prof. dr hab. inż. Adam Kisiel
Wydział Fizyki
Politechnika Warszawska

Warszawa, 21.06.2022 r.

**Ocena dorobku naukowego dr Kacpra Topolnickiego
i recenzja jego osiągnięć badawczych przedstawionych w postaci cyklu powiązanych tematycznie artykułów naukowych
w postępowaniu w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego
w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych
w dyscyplinie nauki fizyczne**

Informacje podstawowe

Dr Kacper Topolnicki ukończył studia magisterskie na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego w roku 2009. Po zakończeniu studiów magisterskich, podjął studia doktoranckie, również na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego. Stopień doktora nauk fizycznych uzyskał we wrześniu 2014 r., na podstawie rozprawy pod tytułem: „The two-nucleon and three-nucleon systems in three dimensions". W czasie studiów doktoranckich rozwinął swoje umiejętności w wykorzystaniu klastrów obliczeniowych dużej mocy we współpracy z Jülich Supercomputer Centre (JSC). W roku 2013 uzyskał finansowanie swoich badań w ramach grantu NCN PRELUDIUM, a po doktoracie realizował swoje badania także w ramach grantu NCN SONATA. W czasie swojej kariery dr Topolnicki odbył półroczny staż w Instytucie Fizyki Jądrowej centrum badawczego w Jülich w Niemczech a także półroczny staż podoktorski w Texas A&M University Commerce w Stanach Zjednoczonych. Był zatrudniony na WFAIS na stanowisku asystenta od roku 2017 w ramach grantu SONATA. W roku 2020, w wyniku procedury konkursowej objął stanowisko adiunkta w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego i na tym stanowisku pracuje aż do chwili obecnej.

Działalność naukowa dr Topolnickiego związana jest z grupą badawczą prof. Henryka Witały, prof. Jacka Golaka oraz dr hab. Romana Skibińskiego z Uniwersytetu Jagiellońskiego. Koncentruje się na opracowaniu opisu teoretycznego, a następnie jego implementacji i przeprowadzeniu obliczeń numerycznych oddziaływań w układach kilku nukleonów. Prace te związane są też z uczestnictwem w kolaboracji Low Energy Nuclear Physics International Collaboration (LENPIC). W szczególności koncentruje się on na problematyce tzw. „formalizmu trójwymiarowego", który jest nowym podejściem do obliczania stanów związanych oraz zagadnień rozpraszania w układach wielu nukleonów. Jest to tematyka aktualna i istotna, będąca w centrum zainteresowania fizyki jądrowej. Cykl artykułów zaprezentowanych przez dr Topolnickiego dotyczy w szczególności kolejnych etapów opracowywania formalizmu trójwymiarowego oraz ostatecznie zastosowanie go w obliczeniach stanów związanych ^{3}H oraz ^{3}He.

Charakterystyka dorobku naukowego

Działalność naukową dr Kacper Topolnicki rozpoczął w trakcie studiów magisterskich w których zdobył pierwsze doświadczenia w wykorzystywaniu klastrów obliczeniowych dużej mocy. W czasie studiów doktoranckich dołączył do grupy teoretyków na WFAIS UJ, która zajmuje się tematyką oddziaływań w układach wielu nukleonów. Już na tym etapie zainteresował się metodą

„formalizmu trójwymiarowego" – specyficznej metody obliczeniowej, która nie używa, standardowo stosowanego w tego typu rachunkach, rozkładu na fale parcjalne. Pozwala to na przeprowadzanie obliczeń w warunkach, w których taki rozkład jest problematyczny, kosztem jednak zwiększenia złożoności obliczeniowej implementacji. W tym kontekście bardzo istotne było nawiązanie przez dr Topolnickiego współpracy z JSC, dzięki czemu miał on dostęp do superkomputerów działających w tym centrum. W swojej działalności dr Topolnicki zajmuje się również rachunkami analitycznymi o dużej złożoności. Pomocne jest wykorzystanie zautomatyzowanych metod działania na wyrażeniach analitycznych, w szczególności przy użyciu Wolfram Language pakietu Mathematica. Wszystkie te aspekty prowadzą do rozwoju i praktycznej implementacji formalizmu trójwymiarowego w obliczeniach dla dwóch i trzech nukleonów. Tego dotyczyła też rozprawa doktorska pana Topolnickiego, która została obroniona we wrześniu 2014 r.

Po doktoracie dr Topolnicki kontynuował rozszerzanie rachunku trójwymiarowego do opisu procesów rozpraszania trój-nukleonowego. Na początku 2015 r. odbył półroczny staż w Texas A&M University Commerce. Następnie powrócił do Polski i powtórnie włączył się w prace krakowskiej grupy zajmującej się systemami kilkuciałowymi. Był kierownikiem grantu SONATA, następnie został zatrudniony jako asystent, aby w roku 2020 ostatecznie objąć stanowisko adiunkta.

W ramach swojej pracy dr Topolnicki wykonał obliczenia w opracowanym przez siebie formalizmie dla procesu rozpraszania neutron-deuteron. Wykorzystane zostało równanie Fadeeva z ograniczeniem do wyrazów pierwszego rzędu. Zaletą tych obliczeń było ich porównanie z tradycyjną metodą rozkładu na fale parcjalne. Istotnym elementem badań dr Topolnickiego jest ciągłe poszukiwanie nowych efektywnych metod numerycznych. Kilka z takich metod zostało przetestowanych w pracach będących podstawą do habilitacji i będzie omówione w dalszej części recenzji.

Działalności dr Topolnickiego jest związana z badaniami teoretycznymi z dziedziny fizyki jądrowej, jednak nie mniej istotna jest jego umiejętność tworzenia zaawansowanych kodów komputerowych, w tym wykorzystujących zautomatyzowane metody analityczne oraz sprawne ich uruchamianie na superkomputerach. Również analiza wyników takich obliczeń jest nietrywialna i wymaga specjalizowanych umiejętności praktycznych. Jest to wyjątkowe połączenie, które dr Topolnicki w kreatywny sposób wykorzystuje do uzyskiwania nowych, nietrywialnych wyników i tworzenia nowych metod badawczych.

Dorobek naukowy dr Kacpra Topolnickiego udokumentowany jest publikacjami w czasopismach objętych systemem JCR, których liczba wynosi 44, wszystkie w języku angielskim. W większości są to prace kilkuautorskie, opracowane w ramach grupy krakowskiej. Z tego 32 to prace opublikowane po obronie doktoratu. Większość z nich jest opublikowana w prestiżowych periodykach, takich jak The European Physical Journal A, Physical Review C, Few-Body Systems, Acta Physica Polonica B. Oprócz tego jest on autorem bądź współautorem opublikowanych w ramach raportów pokonferencyjnych 26 prac recenzowanych.

Sumaryczna liczba cytowań na dzień 3 listopada 2021 r. to 580 (w.g. bazy ISI Web of Science), zaś indeks Hirscha h=13. Są to wartości znaczące, charakterystyczne dla dziedziny teoretycznych obliczeń dla systemów kilkuciałowych w fizyce jądrowej. Istotny jest też fakt, że dr Topolnicki wygłosił znaczącą liczbę referatów i wykładów zaproszonych na międzynarodowych konferencjach naukowych.

Podsumowując, pozytywnie oceniam cały dorobek naukowy dr Kacpra Topolnickiego, który jednoznacznie ukazuje niezwykle solidne i kompetentne ukierunkowanie podejmowanej tematyki, a także samodzielność i specjalizację w trudnych badaniach na pograniczu fizyki teoretycznej i zaawansowanych metod obliczeniowych. Dorobek naukowy dr Topolnickiego jest owocem jego indywidualnej działalności naukowej, w tym w ramach prac w większej grupie teoretyków na WFIAS i jest udokumentowany licznymi publikacjami. Jest on też dobrze oceniany w środowisku międzynarodowym.

Ocena zbioru prac przedstawionych do habilitacji

Z zestawu opublikowanych przez siebie prac dr Topolnicki wybrał 7 związanych tematycznie artykułów i przedstawił je jako osiągnięcie naukowe będące podstawą do wystąpienia z wnioskiem habilitacyjnym. Do zestawu dołączone zostało zbiorcze omówienie wyników jako część autoreferatu. W 3 przedstawionych pracach dr Topolnicki jest jedynym autorem. Kolejne 3 prace mają 4 współautorów, a ostatnia ma 5 współautorów. Dr Topolnicki jest podany jako pierwszy autor (ze złamaniem porządku alfabetycznego) we wszystkich pracach kilkuautorskich. Podany jest również jako autor korespondencyjny w trzech z nich (w czwartej autora korespondencyjnego nie podano). We wszystkich pracach współautorskich wszyscy współautorzy mają tę samą afiliację, co dr Topolnicki. W przypadku prac współautorskich do wniosku załączone zostały oświadczenia wszystkich współautorów, które potwierdzają wiodącą rolę dr Topolnickiego w ich opracowaniu. Pozostali autorzy określają swoją rolę jako „pomocniczą". Analizując dodatkowo załączone oświadczenia habilitanta należy ocenić, iż wkład dr. Topolnickiego był wiodący i kluczowy we wszystkich publikacjach. Wszystkie prace napisane są w języku angielskim i opublikowane w znaczących czasopismach międzynarodowych. Cztery prace opublikowano w czasopiśmie The European Physical Journal A, dwie w Physical Review C, a jedną w Acta Physica Polonica B. Podsumowując, przedstawiony zbiór prac spełnia wymogi formalne stawiane osiągnięciu naukowemu, które może być podstawą do wystąpienia z wnioskiem o habilitację w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne, zarówno pod względem zgodności z tematyką, zawartości merytorycznej jak i objętości materiału.

Załączone prace układają się w logiczny ciąg badań związanych z różnymi aspektami obliczeń w tzw. „formalizmie trójwymiarowym" dla systemów kilku (najczęściej dwóch lub trzech) nukleonów. W pracy p.t. „First-order neutron-deuteron scattering in a three-dimensional approach", oznaczonej jako [9] na liście osiągnięć naukowych, Autor stosuje ten formalizm do obliczenia obserwabli związanych z rozpraszaniem neutronów na deuterze. Ważnym aspektem metody jest uniknięcie konieczności dokonywania rozkładu na fale parcjalne, stosowane w klasycznych obliczeniach. Stosowana jest też reprezentacja macierzowa operatorów w przestrzeni spin-izospin. Wykorzystano równanie Fadeeva, ale obliczenia ograniczone są tylko do wyrazu wiodącego. Dzięki temu możliwe stało się uzyskanie wyników także dla kanału elastycznego oddziaływania. Praca potwierdza bardzo dobrą zgodność wyników uzyskanych nową metodą z wynikami obliczeń klasycznych. Co więcej w wybranych warunkach (przy wyższych energiach rozpraszania) brak konieczności używania fal parcjalnych upraszcza rachunki. Dzieje się to jednak kosztem zwiększenia wymogów obliczeniowych. Praca jest istotnym etapem walidacji nowej metody obliczeń.

W pracy p.t. „Orthogonal polynomial approach to calculate two-nucleon transition operator in three dimensions", oznaczonej jako [10] na liście osiągnięć, Autor proponuje zastosowanie wielomianów ortogonalnych do obliczeń w systemie dwóch nukleonów (neutron-neutron i neutron-

proton). Uzyskano wyniki zgodne z konkurencyjnymi metodami, jednak koszt obliczeniowy metody okazał się znaczący, co ogranicza jej użyteczność. Wykonano obliczenia dla dwóch zestawów wielomianów ortogonalnych – wielomianów Czebyszewa oraz wielomianów Jacobiego i w obu przypadkach zaobserwowano podobne koszty obliczeniowe. Stąd jest mało prawdopodobne, by wybór innego zestawu wielomianów poprawił sytuację. Praca jest przykładem kreatywnego poszukiwania przez Autora nowych, innowacyjnych metod numerycznych do zastosowania w obliczeniach dla układu wielu nukleonów.

W pracy p.t. „The general operator form for the total-momentum-dependent nucleon-nucleon potential", oznaczonej jako [11] na liście osiągnięć, Autor opracował ogólną formę operatora dla potencjałów dwunukleonowych, w których występuje dodatkowo zależność od pędu całkowitego pary, co może być istotne w wybranych podejściach relatywistycznych. Praca prezentuje algorytm uzyskania pełnego wyrażenia na postać operatora, w taki sposób, by było ono zależne jedynie od znanych operatorów spin-pęd oraz funkcji skalarnych pędu. Oprócz tego zaproponowany operator w jawny sposób spełnia symetrie względem niezmienniczości względem obrotów, zamiany cząstek, odwrócenia czasu oraz parzystości. Opracowanie takiego operatora jest również istotne w obliczeniach trójciałowych, gdyż redukuje złożoność obliczeniową oraz daje możliwość używania większego zbioru potencjałów dwuciałowych.

W pracy p.t. „Operator form of the three-nucleon scattering amplitude", oznaczonej jako [12] na liście osiągnięć, Autor opracował ogólną formę amplitudy rozpraszania dla układu trzech ciał. Istotnym osiągnięciem jest znaczące zredukowanie złożoności obliczeniowej tej formy, do poziomu którego obliczenie staje się realistyczne na dzisiejszych superkomputerach. W procedurze iteracyjnego rozwiązywania równania Fadeeva, opracowana w pracy ogólna forma może być stosowana w każdej iteracji. Dzięki temu równanie to może być rozwiązywane właśnie metodami iteracyjnymi. Kolejną istotną zaletą tej formy jest możliwość naturalnego uwzględnienia sił trójciałowych.

W pracy p.t. „General operator form of the non-local three-nucleon force", oznaczonej jako [13] na liście osiągnięć, Autor kontynuuje prace nad opracowaniem ogólnej postaci operatora dla systemu trójciałowego. Podaje algorytm uzyskania takiej formy, jako kombinacji liniowej 320 operatorów spin-izospin-pęd oraz funkcji skalarnych pędu. Podaje również, w jaki sposób funkcje te muszą zachowywać się przy przekształceniach, aby zachować niezmienniczość względem zmiany parzystości, odwrócenia czasu oraz zamiany cząstek. Opracowanie tej formy stanowiło kolejny krok w dążeniu do zastosowania formalizmu „trójwymiarowego" do obliczeń dla systemów trójciałowych.

W pracy p.t. „^{3}H and ^{3}He bound state calculations without angular momentum decomposition", oznaczonej jako [14] na liście osiągnięć, zaprezentowana została w pełni użyteczność formalizmu trójciałowego, który Autor sukcesywnie rozwijał w trakcie swojej pracy badawczej. Obliczenia dla stanów związanych trzech nukleonów zostały przeprowadzone bez użycia rozkładów na fale parcjalne. Pozwoliło to na użycie ekranowanego potencjału Coulombowskiego. Dodatkowo przeprowadzono obliczenia związane z rozpadem beta trytonu. W procedurze użyto zarówno potencjałów 2-nukleonowych jak i 3-nukleonowych, co było możliwe dzięki zastosowaniu osiągnięć z prac poprzednich. Niezwykle istotne było wykazanie w praktycznych obliczeniach, że formalizm trójciałowy pozwala na przeprowadzenie rachunków w rozsądnym czasie i z zadowalającą dokładnością. Procedura pozwoliła też na przekonujące uzasadnienie użycia konkretnej wartości promienia ekranowania („screening radius") – 10 fm. Wyniki zawarte w pracy

otwierają drogę do dalszych badań, w tym do obliczeń z wykorzystaniem bardziej nowoczesnych i zaawansowanych potencjałów oddziaływania, zarówno dwu- jak i trójciałowych. Praca ta w doskonały sposób podsumowuje ciąg publikacji Autora, pokazując ich praktyczną użyteczność i wyznaczając jasno kierunki dalszej pracy.

W pracy p.t. „Three nucleon scattering using „three-dimensional" approach – challenges", oznaczonej na liście osiągnięć jako [15], Autor kreśli perspektywy dalszego rozwoju prac nad formalizmem trójwymiarowym. Koncentruje się na problemie rozpraszania neutron-deuteron oraz rozpadu deuteronu wywołanego neutronem. W szczególności zwraca uwagę na to, że formalizm trójwymiarowy ma przewagę nad klasycznymi metodami przy wyższych energiach oddziaływania. Praca w zręczny sposób łączy wątki poruszane w poprzednich publikacjach i pokazuje jak mogą one zostać użyte w przyszłych badaniach.

Zbiór publikacji przedstawionych przez dr Topolnickiego układa się w logiczny ciąg badań nad wykorzystaniem formalizmu trójwymiarowego do przeprowadzania obliczeń dla systemów dwu i trzech nukleonów, z wykorzystaniem potencjałów zarówno dwu- jak i trójciałowych. Przewaga tego formalizmu nad klasycznymi metodami wykorzystującymi rozkład na fale parcjalne przejawia się w wybranych przedziałach kinematycznych. Metoda stanowi więc ważny wkład do tych badań, będąc komplementarną do innych technik. Generuje ona przy tym znaczące wymagania dotyczące złożoności obliczeniowej i konieczności zastosowania superkomputerów znaczącej mocy. Dr Topolnicki wykazuje duże umiejętności w stosowaniu tych technik, co jest potwierdzone uzyskaniem nietrywialnych wyników obliczeń. W cyklu publikacji da się zauważyć, że w swojej pracy Autorowi udało się znaleźć właściwą równowagę pomiędzy prowadzeniem rozważań czysto teoretycznych a ich praktyczną implementacją w istniejących systemach numerycznych. Dr Topolnicki prezentuje swoje wyniki na ważnych konferencjach międzynarodowych, a jego prace mają znaczącą liczbę cytowań. Jest to dowód na to, że tematyka wybrana przez dr Topolnickiego w jego przewodzie habilitacyjnym jest właściwa.

Charakterystyka dorobku dydaktycznego i organizacyjnego.

Działalność dydaktyczna dr. Topolnickiego jest wystarczająca, odpowiadająca jego historii zatrudnienia i faktu, że stanowisko adiunkta objął dopiero w roku 2020. Prowadził zajęcia ćwiczeniowe i laboratoryjne z zakresu dobrze powiązanego z jego zainteresowaniami naukowymi – w przedmiotach takich jak statystyka, narzędzia obliczeniowe czy matematyka. Stworzył też przedmiot poświęcony istotnemu narzędziu badawczemu, jakim jest pakiet Mathematica. Był opiekunem jednej pracy magisterskiej. Należy się spodziewać, że jego działalność dydaktyczna, a w szczególności opieka nad studentami oraz doktorantami powinna w znaczący sposób wzrosnąć w najbliższej przyszłości, tak, aby był on w stanie przekazać swoją obszerną i specjalistyczną wiedzę nowemu pokoleniu badaczy.

Działalność organizacyjna dr Topolnickiego związana jest z realizacją przez niego szeregu grantów naukowych. Realizował grant NCN PRELUDIUM, a następnie grant NCN SONATA w charakterze kierownika. Jest też wykonawcą w grancie NCN HARMONIA, realizowanym przez grupę krakowską. Istotny jest też udział dr Topolnickiego w działaniach współpracy LENPIC oraz jego intensywna współpraca z centrum komputerowym w Jülich. Aktualnie dr Topolnicki włącza się również w działalność eksperymentu ATLAS w CERN. W załączonych materiałach brak informacji na temat zaangażowania dr Topolnickiego w działania organizacyjne na Wydziale i na Uczelni. Należy mieć nadzieję, że włączy się on w najbliższym czasie w taką aktywność.

Podsumowując działalność dydaktyczna oraz organizacyjna dr Topolnickiego spełnia wymagania, odpowiadając zaawansowaniu jego kariery naukowej oraz dającym przekonanie, że jest on gotowy na pracę jako samodzielny pracownik naukowy.

Podsumowanie

Po szczegółowym zapoznaniu się z przedstawioną do habilitacji przez dr Kacpra Topolnickiego dokumentacją, pozytywnie oceniam jego dorobek naukowy, w tym współpracę z zagranicznymi ośrodkami badawczymi oraz dorobek dydaktyczny i organizacyjny. Także osiągnięcie naukowe w postaci cyklu siedmiu powiązanych tematycznie artykułów naukowych wysokiej jakości opublikowanych w renomowanych czasopismach naukowych uważam za oryginalne, zgodne z tematyką dyscypliny nauk fizycznych, wartościowe i wnoszące znaczący wkład w badania nad teoretycznymi podstawami nowych formalizmów opisu układów kilkunukleonowych, a także ich praktyczną implementacją numeryczną z zastosowaniem superkomputerów. W związku z tym stawiam wniosek o dopuszczenie dr Kacpra Topolnickiego do dalszych procedur związanych z nadaniem mu stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne.

Kisiel

Adam Kisiel