

**Recenzja rozprawy doktorskiej
mgr Moniki Richter-Laskowskiej**

1. Wstęp

Rozprawa doktorska mgr Moniki Richter-Laskowskiej zatytułowana "Application of machine learning algorithms to statistical physics and biophysics" zawiera 136 ponumerowanych stron, składa się z oświadczenia, listy stosowanych oznaczeń, spisu treści, wykresów i tablic, pięciu rozdziałów, spisu literatury, spisu dorobku naukowego Autorki, oraz czterech dodatków.

We wprowadzeniu Doktorantka krótko przedstawia aktualny stan zastosowań algorytmów uczenia maszynowego i zgrabnie przedstawia organizację rozprawy. Drugi rozdział ma charakter metodologiczny: podsumowano podstawowe pojęcia dotyczące przejść fazowych i wprowadzono modele, które będą analizowane w dalszej części rozprawy. W trzecim rozdziale omówione zostały wybrane algorytmy uczenia maszynowego. Wyniki badań przedstawiono w czwartym rozdziale, podzielonym na cztery podrozdziały. Pierwsze trzy dotyczą badania przejść fazowych we wprowadzonych wcześniej modelach. Przejścia typu Bereznińskiego-Kosterlitz-Thoulessa dla klasycznego i kwantowego modelu XY oraz modelu fazowo-fermionowego analizowano w rozdziale 4.1. Rozdział 4.2 poświęcono badaniu modeli Potts'a, Blume-Capela oraz Falicova-Kimballa za pomocą nienadzorowanych metod uczenia maszynowego. Te same modele były przedmiotem badań, za pomocą algorytmu LBC, w rozdziale 4.3. W rozdziale 4.4 przedstawiono wyniki zastosowań algorytmów uczenia maszynowego do badania dynamiki kanałów jonowych. Piąty rozdział zawiera krótkie, treściwe podsumowanie głównych wyników rozprawy. Cztery dodatki zawierają techniczne szczegóły pominięte w głównym tekście.

Rozprawa stanowi logiczną kontynuację badań grupy Promotora, prof. dr. hab. Macieja Małki.

Podstawę rozprawy stanowią trzy opublikowane prace, z nich dwie w czasopismach z wysokim *impact factor* (6.208, 4.779), jeden preprint (praca została złożona do Phys. Rev. E) oraz oryginalnych, nieopublikowanych wyników.

2. Ocena wagi oraz aktualności rozpatrywanych zagadnień

Zagadnienia będące przedmiotem rozprawy są ważne - dotyczą, z jednej strony, teorii przejść fazowych, a z drugiej - dynamiki kanałów jonowych. Są one również aktualne - w literaturze przedmiotu obserwuje się w okresie kilku ostatnich lat znaczący wzrost liczby publikacji w czołowych czasopismach.

3. Ocena merytoryczna wybranych części rozprawy

Przejdę do szczegółów, ograniczając się do najważniejszych, w mojej opinii, wyników. W rozprawie przedstawiono wybrane zastosowania uczenia maszynowego w fizyce statystycznej oraz w biologii.

Pierwsza część rozprawy dotyczy badania przejść fazowych w kilku modelach: klasycznym i kwantowym XY, fazowo-fermionowym (*phase fermion*) (PF), q -stanowym Potts'a (P), Blume-Capela (BC) oraz Falicova-Kimballa z połówkowym wypełnieniem (FK).

Topologiczne przejście fazowe typu Bereznińskiego-Kosterlitz-Thoulessa w pierwszych trzech modelach było badane (rozdział 4.1, praca [170]) dwiema metodami; celem była estymacja temperatury krytycznej. Danymi wejściowymi były konfiguracje spinów otrzymane przez Autorkę i współpracowników z symulacji Monte Carlo (metoda Metropolis'a); techniczne szczegóły umieszczono w dodatku C. W pierwszej części (rozdział 4.1.1) temperaturę przejścia wyznaczono dwiema metodami: na podstawie analizy zależności modułu skrętności (*helicity modulus*) od temperatury oraz używając analitycznych rozwiązań równań grupy renormalizacji. Otrzymane wyniki są w zgodzie ze znanymi z literatury. W drugiej części (rozdział 4.1.2) zastosowano sieć neuronową opisaną w dodatku A. Sieć była uczona na konfiguracjach poniżej oraz powyżej temperatury przejścia - to podejście do zagadnienia jest znane z literatury przedmiotu. Pokazano, że nie identyfikuje ono poprawnie temperatury przejścia - ten efekt jest znany. W następnym kroku Doktorantka dokonała transformacji danych wejściowych, uwzględniającą symetrię zagadnienia. W efekcie otrzymano dobre oszacowanie temperatury przejścia - pierwszy taki wynik w podejściu uczenia maszynowego. W szczególności, przeprowadzona została systematyczna analiza tego oszacowania w zależności od liczby temperatur użytych w procesie uczenia oraz od ich lokalizacji względem temperatury przejścia. Otwartym pozostaje zagadnienie znalezienia topologicznych charakterystyk na podstawie których sieć uczy się. Podsumowując, wyniki uważam za ważne a metodologię - za bardzo dobrą.

Przejścia fazowe ciągłe i nieciągłe (z dużym skokiem parametru porządku), występujące w modelach P, BC oraz FK, badano stosując nienadzorowane techniki uczenia: algorytm PCA oraz algorytm k -średnich (rozdział 4.2). Tego typu podejście jest znane w literaturze przedmiotu. Zastosowano podejście, w którym wyniki otrzymane z symulacji w temperaturach poniżej przejścia fazowego, w okolicy przejścia oraz powyżej przejścia fazowego poddano analizie PCA, ograniczając się do dwóch głównych składowych. W ten sposób konfiguracje spinów otrzymały reprezentację w postaci punktów tworzących klastry w dwuwymiarowej przestrzeni (rys. 4.7 - 4.12). Dalsza analiza polegała na badaniu wybranych charakterystyk tych klastrów stosując algorytm k -średnich. Sformułowane zostały dwa główne cele. Pierwszy (rozdział 4.2.1) to identyfikacja parametru porządku. W tym celu wprowadzono miarę odległości D między klastrami. Główny wynik tej części rozprawy, przedstawiony na rys. 4.15, to fakt, że absolutna wartość pierwszego komponentu PCA oraz

odległość D odtwarzają ilościowo zależność parametru porządku od temperatury dla obu typów przejść fazowych. Drugi cel tej części rozprawy to identyfikacja typu przejścia fazowego na podstawie kształtu klastrów. Podstawowym narzędziem był znany w literaturze współczynnik sylwetki s (*silhouette coefficient*), charakteryzujący dwie skale przestrzenne: wewnątrz klastra i pomiędzy klastrami. Kształt klastra został reprezentowany za pomocą wektora $\vec{s}(k)$, gdzie k oznacza liczbę klastrów w algorytmie k -średnich. Wyniki przedstawiono na rys. 4.18 i 4.19. Analiza jakościowa prowadzi do wniosku, że współczynnik kształtu s pozwala rozróżnić pomiędzy ciągłym i nieciągłym przejściem fazowym z dużym skokiem parametru porządku. Analiza ilościowa, przeprowadzona na podstawie odchylenia standardowego składowych wektora $\vec{s}(k)$ (rys. 4.20), potwierdza powyższy wniosek.

Podsumowując tę część rozprawy uważam, że przedstawione (nieopublikowane) wyniki wnoszą istotny wkład do metodologii badania przejść fazowych w modelowych układach. Nasuwa się następująca uwaga: może warto by spróbować charakteryzować kształt klastrów oraz rozkład $s(k)$ za pomocą składowych fourierowskich.

Zagadnienie identyfikacji rodzaju przejścia fazowego w modelach P, BC i FK było kontynuowane w rozdziale 4.3 za pomocą algorytmu uczenia maszynowego LBC (*learning by confusion*), przedstawionego w dodatku C (preprint, pozycja literaturowa [178]). Klasyfikacja rodzaju przejścia za pomocą rozkładu energii oraz inwariantu Bindera w niektórych przypadkach napotyka trudności. Doktorantka zastosowała algorytm LBC. W pierwszej części (rozdział 4.3.1, dodatek B) sformułowano prosty i elegancki model teoretyczny wydajności w modelu LBC bazujący jedynie na termodynamice. Jest to klasyczny przykład podejścia fizyka-teoretyka! Wyniki, przedstawione na rys. 4.32, pozwalają na klasyfikację typu przejścia na podstawie wprowadzonej przez Autorkę wydajności klasyfikacji. W drugiej części (rozdział 4.3.2) przedstawiono wyniki analizy LBC (rys. 4.33). Oszacowanie temperatury przejścia jest dobre, natomiast kształty krzywych nie odpowiadają przewidywaniom prostego modelu. Dla przejścia nieciągłego w modelu FK zaobserwowano nieoczekiwany efekt - plateau wartości metryki AUC-ROC, odpowiadające idealnej klasyfikacji, poniżej temperatury przejścia. Dało to początek dalszej analizie, związanej z zależnością koncentracji defektów od temperatury. Pokazano, że wydajność klasyfikacji zależy od koncentracji defektów dla przejść pierwszego rzędu (rys. 4.40). Tę część pracy uważam za szczególnie ważną - algorytm LBC "uczy się" na rozkładach defektów. Zagadnienie rozróżniania typów przejścia za pomocą maksymalnej wartości metryki AUC-ROC pozostaje otwarte - wyniki przedstawione na rys. 4.41 oraz w dodatku C świadczą o istotnej roli rozmiaru układu. Podsumowując uważam, że algorytm LBC stosowany łącznie z analizą rozkładów energii oraz inwariantem Bindera pozwala na lepszą charakteryzację przejść fazowych.

Kolejne wyniki zawarte w rozprawie dotyczą zastosowań uczenia maszynowego w biologii i

dotyczą jednego z kontrowersyjnych zagadnień biologii komórkowej - analizy dynamiki kanałów jonowych. Cele prac są dobrze zdefiniowane. Pierwszy (praca [165], rozdział 4.4.2) dotyczy badania możliwości rozróżnienia między sobą odpowiedzi trzech typów komórek na stymulację elektrostatyczną i sprowadza się do porównywania trzech szeregów czasowych. Dane zostały poddane analizie wstępnej, polegającej na wygładzaniu i zmniejszeniu liczebności danych (metoda PAA) oraz na usunięciu wartości odstających (sieć typu autoenkoder), a następnie były klasyfikowane metodą KNN. Osiągnięto wysoką dokładność klasyfikacji (Tabela 4.2), co udanie zaprezentowano graficznie (rys. 4.46) i dodatkowo potwierdzono stosując metodę *k-średnich* (rys. 4.3).

Druga część (rozdział 4.4.3) jest oparta na wynikach pracy [177] i dotyczy roli narygeniny przy aktywacji kanału. Dobrze określony cel - badanie wpływu koncentracji naryganiny na lokalne własności szeregu czasowego - jest bardzo ambitny. Jego realizacja wymagała wieloetapowego podejścia. Analiza oryginalnych danych zawiodła (Autorka nie podaje szczegółów); niewiele lepsze wyniki dała analiza zmodyfikowanego szeregu czasowego (algorytm KNN) charakteryzującego czasy otwarcia kanału (Tabela 4.5). Najważniejszy, z mojego punktu widzenia wynik, otrzymany metodą *shapelets* (Tabela 4.6), dotyczy stopnia klasyfikacyjności w zależności od, co istotne z punktu widzenia metodologii, jednego parametru (a nie dwóch, jak poprzednio). Dokładność klasyfikacji nie jest imponująca. Na podstawie tych danych sformułowano ciekawą hipotezę dotyczącą globalnego wpływu koncentracji narygeniny i lokalnego wpływu potencjału membrany na kształt szeregu czasowego.

Wyniki obu prac oceniam jako istotne. Szkoda tylko, że Autorka nie określiła bardziej dobitnie miejsca swoich wyników w metodologii badania szeregów czasowych dla kanałów jonowych. Mam dwie uwagi. Wydaje mi się, że pierwsza grupa w Tabeli 4.5 nie odpowiada jednakowym prawdopodobieństwom z Tabeli 4.4. Druga ma charakter metodologiczny. Znaczna część wyników drugiej pracy bazuje na równości prawdopodobieństw stanów otwarcia. Zależność prawdopodobieństwa od potencjału, przedstawiona na rys. 4.44, zawiera miarę rozrzutu. Tymczasem, rozkłady otrzymane z szeregów czasowych mogą nie mieć skończonego drugiego (a nawet pierwszego) momentu. W jaki sposób wyznaczono drugi moment? Jeżeli badane szeregi go nie mają, to wybór potencjału odpowiadającego ustalonej wartości prawdopodobieństwa może, w najlepszym przypadku, być obciążony dużym błędem prowadzącym do niewłaściwego wyboru szeregów w procesie klasyfikacji, prowadzącym do jej niskiej efektywności. I, na koniec, uważam, że prace nad dynamiką kanałów jonowych powinny być kontynuowane przy użyciu bardziej zaawansowanych metod analizy szeregów czasowych (sieci rekurencyjne, modele transformerowe).

4. Ocena innych aspektów rozprawy

Szata graficzna rozprawy zasługuje na wyróżnienie. Układ tekstu w rozdziałach jest przejrzysty, rysunki są wykonane bardzo starannie, podpisy do nich zawierają istotne informacje. Język rozprawy jest z reguły zadowalający - niewielka liczba niejasnych/nietrafnych sformułowań nie ma znaczenia. Dużą zaletą rozprawy są przemyślane i dobrze napisane krótkie podsumowania wyników w poszczególnych rozdziałach. Bogata lista odnośników literaturowych świadczy o dobrej znajomości literatury przedmiotu przez Doktorantkę.

Mam kilka uwag dotyczących organizacji rozprawy. Drugi rozdział mógłby z powodzeniem być krótszy. W rozdziale trzecim niektóre z opisanych algorytmów nie są później stosowane - natomiast opis metody PCA jest zbyt krótki, biorąc pod uwagę jego znaczenie w nieopublikowanym materiale z rozdziału 4.2. Dalej, pewien niedosyt pozostawia po sobie zbyt lakoniczny styl niektórych sformułowań, bardziej typowy dla artykułów naukowych, niż dla rozpraw doktorskich. Trochę mi zabrakło informacji o stosowanych pakietach Pythona.

Doktorantka nie ustrzegła się kilku błędów. Równanie (2.10) zawiera błąd. W tabeli 2.2 jest nieprawidłowy znak β . Równanie (2.16): tak zdefiniowane M nie jest parametrem porządku. Równanie C.3 jest nieściśle. Podpis do rysunku C1: ostatnia linia zawiera błędną informację. Nie znalazłem odnośników do rysunków 3.16 i C.3. Podpis do rysunku 4.40 zawiera błąd. Na stronie 6: zamiast (2.8) powinno być (2.9). Nie wspomnę o braku strony 55. Uwaga dotycząca terminologii: stosowanie sformułowania "temperatur krytyczna" dla przejść nieciągłych nie jest właściwe.

I, na koniec, kilka uwag dotyczących spisu literatury. Pozycje [9], [19], [175], [190] wymagają poprawy. W tekście należało dodać referencję do drugiego artykułu Berezińskiego. Na stronie 33 zamiast [81] powinno być [84].

5. Wniosek

Doktorantka otrzymała ważne i ciekawe wyniki, które mogą być podstawą dalszych publikacji w dobrych czasopismach. Doktorantka wykazała się imponującą znajomością zaawansowanych technik uczenia maszynowego. Sposób przedstawienia wyników w rozprawie jest dobry. Zasygnalizowane wcześniej braki nie mają wpływu na bardzo pozytywną ocenę rozprawy.

Uważam, że recenzowana rozprawa mgr Moniki Richter-Laskowskiej zatytułowana "Application of machine learning algorithms to statistical physics and biophysics" z dużym nadmiarem spełnia ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim. Wnoszę o dopuszczenie mgr Moniki Richter-Laskowskiej dalszych etapów obrony.

Jestem skłonny wnioskować o wyróżnienie rozprawy.

A. C. Miłb