



dr Anna Styrz

Rozmowa z autorką pracy: „Hybrydowe algorytmy optymalizacji globalnej – poszukiwanie niskoenergetycznych konformacji cząsteczek chemicznych”.

W którym momencie swojej edukacji zainteresowała się Pani chemią na poważnie?

Moi rodzice są chemikami, więc już od wczesnego dzieciństwa fascynowały mnie te wszystkie dziwne probówki i tajemnicze rzeczy, które się w nich dzieją. Na etapie szkoły średniej interesowałam się równolegle matematyką, fizyką, chemią oraz informatyką. Nie mogłam wybrać tylko jednej dziedziny nauki i dlatego postanowiłam rozpocząć międzywydziałowe studia matematyczno-przyrodnicze. Niestety, w pewnym momencie musiałam wybrać kierunek wiodący i – koniec końców – zdecydowałam się na chemię. W mojej pracy doktorskiej starałam się jednak połączyć wszystkie moje zainteresowania i tak oto doszłam do nowej metody globalnej optymalizacji struktury geometrycznej cząsteczek.

Proszę nam zatem opowiedzieć, czym jest zaprezentowana w Pani doktoracie „inteligentna ewolucja”?

Jest to właśnie metoda globalnej optymalizacji funkcji wielu zmiennych. Łączy ona w sobie standardowy i szeroko stosowany w informatyce algorytm genetyczny z siecią neuronową. Algorytm mój stara się zaimplementować coś, co właśnie można nazwać „inteligentną ewolucją”. Chodzi tu o ewolucyjny proces, który nadzorowany jest przez sieć neuronową, która z kolei zmienia parametry tej ewolucji tak, żeby uzyskać lepsze rezultaty. Innymi słowy: poprzez użycie sieci neuronowej do dynamicznego sterowania procesem ewolucji unika się tu najpoważniejszej wady dotychczas stosowanych algorytmów genetycznych, jaką jest konieczność dobrania a priori odpowiedniej parametryzacji dla optymalizowanej funkcji.

Jakie są praktyczne implikacje tej metody?

Potencjalne zastosowania są bardzo szerokie. Zwykłe algorytmy genetyczne wykorzystywane są obecnie do wszelkich zadań optymalizacyjnych, w każdej dziedzinie życia. Raz działają lepiej, raz gorzej. „Inteligentna ewolucja” może być stosowana w podobnych sytuacjach, przy czym skuteczność jej działania powinna być lepsza. W mojej pracy pokazuję zasadność wykorzystania nowego rodzaju algorytmu do optymalizacji struktur cząsteczek chemicznych, ale można nim optymalizować wszystko: od planu lekcji po działanie systemu zarządzającego światłami drogowymi. W każdej dziedzinie życia można próbować zaimplementować ten algorytm – tak mi się wydaje. Będą natomiast obszary związane z naszym codziennym funkcjonowaniem, w których się on sprawdzi, a będą też takie obszary, w których zadziała on trochę gorzej. Wszystko to zależy od wielu czynników i wymaga dodatkowych testów.

Które z zasobów Cyfronetu okazały się szczególnie pomocne podczas prac nad Pani algorytmem i całym doktoratem?

Przede wszystkim korzystałam z superkomputera Zeus – to na nim uruchamiałam swój program i wykonywałam obliczenia.

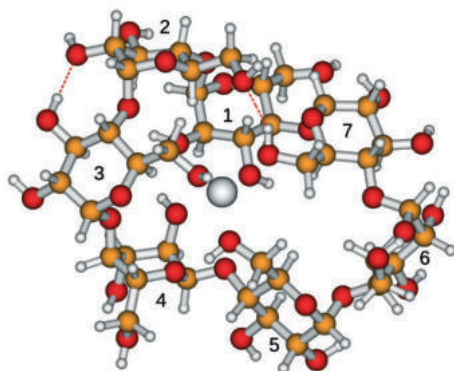
Oprócz chemii czy informatyki, jest jeszcze jedna dziedzina, której poświęca Pani swój czas, i w której odnosi Pani spore sukcesy. Jak udaje się Pani łączyć pracę naukową ze sportem?

Od dwudziestu lat trenuję lekką atletykę (najdłużej skok wzwyż). Staram się brać udział w zawodach, np. w Akademickich Mistrzostwach Polski. W zeszłym roku startowałam w Drużynowych Mistrzostwach Polski i Ekstraklasie Lekkoatletycznej. Łączenie sportu z pracą naukową z pewnością nie jest łatwe, ale jeszcze jakoś mi się to udaje. Poza tym odskocznia od nauki jest potrzebna.

Czy ma Pani radę dla młodych naukowców, rozpoczynających dopiero pracę nad swoim doktoratem?

Tak, mam jedną radę czy właściwie przestrożę. Polecałabym każdemu doktorantowi wybranie tematu, który jest dla niego naprawdę ciekawy. W wybraną dziedzinę badań trzeba się zagłębić na dłużej, poświęcić jej wiele godzin swojego cennego czasu, mieć do niej serce. Wszystko to jest szalenie trudne, jeśli zdecydujemy się nie na zajmowanie obszarem, który nas interesuje, ale czymś, co jest w danym momencie modne, albo korzystne z jakiś innych względów. W tym drugim przypadku ukończenie doktoratu może być bardzo ciężkie, jeżeli nie niemożliwe. Po prostu trzeba lubić to, co się robi, trzeba umieć się tym bawić, a nie być wewnątrz – albo i nawet zewnątrz – zobligowanym do wykonania jakiejś pracy.

Dziękuję za rozmowę.



Najbardziej korzystna energetycznie konformacja kompleksu β -cyklodekstryny i jonu Mg^{2+} (zachowująca chiralność atomów)