

Prof. dr hab. inż. Tomasz Szmuc
Katedra Informatyki Stosowanej
Akademii Górniczo-Hutniczej
Al. Mickiewicza 30, 30-052 Kraków
e-mail: tsz@agh.edu.pl

RECENZJA ROZPRAWY DOKTORSKIEJ

mgr Grzegorza Dobińskiego

Algorytmy wyznaczania parametrów charakteryzujących oddziaływanie sondy z powierzchnią materiału badanego mikroskopem sił atomowych

1. Charakterystyka wyboru tematu i przedmiot rozprawy

Recenzowana rozprawa doktorska opisuje wyniki badań zmierzających do udoskonalenia zdolności pomiarowych mikroskopu sił atomowych. Mikroskopy tego typu rozwijane od ponad 30 lat umożliwiają analizę właściwości (elektrycznych, magnetycznych, termicznych i mechanicznych) oraz obrazowanie powierzchni materiału z dokładnością nanometrową. Pomiar jest realizowany przez detekcję ugięcia sondy spowodowanego przez oddziaływanie jej końca z atomami powierzchni badanego materiału. Rozwój mikroskopii nanometrowej jest w ostatnich latach bardzo dynamiczny. Postęp w tej dziedzinie otwiera nowe możliwości w inżynierii materiałowej, umożliwiając poznawanie nanostruktur i badanie związków z właściwościami materiałów.

Mimo ciągłego rozwijania metod pomiarowych i konstrukcji istnieją ciągle obszary doskonalenia możliwości pomiarowych mikroskopu sił atomowych. W swoich badaniach Autor skupił się na rezonansowej mikroskopii oddziaływań odpychających, gdzie realizowany jest pomiar zmian amplitudy i przesunięcia fazowego spowodowanych oddziaływaniem sondy z badaną powierzchnią. Celem pracy (str. 10) *jest opracowanie nowych oraz udoskonalenie istniejących algorytmów detekcji oddziaływania sondy z powierzchnią pozwalających na uzyskanie szerszej i dokładniejszej informacji o właściwościach badanych powierzchni*. Cel pracy jest wprawdzie bardzo ogólnie sformułowany, lecz tezy pozwalają sprecyzować zakres pracy. Autor formułuje dwie tezy:

1. Opracowany algorytm obliczający sekwencje dyskretnych transformat Fouriera (SDFT) pozwala na przynajmniej dwukrotne zmniejszenie liczby operacji w stosunku do istniejących przy porównywalnym błędzie numerycznym zaokrąglenia.
2. Analiza wyższych harmonicznych drgań wywołanych oddziaływaniem sondy mikroskopu sił atomowych pozwala na wykrywanie heterogeniczności właściwości mechanicznych badanych struktur nanometrowych.

Należy stwierdzić, że tematyka rozprawy dotyczy ważnego i aktualnego problemu zarówno od strony dziedzinowej (analiza i przetwarzanie sygnałów), jak również zastosowań praktycznych – rozszerzenie możliwości analizy właściwości materiałów.

2. Konstrukcja rozprawy

Oprócz *Wprowadzenia* (rozd. 1) oraz *Podsumowania* rozprawa składa się z 4 zasadniczych rozdziałów. Obszerny spis literatury zawiera 137 pozycji związanych tematyką badań i jej merytorycznym otoczeniem. W załączniku podano przykładową implementację algorytmu SDFT. Obszerna całość jest prezentowana łącznie na 155 stronach.

Struktura pracy jest przejrzysta i podporządkowana realizacji postawionego celu. Działania te dotyczą części sprzętowej, jak również nowych algorytmów. Rozdziały 2 i 3 zawierają głównie opis istniejących rozwiązań, rozdział 4 opisuje prototypowy mikroskop sił atomowych zbudowany w zespole, w którym uczestniczył Autor. Główne osiągnięcia Doktoranta są opisane w piątym rozdziale.

Rozdział drugi zawiera wprowadzenie do mikroskopii sił atomowych. Opisano rozwój i poszczególne rozwiązania koncentrując się na rezonansowej mikroskopii oddziaływań odpychających i opisie oddziaływania sondy z powierzchnią materiału.

Transformata Fouriera stanowi podstawowe narzędzie częstotliwościowej analizy sygnałów, stąd w rozdziale trzecim opisano dyskretną transformatę Fouriera (DFT) i algorytmy jej obliczania, w tym również różne odmiany szybkiej transformaty Fouriera. Analizując cyfrową prowadnicę falową Autor zaproponował modyfikację macierzy rotacyjnej dla niskich i wysokich częstotliwości umożliwiające redukcję niestabilności numerycznej. Modyfikacja ta nie prowadzi do zwiększenia liczby operacji elementarnych.

Prototypowy mikroskop sił atomowych *Terra AFM* został skonstruowany przez zespół, w którym Doktorant brał czynny udział. Mikroskop ten stanowił rzeczywiste środowisko, w którym testowano algorytmy zaproponowane przez Autora. W rozdziale czwartym opisano krótko zastosowane rozwiązania sprzętowe oraz oprogramowanie: interfejs, programowanie eksperymentu, analizę i prezentację danych.

Zasadnicze osiągnięcia Doktoranta opisano w rozdziale piątym. Można tu wyróżnić dwie sekcje dotyczące odpowiednio algorytmu rekurencyjnego wyznaczania sekwencji DFT (SDFT) oraz zastosowania tego algorytmu w układzie synchronicznej detekcji drgań belki pomiarowej. W klasycznym rekurencyjnym algorytmie obliczania sekwencji DFT zastosowano zmodyfikowany przez Autora algorytm cyfrowej prowadnicy falowej. Algorytm ten jest jednak narażony na kumulację błędów zaokrągleń, gdyż obliczana n -ta wartość składowej zależy od $n-1$ poprzednich wartości. Zastosowana modyfikacja polega na dodaniu drugiego oscylatora tego samego typu obliczającego co m -tą wartość składowej widma częstotliwościowego. Wartość jest obliczana z m ostatnich próbek sygnału (błąd jest równy maksymalnemu dla prowadnicy o długości m). W okresie co m próbek wektor stanu pierwszego oscylatora jest podstawiany wektorem stanu drugiego oscylatora. W rezultacie maksymalny błąd zaokrągleń jest porównywalny z maksymalnym błędem zmodyfikowanej prowadnicy falowej dla problemów o rozmiarze $2m$. Powyższe rozumowanie potwierdzono przez odpowiednie obliczenia oraz testowanie w środowisku Matlab dla różnych sygnałów: szum biały, suma wzbudzeń sinusoidalnych o częstotliwościach pierwszej połowy składowych harmonicznych DFT i losowym przesunięciu fazowym oraz powyższy z szumem „sól z pieprzem”. Analizę przeprowadzono dla różnych algorytmów SDFT implementowanych w arytmetyce zmiennoprzecinkowej i stałoprzecinkowych. Przeprowadzone eksperymenty wykazały, że obydwa zaproponowane algorytmy (różniące się dodatkową prowadnicą falową) wymagają wykonania połowy operacji mnożenia przy porównywalnym błędzie numerycznym zaokrągleń. Zaproponowany algorytm obliczania sekwencji DFT został zastosowany w układzie synchronicznej detekcji oscylacji dźwięku konstruowanego mikroskopu pracującego w trybie rezonansowej mikroskopii oddziaływań odpychających. Pomiar amplitudy i przesunięcia fazowego jest wykonywany

drogą analizy widma częstotliwościowego drgań sondy. Zastosowanie opracowanego algorytmu rekurencyjnego wyznaczania sekwencji DFT do obliczania pierwszej składowej harmonicznej pozwala określić amplitudę z dużą dokładnością i minimalnym czasem przetwarzania. Zastosowana metoda eliminuje tzw. zjawisko przeciekania widma bez konieczności dodatkowego przetwarzania, a ponadto pozwala uniknąć degradacji rozdzielczości spowodowanej okienkowaniem sygnału. Ważna jest również możliwość otrzymania dokładnej informacji o przesunięciu fazowym bez konieczności stosowania interpolacji. Pomiar wyższych harmonicznych umożliwia uzyskanie pełniejszej informacji o oddziaływaniu sondy z powierzchnią. Układ synchronicznej detekcji drgań belki pomiarowej został zaimplementowany w technologii FPGA – na zaprojektowanej płycie drukowanej zostały umieszczone również pozostałe elementy detektora, m.in. moduły interfejsu. Całość tworzy system wbudowany umożliwiający bezpośredni pomiar parametrów próbki. Badania zdolności rozdzielczej opracowanej metody przeprowadzono na powierzchni próbki testowej. Uzyskano wyniki zgodne z danymi katalogowymi producenta przy stosunkowo wysokim kontraście i niskim poziomie szumów. Opracowana metoda umożliwia równoległą (przy pojedynczym pomiarze) analizę wyższych harmonicznych. Przeprowadzono szereg badań na dwóch różnorodnych próbkach analizując wartości wyższych harmonicznych i przesunięcia fazowego. Zauważone zmiany harmonicznych lub przesunięcia fazowego pozwalają wnioskować o właściwościach materiałów. Zastosowanie opracowanych rozwiązań do analizy drgań belki T-kształtnej umożliwia uzyskiwanie informacji o różnych parametrach powierzchni: adhezja/dyssypacja energii, wyznaczenie wartości siły szczytowej oddziaływania sonda-powierzchnia. Autor zaproponował nowy algorytm charakteryzujący się szybszym obliczaniem wartości siły szczytowej.

W *Podsumowaniu* opisano podstawowe wyniki rozprawy oraz zaproponowano kierunki dalszych badań.

W *konkluzji* (tej części recenzji) należy stwierdzić, że konstrukcja pracy jest właściwie ukształtowana, zaproponowane rozwiązania są implementowane i szeroko testowane zarówno w środowisku symulacyjnym, jak również w rzeczywistym układzie mikroskopu sił atomowych.

3. Ocena merytoryczna rozprawy

Recenzowana praca należy do klasy analizy i przetwarzania sygnałów. Uzyskane wyniki są rezultatem poszukiwania rozwiązań w detekcji synchronicznej w mikroskopii bliskich oddziaływań i w tym obszarze otwierają nowe możliwości pomiarowe. Wydaje się również, że zaproponowana metoda i jej implementacja sprzętowa mogą znaleźć szersze zastosowanie w analizie sygnałów, gdzie stosowane jest podobne podejście. Do najważniejszych osiągnięć rozprawy należy zaliczyć.

1. Opracowanie nowych algorytmów obliczania sekwencji DFT bazujących na zmodyfikowanym (przez Autora) algorytmie cyfrowej przewodnicy falowej. Zaproponowane rozwiązanie charakteryzuje się mniejszą liczbą operacji mnożenia, przy tej samej dokładności obliczeń co najlepsze z istniejących. Stabilność numeryczną wykazano drogą symulacji oraz z wykorzystaniem modeli dyskretnej arytmetyki stochastycznej.
2. Implementację sprzętową opracowanego algorytmu oraz konstrukcję systemu wbudowanego umożliwiającego szybki bezpośredni pomiar drgań belki.
3. Opracowanie algorytmu oddziaływania belki T-kształtnej z powierzchnią. Zaproponowany szybki algorytm obliczania wartości siły szczytowej umożliwia użycie tego parametru do kontroli odległości sondy od powierzchni próbki. W konsekwencji oznacza

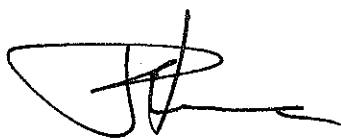
to znaczną poprawę rozdzielczości przy badaniu powierzchni próbek o strukturze heterogenicznej. Tym samym zmniejsza się ryzyko uszkodzenia próbki dodatkowo rozszerzając zakres zastosowań skanowanych próbek.

4. Przeprowadzenie szeregu eksperymentów potwierdzających nowe możliwości badań powierzchni z zastosowaniem mikroskopu sił atomowych.

Wymienione wyniki są oryginalne i otwierają nowe możliwości zarówno w obszarze analizy sygnałów, jak również zastosowań mikroskopu sił atomowych. Warto podkreślić staranność i konsekwencję prowadzonych rozważań – opracowanie nowej metody, konstrukcja algorytmów i ich implementacja oraz przeprowadzenie badań pokazujących właściwości proponowanego rozwiązania względem istniejących.

5. Wniosek końcowy

W podsumowaniu należy stwierdzić, że przedstawiona do oceny rozprawa zawiera wartościowe wyniki, które stanowią oryginalny wkład w obszarze analizy sygnałów metodami częstotliwościowymi i jej zastosowań. Oryginalne i wartościowe wyniki otwierają możliwości dalszych badań. W związku z powyższym stwierdzam, że praca pt.: *Algorytmy wyznaczania parametrów charakteryzujących oddziaływanie sondy z powierzchnią materiału badanego mikroskopem sił atomowych* spełnia wymagania stawiane rozprawom doktorskim i wnoszę o dopuszczenie mgr Grzegorza Dobińskiego do dalszych etapów zmierzających do nadania stopnia naukowego doktora nauk technicznych w dyscyplinie informatyka.



Tomasz Szmuc