

dr hab. inż. Renata Słota, prof.AGH
Wydział Informatyki,
Akademia Górniczo-Hutnicza
Al. Mickiewicza 30,
30-059 Kraków
e-mail: renata.slota@agh.edu.pl

Kraków, dn. 5.02.2026 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej

mgr inż. Bartosza Bosaka

zatytułowanej:

Methods for Modelling and Assessing Confidence of Heterogeneous Multiscale Simulations in High-Performance Computing Environments

1. Wstęp

Przedmiotem recenzji jest rozprawa doktorska (Poznań, 2025), która została przekazana mi do recenzji w formie wydruku liczącego sumarycznie 200 stron. Rozprawa napisana jest w języku angielskim i zawiera autoreferat liczący 54 strony oraz załączone publikacje stanowiące rozprawę w formie zbioru opublikowanych i powiązanych tematycznie artykułów naukowych. Rozprawa poprzedzona jest podziękowaniami i streszczeniem w języku angielskim i polskim.

Przedłożona do recenzji rozprawa doktorska stanowi obszerną i spójną monografię poświęconą zagadnieniom modelowania wieloskalowego oraz metodom weryfikacji, walidacji i kwantyfikacji niepewności (VVUQ) w kontekście wysokowydajnych środowisk obliczeniowych. Praca obejmuje łącznie cztery rozdziały autoreferatu oraz zestaw dziewięciu publikacji naukowych, w których Autor rozprawy jest współautorem.

W rozdziale pierwszym autoreferatu przedstawiono kontekst badań, główną hipotezę (własne tłumaczenie z j. ang.): *"Zastosowanie dedykowanych strategii obliczeniowych dla modelowania wieloskalowego oraz procedur weryfikacji, walidacji i kwantyfikacji niepewności (VVUQ) usprawnia proces tworzenia złożonych modeli wieloskalowych, zwiększa efektywność ich wykonywania oraz wzmacnia zaufanie do wyników zaawansowanych symulacji naukowych."* oraz szczegółowy zakres kontrybucji, obejmujący rozwój metod i narzędzi umożliwiających budowę, wykonywanie i ocenę złożonych symulacji wieloskalowych. Autor omawia kluczowe problemy naukowe i techniczne, wskazuje motywację badań, a także podsumowuje obszary własnego wkładu – od uproszczenia procesu tworzenia modeli, przez usprawnienia wykonawcze, po metody wzmacniające wiarygodność symulacji.

Rozdział drugi autoreferatu ma charakter przeglądowy i metodologiczny. Przedstawiono w nim sposób klarowny podstawy teoretyczne obliczeń wieloskalowych, obejmujące m.in. Scale Separation Map, Multiscale Modeling Language oraz Multiscale Modeling and Simulation Framework, a także przegląd nowoczesnych strategii wykonywania symulacji heterogenicznych. W części poświęconej VVUQ i analizie wrażliwości Autor przedstawia zarówno klasyczne metody oceny wiarygodności modeli, jak i techniki przeznaczone do zastosowań na dużą skalę, ze szczególnym uwzględnieniem harmonogramowania zadań i integracji procedur UQ w środowiskach HPC.

Rozdział trzeci autoeferatu zawiera część eksperymentalną, w której Autor omawia opracowane rozwiązania programistyczne oraz analizuje ich praktyczne zastosowanie. Szczególną wartością tej części są liczne studia przypadków z różnych dziedzin nauki i inżynierii — od przepływu krwi i modelowania oddziaływań molekularnych, przez symulacje syntezy jądrowej i zanieczyszczenia powietrza, po epidemiologię i odnawialne źródła energii. Rozdział prezentuje również ewolucję narzędzi wykonawczych oraz porównanie rozwiązań automatyzujących realizację złożonych scenariuszy wieloskalowych i VVUQ, takich jak: MUSCLE2, QCG-PilotJob, portal QCG czy serwis mUQSA.

Rozdział czwarty autoteferatu stanowi podsumowanie pracy, zawiera syntetyczną prezentację wniosków z badań, przegląd osiągniętych rezultatów oraz wskazanie kierunków dalszych prac w obszarze budowy zintegrowanych środowisk do konstruowania, wykonywania i walidacji symulacji wieloskalowych z uwzględnieniem niepewności.

W zakończeniu autoreferatu Autor podkreśla również swoje zaangażowanie w upowszechnianie wiedzy poprzez działalność organizacyjną i współpracę międzynarodową, na przykład w ramach warsztatów MMS towarzyszących konferencji ICCS.

Opisany powyżej autoreferat obejmuje strony 1-54. Integralną częścią rozprawy jest dziewięć publikacji naukowych, załączonych w dalszej części, obejmujących zagadnienia integracji modeli wieloskalowych, automatyzacji przepływów obliczeniowych, rozwoju narzędzi VVUQ oraz zastosowań tych metod w rzeczywistych problemach naukowych. Publikacje te zajmują strony 55-192, po których następuje bibliografia w liczbie około 100 pozycji.

W dalszej części przedstawię recenzję według wymaganego układu.

2. Problem badawczy i jego znaczenie

Jaki jest najważniejszy problem rozważany w rozprawie?

Czy ma on charakter naukowy?

Czy ma on znaczenie praktyczne?

Rozprawa doktorska dotyczy zagadnień związanych z projektowaniem, integracją, uruchamianiem i walidacją złożonych symulacji wieloskalowych w wysokowydajnych środowiskach obliczeniowych. Główny problem badawczy koncentruje się na opracowaniu metod i narzędzi umożliwiających:

- efektywne łączenie modeli opisujących różne skale czasowe i przestrzenne,
- zapewnienie wiarygodności wyników symulacji poprzez zastosowanie procedur VVUQ (verification, validation and uncertainty quantification),
- zwiększenie efektywności wykonania i automatyzacji przepływów obliczeniowych,
- uproszczenie procesów przygotowania, uruchamiania i zarządzania eksperymentami obliczeniowymi wymagającymi zróżnicowanych zasobów obliczeniowych.

Problem ten ma jednoznacznie charakter naukowy, ściśle związany z dziedziną Informatyki technicznej i telekomunikacji, ze szczególnym uwzględnieniem nauk obliczeniowych, systemów równoległych i rozproszonych oraz inżynierii oprogramowania dla systemów dużej skali. Problem ten dotyczy fundamentalnych aspektów organizacji i analizy złożonych symulacji komputerowych

w naukach obliczeniowych. Wieloskalowe obliczenia są obecnie jednym z kluczowych wyzwań obszaru nauk obliczeniowych, zwłaszcza gdy łączy się go z wykonywaniem eksperymentów obliczeniowych na dużą skalę oraz oceną ich wiarygodności.

Jednocześnie problem ten ma duże znaczenie praktyczne. Integracja modeli wieloskalowych oraz procedur VVUQ znajduje bezpośrednie zastosowanie w takich dziedzinach, jak inżynieria materiałowa, biologia obliczeniowa, chemia kwantowa, modelowanie środowiskowe czy medycyna obliczeniowa. Współczesne modele naukowe i inżynierskie w wielu wypadkach wymagają integracji wielu skal, a ich rosnąca złożoność powoduje konieczność stosowania automatyzacji oraz inteligentnego zarządzania obciążeniem obliczeniowym. W wielu obszarach, takich jak biomedycyna, energetyka, klimat czy epidemiologia, kluczowego znaczenia nabiera ocena niepewności i wiarygodności wyników symulacji. Dodatkowo rośnie zapotrzebowanie na powtarzalność obliczeń oraz intuicyjne narzędzia, które eliminują barierę wejścia dla użytkowników dużych systemów obliczeniowych. W rezultacie prace rozwijające metody automatyzacji, orkiestracji i walidacji symulacji wieloskalowych są niezwykle potrzebne i są wykorzystywane zarówno w badaniach akademickich, jak i w zastosowaniach przemysłowych.

Podsumowując — Autor zajął się jednym z ważnych i - w mojej opinii - trudnych obszarów współczesnych obliczeń naukowych: skalowalnym modelowaniem wieloskalowym połączonym z VVUQ, realizowanym w złożonych środowiskach obliczeniowych. Jest to problem ważny, aktualny i o dużym potencjale zastosowania, czego przykładem są aplikacje w oparciu o które oceniane były wyniki prac opisywanych w artykułach stanowiących osiągnięcie Autora.

3. Wkład autora

Jaki jest najważniejszy wkład autora opisywany w rozprawie?

Jeżeli niezbędne, recenzent może rozróżnić wkład deklarowany przez autora rozprawy i wkład, który sam recenzent uważa za najważniejszy. W tym wypadku należy podać powody, dla których recenzent nie zgadza się z twierdzeniami autora (np. ktoś wcześniej zaproponował już dany pomysł, lub jest on oryginalny, ale niepoprawny z powodów opisanych w sekcji 3). Prosimy także o komentarze dotyczące praktyczności zaproponowanych rozwiązań (może być tak, że problem jest bardzo praktyczny, ale zaproponowane rozwiązanie nie). Jeżeli ma to zastosowanie, recenzent może odwołać się do innych wskaźników jakości (np. jakości publikacji, patentów autora, cytowań, wdrożonych zastosowań...).

Wkład Autora jest rozbudowany, wieloaspektowy i obejmuje trzy spójne obszary badawcze, odpowiadające typowemu cyklowi życia nowoczesnych przepływów w naukach obliczeniowych: **rozwój — wykonanie — walidacja**. Wkład ten jest udokumentowany w dziewięciu publikacjach (P1–P9), obejmujących artykuły w renomowanych czasopismach i materiałach konferencyjnych (ICCS 2012, ICCS 2013, Journal of Com. Sci. 2014, FGCS 2019, ICCS 2021, Philos. Trans. A. Math. Phys. Eng. Sci. 2012, ICCS 2025, Adv. Theory Simul. 2020, PPAM 2024).

Autor współuczestniczył w upraszczaniu procesu tworzenia i integrowania wieloskalowych modeli obliczeniowych, poprzez udział w:

- opracowaniu nowych metod dostępu i realizacji dużych eksperymentów obliczeniowych na heterogenicznych zasobach obliczeniowych,
- rozwoju usług i narzędzi z ekosystemu QCG, umożliwiających automatyzację przygotowania, składania, uruchamiania i monitorowania workflowów,

- zaprojektowaniu i implementacji mUQSA — usługowego środowiska do automatycznej realizacji UQ i SA, eliminującego konieczność obsługi CLI i bibliotek niskopoziomowych,
- umożliwieniu automatycznego składania aplikacji multiscale z heterogenicznych komponentów zgodnych z MML.

Wkład ten obniża próg wejścia użytkownika w uruchamianie symulacji wieloskalowych na dużą skalę.

Autor uczestniczył w zaproponowaniu szeregu metod poprawiających efektywność wykonania obliczeń dla modeli wieloskalowych, m.in. w:

- rozwoju strategii dystrybuowanego i heterogenicznego wykonania symulacji wieloskalowych,
- współtworzeniu i rozwoju MUSCLE2, ze szczególnym uwzględnieniem współdziałania między klastrami i koordynacji modeli,
- adaptacji Multiscale Computing Patterns do optymalizacji różnych scenariuszy wykonania,
- opracowaniu planowania hierarchicznego i metod poprawy wykorzystania zasobów,
- rozszerzeniu QCG-PilotJob o obsługę złożonych scenariuszy multiscale i VVUQ,
- projekcie i implementacji mechanizmów integracji EasyVVUQ z QCG-PilotJob na HPC,
- przeprowadzeniu skalowalnościowych testów wydajnościowych MUSCLE2 oraz usług QCG.

Te działania przenoszą koncepcje teoretyczne obliczeń wieloskalowych do praktycznych, wydajnych i skalowalnych implementacji na zasobach obliczeniowych dużej skali.

Autor uczestniczył również w rozwijaniu metod poprawiających wiarygodność i zaufanie do symulacji. Brał udział w pracach dotyczących:

- integracji metod VVUQ z przepływami wieloskalowymi i ich automatyzacji,
- opracowania narzędzi zapewniających reprodukowalność i śledzenie
- dostarczenia intuicyjnych interfejsów webowych (mUQSA) dla UQ i SA,
- demonstracji skuteczności metod na rzeczywistych przypadkach naukowych: przepływ krwi, kalkulator powinowactwa wiązań, modele fuzji, zanieczyszczenia powietrza, epidemiologia, źródła energii odnawialnej,
- koncepcyjnego wkładu w łączenie wymagań VVUQ (wiarygodność) z wymaganiami HPC (wydajność, skalowalność, użyteczność).

Jest to wkład o dużym znaczeniu dla nauk obliczeniowych i praktyki w systemach obliczeniowych dużej skali.

Niemniej jednak pojawiają się istotne uwagi krytyczne w zakresie wkładu autora. W szczególności na uwagę zasługuje wyjątkowo wieloautorski charakter większości publikacji składających się na dorobek rozprawy. W wielu przypadkach artykuły powstawały w zespołach liczących kilkunastu autorów, co – mimo że jest typowe dla dużych międzynarodowych projektów HPC – utrudnia jednoznaczne wyodrębnienie samodzielnego wkładu doktoranta. Opisy kontrybucji w pracach są przeważnie ogólne i nie pozwalają stwierdzić, które elementy metodologii, implementacji czy analiz wynikają bezpośrednio z jego pracy. W efekcie trudno jednoznacznie ocenić, za które

kluczowe rezultaty przedstawione w publikacjach odpowiada on osobiście, a które są wynikiem wspólnego wysiłku dużego zespołu.

Powyższa trudność dotyczy szczególnie publikacji obejmujących szeroko zakrojone prace nad MMSF, MCP, MUSCLE2 oraz narzędziami komunikacyjnymi, które w rozprawie stanowią ważne elementy opisywanej metodologii, ale w publikacjach mają licznych współautorów. Brak wyraźnego wskazania indywidualnej roli doktoranta w tworzeniu poszczególnych komponentów stanowi więc pewną słabość formalną, ponieważ jednym z fundamentalnych wymogów oceny doktoratu jest możliwość jednoznacznego przypisania autorstwa najważniejszych osiągnięć kandydatowi.

Na tym tle warto jednak zauważyć, że wśród dziewięciu publikacji znajdują się dwie prace pierwszoautorskie (P5 i P7), w których to doktorant pełni główną rolę zarówno koncepcyjną, jak i tekstową. To właśnie te publikacje najlepiej dokumentują jego samodzielny wkład, a co istotne – dotyczą one bezpośrednio elementów kluczowych dla rozprawy: automatyzacji procesów VVUQ, rozwoju systemu QCG-PilotJob, integracji metod niepewności oraz stworzenia platformy mUQSA. Są więc one najbardziej spójną i jednoznaczną podstawą oceny jego dorobku badawczego. W pozostałych pracach wkład doktoranta, choć niewątpliwy, jest trudniejszy do jednoznacznego wyodrębnienia.

Pomimo wskazanych trudności, należy odnotować, że rozprawa zawiera sekcję *Contribution*, w której doktorant przedstawia syntetyczne zestawienie własnych osiągnięć. Choć opis ten mógłby być bardziej szczegółowy i lepiej powiązany z poszczególnymi publikacjami, to jednak pozwala on na odtworzenie realnej roli doktoranta w rozwijaniu omawianych narzędzi i metodologii.

Warto ponadto zwrócić uwagę, że dorobek publikacyjny obejmuje okres ponad dekady (2012–2025), co prowadzi do pewnych wątpliwości dotyczących aktualności i spójności prezentowanych osiągnięć. Najwcześniejsze publikacje, choć wartościowe w czasie powstania, odnoszą się do rozwiązań i narzędzi, które mogą mieć teraz znaczenie historyczne wobec dynamicznego rozwoju metod HPC, AI oraz współczesnych podejść do multiscale computing. Z kolei najnowsze prace są tematycznie adekwatne, lecz stosunkowo zwięzłe i nie zawsze prezentują szczegółowe aspekty implementacyjne. W efekcie trudno jednoznacznie ocenić, które elementy opisanych osiągnięć odzwierciedlają aktualny stan badań autora, a które stanowią kontynuację dawnych projektów bez pełnej ewaluacji w świetle współczesnych wymagań technologicznych.

4. Poprawność

Czy stwierdzenia zawarte w rozprawie są godne zaufania? Czy uzasadnienia są poprawne? Wskaż zauważone słabości i błędy. Wskaż także te aspekty dotyczące poprawności, które są najbardziej wartościowe (elegancja dowodów, plan eksperymentów, analiza danych empirycznych, jakość prototypowego oprogramowania/sprzętu...).

Rozprawa została przygotowana poprawnie, starannie i zgodnie ze standardami badań naukowych w dyscyplinie ITIT.

Ocena poprawności merytorycznej wskazuje, że metody wieloskalowych obliczeń oraz ich formalna organizacja zostały opracowane poprawnie i w sposób logiczny, a opisane strategie wykonawcze są uzasadnione i zgodne z aktualnym, co do okresu publikacji, stanem wiedzy.

Wyniki eksperymentalne są rzetelne i pokazują zarówno skuteczność zastosowanych metod, jak i ich ograniczenia, natomiast badania skalowalności narzędzi przeprowadzono starannie i trafnie zinterpretowano.

Praca zawiera szczegółową analizę złożonych przepływów obliczeniowych, a także klarowne ujęcie schematów stosowanych w modelowaniu wieloskalowym oraz metod hierarchicznego planowania zadań. Na uwagę zasługuje jakość przygotowanych implementacji, mierzących się ze skomplikowanymi środowiskami wykonawczymi i aplikacjami oraz przeprowadzonych testów. Ważnym atutem są również liczne rzeczywiste studia przypadków, które stanowią praktyczną weryfikację zaprezentowanych metod i potwierdzają ich przydatność w rzeczywistych zastosowaniach naukowych.

Nie stwierdzam błędów ani nieścisłości merytorycznych.

5. Wiedza kandydata

Które z rozdziałów (lub sekcji w rozdziałach) rozprawy omawiają istniejący stan wiedzy i dzięki temu potwierdzają ogólny stan wiedzy kandydata w zakresie Informatyki? Jakie obszary tych dyscyplin zostały omówione w tych rozdziałach/sekcjach? Jaka jest opinia recenzenta o jakości tych rozdziałów sekcji? Jaka jest opinia recenzenta o bibliografii? Na ile bibliografia jest kompletna? Prosimy o podanie innych argumentów za lub przeciw stwierdzeniu, że kandydat posiada ogólną wiedzę w dyscyplinie Informatyka techniczna i telekomunikacja.

Autor wykazuje szeroką i pogłębioną wiedzę w obszarze wieloskalowych obliczeń, HPC, VVUQ, SA oraz automatyzacji przepływów obliczeniowych, a także bardzo dobrą znajomość środowisk obliczeniowych i technik programistycznych. Cechuje go biegłość w analizie literatury i umiejętność integrowania jej w spójne ramy metodologiczne. Praca świadczy również o jego dojrzałości naukowej, przejawiającej się w licznych publikacjach w środowiskach międzynarodowych, oraz aktywnym zaangażowaniu w środowisko badawcze, między innymi poprzez współorganizację warsztatów MMS podczas konferencji ICCS.

Rozprawa jednoznacznie potwierdza, że Autor posiada szeroką wiedzę odpowiadającą wymaganiom stawianym doktorom nauk w dyscyplinie **Informatyka Techniczna i Telekomunikacja**.

6. Inne uwagi

Rozprawa jest starannie przygotowana pod względem struktury i języka. Znaczącym atutem pracy jest silna orientacja praktyczna zastosowanych metod, potwierdzona realnymi wdrożeniami i testami przeprowadzonymi w ramach projektów naukowych.

Wieloautorski charakter publikacji oraz brak jednoznacznego powiązania kontrybucji doktoranta z elementami merytorycznymi poszczególnych artykułów utrudniały precyzyjną ocenę jego indywidualnego wkładu. Jednocześnie warto podkreślić, że praca w licznych, międzynarodowych zespołach badawczych stanowi istotny atut i dobrze świadczy o zdolności doktoranta do współpracy oraz funkcjonowania w środowisku dużych projektów naukowych.

Dorobek publikacyjny obejmuje ponad dekadę (2012–2025), co rodzi wątpliwości dotyczące jego aktualności i spójności. Wczesne prace odnoszą się do rozwiązań, które mogą być dziś mniej istotne, natomiast nowsze publikacje, choć tematycznie trafne, są związane i nie zawsze szczegółowe. W efekcie trudno jednoznacznie ocenić, które elementy przedstawionych osiągnięć odzwierciedlają aktualny stan badań autora.

Na bazie moich wątpliwości proponuję kilka pytań wprowadzających do dyskusji:

1. Które konkretne elementy metodologii, implementacji lub eksperymentów w wieloautorskich publikacjach są w pełni Pana własnym, samodzielnym wkładem?
2. Jak zapewnia Pan spójność swojego programu badawczego na przestrzeni ponad dekady mimo zmieniającej się tematyki i technologii?
3. Które z opracowanych przez Pana rozwiązań pozostają aktualne w kontekście obecnych trendów w HPC i AI, a które wymagają dziś rewizji?
4. Które z (współ)opracowanych przez Pana narzędzi są obecnie realnie używane przez społeczność i jakie są plany ich dalszego rozwoju?

7. Podsumowanie

Biorąc pod uwagę opinie zaprezentowane w poprzednich punktach i wymagania zdefiniowane przez art. 187 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (z późniejszymi zmianami) 1 moja ocena rozprawy pod względem trzech podstawowych kryteriów jest następująca:

A. Czy rozprawa zawiera oryginalne rozwiązanie problemu naukowego? (wybierz jedną opcję stawiając znak **X**)

<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Zdecydowanie TAK	Raczej TAK	Trudno powiedzieć	Raczej NIE	Zdecydowanie NIE

B. Czy po przeczytaniu rozprawy zgadzasz się, że kandydat posiada ogólną wiedzę teoretyczną w dyscyplinie Informatyka techniczna i telekomunikacja?

<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Zdecydowanie TAK	Raczej TAK	Trudno powiedzieć	Raczej NIE	Zdecydowanie NIE

C. Czy kandydat posiada umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej?

<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Zdecydowanie TAK	Raczej TAK	Trudno powiedzieć	Raczej NIE	Zdecydowanie NIE

Podpis

¹ <http://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20190000276>