Wrocław, 19.10.2021

Dr hab. inż. Krzysztof Burnecki, prof. uczelni
Katedra Matematyki Stosowanej
Wydział Matematyki
Politechnika Wrocławska

Recenzja rozprawy doktorskiej Pani mgr Mai Milewskiej
pt. *Spring systems learning mechanical behaviour*

Rozprawa doktorska została napisana pod kierunkiem prof. dr. hab. Jacka Miękisza na Wydziale Matematyki, Informatyki i Mechaniki Uniwersytetu Warszawskiego. Jest napisana w języku angielskim, liczy 121 stron, składa się z pięciu rozdziałów, trzech dodatków i bibliografii liczącej 40 pozycji, wśród których są 3 prace autorki wspólne z innymi autorami (dwie z prof. Tomaszem Schreiberem oraz jedna z prof. Jackiem Miękiszem).

Opis rozprawy. Recenzowana rozprawa doktorska dotyczy systemów sprężyn opisanych językiem grafu sztywnego i odpowiedzi na pytanie jak system sprężyn powinien być skonstruowany, żeby zareagował na zewnętrzne siły w pewien z góry określony sposób. Główną część rozprawy stanowią rozdziały 2-4.

W rozdziale drugim opisane są najpierw podstawy dynamiki newtonowskiej a następnie model systemu sprężynowego oparty na pojęciu grafu sztywnego oraz przedstawione są siły jakie działają na poszczególne wierzchołki. W rozprawie system sprężyn reprezentowany jest za pomocą nieskierowanego grafu sztywnego $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ zdefiniowanego w przestrzeni trójwymiarowej o wierzchołkach w zbiorze $\mathcal{V}$ i o zbiorze połączeń między nimi (krawędzi) $\mathcal{E}$, będącego zbiorem 2-elementowych podzbiorów $\mathcal{V}$. Każdej krawędzi $e \in \mathcal{E}$ przypisany jest parametr $k[e]$ (współczynnik sprężystości określający elastyczność sprężyny) oraz $l[e]$ (aktualna długość sprężyny, gdzie $l_0[e]$ jest długością spoczynkową). Autorka definiuje także następujący podział wierzchołków.

1. Wierzchołki ruchome $\mathcal{V}_{movable}$
   (a) Wierzchołki obserwowane $\mathcal{V}_{obs}$
   (b) Wierzchołki pomocnicze $\mathcal{V}_{*}$
2. Wierzchołki zamrożone $\mathcal{V}_{frozen}$
   (a) Wierzchołki kontrolne $\mathcal{V}_{con}$
   (b) Wierzchołki nieruchome $\mathcal{V}_{fixed}$

Zaprezentowany jest także mechanizm relaksacji systemu sprężyn. Okazuje się później, że jest on kluczowy jeśli chodzi o czas w procesie uczenia sieci zachowań mechanicznych. Następnie przedstawiona jest idea systemu adaptacyjnego, która jest związana z głównym celem rozprawy a mianowicie stworzeniem algorytmu, który dla każdej sprężyny należącej do systemu znajdzie współczynnik sprężystości i długość spoczynkową tak, że po przemieszczeniu wierzchołków kontrolnych na pozycje zdefiniowane przykładami uczącymi

i przemieszczeniu wszystkich wierzchołków ruchomych do stanu równowagi (zrelaksowaniu) wierzchołki obserwowane będą bliskie wierzchołkom obserwowanym dla tych przykładów.

Danymi wejściowymi dla rozważanego problemu są sztywny graf $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ oraz zbiór przykładów uczących $(E^{(i)})_{i=1}^{N}$. Każdy przykład uczący $E^{(i)} = (\overline{y}^{(i)}_{\mathcal{V}_{con}}, \overline{y}^{(i)}_{\mathcal{V}_{obs}})$ składa się z

1. części kontrolnej $\overline{y}^{(i)}_{\mathcal{V}_{con}}$, która definiuje położenie wierzchołków kontrolnych oraz

2. części obserwowanej $\overline{y}^{(i)}_{\mathcal{V}_{con}}$, która definiuje położenie wierzchołków obserwowanych.

Tak więc celem systemu adaptacyjnego jest znalezienie parametrów $k]e]$ i $l_0[e]$, $e \in \mathcal{E}$ i stanu równowagi $G[\overline{x}^0_{\mathcal{V}_{movable}}; \overline{y}^{(i)}_{\mathcal{V}_{con}}]_v$ dla $i \in \{1, \ldots, N\}$, który opisuje współrzędne wierzchołków ruchomych w konfiguracji $\overline{x}^0_{\mathcal{V}_{movable}}$ osiągniętej po przesunięciu wierzchołków kontrolnych w lokalizacje oznaczone przez $\overline{y}^{(i)}_{\mathcal{V}_{con}}$.

W celu określenia jakości dopasowania danej sieci do zbioru przykładów uczących rozważana jest następująca kwadratowa funkcja błędu:

$$\Phi = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \Phi^{(i)},$$

gdzie

$$\Phi^{(i)} = \frac{1}{|\mathcal{V}_{obs}|} \sum_{v \in \mathcal{V}_{obs}} (\mathrm{dist}(\overline{y}^{(i)}_v, G[\overline{x}^0_{\mathcal{V}_{movable}}; \overline{y}^{(i)}_{\mathcal{V}_{con}}]_v))^2$$

oraz dist oznacza odległość euklidesową.

Algorytm składa się z dwóch pętli: zewnętrznej i wewnętrznej. W zewnętrznej, po zakończeniu operacji dla wszystkich przykładów uczących sprawdzane jest czy błąd Φ się zmniejsza – z tym związany jest warunek zakończenia obliczeń. W wewnętrznej, dla każdego przykładu uczącego modyfikowane są parametry sprężyn zgodnie z następującą procedurą opartą na metodzie gradientu prostego:

1. $k[e] = k[e] - \rho \frac{\partial \Phi^{(i)}}{\partial k[e]}$, gdzie ρ jest ustaloną długością kroku,

2. $l_0[e] = l_0[e] - \rho \frac{\partial \Phi^{(i)}}{\partial l_0[e]}$.

Jeżeli po tych modyfikacjach i zrelaksowaniu systemu błąd $\Phi^{(i)}$ maleje lub niewiele rośnie wtedy nowa konfiguracja jest akceptowana. W przeciwnym wypadku wszystkie zmiany są odrzucane.

W tym rozdziale przedstawione są także podobieństwa między zaprezentowanym algorytmem uczącym a wsteczną propagacją będącą klasycznym algorytmem uczenia wielowarstwowych sieci neuronowych.

Istotną częścią tego rozdziału jest też procedura generowania grafu. Umożliwia ona stworzenie topologii grafu na podstawie przykładów uczących. Procedura oparta jest jest na metodzie Henneberga, która pozwala iteracyjnie skonstruować minimalny graf. Umówiona została także modyfikacja algorytmu uczenia się poprzez dodanie losowego zaburzenia pozycji wierzchołków kontrolnych służąca do poprawienia stabilności stanów równowagi.

Rozdział trzeci to rozbudowany przykład zastosowania systemu sprężynowego do modelowania struktury białek w czasie pełnienia przez nich funkcji biologicznych. Mając do dyspozycji sekwencje ich rzeczywistych konfiguracji autorka buduje system o strukturze

i dynamice białek. Najpierw przedstawia wstęp do teorii białek zbudowanych z aminokwasów połączonych ze sobą wiązaniami peptydowymi. Następnie przedstawia algorytm mapowania struktury białka na system sprężynowy. Struktury wzięte są z PDB database, która jest biologiczną bazą danych o strukturze przestrzennej białek i kwasów nukleinowych. Pierwszy i ostatni przykład uczący zostały zbudowane na podstawie rzeczywistych konformacji brzegowych danego białka przed i po wykonaniu czynności biologicznej. Pośrednie przykłady wygenerowane są za pomocą algorytmu śledzenia przejść konformacyjnych w białkach (metoda GOdMD).

Po znalezieniu optymalnej struktury białek autorka sprawdza własności fizyczne wytrenowanych konformacji. W tym celu weryfikuje czy średnia sił działająca pomiędzy parami cząsteczek (wierzchołków) wraz ze wzrostem odległości między tymi cząsteczkami zależy od odległości pomiędzy dwoma wierzchołkami zgodnie z modelem Lennnarda-Jonesa. System testowany jest na przykładzie pięciu białek i wyniki dopasowania porównywane są z metodą GOdMD. Jakość dopasowania mierzona jest za pomocą zmodyfikowanej funkcji błędu. Wyniki przedstawione są w tabeli 3.1 a porównanie z siłą Lennarda-Jonesa (obliczoną na podstawie potencjału Lennarda-Jonesa) na rysunku 3.2.

W rozdziale czwartym przedstawiona jest całościowa analiza numeryczna wpływu parametrów algorytmów uczących i tworzących strukturę grafu na jakość dopasowania mierzoną funkcją błędu oraz czas działania procedur. Analiza prowadzi do praktycznych sugestii w kwestii wyboru parametrów dla różnych rzeczywistych sytuacji. W tym celu przedstawiona jest konstrukcja automatycznego tworzenia przykładów uczących oraz początkowych parametrów sprężyn związanych z grafem. Analizowane jest zachowanie błędu podczas działania algorytmu uczącego z uwzględnieniem szumu losowego i bez niego. Rozważany jest także wpływ zmiany parametru związanego z warunkiem stopu algorytmu.

W Dodatku A przedstawiona jest teoria sztywnych grafów wraz z konstrukcją Henneberga, która jest iteracyjną metodą tworzenia minimalnego grafu. Dodatek B zawiera pseudokody algorytmów opisanych we wcześniejszych częściach pracy. Dodatek C to opis propagacji wstecznej.

Znaczenie tematyki i ocena wyników. Rozprawa jest, moim zdaniem, dobrym przykładem pracy interdyscyplinarnej łączącej matematykę (grafy), fizykę (układy sprężyn), informatykę (algorytmy uczące i optymalizujące) oraz biologię (przykład zastosowań systemu sprężynowego do opisu dynamiki białek).

Pomysł użycia systemów sprężyn do modelowania różnych materiałów w mechanice czy systemów fizycznych nie jest nowy. Systemy te pomagają odpowiedzieć na przykład na pytanie co się stanie z ciałem stałym poddanym sile zewnętrznej. Natomiast problem odwrotny analizowany w rozprawie jest oryginalny i prowadzi do ciekawych analiz. Trudno jest mi jednak odpowiedzieć na pytanie czy jest problem mający istotne znaczenie aplikacyjne. Model omawiany w rozprawie został wprowadzony w pracach [11] i [12]. Praca [13] rozwija problematykę z prac [11]-[12] koncentrując się na wpływie topologii grafu na jakość uczenia. Niestety prace [11]-[13] nie mają żadnych „zewnętrznych" cytowań (stan na 12.10.2021, Web of Science) pomimo tego, że zostały opublikowane ponad 7 lat temu co może świadczyć o tym, że ta problematyka nie jest interesująca dla szerszego grona odbiorców lub, że opublikowane wyniki nie dotarły jeszcze do osób potencjalnie zainteresowanych tym podejściem.

Zastosowanie systemu sprężyn do modelowania struktury i dynamiki białek pozwoliło opisać interakcje pomiędzy parami cząsteczek znajdującymi się blisko siebie dynamiką sprężyn harmonicznych. Okazuje się, że wytrenowane systemy odtwarzają dobrze przykłady uczące otrzymane w oparciu o rzeczywiste konformacje białek pochodzących z bazy

PDB oraz za pomocą uznanej metody GOdMD. Ponadto właściwości fizyczne wytrenowanych systemów są podobne do rzeczywistych interakcji pomiędzy cząsteczkami co zostało potwierdzone za pomocą badania zgodności sił działającymi między parami cząsteczek z siłą Lennarda-Jonesa.

Autorka, co widać, włożyła dużo pracy do sprawdzenia, które parametry systemu mają największe znaczenie i co wpływa na optymalizację procesu uczenia. Wyniki otrzymane w rozdziale czwartym dla różnych wygenerowanych przykładów uczących sugerują ograniczanie liczby wierzchołków pomocniczych przy wysokim średnim stopniu wierzchołka. Jednym z wniosków jest nieliniowy charakter czasu uczenia w zależności od liczby wierzchołków pomocniczych. Pokazała także za pomocą automatycznie zbudowanych sieci, że dodanie szumu do położenia wierzchołków kontrolnych może zwiększyć odporność sieci na wpadanie w niewytrenowane minima. Zaskakują tutaj wyniki zilustrowane na rysunku 4.9a, które pokazują, że dla określonego przejścia pomiędzy wierzchołkami kontrolnymi dla pewnej liczby wierzchołków następuje skokowe pogorszenie wyników zbieżności. Pod kątem skuteczności procesu uczenia i znajdowania minimum funkcji błędu, wydaje mi się, że warto byłoby też sprawdzić inne metody znajdowania minimum oprócz metody gradientu prostego.

Rozprawa napisana jest w języku angielskim. Redakcja zarówno pod względem językowym i matematycznym jest staranna i przejrzysta poza usterkami, które przytaczam poniżej. Nie znalazłem błędów w rozumowaniach. Autorka przedstawia czytelnikowi niezbędne definicje, stosowane twierdzenia i elementy teorii, co czyni pracę spójną i kompletną, a także ułatwia jej zrozumienie. Każdy rozdział (podrozdział) poprzedzony jest opisem jego zawartości, co ułatwia wgłębianie się w jego treść. Podobnie pomaga przedstawienie już we wstępie głównych wyników rozprawy. Może jedynie rozdział czwarty wydaje się zbyt przeładowany różnymi analizami.

Rozprawa stanowi kompletną całość. Zawiera jasno określony cel rozprawy i opis stworzonych algorytmów do uczenia systemu, generowania grafu dla danego zestawu przykładów uczących, automatycznego tworzenia przykładów uczących, dodawania zaburzeń losowych a także ciekawy przykład zastosowania z dynamiki białek.

Konkluzja. Uważam, że praca doktorska mgr Mai Milewskiej spełnia wymogi ustawowe stawiane rozprawom doktorskim oraz wnioskuję o dopuszczenie jej autorki do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Uwagi redakcyjne.

1. W pracach naukowych podpisy tabel zwykle są umieszczane nad tabelami (w artykułach autorki też tak jest). W rozprawie są jednak pod tabelami.

2. Nie wiedzieć czemu autorka odwołując się numerów równań zwykle nie umieszcza ich w nawiasach (tak jest np. w pierwszym zdaniu na stronie 21 ale na tej samej stronie niżej „2.12" jest już w nawiasie ...). Czasami więc trudno zorientować się czy odwołanie jest do równania czy do punktu rozprawy.

3. W literaturze niektóre tytuły czasopism są napisane pełną nazwą a inne tylko skrótem.

4. Strona 26, po wzorze (2.15) funkcja błędu średniokwadratowego $\Phi^{(i)}$ jest dwa razy definiowana.

5. W rozdziale drugim pojawia się po raz pierwszy pojęcie konstrukcji Henneberga, w trzecim pojęcie funkcji (i potencjału) Lennarda-Jonesa ale w całej rozprawie brak jest odnośników do właściwej literatury. Podobnie w przypadku pojęć związanych z grafami czy metody gradientu prostego – albo w ogóle brak jest odnośników do literatury albo pojawiają się dopiero na końcu rozprawy w dodatkach.

6. Strona 52, pierwsze zdanie: „In this chapter, we have proved that our method ..." W tym rozdziale raczej nie ma ścisłego dowodu ...

Literówki

1. Strona 12, „In ENM all particles moves ..." –> „In ENM all particles move ...".

2. Strona 17, „... newtonian dynamics" —> „Newtonian dynamics".

3. Strona 26, „... which is the main results ..." –> „...which is the main result ...".

4. Strona 47, „To depict the mean value of forces ..., we bucketing springs ...". –> „To depict the mean value of forces ..., we bucketed springs ...".

5. Strona 99, podpis pod tabelą B.5: „in the Procedure 6" –> „in Procedure 6".

6. Pozycja [4] literatury: powinno być „Journal".

7. Pozycja [4] literatury: brakuje roku publikacji.

K. Burnecki

Krzysztof Burnecki