Jesienne Warsztaty Naukowe Centrum Studiów Zaawansowanych są kontynuacją cyklu spotkań stypendystów CSZ w roku 2011 z wiodącą kadrą naukową. Idea warsztatów ma na celu integrację naukowców ponad strukturami, dziedzinami i wiekiem. Pragniemy stworzyć płaszczyznę do wymiany doświadczeń, nawiązywania współpracy naukowo-badawczej, a także poszerzania horyzontów naukowych podczas inspirujących dyskusji.

Warsztaty Naukowe CSZ są, obok oferty programów stypendialnych, uzupełnieniem działalności Centrum, której celem jest wzmacnianie potencjału naukowo-dydaktycznego Uczelni, a w konsekwencji, umożliwienie lepszego wypełniania edukacyjnych zadań społecznych.

W programie jesiennych warsztatów, oprócz spotkań z wybitnymi Profesorami, zaplanowane są wystąpienia stypendystów CSZ oraz sesja posterowa. Prezentacje będą dotyczyły prowadzonych projektów naukowo-badawczych w ramach przyznanych stypendiów współfinansowanych z Europejskiego Funduszu Społecznego.

Liczymy, że proponowana przez nas forma warsztatów naukowych przyczyni się do osiągnięcia założonych celów.

Zespół Centrum Studiów Zaawansowanych
Politechniki Warszawskiej

14-16 października 2011/ Mądralin

Piątek / 14 października

13 30 Wyjazd - parking BIS *(przy Wydziale Elektroniki i Technik Informacyjnych PW)*
15 00 Obiad
16 30 - 18 00 Oficjalne rozpoczęcie warsztatów / Wykład Dyrektora Centrum Studiów Zaawansowanych PW **profesora Stanisława Janeczko** / Dyskusja plenarna
18 00 - 19 00 Sesja posterowa
20 00 Uroczysta kolacja

Sobota / 15 października

8 00 - 9 30 Śniadanie

I

10 00 - 10 30 Polska w Kosmosie / wykład specjalny
profesor Piotr Wolański, *Politechnika Warszawska oraz Komitet Badań Kosmicznych i Satelitarnych PAN*

10 30 - 10 50 Założenia konstrukcyjne oraz funkcjonalne nowego narzędzia laparoskopowego / **Marcin Witkowski**, Wydział Mechaniczny Energetyki i Lotnictwa PW

10 50 - 11 10 Analiza procesu generacji paliwa syntetycznego z wykorzystaniem ciepła wysokotemperaturowego reaktora jądrowego / **Jakub Kupecki**, Wydział Mechaniczny Energetyki i Lotnictwa PW

11 10 - 11 30 Funkcje agregacji i entropia / **Agata Pilitowska**, Wydział Matematyki i Nauk Informcyjnych PW

11 30 - 11 50 Przerwa kawowa

II

11 50 - 12 10 Decyzja administracyjna w gospodarce nieruchomościami / **Dorota Wilkowska-Kołakowska**, Wydział Administracji i Nauk Społecznych PW

12 10 - 12 30 Właściwości farb fleksograficznych modyfikowanych polimerami hiperrozgałęzionymi / **Zuzanna Żołek-Tryznowska**, Wydział Inżynierii Produkcji PW

12 30 - 12 50 Udostępnienie treści planistycznych w celu zintegrowanego zarządzania przestrzenią miejską / **Beata Stelmach-Fita,** Wydział Architektury PW

12 50 -13 10 Chemoenzymatyczna synteza alkoholi z ugrupowaniem tetrazolowym / **Edyta Łukowska-Chojnacka**, Wydział Chemiczny PW

13 10 - 13 30 Przerwa kawowa

III

13 30 - 13 50 Nieliniowe właściwości struktur PDLC / **Krzysztof Zegadło**, Wydział Fizyki PW

13 50 - 14 10 Analiza modulacyjna obrazów prążkowych z zastosowaniem transformacji falkowej / **Krzysztof Pokorski,** Wydział Mechtroniki PW

14 10 - 14 40 Defekty samoistne w półprzewodnikach fotowoltaicznych z rodziny chalkopirytu / **Adam Krysztopa**, Wydział Fizyki PW

14 40 - 15 00 Nowe sposoby ukrywania informacji w sieciach telekomunikacynych / **Wojciech Mazurczyk**, Wydział Elektroniki i Technik Informacyjnych PW

15 15 - 16 30 Obiad

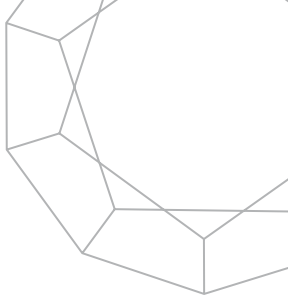
18 00 Kolacja grillowa / ogłoszenie wyników konkursu na najlepszą prezentację i poster

Niedziela / 16 października

7 30 - 9 00 Śniadanie

9 30 Wyjazd do Warszawy

Abstrakty / sesja posterowa



Spis treści

[1] Jarosław Arabas / Przyspieszanie algorytmu ewolucyjnego za pomocą programowalnych kart graficznych strona 9

[2] Krzysztof Czuba / Systemy sterowania i synchronizacji dla akceleratora cząstek elementarnych XFEL strona 10

[3] Paweł Gawryś/ Synteza i badanie rozpuszczalnych półprzewodników typu n z rodziny heteroacenów strona 11

[4] Łukasz Makowski / Wybrane problemy numerycznej estymacji liczności sinic w zbiorniku wodnym strona 12

[5] Dobrochna Matkowska / Wolumetryczne właściwości układu x_1 [C_4mim][$MeSO_4$] + (1-x_1)MeOH w temperaturze (283.15 - 353.15) K i ciśnieniu (0.1 - 35) MPa strona 14

[6] Kamil Paduszyński / Zastosowanie teorii PC-SAFT do modelowania właściwości termodynamicznych układów dwuskładnikowych z cieczami jonowymi strona 15

[7] Tomasz Pietrzak / Nowe nanomateriały oparte na szkłach wanadanowo-fosforanowych i żelazowo-fosforanowych strona 16

[8] Tymon Rubel / Metoda analizy ilościowej białek w badaniach proteomicznych wykorzystujących spektrometrię mas strona 18

[9] Tomasz Rudny / Projektowanie narzędzi informatycznych do symulacji dynamiki układów wielu ciał strona 20

[10] Mirosław Seredyński / Porównanie metod hybrydowej i opartej na technice śledzenia frontu w makroskopowym modelowaniu krzepnięcia stopu podwójnego strona 21

[11] Dominik Sierociuk/ Ulepszona metoda dla modelowania analogowego członu całkującego rzędów 0.25 i 0.5 strona 23

[12] Małgorzata Wojtyś / Postselekcyjne estymatory gęstości prawdopodobieństwa oraz funkcjonału entropii strona 24

[13] Maciej Zawadzki/ Właściwości fizykochemiczne cieczy jonowych opartych na kationie chinolinowym strona 26

Jarosław Arabas
Wydział Elektroniki i Technik Informacyjnych
Laureat konkursu o naukowe stypendium
wyjazdowe dla nauczycieli akademickich, CAS/19/POKL

Przyspieszanie algorytmu ewolucyjnego za pomocą programowalnych kart graficznych

Programowalne karty graficzne (ang. GPU) umożliwiają prowadzenie masywnie równoległych obliczeń przy niskim koszcie sprzętu. Przykładowo, możliwy jest zakup ponad sturdzeniowego komputera za kwotę rzędu 200 euro. Jednak efektywne użycie GPU jest poważnie ograniczane przez ich architekturę, która realizuje paradygmat MISO (wiele danych, jedna instrukcja). Moim podstawowym obszarem badań jest optymalizacja z użyciem metod ewolucyjnych (EC). Z założenia EC realizuje proces iteracyjny. W każdej iteracji przetwarzana jest populacja wielu punktów z przestrzeni przeszukiwań. Z tego powodu równoległość implementacji jest cechą wręcz narzucającą się. Implementacja za pomocą GPU pozwala na efektywne wykorzystanie ogromnych populacji. Na plakacie zamierzam opisać potencjalne korzyści, których można oczekiwać dla tego typu równoległej realizacji EC. W szczególności zamierzam przedyskutować w jakich warunkach użycie bardzo licznej populacji jest wskazane z punktu widzenia poprawy jakości uzyskiwanych przez EC rozwiązań.

Krzysztof Czuba
Wydział Elektroniki i Technik Informacyjnych
Laureat konkursu o naukowe stypendium
dla młodych doktorów, CAS/17/POKL

Systemy sterowania i synchronizacji dla akceleratora cząstek elementarnych XFEL

Jednym z najnowszych i najbardziej zaawansowanych projektów współczesnej fizyki wielkich energii jest akcelerator XFEL, budowany obecnie w ośrodku badawczym DESY w Hamburgu. Urządzenie budowane w tunelu o długości około 3,3 km będzie służyło badaczom z różnych dziedzin jako źródło promieniowania koherentnego w pasmie rentgenowskim charakteryzującego się intensywnością o kilka rzędów wielkości większą niż uzyskiwana z tradycyjnych źródeł takiego promieniowania. Działanie urządzenia oparte jest na przyspieszaniu elektronów do bardzo dużych energi w łańcuchu nadprzewodzących rezonatorów. Instytut Systemów Elektronicznych PW prowadzi intensywną współpracę z ośrodkiem DESY, w ramach której opracowywane są urządzenia elektroniczne służące do sterowania pracą akceleratora. Jednym z głównych zadań jest skonstruowanie i uruchomienie systemu umożliwiającego synchronizację czasową, z dokładnością do dziesiątek femtosekund, około tysiąca urządzeń rozmieszczonych w tunelu akceleratora. Opracowano nowatorkie rozwiązania w zakresie generacji oraz rozprowadzania precyzyjnych, niskoszumnych sygnałów z zakresu częstotliwości od 100 MHz do 4 GHz. Badane są układy i systemy elektroniczne pod kątem wrażliwości na zmiany parametrów klimatycznych takich jak temperatura i wilgotność powietrza. Do rozprowadzania sygnałów wykorzystywane są techniki zarówno w.cz. jak i światłowodowe. Budowane są także systemy przetwarzania danych o szybkościach i precyzji nie spotykanych w innych dziedzinach, bazujące na najnowocześniejszych rozwiązaniach z przemysłu telekomunikacyjnego.

Niniejsza prezentacja zawiera przegląd najważniejszych zagadnień oraz osiągnięć techniki stosowanych przy budowie elektronicznych systemów sterujących akceleratorami cząstek elementarnych.

.

Paweł Gawryś
Wydział Chemiczny
Laureat konkursu o stypendium naukowe
dla doktorantów, CAS/16/POKL

Synteza i badanie rozpuszczalnych półprzewodników typu n z rodziny heteroacenów

Wraz z rozwojem elektroniki wzrasta zapotrzebowanie na organiczne materiały półprzewodnikowe, które miałyby przystępną cenę, cechowały się dużą rozpuszczalnością oraz wykazywały znaczną ruchliwością nośników ładunku w urządzeniach elektronicznych.

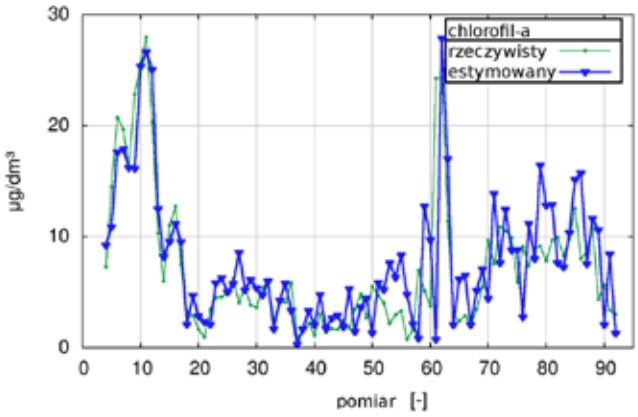
Liczba znanych materiałów półprzewodnikowych typu n, w których nośnikami ładunków są elektrony jest znacznie mniejsza niż półprzewodników typu p o przewodnictwie dziurowym. Dlatego w niniejszej pracy skupiono się na zaprojektowaniu nowych półprzewodników typu n bazujących na acenach, zawierających dodatkowo heteroatomy w rdzeniu oraz posiadających dodatkowe grupy elektronoakceptorowe - estrowe.

Łukasz Makowski
Wydział Elektryczny
Laureat konkursu o stypendium naukowe
dla młodych doktorów, CAS/17/POKL

Wybrane problemy numerycznej estymacji liczności sinic w zbiorniku wodnym

Rozproszone systemy pomiarowe są wykorzystywane w ochronie środowiska w celu oceny stanu monitorowanego obiektu i ewentualnego informowania o wystąpieniu problemu. Można w nich wykorzystać metody bayesowskie w celu poprawy jakości tej oceny, a tym samym wsparcie dla jednostek odpowiedzialnych za dany obiekt, taki jak zbiornik retencyjny będący źródłem wody pitnej dla okolicznych miast. Prezentowane badania są aplikowane do systemu budowanego na jeziorze Dobczyckim, pod Krakowem [1].

Sinice są popularnymi, jednokomórkowymi bakteriami mającymi w swej strukturze chlorofil. Potrafią realizować procesy typowe dla roślin i zapewne one jako pierwsze zaczęły przekształcać atmosferę ziemską w atmosferę tlenową. Jednak zawarte w nich związki barwnikowe są niebezpieczne dla zdrowia a nawet życia innych organizmów, w tym również dla człowieka.



Rysunek 1 Estymowany i rzeczywisty poziom chlorofilu-a

Pomiar liczby komórek sinic jest możliwy, aczkolwiek trudny i wymagający stanowiska laboratoryjnego. Zazwyczaj ich liczność określa się metodami pośrednimi, wyznaczając ilość chlorofilu za pomocą chromatografi. Wiadomo, że liczność sinic zależy od wartości całkowitego fosforu (TP) i całkowitego azotu (TN) rozpuszczonych w wodzie [2]. Daje to podstawę do realizacji pomiaru łatwiej mierzalnych parametrów wody i na tej podstawie określanie zagrożenia sinicami. Fuzja danych z wykorzystaniem algorytmu Levenberga-Marquardta (LMA) została już wcześniej z powodzeniem wykorzystana do estymacji poziomu sinic w zbiorniku Dobczyckim [3]. Jednakże omówienie różnic między obliczonymi a rzeczywiście występującymi wartościami, ze względu na numeryczny i niedoskonały charakter minimalizacji za pomocą LMA, nie było wystarczające. Dlatego do interpretacji wyników zostały wykorzystane metody bayesowskie.

Zastosowawszy przebieg wyniku LMA do rozkładu normalnego można obliczyć warunkowe prawdopodobieństwo między poziomem sinic a mierzalnymi parametrami wody, zgodnie z podejściem bayesowskim:

$$f(\mathbf{Y}_2|\mathbf{Y}_1,\rho,\frac{1}{\sigma^2}) \propto \frac{1}{\sigma^{(n-p)}} exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{t=p+1}^{n}\left[\rho(B)\mathbf{Y}_t\right]^2\right)$$

W efekcie otrzymujemy zarówno przebieg estymowanej liczności sinic wyrażonej w ilości chlorofilu oraz prawdopodobieństwo wystąpienia tego poziomu.

Włączenie efektów tych badań do rozproszonego systemu pomiarowego pozwoli odbiorcy, takiemu jak przedsiebiorstwo wodociągowe, na ciągłe monitorowanie poziomu sinic w wodzie, a przez to lepsze zarządzanie procesem uzdatniania wody i przyspieszy reakcję na pojawiające się zagrożenia.

Literatura

[1] Dziadak B., Makowski L., Michalski A., Enviromental monitoring system with instant communication, Przegląd Elektrotechniczny (Electrical Review), 87 (2011) no. 4, pp. 243-245.

[2] Smith V.H. Havens K., East T., James T., N:P ratios, light limitation, and cyanobacterial dominance in a subtropical lake impacted by non-point source nutrient pollution, Environmental Pollution, 122 (2003), pp. 379 - 390.

[3] Dziadak B., Kalicki A., Staroszczyk Z., Makowski Ł., Michalski A., Wykorzystanie fuzji danych do estymacji liczebności sinic w jeziorze Dobczyckim,
Przegląd Elektrotechniczny (Electrical Review), 87 (2011), no.9a, pp. 87 - 90.

Dobrochna Matkowska
Wydział Chemiczny
Laureatka konkursu o stypendium naukowe
dla doktorantów, CAS/16/POKL

Wolumetryczne właściwości układu x_1 [C_4mim] [$MeSO_4$] + (1-x_1) MeOH w temperaturze (283.15 - 353.15) K i ciśnieniu (0.1 - 35) MPa

Ciecze jonowe (IL) mają charakter soli organicznych, które występują w stanie ciekłym w warunkach pokojowych. Ich cząsteczki składają się z dużego organicznego kationu i anionu, który może być zarówno organiczny jak i nieorganiczny. Ciecze jonowe wykazują unikalne właściwości, takie jak - niska temperatura topnienia, bardzo niska lotność, wysoka stabilność chemiczna i termiczna. Są niepalne i łatwe do recyklingu. Ze względu na ich nielotny charakter i dobre właściwości solwatacyjne, ciecze jonowe znalazły zastosowanie jako „zielone" i łagodne zamienniki dla tradycyjnych, lotnych organicznych rozpuszczalników. Ich sprawdzone i potencjalne zastosowanie nie ogranicza się jedynie do występowania w roli rozpuszczalników. Termodynamiczne właściwości cieczy jonowych i ich mieszanin są ważne z technologicznego i teoretycznego punktu widzenia. Do szczególnie istotnych należą właściwości wolumetryczne, czyli gęstość i wynikające z niej współczynniki mechaniczne oraz ich nadmiarowe wielkości, szczególnie nadmiarowa objętość mieszania. Wielkości te dostarczają informacji o strukturze i oddziaływaniach wewnątrzcząsteczkowych występujących w roztworze.

Prezentowane badania zawierają dane dotyczące wolumetrycznych właściwości cieczy jonowej: metylosiarczanu 1-butylo-3-metyloimidazoliowego i jej mieszaniny z metanolem. Pomiar gęstości dokonany został za pomocą densymetru Anton Paar DMA 512 P w zakresie temperatur (283.15 – 353.15) K i pod ciśnieniem (0.1 – 35) MPa.

Kamil Paduszyński
Wydział Chemiczny
Laureat konkursu o stypendium naukowe
dla doktorantów, CAS/16/POKL

Zastosowanie teorii PC-SAFT do modelowania właściwości termodynamicznych układów dwuskładnikowych z cieczami jonowymi

Zgodnie z ogólnie przyjętą opinią, zastosowanie cieczy jonowych (ang. ionic liquids, ILs) w inżynierii i technologii chemicznej będzie umożliwiać zastąpienie konwencjonalnych i szkodliwych dla środowiska procesów, procesami wydajniejszymi i nie emitującymi znacznych ilości zanieczyszczeń i produktów ubocznych. Projektowanie takich procesów musi być oparte na dokładnych i rzetelnych danych fizykochemicznych i termodynamicznych ILs oraz ich mieszanin z różnymi rozpuszczalnikami organicznymi. Dlatego też, bardzo istotnym z punktu widzenia badań nad rozwojem nowych i czystych technologii jest tworzenie banków tego typu danych, jak również prowadzenie badań teoretycznych nad różnego rodzaju modelami pozwalającymi takie dane opisać lub przewidzieć (np. uogólnione korelacje, równania stanu, metody udziałów grupowych).

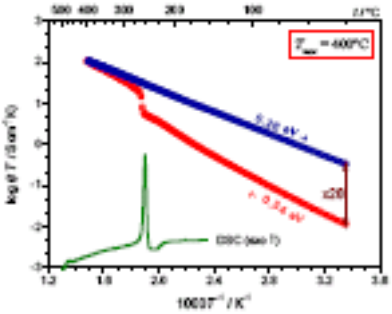
W niniejszej prezentacji, przedstawiono wyniki badań nad modelowaniem różnych właściwości termodynamicznych czystych ILs (gęstość, prężność pary) oraz ich mieszanin z serią rozpuszczalników niepolarnych, polarnych i asocjujących (równowagi fazowe VLE, LLE, SLE, nadmiarowe funkcje mieszania). Obiektem badań były ciecze z kationem imidazoliowym, pirydiniowym, pirolidyniowym i piperydyniowym oraz anionem bis(trifluorometylosulfonylo)imidkowym. Do obliczeń zastosowano teorię PC-SAFT i prosty model molekularny dla ILs. Parametry modelu wyznaczono na podstawie wartości gęstości ILs w funkcji temperatury i ciśnienia. W celu modelowania mieszanin, opracowano metodę wyznaczania parametrów oddziaływań między ILs a cząsteczkami rozpuszczalnika (ang. cross interactions parameters) na podstawie współczynników aktywności w rozcieńczeniu nieskończenie wielkim (γ^{∞}). Uzyskano znaczną poprawę dokładności obliczeń w porównaniu z obliczeniami przy założeniu standardowych reguł mieszania. Udowodniono tym samym, że model PC-SAFT jest przydatnym narzędziem służącym do modelowania układów dwuskładnikowych z ILs.

Tomasz Pietrzak
Wydział Fizyki
Laureat konkursu o naukowe stypendium
wyjazdowe dla doktorantów CAS/18/POKL

Nowe nanomateriały oparte na szkłach wanadanowo-fosforanowych i żelazowo-fosforanwych

W obecnych czasach obserwujemy coraz większe zapotrzebowanie na urządzenia do magazynowania energii. Nie tyczy się to tylko baterii do latarek, telefonów komórkowych czy laptopów. Coraz bliższa jest perspektywa rewolucji w motoryzacji, polegająca na odchodzeniu od napędzania pojazdu benzyną/olejem napędowym, na rzecz akumulatorów zasilających ekologiczne silniki elektryczne. Nie tylko przemysł oczekuje od inżynierów projektowania baterii o coraz większej pojemności i żywotności. Oczekuje się także od naukowców – fizyków, chemików, inżynierów materiałowych – znajdowania materiałów tańszych, efektywniejszych i bardziej przyjaznych środowisku. Spośród materiałów katodowych obecnie największe zainteresowanie naukowców budzi fosforan litowo-żelazowy ($LiFePO_4$) [1] – ze względu na duże zasoby jego składników oraz przyjazność środowisku, jak również pięciotlenek wanadu (V_2O_5) [2] – ze względu na jego dużą pojemność grawimetryczną.

Niniejsza praca skupia się na otrzymywaniu i badaniu właściwości materiałów układu V_2O_5-P_2O_5 [3], V_2O_5, $FePO_4$ [5] oraz $LiFePO_4$-V_2O_5 [6] o wysokiej przewodności elektronowej i dostatecznej stabilności termicznej. Proponowanym w niniejszej pracy sposobem na otrzymywanie materiałów o polepszonej przewodności jest metoda termicznej nanokrystalizacji: otrzymany materiał amorficzny poddawany jest określonej obróbce termicznej – powodującej wzrost krystalitów o rozmiarach rzędu kilkudziesięciu nanometrów, na skutek czego jego przewodność elektronowa może wzrosnąć nawet o 3 rzędy wielkości [6]. Alternatywnym sposobem jest bezpośrednie otrzymywanie materiałów nanokrystalicznych w wyniku wolniejszego chłodzenia z fazy ciekłej [6].



Rysunek 1 Wzrost przewodności szkła $90V_2O_5 \cdot 10P_2O_5$ na skutek termicznej nanokrystalizacji

W celu głębszego zrozumienia zachodzących procesów (np. mechanizmu transportu ładunku w materiałach nanokrystalicznych [4] lub kinetyki krystalizacji) otrzymywane materiały charakteryzowane są za pomocą wielu technik pomiarowych: spektroskopii impedancyjnej (IS), różnicowej analizy termicznej (DTA), dyfraktometrii rentgenowskiej (XRD), skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM), woltamperometrii cyklicznej (CV). Otrzymane materiały cechuje podwyższona – w stosunku do konkurencyjnych metod otrzymywania – przewodność elektronowa (np. $2 \cdot 10^{-3}$ S/cm dla V_2O_5-P_2O_5 lub 10^{-6} S/cm dla $LiFePO_4$-V_2O_5) oraz dobra stabilność termiczna. Występują w nich krystality o rozmiarach rzędu 25-80 nm. Wstępne pomiary elektrochemiczne wskazują na zdolność otrzymanych materiałów do interkalowania litu.

Literatura

[1] M.S. Whittingham: Lithium Batteries and Cathode Materials. Chemical Reviews 104 (2004) 4271–4301.

[2] N.A. Chernova, M. Roppolo, A.C. Dillon, M.S. Whittingham: Layered vanadium and molybdenum oxides: batteries and electrochromics. Journal of Materials Chemistry 19 (2009) 2526–2552.

[3] T.K. Pietrzak, J.E. Garbarczyk, I. Gorzkowska, M. Wasiucionek, J.L. Nowiński, S. Gierlotka, P. Jóźwiak: Electrical properties vs. microstructure of nanocrystallized V_2O_5-P_2O_5 glasses. Journal of Power Sources 194 (2009) 73–80.

[4] T.K. Pietrzak, J.E. Garbarczyk, M. Wasiucionek, I. Gorzkowska, J.L. Nowinski, S. Gierlotka: Electrical properties vs. microstructure of nanocrystallized V_2O_5-P_2O_5 glasses - An extended temperature range study. Solid State Ionics 192 (2011) 210–214.

[5] T.K. Pietrzak, Ł. Wewiór, J.E. Garbarczyk, M. Wasiucionek, I. Gorzkowska, J.L. Nowiński, S. Gierlotka: Electrical properties and thermal stability of $FePO_4$ glasses and nanomaterial. Solid State Ionics 188 (2011) 99–103.

[6] T.K. Pietrzak, I. Gorzkowska, J.L. Nowiński, J.E. Garbarczyk, M. Wasiucionek: Preparation of triphylite-like glasses and nanomaterials in the LiFePO4-V_2O_5 system and study on their electrical conductivity. Functional Materials Letters 4 (2011) 143–145.

Tymon Rubel
Wydział Elektroniki i Technik Informacyjnych
Instytut Radioelektroniki PW
Laureat konkursu o stypendium naukowe
dla młodych doktorów, CAS/17/POKL

Metoda analizy ilościowej białek w badaniach proteomicznych wykorzystujących spektrometrię mas

Ostatnia dekada była okresem niezwykle dynamicznego rozwoju proteomiki, młodej dziedziny wiedzy zajmującej się jakościowym i ilościowym badaniem zbiorów białek kodowanych przez genomy organizmów. Osiągnięty w tym czasie wzrost o ponad rząd wielkości liczby jednocześnie identyfikowanych białek otworzył przed biologią molekularną nowe możliwości. Z jednej strony, na polu badań podstawowych, techniki proteomiczne wnoszą obecnie coraz większy wkład do postulowanego przez tzw. biologię systemów opisu działania komórki jako sieci wzajemnie powiązanych procesów, sterowanych przez aktywne biologicznie cząstki, w tym białka. Z drugiej strony, w obszarze zastosowań medycznych, wyniki prowadzonych na świecie prac pozwalają wierzyć, że proteomika nie tylko przyczyni się do lepszego zrozumienia molekularnego podłoża szeregu schorzeń, ale będzie również w stanie dostarczyć nowe narzędzia diagnostyczne.

Techniką analityczną o podstawowym znaczeniu dla proteomiki jest obecnie spektrometria mas sprzężona z wysokosprawną chromatografią cieczową (LC-MS, Liquid Chromatography – Mass Spectrometry), której zastosowanie pozwala uzyskać jednocześnie informacje o tysiącach białek występujących w próbkach biologicznych. Należy jednak zaznaczyć, że możliwość prowadzenia badań o charakterze wielkoskalowym jest w przypadku techniki LC-MS okupiona znaczną wymiarowością i dużą złożonością otrzymywanych danych pomiarowych. W zależności od rodzaju stosowanego spektrometru i stopnia skomplikowania analizowanych próbek, rozmiar danych generowanych w pojedynczym eksperymencie może sięgać od kilku do kilkudziesięciu GB. Dodatkowo, bezpośrednie wyniki pomiaru nie poddają się w łatwy sposób interpretacji, a wnioskowanie na ich podstawie o strukturze złożonych cząstek, takich jak białka, jest możliwe wyłącznie dzięki stosowaniu specjalizowanych algorytmów przetwarzania danych.

W niniejszej prezentacji przedstawiona zostanie metoda umożliwiająca przeprowadzenie analizy ilościowej w oparciu o dane dostarczane przez system pomiarowy LC-MS, nie wymagająca stosowania znakowania próbek izotopami stabilnymi. Metoda ma charakter kompleksowy i obejmuje swym zakresem wszystkie kroki konieczne do przeprowadzenia analizy ilościowej, począwszy od gromadzenia wiedzy o składzie próbek, przez wykorzystanie jej podczas ekstrakcji cech ilościowych z widm mas próbek, aż do etapu obróbki mającej na celu poprawę jakości danych sprowadzonych do postaci liczbowej. Elementem wyróżniającym prezentowaną metodę spośród rozwiązań znanych z literatury, jest oparcie analizy ilościowej na szerokim wykorzystaniu zgromadzonej uprzednio wiedzy o składzie białkowym próbek. W efekcie cały proces przetwarzania danych ukierunkowany jest na uzyskanie w pełni wartościowej informacji biologicznej i jednocześnie możliwe staje się znaczące zmniejszenie podatności na błędy procesu ekstrakcji cech ilościowych. Oprócz przedstawienia algorytmów stanowiących podstawę metody, omówione zostaną również wyniki jej działania dla przykładowych danych pochodzących z rzeczywistych badań proteomicznych.

Tomasz Rudny
Wydział Matematyki i Nauk Informacyjnych
Laureat konkursu o naukowe stypendium
wyjazdowe dla nauczycieli akademickich, CAS/19/POKL

Projektowanie narzędzi informatycznych do symulacji dynamiki układów wielu ciał

Artykuł ten opisuje założenia, algorytmy i metody sytemu informatycznego do symulacji dynamiki układów wielu ciał (*ang. Multi Body Systems*). Omówione prace zostały wykonane wspólnie z zespołem badawczym University of Melbourne.

Układy wielu ciał zajmują szczególne miejsce w mechanice teoretycznej. Są wykorzystywane do modelowania bardzo wielu zjawisk - od robotów, obrabiarek, układów mechanicznych, przekładni poprzez układy planetarne, mgławice pyłowe aż po symulacje cząsteczek. Interesujące zastosowania obejmują również symulacje przepływu krwi w naczyniach krwionośnych, analizę tarcia na styku powierzchni oraz erozję skał. Niestety, symulację dynamiki układów wielu ciał są problemem trudnym z uwagi na olbrzymią złożoność obliczeniową problemu. Konieczne jest zastosowanie efektywnych, często nowatorskich metod. Jedną z nich jest metoda LCP - Linear Complementarity Problem. Równie ważne jednak jak zastosowanie odpowiednich metod obliczeniowych jest skorzystanie z właściwej technologii.

Na bazie powyższych założeń powstaje system do symulacji dynamiki układów wielu ciał. Z jednej strony pozwala on na graficzną prezentację układów dynamicznych, z drugiej umożliwia denfiowanie takich układów oraz - co najważniejsze - wydajną ich symulację. Symulacja prowadzona jest z wykorzystaniem najnowszych technologii programowania równoległego - w szczególności programowania na GPU (*ang. Graphical Processing Unit*) w technologii CUDA. Pozwala ona często na uzyskanie przyspieszenia klasycznych algorytmów o czynnik 100 lub więcej.

Artykuł ten prezentuje założenia, algorytmy, technologię systemu informatycznego do symulacji układów wielu ciał. Wiele jego docelowej funkcjonalności zostało już zaimplementowane, czego wyniki są prezentowane w niniejszej pracy.

Mirosław Seredyński
Wydział Mechaniczny Energetyki i Lotnictwa
Laureat konkursu o naukowe stypendium
dla młodych doktorów, CAS/17/POKL

Porównanie metod hybrydowej i opartej na technice śledzenia frontu w makroskopowym modelowaniu krzepnięcia stopu podwójnego

Modelowanie numeryczne procesów związanych z krzepnięciem stopów dwuskładnikowych jest złożonym zagadnieniem głównie ze względu na występowanie szeregu wzajemnie powiązanych procesów zachodzących w szerokim zakresie skal przestrzennych i czasowych. Podczas chłodzenia odlewu tworzą się mikroskopijne ziarna fazy stałej o strukturze dendrytów. Na powierzchni chłodzonych ścian zaczynają swój wzrost w kierunku wnętrza nieruchome dendryty kolumnowe, natomiast wewnątrz odlewu, w obszarze przechłodzonej cieczy, następuje nukleacja i wzrost dendrytów równoosiowych. Charakter przepływu w obszarach opanowanych przez obie wymienione struktury jest inny. I tak, w przypadku dendrytów kolumnowych wykazuje on cechy ruchu cieczy w ośrodku porowatym, natomiast w strefie dendrytów równoosiowych cechy zawiesiny cząstek stałych.

Zastosowanie właściwego opisu transportu pędu w wymienionych obszarach wymaga opracowania procedury pozwalającej na detekcję zmiennych w czasie obszarów występowania obu struktur ziaren. Stosowany do tej pory uproszczony model (hybrydowy) opierał się na koncepcji tzw. punktu koherencji (ang. coherency point), gdzie obszary dendrytów rozdzielone są powierzchnią jednakowego udziału fazy stałej. W myśl tego modelu nieruchoma sieć dendrytów, znajdująca się w pobliżu ścianek, jest tworzona w wyniku zrastania się dendrytów równoosiowych po przekroczeniu pewnego granicznego udziału objętościowego fazy stałej. Przeprowadzone w wyidealizowanych warunkach eksperymenty wykazały, że wartość punktu koherencji zależna jest, nie tylko od rodzaju stopu, ale także od innych czynników np. warunków chłodzenia. Ponadto spotykane w literaturze symulacje numeryczne opierały się na wziętych ad-hoc wartościach punktu koherencji, który często traktowany był jako zmienna pozwalająca na dopasowanie wyników obliczeń do danych eksperymentalnych.

W celu zweryfikowania poprawności powyższego opisu zastosowany został model rozdzielenia obszarów o odmiennej morfologii dendrytów oparty na technice śledzenia frontu (FT) na stałej siatce dyskretyzacji. Jego zasadniczą cechą jest wprowadzenie powierzchni (nazywanej również frontem dendrytów kolumnowych) będącej obwiednią wierzchołków dendrytów kolumnowych, przemieszczającej się w rozważanym obszarze wg znanej kinetyki wzrostu dendrytów, czyli relacji wiążącej prędkość wzrostu z przechłodzeniem, prędkością napływu cieczy itp. Zależność ta może być wyznaczana doświadczalnie lub na drodze teoretycznej. Z definicji wymienionej powierzchni wynika, że przed nią znajduje się przechłodzona ciecz, w której unoszone są ziarna równoosiowe, natomiast za nią dendryty kolumnowe. Położenie frontu pozwala na bezpośrednią detekcję obszarów zajętych przez dendryty kolumnowe oraz przeniesienie informacji do makroskopowego równania bilansu pędu za pomocą specjalnie skonstruowanej funkcji przełączającej.

Weryfikację modelu hybrydowego za pomocą modelu opartego na technice śledzenia frontu przeprowadzono na przykładzie krzepnięcia stopu podwójnego Pb - 48 % wag. Sn w geometrii dwuwymiarowej. Przedstawiona weryfikacja modelu hybrydowego składała się z dwóch części. W pierwszej porównano położenia linii rozdzielających obszary o odmiennych morfologiach dendrytów, tj. frontu dendrytów kolumnowych w przypadku metody opartej na technice śledzenia frontu oraz linii stałego udziału fazy stałej w przypadku metody hybrydowej, dla dwóch wybranych chwil czasowych. Na tej podstawie wybrano wartości punktów koherencji odpowiadające najlepszemu dopasowaniu linii rozdziału. W następnym kroku zweryfikowano przewidziany modelem FT udział fazy stałej wzdłuż frontu dendrytów kolumnowych i porównano go z wartością najlepiej dopasowanego punktu koherencji. Porównane zostały rozkłady formującej się makrosegregacji składnika rozpuszczonego.

W rezultacie przeprowadzonych obliczeń stwierdzono zmienność udziału fazy stałej wzdłuż frontu w czasie i przestrzeni, co pozostaje w sprzeczności z podstawowym założeniem modelu hybrydowego. Przeanalizowano również wpływ wyboru wartości punktu koherencji na strukturę rozłożenia składnika rozpuszczonego w krzepnącym stopie.

Dominik Sierociuk
Wydział Elektryczny
Instytut Sterowania i Elektroniki Przemysłowej PW
Laureat konkursów o naukowe stypendium
dla młodych doktorów, CAS/9/POKL
oraz o naukowe stypendium wyjazdowe
dla nauczycieli akademickich CAS/19/POKL

Ulepszona metoda dla modelowania analogowego członu całkującego rzędów 0.25 i 0.5.

Rachunek różniczkowy niecałkowitych rzędów jest uogólnieniem tradycyjnego rachunku różniczkowego i całkowego na rzędy/krotności pochodnych/całek będące liczbami rzeczywistymi a nawet zespolonymi. Rachunek ten jest stosowany przy modelowaniu i sterowaniu układów o złożonej wewnętrznej strukturze, w szczególności bazujących na procesie dyfuzji, na przykład ultrakondensatory czy układ transportu ciepła. W prezentacji zostanie przedstawiona nowa metoda modelowania analogowego układu całkującego niecałkowitego rzędu. W szczególności zostaną rozpatrzone dwa przypadki, to jest: układu całkującego o rzędzie 0.5 i rzędzie 0.25. Umożliwia ona otrzymanie modelu analogowego z użyciem rezystorów i kondensatorów o wartościach standardowo produkowanych. Weryfikacja eksperymentalna zaprezentowanej metody aproksymacji analogowej zostanie pokazana zarówno w dziedzinie częstotliwości jak i czasu. Zaprezentowana metoda może zostać użyta do modelowania analogowego liniowych czy nieliniowych równań różniczkowych niecałkowitych rzędów lub praktycznej realizacji regulatorów niecałkowitego rzędu jak np: kontroler PID niecałkowitego rzędu.

Literatura

[1] I. Podlubny, Fractional Differential Equations, Academic Press, 1999.

[2] C.A. Monje, Y.Q. Chen, B.M. Vinagre, D. Xue and V. Feliu, Fractional-order Systems and Controls, Springer, 2010.

[3] I. Petraš and I. Podlubny and P. O'Leary and L. Dorčak and B. M. Vinagre, Analogue Realization of Fractional-Order Controllers, Faculta BERG, TU Košice, Slovakia, 2002.

Małgorzata Wojtyś
Wydział Matematyki i Nauk Informacyjnych
Laureatka konkursu o stypendium naukowe
dla doktorantów, CAS/16/POKL

Postselekcyjne estymatory gęstości prawdopodobieństwa oraz funkcjonału entropii

Niech $f \in L^2([0,1])$ będzie pewną ustaloną gęstością prawdopodobieństwa względem miary Lebesgue'a na odcinku [0, 1]. W referacie przedstawiam własności estymatorów gęstości f oraz entropii

$$K(f) = \int_0^1 f(s)\log f(s)ds$$

opartych na takich regułach wyboru modelu, jak Bayesowskie Kryterium Informacyjne, kryteria minimalnej p-wartości i maksymalnej p-wartości (zdefiniowane w[2]) oraz reguły bazujaące na progowaniu ([3]), dla sytuacji, gdy rozważana lista dostępnych modeli jest postaci

$$M_i = \{f_t(x) = \exp\{\sum_{j\in i} t_j b_j(x) - p_i(t)\}I(x \in [0,1]), t_j \in \mathbb{R} dla j \in i\},$$

gdzie $i \subset \{1,\dots,m\}$ dla pewnego ustalonego $m \in N$, $(b_j(x))_{j=1}^m$ jest wektorem funkcji ortonormalnych w przestrzeni $f \in L^2([0,1])$, zaś $p_i(t)$ to stała normująca. Niech $\hat{\imath} = \hat{\imath}(X_1,\dots,X_m)$ będzie dowolną regułą wyboru modelu przyjmującą wartości w zbiorze $2^{\{1,\dots,m\}}$ bazującą na próbie losowej $X_1,\dots,X_n \sim f$. Przy danej wartości $\hat{\imath}$, postselekcyjny estymator gęstości definiujemy jako $\hat{f}_{\hat{\imath}}$, zaś estymator entropii jako $\hat{K}(f) = \int_0^1 f_{\hat{\imath}}(s)\log f_{\hat{\imath}}(s)ds$, gdzie $\hat{f}_{\hat{\imath}}$ jest estymatorem największej wiarogodności dla gęstości f w rodzinie $M_{\hat{\imath}}$. Dowodzę, że $\hat{K}(f)$ oparty o dowolną konserwatywną regułę wyboru modelu jest przy odpowiednich założeniach zgodny i asymptotycznie normalny. Wyniki uogólniam do sytuacji, gdy $\log f$ ma nieskończone rozwinięcie w bazie $(b_i)_1^\infty$ Wyznaczam tempo zbieżności $\hat{K}(f)$ do wartości teoretycznej $K(f)$

lub, gdy prawdziwy model nie występuje na liście rozważanych modeli, do $K(\hat{f})$, gdzie $\hat{f}$ jest rzutem informacyjnym gęstości f na maksymalny rozważany model, tzn. jest to element najbliższy f w sensie odległości Kullbacka-Leiblera spośród wszystkich rozważanych modeli. Przedstawiam też wyniki symulacyjne uwydatniające zysk, wyrażony w terminach błędu średniokwadratowego, płynący z włączenia metod wyboru modelu do procesu estymacji.

Literatura

[1] Barron, A. R., Sheu, C. H. (1991). Approximation of density functions by sequences of exponential.

[2] Pokarowski, P., Mielniczuk, J. (2011). P-values of likelihood ratio statistic for consistent testing and model selection, in preparation.

[3] Wojtyś M. (2011) Post-model-selection method for density estimation. Comm. Statist. Th. Meth. 40, 3082-3098..

Maciej Zawadzki
Wydział Chemiczny
Laureat konkursu o stypendium naukowe
dla doktorantów, CAS/16/POKL

Właściwości fizykochemiczne cieczy jonowych opartych na kationie chinolinowym

Zsyntezowano nowe ciecze jonowe oparte na kationie chinolinowym i izochinolinowym z różnymi podstawnikami alkilowymi. Zmierzono podstawowe właściwości fizykochemiczne: temperaturę topnienia, entalpię topnienia i przemiany fazowe w ciele stałym, gęstość i lepkość. Wyznaczono diagramy fazowe, stosując metodę dynamiczną w układach dwuskładnikowych cieczy jonowych z alkoholami lub z węglowodorami aromatycznymi. W układach z krótko łańcuchowymi alkoholami obserwowano pełną mieszalność w fazie ciekłej. Dla dłuższych alkoholi obserwowano lukę mieszalności z górną krytyczną temperaturą mieszalności. W układów z węglowodorami aromatycznymi obserwowano lukę mieszalności. Górna krytyczna temperatura mieszalności była wyższa od temperatury wrzenia rozpuszczalnika i nie została wyznaczona. Krzywe likwidusu jak i krzywe równowagi ciecz – ciecz zostały skorelowane z pomocą równania NRTL.

Literatura

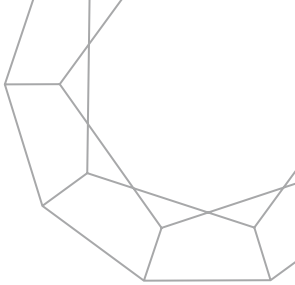
[1] "Thermophysical properties and phase equilibria study of the binary systems {N-hexylquinolinium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide+aromatic hydrocarbons, or an alcohol}"; Domańska, U., Zawadzki, M.,Zwolińska, M.; Journal of Chemical Thermodynamics 43 (2011) 775-781.

[2] Phase equilibria study of { N -hexylisoquinolinium bis{(trifluoromethyl) sulfonyl}imide + aromatic hydrocarbons or an alcohol} binary systems" Domańska, U., Zawadzki, M.,Tshibangu, M.M., Ramjugernath, D.,Letcher, T.M.; Journal of Physical Chemistry B 115 (2011) 4003-4010.

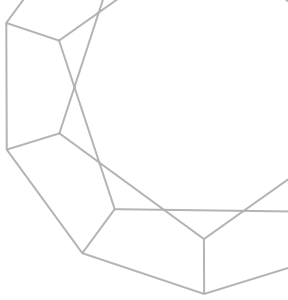
[3] "Thermodynamic properties of the N-butylisoquinolinium bis(trifluoromethylsulfonyl) imide"; U. Domańska, M. Zawadzki; Journal of Chemical Thermodynamics 43 (2011) 989-995.

[4] "Measurements of activity coefficients at infinite dilution of organic compounds and water in isoquinolinium-based ionic liquid [C8iQuin][NTf2] using GLC"; U. Domańska, M. Zawadzki, M. Królikowska, M. Marc Tshibangu,Deresh Ramjugernath, T. M. Letcher; Journal of Chemical Thermodynamics 43 (2011) 499–504.

[5] „Phase equilibria study of {N-butylquinolinium bis{(trifluoromethyl)sulfonyl}imide + aromatic hydrocarbons, or an alcohol} binary systems"; U. Domańska, M. Zawadzki, M. Marc Tshibangu, Deresh Ramjugernath, T. Letcher; Journal of Chemical Thermodynamics 42 (2010) 1180 – 1186.



Abstrakty / prezentacje ustne



Spis treści

Marcin Witkowski / Założenia konstrukcyjne oraz funkcjonalne nowego narzędzia laparoskopowego strona 31

Jakub Kupecki / Analiza procesu generacji paliwa syntetycznego z wykorzystaniem ciepła wysokotemperaturowego reaktora jądrowego strona 32

Agata Pilitowska / Funkcje agregacji i entropia strona 33

Dorota Wilkowska-Kołakowska / Decyzja administracyjna w gospodarce nieruchomościami strona 34

Zuzanna Żołek-Tryznowska / Właściwości farb fleksograficznych modyfikowanych poliemerami hiperrozgałęzionymi strona 37

Beata Stelmach-Fita / Udostępnienie treści planistycznych w celu zintegrowanego zarządzania przestrzenią miejską strona 39

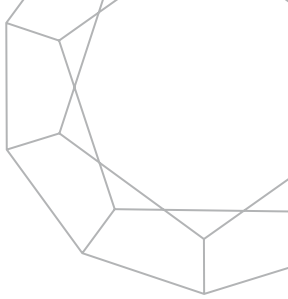
Edyta Łukowska-Chojnacka / Chemoenzymatyczna synteza alkoholi z ugrupowaniem tetrazolowym strona 41

Krzysztof Zegadło / Nieliniowe właściwości struktur PDLC strona 42

Krzysztof Pokorski / Analiza modulacyjna obrazów prążkowych z zastosowaniem transformacji falkowej strona 44

Adam Krysztopa / Defekty samoistne w półprzewodnikach fotowoltaicznych z rodziny chalkopirytu strona 46

Wojciech Mazurczyk / Nowe sposoby ukrywania informacji w sieciach telekomunikacynych strona 48



Marcin Witkowski
Wydział Mechaniczny Energetyki i Lotnictwa
Laureat konkursu o stypendium naukowe
dla doktorantów, CAS/16/POKL

Założenia konstrukcyjne oraz funkcjonalne nowego narzędzia laparoskopowego

Dążenie do zminimalizowania rozległości urazów jakich doznają pacjenci w związku z przeprowadzanymi operacjami chirurgicznymi, jest istotnym czynnikiem prowadzącym do rozwoju narzędzi chirurgicznych. Wprowadzenie mało inwazyjnych operacji laparoskopowych przyczyniło się w znacznym stopniu do komfortu odczuwanego przez pacjenta po wykonanych zabiegach. Zalety chirurgii laparoskopowej takie jak niewielkie rany pooperacyjne, mniejsze powikłania, mniejsze zużycie leków i materiałów medycznych, krótszy okres hospitalizacji czy rehabilitacji, zostały potwierdzone w sprawozdaniach medycznych oraz w wielu specjalistycznych publikacjach. Wraz z narodzinami nowej, mało inwazyjnej techniki prowadzenia operacji, powstały specjalnie do tego przystosowane narzędzia laparoskopowe. Na przestrzeni ostatnich 25 lat pojawiały się na rynku coraz nowsze narzędzia, dające chirurgowi większe możliwości manipulacji ułatwiające wykonywanie skomplikowanych czynności. Mimo nowych koncepcji i rozwiązań ogromną większość wykorzystywanych narzędzi w chirurgii laparoskopowej stanowią w dalszym ciągu narzędzia niewiele odbiegające w budowie i prostocie od zaprojektowanych w początkowych latach laparoskopii. Nowe narzędzia, ze względu na wysoką złożoność konstrukcji oraz wysoką cenę nie znalazły do tej pory szerokiego zastosowania.

W opisywanej pracy podjęto próbę krytycznej oceny narzędzi dostępnych na rynku oraz konstrukcji eksperymentalnych opisanych w publikacjach. Analiza została przeprowadzona zarówno pod kątem konstrukcyjnym jak i funkcjonalnym. Wnioski z opisanej pracy pozwoliły na sformułowanie założeń konstrukcyjnych oraz funkcjonalnych do budowy narzędzia laparoskopowego. Praca stanowi element projektu budowy nowego narzędzia chirurgicznego, realizowanego przez autora w ramach pracy doktorskiej.

Jakub Kupecki
Wydział Mechaniczny Energetyki i Lotnictwa
Laureat konkursu o naukowe stypendium
wyjazdowe dla doktorantów, CAS/10/POKL

Analiza procesu generacji paliwa syntetycznego z wykorzystaniem ciepła wysokotemperaturowego reaktora jądrowego

Przedmiotem prowadzonych w ramach stypendium wyjazdowego prac była analiza numeryczna układu gazyfikacji węgla opartego na wysokotemperaturowym reaktorze jądrowym (ang. HTR).

Analizowany układ, stanowi interesującą technologię pozwalającą wytwarzać gaz syntetyczny z paliwa węglowego. Wytworzone paliwo może być następnie bezpośrednio wykorzystane w turbinie gazowej lub też magazynowane i służyć do wyrównywania zmienności w dobowym zapotrzebowaniu na energię elektryczną. Technologia gazyfikacji pozwala zredukować emisje gazów cieplarnianych związanych z generacją energii elektrycznej. Dodatkowo, wykorzystanie wysokotemperaturowego reaktora jądrowego jako źródła ciepła pozwala zredukować o ok. 30% ilość węgla spalanego w celu dostarczenia energii do endotermicznego procesu zgazowania. W pracy wykorzystano narzędzia komputerowej mechaniki płynów (ang. Computational Fluid Dynamics) w celu określenia kluczowych parametrów, mających wpływ na zachodzącą reakcję zgazowania. Analizie poddano wpływ stopnia zawirowania dwufazowej mieszaniny reagującej w jednostce gazyfikującej. Określono zmiany sprawności w zależności od temperatury procesu. W obliczeniach modelowych zastosowano zaawansowane techniki umożliwiające redukcję kosztu obliczeniowego poprzez wprowadzenie uzasadnionych założeń upraszczających. Analizowana technologia może stanowić perspektywiczne źródło energii oraz przyczynić się do znacznego zmniejszenia emisji związanych z energetycznym wykorzystaniem węgla.

Prace obliczeniowe prowadzone były w Division of Nuclear Reactor Technology, Royal Institute of Technology (KTH), Sztokholm, Szwecja w okresie VIII – XII 2010.

Agata Pilitowska
Wydział Matematyki i Nauk Informacyjnych
Laureatka konkursu o naukowe stypendium wyjazdowe
dla nauczycieli akademickich, CAS/19/POKL

Funkcje agregacji i entropia

W celu gromadzenia i przetwarzania informacji niezbędnych w procesach decyzyjnych stosuje się tzw. funkcje agregacji. Pojęcie agregacji odnosi się do procesu polegającego na uzyskaniu jednej, syntezującej wartości z dowolnie (skończenie) wielu, najczęściej numerycznych danych. Najprostszym przykładem są funkcje średniej arytmetycznej, ważonej, czy geometrycznej. W wielu przypadkach wymaga się by w dowolnym dwu-stopniowym procesie uzupełniania informacji, końcowy rezultat nie zależał od kolejności wykonywania operacji. Określenie funkcji wyjściowej do specyficznego problemu jest zadaniem trudnym. Aby go ułatwić charakteryzuje się funkcje agregacji według własności, które spełniają. Jedną z takich własności jest entropia, która wydaje się, być bardzo naturalnym wymogiem. Można ją wyjaśnić na następującym przykładzie. Gdy chcemy ocenić $\boldsymbol{p}$ kandydatów przez $\boldsymbol{n}$ sędziów i uzyskać ocenę zbiorczą to możemy zrobić to na dwa sposoby. Najpierw zebrać wszystkie oceny uzyskane przez każdego z kandydatów, a następnie skomponować ocenę grupową. Alternatywnie, można najpierw zgromadzić oceny przyznane jednemu kandydatowi przez wszystkich sędziów, a dopiero potem obliczyć ocenę całościową. Własność entropii oznacza, że obie metody muszą prowadzić do tego samego ogólnego wyniku.

Pierwsza część referatu zawiera wybór najważniejszych przykładów funkcji agregacji (takich jak średnie, funkcje łączne, normy, czy też z dyskretne rozmyte całki) oraz ich własności. Druga część poświęcona jest funkcjom entropicznym, a także pewnym uogólnieniom entropii.

Dorota Wilkowska-Kołakowska
Wydział Administracji i Nauk Społecznych
Laureatka konkursu o stypendium naukowe
dla młodych doktorów, CAS/17/POKL

Decyzja administracyjna w gospodarce nieruchomościami

Problematyka gospodarki nieruchomościami obejmuje wiele aspektów. Są to m.in. kwestie podziału nieruchomości, scalania i podziału nieruchomości, scalania i wymiany nieruchomości, pierwokupu nieruchomości, wywłaszczania nieruchomości i zwrotu wywłaszczonych nieruchomości, udziału w kosztach budowy urządzeń infrastruktury technicznej oraz wiele innych. Problematyka gospodarki nieruchomościami dotyczy też regulacji zawartych w ustawie o autostradach płatnych oraz o Krajowym Funduszu Drogowym, o szczególnych zasadach przygotowania i realizacji inwestycji w zakresie dróg publicznych, ustawie prawo lotnicze, ustawie o lasach, ustawie o transporcie kolejowym i innych.

W większości wyżej podanych aspektów gospodarowania nieruchomościami istotną rolę odgrywa decyzja administracyjna. Bez rozstrzygnięcia stanu faktycznego w drodze decyzji administracyjnej przez właściwy organ, nie byłoby możliwe realizowanie obecnie na tak szeroką skalę procesów inwestycyjnych w zakresie budowy dróg, linii kolejowych, budownictwa wielorodzinnego, centrów handlowych (decyzja o zezwoleniu na realizację inwestycji drogowej, decyzja o podziale nieruchomości, decyzja o wywłaszczeniu nieruchomości).

W pierwszym etapie badań skoncentrowałam się przede wszystkim na rozważeniu aspektu racjonalnego gospodarowania nieruchomościami w kontekście realizacji zasady zrównoważonego rozwoju (najważniejsze tezy podałam w artykule „Prawidłowa wycena nieruchomości jako istotny element racjonalnej gospodarki nieruchomościami"), budzącego kontrowersje współdziałania organów uprawnionych do wydania decyzji z podmiotami, które w istocie powinny pełnić jedynie funkcje biegłych, a które w rzeczywistości wywierają bezpośredni wpływ na treść decyzji, a także problemów praktycznych związanych z wydawaniem istotnych dla racjonalnego gospodarowania nieruchomościami decyzji w sprawie scalania i ponownego podziału nieruchomości oraz scalania i wymiany gruntów (najważniejsze tezy podałam

w artykule „Postępowanie w sprawie scalania i podziału nieruchomości oraz scalania i wymiany gruntów- problematyka administracyjnoprawna").

W definicjach dotyczących zrównoważonego rozwoju zwraca się uwagę na fakt, że realizacja zrównoważonego rozwoju jest możliwa poprzez ekonomiczne działanie opierające się na zasadzie równowagi, zasadzie efektywności i zasadzie zapewnienia wzajemnych korzyści. W kontekście podjętej tematyki na uwagę zasługuje zasada efektywności, tzn. racjonalnego gospodarowania, którą można odnieść do jednego z przejawów działalności gminy, tzn. gospodarowania nieruchomościami. Gospodarowanie nieruchomościami gminnymi jest jednym z elementów pozwalających na realizację ładu przestrzennego, architektury i urbanistyki i wiąże się bardzo często z koniecznością dokonywania wycen nieruchomości, od prawidłowości której zależy ochrona mienia i praw podstawowych mieszkańców gminy. Dlatego jednym z celów mojej pracy badawczej było określenie wpływu prawidłowej wyceny na racjonalne gospodarowanie nieruchomościami w gminie oraz zaprezentowanie rozwiązań zwiększających prawidłowość wycen nieruchomości w Polsce, wraz z powołaniem się na rozwiązania niemieckie, które mogą stanowić również inspirację dla polskiego ustawodawcy.

Decyzja w gospodarce nieruchomościami charakteryzuje się pewnymi odrębnościami w stosunku do klasycznego schematu decyzji. Odrębności te wynikają zarówno ze szczególnej treści samej decyzji, która często wywołuje skutki cywilnoprawne i wywiera bezpośredni wpływ na gwarantowane konstytucyjnie uprawnienia obywateli, jak i z odrębności postępowania administracyjnego w stosunku do procedury określonej w kodeksie postepowania administracyjnego, co bardzo dobrze jest widoczne w przypadku decyzji dotyczących scalania i ponownego podziału nieruchomości oraz scalania i wymiany gruntów.

Zarówno postępowanie w sprawie scalania i ponownego podziału nieruchomości, jak i postępowanie w sprawie scalania i wymiany gruntów stanowią postępowania administracyjne, podlegające odrębnym regulacjom prawnym. Typowe, wskazywane w ustawodawstwie i literaturze cechy postępowania administracyjnego wypełnia postępowanie scaleniowe regulowane przez ustawę o scalaniu i wymianie gruntów: postępowanie jest prowadzone przez organ administracji, jakim jest starosta, a rozstrzygnięcie sprawy ma postać decyzji administracyjnej. Postępowanie w sprawie scalenia i ponownego podziału nieruchomości, natomiast, stanowi szczególny rodzaj postępowania administracyjnego odrębny od postępowania unormowanego przepisami kodeksu postępowania administracyjnego. Jest ono prowadzone przez organy administracji publicznej, jednakże w tym przypadku nie mamy do czynienia z indywidualnym rozstrzygnięciem w postaci decyzji administracyjnej, tylko z aktem o charakterze generalnym, jakim jest uchwała rady gminy. Tym bardziej wydaje się problematyczne to, że ustawodawca posłużył się w tytule rozdziału II ustawy o gospodarce nieruchomościami oraz

w tytule ustawy o scalaniu i wymianie gruntów, tą samą nazwą „scalanie" na oznaczenie dwóch różnych procedur. Fakt ten powoduje szereg problemów w praktyce administracyjnej. Zdarza się bowiem, że prowadzący postępowanie urzędnicy mylą tak samo brzmiące pojęcia, co niesie za sobą negatywne skutki szczególnie dla stron postępowania.

Kolejny problem, który był przedmiotem moich badań, dotyczy zagadnienia wymiany gruntów z ustawy o scalaniu i wymianie gruntów. Jednym z podstawowych celów Państwa powinno być ograniczanie procedur administracyjnych, tam gdzie to możliwe. Sprzyja to obniżaniu kosztów działalności administracyjnej oraz ogranicza biurokrację, a tym samym może przyspieszyć niektóre procedury. Dlatego na poparcie zasługuje teza, że zadania, które ma spełniać wymiana z ustawy o scalaniu i wymianie gruntów można z powodzeniem zrealizować poprzez cywilną umowę zamiany gruntów, co pozwoli na dostosowanie obecnie obowiązującej ustawy z 1982 r. do współcześnie panujących warunków społecznych i rynkowych. Angażowanie państwa i środków budżetowych w kolejną procedurę administracyjną (według obecnie obowiązującej ustawy wymiana gruntów jest dokonywana w postępowaniu administracyjnym) w dobie prywatyzacji administracji, tzn. przekazywania wielu zadań publicznych podmiotom prywatnym oraz koniecznych oszczędności w zakresie finansów publicznych, wydaje się niepotrzebne tam, gdzie może z powodzeniem zostać zastosowana cywilistyczna (prywatnoprawna) procedura zamiany nieruchomości. Wprowadzenie tego typu zmian do ustawy przyczyniłoby się niewątpliwie do realizacji konstytucyjnej zasady ochrony prawa własności dotyczącej m.in. jak najmniejszej ingerencji Państwa w sferę prawa własności (por. art. 64 Konstytucji). Zagadnienia te będą przedmiotem dalszych badań.

Zuzanna Żołek-Tryznowska
Wydział Inżynierii Produkcji
Laureatka konkursów o stypendium naukowe
dla doktorantów CAS/8/POKL oraz
młodych doktorów, CAS/17/POKL

Właściwości farb fleksograficznych modyfikowanych poliemerami hiperrozgałęzionymi

W ciągu ostatnich lat polimery hiperrozgałęzione stały się przedmiotem intensywnych badań. Opracowano już wiele zastosowań tych polimerów w różnych dziedzinach między innymi w poligrafii – jako dodatki do farb drukowych lub dodatki poprawiające barwienie włókien z tworzyw sztucznych [1]. Niektóre z zastosowań są już opatentowane [2,3].

Zbadano wpływ dodatku niewielkich ilości (3% i 6% wagowych) dodatku polimeru hiperrozgałęzionego dostępnych komercyjnie na właściwości farb oraz jakość wydruku. W badaniach wykorzystano polimery hiperrozgałęzione: silnie rozgałęziony poliester z dużą ilością grup hydroksylowych Boltorn H-2004, B-H2004, (462113-22-0, Persorp, Szwecja, stopień czystości: 0,999) oraz amfifilowy polimer hiperrozgałęziony zawierający długie, nienasycone łańcuchy reszt kwasów tłuszczowych Boltorn W3000, B-W3000, (Perstorp, Szwecja, stopień czystości 0,90). Do badań użyto dwie farby fleksograficznych: farby czarnej przeznaczonej do druku na folii polietylenowej Urania (WFFG, Polska) oraz farby żółtej E-Print (WFFG, Polska) przeznaczonej do druku na folii polipropylenowej.

Zbadano reologię (lepkość), gęstość oraz napięcie powierzchniowe farb niemodyfikowanych Urania i E-Print oraz farb modyfikowanych polimerami hiperrozgałęzionymi B-H2004 oraz B-W3000 w ilości 3% i 6% wagowych. Następnie wykonano wydruki przy pomocy prętów Anilox na folii polietylenowej i zbadano właściwości optyczne: zmierzono gęstość optyczną oraz parametry *L*,*a*,*b*.

Przeprowadzone badania pozwoliły ustalić, czy niewielki dodatek polimerów hiperrozgałezionych dostępnych komercyjnie może być stosowany do modyfikacji farb fleksograficznych oraz jaka ilość polimeru jest niezbędna do poprawienia właściwości farb oraz odbitek wykonanych za pomocą tych farb.

Literatura

[1] P. E. Froehling, Dyes Pigments 48 (2001) 187-195.
[2] Patent EP882772 (Ciba).
[3] Patent US7511085 (BASF AG, XSYS Print Solution Deutschland GMBH).

Beata Stelmach-Fita
Wydział Architektury
Laureatka konkursu o stypendium naukowe
dla doktorantów, CAS/16/POKL

Udostępnienie treści planistycznych w celu zintegrowanego zarządzania przestrzenią miejską

Wzrost świadomości znaczenia geografii i zależności przestrzennych, połączony ze wsparciem ze strony technologii elektronicznej, spowodował rozwój cyfrowej informacji geograficznej i systemów informacji geograficznej na całym świecie. Cyfrowe dane geograficzne stanowią próbę modelowania i opisywania świata rzeczywistego, mającą zastosowanie w komputerowej analizie i graficznej prezentacji informacji. Każdy opis rzeczywistości zawsze stanowi: pewną abstrakcję, częściową i tylko z jednego z możliwych *„punktów widzenia"*. Model świata rzeczywistego nie jest dokładnym duplikatem; niektóre dane, informacje i zjawiska są wyodrębniane, inne upraszczane, a jeszcze inne kompletnie ignorowane. Rzadko zdarza się, aby dane były doskonałe, kompletne i poprawne. Aby zapewnić, że dane nie są niewłaściwie używane, należy w pełni udokumentować założenia i ograniczenia dotyczące tworzenia danych. Metadane pozwalają producentowi opisać zbiór tak, aby użytkownicy mogli zrozumieć założenia i ograniczenia zbioru oraz ocenić jego przydatność pod kątem zamierzonego przez nich zastosowania. Dane te często są wytwarzane przez jedną osobę lub organizację, a stosowane przez inną. Odpowiedni opis zbioru zapewni wszystkim osobom nie znającym danych lepsze ich zrozumienie i umożliwi im poprawne korzystanie z nich. Ponieważ producenci i użytkownicy mają do czynienia z coraz większą liczbą danych, to odpowiednio przygotowana dokumentacja dostarczy im także niezbędnej wiedzy o ich własnych zasobach informacyjnych i pozwoli na lepsze zarządzanie przechowywaniem, aktualizacją i ponownym wykorzystaniem danych .

Zbiory danych przestrzennych gromadzone w zasobach dotyczących *„zagospodarowania przestrzennego"* również będą wymagały takiego rzetelnego opisania, jeżeli mają być udostępniane w ustanowionej Wspólnotowej Infrastrukturze Informacji Przestrzennej. Wytyczne Dyrektywy 2007/2/WE INSPIRE w tym zakresie dotyczą danych w formie elektronicznej. W Polsce

dokumenty planistyczne do tej pory były tworzone w różnych postaciach (od analogowej, rastrowej po wektorową). Tych sporządzanych w formie elektronicznej przybywa coraz więcej. Nie ma przeszkód, aby w I etapie zacząć opisywać zasoby takie jakie są tj. analogowe, rastrowe, wektorowe itp.

Praca naukowo-badawcza przede wszystkim, w założeniu, ma zidentyfikować problemy związane z udostępnianiem treści planistycznych, dotyczących (aktualnego i przyszłego) *„przeznaczenia terenu”,* zgodnie z obowiązującymi standardami.

Najistotniejszym dokumentem zawierającym informację o przewidywanym *„przeznaczeniu terenu”* jest miejscowy plan zagospodarowania przestrzennego gminy (MPZP), który jest jedynym aktem prawa miejscowego w tym zakresie (sporządzane niestety fakultatywnie i fragmentarycznie tj. nie na całym obszarze gminy). Nie można w związku z tym tylko tego dokumentu rozpatrywać jako źródła informacji. Są inne dokumenty, typu „decyzje” np. o ustaleniu lokalizacji celu publicznego, o warunkach zabudowy (funkcjonujące z kolei poza systemem planowania). Ponadto fakt nie objęcia planowaniem tj. aktami prawa miejscowego wszystkich terenów zurbanizowanych, wpływa negatywnie na kształtowanie zagospodarowania przestrzeni - potwierdzają w dyskursie eksperci.

Ze względu na objętość i specyfikę pracy doktorskiej, przedmiot badań zawęża się między innymi do: przybliżenia zagadnień terminologicznych, analizy źródeł, w tym przepisów, norm, standardów, nowych technologii oraz rozpoznania metod podejścia do standaryzacji zapisu MPZP na przykładzie wybranych pięciu miast w Polsce (tj. I-go badania ankietowego); ponadto do identyfikacji ww. zasobów, z których wynika informacja o „przeznaczeniu terenu” (tj. II-go, aktualnie, przeprowadzanego badania ankietowego, skierowanego do ekspertów). W kontekście pytań z ankiety przeprowadzano również wywiady z urbanistami, geodetami, geologami, specjalistami GIS.

W niezbędnym zakresie zasygnalizowano kwestie: braku w praktyce hierarchicznych związków MPZP z pozostałymi opracowaniami planistycznymi, tj. na poziomie gminy, województwa, kraju oraz osadzenia planowania przestrzennego w *głównych obszarach programowania strategicznego*.

Zagadnienie: *„zintegrowane zarządzanie przestrzenią miejską”*, inaczej *„planowanie rozwoju miast”*, zawężone zostało do przybliżenia osnowy teoretycznej i dotychczasowych badań. Podtrzymywanie rozwoju miast nie jest w pełni możliwe bez udostępniania wszystkim zainteresowanym podmiotom rzetelnej, dobrej jakości informacji o zachodzących zmianach w zagospodarowaniu przestrzennym.

[1] Wstęp opracowano na podstawie normy: Informacja Geograficzna Metadane PN - EN ISO 19115

Edyta Łukowska-Chojnacka
Wydział Chemiczny
Laureatka konkursu o stypendium naukowe
dla młodych doktorów, CAS/17/POKL

Chemoenzymatyczna synteza alkoholi z ugrupowaniem tetrazolowym

W ostatnich latach obserwuje się wzrost zapotrzebowania przemysłu farmaceutycznego na związki o określonej konfiguracji przestrzennej. Spośród wielu metod otrzymywania optycznie czynnych związków na szczególną uwagę zasługuje biokataliza. Stosowanie enzymów jako katalizatorów pozwala na prowadzenie reakcji w łagodnych warunkach oraz umożliwia uproszczenie wielu syntez poprzez zmniejszenie ilości ich etapów. Ponadto reakcje enzymatyczne spełniają wymagania tzw. „zielonej chemii" - enzymy są nieszkodliwe dla żywych organizmów, całkowicie biodegradowalne oraz charakteryzują się wysoką enancjoselektywnością.

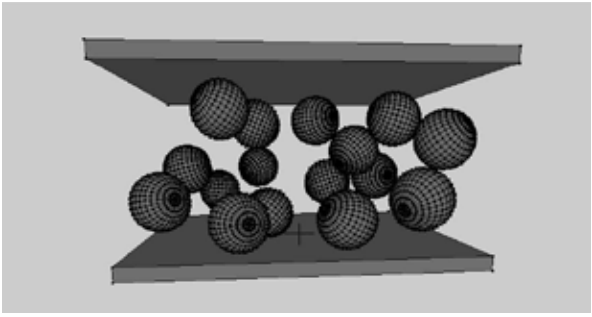
Wykorzystując katalizę enzymatyczną opracowano metodę otrzymywania optycznie czynnych alkoholi z ugrupowaniem tetrazolowym. Skupienie uwagi na pochodnych terazolowych związane jest z możliwościami aplikacyjnymi tych związków. Aktualnie znanych jest wiele pochodnych tetrazolowych, które wykazują działanie przeciwzapalne, przeciwbakteryjne, przeciwwirusowe, analeptyczne, antyalergiczne, antylipemiczne oraz antyhipertensyjne.

Badania obejmowały dwa etapy: chemiczny oraz mikrobiologiczny. Pierwszy to synteza odpowiednich substratów - racemicznych alkoholi podstawionych pierścieniem tetrazolowym. Drugi natomiast to kinetyczny rozdział mieszanin racemicznych wymienionych alkoholi w katalizowanej lipazami reakcji transestryfikacji. Testowano kilka komercyjnie dostępnych lipaz: Amano AK, Amano PS oraz Novozym SP 435. Spośród wymienionych enzymów najlepsze właściwości katalityczne, czyli wysoką aktywność oraz enancjoselektywność, wykazywała lipaza Amano AK.

Krzysztof Zegadło
Wydział Fizyki
Laureat konkursu o naukowe stypendium wyjazdowe
dla doktorantów, CAS/18/POKL
oraz
M.Karpierz [1], I.Cieślik [2], A.Majchrowski [2], J.Żmija [2], R.Węgłowski [2],
S.Kłosowicz [2], H.El Ouazzani [3], B.Sahraoui [3], J.Myśliwiec [4]
[1] Politechnika Warszawska, [2] Wojskowa Akademia Techniczna
[3] University of Angers, Francja, [4] Politechnika Wrocławska

Nieliniowe właściwości struktur PDLC

Polymer-dispersed liquid crystals (PDLC) to struktury, w których małe kropelki ciekłego kryształu (zwykle od dziesiątek nanometrów do kilkunastu mikrometrów) są rozłożone w matrycy polimerowej, która jest w fazie stałej[1]. Są one szczególnie interesujące, ponieważ ich właściwości zależą od oddziaływania na powierzchni pomiędzy kropelkami ciekłego kryształu a wnęką matrycy polimeru. Orientacja molekuł ciekłokrystalicznych jest zupełnie przypadkowa. Mogą one zostać uporządkowane poprzez zastosowanie zewnętrznego pola elektrycznego, co pozwala na uzyskanie stanu przezroczystości próbki. Dodatkowo w strukturę PDLC zostały włączone nieliniowe nanokryształki LCBO. Reorientacja molekuł ciekłego kryształu spowoduje zmianę nieliniowych właściwości struktury, ponieważ kryształki LCBO o symetrii niesferycznej, również ustawią się w jednym kierunku. Nieliniowe własności struktur PDLC wraz z kryształkami LCBO będą więc zależały od koncentracji tychże kryształków, ale również od przyłożonego zewnętrznego pola elektrycznego. Ten ostatni efekt może być stosowany w wyświetlaczach ciekłokrystalicznych.



Rysunek 1 Struktura PDLC z przypadkowo zorientowanymi molekułami ciekłego kryształu

Literatura

[1] R. Miedziński, J. Ebothe, I. Fuks-Janczarek, I.V. Kityk, A. Majchrowski, R. Węgłowski, S.J. Kłosowicz, J. Mater. Sci. Mater. Electron. 21, 659 (2010).

[2] R. Węgłowski, S.J. Kłosowicz, A. Majchrowski, K. Ozga, I.V. Kityk, S. Calus, M. Chmiel, Opt. Lasers Eng. 48, 856 (2010).

[3] P.P. Markowicz, V.K.S. Hsiao, H. Tiryaki, A.N. Cartwright, P.N. Prasad, K. Dolgaleva, N.N Lepeshkin, R.W. Boyd, Appl. Phys. Lett. 87, 051102 (2005).

[4] H.J. Yuan, L. Li, P. Palffy-Muhoray, Proc. SPIE 1455, 73.

[5] J. Nizioł, R. Węgłowski, S.J. Kłosowicz, A. Majchrowski, P. Rakus, A. Wojciechowski, I.V. Kityk, S. Tkaczyk, E. Gondek, J. Mater. Sci. Mater. Electron. 21, 1020 (2010).

Krzysztof Pokorski
Wydział Mechatroniki
Laureat konkursu o stypendium naukowe
dla doktorantów, CAS/16/POKL
oraz
Krzysztof Patorski
Instytut Mikromechaniki i Fotoniki, Wydział Mechatroniki PW

Analiza modulacyjna obrazów prążkowych z zastosowaniem transformacji falkowej

Od około trzydziestu lat ciągła transformacja falkowa jest skutecznie wykorzystywanym narzędziem do przetwarzania sygnałów jednowymiarowych. Wynika to, między innymi, z jej znakomitych właściwości przydatnych w analizie sygnałów niestacjonarnych i odporności na szum. Wymienione zalety jednowymiarowej transformaty falkowej posiada również dwuwymiarowy odpowiednik. Stąd rosnące w ostatnich latach zainteresowanie dwuwymiarową ciągłą transformacją falkową (2D CWT) jako metodą analizy obrazów prążkowych. Dotychczasowe aplikacje ograniczały się do ekstrakcji fazy interferogramów i profilogramów. Jako pierwszy zespół zaproponowaliśmy analizę modulacji obrazów prążkowych za pomocą dwuwymiarowej ciągłej transformacji falkowej, która z kolei umożliwiła opracowanie nowych metod normalizacji prążków i wyznaczania położenia punktów osobliwych bez uciekania się do obliczeń fazowych.

Przedstawiamy matematyczne podstawy ciągłej transformacji falkowej oraz szczegóły analizy modulacyjnej obrazów prążkowych, w tym sposoby wyznaczania grzbietu 2D CWT oraz wybór odpowiedniej falki i jej parametrów. Prezentujemy szereg symulacji pokazujących efektywność zaproponowanych rozwiązań, w tym odporność na szum.W celu ich weryfikacji pokazujemy przykłady zastosowań zaproponowanej metody do rzeczywistych obrazów doświadczalnych, w tym:

1. wizualizację rezonansowych modów drgań mikroelementów za pomocą demodulacji CWT interferogramów rejestrowanych z uśrednianiem w czasie;

2. analizę modulacji obrazów mory addytywnej do wyznaczania map przemieszczeń badanego obiektu;

3. normalizację obrazów interferencyjnych ze znacznymi różnicami poziomów modulacji i tła jako przetwarzanie wstępne do ich analizy innymi metodami;

4. przetwarzanie interferogramów pól optycznych z nieciągłościami fazowymi,

zarejestrowanych w różnych układach doświadczalnych w celu wyznaczenia położenia wirów optycznych.

Wszystkie przedstawione zastosowania opierają się na analizie pojedynczego obrazu prążkowego, bez konieczności wprowadzania ustalonych przesunięć fazy zarówno w czasie jak i przestrzeni obrazu. Wyniki przedstawionych analiz modulacyjnych są porównywane z wynikami najdokładniejszej z dotychczas stosowanych metod - metody czasowej dyskretnej zmiany fazy. Korzystanie z pojedynczego obrazu prążkowego w przypadku przetwarzania CWT znacznie zmniejsza wymagania dotyczące układu pomiarowego.

Adam Krysztopa
Wydział Fizyki
Laureat konkursu o stypendium naukowe
dla doktorantów, CAS/16/POKL

Defekty samoistne w półprzewodnikach fotowoltaicznych z rodziny chalkopirytu

Energetyka odnawialna jest prężnie rozwijającą się gałęzią nauki i inżynierii, a znaczącą jej część stanowi fotowoltaika – dziedzina zajmująca się konwersją energii promieniowania słonecznego na energię elektryczną. Przez wiele lat w tym obszarze nieprzerwanie dominuje technologia fotowoltaiczna oparta na krzemie, jednakże własności fizyczne tego materiału wymagają produkcji ogniw słonecznych o znacznej grubości, czego rezultatem są ciężkie i kosztowne panele słoneczne. Alternatywą dla technologii krzemowej są tzw. ogniwa II generacji – cienkowarstwowe ogniwa słoneczne. Wśród materiałów wykorzystywanych jako warstwa absorbera przy produkcji ogniw cienkowarstwowych zalicza się m.in. krzem amorficzny, CdTe ale przede wszystkim materiały z rodziny chalkopirytu $Cu(In,Ga)Se_2$ (CIGSe) – rekord wydajności dla ogniw opartych na CIGSe wynosi 20,3%, co jednak nadal jest wynikiem sporo poniżej przewidywań teoretycznych.

Materiał CIGSe charakteryzuje się specyficznymi własnościami, sprawiającymi, że jest idealnym kandydatem do produkcji cienkowarstwowych ogniw słonecznych: posiada tzw. prostą przerwę wzbronioną, co skutkuje o około 3 rzędy wielkości większym współczynnikiem absorpcji niż w przypadku krzemu, niewymagane jest domieszkowanie w celu wprowadzenia materiału w konkretny typ przewodnictwa (elektronowy lub dziurowy), nie wymaga skomplikowanych i kosztownych technologii wytwarzania jak w przypadku monokrystalicznego krzemu, co znacząco obniża koszty produkcji. Materiał ten niestety posiada także wady takie jak znaczna ilość samoistnych poziomów defektowych skutkujących obniżeniem wydajności oraz metastabilnymi zmianami parametrów fotowoltaicznych ogniw słonecznych opartych na CIGSe.

Pomimo wielu lat badań fizyka defektów w $Cu(In,Ga)Se_2$ nie jest w pełni poznana, a ogólnie przyjęte modele fizyczne nie wyjaśniają dostatecznie wszystkich zjawisk zachodzących w heterostrukturach ogniw słonecznych: ZnO/CdS/CIGSe. Badania spektroskopowe poziomów defektowych przypadku

ogniw słonecznych przeprowadzane są z wykorzystywaniem dobrze znanych metod pojemnościowych: spektroskopii admitancyjnej (AS) oraz spektroskopii niestacjonarnych przebiegów pojemności (DLTS). Obie te metody świetnie się sprawdzają w przypadku złącz Schottky'ego o dobrej jakości, natomiast interpretacja wyników dla tak skomplikowanych heterostruktur jak ogniwa słoneczne jest znacznie utrudniona i niejednoznaczna – sygnał odpowiedzi może pochodzić nie tylko od głębokich defektów. W celu odizolowania odpowiedzi pochodzącej wyłącznie od poziomów defektowych w objętości półprzewodnika CIGSe zastosowano metody fotoprądowe: modulowane fotoprzewodnictwo (MPC) i spektroskopię niestacjonarnych przebiegów prądu (PITS). Pełną kontrolę składu i stechiometrii uzyskano poprzez zastosowanie epitaksjalnie wzrastanych warstw półprzewodnika $CuInSe_2$ oraz $CuGaSe_2$. Następnie przeprowadzono badania nad materiałem polikrystalicznym – takim, jaki jest wykorzystywany w produkcji ogniw słonecznych, by w następnej kolejności dokonać porównania rezultatów otrzymanych na podstawie metod fotoprądowych i pojemnościowych. Pokazano, że morfologia materiału nie ma wpływu na widmo defektowe, a zgodność wyników otrzymanych różnymi metodami jest uderzająca. Dzięki specyfice metod fotoprądowych udało się zaobserwować poziomy defektowe trudne do zaobserwowania przy użyciu technik pojemnościowych. Wyniki badań pokazały, iż możliwa jest separacja sygnatur pochodzących od defektów samoistnych w objętości półprzewodnika, od pozostałych, związanych np. z obecnością defektów lub nieplanowanych barier na międzypowierzchniach heterostruktury ZnO/CdS/CIGSe. Ułatwia to w znacznym stopniu interpretację rezultatów badań metodami pojemnościowymi oraz zrozumienie mechanizmu metastabilnych zmian w parametrach fotowoltaicznych ogniw słonecznych opartych o $Cu(In,Ga)Se_2$, co w przyszłości ma szanse przyczynić się do zwiększenia wydajności cienkowarstwowych ogniw słonecznych.

Wojciech Mazurczyk
Wydział Elektroniki i Technik Informacyjnych
Laureat konkursu o stypendium naukowe
dla młodych doktorów, CAS/17/POKL

Nowe sposoby ukrywania informacji w sieciach telekomunikacynych

Metody ukrywania informacji w sieciach telekomunikacyjnych (steganografia) to zbiór technik, których celem jest umożliwienie tajnego przekazywania informacji w taki sposób, aby jedynie wysyłający i odbiorca wiedział o ich istnieniu. Aby ukryć fakt ukrytej (steganograficznej) wymiany danych niezbędne jest wykorzystanie odpowiedniego nośnika tajnych informacji, w którym umieszczane są sekretne dane. Dla nieświadomego obserwatora zmieniony nośnik informacji wygląda na niezmodyfikowany i nie wzbudza podejrzeń.

Metody steganograficzne ewoluują wraz z rozwojem nowych form komunikacji międzyludzkiej, a co za tym idzie ewoluuje też rodzaj nośnika tajnych danych. Współczesne rozwiązania i prace badawcze w dziedzinie ukrywania informacji, koncentrują się głównie na ukrywaniu informacji w treściach multimedialnych (cyfrowych obrazach, plikach dźwiękowych, filmach video, przesyłanym tekście) oraz w sieciowych protokołach komunikacyjnych. W pierwszym przypadku istotą rozwiązań steganograficznych jest wbudowanie ukrytych danych w nośnik w taki sposób, żeby były one niewykrywalne przez zmysły człowieka (wzrok, słuch). W przypadku steganografii wykorzystującej jako nośnik protokoły sieciowe modyfikacji podlegają określone właściwości protokołów, takie jak zawartość pól opcjonalnych, sekwencje wysyłanych wiadomości itp. Celem jest zatem przesłanie tajnych informacji w taki sposób, by inni użytkownicy sieciowi nie byli świadomi faktu komunikacji pomiędzy użytkownikami wykorzystującymi metody steganograficzne. Dlatego też w odniesieniu do wszystkich metod ukrywania informacji wykorzystujących jako nośnik ukrytych informacji ruch przesyłany w sieciach telekomunikacyjnych używa się określenia steganografii sieciowej (*network steganography*). W rezultacie zastosowanie steganografii sieciowej pozwala na prowadzenie ukrytej komunikacji w sieciach telekomunikacyjnych.

Celem referatu jest przedstawienie najnowszych sposobów ukrywania informacji w sieciach telekomunikacyjnych w ramach projektów badawczych

prowadzonych przez stypendystę. Po wprowadzeniu w dziedzinę steganografii sieciowej zaprezentowane zostaną m.in. koncepcja steganografii wielopoziomowej (*Multi-Level Steganography*) oraz metoda PadSteg (*Padding Steganography*) należąca do grupy rozwiązań steganografii międzyprotokołowej.

notatki

notatki