Dr hab. inż. Zbigniew Świder, prof. PRz
Katedra Informatyki i Automatyki
Politechnika Rzeszowska im. Ignacego Łukasiewicza
al. Powstańców Warszawy 12
35-959 Rzeszów

Rzeszów, 31.01.2025

RECENZJA ROZPRAWY DOKTORSKIEJ

Tytuł rozprawy:	Rozwijanie narzędzi obliczeniowych oraz modeli matematycznych dla systemów reakcji-adwekcji-dyfuzji
Autor rozprawy:	mgr inż. Jarosław Gil
Promotor rozprawy:	prof. zw. dr hab. inż. Andrzej Polański
Promotor pomocniczy:	dr inż. Tomasz Jarosz
Dziedzina:	nauki inżynieryjno-techniczne
Dyscyplina:	informatyka techniczna i telekomunikacja

Niniejsza recenzja została przygotowana na zlecenie Rady Dyscypliny Informatyka Techniczna i Telekomunikacja Politechniki Śląskiej.

1. Cel i zakres rozprawy

Rozprawa doktorska mgr inż. Jarosława Gila dotyczy metod i schematów obliczeniowych dla modelowania wybranych zjawisk chemicznych, fizycznych i biologicznych. Kluczowymi aspektami było wzięcie pod uwagę wszystkich istotnych parametrów procesu zbliżających wyniki symulacji do badań eksperymentalnych. Dokonano również implementacji algorytmów realizujących wybrane schematy obliczeniowe i porównano otrzymane wyniki z danymi literaturowymi.

W ramach pracy przeanalizowano i wykonano symulacje numeryczne następujących procesów:

- powstawanie wzorców Lieseganga w procesie strącania (system dyfuzji-aglomeracji-reakcji)
- detonacja materiału wybuchowego i propagacja fali detonacyjnej (system adwekcji-reakcji)
- ewolucja populacji komórkowych i populacji mikroorganizmów (procesy stochastyczne).

W rozprawie postawiono następujące hipotezy:

1. Na podstawie równania dyfuzji, modelu kinetycznego procesu chemicznego oraz teorii przesycenia można określić sumaryczne równanie cząstkowe stanu składu, a jego rozwiązanie określa zmiany stanu układu w czasie oraz kształt stacjonarnego procesu strącania.
2. Przedstawienie procesu detonacji i propagacja fali uderzeniowej w postaci sekwencji zdarzeń (opisanych odpowiednimi równaniami) zachowuje zależności pomiędzy parametrami oraz pozwala wyznaczyć kształt fali, w tym nieciągłe zmiany na jej froncie.
3. Wykorzystanie algorytmu Gillespiego oraz struktury macierzy rzadkich (do przechowywania indeksów mutacji oraz komórek) znacząco wpływa na czas obliczeń, szczególnie dla symulacji wysokoliczebnych populacji oraz tworzenia wysokorozdzielczych statystyk.
4. Grupowanie danych ze względu na charakterystyczne cechy oraz transkrypcja materiału genetycznego znacząco zmniejsza czas symulacji dla wielkich populacji.

2. Struktura i zawartość rozprawy

Recenzowana praca doktorska obejmuje formalnie 4 główne rozdziały, poprzedzone wstępem oraz zakończone podsumowaniem. Zasadnicza część rozprawy liczy łącznie 116 stron, a także zawiera bibliografię liczącą 74 pozycje oraz spis rysunków, tabel i algorytmów.

Praca rozpoczyna się wstępem, w którym przedstawiono cel i zakres pracy oraz tezy postawione w rozprawie. Autor krótko przypomina aspekty związane z modelowaniem numerycznym procesów chemicznych, fizycznych czy biologicznych, zwracając przy tym uwagę na czynniki przybliżające wyniki symulacyjne do danych eksperymentalnych.

W rozdziale 4 przypomniano podstawowe równania kinetyczne reakcji chemicznych, równanie adwekcji, dyfuzji oraz najczęściej stosowane opisy procesów stochastycznych. Omówiono również wybrane metody numerycznego rozwiązywania równań różniczkowych zwyczajnych (Eulera, Rungego-Kutty) oraz cząstkowych (metoda charakterystyk).

W rozdziale 5 omówiono zjawisko powstawania wzorców Lieseganga w procesie strącania osadu, a więc tworzenie pasków, prążków czy pierścieni w obszarze ruchomego frontu reakcji chemicznej. Podano prawo Matalona-Packtera opisujące związek pomiędzy stężeniem substancji wprowadzanej do układu, a odległością między kolejnymi strukturami samoorganizującymi się, przedstawiono równania opisujące proces oraz model numeryczny z koniecznymi warunkami początkowymi. Na koniec rozdziału zamieszczono opracowany na potrzeby symulacji pseudokod (dla pakietu Matlab) oraz omówiono otrzymane wyniki.

W rozdziale 6 przedstawiono kolejne kroki modelowania procesu detonacji materiału wybuchowego (trotylu) oraz propagacji powstającej fali uderzeniowej. Przypomniano podstawowe równanie stanu gazu doskonałego, stosowane modele CJ (*Chapman, Jouguet*), ZND (*Zeldovich, von Neumann, Döring*) oraz równania BKW (*Becker, Kistiakowsky, Wilson*) i JWL (*Jones, Wilkins, Lee*). Omówiono proces detonacji jako gwałtowny rozkład materiału wybuchowego prowadzący do wydzielenia dużej ilości energii w bardzo krótkim czasie, w tym warunki Rankine'a-Hugoniota, równania frontu uderzeniowego, propagacji fali uderzeniowej oraz dopalania fali podetonacyjnej. Następnie podano proponowany algorytm symulacji, parametry początkowe procesu oraz otrzymane wyniki. Na koniec zostały one porównane z danymi doświadczalnymi dla wybuchu sferycznego ładunku trotylu.

W rozdziale 7 opisano zastosowanie algorytmu Gillespiego do modelowania rozwoju klonalnego populacji komórek oraz populacji mikrobiologicznych. Podano podstawowe zasady działania algorytmu wraz z przykładami zastosowań w kontekście biologii komórkowej oraz mikrobiologii. Przedstawiono podstawy teoretyczne rozwoju klonalnego, w tym sam algorytm Gillespiego, stosowane scenariusze ewolucji i typy mutacji oraz modele stochastyczne (wersje tau-leap, zbinowana oraz macierzowa) i deterministyczne (propagacja korzystnych i negatywnych mutacji). Na koniec zamieszczono wyniki symulacji algorytmu Gillespiego w języku Python i porównanie algorytmów w różnych wersjach pod kątem czasu obliczeń oraz zajętości pamięci.

W rozdziale 8 przypomniano cel rozprawy, podsumowano uzyskane wyniki oraz pokazano ich związek z przedstawionymi wcześniej tezami.

3. Najważniejsze osiągnięcia rozprawy

Biorąc pod uwagę zawartość pracy oraz pozytywną ocenę jej zawartości merytorycznej, za główne osiągnięcia Autora należy uznać wyznaczenie schematu obliczeniowego, jego implementację (Matlab, Python) i parametryzację, wykonanie symulacji oraz interpretację wyników (wraz z porównaniem z danymi rzeczywistymi otrzymanymi na podstawie dostępnej literatury). Opracowane przez Autora algorytmy są dostępne w repozytorium *github*.

Najważniejszymi elementami rozprawy, decydującymi o jej wartości naukowej i badawczej, są:

- implementacja algorytmu (skrypty pakietu Matlab) symulującego proces powstawania zjawiska pierścieni Lieseganga w kontrolowanym środowisku dla geometrii 1D oraz 2D
- opracowanie programu (w języku Python) dla symulacji procesu detonacji trotylu oraz propagacji powstającej fali uderzeniowej dla geometrii 1D oraz 2D
- porównanie wyników symulacji z badaniami na podstawie danych literaturowych
- modyfikacje algorytmu Gillespiego (wykorzystanie macierzy rzadkich do przechowywania danych) dla symulacji dużych populacji komórkowych oraz mikroorganizmów
- modyfikacje algorytmu Gillespiego dla generowania wysokorozdzielczych statystyk, w tym dotyczących propagacji ewolucji w oparciu o fale mutacji i fitnessu oraz statystyki VAF
- implementacja algorytmu Gillespiego w postaci programu w języku Python.

Autor podjął się realizacji ciekawego oraz istotnego z punktu widzenia zastosowań praktycznych tematu badawczego. Niektóre wyniki badań zostały wcześniej opublikowane we współautorskich pracach w języku angielskim, co świadczy pozytywnie o dużej wiedzy Autora rozprawy w zakresie poruszanej tematyki badawczej.

4. Poprawność pracy i uwagi krytyczne

Poprawność treści rozprawy nie wzbudza istotnych zastrzeżeń, a stwierdzenia w niej zawarte mogą być podstawą do dalszych badań, co wynika z zawartych w pracy podstaw teoretycznych popartych wynikami przeprowadzonych symulacji.

Jednocześnie Autor nie ustrzegł się pewnych drobnych niedociągnięć, a wśród uwag o charakterze krytycznym, a po trosze i dyskusyjnym, można wymienić następujące:

1. Na stronie 38 napisano: „*Model został zweryfikowany wykorzystując zasady opisane w (5.1).*". Czy jeden zestaw danych oraz zasady z (5.1) wystarczą i są dowodem na poprawność modelu i programu symulacyjnego oraz gwarancją, że dla innych parametrów wejściowych otrzymamy poprawne wyniki (zgodne z eksperymentem procesowym)? W rozdziale 5 przedstawiono wyniki symulacji dla jednego zestawu danych, natomiast nie zamieszczono (dla porównania) rysunku z rzeczywistego procesu – czy one się pokrywają i w jakiej części?

2. W punkcie 6.3 (str. 64) przedstawiono wyniki symulacji dla fali uderzeniowej (proces detonacji) i napisano „*Na podstawie danych zawartych na rysunku 10 model został zweryfikowany mierząc wartości nadciśnienia w czterech odległościach od centrum inicjacji (Rysunek 11).*", ale skale na osi pionowej są w różnych jednostkach (kPa, bar), a wartości maksymalne (np. pierwszego piku w odległości 0.5 m) nie pokrywają się (odpowiednio 3.1 [bar], 180 [kPa]). Jak więc zweryfikowano poprawność modelu i rezultaty symulacji z danymi pomiarowymi?

3. W podpunkcie 7.4.2 napisano „*Algorytm w wersji tau-leap (Algorytm 5) oraz algorytm wykorzystujący macierz mutacji (Algorytm 7) pozwalają za uzyskanie jednakowych wyników.*", a w dalszej części (str. 97) „*Ustalane wartości średnie parametrów ewolucyjnych nie powodowały zmian w statystykach rozwoju całej populacji (Rysunek 26).*" Zatem czy jedynym potwierdzeniem tego jest porównanie fali mutacji (Rysunek 26) dla tej symulacji, czy też przeprowadzono inne testy potwierdzające uzyskanie zbliżonych wyników tych trzech algorytmów dla różnych parametrów wejściowych?

4. Na stronie 109 pokazano dwie statystyki VAF (dla danych rzeczywistych oraz symulacyjnych) i na stronie 111 napisano „*Zauważalne jest podobieństwo w rozkładzie histogramu. (...) Rozkład histogramów jest podobny w przypadku danych rzeczywistych i danych symulacyjnych.*".

Porównując rysunki 37 oraz 38 trudno jednak dostrzec wyraźne podobieństwo – maksymalne wartości znacznie się różnią (650 vs 450) oraz wysokości słupków w przedziale od 0 do 0.2 też są inne. Jakie więc (zdaniem Autora) muszą być różnice w histogramach, aby nie można było stwierdzić, że są one podobne, czyli gdzie jest granica „podobne czy niepodobne"?

5. W podsumowaniu (str.116 na dole) Autor napisał: „*Wyznaczenie schematów obliczeniowych oraz zastosowanie modelowania numerycznego do opisu i symulacji rzeczywistych zjawisk chemicznych, fizycznych i biologicznych umożliwia dokładniejszą analizę procesów.*". Oczywiście, ale pod warunkiem, że symulacje są poprawne i właściwie modelują rzeczywistość. Czy i w jaki sposób zostało to zweryfikowane (udowodnione) przez Autora, czy też dopiero będzie badane w przyszłych pracach?

6. Drobne uwagi szczegółowe (najważniejsze):
   - str. 13 – jest „w pierwszym rozdziale" – raczej „w pierwszym podrozdziale"
   - str. 13, 14, 15, 16, 17, 18, 20, 21, 23, 25, 28, 29, 31, … – interpunkcja (przecinki)
   - str. 14, 15, 19, 22, 23, 24, 27, … – jest „Gdzie:" - raczej „gdzie:" (od małej litery)
   - str. 14, p.4.4.1 – jest „zależu" – powinno być „zależy"
   - str. 27-28 – tytuł tabeli pomieszany z tekstem – powinien być tylko tytuł tabeli i sama tabela, a jej ew. opis czy objaśnienie umieszczone normalnie w tekście (jako zwykły akapit)
   - str. 29, 31, 32, 34, … – znowu tytuł tabeli, rysunku lub pseudokodu pomieszany z tekstem
   - str. 32, 57, 58, 67, … – za mała czcionka na rysunku (w porównaniu z tekstem czy Rys. 2)
   - str. 69 – zupełnie nieczytelne ilustracje oraz opisy osi na Rys.13 (za mała czcionka)
   - str. 88 – za mała czcionka w opisach sygnałów na Rys. 19 (nieczytelne)
   - str. 95 (p. 7.4.2) – jest „uzyskanie takich samych wyników" – lepiej „zbliżonych"
   - str. 99 – za mała czcionka w opisach osi na Rys. 27 (nieczytelne).

5. Podsumowanie

Przytoczone wyżej uwagi dyskusyjne nie umniejszają zasług Autora ani nie kwestionują przedstawionych osiągnięć, a opisywana w pracy problematyka dotyczy aktualnych i interesujących zagadnień naukowych. Recenzowana praca zasługuje na pozytywną ocenę merytoryczną i wnosi istotny oraz oryginalny wkład w dyscyplinę informatyka techniczna i telekomunikacja. Postawione cele i zadania pracy zostały zrealizowane, a jej tematyka wpisuje się we współczesny nurt badań w tym zakresie.

Stwierdzam zatem z pełnym przekonaniem, że opiniowana rozprawa Pana mgr inż. Jarosława Gila pt. „*Rozwijanie narzędzi obliczeniowych oraz modeli matematycznych dla systemów reakcji-adwekcji-dyfuzji*" zawiera samodzielne rozwiązanie ważnego i istotnego problemu naukowego, jednocześnie spełniając wszystkie wymagania przewidziane dla rozpraw doktorskich w aktualnie obowiązującej Ustawie o Tytule Naukowym i Stopniach Naukowych.

W związku z tym stawiam wniosek o **dopuszczenie rozprawy doktorskiej do publicznej obrony**.

Dr hab. inż. Zbigniew Świder