



Marek Litniewski, dr hab.
Instytut Chemii Fizycznej PAN
Kasprzaka 44/52
01-224 Warszawa
mark@ichf.edu.pl

Warszawa 14-09-2015

Recenzja rozprawy doktorskiej magistra Szymona Winczewskiego pt.: Algorytmy do lokalizacji dyslokacji w materiałach symulowanych numerycznie.

Rozprawa magistra Szymona Winczewskiego pt.: „Algorytmy do lokalizacji dyslokacji w materiałach symulowanych numerycznie” napisana pod kierunkiem profesora dr hab. inż. Jarosława Rybickiego przedstawia wysoce efektywną metodę obliczeniową pozwalającą na znalezienie dyslokacji a następnie śledzenie jej ruchu w symulacjach ruchliwości dyslokacji za pomocą metody dynamiki molekularnej.

Struktura rozprawy jest typowa dla prac doktorskich. Autor rozpoczyna od kilkunastu wstępu, w którym poza krótkim rysem historycznym dotyczącym symulacji molekularno-dynamicznych w zastosowaniu do dyslokacji, przedstawia podstawowe informacje nt. dotychczas używanych uniwersalnych metod lokalizacji dyslokacji ODDA i DXA koncentrując się na ich wysokiej czasochłonności w zastosowaniu do śledzenia ruchu dyslokacji symulowanego powszechnie stosowaną metodą PAD. W dalszej części wstępu autor omawia krytycznie prostsze metody śledzenia dyslokacji przedstawiając następnie cele rozprawy i założenia, jakie nowa metoda powinna spełniać. Pewną wątpliwość budzi tu we mnie celowość warunku WG4 zgodnie, z którym metoda powinna być prosta, tj. jedyne dane wejściowe powinny stanowić dane o położeniach atomów. Prostota konstrukcji nie może być argumentem samym w sobie. W tym wypadku rozpatrywanie np. zamiast położenia dla danego czasu kilku położenia w odstępach co krok pozwoliło by na uśrednienie po czasie co powinno znacznie ograniczyć wpływ fluktuacji termicznych.

Główna część pracy jest podzielona na dwie części. W pierwszej, na ok. 35 stronach autor przedstawia podstawy teoretycznych pracy. Omawia podstawowe informacje nt. dyslokacji oraz ich ruchu. Następnie autor przechodzi do omówienia metody dynamiki molekularnej. Przedstawia używany dalej w symulacjach algorytm Verlet'a oraz metody szybkiej identyfikacji najbliższych sąsiadów: listę Verleta i metodę cel połączonych. W dalszej części rozdziału 2 przedstawiona zostaje dość szczegółowo metoda PAD oraz używany w symulacjach potencjał MEAM/Spline. Na koniec tego rozdziału autor omawia metodę BOP. Generalnie, ta literaturowa część pracy dość dobrze przedstawia zagadnienia fizyczne będące w dalszej części tematem symulacji jak i zastosowane metody. Szkoda tylko, że metoda BOP potraktowana została trochę jak „spadająca z nieba” a będące punktem wyjścia harmoniki sferyczne zaistniały tylko, jako funkcje służące do zdefiniowania parametrów. Użycie skrótu SH zamiast pełnej

nazwy uważam w zastosowaniu do harmonik sferycznych za zdecydowanie przesadne. Niezrozumiałe jest również prezentowanie listy Verleta i metody cel połączonych, jako alternatywnych, podczas gdy absolutnym standardem szczególnie w przypadku symulacji cieczy i gazów jest połączenie obu metod. Bardzo nieszczęśliwym jest również użycie na str. 25 słowa iteracja w zastosowaniu do metody Verleta gdyż w przypadku metod numerycznego całkowania równań ruchu iteracja oznacza wielokrotne obliczanie wartości dla tego samego czasu w celu rozwiązania równań w algorytmach typu implicite (metoda niejawna), podczas gdy algorytm Verleta jest metodą explicite (jawną).

W drugiej, podstawowej części pracy, składającej się z rozdziałów 3, 4 i 5 autor na blisko stu stronach przedstawia nową metodę numeryczną pozwalającą w wysoce optymalny sposób na lokalizację i śledzenie dyslokacji symulowanej metodą PAD. Rozdział 3 poświęcony jest optymalizacji oryginalnie wysoko niewydajnej metody BOP. Do rozdziału tego nie mam żadnych zastrzeżeń. Opis metody optymalizacji jest całkowicie wystarczający i w pełni pozwala na samodzielne napisanie odpowiedniej procedury. Również testy mające na celu określenie wystarczającego rozmiaru siatki interpolacyjnej jak i porównanie czasochłonności nowej metody z konkurencyjnymi są absolutnie wystarczające. Należy podkreślić, że w wyniku zastosowanej optymalizacji autorowi udało się uzyskać metodę kilkadziesiąt razy szybszą od oryginalnej, co przesunęło ją z obszaru „niestosownych” do wysoce konkurencyjnych. Optymalizacja, szczególnie wysoka optymalizacja, jest zazwyczaj bardzo pracochłonnym i niezbyt zajmującym zajęciem. Praca wykonana przez mgr. Winczewskiego dobitnie pokazuje, że zajęcie to może być bardzo owocne zupełnie zmieniając nasz stosunek do danej metody.

W rozdziale 4 przedstawiono metodę lokalizacji i śledzenia ruchu dyslokacji wykorzystującą specyfikę metody PAD. Metoda proponowana przez autora (oznaczana za autorem metodą f-DTA) po początkowym określeniu położenia rdzenia dyslokacji poprzez analizę parametrów BOP w całym obszarze symulacji określa to położenie w następnych pomiarach wykorzystując poprzednie położenie, co bardzo skraca czas potrzebny do wykonania pomiaru. Określenie położenia wszystkich atomów wchodzących w skład dyslokacji pozwala na pełne opisanie zarówno ruchu jak i kształtu ewoluującej dyslokacji. W prezentowanej metodzie na szczególną uwagę zasługuje identyfikacja a następnie rewizja atomów należących do rdzenia dyslokacji wykorzystując elementy teorii grafów. Autor przywiązuje bardzo dużą wagę do jak największego skrócenia czasu egzekucji programu starając się jednocześnie utrzymać dokładność metody na odpowiednim poziomie. Ponieważ podstawowa metoda określania płaszczyzn krystalograficznych okazuje się nie być niezawodna, autor wprowadza dodatkowy test weryfikujący realność płaszczyzn krystalograficznych poprzez warunki (4.37) i (4.38). Niestety, teoretycznie możliwe jest, choć bardzo mało prawdopodobne, dołączenie w ten sposób fałszywej płaszczyzny nie do tej, z którą powinna być połączona. Szkoda, że autor nie rozważył jakiegoś wzmocnienia weryfikacji poprzez np. kryterium ilości atomów wchodzących w skład płaszczyzny. Autor nie podał również żadnego uzasadnienia dla przyjętego rozmiaru obszaru śledzenia $W_t = 10 \text{ \AA}$. Wielkość ta jest, co prawda, później weryfikowana, ale jakakolwiek argumentacja dla takiej a nie innej wartości wyjściowej by się przydała. W

sumie jednak metoda przedstawiona w rozdziale 4 jest bardzo interesująca i świadczy o dużej fachowości oraz pomysłowości autora.

W rozdziale 5 autor przedstawia wyniki symulacji komputerowych, których głównym celem jest zaprezentowanie metody f-DTA w działaniu. Symulacje wykonane zostały metodą PAD dla modelu molibdenu dla dwóch rozmiarów układów o całkowitej liczbie atomów $N = 165726$ i 1332504 i dwóch temperatur $T = 20$ oraz 200K . Dla każdego układu w danej temperaturze wykonano 17 przebiegów symulacyjnych przy różnych wartościach naprężeń od 0.01 do 1.0 GPa. Do utrzymania temperatury użyto termostatu o nieobciążonym profilu, co dobrze świadczy o znajomości problematyki symulacji komputerowych przez autora. Bardzo istotnym elementem tego rozdziału jest wyznaczenie zakresów parametrów metody BOP niezbędnych do identyfikacji atomów podejrzanych o przynależność do rdzenia dyslokacji. Analiza histogramów z Rys. 5.1 – 5.4 brzmi sensownie, ale szkoda, że wyznaczonych zakresów nie zweryfikowano dodatkowo przeprowadzając np. kilka krótkich symulacji dla innych wartości lub używając jakiejś innej metody. W dalszej części rozdziału 5-go przedstawione są wyniki symulacji pokazujące ruchliwość dyslokacji krawędziowej dla różnych N , T oraz wartości naprężeń. Na koniec autor analizuje efektywność zastosowanej metody pokazując m.in., że proponowana metoda jest nieporównanie szybsza niż ODDA. Dalsza recenzja pracy wymaga tutaj komentarza dotyczącego jakości jej wykonania. Czytając pracę odnosi się nieodparte wrażenie, że autor pisząc ją coraz bardziej się spieszył. Ilość prostych błędów i niedopatrzeń gwałtownie narasta wraz z numerem stron tak jakby po zakończeniu symulacji nie było już czasu na dokładne przemyślenie i ponowne przeczytanie opisu. W rezultacie, jakość naprawdę dobrej pracy doktorskiej znacznie się obniża. Pewne objawy widać już w rozdziale 4. W wyniku zlewania się kolorów Rys. 4.2 jest bardzo mało czytelny, czemu łatwo można było zaradzić po prostu go powiększając. Wyraźnym niedopatrzaniem jest też fakt, że orientacja komórki elementarnej w układzie prezentowanym na tym rysunku przedstawiona jest dopiero 20 stron później. W rozdziale 5 błędów jest dużo więcej. Rysunki 5.1 – 5.4 są zupełnie pozbawione opisu i choć wszystkie niezbędne informacje podane są w tekście to niepowtórzenie najważniejszych informacji pod rysunkami bardzo utrudnia ich analizę. Na str. 119 w ramach protokołu symulacji napisane jest, że czas obserwacji jest na tyle długi, że możliwy jest dokładny pomiar prędkości dyslokacji, podczas gdy Rys. 5.6 ewidentnie temu przeczy. W służącym do obliczania prędkości dryfu wzorze (5.8) pojawia się kolizja oznaczeń gdyż Δt jest standardowym oznaczeniem długości kroku wielokrotnie zresztą używanym w pracy. Zupełnie dziwny jest rysunek 5.7 na którym autor przedstawia „pikokształtny” skutek periodycznych warunków brzegowych zamiast po prostu w sposób całkowicie fizyczny uwzględnić te warunki we wzorze (5.8) otrzymując w rezultacie linię prostą. Wyniki przedstawione w tabeli 5.3 pokazują ewidentny size effect czyli zależność wyników od rozmiarów układu. Autor zauważa ten efekt, ale proste stwierdzenie, że przy niskich naprężeniach rozmiar układu powinien być większy niż $100b$ jest dużo za słabe. Tabela 5.3 pokazuje, że efekt jest tak silny, że przy niskich naprężeniach nawet kilkadziesiąt milionów atomów może okazać się niewystarczające. Przy tak silnym size effect zastanawianie się a nawet zauważanie plateau na Rys. 5.8 nie ma moim zdaniem większego sensu. W rozdziale 5.5 od samego początku panuje wielkie zamieszanie. Wielkość t_{MD} nazwana jest czasem symulacji, co jest następnie uściślone, jako „czas potrzebny na przeprowadzenie symulacji dynamiczno-molekularnej” co można zrozumieć tylko jako całkowity czas pojedynczej

symulacji. Tymczasem dalsze rozważania zupełnie temu przeczą. Wartości z Tabel 5.4 i 5.5 w połączeniu z informacjami na temat czasochłonności całych symulacji (str. 140 oraz 120) jak i rozważania na str. 142-143 w tym porównanie z metodą ODDA pokazują, że t_{MD} nie jest czasem pojedynczej symulacji a czasem jednego kroku pomnożonym przez ilość procesorów po to, aby jak rozumiem z grubsza odnieść go do czasu dla pojedynczego procesora. Sugeruje to również jednostka $ms/(krok \times CPU)$, będąca próbą uogólnienia wyniku poprzez uwzględnienie możliwości obliczeniowych maszyny. Użycie tu oznaczenia t_{MD} jest też bardzo nieszczęśliwe. Zastąpienie go np. przez $t_{\Delta t}$ bardzo podniosło by przejrzystość tekstu. Druga analizowana wielkość t_{f-DTA} też początkowo określona jest bardzo ogólnie, jako czas analizy a dopiero na następnej stronie uściślona jako: czas niezbędny na przeprowadzenie jednej lokalizacji dyslokacji. Dopiero w tym momencie obraz staje się spójny gdyż porównujemy pojedynczą analizę z jednym krokiem czasowym. To, czego oczekuję od autora rozprawy to ponowne przedstawienie Roz. 5.5 z jednoznacznym zdefiniowaniem wszystkich wielkości oraz pełniejszym omówieniem zastosowanej jednostki czasu wraz z podaniem przyczyny jej wprowadzenia jak i dyskusją jej ograniczeń.

Praca kończy się dość standardowym podsumowaniem, w którym brakuje mi próby przedstawienia możliwości szerszego uogólnienia proponowanych algorytmów, jak choćby zastanowienia się nad możliwością zastosowania zoptymalizowanej metody BOP poza symulacjami metodą PAD.

Podsumowując, należy podkreślić, że osiągnięcia i zalety pracy zdecydowanie przewyższają jej błędy i niedopatrzenia. Kończąc recenzję stwierdzam, że rozprawa doktorska magistra Szymona Winczewskiego w pełni odpowiada warunkom określonym w artykule 13.1 ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki z dnia 14 marca 2003 z późniejszymi zmianami. Wnioskuje o dopuszczenie magistra Szymona Winczewskiego do dalszych etapów przewodu doktorskiego.



Marek Litniewski