



UNIwersYTET MIKOŁAJA
KOPERNIKA
I N S T Y T U T
F I Z Y K I



ul. Grudziądzka 5/7 87-100 TORUŃ

<http://www.fizyka.umk.pl/>

Tel. centr. (48 56) 611 33 10

Fax (48 56) 622 53 97

Sekretariat: (48 56) 622 63 70

e-mail: ifiz@fizyka.umk.pl

Prof. dr hab. Ireneusz Grabowski

Toruń 12.09.2016

Instytut Fizyki UMK

ul. Grudziądzka 5/7

87-100 Toruń

Recenzja rozprawy doktorskiej **mgr Anny Styrzcz** „*Hybrydowe algorytmy optymalizacji globalnej - poszukiwanie niskoenergetycznych konformacji cząsteczek chemicznych*”
przygotowanej pod opieką promotorską prof. dra hab. Jacka Korchowca na Wydziale Chemii
Uniwersytetu Jagiellońskiego.

Oceniana rozprawa przedstawia wyniki badań nad wykorzystaniem metod globalnej optymalizacji funkcji wielu zmiennych bazującej na algorytmach genetycznych, sieciach neuronowych do efektywnej optymalizacji struktury geometrycznej cząsteczek. Problem optymalizacji geometrii cząsteczki jest jednym z podstawowych zagadnień w obliczeniach struktury wieloelektronowej układów molekularnych, obliczania własności tych układów i modelowaniu molekularnym. W przypadku skomplikowanych i dużych cząsteczek takich jak nanoukłady czy cząsteczki o znaczeniu biologicznym, problem znalezienia globalnego minimum energii potencjalnej i, co za tym idzie, struktury geometrycznej cząsteczki, jest zadaniem skomplikowanym i trudnym w realizacji ze względu zarówno na wielkość układu, jak i liczbę minimów lokalnych na powierzchni energii potencjalnej. Wymaga to wyjścia poza standardowe metody stosowane w chemii obliczeniowej. Tak więc temat podjęty w ocenianej pracy jest jak najbardziej aktualny a badania niezmiernie ważne i pożądane.

W przedstawionej rozprawie skupiono się na dwóch aspektach związanych z globalną optymalizacją struktury geometrycznej cząsteczek chemicznych: algorytmie genetycznym służącym do optymalizacji funkcji wielu zmiennych i jego optymalizacją

poprzez dynamiczną kontrolę procesu optymalizacji siecią neuronową oraz problemie zachowania tożsamości chemicznej optymalizowanych cząsteczek. Dla obu problemów autorka zaproponowała unikatowe rozwiązania, które są najważniejszymi wynikami przedstawionej pracy.

W przypadku optymalizacji funkcji wielu zmiennych doktorantka stworzyła algorytm o nazwie „inteligentna ewolucja”- metodę łączącą algorytmy genetyczne i sieci neuronowe. W metodzie tej parametry algorytmu genetycznego „dobierane” są przez sieć neuronową, co pozwala na znaczne zwiększenie przede wszystkim wydajności algorytmu, jego niezawodności a także uniwersalności uzyskanej dzięki dynamicznemu dostosowywaniu parametrów procesu optymalizacji poprzez wykorzystywanie informacji specyficznych dla rozwiązywanego problemu. Algorytm najpierw sprawdzony został na kilku modelowych funkcjach matematycznych standardowo wykorzystywanych do testowania algorytmów optymalizacyjnych (Ackleya, Rastrigina, Griewanka i Dixona-Price’e) a następnie na wybranych układach molekularnych. Jakość wyników w każdym przypadku porównywana była ze „specjalnie” parametryzowanymi dla tych układów i funkcji statycznymi algorytmami genetycznymi. Przeprowadzone testy potwierdziły efektywność opracowanego kontrolowanego siecią neuronową algorytmu genetycznego.

Zaproponowany algorytm uzupełniony został mechanizmem wymuszającym zachowanie tożsamości chemicznej cząsteczki w trakcie optymalizacji, poprzez optymalizację wszystkich współrzędnych atomów tworzących cząsteczkę i wykorzystaniu pola siłowego wymuszającego właściwą topologię układu. Metoda przetestowana została dla kilku stosunkowo prostych cząsteczek i przy wykorzystaniu różnych mechanizmów zachowania topologii (potencjałów modyfikujących). Testy wykazały jednoznaczną poprawę szybkości zbieżności procesu optymalizacji globalnej i zależność jakości otrzymanych wyników zarówno od skomplikowania potencjałów modyfikujących jak i od konformacji badanych cząsteczek.

Rozprawa doktorska mgr Anny Styrz liczy ponad 100 stron, składa się z 7 rozdziałów i podzielona jest na wyraźnie wyodrębnioną część teoretyczną będącą opisem wykorzystywanych (Rozdziały 2-3) i stworzonych przez doktorantkę metod (Rozdziały 4-5) oraz część praktyczną w której przedstawiono wyniki obliczeń (Rozdział 6) i dyskusję uzyskanych rezultatów. Pracę rozpoczyna bardzo krótki wstęp, będący wprowadzeniem do tematyki pracy wraz z zarysowanym celem pracy, a kończy także bardzo krótkie podsumowanie pozwalające całościowo spojrzeć na najważniejsze dokonania i wyniki pracy doktorskiej. Bibliografia liczy prawie 80 pozycji i jest dobrze dobrana do tematyki pracy.

Określenie „bardzo krótki” użyte przeze mnie, w stosunku do „Wstępu” i „Zakończenia” pracy doktorskiej, wskazuje na wyraźny niedostatek czy nawet mankament pracy. Brakuje mi w nich szerszego spojrzenia na badane, rozwiązane i opisane w pracy zagadnienia np. możliwe inne zastosowania zaproponowanych algorytmów i metod, możliwy dalszy rozwój czy wskazania ewentualnej poprawy efektywności.

Dwa pierwsze rozdziały teoretyczne pracy zawierają opis algorytmów genetycznych i jednokierunkowych sieci neuronowych. W kolejnym rozdziale przedstawiony został opracowany przez doktorantkę algorytm dynamicznego kontrolowanego siecią neuronową algorytmu genetycznego oraz szczegółowo opisane wyniki testów tego algorytmu dla modelowych funkcji matematycznych. Rozdział kolejny (5.) to opis metody wymuszającej zachowanie topologii cząsteczki w trakcie optymalizacji oraz testów zaproponowanego mechanizmu dla kilku cząsteczek chemicznych.

Ta część pracy sprawia wrażenie bardzo specjalistycznej i chwilami hermetycznej, co może ograniczać grupę ewentualnych czytelników do wąskiego grona specjalistów. Chwilami miałem wrażenie, że oszczędność w przekazie informacji i wyrażaniu myśli jest jednak zbyt duża jak na pracę doktorską. Brakowało mi przy czytaniu, zwłaszcza części teoretycznej, choćby intuicyjnego objaśnienia powodu stosowania kodowania, operacji genetycznych, czy funkcji przystosowania.

Ostania część pracy to opis zastosowania zaproponowanych metod optymalizacji i procedury zachowania topologii dla konkretnych układów chemicznych. Obliczenia przeprowadzono rzetelnie, choć po raz kolejny brakuje mi konkretnych wniosków wynikających z tych obliczeń.

Od strony technicznej, językowej i co najważniejsze merytorycznej praca napisana jest starannie, choć jak już wspomniałem język jest mocno specjalistyczny a tekst oszczędny. W ocenianej pracy napotkałem stosunkowo niewiele błędów językowych, stylistycznych i pomyłek edytorskich, które pomijam w recenzji. Brakuje mi jednak w pracy szerszego wprowadzenia do tematyki optymalizacji struktury energetycznej cząsteczek, opisu metod używanych w tych zagadnieniach i porównania z innymi metodami, a także identyfikacji problemów, które występują w procesie optymalizacji.

Powyższe wybrane techniczne uwagi nie mają większego znaczenia dla mojej pozytywnej całościowej oceny pracy, otrzymanych wyników i ich prezentacji. Chciałbym jednak otrzymać odpowiedzi na kilka prostych (niewyjaśnionych wystarczająco w pracy zagadnień).

- Na str. 29 przy opisie procesu uczenia się na przykładzie funkcji XOR przyjęto bez wyjaśnienia współczynnik uczenia się na poziomie 0.7. Skąd taki wybór? Czy sprawdzono zależność efektywności metody od tego współczynnika?
- Jaki jest koszt zarządzania dynamicznym rozdzieleniem optymalizacji lokalnych w procesie zrównoleglenia obliczeń?
- O jakich czasach obliczeń możemy mówić w konkretnych, opisanych w pracy, zastosowaniach. Jaka jest zależność czasu obliczeń od użytych metod?

W podsumowaniu chcę stwierdzić, iż recenzowaną rozprawę doktorską mgr Anny Styrzc oceniam bardzo pozytywnie. Podjęty przez doktorantkę program badawczy dotyczy tematyki o podstawowym znaczeniu dla rozwoju metod optymalizacji struktury geometrycznej cząsteczek.

Mgr Anna Styrzc wykazała się dużą wiedzą ogólną oraz biegłością w wykorzystaniu zaawansowanych narzędzi teoretycznych, algorytmów informatycznych, programów komputerowych, tworzenia własnego kodu komputerowego, oraz przeprowadzania wnikliwej analizy i opracowania otrzymanych wyników. Świadczy to o dobrym przygotowaniu doktorantki do efektywnego prowadzenia pracy naukowej. Wyniki przedstawione w pracy zostały już jakiś czas temu opublikowane w czasopiśmie Applied Mathematics and Computer Science.

W mojej ocenie ilość i jakość otrzymanych wyników w zupełności spełnia wymagania stawiane rozprawom doktorskim. Nie mam więc wątpliwości, że rozprawa mgr Anny Styrzc spełnia warunki określone w art.13 Ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym z dnia 14 marca 2003 r. stawiane rozprawom doktorskim i wnoszę o dopuszczenie jej autorki do kolejnych etapów przewodu doktorskiego.



Ireneusz Grabowski