosowania (najogólniej rzecz ujmując idea polega na pozostawieniu jako następne pokolenie osobników najlepiej przystosowanych).
- d) Weryfikacji, czy zaszło **kryterium stopu**.
- e) **Powtórzenie** operacji b) i c) (iteracja) dla kolejnych pokoleń jeśli kryterium stopu jest niespełnione.

W opracowanych i zaimplementowanych w Rozprawie wariantach algorytmu genetycznego **dedykowanych** do przewidywania struktury krystalicznej nanodrutów jako funkcję celu (**przystosowania**) zaproponowano **funkcjonał gęstości (DFT)**, co jest naturalnym założeniem wynikającym głęboko z fizyczny przesłanek. Teoria funkcyjna gęstości elektronowej często określana jako metoda *ab initio* jest metodą bazującą na funkcji falowej. Celem metody jest rozwiązanie równania Schrödingera w sposób przybliżony. Teoria funkcyjna gęstości tworzy podstawy numerycznych obliczeń energii całkowitej oraz rozkładu gęstości elektronowej w układach atomowych.

W rozprawie zawarto obszerny i klarowny opis poświęcony **DFT**. W samej implementacji wykorzystano implementację teorii funkcyjna gęstości w postaci pakietu o nazwie **Quantum ESPRESSO** zaproponowanego w artykule, w *Journal of Physics: Condensed Matter* (2017) przez Paolo Giannozzi i współautorów wraz z *pseudopotencjałem* zaproponowanym przez H. Hellmanna w 1935 r. typu *Projector-Augmented Wave* adekwatnym dla pierwiastka boru.

Kolejny etap rozprawy to ściśle zdefiniowanie obiektów opracowanego AG w terminologii matematycznej pozwalającej na praktyczną implementację w języku C++. Zdefiniowano zatem pojęcia: **genu**, **genotypu**, **populacji**. Zdefiniowano także **operacje/funkcje** pomocnicze działające na tych obiektach, na przykład funkcję „spłaszczającą” *flatten* działającą na sekwencjach populacji.

W algorytmie genetycznym stosuje się mechanizm tworzenia kolejnych genotypów na bazie już istniejących, poprzez wykorzystanie genów lepiej przystosowanych, aby wyprodukować genotypy jeszcze lepiej przystosowane. Mechanizmy te wiążą się z **zastosowaniem operacji „ewolucyjnych”, czyli mutacji i krzyżowania (rekombinacji) genomów**. W pracy mechanizmy te wprowadzono poprzez ogólniejsze pojęcia, a mianowicie poprzez odpowiednie **operatory wariacji**. Wykonanie tych operacji wymaga wykonywania pewnego losowania według założonych rozkładów prawdopodobieństwa. W pracy scharakteryzowano przyjęte operatory wariacji dla kluczowych, naturalnych rozkładów występujących w przyrodzie (rozkład Gaussa, rozkład płaski, oraz szczególny przypadek rozkładu Bernoulliego). Dodatkowo, pokazano też możliwość rozszerzenia *funkcji przystosowania* poza jej dziedzinę (str. 17).

W następnej kolejności omówiono **mechanizmy selekcji**, które w Rozprawie, w istotny sposób zależą od funkcji prawdopodobieństwa selekcji spf. Omówiono m. in. mechanizm selekcji proporcjonalnej z procedurą okienkowania, selekcję rankingową (określono funkcje pomocnicze: funkcja filtrującą zgodnie z zadaniem predykatem, funkcje size). Następnie w krótki sposób opisano wybór populacji początkowej, wskazując na pewne ograniczenia, w szczególności konieczność przynależności potomka do dziedziny *funkcji przystosowania*.

Po omówieniu tych pojęć i operacji Autor opisuje już operacje iteracji. W Rozprawie wiodącą rolę odgrywała reprezentacja zmiennoprzecinkowa, dlatego zaproponowano jeszcze wprowadzenie nieco bardziej zaawansowanego operatora wariacji adekwatnego dla tej reprezentacji, którym jest *mutacja samoadaptacyjna*.

a) Implementacja algorytmu genetycznego

Do celu implementacji wybrano język programowania C++, który łączy ponad 40-letnią historię z nowoczesnymi technikami. Język C++ został stworzony w latach osiemdziesiątych XX wieku (pierwsza wersja pojawiła się w 1979 r.) przez Bjarne Stroustrupa jako obiektowe rozszerzenie języka C. Poza językiem C, na kształt języka C++ miały wpływ takie języki, jak Simula (z której zaczerpnął właściwości obiektowe) oraz Algol, Ada, ML i CLU. Język C++ jest standaryzowany przez ISO. Pierwszą wersję opublikowano w 1998. Następnie kilkakrotnie standard aktualizowano: C++03, C++11, C++14 oraz C++17. Ostatnia,

najnowsza z wersji standardu, nazywana C++20 opublikowana została w grudniu 2020 jako nowy standard ISO/IEC. Istnieją co najmniej cztery biblioteki C++ implementujące obliczenia ewolucyjne w C++. Właściwie jednak wszystkie wymienione biblioteki zostały zaimplementowane w stylu sprzed standardu języka C++11. Oznacza to, że żadna z bibliotek nie została napisana we współczesnym C++. **W ramach przygotowywania Rozprawy doktorant zdecydował się na stworzenie autorskiej biblioteki algorytmów genetycznych, która to biblioteka została zaimplementowana w możliwie najnowszym standardzie języka przystępnym w użyciu dla potencjalnego końcowego odbiorcy. W efekcie realizacji tego zadania stworzono z użyciem C++20 bibliotekę , którą nazwano *Quilë*.**

Biblioteka obsługuje poza reprezentacją zmiennoprzecinkową również całkowitoliczbową, binarną oraz permutacyjną. Zbiór możliwych wariacji zawiera poza mutacją Gaussa także mutację samoadaptacyjną, *swap*, *random-reset* oraz *bit-flipping*, rekombinację arytmetyczną, arytmetyczną pojedynczą, jednopunktową oraz *cut-and-crossfill*.

Funkcjami prawdopodobieństwa selekcji zaimplementowanymi w bibliotece są mechanizm selekcji proporcjonalnej z procedurą okienkowania oraz selekcji rankingowej z presją liniową i eksponencjalną. Poza stochastycznym uniwersalnym próbkowaniem dostępny jest algorytm koła ruletki oraz procedura selekcji generacyjnej.

Zaimplementowanymi warunkami zakończenia (warunek stopu) są, poza osiągnięciem plateau wartości funkcji przystosowania, osiągnięcie ustalonej liczby iteracji lub konkretnej wartości funkcji przystosowania oraz ogólniejszy od poprzedniego warunek osiągnięcia jakiejś własności przez dowolny genotyp. Warunki zakończenia algorytmu można łączyć z użyciem koniunkcji oraz alternatywy, a sam zbiór warunków zakończenia można rozszerzyć o kolejne mechanizmy. Uwaga o możliwości **rozszerzenia dotyczy również zbioru operatorów wariacji, funkcji prawdopodobieństwa selekcji i algorytmów selekcji.**

Biblioteka zawiera szereg ulepszeń funkcjonalnych. Wykorzystuje w obliczeniach *bazę danych* genotypów i odpowiadających im obliczonych wartości funkcji przystosowania. Dzięki takiej bazie w wygodny sposób unika wykonywania wielokrotnych obliczeń wartości funkcji przystosowania dla danego genotypu. Pozwala to na redukcję kosztów obliczeniowych.

W Rozprawie przedstawiono ciekawy i przekonujący przykład zastosowania zaimplementowanego AG do rozwiązania tzw. **zagadnienia 8 hetmanów**. Przykład ten pokazuje m.in. możliwości opracowanej biblioteki. Warto w tym miejscu wspomnieć, że właśnie **w tym roku** (2022) matematyk z Harvard University Michael Simkin rozwiązał ten postawiony ponad 150 lat temu problem, podał przybliżony wzór na rozwiązanie problemu dla szachownicy dowolnych rozmiarów.

b. Weryfikacją efektywności i testy zaimplementowanego AG

Ważną a nawet kluczową rolę dla oceny poprawności i wiarygodności i jakości zaimplementowanych algorytmów odgrywa testowanie. Ponieważ głównym celem aplikacyjnym pracy jest problem przewidywania struktury krystalicznej nanodrutów, a wiąże się to z wykorzystywaniem reprezentacji zmiennoprzecinkowej w zwykłym (jednocelowym) algorytmie genetycznym zaimplementowanym w bibliotece Quilę, dlatego też, w ramach testowania wykonano przede wszystkim analizę efektywności i wydajności biblioteki w dziedzinie optymalizacji zmiennoprzecinkowej przeprowadzonej z użyciem jednocelowych funkcji testowych (banchmarks). Wykorzystano do tego celu funkcje testowe znajdujące się w repozytorium **A Library of Mixed-Integer and Continuous Nonlinear Programming Instances** oraz 16 jednocelowych funkcji testowych zaczerpniętych z literatury: David H. Ackley, *A connectionist machine for genetic hillclimbing*. Boston, MA, USA: Springer, 1987. Strojenie AG odbywało się prostą metodą testowania parametrów wybranych intuicyjnie lub konwencjonalnie. Kluczowym elementem procesu strojenia była analiza statystyczna. Przeprowadzone testy pokazały zadawalającą efektywność (Tablica 4.2, str. 23) zwłaszcza (co jest oczywiste) dla problemów mniejszych rozmiarów. Tablica 4.2, str. 23 przedstawia **success rate** dla 100 prób dla 16 funkcji testowych, dla różnych wariantów opracowanego algorytmu.

c. Zastosowanie AG w fizyce ciała stałego. Przewidywanie struktury krystalicznej.

Opracowana implementacja AG została zastosowana do przewidywania optymalnej struktury krystalicznej dla nanodrutów monoatomowych na przykładzie pierwiastka bor. W pracy uwzględniono dwa rodzaje tych struktur: płaskie oraz wypukłe. Wykorzystanie

algorytmu wymagało reprezentowania/wyrażenia odpowiednich obiektów fizycznych w języku matematycznym umożliwiającym zastosowanie adekwatnego algorytmu genetycznego z biblioteki *Quilē*. Do tego celu odpowiednia jest reprezentacja zmiennoprzecinkowa. W zastosowaniu algorytmu AG podstawowym obiektem jest **komórka elementarna nanodrutu** (w pracy przyjęto do 8 atomów w komórce). Przyjęto, że nanodrut jest periodyczny w kierunku osi z i scharakteryzowany jest na poziomie fenotypu poprzez położenie poszczególnych atomów i wysokość komórki elementarnej. Odpowiednie genotypy nanodrutu płaskiego i wypukłego wraz z zakodowanymi cechami fenotypu przedstawiono na Rysunku 1 (str. 28). Zagadnienie optymalizacyjne polegało na znalezieniu wysokości komórki elementarnej oraz położenia atomów, które minimalizują całkowitą energię tej komórki. Zatem dla funkcji przystosowania zastosowano samouzgodnione obliczenia DFT. W praktycznych zastosowaniach i efektywności algorytmów ewolucyjnych bardzo ważną rolę odgrywa **koszt obliczeniowy**. **Doktorant dokonał szeregu ulepszeń** w opracowanym algorytmie w celu przyspieszenia obliczeń DFT:

- wykorzystano siatkę $\sim k$ -punktów Monkhorsta-Packa o niskiej rozdzielczości,
- w procedurze samouzgodnionej zastosowano mieszanie Broydena,
- próbkowanie strefy Brillouina odbywało się metodą Methfessela-Paxtona,
- zaś do odcięcia energii kinetycznej funkcji falowej w rozwinięciu Fouriera przyjęto istotnie większą wartość niż sugerowane minimum.

Wyniki końcowe struktur znalezionych na drodze ewolucyjnej pokazującej możliwości wykorzystania zaimplementowanego AG zaprezentowano na rysunku 5.2 zostały podzielone na dwie grupy:

- nanodrutu otrzymane w ewolucji struktur płaskich
oraz
- nanodrutu otrzymane w ewolucji struktur wypukłych.

Przedstawiono szereg znalezionych struktur (struktury relaksacyjne) dla przypadku płaskiego i wypukłego w zależności od liczby atomów w komórce elementarnej.

Przeprowadzone symulacje/obliczenia pozwoliły m. in. na **określenie energii wiązania na atom, długości wiązań i rozmiarów komórki elementarnej w stanie zrelaksowanym**. **Zauważono, że najbardziej stabilne znalezione nanodrutu zrelaksowane mają tendencje do formowania motywów trójkątnych, kwadratowych lub posiadających dziury i wklęsnięcia o różnych rozmiarach.**

II. Uwagi ogólne i dyskusyjne

1. W Rozprawie zawarto stwierdzenie: „Strojenie AG odbywało się prostą metodą testowania parametrów wybranych intuicyjnie lub konwencjonalnie. Kluczowym elementem procesu strojenia jest analiza statystyczna.” Czy dla konkretnych układów fizycznych nie można spróbować zawęzić przestrzeni parametrów, a także wskazać w samym algorytmie najkorzystniejsze rozkłady prawdopodobieństwa, które należałoby zastosować/przetestować **w oparciu o przesłanki fizyczne**? Równie pomocne byłyby również w tym kontekście pewne przesłanki geometryczne, oczekiwanie symetrii, niezmienniczości?

Czy nie dałoby się wykorzystać mechanizmów uczenia do strojenia AG?

2. Nasuwa się też analogiczna sugestia jak w punkcie 1. dla procedury wyboru pierwszego pokolenia.

3. Jaką rolę może odgrywać „kodowanie” układu fizycznego do układu „biologicznego”? Mam na myśli przejście od *fenotypu* do *genotypu* ? Czy tutaj nie można wykorzystać na przykład algorytmu kompresji, aby zawęzić przestrzeń stanów do przeszukiwania dla algorytmu genetycznego ?

4. Czy nie dałoby się sformułować odpowiedników Twierdzenia o Schematach dla specyficznych układów fizycznych rozpatrywanych w Rozprawie? W szczególności wykorzystując m. in. prawo zachowania energii.

5. Ile czasu średnio w stosunku do czasu przebiegu pełnego algorytmu zajmuje obsługa generowania liczb pseudolosowych? Jak duże są przestrzenie stanów (maksymalnie 21 genów w genotypie, każdy gen reprezentowany przez 8 bitów ...?)?

6.

Uwagi edytorskie:

- pewne problemy związane z opisem Rozprawy sprawia brak numeracji wzorów.
- zauważyłem też nieco błędów drukarskich, na przykład:
- brak nawiasu we wzorze: $E_b = E_{\text{tot, izolowany atom B}} - E_{\text{tot, nanodrut}}/N_a$

7.

Wydaje się, korzystne byłoby też dodanie słownika symboli i terminów występujących w Rozprawie.

III. PODSUMOWANIE i OCENA KOŃCOWA

Recenzowana Rozprawa doktorska stanowi opracowanie zaawansowanej autorskiej biblioteki programów stanowiących implementacje algorytmów genetycznych dedykowanych do przewidywania optymalnych struktur krystalicznych dla nanodrutów monoatomowych. Rozprawa doktorska wiąże ze sobą kilka dyscyplin, zaś doktorant **ukierunkował ją na zastosowania w fizyce ciała stałego**. Opracowana biblioteka jest unikalną stworzoną przy użyciu najnowszej wersji języka programowania C++20. Przedstawione propozycje zastosowań biblioteki pokazują jej duże możliwości co do przewidywania i analizy optymalnych struktur krystalicznych. **Również aktywność i dorobek naukowy doktoranta oceniam pozytywnie, wykazuje się On samodzielnością w prowadzeniu badań naukowych**. Wyniki prac opublikował On w 8 artykułach, w czasopismach, z których część znajdują się w kwartyle Q1 w bazie Web of Science. Mając powyższe na uwadze stwierdzam, że przedstawiona do oceny Rozprawa doktorska spełnia wymagania stawiane przez odpowiednią Ustawę i wnoszę jednocześnie o dopuszczenie rozprawy do publicznej obrony.

Janusz Kucpa