



Dr Piotr Wróbel

Uniwersytet Jagielloński

Rozmowa z autorem pracy:

„Studies of interactions in solutions based on Molecular Dynamics methods and simulated vibrational spectra”

Co zdecydowało o poświęceniu pracy doktorskiej oddziaływaniom w roztworach wybranych substancji z potencjałem wykorzystania w nowoczesnych bateriach?

Gdy rozpocząłem współpracę ze swoim zespołem w 2017 roku, mój Promotor już realizował grant na prowadzenie badań w tej tematyce. Wtedy dla jednej z takich substancji przeprowadziłem symulacje, które stanowiły treść mojej pracy magisterskiej. Wyniki były zadowalające i wskazywały na zasadność użycia zastosowanej metodologii do tego typu układów. Stąd naturalną była decyzja o kontynuacji działań w tej dziedzinie.

Co w Pańskich badaniach stanowiło największe wyzwanie, jeśli weźmiemy pod uwagę pozyskiwanie danych oraz opracowywanie wyników na ich podstawie?

W kwestii pozyskania danych największym wyzwaniem było otrzymanie sensownego zbioru uczącego dla uczenia sieci neuronowych przewidujących energię potencjalną dla zadanej geometrii układu. Wymagało to starannego dobrania różnorodnych geometrii, także takich z „nienaturalnie” porozciągany lub powyginanymi wiązaniami, tak aby wyuczony model umiał przewidzieć, że są to struktury niekorzystne energetycznie.

W przypadku opracowania wyników raczej było to liczenie funkcji autokorelacji czasu przebywania, ze względu na złożoność pamięciową algorytmu zastosowanego do jej obliczenia oraz moje – w danym czasie – niewielkie doświadczenie w implementacji tego typu zagadnień.

W pracy przedstawia Pan potencjalne alternatywy dla symulacji za pomocą dynamiki molekularnej ab initio (AIMD). Jak ocenia Pan potrzebę poszukiwania rozwiązań o mniejszym koszcie obliczeniowym?

Uważam, że rozwój metod o mniejszym koszcie obliczeniowym i sensownym kompromisie w kwestii dokładności wyników w stosunku do metod ab initio jest pożądany w kontekście szerszego zastosowania takich badań np. w przemyśle. AIMD, pomimo tego, że prowadzi do rezultatów zbliżonych do wartości eksperymentalnych, wciąż wymaga stosunkowo dużego czasu obliczeniowego – przykładowo otrzymanie 35 ps symulacji dla układu zawierającego 50 cząsteczek węgla etylenu (tzn. 500 atomów) zajęło około miesiąca.

W jaki sposób zasoby Cyfronetu przysłużyły się realizacji części Pana badań związanej z obliczeniami i ich analizą?

Zasoby Cyfronetu właściwie umożliwiły wykonanie jakichkolwiek badań – superkomputer Prometheus a potem Ares były wykorzystywane do prowadzenia wszystkich symulacji (AIMD czy DFTB),

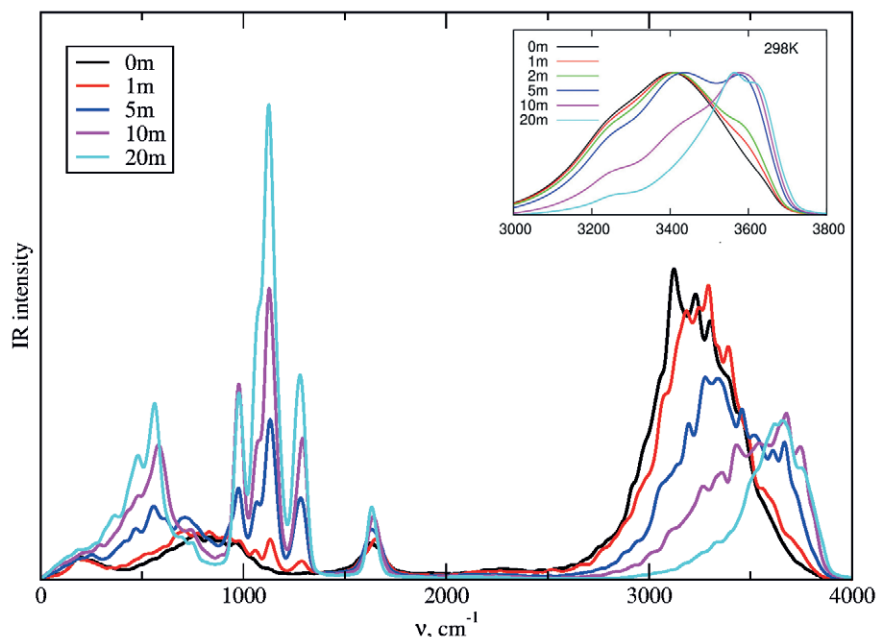
a w późniejszym czasie dedykowana partycja Aresa z układami GPGPU posłużyła do uczenia sieci neuronowych.

Jaki aspekt pracy naukowej daje Panu największą satysfakcję?

Najlepszy jest ten moment zadowolenia, kiedy po długiej pracy, w trakcie której pojawiło się zwątpienie, w końcu zaczyna się klarować wyraźny i oczekiwany wynik.

Co mógłby Pan doradzić osobom, które dopiero rozpoczynają studia doktoranckie? Na co te osoby powinny zwrócić największą uwagę?

Polecam znaleźć swoją niszę, którą się lubi, i nie oglądać się na działalność kolegów z roku. I to mimo tego, że w innym zespole publikuje się więcej, ma się więcej grantów, itd.; nie zapominajmy, że trawa po drugiej stronie ogrodzenia zawsze wydaje się bardziej zielona. Warto korzystać z wyjazdów konferencyjnych w celu oswojenia się z wystąpieniami publicznymi, po tym obrona nie będzie już stresem a formalnością. Dodatkowo ważne jest branie udziału w konkursach na finansowanie badań. Nawet jeśli szanse na wygraną są niewielkie, podstawowa zasada jest prosta – kto nie składa wniosków, ten nic nie wygrywa. Na koniec niestety też bardzo pragmatyczna uwaga – na wypadek, gdyby nie udało się kontynuować kariery naukowej po doktoracie, bezcenne jest zdobycie kwalifikacji umożliwiających inną pracę zawodową. Zapewnia to bardzo duży komfort psychiczny.



Widma w podczerwieni otrzymane z symulacji AIMD dla wodnych roztworów LiTFSI. Wstawka przedstawia eksperymentalne widma w zakresie drgań O-H pochodzące z publikacji: Y. Zhang, N. H. C. Lewis, et. al., J. Phys. Chem. B 125 (2021), 4501–4513