

**Recenzja rozprawy doktorskiej pt. „Teoretyczne metody przewidywania prędkości ultradźwięków w warunkach zwiększonego ciśnienia i temperatury w wybranych cieczech jonowych” mgr. Jeremiasza Pilarza przygotowanej na wydziale chemii Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach**

Rozprawa doktorska mgr. Jeremiasza Pilarza jest monografią opartą o trzy publikacje, które ukazały się w dobrych czasopismach chemicznych takich jak Journal of Molecular Liquids i Journal of Chemical Thermodynamics. We wszystkich publikacjach mgr Pilarz jest pierwszym autorem. Prace mgr Pilarza już spotkały się z zainteresowaniem świata nauki, gdyż w ciągu 3 lat uzyskały 25 cytowań według Google scholar. Praca doktorska dotyczy wyznaczania prędkości dźwięku oraz gęstości cieczy jonowych w funkcji ciśnienia i temperatury, za pomocą czterech różnych metod teoretycznych. Obie wielkości pozwalają na wyznaczenie drugich pochodnych potencjałów termodynamicznych czyli podatności termodynamicznych takich jak np. ściśliwość adiabatyczna, izotermiczna czy rozszerzalność termiczna pod stałym ciśnieniem, które dla cieczy jonowych nie są łatwe do zmierzenia. Z klasycznej termodynamiki wiadomo, że jeśli mamy dla układu jednoskładnikowego trzy podatności termodynamiczne, to z nich możemy wyznaczyć wszystkie inne wielkości termodynamiczne charakteryzujące ten układ. Praca jest napisana bardzo przystępnie, wnioski nie budzą zastrzeżeń. Cztery metody użyte do wyznaczania prędkości dźwięku to: CP-PC-SAFT (metoda termodynamiczna dopasowywania równań stanu do kilku punktów eksperymentalnych), metoda spinodalna (metoda termodynamiczna oparta o wyznaczenie kilku punktów spinodali), sieci neuronowe oraz uczenie maszynowe. Autor pokazał, że nawet jeśli sieć neuronowa przewiduje poprawnie gęstość i prędkość dźwięku (błędy dużo poniżej 1%), to z tak otrzymanych danych nie można dostać poprawnie pierwszej pochodnej czyli izobarycznej rozszerzalności termicznej. Kolejnym ważnym wynikiem pracy jest pokazanie, że znakomite wyniki, dotyczące przewidywania danych termodynamicznych w obszarach gdzie trudno je zmierzyć, można otrzymać, gdy łączy

się metody termodynamiczne, dużą liczbę danych wejściowych do uczenia z sieciami neuronowymi a w przyszłości ze sztuczną inteligencją. Niewątpliwie praca doktorska mgr. Pilarza wyznacza nowe kierunki uzyskiwania danych termodynamicznych bez konieczności wykonywania wielu żmudnych pomiarów. Praca bardzo mi się podobała. Oprócz mnie wyniki pracy doktoranta sprawdziło co najmniej sześciu niezależnych recenzentów Jego publikacji oraz trzech edytorów i dlatego nie mam wątpliwości, że wyniki spełniają wymogi stawiane w rozprawach doktorskich. **Stawiam wniosek o dopuszczenie mgr. Jeremiasza Pilarza do dalszych etapów przewodu doktorskiego.** Poniżej przedstawię dla porządku kilka uwag dotyczących rozprawy.

Praca jest jednolita tematycznie. Liczy ponad 200 stron, z czego 100 stron to tekst główny a resztę stanowi bibliografia, kody numeryczne Autora oraz wyniki szczegółowe przedstawione w formie wykresów. Praca dotyczy ważnego w chemii zagadnienia danych termodynamicznych dla cieczy jonowych. Jest to grupa związków mających zastosowanie jako nietlone rozpuszczalniki, zastępujące rozpuszczalniki organiczne. Autor zgodnie z tym co obiecał w tytule, wyznaczył prędkość dźwięku w cieczach jonowych w zakresie ciśnień od 1 bara do około 50 barów i temperatur od 278 K do 393 K z bardzo dobrą dokładnością. Użył do tego celu czterech różnych metod w celach porównawczych i metodologicznych. Wytyczył nowe podejście do analizy danych termodynamicznych.

Mam do Autora kilka pytań. W pracy Autor użył wielowarstwowej sieci neuronowej i zadawał na wejściu pięć zmiennych: masę molową kationu, masę molową anionu, ciśnienie, temperaturę oraz dodatkowy parametr, który pozwalał na rozróżnienie kationów mających te same masy molowe, ale będących lustrzanymi odbiciami względem azotu (dla kationów imizadolowych). Czy była to minimalna liczba parametrów? Czy liczba parametrów których z

sensem można użyć skaluje się z liczbą danych do uczenia? Czy można byłoby w jakiś sposób używać metod termodynamiki do trenowania sieci neuronowej np. skoro gęstość była wyznaczona poprawnie to zaimplementowanie dodatkowo metody CP-PC-SAFT (do uczenia sieci) mogłoby skorygować gęstość tak by pochodna po temperaturze przy stałym ciśnieniu była liczona poprawnie? Jak działa sieć neuronowa, jeśli w danych wejściowych pominiemy istotny parametr od którego jeszcze zależałaby prędkość dźwięku?

**Wnoszę o wyróżnienie pracy doktorskiej mgr Jeremiasza Pilarza.** Tak jak napisałem powyżej praca doktorska bardzo mi się podobała. Wyniki zostały opublikowane w trzech dobrych czasopismach, a Autor rozprawy doktorskiej jest ich pierwszym autorem. Te publikacje uzyskały już 25 cytowań. Praca doktorska mgr. Pilarza wyznacza nowe trendy w termodynamice w oparciu o uczenie maszynowe i sieci neuronowe. Sądzę, że w przyszłości powstanie sztuczna inteligencja na wzór AlphaFold i ucząc się na podstawie dostępnych danych termodynamicznych będzie w stanie przewidzieć równania stanu nowych substancji chemicznych. AlphaFold został nauczony zwijania białek na bazie 170 tys. struktur już zwiniętych białek z baz danych. Następnie na tej podstawie przewidział 200 milionów struktur przestrzennych wszystkich znanych białek, rozwiązując jeden z wielkich problemów biologii molekularnej czyli jak z sekwencji aminokwasów uzyskać przestrzenną strukturę białka. Podobnie stanie się w termodynamice, a praca doktorska mgr. Jeremiasza Pilarza jest tego najlepszym dowodem.

Prof. dr hab. Robert Hołyst Kierownik Zakładu Fizykochemii Miękkiej Materii

Instytut Chemii Fizycznej PAN

Kasprzaka 44/52, 01-224 Warszawa

<https://softmatter.ichf.edu.pl/>

[rhozyst@ichf.edu.pl](mailto:rhozyst@ichf.edu.pl)