

Warszawa, 3.06.2016

Prof. dr hab. inż. Krzysztof Wiśniewski
Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN
ul. Pawińskiego 5B, 02-106 Warszawa
E-mail: kwisn@ippt.gov.pl
Tel. +48 (22) 826 1281, w. 328

Opinia
o osiągnięciu naukowym i istotnej aktywności naukowej
dra inż. Łukasza RAUCHA
w związku z postępowaniem habilitacyjnym w dziedzinie nauk technicznych w
dyscyplinie Informatyka

Podstawę opracowania recenzji stanowi pismo Sekretarza Rady Naukowej IPPT PAN dra hab. inż. Zbigniewa Ranachowskiego z dnia 6.05.2016 r. i dokumenty związane z postępowaniem, które zostały dołączone do ww. pisma.

1. Sylwetka naukowa Habilitanta

Dr inż. Łukasz Rauch uzyskał magisterium z informatyki w 2002 r. i doktorat w specjalności informatyka w roku 2007 na Wydziale Elektrotechniki, Automatyki, Informatyki i Elektroniki Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie. Rozprawa doktorska p.t. "*Design of new algorithms, based on the particles dynamics, dedicated to images and multidimensional data processing*" została wykonana pod kierunkiem dra hab. inż. Jana Kusiaka. (Dodatkowo uzyskał magisterium z ekonomii na AGH w 2003 r.) Od 2003 r. do chwili obecnej Habilitant jest adiunktem na Wydziale Inżynierii Metali i Informatyki Przemysłowej AGH. Dodatkowo jest zatrudniony (na czas określony) w Akademickim Centrum Komputerowym Cyfronet AGH oraz w Wyższej Szkole Zarządzania i Bankowości w Krakowie.

2. Ocena osiągnięcia naukowo-badawczego

Jako główne osiągnięcie naukowe, będące podstawą ubiegania się o nadanie stopnia doktora habilitowanego, dr inż. Łukasz Rauch wskazuje jednotematyczny cykl publikacji, zebranych pod wspólnym tytułem "*Metodyka obliczeń wieloskalowych z wykorzystaniem heterogenicznych architektur sprzętowych*". Cykl ten składa się z **24** prac opublikowanych w ciągu 5 lat (2011-15), co świadczy o znacznej aktywności badawczej Habilitanta w tych latach. Prace te można sklasyfikować w następujący sposób:

Publikacje w recenzowanych czasopismach z Impact Factorem (IF) - 4 prace

- Archives of Civil and Mechanical Engineering IF 1.793, 30 pkt MNiSW
[3], [19] udział własny 25%
- Metallurgical and Material Transactions B IF 1.212, 30 pkt MNiSW
[22] udział własny 50%
- Archives of Metallurgy and Materials IF 1.090, 30 pkt MNiSW
[13] udział własny 30% (podana jako w druku ale już dostępna Vol. 60 (3), pp. 1973–1980)

Publikacje w recenzowanych czasopismach bez IF - 7 prac

- Computer Methods in Materials Science bez IF, 12 pkt. Tabela B MNiSW
[2], [4] udział własny 70%, [7] udział własny 35%, [18] udział własny 60%
- Rudy i Metale Nieżelazne bez IF, 8 pkt. Tabela B MNiSW
[8] udział własny 50%
- Procedia Computer Science (Elsevier, Open Access, SNIP 0.705) bez IF, bez pkt. MNiSW
[1] udział własny 100%, [12] udział własny 40%

Publikacje w recenzowanych materiałach konferencyjnych - 6 prac

- Lecture Notes in Computer Science. eScience on distributed computing infrastructure. Vol. 8500 [11] str. 14, udział własny 50%
- Lecture Notes in Computer Science. Parallel Processing and Applied Mathematics. Vol. 7204, [16] str. 10, udział własny 50%
- MEFORM'2013: simulation von umformprozessen
[9] str. 9, udział własny 70%
- SpringSim '12, Conference Proceedings, online publication
[5] str. 7 (dwu-kolumnowe) udział własny 80%
- 7th IEEE International Conference on e-Science: Stockholm
[17] str. 7 (dwu-kolumnowe) udział własny 50%

XXXII. Verformungskundliches Kolloquium : Leoben
[21] str. 8 (dwu-kolumnowe) udział własny 50%

Książka wydana przez wydawnictwo Elsevier (1 książka)

[24] udział własny 25%

Abstrakty w materiałach konferencyjnych (4 abstrakty)

Cracow'12 Grid Workshop	[10] str. 2, udział własny 50%
III int. conf. on Isogeometric Analysis IGA 2015	[14] str.1, udział własny 50%
PLASTMET'2012	[20] str. 2, udział własny 100%
Cracow'12 Grid Workshop	[23] str. 2, udział własny 30%

Praca w druku w Computer Methods in Materials Science [15] (nie załączono zawiadomienia o przyjęciu pracy)

Praca w recenzji w Journal of Computational Science [6]

Podsumowując, dr inż. Ł. Rauch opublikował 4 prace w recenzowanych czasopismach z Impact Factorem (IF) i ich sumaryczny IF wynosi 5.888 ($2 \times 1.793 + 1.212 + 1.090 = 5.888$). (Habilitant podaje łączny IF 10.041) Ponadto Habilitant opublikował 7 prac w recenzowanych czasopismach bez IF oraz 6 prac w recenzowanych materiałach konferencyjnych; te ostatnie są często wykorzystywane w informatyce ze względu na krótki cykl publikacyjny. Wszystkie recenzowane czasopisma z IF, w których publikował Habilitant, są klasyfikowane przez MNiSW jako 30-to punktowe.

Pomijając cztery 1- lub 2-stronicowe abstrakty, pracę w druku oraz pracę w recenzji, Habilitant opublikował 18 prac. Nieomal wszystkie prace, poza jedną, są współautorskie lecz aż w 14 z nich Habilitant jest pierwszym autorem. Według moich obliczeń (na podstawie danych z Załącznika nr 7), średni udział własny dra inż. Ł. Raucha w przygotowaniu publikacji wynosi ok. 53% w tym: 33% w recenzowanych czasopismach z IF, 61% w recenzowanych czasopismach bez IF i 59% w recenzowanych materiałach konferencyjnych.

Zadeklarowany udział własny w powyższych publikacjach został potwierdzony oświadczeniami współautorów: profesorów J. Kitowskiego, J. Kusiaka, R. Kuziaka, M. Pietrzyka, doktorów habilitowanych Ł. Madeja, D. Szeligi, a także: Dr . D. Króla, M. Pernach, R. Słoty, magistrów M. Ambrozińskiego, D. Bachniaka, K. Bzowskiego, R. Gołąba, J. Liputa, P. Nowaka, P. Spytkowskiego, oraz inżynierów K. Imiołka i A. Rodzaja. Oświadczenia te nie wzbudzają moich zastrzeżeń ponieważ określają udział merytoryczny współautorów (choć w sposób bardzo ogólny). Natomiast domyślam się, że procentowy udział własny podany w Załączniku nr 7 jest autorstwa Habilitanta.

Uważam, że publikacje te dobrze świadczą o zakresie i wartości badań prowadzonych przez Habilitanta. Na pewno widoczny jest brak publikacji w czasopismach o wysokim IF i wysoko punktowanych przez MNiSW; w moim odczuciu w pewnym stopniu jest to kompensowane przez współautorstwo książki wydanej w przez wydawnictwo o zasięgu światowym Elsevier w 2015 r.

Dziedzinę badań Habilitanta stanowią zagadnienia informatyczne związane z modelowaniem numerycznym na tzw. heterogenicznych architekturach sprzętowych składających się z urządzeń obliczeniowych o różnej budowie, bazujących na procesorach i kartach graficznych i obliczeniowych (GPU i GPGPU). Architektury takie umożliwiają rozpraszanie i wielopoziomą paralelizację obliczeń, co może dość znacznie je przyspieszyć i umożliwić zwiększenie rozmiarów analizowanych modeli; jest to bardzo istotne w wielu zastosowaniach. Uważam, że pełne wykorzystanie tych możliwości jest trudne i wymaga zaawansowanej wiedzy informatycznej i numerycznej.

Habilitant specjalizuje się w obliczeniach wielkoskalowych na potrzeby inżynierii materiałowej i metalurgii. W swoich pracach stosuje następujące metody obliczeniowe: Statykę i Dynamikę Molekularną (MS/MD), Automaty Komórkowe (CA) oraz Metodę Elementów Skończonych (FE). Metody te łączy następująco: a) MS/MD+FE do symulacji nano-makro lub nano-mikro, b) CA+FE (podejście CAFE) do symulacji mikro-makro oraz c) FE+FE (podejście FE²) do symulacji mikro-makro. Wymaga to opracowania i implementacji procedur numerycznych wykorzystywanych dla każdej ze skal a następnie opracowania szeregu zagadnień o charakterze informatycznym związanych z podziałem i zarządzaniem zadaniami obliczeniowymi na heterogenicznym sprzęcie. Od strony programistycznej – Habilitant wykorzystuje standardy OpenCL, CUDA i MPI.

Prace Habilitanta stanowiące jednotematyczny cykl publikacji można podzielić na 2 grupy :

1. Prace [7,8,19,9,21,22,11,12,13] (wymieniam w kolejności opublikowania, pogrubione numery oznaczają prace w czasopismach z IF), a także abstrakty konferencyjne [10,14] oraz praca w druku [15], dotyczą metody Statystycznie Podobnych Reprezentatywnych Elementów Objętościowych (SSRVE) zastosowanej do obliczeń wielkoskalowych dla materiałów z mikrostrukturą. W większości powyższych prac stosowane jest podejście FE² a w ostatnich pracach [14] i [15] zastosowano na poziomie mikro elementy izogeometryczne (wykorzystujące NURBS) zamiast elementów skończonych. Podstawowa koncepcja SSRVE została zaproponowana w pracy [Schroeder, Balzani, Brands, 2011] i sprowadza się ona do poszukiwania uproszczonej mikrostruktury periodycznej o podobnych statystycznie cechach – celem jest redukcja modelu i przyspieszenie obliczeń. Jest to metoda dużo bardziej skomplikowana niż klasyczna metoda RVE i Habilitant umiejętnie rozwija ją w swoich pracach, rozwiązując cały szereg szczegółowych problemów potrzebnych do jej implementacji w 2D i 3D.

W metodzie SSRVE rzeczywista mikrostruktura zastępowana jest periodyczną strukturą złożoną z SSRVE. Proces generowania SSRVE jest skomplikowany i składa się z wielu etapów, takich jak: analiza obrazu, obliczanie współczynników kształtu i optymalizacja. Analiza obrazu zawiera: 1) filtrowanie metodą Dynamic Particles opracowaną w [Rauch, Kusiak, 2007] oraz 2) segmentację obrazu, żeby rozseparować fazy materiału i przeanalizować ziarna. (Segmentacja zajmowano się też w [Rauch, Madej, 2010]; ustalono wartość progową na skali szarości służącą do rozseparowania jasnych i ciemnych obszarów obrazu.) Ziarna mogą być dalej analizowane algorytmem wykrywania brzegu. W [7] analizowano współczynniki kształtu opisujące fazę ciemną materiału i oprócz 4 opisanych wcześniej w literaturze, zaproponowano 9 dodatkowych, w tym 4 wyłącznie do analizy obrazów cyfrowych. Przeprowadzono analizę wrażliwości i dokonano selekcji parametrów dla szeregu mikrostruktur. Celem selekcji jest redukcja liczby parametrów dla zagadnienia optymalizacji służącym do tworzenia SSVRE. Funkcja celu (kosztu) jest sformułowana za pomocą współczynników kształtu. Implementacja procedury optymalizacji bazuje na algorytmie genetycznym i aproksymacji splajnami, co daje gładkie kształty inkluzji. W [7] opisano także statystyczne miary służące do charakteryzacji mikrostruktury i zaproponowano szereg uproszczeń, które poprawiają efektywność bez istotnego pogarszania dokładności.

Inną ważną kwestią dla efektywności metody jest liczba punktów referencyjnych służących do określania kształtu inkluzji w SSRVE; problem ten podjęto w [8]. Dokonano porównań naprężeń maksymalnych i rozkładu naprężeń w SSRVE; sformułowano postulaty dotyczące obliczeń wielkoskalowych. W [19] testowano SSRVE dla problemu o znaczeniu przemysłowym i podano czasy obliczeń dla RVR i SSRVE; różnice są znaczne i bardzo dobrze uzasadniają zastosowanie SSRVE. Prace [9,21] są poświęcone efektywności obliczeń wielkoskalowych i omówione są w nich 3 podejścia, dość ogólnie, oraz obliczane są ciekawe przykłady. [21] poświęcona jest analizie wrażliwości i testowane są 2 metody, Morrisa (klasyczna) i Sobola, która wykorzystuje metodę Monte Carlo. Dla tej drugiej metody przygotowano bibliotekę, która produkuje inputy i oblicza zależności input-output; wykorzystano platformę SCALARM (opracowana na AGH przez grupę prof. J. Kitowskiego) do wysyłania i monitorowania zadań w gridzie. Tzw. Data Farming wykorzystano w [12] i w konkluzji podkreślono, że integrując swoje kody z tą platformą otrzymano silną paralelizację, ale nie podano konkretów. Do ww. platformy nawiązuje także praca [13], w której podano, że stosując 40 węzłów obliczeniowych zredukowano czas obliczeń z 260 do 8 godzin, co jest istotną poprawą.

Warto zaznaczyć, że sama metoda SSRVE jest traktowana jako sposób poprawienia efektywności obliczeń w modelowaniu wielkoskalowym. Oceniam, że ta metoda ma bardzo duże znaczenie praktyczne i wymaga zaawansowanej znajomości metod obliczeniowych. Wydaje mi się, że opracowanie metody SSRVE jest istotnym osiągnięciem Habilitanta.

2. Prace [17,5,16,1,2,18,3] (wymieniam w kolejności opublikowania, pogrubiony numer oznacza pracę w czasopiśmie z IF) a także abstrakty konferencyjne [20,23], praca złożona [6] i praca w druku [4] dotyczą w większości zaawansowanych obliczeń na architekturach heterogenicznych. Habilitant stawia szereg celów naukowych związanych z efektywnością obliczeń na potrzeby inżynierii materiałowej i metalurgii i umiejętnie je realizuje rozwijając kilka metod obliczeniowych:

a) Metoda CA+FEM dla modelowania wielkoskalowego: w [17] porównano wydajność 2 kart graficznych, zidentyfikowano trudności z uzyskaniem dobrej skalowalności; ten problem potwierdzono także dla innej konfiguracji sprzętowej w [5] oraz w [16], gdzie uzyskano przyśpieszenia (ang. speedup) poniżej 5 na karcie ze 192 procesorami strumieniowymi. Metodę CA+FEM zastosowano do modelowania zniszczenia narzędzia do kucia na gorąco w [18]. W jednym węźle połączono 2 CPU i 4 GPU; badano skalowalność ze względu na parametr GWS/LWS i zastosowano metodę podziału domeny ze względu na oszacowaną skalowalność urządzeń dla wielopoziomowej paralelizacji modelu CA. W [3] opracowana została uniwersalna platforma CA umożliwiająca automatyczne generowanie kerneli obliczeniowych na podstawie modeli numerycznych zaimplementowanych z wykorzystaniem API opracowanej platformy.

b) Metoda Molecular Statics (MS): dla obliczeń mikrostruktury materiałowej z dyslokacjami testowano 3 konfiguracje hardware'u składającego się z CPU i GPGPU i uzyskano bardzo dobrą skalowalność [2,1].

Oceniam ponadto, że implementacja powyższych dwóch metod wymagała wysokich umiejętności programistycznych.

Podsumowując, charakter prac przedstawionych jako osiągnięcia naukowe jest informatyczno-numeryczny i dotyczy aspektów obliczeniowych istotnych dla zaawansowanych problemów inżynierii materiałowej i metalurgii. Tematyka prac jest spójna a ich poziom odpowiada wymaganiom stawianym w przewodach habilitacyjnych.

3. Opinia o istotnej działalności naukowej

Po doktoracie, Habilitant pracował jeszcze nad kilkoma innymi zagadnieniami:

- a) analizą obrazów, w której opracował i opublikował kilka algorytmów do segmentacji i klasteryzacji obrazów, które umożliwiają Cyfrową Reprezentację Materiału (DMR),
- b) projektowaniem oraz implementacją systemów komputerowych wspomagających zarządzanie przedsiębiorstwami, co ma związek z drugim kierunkiem studiów, które ukończył Habilitant, tj. z zarządzaniem. Jest on współautorem rozwiązania typu *Customer Relationship Management (CRM)*, które zostało wdrożone w kilkunastu przedsiębiorstwach w Polsce.

- c) wspomaganie projektowania procesów przemysłowych z uwzględnieniem analizy wrażliwości i optymalizacji a także z wykorzystaniem infrastruktur HPC.

Powyższe kierunki swojej pracy Habilitant omawia krótko w punkcie 5 autoreferatu, niestety nie podaje numerów wiążących się z nimi prac z Wykazu II A. Wykaz ten zawiera listę 21 prac z bazy Journal Citation Reports (JCR). Warto zauważyć, że 10 z tych prac zostało opublikowanych w czasopismach z IF,

Archives of Civil and Mechanical Engineering [31] IF 0.855 (21 cytowań) , [32] IF 0.383 (17 cytowań)	30 pkt MNiSW
Int J for Multiscale Computational Engineering [34] IF 0.768 (10 cytowań)	25 pkt MNiSW
Archives of Metallurgy and Materials [35] IF 0.187 (9 cytowań) , [25] IF 1.090, [29] IF 0.763	30 pkt MNiSW
Steel Research International [27] IF 0.486, [28] IF 0.493, [33] IF 0.455, [36] IF 0.344	25 pkt MNiSW

i że 4 pierwsze z nich są cytowane. Dla każdej z powyższych publikacji Habilitant zadeklarował, że jego udział polegał na pracach związanych z aspektami informatycznymi i dodatkowo określił jakiego zagadnienia ten udział dotyczył. Ponadto, jak podano w Wykazie II E, po doktoracie Habilitant opublikował także 30 innych prac w innych czasopismach (nie będących w bazie JCR) lub abstraktów.

Podsumowując:

- Łączny opublikowany dorobek naukowy Habilitanta stanowi 100 prac (w tym krótkie abstrakty) z czego 14 zostało w czasopismach z IF. Jego sumaryczny IF wynosi 10.04 a suma punktów MNiSW dla tych publikacji wynosi 395 (120+275).
- Dla przedstawionego osiągnięcia naukowego sumaryczny IF wynosi 5.888 a suma punktów MNiSW dla tych publikacji wynosi 120.
- Według Web of Science, Jego indeks Hirscha wynosi 5 a liczba cytowań 77 (bez autocytowań 61), co świadczy o tym, że ta tematyka badań należy do uprawianego obecnie nurtu nauk obliczeniowych.

Warto zauważyć, że powyższe wskaźniki bibliometryczne przekraczają wymagania stawiane osobom ubiegającym się o stopień doktora habilitowanego przez Radę Naukową IPPT PAN (indeks Hirscha 4 i 50 cytowań) oraz, że wymagania te są w IPPT wyższe niż zwyczajowo stosowane w politechnikach i szkołach wyższych, które prowadzą działalność dydaktyczną.

4. Ocena dorobku dydaktycznego i popularyzatorskiego oraz współpracy międzynarodowej

Od 2003 r. do chwili obecnej Habilitant jest adiunktem na Wydziale Inżynierii Metali i Informatyki Przemysłowej AGH i prowadzi zajęcia ze studentami. W tym czasie był opiekunem 45 obronionych prac magisterskich oraz 35 prac inżynierskich. Ponadto, jest promotorem pomocniczym dla 5 prac doktorskich, z których 1 została już obroniona. Od 2007 r. jest opiekunem naukowym koła MetalSoft, które zrzesza 30 studentów. Deklaruje także udział w pracach 6 komisji wydziałowych. (We wniosku nie znalazłem informacji z jakich przedmiotów Habilitant prowadzi zajęcia ze studentami.)

Jeżeli chodzi o działalność popularyzatorską, to Habilitant wygłosił łącznie 35 referatów na międzynarodowych konferencjach a także 1 wykład zaproszony na międzynarodowej konferencji MetalForming w Palermo w 2014 r. Dodatkowo uczestniczył w przygotowaniu 25 publikacji i wystąpień konferencyjnych, które zostały wygłoszone przez inne osoby. Był członkiem komitetów organizacyjnych 3 konferencji naukowych.

Recenzował 20 prac dla szeregu czasopism międzynarodowych, m.in. J. of Computational Science, Computer Science J., Medical and Biological Engineering and Computing, Bio-Algorithms and Med-Systems, Archives of Civil and Mechanical Engineering, Archives of Metallurgy and Materials, J. of the Franklin Institute, Lecture Notes in Computer Science, Computer Methods in Material Science. Warto zauważyć, że w części z tych czasopism Habilitant dotychczas nie publikował swoich prac.

W 2007 r. Habilitant otrzymał Best Paper Award of Int. Society for Productivity Enhancement a następnie otrzymał 5 nagród od Rektora AGH w tym: 1 indywidualną i 1 zespołową za osiągnięcia naukowe i publikacyjne, 3 dla opiekuna naukowego pracy wyróżnionej i 1 za pracę na rzecz studenckiego ruchu naukowego w AGH.

Habilitant kierował 2 projektami badawczymi NCN, był głównym wykonawcą w 7 projektach NCN, 9 NCBiR i 10 w projektach strukturalnych, zleconych, celowych i innych. Deklaruje udział w 14 konsorcjach badawczych i w 1 sieci badawczej. Wykonał 3 ekspertyzy krajowe.

Uważam, że dorobek dydaktyczny dra inż. Łukasza Raucha na AGH nie budzi zastrzeżeń, a jego aktywność projektowa jest z całą pewnością bardzo wysoka.

5. Wniosek końcowy

Stwierdzam, że dr inż. Łukasz Rauch ma odpowiednie kwalifikacje naukowe umożliwiające samodzielne prowadzenie badań naukowych. Jego osiągnięcia naukowe stanowiące znaczny wkład w rozwój dyscypliny informatyka, w szczególności opracowanie metody Statystycznie Podobnych Reprezentatywnych Elementów Objętościowych (SSRVE), oraz pozostały istotny dorobek naukowy mogą służyć za podstawę do rozpatrzenia wniosku o nadanie mu stopnia doktora habilitowanego nauk technicznych w dyscyplinie informatyka.

K. Wiśniewski

3.06.2016