



---

**POLITECHNIKA POZNAŃSKA**

---



**INSTYTUT  
INFORMATYKI**

**WYDZIAŁ INFORMATYKI I TELEKOMUNIKACJI  
Instytut Informatyki**

ul. Piotrowo 2, 60-965 Poznań, tel. +48 61 665 2997, fax +48 61 877 1525  
e-mail: office\_cs@put.poznan.pl, www.put.poznan.pl

**Poznań, 2025-02-11**

**dr hab. inż. Agnieszka Rybarczyk  
Instytut Informatyki  
Politechnika Poznańska**

## **RECENZJA ROZPRAWY DOKTORSKIEJ**

**mgr inż. Jarosława Gila**

**„Rozwijanie narzędzi obliczeniowych oraz modeli matematycznych  
dla systemów reakcji–adwekcji–dyfuzji”**

**Promotor: prof. dr hab. inż. Andrzej Polański**

**Promotor pomocniczy: dr inż. Tomasz Jarosz**

**Dyscyplina: Informatyka techniczna i telekomunikacja**



**WYDZIAŁ INFORMATYKI I TELEKOMUNIKACJI**  
**Instytut Informatyki**

ul. Piotrowo 2, 60-965 Poznań, tel. +48 61 665 2997, fax +48 61 877 1525  
e-mail: office\_cs@put.poznan.pl, www.put.poznan.pl

## **1. Problematyka naukowa oraz przedmiot rozprawy**

Procesy reakcji-adwekcji-dyfuzji stanowią fundament wielu zjawisk fizycznych, chemicznych i biologicznych. Zrozumienie dynamiki tych procesów wymaga zaawansowanego modelowania matematycznego oraz efektywnych algorytmów numerycznych, które pozwolą na precyzyjne przewidywanie i analizę ich przebiegu. Rozwój metod obliczeniowych w tym obszarze ma kluczowe znaczenie zarówno dla badań teoretycznych, jak i zastosowań praktycznych, m.in. w inżynierii materiałowej, medycynie oraz bezpieczeństwie publicznym. Wykorzystanie algorytmów numerycznych pozwala nie tylko na symulację i analizę zjawisk trudnych do zbadania w warunkach eksperymentalnych, ale również docelowo na optymalizację procesów technologicznych oraz przewidywanie ich długofalowych skutków.

W recenzowanej pracy podjęto się opracowania nowych schematów obliczeniowych dla wybranych układów reakcji-adwekcji-dyfuzji. Skupiono się na trzech kluczowych zagadnieniach: modelowaniu procesu powstawania wzorców Liesegang - zjawiska spontanicznego formowania się periodycznych struktur w roztworach chemicznych, modelowaniu procesu detonacji materiałów wybuchowych i analizie propagacji fali detonacyjnej w oparciu o równania adwekcji i reakcji, a także modelowaniu ewolucji populacji komórkowych, w szczególności poprzez zastosowanie algorytmu Gillespiego do opisu dynamiki mutacji i selekcji w dużych populacjach komórkowych.

## **2. Analiza treści rozprawy oraz uzyskanych wyników**

### **2.1. Treść rozprawy**

Rozprawa składa się ze spisu treści, streszczenia w języku polskim oraz angielskim, ośmiu rozdziałów wraz z podsumowaniem, bibliografii, spisu rysunków, tabel i algorytmów oraz opisu dorobku naukowego Autora. Rozdziały pierwszy, drugi oraz trzeci określają zakres tematyczny



**WYDZIAŁ INFORMATYKI I TELEKOMUNIKACJI  
Instytut Informatyki**

ul. Piotrowo 2, 60-965 Poznań, tel. +48 61 665 2997, fax +48 61 877 1525  
e-mail: office\_cs@put.poznan.pl, www.put.poznan.pl

rozprawy, uzasadniają jej znaczenie w kontekście współczesnych badań nad systemami reakcji-adwekcji-dyfuzji oraz formułują cele i tezy pracy. Rozdział czwarty poświęcony jest omówieniu zagadnień związanych z tematyką pracy, wprowadza podstawowe pojęcia matematyczne i fizyczne związane z modelowaniem reakcji-adwekcji-dyfuzji.

Rozdziały 5, 6 i 7 stanowią kluczową część pracy, zawierającą oryginalne wyniki badań. Rozdział 5 przedstawia modelowanie procesu powstawania wzorców Liesegang. Autor przeprowadził numeryczne symulacje opierające się na równaniach reakcji-dyfuzji, weryfikując otrzymane wyniki z danymi literaturowymi oraz prawami Matalona-Packtera.

Rozdział 6 skupia się na modelowaniu detonacji materiałów wybuchowych i propagacji fali uderzeniowej. Przedstawiono tutaj zastosowanie równań Naviera-Stokesa oraz warunków Rankine'a-Hugoniota do analizy dynamicznych zmian parametrów fizycznych w trakcie eksplozji. Autor przeprowadził numeryczne eksperymenty, które wykazały wysoką zgodność wyników symulacyjnych z danymi eksperymentalnymi.

Rozdział 7 poświęcony jest modelowaniu ewolucji populacji komórkowych przy użyciu algorytmu Gillespiego. Autor wprowadził modyfikacje do klasycznego algorytmu, pozwalające na efektywne modelowanie dużych populacji, co ma szczególne znaczenie w badaniach nad dynamiką mutacji nowotworowych. Wykazano, że zastosowane podejście pozwala na uzyskanie precyzyjnych danych na temat zmian struktury populacji komórkowych, a uzyskane wyniki zostały zweryfikowane na podstawie danych z bazy TCGA.

Rozdział 8 stanowi podsumowanie pracy, w którym Autor zestawia kluczowe wyniki, wskazuje na ograniczenia zastosowanych metod oraz sugeruje potencjalne kierunki dalszych badań.

Układ pracy oceniam jako prawidłowy.



WYDZIAŁ INFORMATYKI I TELEKOMUNIKACJI  
Instytut Informatyki

ul. Piotrowo 2, 60-965 Poznań, tel. +48 61 665 2997, fax +48 61 877 1525  
e-mail: office\_cs@put.poznan.pl, www.put.poznan.pl

## 2.2. Najważniejsze wyniki przedstawione w rozprawie

Za najważniejsze wyniki przedstawione w rozprawie uznać można:

1. Opracowanie i rozwinięcie zaawansowanych modeli matematycznych oraz narzędzi obliczeniowych dla układów reakcji-adwekcji-dyfuzji, umożliwiających dokładne symulacje skomplikowanych procesów chemicznych, fizycznych i biologicznych, uwzględniając kluczowe parametry wpływające na analizowane procesy zblizając obliczenia do rzeczywistych warunków.
2. Opracowanie modelu numerycznego powstawania wzorców Lieseganga, opartego na zjawiskach dyfuzji, aglomeracji i reakcji, spełniającego założenia prawa Matalona-Packtera, umożliwiającego określenie ilości substancji dyfundujących i strącających w układzie oraz przewidywanie zmian jego składu w czasie.
3. Opracowanie modelu detonacji materiałów wybuchowych opartego na równaniach Naviera-Stokesa i warunkach Rankine'a-Hugoniota umożliwiło realistyczne przewidywanie propagacji fali detonacyjnej. Strukturyzacja procesu na podprocesy ułatwiła jego opis, zachowując jednocześnie zależności pomiędzy parametrami.
4. Modyfikacja algorytmu Gillespiego umożliwiła efektywne modelowanie ewolucji populacji komórkowych obejmujących miliony komórek. Walidacja wyników, przeprowadzona na podstawie danych z bazy TCGA, potwierdziła poprawność opracowanego modelu.

Opracowane modele i algorytmy stanowią istotny wkład w rozwój metod numerycznych i mogą znaleźć zastosowanie zarówno w badaniach akademickich, jak i w praktycznych aplikacjach w chemii, fizyce oraz biologii obliczeniowej.



**WYDZIAŁ INFORMATYKI I TELEKOMUNIKACJI**  
**Instytut Informatyki**

ul. Piotrowo 2, 60-965 Poznań, tel. +48 61 665 2997, fax +48 61 877 1525  
e-mail: office\_cs@put.poznan.pl, www.put.poznan.pl

### 2.3. Uwagi dyskusyjne

Praca jest poprawnie napisana, a poniższe uwagi mają charakter dyskusyjny i nie wpływają w istotny sposób na wartość wyników w niej zaprezentowanych. Oto niektóre z nich:

- W niektórych miejscach pojawiają się opisy, które nie zostały opatrzone odpowiednim odnośnikiem do literatury np. w podrozdziałach 6.1.3, 6.1.4, 6.1.5, 7.4.4.
- W części dotyczącej modelowania zjawiska powstawania wzorców Lieseganga wspomniano o możliwości zastosowania tych modeli w projektowaniu leków o kontrolowanym uwalnianiu. Proszę Doktoranta o rozwinięcie tej koncepcji: w jaki sposób numeryczne modele wzorców Lieseganga mogłyby zostać wykorzystane do precyzyjnego projektowania leków, a także jakie wyzwania wiązałyby się z ich praktycznym zastosowaniem w tej dziedzinie?
- Jednym z celów rozprawy było opracowanie zmodyfikowanego algorytmu Gillespiego, optymalizującego czas symulacji ewolucji wysokoliczebnych populacji komórkowych przy zachowaniu dokładności danych symulacyjnych. W tym celu opracowano jego macierzową wersję, jednak nie przeprowadzono analizy jej złożoności obliczeniowej (czasowej i pamięciowej). Jaka jest złożoność macierzowego algorytmu Gillespiego?
- Dlaczego w modelowaniu rozwoju populacji na poziomie makroskopowym wybrano algorytm Gillespiego? Czy rozważano zastosowanie alternatywnych podejść, takich jak systemy wieloagentowe? Jak, zdaniem Doktoranta, zastosowanie systemów wieloagentowych wpłynęłoby na dokładność symulacji, efektywność obliczeniową oraz odwzorowanie dynamiki populacji?
- Dla każdego danych eksperymentalnych wykorzystanych w analizach warto rozważyć dodanie osobnych sekcji szczegółowo je charakteryzujących, nawet jeśli pochodzą one z literatury. W szczególności przydatne byłoby uzupełnienie opisu danych zebranych przez Sieć



**WYDZIAŁ INFORMATYKI I TELEKOMUNIKACJI**

**Instytut Informatyki**

ul. Piotrowo 2, 60-965 Poznań, tel. +48 61 665 2997, fax +48 61 877 1525

e-mail: office\_cs@put.poznan.pl, www.put.poznan.pl

Badawcą Łukasiewicz (Instytut Przemysłu Organicznego, Grupa Badawcza Technik Wybuchowych) na potrzeby modelowania detonacji oraz danych z bazy TCGA (The Cancer Genome Atlas) wykorzystywanych do modelowania ewolucji populacji komórkowych.

## 2.4. Uwagi redakcyjne

Praca została przygotowana starannie i przejrzyście, nie mam do niej większych uwag.

Przykładowe zostały przedstawione poniżej:

- Tzw. drobne literówki np.  
str. 16 (...) zależu, [powinno być: zależy],  
str 53 (...) reakcji [powinno być: reakcji]
- Wzory (43) i (44) na str. 42 są zamienione – ich przypisanie do procesów powinno być odwrotne.
- Nie zawsze zachowana jest konsekwencja w rozmieszczeniu rysunków względem tekstu. W niektórych przypadkach rysunki znajdują się nad, a w innych pod fragmentem, który je opisuje (np. str. 59, str. 66, str. 105), a także nie zawsze występują w kolejności zgodnej z ich numeracją (str. 68). Może to utrudniać czytelnikowi orientację w treści.



WYDZIAŁ INFORMATYKI I TELEKOMUNIKACJI  
Instytut Informatyki

ul. Piotrowo 2, 60-965 Poznań, tel. +48 61 665 2997, fax +48 61 877 1525  
e-mail: office\_cs@put.poznan.pl, www.put.poznan.pl

### 3. Podsumowanie i konkluzja oceny

Praca odzwierciedla szerokie zainteresowania badawcze Autora oraz jego dogłębną znajomość tematu. Wymienione wcześniej uwagi dyskusyjne i drobne zastrzeżenia nie umniejszają jego osiągnięć ani nie wpływają istotnie na wartość i jakość przedstawionych w pracy wyników. Podsumowując, można stwierdzić, że kluczowe rezultaty pracy potwierdzają skuteczną realizację założonego w pracy celu.

Biorąc pod uwagę opinie zaprezentowane w poprzednich punktach i wymagania zdefiniowane przez art. 187 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (z późniejszymi zmianami) moja ocena rozprawy pod względem trzech podstawowych kryteriów jest następująca:

A. Czy rozprawa zawiera oryginalne rozwiązanie problem naukowego?

<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Zdecydowanie TAK	Raczej TAK	Trudno powiedzieć	Raczej NIE	Zdecydowanie NIE

B. Czy po przeczytaniu rozprawy zgadzasz się, że kandydat posiada ogólną wiedzę teoretyczną w dyscyplinie informatyka techniczna i telekomunikacja?

<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Zdecydowanie TAK	Raczej TAK	Trudno powiedzieć	Raczej NIE	Zdecydowanie NIE

C. Czy kandydat umiejętności samodzielne prowadzenia pracy naukowej?

<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Zdecydowanie TAK	Raczej TAK	Trudno powiedzieć	Raczej NIE	Zdecydowanie NIE



**WYDZIAŁ INFORMATYKI I TELEKOMUNIKACJI**  
**Instytut Informatyki**

ul. Piotrowo 2, 60-965 Poznań, tel. +48 61 665 2997, fax +48 61 877 1525  
e-mail: office\_cs@put.poznan.pl, www.put.poznan.pl

W związku z powyższym, stwierdzam, że praca pt. „Rozwijanie narzędzi obliczeniowych oraz modeli matematycznych dla systemów reakcji–adwekcji–dyfuzji” spełnia wymagania stawiane rozprawom doktorskim przez Ustawę o stopniach naukowych i tytule naukowym, i w konsekwencji może stać się przedmiotem publicznej obrony. Wnoszę zatem o dopuszczenie mgr inż. Jarosława Gila do dalszych etapów postępowania o nadanie stopnia doktora nauk inżynieryjno-technicznych w dyscyplinie informatyka techniczna i telekomunikacja.

Dr hab. inż. Agnieszka Rybarczyk