

Wpłynęło dnia 14.09.2015r.
L. dz. 29/147/15/15N/2015
Zał. _____

Instytut Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk

ul. M. Smoluchowskiego 17, 60-179 Poznań
tel.: (61) 86-95-100, fax: (61) 86-84-524
Internet: <http://www.ifmpan.poznan.pl>

Poznań, dnia 7 września 2015 r.

dr hab. inż. Konstantin Tretiakov, prof. IFM PAN

RECENZJA

rozprawy doktorskiej mgra inż. Szymona Winczewskiego
pt. „*Algorytmy do lokalizacji dyslokacji w materiałach symulowanych numerycznie*”
wykonanej pod kierunkiem prof. dr hab. inż. Jarosława Rybickiego
na wydziale Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechniki Gdańskiej

Rozprawa doktorska jest w całości poświęcona opracowaniu nowej metody obliczeniowej umożliwiającej lokalizację i śledzenie ruchu pojedynczej dyslokacji w materiałach symulowanych metodą dynamiki molekularnej, oraz jej zastosowaniu w badaniach monokryształu molibdenu o strukturze przestrzennie centrowanej. Tematyka pracy jest bardzo ciekawa i ważna, ponieważ za własności plastyczne materiałów w dużym stopniu odpowiadają dyslokacje, a dokładniej procesy ich powstania, namnażania i propagacji. Jest też aktualna, gdyż rozwój komputerów dopiero w ostatnich latach pozwolił na prowadzenie symulacji dużej skali – milionów atomów, a tylko w tak dużych układach możemy śledzić i analizować ruch dyslokacji, co pozwala później wyciągać wnioski na temat własności plastycznych badanego materiału.

Rozprawa jest napisana w języku polskim, składa się z sześciu rozdziałów zawartych na 162 stronach, liczy 33 rysunki oraz 13 tabel i jest przygotowana bardzo starannie. Pracę kończy bibliografia licząca 187 pozycji, wśród których są dwie publikacje współautorstwa mgra inż. Szymona Winczewskiego oraz odnośnik do strony internetowej dotyczący wytworzonego przez Autora rozprawy oprogramowania. Na dorobek naukowy Autora rozprawy składają się 4 opublikowane artykuły (w takich czasopismach jak: *Advanced Materials*, *Biophysical Journal*, *Procedia Computer Science*, *Computational Methods in Science and Technology*) i 3 wystąpienia konferencyjne, gdzie mgr inż. Szymon Winczewski prezentował wyniki dotyczące nowej metody obliczeniowej.

Pierwszy rozdział rozprawy dotyczy wprowadzenia do tematyki. Sformułowano w nim również cele rozprawy, a oprócz tego sposób organizacji pracy wraz ze stosowanymi oznaczeniami. Muszę tu zauważyć, że zabrakło tutaj, obok stosowanych oznaczeń, spisu wszystkich używanych w pracy skrótów, a jest ich sporo. Moim zdaniem ułatwiłoby to bardzo czytanie pracy. W rozdziale tym omówiono bieżący stan wiedzy dotyczący symulacji metodą dynamiki molekularnej w kontekście detekcji i lokalizacji dyslokacji w badanym układzie. Po krótkim, ogólnym wstępie dotyczącym symulacji komputerowych jest omówiona metoda PAD (z ang. *periodic array of dislocations*), która umożliwia badanie dyslokacji za pomocą symulacji komputerowych. Szczególną uwagę Autor poświęca metodom detekcji dyslokacji w symulowanym układzie, takim jak ODDA (z ang. *on-the-fly*

dislocation detection algorithm) i DXA (z ang. *dislocation extraction algorithm*), oraz innym technikom stosowanym dotychczas. Bazując na analizie omówionych rozwiązań Autor w sposób logiczny i konsekwentny uzasadnia problematykę rozprawy i formułuje jej cele. Za główny cel mgr inż. Szymon Winczewski obiera opracowanie nowej, wydajnej metody obliczeniowej przeznaczonej do śledzenia ruchu dyslokacji w symulacjach dużej skali. W dalszej części wprowadzenia Autor wymienia – moim zdaniem dosyć ambitne – wymogi stawiane nowej technice obliczeniowej.

Drugi rozdział rozprawy mgr inż. Szymon Winczewski poświęca podstawom teoretycznym, gdzie omawia podstawowe pojęcia z zakresu teorii dyslokacji, metodę dynamiki molekularnej, zastosowany w symulacjach potencjał (klasy MEAM/Spline) oddziaływań pomiędzy atomami molibdenu, metodę badania dyslokacji za pomocą symulacji komputerowych (PAD) i prezentuje metodę BOP (z ang. *bond-orientational order parameters*), która stanowi fundament dla metody lokalizacji i śledzenia ruchu dyslokacji. W dalszej części rozdziału w krótki i precyzyjny sposób wprowadzone są podstawowe pojęcia dotyczące dyslokacji i ich ruchu, a dobrze przygotowane rysunki 2.1-2.3 świetnie je ilustrują. Jedynie ostatni rysunek 2.4 kończący opis ruchu dyslokacji jest na nieco słabszym poziomie. Nie jest on wystarczająco czytelny – trudno rozróżnić linie kropkowane i ciągłe.

Moje zastrzeżenie budzi używane przez Autora w tytule podrozdziału 2.2 i w tekście sformułowanie „Metody dynamiki molekularnej” w liczbie mnogiej. Bardziej zasadne wydaje się stosowanie liczby pojedynczej, ponieważ jest to jedna metoda, która ma różne realizacje. Oprócz tego pierwszy raz spotkałem się ze sformułowaniem „symulacje dynamiczno-molekularne”, które jest bardzo często używane w tej rozprawie. W języku polskim jest dobrze ugruntowane i ogólnie przyjęte sformułowanie „symulacje metodą dynamiki molekularnej” (patrz chociażby D.W. Heermann, *Podstawy symulacji komputerowych w fizyce*, WNT Warszawa, 1997).

We wstępie do opisu metody dynamiki molekularnej mgr Szymon Winczewski przedstawia bardzo krótki historyczny zarys metody. Trudno mi się zgodzić z Autorem, który twierdzi na str. 22, że „W roku 1974 Stillinger i Rahman przeprowadzili pierwszą wierną symulację rzeczywistego układu, badając wodę [82]”. Czy Autor uważa, że na przykład Argon w stanie ciekłym lub stałym nie jest układem rzeczywistym? Symulacje komputerowe dla tej substancji i innych gazów szlachetnych były przeprowadzone z powodzeniem znacznie wcześniej, wystarczy chociażby wymienić odnośnik [81] cytowany w tej rozprawie. Dalszy opis metody dynamiki molekularnej wraz z metodami identyfikacji najbliższych sąsiadów, metody PAD i BOP jest merytoryczny i przejrzysty. Jedyne zastrzeżenia w tej części budzą zwroty „samostartowalność” str. 24, (wydaje się, że nie ma takiego słowa w języku polskim), oraz „renderuje” str. 37 i str. 39.

Rozdział trzeci stanowi moim zdaniem jedną z najważniejszych części rozprawy, gdyż jest w nim przedstawiona idea „jądra” nowej techniki opartej o metodę BOP, tj. metoda szybkiej jednoczesnej interpolacji FSI (z ang. *fast simultaneous interpolation*). Ponieważ oryginalna metoda BOP jest oparta na obliczaniu harmonik sferycznych, wykazuje ona z tego tytułu bardzo wysokie koszty obliczeniowe i właśnie to utrudnia jej stosowanie w symulacjach dużej skali. Główną ideą Autora rozprawy jest zastąpienie dokładnych obliczeń harmonik sferycznych ich przybliżoną ewaluacją. Idea ta jest klarowna i elegancka. W rozdziale tym mgr inż. Szymon Winczewski oprócz szczegółowego opisu nowej metody, równoległe opisuje przykład jej zastosowania ze szczegółową analizą korzyści w postaci skrócenia czasu obliczeń, które są uzyskiwane na poszczególnych etapach. Uzyskane 50-krotne przyspieszenie obliczeń robi wrażenie!

Bardzo ciekawą lekturą była część dotycząca dokładności zastosowanego przybliżenia i porównanie wydajności nowej metody dla trzech różnych konfiguracji sprzętowych zarówno pod względem mocy obliczeniowej procesora, jak i różnymi rozmiarami pamięci operacyjnej. Ta ostatnia ma tu kluczowe znaczenie, ponieważ metoda FSI jest oparta na tablicach, które muszą się znaleźć w całości w pamięci operacyjnej lub najlepiej w pamięci podręcznej procesora, żeby proponowana metoda była skuteczna. Co dotyczy błędów pochodzących od stosowanej metody, to rysunek 3.2 wyczerpuje całą dyskusję. Zresztą sam Autor stwierdza, i trudno z tym się nie zgodzić, że nawet przy tak małej siatce interpolacyjnej jak $p=q=600$ błędy są małe i akceptowalne.

Podczas porównania skuteczności metody dla różnych konfiguracji sprzętowych nasuwają się następujące uwagi. Po pierwsze, zastosowany przez Autora termin „przyśpieszenie” (rys. 3.3) jest tu dalece niefortunny, nawet powiedziałbym zły. Przyśpieszenie w fizyce jest bardzo dobrze określone. W tym przypadku mgr inż. Szymon Winczewski mógł zaczerpnąć analogii z literatury i wprowadzić bezwymiarowy czynnik zdefiniowany jako stosunek czasu niezbędnego na przeprowadzenie analizy testowaną metodą, do czasu niezbędnego na przeprowadzenie analizy za pomocą metody referencyjnej lub na odwrót. Po drugie, Autor pisze na str. 70 „*Stwierdza się jednak, że zyski wynikające z zastosowania metody FSI są tym większe, im wyższe są zdolności przetwarzania maszyny.*”. Zdanie to jest nie prawdziwe (patrz rys. 3.3), ponieważ maszyna C jest „najstabsza” a zysk kosztów obliczeniowych (~ 45) pochodzących od stosowania nowej metody dla $p=600$ jest większy niż w przypadku „mocniejszej” maszyny B (~ 38). Autor powinien to skomentować! Kolejna uwaga dotyczy zdania na str. 70 „*Uzyskane wyniki pokazują, że metoda FSI jest metodą dokładną.*”. Mam nadzieję, że Autor zgodzi się, iż metoda aproksymacyjna nie może (z samej definicji) być metodą dokładną. Zresztą w kolejnym zdaniu mgr inż. Szymon Winczewski pisze o małych błędach metody. Nie rozumiem też co Autor ma na uwadze pisząc na str. 70, że „... błędy zachowują się porządnie.” Moim zdaniem należałoby napisać, że wartość błędu zachowuje się zgodnie z pewną zależnością i ją podać. Kolejne zastrzeżenie dotyczy rysunku 3.5, gdzie oś Y jest opisana jako „Częstość” i wydaje się być nieodpowiednim opisem, a dyskusja tego rysunku w tekście, moim zdaniem, nie jest wystarczająca. Wymaga to dodatkowego wyjaśnienia.

W dalszej części tego rozdziału mgr inż. Szymon Winczewski przedstawia porównanie wydajności ewaluacji parametrów BOP nową metodą i innymi istniejącymi rozwiązaniami dla metody BOP na przykładzie układów testowych. W tabeli 3.5 opisano charakterystyki układów testowych. Są one niewystarczające, ponieważ nie jest jasne jakiego dokładnie materiału dotyczą. Na przykład przypadek 1a lub 4a opisano jako monokryształ, ale nie napisano jaki to materiał i jaką miał strukturę krystalograficzną. Podobna sytuacja dotyczy przypadków 1c i 4c. To również wymaga wyjaśnienia.

Ostatnia część tego rozdziału odnosi się do porównania efektywności proponowanej metody z innymi metodami analizy struktury. Jest to bardzo ważna część ponieważ dobitnie pokazuje przewagę nowej metody nad innymi metodami, a przede wszystkim nad metodą CNA (z ang. *common neighbor analysis*), która jest uważana za wydajną. Warto tu zauważyć, że na rysunku 3.9 Autor stosuje termin „koszt obliczeniowy”, który znacznie lepiej oddaje sedno sprawy, niż „przyśpieszenie” stosowane wcześniej.

Następny, czwarty rozdział mgr inż. Szymon Winczewski uważa za główny owoc rozprawy. Przedstawiono w nim opracowaną metodę lokalizacji i śledzenia ruchu dyslokacji, której Autor daje nazwę f-DTA (ang. *fast dislocation tracking algorithm*), a w języku polskim „*szybki algorytm śledzenia dyslokacji*”. Wstęp do tego rozdziału Autor poświęca uzasadnieniu wyboru nazwy, z którym trudno się nie zgodzić. W mojej opinii jest on trafny. Podstawową ideą proponowanej

metody jest wykorzystanie faktu mocnego odstępstwa charakteru uporządkowania w pobliżu linii dyslokacji od obszarów „idealne” uporządkowanych, znajdujących się daleko od linii dyslokacji. Możliwość szybkiego badania porządku krótko-zasięgowego i znakowania atomów stanowiących rdzeń dyslokacji w różnych momentach czasu pozwala śledzić ruch dyslokacji.

W dalszych podrozdziałach Autor bardzo szczegółowo podaje zarys metody i zastosowane algorytmy, a na końcu opisuje powstałe oprogramowanie. Rozdział ten jest napisany bardzo dobrze, a przejrzyste rysunki są pomocne podczas lektury. Nie mam większych uwag dotyczących tego rozdziału, może poza drobnostką: na str. 113 Autor używa słowa „parsowanie”, które nie istnieje w języku polskim.

Moim zdaniem warto tu zauważyć świetne przygotowanie informatyczne mgr inż. Szymona Winczewskiego. Świadczy o tym zasadne zastosowanie algorytmu BFS (anz. *breadth-first search*) dla grafu G podczas lokalizacji rdzenia dyslokacji i dalej przy wyznaczeniu linii dyslokacji.

Czytając ten rozdział nasunęło mi się pytanie, które pozwolę sobie zadać: czy testy wykazały gięcie linii dyslokacji, co implikowałoby inny niż prostopadłościenny kształt obszaru śledzenia?

Rozdział piąty został poświęcony zastosowaniu metody f-DTA do rozwiązania konkretnego problemu fizycznego. Do testu nowej metody mgr inż. Szymon Winczewski wybiera problem detekcji dyslokacji krawędziowej i śledzenia jej ruchu w monokryształe molibdenu o strukturze przestrzennie centrowanej i na początku tego rozdziału uzasadnia ten wybór. W dalszej części Autor przechodzi do omówienia szczegółów przeprowadzonych symulacji, gdzie przedstawiony jest opis symulowanych układów oraz detale symulacji metodą dynamiki molekularnej z zastosowaniem metody PAD. Symulacje zostały wykonane dla dwóch rozmiarów układów ($N = 165\,726$ i $N = 1\,332\,504$), dwóch temperatur ($T=20\text{K}$ i $T=200\text{K}$), oraz 17 różnych naprężeń w zakresie od 0.01GPa do 1GPa przykładanych do wymuszenia ruchu dyslokacji. Warto tu zaznaczyć *wielkoskalowość* przeprowadzonych symulacji, gdyż badany układ zawiera ponad milion cząstek, a łączny czas symulacji wyniósł około 1.6 miliona procesorogodzin, co jest równoważne 180 latom pracy jednego procesora.

Moją uwagę przykuło słowo „równoważenia” na str.119. Nie jestem pewien, czy jest ono tu odpowiednie. W moim przekonaniu w tym przypadku mówimy o ustaleniu stanu nierównowagowego stacjonarnego, w którym dyslokacja porusza się ze stałą prędkością.

Można zauważyć, że mgr inż. Szymon Winczewski stosował dokładnie taki sam czas do osiągnięcia stanu stacjonarnego, a czasy próbkowania uzależniał od przyłożonego naprężenia. W związku z tym nasuwa się pytanie: jakie kryterium Autor stosował do stwierdzenia, że dyslokacja już osiągnęła stałą prędkość w kryształach i można zacząć proces próbkowania lub inaczej mówiąc pomiar?

Dalej na str. 120 mgr inż. Szymon Winczewski pisze „*Monitorowano wszystkie istotne parametry termodynamiczne.*” Mimo to, a może właśnie dlatego, że Autor do prowadzenia symulacji używa programu LAMMPS, zabrakło mi porównań z danymi literaturowymi podstawowych wielkości termodynamicznych dla badanego układu, chociażby dla układu równowagowego, które by świadczyły o poprawności prowadzonych symulacji.

W dalszej części rozdziału piątego mgr inż. Szymon Winczewski dyskutuje warunki detekcji rdzenia dyslokacji i przeprowadza analizę rozkładów parametrów BOP. Rozkłady parametrów BOP wraz z wizualizacją układu w temperaturze 200K są przedstawione na rysunkach 5.1-5.4. W moim odczuciu Autor wybrał tu bardzo udaną formę prezentacji otrzymanych wyników. Podczas dyskusji otrzymanych rezultatów mgr inż. Szymon Winczewski dochodzi do wniosku, że parametry Q_4 i W_6 pozwalają zidentyfikować atomy rdzenia dyslokacji.

W podrozdziale 5.4 dochodzimy do najważniejszych wyników z punktu widzenia badanych własności fizycznych, a mianowicie wyznaczenia funkcji ruchliwości dyslokacji krawędziowej w molibdenie ($\mathbf{b} = 1/2 \langle 111 \rangle$), która łączy prędkość ruchu dyslokacji z naprężeniem stycznym i temperaturą, $v_d = v_d(\tau_{xz}, T)$. Mgr inż. Szymon Winczewski przedstawia w tym podrozdziale szereg rysunków, które świetnie ilustrują ruch dyslokacji w układzie (rys. 5.5), omawia sposób wyznaczenia prędkości dyslokacji wzór (5.8), a na rysunku 5.9 prezentuje wykres prędkości dyslokacji w funkcji przyłożonego naprężenia stycznego dla dwóch badanych temperatur ($T=20\text{K}$ i $T=200\text{K}$). Choć Autor celowo skupia swoją uwagę na analizie wydajności opracowanej metody, to jednak zabrakło mi w rozprawie chociażby wstępnej próby interpelacji fizycznej otrzymanych wyników.

W ostatnim podrozdziale mgr inż. Szymon Winczewski dyskutuje wydajność opracowanej metody. Nie można pominąć faktu, że na analizę metodą f-DTA jest potrzebny czas około 400 razy mniejszy od czasu zasadniczych symulacji metodą dynamiki molekularnej. W moim odczuciu nowa metoda jest bardzo wydajna, co pozwoli w przyszłości stosować ją bezpośrednio w trakcie trwania symulacji (ang. *on-the-fly*), a nie tak jak dotychczas używając metodę f-DTA po zakończeniu symulacji zasadniczych tzw. przetwarzania po (z ang. *post-processing*). Pozwoli to znacznie ograniczyć wymagania dyskowe, które w obecnej sytuacji są olbrzymie (11TB). Warto podkreślić, że gdyby Autorowi udało się zrównoleglić powstałe oprogramowanie, wówczas zaowocowałoby to dodatkowym istotnym skróceniem czasu rzeczywistego obliczeń.

W ostatnim rozdziale mgr inż. Szymon Winczewski pokazuje, że postawione cele zostały osiągnięte, a oprócz tego komentuje opracowaną technikę obliczeniową i robi ogólny zarys przyszłych prac.

Oprócz uwag i komentarzy zrobionych powyżej, pozwolę sobie wymienić inne drobne uchybienia:

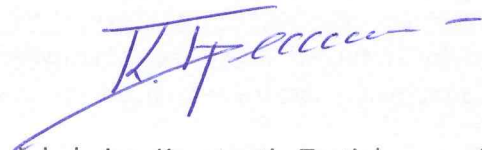
- str. 50 w tekście „czynnik wyrażający koszt obliczeniowe metody” powinno być „czynnik wyrażający koszty obliczeniowe metody”
- str. 52 w tekście „Wyszczególnione je poniżej:” powinno być „Wyszczególniono je poniżej:”
- na str. 60 zamiast „... korzysta się z *explicite* wyrażeń bądź też wzorów rekurencyjnych ...” powinno być „... korzysta się z dokładnych wyrażeń bądź też wzorów rekurencyjnych ...”
- str. 66 w tekście „... podjęte zostanie również zagadnienie błędów.” raczej powinno być „... podjęte zostanie również zagadnienie oceny błędów.”

Rozprawa jest napisana poprawnym językiem i posiada logiczny układ treści. Jest dobrze zilustrowana wykresami i rysunkami poglądowymi. Rzetelny przegląd literatury obejmuje 187 dobrze dobranych pozycji, dotyczących podjętej problematyki, co wskazuje na bardzo dobrą znajomość literatury przedmiotu.

Podsumowując stwierdzam, że mgr inż. Szymon Winczewski przedstawił ciekawą i aktualną tematycznie pracę doktorską i w mojej ocenie w pełni zrealizował jej cele. Z przedstawionej rozprawy doktorskiej wynika, że Autor głęboko rozumie podstawy symulacji komputerowych w fizyce, potrafi nie tylko prowadzić symulacje komputerowe, ale również tworzyć nowoczesne oprogramowanie naukowe na wysokim poziomie. Na osobne podkreślenie zasługuje kilka aspektów. Autorowi udało się: (i) w prosty i elegancki sposób rozwiązać czasochłonny problem liczenia harmonik sferycznych w metodzie BOP proponując metodę szybkiej interpolacji równoczesnej (FSI), która przyspieszyła obliczenia 50-cio krotnie; (ii) opracować kompletną metodę

lokalizacji i śledzenia ruchu pojedynczej dyslokacji f-DTA, która realizuje detekcję dyslokacji nieporównywalnie szybciej niż istniejące metody ODDA i DXA; (iii) zastosować z powodzeniem zaproponowaną metodę do rozwiązania konkretnego problemu fizycznego, a mianowicie do śledzenia ruchu dyslokacji krawędziowej w monokryształe molibdenu o strukturze przestrzennie centrowanej i wyznaczyć funkcję ruchliwości dyslokacji krawędziowej w molibdenie; (iv) stworzyć oprogramowanie (około 20 tysięcy linii kodu), które stanowi warsztat do bardzo efektywnego prowadzenia symulacji komputerowych, a udostępnienie go środowisku naukowemu na stronie internetowej jest wartością dodaną. Pomimo pewnych uwag, które nie psują mojego dobrego zdania o rozprawie, pozytywnie oceniam pracę doktorską mgr inż. Szymona Winczewskiego.

Z przekonaniem stwierdzam, że przedstawiona mi do oceny rozprawa doktorska pt. „*Algorytmy do lokalizacji dyslokacji w materiałach symulowanych numerycznie*” spełnia wszystkie ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim i wnoszę o dopuszczenie Pana magistra inżyniera Szymona Winczewskiego do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

A handwritten signature in blue ink, appearing to read 'K. Tretiakov', with a long horizontal stroke extending to the right.

dr hab. inż. Konstantin Tretiakov, prof. IFM PAN