

Gdańsk 25.08.2026

dr hab. Krzesimir Ciura
Katedra i Zakład Chemii Fizycznej
Wydział Farmaceutyczny
Gdański Uniwersytet Medyczny
Al. Gen. J. Hallera 107
80-416 Gdańsk

WNIOSEK O WYRÓŻNIENIE ROZPRAWY DOKTORSKIEJ

Autor rozprawy: mgr inż. Karol Baran

Tytuł rozprawy: *Few-shot machine learning for multimolecular systems modeling*

Poziom merytoryczny rozprawy doktorskiej mgr. inż. Karola Barana uzasadnia wystąpienie z wnioskiem o jej wyróżnienie. Opieram go na dwóch przesłankach dotyczących jakości uzyskanych wyników oraz ich znaczenia praktycznego.

Po pierwsze, opracowane przez Doktoranta rozwiązania w zakresie modelowania właściwości cieczy jonowych są istotnie lepsze od podejść dotychczas stosowanych, co jednoznacznie potwierdzają uzyskane parametry statystyczne. Wprowadzenie ułamkowej objętości swobodnej jako deskryptora molekularnego podniosło współczynnik determinacji modeli przewidujących rozpuszczalność ditlenku węgla z 0,738 do 0,833 na zbiorze testowym. Systematyczne rozstrzygnięcie sposobu reprezentacji układów dwucząsteczkowych w grafowych sieciach neuronowych pozwoliło uzyskać modele nie tylko dokładniejsze, ale i najbardziej powtarzalne spośród porównywanych wariantów. Największe znaczenie ma jednak wykazanie skuteczności autorskich modyfikacji algorytmów meta-uczenia w zakresie kilku do kilkunastu związków w zbiorze adaptacyjnym, a więc tam, gdzie metody dotychczas uznawane za standardowe zawodzą całkowicie. Zaproponowany algorytm TSA-Reptile poprawił jakość predykcji dla układów odległych od danych treningowych, w przypadku których standardowe podejście meta-uczenia zawodziło.

Po drugie, uzyskane wyniki mają wyraźny potencjał wdrożeniowy. Opracowane modele odnoszą się do zagadnień o realnym znaczeniu technologicznym, obejmujących wychwyty ditlenku węgla, izolację ligniny z biomasy oraz ocenę bezpieczeństwa stosowanych rozpuszczalników. Mogą one zostać bezpośrednio wykorzystane do przesiewowej selekcji cieczy jonowych przed etapem badań eksperymentalnych. Równocześnie zaproponowane modyfikacje algorytmiczne mają charakter niezależny od dziedziny zastosowania. Ciecze jonowe pełnią w rozprawie funkcję wymagającego układu modelowego, natomiast wypracowane rozwiązania mogą zostać przeniesione na inne obszary, w których liczba dostępnych danych pomiarowych pozostaje ograniczona.

Z powyższych względów wnioskuję o wyróżnienie ocenianej rozprawy doktorskiej.