

# Autoreferat

*informujący o osiągnięciach w działalności naukowo-badawczej*

dr Andrzej Daniluk

*Zakład Informatyki Stosowanej, Instytut Informatyki, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej*

Lublin 2016

<b>Życiorys naukowy .....</b>	<b>3</b>
<b>I. Ogólna charakterystyka zainteresowań naukowych .....</b>	<b>4</b>
<b>II. Dziedzina problemu .....</b>	<b>8</b>
<i>II.1. Modele matematyczne dziedziny problemu.....</i>	<i>12</i>
<b>III. Projektowanie oprogramowania dla celów naukowych .....</b>	<b>16</b>
<i>III.1. Cykl wytwórczy oprogramowania dla celów naukowych.....</i>	<i>18</i>
<i>III.2. Metamodel.....</i>	<i>20</i>
<i>III.3. Model eksperymentu RHEED .....</i>	<i>22</i>
<i>III.4. Powtórne użycie artefaktów systemu .....</i>	<i>26</i>
<i>III.5. Wielowątkowe transakcje .....</i>	<i>27</i>
<i>III.6. Możliwości ogólniejszych zastosowań.....</i>	<i>29</i>
<b>IV. Podsumowanie głównych osiągnięć.....</b>	<b>31</b>
<b>V. Spis publikacji.....</b>	<b>33</b>

# Życiorys naukowy

Andrzej Daniluk

## Wykształcenie

**Stopień doktora nauk fizycznych w zakresie fizyki, specjalność: fizyka komputerowa**

2000

Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie,  
Wydział Matematyki i Fizyki, Instytut Fizyki

### Rozprawa doktorska

*Modele wzrostu warstw epitaksjalnych analizowane przy pomocy dynamicznej teorii RHEED,*

promotor: prof. dr hab. Paweł Mikołajczak

recenzenci: dr hab. Ryszard Taranko, Instytut Fizyki UMCS

prof. dr hab. Marian A. Herman, Instytut Fizyki PAN Warszawa

### Tytuł

#### magistra

1991

Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie,  
Wydział Matematyki, Fizyki i Chemii, Instytut Fizyki

### Praca

#### magisterska

*Modelowanie komputerowe wzrostu cienkich warstw,*  
promotor prof. dr hab. Mieczysław Jałochowski

**Zatrudnienie** Zakład Informatyki Stosowanej, Instytut Informatyki UMCS,

ul. Akademicka 9, 20-033 Lublin

e-mail: andrzej.daniluk@poczta.umcs.lublin.pl

### Przebieg

#### pracy

#### zawodowej

2013 - : starszy wykładowca w Zakładzie Informatyki Stosowanej,  
Instytut Informatyki UMCS

2005-2013: adiunkt w Zakładzie Informatyki Stosowanej,  
Instytut Informatyki UMCS

2004-2005: adiunkt w Zakładzie Informatyki Stosowanej, Instytut Fizyki UMCS

2002-2004: wykładowca w Państwowej Wyższej Szkole Zawodowej w Chełmie

2001-2004: adiunkt w Zakładzie Fizyki Doświadczalnej, Instytut Fizyki UMCS

1995-2000: asystent w Zakładzie Fizyki Doświadczalnej, Instytut Fizyki UMCS

1993-1995: asystent w Zakładzie Biofizyki, Instytut Fizyki UMCS

1991-1993: nauczyciel fizyki i informatyki, VI LO w Lublinie

# I. Ogólna charakterystyka zainteresowań naukowych

Pierwsze moje prace o charakterze naukowym mieściły się w nurcie współczesnych badań związanych z zastosowaniem metod komputerowego modelowania w wybranych obszarach inżynierii materiałowej. W okresie studiów w Instytucie Fizyki na Uniwersytecie Marii Curie-Skłodowskiej, w ramach przygotowywanej pracy magisterskiej opracowałem i zaimplementowałem oryginalny algorytm umożliwiający numeryczne modelowanie w sposób jakościowy doświadczalnych danych dotyczących wzrostu ultracienkich warstw homoepitaksjalnych krystalizowanych metodą epitaksji z wiązek molekularnych.

W 1993 roku zostałem zatrudniony w Instytucie Fizyki UMCS na stanowisku asystenta. W tym okresie uczestniczyłem w eksperymentach badawczych z zakresu chemii fizycznej i biofizyki oraz zajmowałem się tworzeniem oprogramowania spektroskopu do badań widm Ramana. Byłem również autorem programu sterującego aparaturą do otrzymywania ultracienkich monowarstw adsorpcyjnych na powierzchni cieczy - monowarstw Langmuira-Blodgett. Moja działalność naukowa zaowocowała współautorstwem dwóch publikacji.

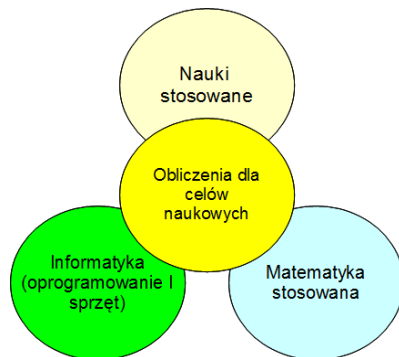
W tym czasie rozpocząłem też współpracę ze środowiskiem lubelskich psychologów. Opracowałem i wdrożyłem program komputerowy służący do statystycznego opracowywania wyników badań prowadzonych przez pracowników Wydziału Psychologii i Pedagogiki UMCS.

Od roku 1996 kontynuowałem pracę naukową w zakresie inżynierii materiałowej ultracienkich warstw epitaksjalnych.

Po uzyskaniu stopnia doktora kontynuowałem prace w Zakładzie Fizyki Doświadczalnej IF UMCS nad wykorzystaniem różnych matematycznych modeli oraz odpowiednich algorytmów numerycznych pozwalających na modelowanie typów międzypowierzchni złożonych krystalicznych heterostruktur oraz zależności temperaturowych RHEED.

W 2005 roku zostałem zatrudniony w Zakładzie Informatyki Stosowanej w nowoutworzonym Instytucie Informatyki na Wydziale Matematyki, Fizyki i Informatyki UMCS. W tym okresie skoncentrowałem się głównie na konstruowaniu i wdrażaniu wydajnych algorytmów i programów komputerowych, za pomocą których możliwym jest w czasie rzeczywistym modelowanie zjawiska dyfrakcji wysokoenergetycznych elektronów RHEED (ang. *Reflection High Energy Electron Diffraction*).

Obliczenia dla celów naukowych są prężnie rozwijającą się interdyscyplinarną dziedziną wykorzystującą zaawansowane techniki komputerowe, obliczeniowe oraz analizy danych w celu zrozumienia i rozwiązania skomplikowanych problemów.

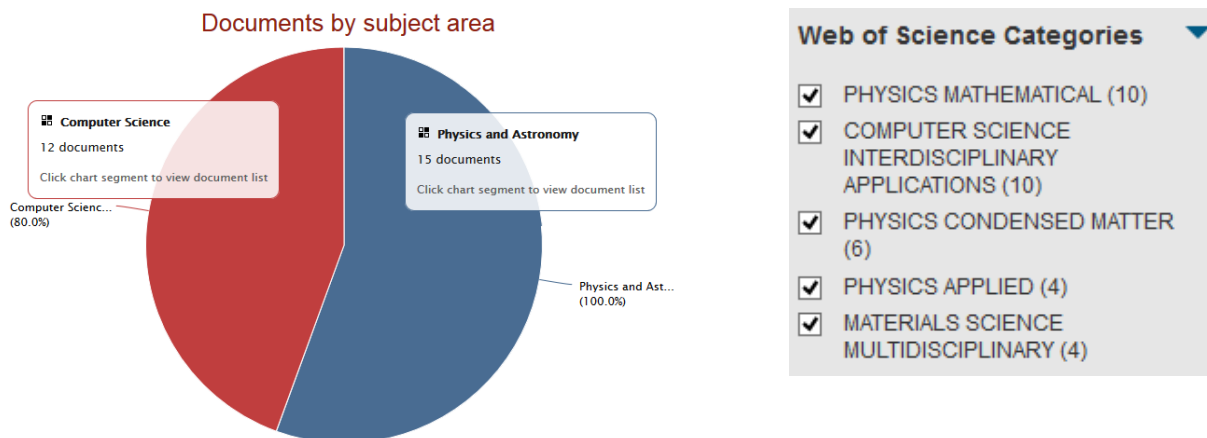


Ogólnie obszar moich zainteresowań można scharakteryzować następującą zależnością:

Obliczenia dla celów naukowych = dziedzina problemu (fizyka) +  
informatyka + matematyka stosowana

Nie jest możliwe rzetelne ocenienie deklarowanego dorobku w sposób fragmentaryczny. Tematyka oraz narzędzia badawcze zaprezentowane w pracach [1-10] (oraz w innych po doktoracie) mieszczą się w interdyscyplinarnym obszarze zainteresowań współczesnych nauk ścisłych i technicznych charakterystycznych odpowiednio dla fizyki komputerowej i technicznej oraz informatyki. Większość prac to publikacje w równym stopniu w dziedzinie fizyki jak i informatyki. Zdecydowana większość (80%) moich prac po doktoracie została opublikowana w *Computer Physics Communications (CPC)* (*An International Journal and Program Library for Computational Physics and Physical Chemistry*) jako prace jednoautorskie. CPC jest naukowym czasopismem o dużej renomie międzynarodowej reprezentującym repozytorium programów komputerowych stosowanych w fizyce oraz chemii fizycznej i jest zogniskowane raczej na algorytmach i metodach obliczeniowych niż rezultatach fizycznych. Zgodnie z opisem w bazie Web of Knowledge, publikowane tam artykuły w równym stopniu są publikacjami w dziedzinie fizyki jak i informatyki (według SCI; CPC to 100% Computer Science and 100% Physics). Tzw. 5-letni Impact Factor czasopisma jest wysoki i aktualnie wynosi 3.508. Wszystkie skonstruowane przeze mnie projekty oraz materiały dodatkowe do prac [1-3, 7-10] publikowane są w: *International CPC Program Library, School of Electronics, Electrical Engineering and Computer Science, Queen's University of Belfast* <http://cpc.cs.qub.ac.uk/> w katalogach ADUY, ADVL oraz AETW.

Większość publikacji mojego autorstwa udostępnianych w czasopismach z bazy Journal Citation Reports (JCR) ma charakter interdyscyplinarny. Poniżej zamieszczam klasyfikację dorobku naukowego po doktoracie dokonaną w oparciu o dane odpowiednio z bazy Scopus oraz Web of Science:



Praca projektantów i programistów jako autorów nie jest w pełni doceniana, zaś samo oprogramowanie nie jest obecnie systematycznie traktowane jako pełnoprawny element dorobku naukowego w społeczności akademickiej. Moim zdaniem oprogramowanie należy zacząć postrzegać jako integralną część ekosystemu komunikacji naukowej w XXI wieku. Również problem ten staje się coraz bardziej zauważalny w literaturze światowej, [F. Seinstra, D. Wallom, K. Keahey, *SoftwareX* 1–2 (2015), Editorial]: *"Yet, despite the impact scientific software instruments have on the daily practice of many scientists, and despite the great many new discoveries that can be attributed directly to the existence of these instruments, the design and implementation of software instruments is often not held in high regard in the traditional academic environment. In science, publications and their citations are by far the most essential prerequisites for pursuing a successful academic career. Since traditionally the design and development of software does not warrant a publication it is often denied the acknowledgement that citations provide. In this way, the current academic setting is hindering, even blocking, the career paths of the scientific software designers and implementers that a growing portion of science has become so much dependent on."*

Głównym celem naukowym prezentowanym w przedłożonych pracach było zbudowanie abstrakcyjnego modelu będącego syntetycznym ujęciem najbardziej istotnych elementów eksperymentu RHEED służącego do obliczeń krzywych dyfrakcyjnych oraz wykazanie jego stosowności do jakościowej oraz ilościowej analizy danych doświadczalnych. Podjęta problematyka naukowa związana ze zjawiskiem dyfrakcji wysokoenergetycznych elektronów wykorzystywanym do monitorowania stanu powierzchni ultracienkiej warstwy epitaksjalnej jest istotną domeną fizyki technicznej mającą trudny do przecenienia wpływ na rozwój technologiczny w wielu dziedzinach, także w informatyce. Aplikacyjny charakter podejmowanej problematyki oraz oryginalność wykonanych prac konstrukcyjnych (programów komputerowych) w kontekście nowoczesnych metod i narzędzi fizyki technicznej i komputerowej oraz informatyki stosowanej stanowią główną wartość przedłożonego do oceny dorobku naukowego.

Ważnym zadaniem dla uczelni XXI wieku jest znoszenie barier utrudniających przenikanie się różnych dyscyplin oraz prowadzenie badań interdyscyplinarnych. Przedłożony do oceny dorobek naukowy oraz popularyzatorski jest modelowym przykładem prowadzenia badań interdyscyplinarnych z zakresu fizyki technicznej i komputerowej oraz informatyki stosowanej.

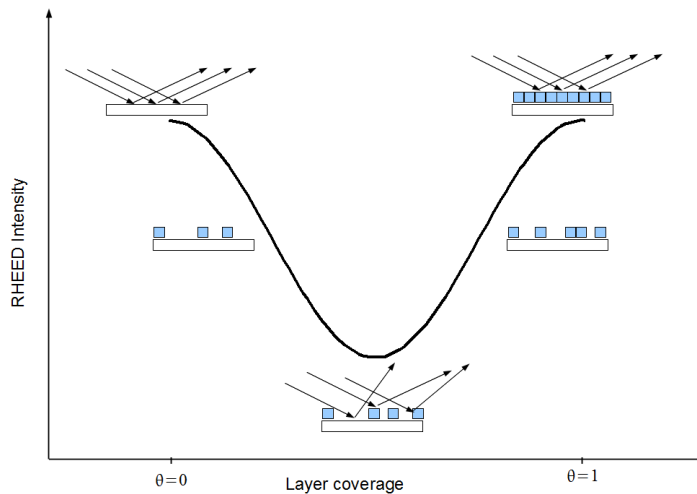
Jako osiągnięcie naukowe wynikające z art. 16 pkt 1 ust. 2.1 i 2.2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. nr 65, poz. 595 ze zm.) deklaruję powiązany tematycznie cykl siedmiu artykułów oraz trzech prac wdrożeniowych opublikowanych w czasopiśmie z bazy Journal Citation Reports pod wspólnym tytułem:

### *Modelowanie wirtualnego eksperymentu naukowego*

Lp.	Dane bibliograficzne	Uwagi	5-year Impact Factor
1	A. Daniluk, <i>Dynamical calculations for RHEED intensity oscillations</i> , Computer Physics Communications 166 (2005) 123-140.	Praca zawiera listing programu sugerowany przez recenzentów jako forma dokumentowania podstawowego algorytmu - dołączony został decyzją edytora.	3. 508
2.	A. Daniluk, <i>An extension of the computer program for dynamical calculations of RHEED intensity oscillations. Heterostructures</i> , Computer Physics Communications 176 (2007) 70-73.		3.508
3	A. Daniluk, <i>RHEED intensities from two-dimensional heteroepitaxial nanoscale systems</i> , Computer Physics Communications 185 (2014) 3001-3009.		3. 508
4	P. Mazurek, A. Daniluk, K. Paprocki, <i>Substrate temperature control from RHEED intensity measurements</i> , Vacuum 72 (2004) 363-367.		1. 647
5	P. Mazurek, A. Daniluk, K. Paprocki, <i>Analysis of RHEED intensities during formations of the CaF<sub>2</sub>/Si(111) and MgO/YSi<sub>2</sub>-√Si(100) interface</i> , Vacuum 57 (2000) 229-236.		1.647
6	P. Mazurek, A. Daniluk, K. Paprocki, <i>Forming the high quality CoSi<sub>2</sub> by solid phase epitaxy</i> , Optica Applicata 32 (2002) 389-395.		0.496
7	A. Daniluk, <i>Visual modeling for scientific software architecture design. A practical approach</i> , Computer Physics Communications 183 (2012) 213-230.	Realnie objętość pracy jest większa. Decyzją edytora część diagramów (ze względu na ich szczegółowość) dostępna jest wyłącznie w formie elektronicznej w postaci materiałów dodatkowych.	3. 508
Zgodnie z art. 16 pkt 1 ust. 2.2 ustawy (Dz. U. nr 65, poz. 595 ze zm.) deklaruję autorstwo zrealizowanego oryginalnego osiągnięcia projektowego i konstrukcyjnego w postaci środowisk obliczeniowych <i>GrowthXX</i> . Środowiska obliczeniowe <i>Growth09</i> oraz <i>GrowthCP</i> implementowane są poprzez 3 prace wdrożeniowe.			
8	A. Daniluk, <i>Model-Driven Development for scientific computing. Computations of RHEED intensities for a disordered surface. Part II</i> , Computer Physics Communications 181 (2010) 709-710.	Diagramy specyfikacji modelu dostępne są w formie elektronicznej. Praca reprezentuje implementację modelu udokumentowanego w [7] (rys. 10, poziom M0 w dalszej części autoreferatu)	3. 508
9	A. Daniluk, <i>Model-Driven Development for scientific computing. Computations of RHEED intensities for a disordered surface. Part I</i> , Computer Physics Communications 181 (2010) 707-708.	Dostępność diagramów jw. Reprezentuje program wykorzystywany w [8]. <i>CPC Program Library</i> umożliwia publikowanie odrębnych artefaktów wykonywalnych w jednej edycji.	3. 508
10	A. Daniluk, <i>Cooperative and competitive concurrency in scientific computing. A full open-source upgrade of the program for dynamical calculations of RHEED intensity oscillations</i> , Computer Physics Communications 182 (2011) 1389-1390.	Praca zawiera 36-stronnicowy oficjalny dokument projektowy dostępny w formie elektronicznej z plikami dystrybucyjnymi w bazie <i>CPC Program Library</i> .	3. 508

## II. Dziedzina problemu

Dziedziną problemu jest dyfrakcja odbiciowa wysokoenergetycznych elektronów RHEED w ujęciu dynamicznym. Technika RHEED stosowana do monitoringu procesu wzrostu ultracienkich warstw epitaksjalnych jest bardzo czuła na wzrost i formę frontu wzrostu warstwy, a intensywność odbitych wiązek elektronowych jest w ogólności funkcją stopnia uporządkowania atomów na powierzchni oraz temperatury podłoża.



Rys.1. Jakościowy opis zmian intensywności oscylacji RHEED [3]

Te zmiany intensywności wynikają z wahań chropowatości powierzchni, a charakter tych zmian może odzwierciedlać sposób formowania oraz uporządkowanie atomów w kolejnych warstwach.

Zjawisko występowania oscylacji natężenia wiązki wysokoenergetycznych elektronów odbitych zwierniadlanie od przypowierzchniowej warstwy epitaksjalnej otrzymywanej metodą MBE zostało zaobserwowane przez Harrisa i współpracowników na początku lat 80. ubiegłego wieku [J.J. Harris, B.A. Joyce, P.J. Dobson, Surf. Sci. 108 (1981) L444]. Od tego czasu ze względu na duży aplikacyjny charakter stało się przedmiotem intensywnych badań. Cohen i wsp. [P.I. Cohen, G.S. Petrich, P.R. Pukite, G.J. Whaley, A.S. Arrot, Surf. Sci. 216 (1989) 222] zaproponowali jego opis wykorzystując kinematyczną teorię dyfrakcji elektronów. Inne podejścia opisywały ten proces jako zjawisko wielokrotnego rozpraszania dyfuzyjnego. Maksym i Beeby [P.A. Maksym, J.L. Beeby, Appl. Surf. Sci. 11 (1982) 663] zaproponowali model teoretyczny uwzględniający proces rozpraszania przez periodyczny potencjał dwuwymiarowych płaszczyzn krystalograficznych równoległych do powierzchni ale nieperiodyczny w kierunku prostopadłym do powierzchni rozpraszającej. Peng i Whelan [L.M. Peng, M.J. Whelan, Surf. Sci. Lett. 238 (1990) L446] zaproponowali inny opis, w którym wiązka wysokoenergetycznych elektronów jest rozpraszana przez potencjał periodyczny w kierunku prostopadłym do powierzchni.

W literaturze przedmiotu znanych jest wiele prac, w których podjęto próby wyjaśnienia głównych przyczyn występowania zjawiska oscylacji natężenia elektronów RHEED od wzrastającej warstwy



epitaksjalnej. Niemniej jednak do tej pory nie osiągnięto konsensusu odnośnie przekonującej interpretacji danych eksperymentalnych, w szczególności przyczyn występowania oscylacji oraz obserwowanej eksperymentalnie zmiany ich fazy w zależności od warunków dyfrakcji. Niektórzy autorzy główne źródło zmian intensywności oscylacji RHEED upatrują w procesie interferencji fal elektronowych od dwu sąsiednich płaszczyzn krystalograficznych formującej się warstwy [C.S. Lent, P.I. Cohen, Surf. Sci. 139 (1984) 121]. Inną możliwą przyczynę upatruje się w rozpraszaniu dyfuzyjnym na niedoskonałościach powierzchniowych [J.H. Neave, B.A. Joyce, P.J. Dobson, N. Norton, Appl. Phys. A31 (1983) 1]. Dodatkowym źródłem oscylacji mogą też być zdaniem Clarka i wsp. cykliczne zmiany chropowatości powierzchni związane z formowaniem się tarasów [S. Clarke, D.D. Vvedensky, Phys. Rev. B37 (1988) 6559]. Shin i Azis [B. Shin and M. J. Aziz, Phys. Rev. B76 (2007) 165408] zaproponowali model oparty na kinematycznej teorii dyfrakcji oraz rozpraszaniu dyfuzyjnym od formujących się na powierzchni tarasów. Niemniej jednak żaden z przedstawionych do tej pory opisów nie wyjaśnia obserwowanej eksperymentalnie zależności fazy oscylacji od ustalonych warunków dyfrakcji [J. Zhang, J.H. Neave, P.J. Dobson, B.A. Joyce, Appl. Phys. A 42 (1987) 317]. W jednym z najnowszych doniesień Fuhr i Müller [J.D. Fuhr, P. Müller, Phys. Rev. B84 (2011) 195429] na bazie przeprowadzonych symulacji zasugerowali, że oscylacje intensywności wysokoenergetycznych elektronów są wynikiem dyspersji kątowej padającej wiązki elektronowej oraz periodycznych oscylacji rozmiarów wysp formujących się na powierzchni.

Trzy prace mojego autorstwa przedstawiają podstawy fizyczne oraz stanowią opis dziedziny problemu:

[1] A. Daniluk, *Dynamical calculations for RHEED intensity oscillations*, Computer Physics Communications 166 (2005) 123.

[2] A. Daniluk, *An extension of the computer program for dynamical calculations of RHEED intensity oscillations. Heterostructures*, Computer Physics Communications 176 (2007) 70.

[3] A. Daniluk, *RHEED intensities from two-dimensional heteroepitaxial nanoscale systems*, Computer Physics Communications 185 (2014) 3001.

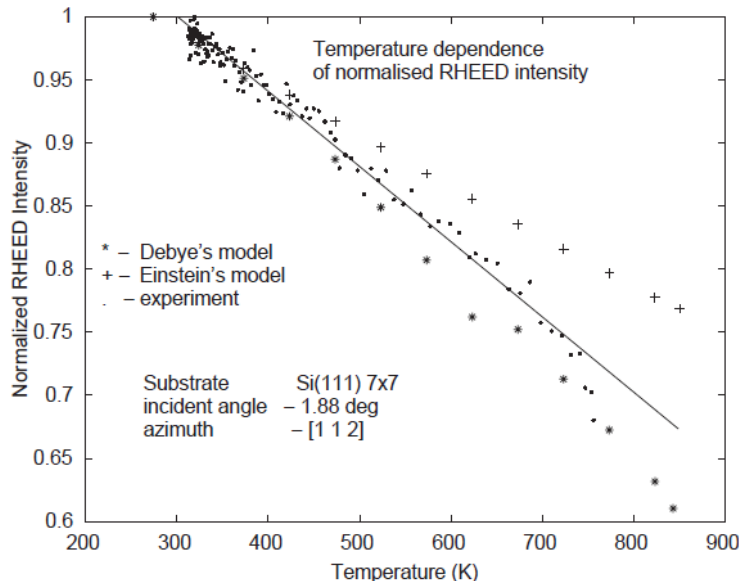
Publikacja [1] przedstawia ogólny, rozważany przeze mnie model dziedziny problemu oraz szczegółowo omawia wykorzystywany aparat obliczeniowy. Algorytm zaimplementowany w [1] umożliwia iteracyjne znalezienie tak rozwiązań równania Schrödingera (wartości energii i funkcje falowe) jak i potencjału periodycznego, który jest potrzebny jako wielkość wejściowa do takiego obliczenia. Publikacja [2] implementuje rozszerzony model obliczeniowy dla struktur heterozłączowych typu struktura diamentu/struktura FCC. W szczególności w pracy tej zaimplementowano oryginalną metodę samouzgadniania potencjałów rozpraszających dla heterokrystalicznych struktur wielowarstwowych na przykładzie warstw ołowiu osadzanych na krzemowym podłożu. Niemniej jednak na tym etapie nie uwzględniono możliwości występowania rozpraszania dyfuzyjnego od formującej się cienkowarstwowej

powierzchni. Praca [3] zawiera opis dziedziny problemu (wraz z przykładową implementacją) z uwzględnieniem możliwych form rozpraszania dyfuzyjnego. Modele wprowadzone przeze mnie w [3] zostały zastosowane dla przypadku wzrostu warstw złota na krzemowym podłożu. Badanie mechanizmów formowania się ultracienkich warstw metalicznych Ag jest bardzo interesujące zarówno z perspektywy naukowej jak i technologicznej. W szczególności warstwy takie są bardzo często wykorzystywane jako modelowe przykłady dla zjawisk związanych z kwantowaniem rozmiarowym. Ponadto ultracienkie warstwy Ag mogą być doskonałym podłożem dla różnego typu struktur niskowymiarowych.

Temperatura podłoża jest parametrem o dużym znaczeniu dla przebiegu procesu zarodkowania i kontroli mechanizmu wzrostu warstwy epitaksjalnej. Dlatego też, bardzo istotnym elementem, który należy uwzględnić w trakcie wykonywania obliczeń zmian intensywności oscylacji RHEED jest poprawne przyjęcie modelu drgań cieci krystalicznej. W publikacji:

[4] P. Mazurek, A. Daniluk, K. Paprocki, *Substrate temperature control from RHEED intensity measurements*, Vacuum 72 (2004) 363.

będącej połączeniem eksperymentu i obliczeń pokazano, że model Debye'a powinien być konsekwentnie stosowany w trakcie wykonywania zaawansowanych obliczeń zmian natężenia wysokoenergetycznych elektronów odbitych od warstw przypowierzchniowych.



Rys.2. Teoretyczne i zmierzone zależności temperaturowe intensywności oscylacji RHEED dla sieci Si(111). Dane pomiarowe bardzo dobrze odpowiadają wynikom teoretycznym uwzględniającym średnie kwadratowe wychylenia atomów z położenia równowagi uzyskane w oparciu o model Debye'a [4]

W pracy tej wykazano ponadto, że możliwym jest wykorzystanie standardowych pomiarów krzywych dyfrakcyjnych (ang *rocking-curve*) jako techniki *in situ* do określenia temperatury monokrystalicznych podłoży, na których formowane są ultracienkie warstwy epitaksjalne.

Od czasu, kiedy technika epitaksji z wiązki molekularnej pozwala na budowę warstw (kryształów) o kontrolowanym składzie kolejnych monowarstw, wysiłek badawczy wielu laboratoriów skierowany został na poznanie dynamiki procesu formowania zarówno monowarstw jak i konkretnych struktur heterozłączowych, to znaczy struktur, w których występują monokrystaliczne międzypowierzchnie utworzone przez materiały o różnym składzie chemicznym (różnych własnościach fizyko-chemicznych). Podstawowym naukowym problemem w tego rodzaju badaniach jest określenie zarówno typu międzypowierzchni, jej jakości jak i mechanizmu wzrostu kolejnych warstw, tak jak zostało to przedstawione w pracach:

[5] P. Mazurek, A. Daniluk, K. Paprocki, *Analysis of RHEED intensities during formations of the  $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$  and  $\text{MgO}/\text{YSi}_{2-x}/\text{Si}(100)$  interface*, *Vacuum* 57 (2000) 229.

[6] P. Mazurek, A. Daniluk, K. Paprocki, *Forming the high quality  $\text{CoSi}_2$  by solid phase epitaxy*, *Optica Applicata* 32 (2002) 389.

W [5-6] zaprezentowano rezultaty badań eksperymentalnych nad zastosowaniem dyfrakcji elektronów RHEED w trakcie formowania wysokiej jakości struktur heterozłączowych  $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$ ,  $\text{MgO}/\text{YSi}_{2-x}/\text{Si}(100)$  oraz  $\text{CoSi}_2/\text{Si}(111)$ . W szczególności, na podstawie dynamicznych pomiarów RHEED od wzrastających warstw  $\text{CaF}_2$  określono optymalne zakresy temperatur oraz szybkości osadzania warstw fluorku wapnia na krzemowych podłożach. Eksperymentalnie potwierdzono, że w wysokich temperaturach fluorek wapnia dysocjuje formując na krzemowym podłożu międzypowierzchnię (interfejs) typu Si-Ca-F. Pomiary krzywych dyfrakcyjnych wykazały, że stosując odpowiednie warunki osadzania możliwym jest uzyskanie w pełni epitaksjalnego wzrostu warstw  $\text{CaF}_2$  do wysokości dwóch potrójnych monowarstw na dużej powierzchni. Struktury takie wydają się być już odpowiednie do uzyskania dobrej jakości złącz tunelujących typu M-I-S. W przypadku epitaksji tlenku magnezu  $\text{MgO}$  najlepsze rezultaty otrzymano osadzając tego typu warstwy na powierzchni Si(100) z cienką warstwą buforową (60-100 Å) krzemku itru. Wykazano, że zastosowanie tego rodzaju warstwy buforowej umożliwia uzyskanie dobrej jakości powierzchni  $\text{MgO}$  nawet 2-calowych rozmiarów - co otwiera drogę do zastosowań komercyjnych. Epitaksjalne krzemki tworząc złącza typu metal-półprzewodnik z powodzeniem mogą być wykorzystywane jako elementy wielu urządzeń mikroelektronicznych, w tym urządzeń wykorzystujących struktury typu S-M-S. W pracy [6] dokładnie opisano praktyczną procedurę otrzymywania wysokiej jakości cienkich warstw  $\text{CoSi}_2$  na krzemowym podłożu Si(111) techniką epitaksji z fazy stałej. Jakość otrzymanych struktur została potwierdzona poprzez pomiary dyfrakcyjne, które z kolei zostały porównane z wyliczeniami teoretycznymi bazującymi na dynamicznej teorii dyfrakcji wysokoenergetycznych elektronów.

Prace [4-6] stanowiły bazę testową dla konstruowanych przeze mnie algorytmów obliczeniowych (etap walidacji modeli, rys. 6-7 w dalszej części autoreferatu).

## II.1. Modele matematyczne dziedziny problemu

Podstawowy model matematyczny dziedziny problemu oraz stosowany przez mnie aparat obliczeniowy został opublikowany w pracy:

[1] A. Daniluk, *Dynamical calculations for RHEED intensity oscillations*, Computer Physics Communications 166 (2005) 123.

Podstawą obliczeń zmian natężenia elektronów wysokoenergetycznych RHEED odbitych zwierciadlanie od warstw przypowierzchniowych kryształu jest rozwiązanie równania Schrödingera:

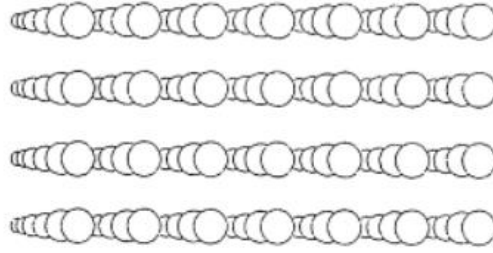
$$\left( \frac{d^2}{dz^2} + \frac{2m_0 E}{\hbar^2} \right) \psi(z) = \frac{2m_0}{\hbar^2} U(z) \psi(z), \quad (1)$$

gdzie  $\hbar$  jest stała Plancka,  $m_0$  jest masa spoczynkową elektronu,  $E$  energią kinetyczną elektronów, oraz  $U(z)$  jest jednowymiarowym potencjałem rozpraszającym proporcjonalnym do pokrycia monowarstwy,  $\psi(z)$  jest funkcją falową elektronu. Jednowymiarową postać potencjału uzyskuje się poprzez uśrednienie pełnego, 3-wymiarowego potencjału  $U(\vec{r})$  w płaszczyznach równoległych do powierzchni warstwy. Dlatego  $U(z)$  może być traktowany jako zerowy współczynnik transformaty Fouriera pełnego potencjału 3-wymiarowego:

$$U^n(z) = - \left( 1 + \frac{E}{m_0 c^2} \right) \times \theta_n (1 + \alpha i) \times \frac{8\pi}{S_0} \times \sum_{k=1}^4 \sqrt{\frac{\pi}{b_k}} a_k \times \left[ \exp \left( - \frac{4\pi^2 (z - z_n)^2}{b_k} \right) \right], \quad (2)$$

gdzie  $a_k$  i  $b_k$  reprezentują współczynniki rozpraszania elektronowego,  $\theta_n$  jest pokryciem  $n$ -tej monowarstwy (z zakresu 0-1) - jest to stosunek ilości miejsc (węzłów sieci) aktualnie zajmowanych przez atomy do całkowitej ilości dostępnych miejsc na sieci krystalicznej,  $S_0$  jest powierzchnią 2-wymiarowej komórki elementarnej,  $z_n$  jest pozycją  $n$ -tej warstwy w kierunku prostopadłym do powierzchni.

Obliczenia oparte o jednowymiarowy model potencjału rozpraszającego kryształu mogą być stosowane do interpretacji danych doświadczalnych pod warunkiem, że azymut wiązki padającej jest o kilka stopni przesunięty względem głównego kierunku krystalograficznego – jest to tzw. warunek jednowiązkowy (ang. *one-beam condition*). Wówczas można przyjąć, że wiązka elektronów padających jest rozpraszana przez uśredniony potencjał warstw atomowych w płaszczyznach równoległych do powierzchni.



Rys. 3. Projektcja sieci krystalicznej dla warunku jednowiązkowego [A. Ichimiya, H. Nakahara, Y. Tanaka, *Surface structures during silicon growth on an Si(111) surface*, [in]: *Advances in the Understanding of Crystal Growth Mechanisms* edited by T. Nishinaga, K. Nishioka, J. Harada, A. Sasaki, H. Takei, 1997 Elsevier Science]

Obecnie wielu autorów zajmujących się obliczeniami RHEED wykorzystuje model jednowiązkowy ze względu na jednoznaczność interpretacji oraz porównywalność danych obliczeniowych. Opisany i zaimplementowany w pracy [1] model proporcjonalnego do pokrycia potencjału rozpraszającego warstwy jest pewną wyidealizowaną formą rzeczywistości. W ogólności należy przyjąć, że wiązka padających elektronów jest rozpraszana dodatkowo na krawędziach wysp formujących się na wzrastającej powierzchni. Wcześniej zaproponowano ciekawy model dyfuzyjnego potencjału rozpraszającego [Z. Mitura, S.L. Dudarev, L.M. Peng, G. Gładyszewski, M.J. Whelan, *The small terrace size approximation in the theory of RHEED oscillations*, *J. Cryst. Growth* 235 (2002) 79]. Warto jednak zauważyć, że w prezentowanej przez autorów formie potencjał ten może być wykorzystywany jedynie dla struktur homoepitaksjalnych. W publikacji:

[3] A. Daniluk, *RHEED intensities from two-dimensional heteroepitaxial nanoscale systems*, *Computer Physics Communications* 185 (2014) 3001.

uwzględniono możliwość występowania rozpraszania dyfuzyjnego w warstwach heteroepitaksjalnych. Artykuł ten (wraz z częścią implementacyjną) zawiera zaproponowany przeze mnie *model potencjału rozpraszającego dla ultracienkich warstw heteroepitaksjalnych z uwzględnieniem potencjalnych form rozpraszania dyfuzyjnego na powierzchni górnej formującej się 2D monowarstwy*. Zaproponowana postać potencjału rozpraszającego dla *heterostruktur* jest następująca:

$$U_{Combined}(z) = \sum_n U^{substrate}(z) + \sum_n (U^{layer}(z) + U^{add}(z)), \quad (3)$$

gdzie człon odpowiedzialny za rozpraszanie dyfuzyjne na powierzchni górnej monowarstwy ma postać:

$$U_{add}^n(z) = \left(1 + \frac{E}{m_0 c^2}\right) \times W(\theta_n) i \beta \times \frac{8\pi}{S_0} \times \sum_{k=1}^4 \frac{a_k}{100^{1/2}} \times \left[ \exp\left(-\frac{4\pi^2(z-z_n)^2}{100}\right) \right], \quad (4)$$

gdzie funkcja  $W(\theta_n)$  określa stopień rozpraszania dyfuzyjnego. W pracy zaproponowano, aby jakościowo uzależnić stopień rozpraszania dyfuzyjnego od sposobu narastania górnej monowarstwy. Stąd możliwość występowania przynajmniej trzech podstawowych form potencjału (3).

#### MODEL1

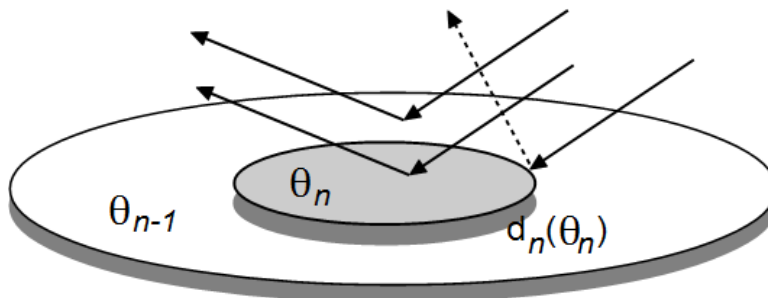
Zakładając, że w czasie idealnego wzrostu typu warstwa-po-warstwie, każde miejsce na  $n$ -tym poziomie może być wypełnione z prawdopodobieństwem  $\theta_n$  lub pozostawać puste z prawdopodobieństwem  $1 - \theta_n$ , funkcja  $W(\theta_n)$  może być zapisana jako iloczyn odpowiednich prawdopodobieństw:

$$W(\theta_n) = (1 - \theta_n)\theta_n, \quad (5)$$

i zależy jedynie od liczby pustych i wypełnionych miejsc na danym poziomie. Jest to przykład wzrostu typu *random*, tzn. osadzone atomy zajmują wolne miejsca na wzrastającej powierzchni i nie jest uwzględniany ich międzywarstwowy transport.

#### MODEL2

Uwzględniając możliwość wzrostu typu dystrybucyjnego można przyjąć, że prawdopodobieństwo zajęcia przez atom pustego miejsca na  $n$ -tym poziomie zależy od obwodu warstwy  $d_n(\theta_n)$ .



Rys. 4. Ilustracja rozpraszania dyfuzyjnego. Część wiązki elektronowej rozpraszana jest na krawędziach formujących się wysp (linia przerywana)

Przy założeniu, że dla powierzchni wypełnionej mniej niż do połowy istnieje określona liczba wysp, z których każda ma taki sam obwód oraz że dla powierzchni wypełnionej więcej niż do połowy istnieje określona liczba pustych obszarów o takim samym obwodzie, wówczas funkcja  $W(\theta_n)$  może być zapisana jako:

$$W(\theta_n) = d_n^{(1)}(\theta_n), \quad (6)$$

gdzie:

$$d_n^{(1)}(\theta_n) \cong \begin{cases} \theta_n^{p_1} & \text{dla } \theta_n \leq \theta_c \\ (1-\theta_n)^{p_2} & \text{dla } \theta_n > \theta_c, \end{cases} \quad (7)$$

przy założeniach:  $\theta_c^{p_1} = (1-\theta_c)^{p_2}$ ,  $p_1 = p_2 = 0.5$  oraz  $\theta_c = 0.5$ . Założenie to odpowiada sytuacji, w której postulujemy, że wzrost monowarstwy jest typu wyspowego przy zachowaniu stałej liczby centrów krystalizacji.

### MODEL3

Zakładając z kolei, że wzrost monowarstwy odbywa się małymi wyspami oraz, że w trakcie procesu formowania monowarstwy występuje dodatkowe zarodkowanie (co w praktyce odpowiada utrzymaniu rozmiaru wysp, podczas gdy zwiększa się ich liczba), funkcję określającą stopień rozpraszania dyfuzyjnego można zapisać jako:

$$W(\theta_n) = d_n^{(2)}(\theta_n) \quad (8)$$

gdzie:

$$d_n^{(2)}(\theta_n) \cong \theta_n (1-\theta_n)^{1/2}, \quad (9)$$

Każda z przetestowanych form modelu potencjału rozpraszającego (3) dla struktur heterozłączowych jest dodatkowo zilustrowana fragmentem odpowiedniego pseudokodu [3], w ten sposób aby możliwym było wprowadzenie dowolnych modyfikacji użytkownika.

W pracy [3] nie badano kinetyki wzrostu warstwy. Modele wzrostu uwzględniono w sposób jakościowy. Celem było zaprezentowanie stosowności potencjału (3) oraz konsekwencje takiego podejścia. Wykazano, że rozwój bardziej zaawansowanych modeli obliczeniowych uwzględniających bardziej szczegółowe formy rozpraszania dyfuzyjnego może być niezwykle pomocny dla ilościowego opisanie danych doświadczalnych (przynajmniej dla warunku jednowiązkowego). Prezentowane w [3] modele zakładają, że w trakcie aktu rozpraszania wysokoenergetycznych elektronów od warstw przypowierzchniowych oscylacje RHEED są generowane przez superpozycję dwóch czynników: (1) periodyczną strukturę sieci krystalicznej ze *szczególnym uwzględnieniem periodycznych zmian średniego potencjału rozpraszającego monowarstwy powierzchniowej*, oraz (2) część wiązki jest rozpraszana dyfuzyjnie przez formujące się na powierzchni wyspy o periodycznie zmieniających się rozmiarach.

Warto zauważyć, że ogólne założenia modelu potencjału rozpraszającego przedstawionego w publikacji [3] bardzo dobrze odpowiadają wynikom opublikowanym równoległe przez Kawamure i Maksyma [T. Kawamura, P.A. Maksym, *Origin of RHEED intensity oscillation during homoepitaxial growth on Si(001)*, Surface Science 630 (2014) 125], gdzie autorzy wykazali, że źródłem zmian

intensywności oscylacji RHEED w trakcie wzrostu warstwa po warstwie jest interferencja fal elektronowych ulegających dyfrakcji na dwóch sąsiednich poziomach (co odpowiada formowaniu się monowarstwy) z uwzględnieniem dodatkowego rozpraszania na krawędziach tarasów.

W publikacji [3] dodatkowo wykazano, że za pomocą standardowych pomiarów krzywych dyfrakcyjnych przedstawiających zmianę natężenia wiązki ugiętej na danych płaszczyznach sieciowych próbki w funkcji kąta padania wiązki wysokoenergetycznych elektronów na powierzchnię próbki, powinna istnieć możliwość eksperymentalnego badania przejść perkolacyjnych w trakcie formowania dwuwymiarowych struktur – co jest niezwykle interesujące zarówno z praktycznego jak i naukowego punktu widzenia. Moim zdaniem, na podstawie [3] można zaprojektować i przeprowadzić bardzo interesującą serię eksperymentów.

Obliczanie zmian intensywności oscylacji wysokoenergetycznych elektronów RHEED jest problemem mieszczącym się w klasie NP. Podstawowymi zasobami systemowymi uwzględnianymi w analizie algorytmów są czas działania oraz obszar zajmowanej pamięci. Zaproponowane przeze mnie dla struktur heteroepitaksjalnych rozwiązanie charakteryzuje się złożonością czasową  $O(n^2)$  oraz pamięciową  $O(n)$ , gdzie  $n$  jest całkowitą liczbą monowarstw przyjętą do obliczeń.

### **III. Projektowanie oprogramowania dla celów naukowych**

Ważny element mojej aktywności dotyczy badań na metodami projektowania i wdrażania oprogramowania dla celów naukowych konstruowanego w oparciu o paradygmat architektury sterowanej modelami. Opracowany na początku XXI wieku przez organizację OMG (ang. *Object Management Group*) standard wdrażania oprogramowania sterowanego modelem MDD (ang. *Model-Driven Development*) jest bardzo nowoczesnym i technologicznie zaawansowanym podejściem do ewolucji obiektowo-zorientowanej architektury oprogramowania. MDD wykorzystuje rozwój sterowany modelami, który jest rozszerzeniem paradygmatu architektury sterowanej modelami, MDA (ang. *Model-Driven Architecture*) na wszystkie aspekty ewolucji systemu. MDA jest najbardziej znanym standardem MDD. Celem MDA jest opracowanie standardów, które wspierają elastyczne podejście do systemów rozwijających się w obliczu zmieniającej się infrastruktury i zmieniających się wymagań biznesowych.

Trzeba zauważyć, że termin „Architektura” w ujęciu MDA nie odnosi się w prosty sposób do architektury modelowanego systemu, a opisuje różne standardy i formy modeli, które stanowią istotę technologii MDA. Istotą MDA jest zastąpienie klasycznego XX wiecznego podejścia do programowania głoszącego iż „wszystko jest obiektem” na rzecz nowoczesnego – „wszystko jest modelem”. Warto wspomnieć, iż pomimo tego, że standard wdrażania oprogramowania sterowanego modelami funkcjonuje w inżynierii oprogramowania od ponad dekady, to jednak koncepcja jego wykorzystania na szerszą skalę w obszarach nauk stosowanych (również w fizyce) nie jest w pełni doceniana. Autorzy większości programów obliczeniowych ograniczają się jedynie do pełnego dokumentowania modelu



matematycznego, na bazie którego funkcjonuje dane oprogramowanie zaniedbując inne (z praktycznego punktu widzenia nie mniej obecnie istotne) elementy cyklu wytwórczego projektu. Powoduje to, że większość funkcjonujących w obiegu społecznym programów symulacyjnych jest bardzo trudna do analizy i ew. samodzielnej modyfikacji lub adaptacji do nowych, zmieniających się wymagań użytkownika.

Opis wykorzystywanych technologii informatycznych wraz z nieodłączną implementacją znajduje się w trzech pracach, które *nie powinny być traktowane rozłącznie*. Realnie, publikacje te powinny być rozpatrywane jako jedna duża edycja. Rozłączne potraktowanie wymienionych prac spowoduje rozerwanie relacji pokazanych na rysunkach 5-7 oraz 10.

[7] A. Daniluk, *Visual modeling for scientific software architecture design. A practical approach*, Computer Physics Communications 183 (2012) 213.

[8] A. Daniluk, *Model-Driven Development for scientific computing. Computations of RHEED intensities for a disordered surface. Part I*, Computer Physics Communications 181 (2010) 707.

[9] A. Daniluk, *Model-Driven Development for scientific computing. Computations of RHEED intensities for a disordered surface. Part II*, Computer Physics Communications 181 (2010) 709.

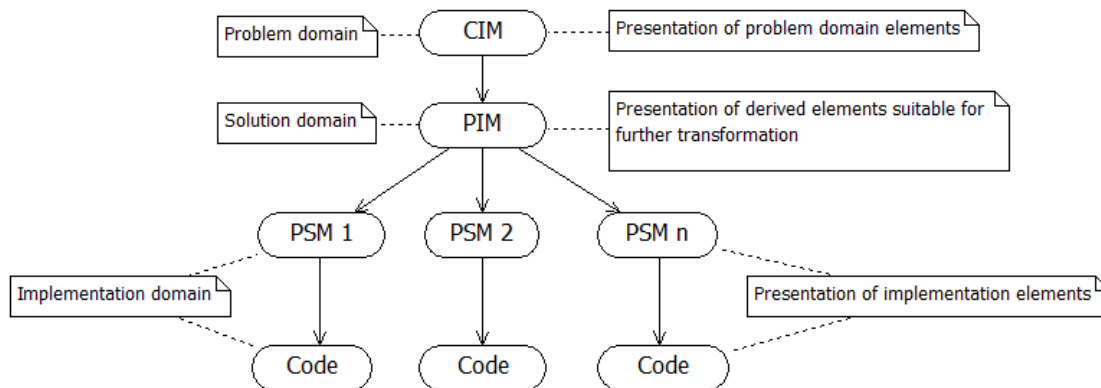
MDA nie jest w ścisłym tego słowa znaczeniu całkowicie nową metodyką tworzenia oprogramowania. W rzeczywistości MDA jest rozwinięciem opracowania iteracyjnego z wprowadzeniem mechanizmów automatycznej transformacji modeli opisanych w [7] oraz implementowanych w [8-10]. W praktyce użycie MDA sprowadza się do:

- przeniesienia ciężaru rozwoju systemu na wyższy poziom abstrakcji i nadanie modelowaniu centralnej roli,
- ścisłego oddzielenie warstw systemu,
- automatycznej generacji kodu bezpośrednio z modelu,
- wprowadzeniu mechanizmów automatycznej weryfikacji i walidacji kodu.

Zgodnie z założeniami organizacji OMG wyróżnia się cztery warstwy oprogramowania tworzonego zgodnie z wytycznymi MDA:

- *Computation-Independent Model* (CIM) – model dziedzinowy, nie pozostający w ścisłej relacji z technologią informatyczną;
- *Platform-Independent Model* (PIM) – abstrakcyjna, niezależna od platformy systemowej i programistycznej specyfikacja systemu wykorzystująca metamodel;
- *Platform-Specific Model* (PSM) – model odwzorowany na konkretne rozwiązania wybranej platformy systemowej i programistycznej. PSM może być tworzony w oparciu o język ogólnego przeznaczenia (C++, Java, C#, Object Pascal, itp.) lub wybrany język dziedzinowy;
- *Code* – automatycznie generowany kod niskopoziomowy (np. kod Javy, C#, C++, Object Pascala, itp.).

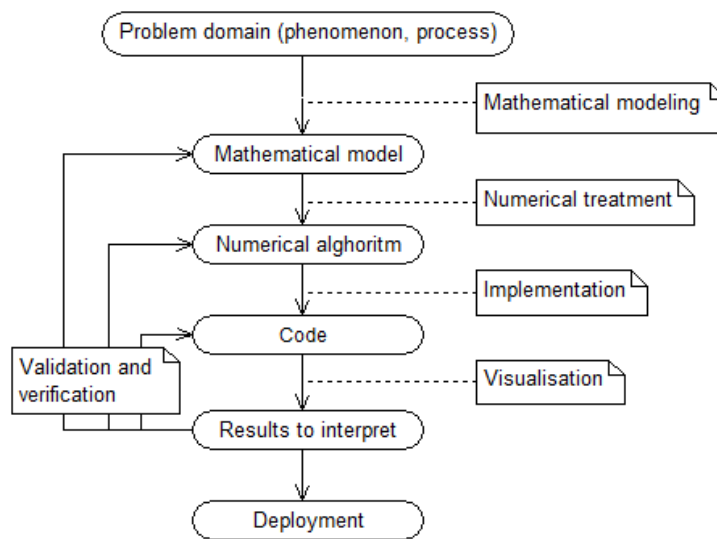
Na rysunku 5 pokazano schemat cyklu życia oprogramowania tworzonoego zgodnie z podstawowym standardem MDA.



Rys.5. Standardowe relacje między warstwami MDA [7]

### III.1. Cykl wytwórczy oprogramowania dla celów naukowych

W ogólności symulacja komputerowa jest metodą odtwarzania zjawisk zachodzących w świecie rzeczywistym za pomocą ich matematycznych modeli definiowanych i obsługiwanych przy użyciu programów komputerowych. Tego rodzaju programy komputerowe traktowane są jako modele symulowanego zjawiska. Typowy proces tworzenia oprogramowania dla celów naukowych schematycznie przedstawiono na rysunku 6. Proces ten obejmuje analizę dziedziny problemu, wybór modelu matematycznego opisującego dziedzinę problemu, znalezienie sposobu wdrożenia tego modelu w formie, która może być uruchomiona na komputerze (opracowanie algorytmu numerycznego), implementację w języku programowania, obliczenie wyników algorytmu oraz ich wizualizację i interpretację.

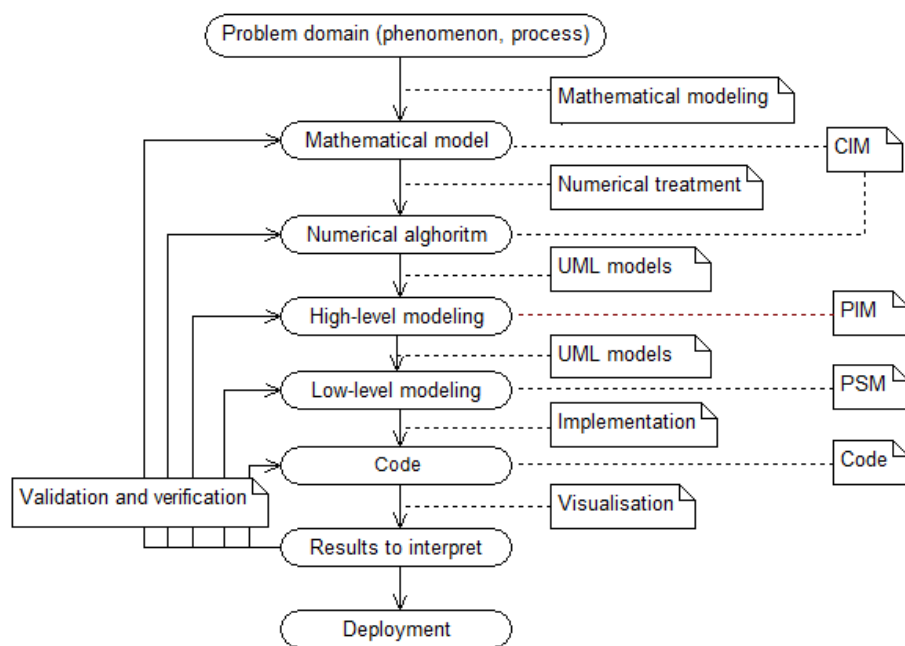


Rys.6. Standardowy cykl wytwórczy oprogramowania dla celów naukowych [7]

Istotną wadą cyklu z rysunku 6 jest to, że nie uwzględnia on aspektu modelowania wszystkich obiektów dziedziny problemu, a co za tym idzie uniemożliwia modelowanie złożonych systemów przeznaczonych do obliczeń naukowych. Przy czym system traktowany jest jako byt w postaci zbioru wzajemnie powiązanych elementów, realizujących jako całość funkcję nadrzędną lub zbiór takich funkcjonalności. Według [P.A. Fishwick, *Simulation Model Design and Execution: Building Digital Worlds*, (1995) Upper Saddle River, Prentice Hall]: "A system is a set of interacting or interdependent entities, real or abstract, forming an integrated whole. In general, a system is a construct or collection of different elements that together can produce results not obtainable by the elements alone".

W praktyce, poprawnie skonstruowany model systemu obliczeniowego powinien być ilościową i jakościową reprezentacją statycznej i dynamicznej struktury systemu, pozwalającą przedstawić wpływ wielu czynników istotnych z punktu widzenia prowadzonych badań. Oznacza to, że np. system modelujący eksperyment naukowy powinien umożliwić czynną (w trakcie działania) modyfikację parametrów mających wpływ na przebieg zjawiska stanowiącego przedmiot badania, pozwalając użytkownikowi na poznanie zależności przyczynowych pomiędzy składnikami lub warunkami przebiegu badanego zjawiska w czasie rzeczywistym. W tym kontekście istnienie samego modelu matematycznego jest daleko niewystarczające, należy zbudować modele uwzględniające wszystkie współistniejące obiekty dziedziny problemu.

Jako ważny element, który opracowałem w trakcie prac nad projektem [8-9] jest zaproponowany przeze mnie w publikacji [7] cykl wytwórczy, który zdaniem autora powinien w znaczący sposób usprawnić proces modelowania systemów do obliczeń naukowych. Praktyczne znaczenie poszczególnych poziomów modelowania z rys. 7 zostało dokładnie przedstawione w pracy [7].



Rys.7. Proponowany cykl wytwórczy oprogramowania dla celów naukowych zgodny z paradygmatem architektury sterowanej modelami [7]

Istotnymi elementami cykli z rysunków 6 i 7 są weryfikacja i walidacja elementów modelu. Weryfikacja jest procesem określania zgodności wyników dostarczanych przez system z założeniami modelu matematycznego, w oparciu o który system został zbudowany. W tym kontekście weryfikacja wiąże się z określeniem poprawności stosowanego algorytmu numerycznego w odniesieniu do modelu matematycznego. Walidacja z kolei jest procesem określania, czy tworzone w trakcie cyklu modele są wystarczająco dobrym przybliżeniem dziedziny problemu. Walidacja zajmuje się aspektami fizycznymi i polega na określeniu adekwatności stosowanego modelu do odtwarzania danych eksperymentalnych. Według [S. Roy, *Recent advances in numerical methods for fluid dynamics and heat transfer*, Journal of Fluid Engineering, 127(4) (2005) 629]: *“Verification can be thought of as solving the chosen equations correctly, while validation is choosing the correct equations in the first place”*.

Z drugiej strony, biorąc pod uwagę istnienie modeli UML dziedziny problemu (rys. 7) należy sprawdzić ich spójność ze względu na semantyczne i syntaktyczne kryteria. Jednak nie wszystkie elementy kodu generowanego na podstawie diagramów można zweryfikować automatycznie, część z nich można zweryfikować dopiero na etapie kompilacji. Należy też pamiętać, że zgodnie z założeniami MDA jeden model PIM może być źródłem wielu modeli PSM (rys. 5).

Zgodnie z definicją wprowadzoną przez Johanssona [H.J.Johansson, P.McHugh, A.J.Pendlebury, W.A.Wheeler, *Business Process Reengineering: BreakPoint Strategies for Market Dominance*, John Wiley & Sons, 1993] proces biznesowy to:

*„a set of linked activities that take an input and transform it to create an output. Ideally, the transformation that occurs in the process should add value to the input and create an output that is more useful and effective to the recipient either upstream or downstream”*

Bez trudu można wykazać, że proponowany cykl spełnia wszystkie kryteria właściwe dla standardowego procesu biznesowego, tzn.: definiowalność, porządek, istnienie odbiorcy rezultatów procesu, zwiększanie wartości w trakcie procesu, osadzenie oraz wielofunkcyjność.

Jak już wspomniano, ważnym aspektem stosowania owego cyklu jest jednocześnie wraz z artefaktami wykonywalnymi sporządzanie szczegółowych modeli systemu obliczeniowego oraz jego dokumentacji. Przy czym autor traktuje tworzone oprogramowanie jako konkretny produkt przeznaczony dla określonego sektora wiedzy.

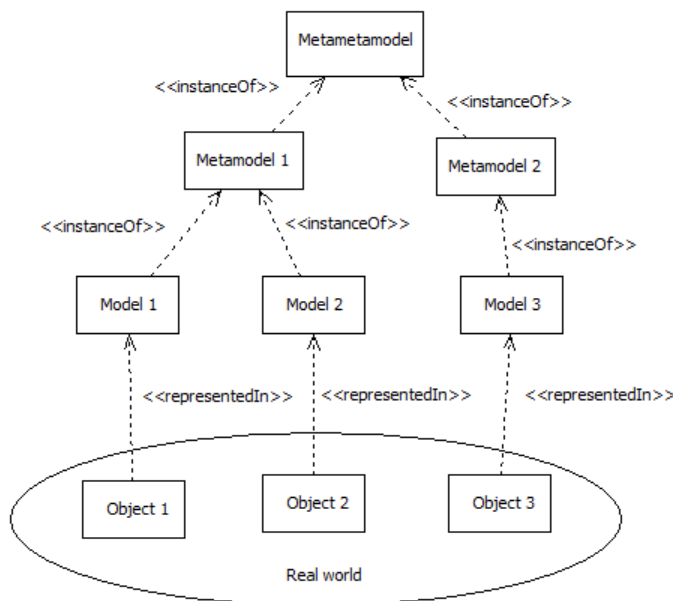
## III.2. Metamodel

Uznając model za abstrakcję pewnego zjawiska ze świata rzeczywistego, to metamodel jest abstrakcją ukazującą właściwości owego modelu. Inaczej rzecz ujmując, metamodel odwzorowuje zależności pomiędzy pojęciami wprowadzanymi w określonym modelu.

Złożone metamodele są niezmiennie problematyczne dla naukowców i deweloperów, którzy muszą je zrozumieć - aby wykorzystać. Wynika to z faktu wykorzystywania skomplikowanych notacji

modelowania. Notacje te zapewniają dobre wsparcie dla systemów wspomagających proces modelowania, ułatwiają proces komunikacji w wielu obszarach zastosowań. Obecnie większość autorów wykorzystuje notację opartą na zunifikowanym języku modelowania UML (ang. *Unified Modeling Language*). Autor w swoich pracach korzystał wyłącznie z notacji UML oraz właściwości profili udostępnianych przez infrastrukturę OMG.

UML jako język służący do opisu wszystkich rodzajów programowych artefaktów jest standardem obiektowego modelowania. UML posiada notację graficzną, co implikuje fakt, iż powinien być też zaopatrzony w wbudowany mechanizm służący do definiowania tej notacji (pojęć języka i powiązań między nimi). Mechanizmem tym jest metamodel. Metamodel jest modelem, który definiuje język i gramatykę służącą do wyrażania innych modeli. Rysunek 8 prezentuje przykład stosu metamodeli.

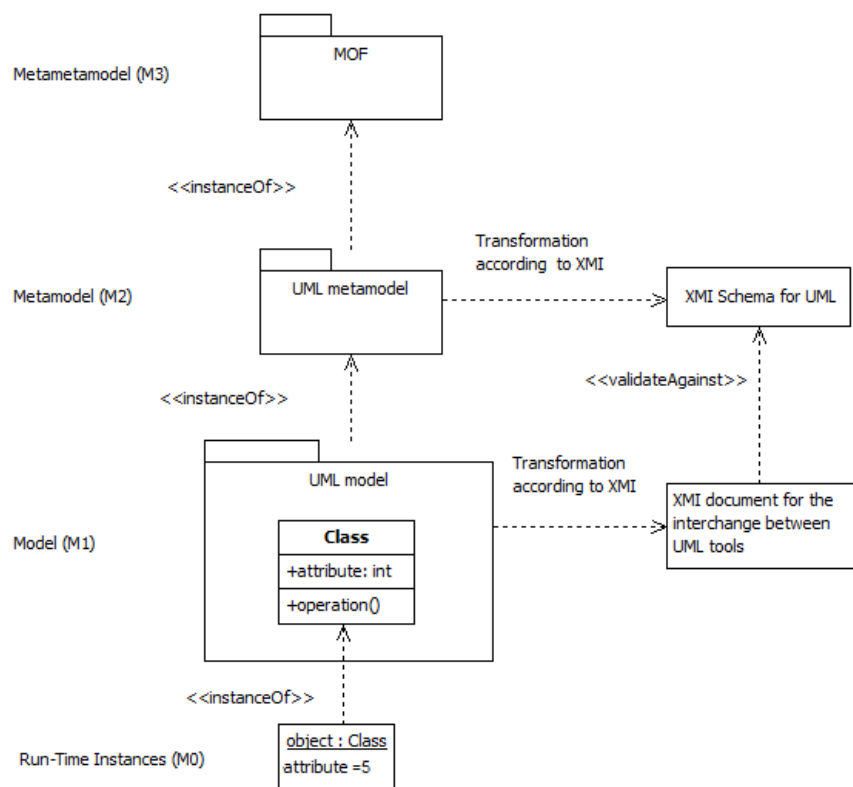


Rys.8. Stos metamodeli

Modele reprezentują zjawiska ze świata rzeczywistego i są egzemplarzami (instancjami) swoich własnych metamodeli. W terminologii tej języki są nazywane metamodelami, zaś stworzone w tych językach artefakty (włączając programy wykonywalne) nazywane są modelami.

Metamodeli UML definiują strukturę UML. Metametamodel (lub metajęzyk) jest modelem, który definiuje język do opisu metamodeli. UML jest zdefiniowany w formie metametamodelu nazywanego MOF (ang. *Meta-Object Facility*). MOF charakteryzuje mechanizmy niezbędne do przechowywania i uzyskiwania dostępu do różnych języków modelowania. Na rysunku 9 pokazano infrastrukturę modelowania zgodnie z założeniami organizacji OMG. Na poziomie M0 występują konkretne realizacje modeli, na przykład konkretne obiekty generowane w trakcie wykonania programu. Na poziomie M1 występują modele systemu. Modele UML są tworzone właśnie w tej warstwie. Na poziomie M2 mamy do czynienia z metamodelami, które odgrywają rolę gramatyk do definiowania modeli np. pojęcia generalizacji, powiązań, zależności klas, itp. Na poziomie M3 występuje metametamodel. W standardzie

MDA, MOF umożliwia definiowanie wielu różnych metamodeli na poziomie M2. Od użytkowników UML nie jest wymagana znajomość MOF. W MOF wyrażony jest metamodel UML stanowiąc jednocześnie gramatykę języka UML.



Rys.9. Uproszczona forma infrastruktury modelowania OMG [7]

Wprowadzenie standardu XMI (ang. *XML Metadata Interchange*) jako mechanizmu wymiany metadanych pomiędzy różnymi narzędziami wizualnego modelowania pozwoliło na serializację metamodeli, co oznacza możliwość ich wzajemnej wymiany pomiędzy narzędziami różnych producentów. Do obecnie najpopularniejszych narzędzi wspierających technologie MDD/MDA należą Eclipse, Together oraz Sparx Enterprise Architect. W swoich pracach autor korzystał z narzędzi Together oraz Sparx Enterprise Architect.

### III.3. Model eksperymentu RHEED

*"Models represent reality, simulation imitates it."*

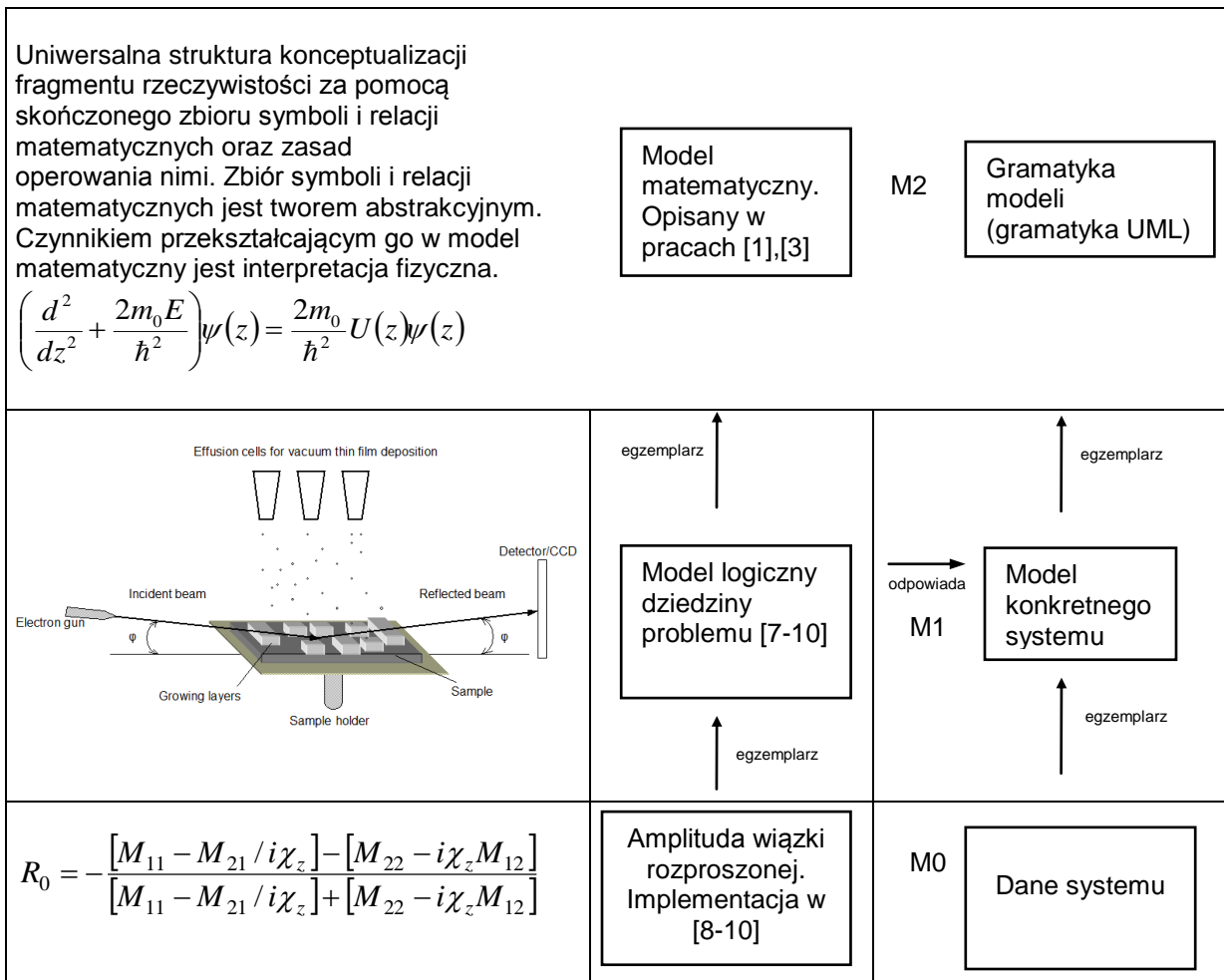
Russell L. Ackoff, Maurice W. Sasieni, *Fundamentals of Operations Research*, 1968

Projekt dziedziny problemu uwzględnia model dziedziny utworzony w fazie analizy i ma na celu stworzenie ogólnej architektury dla podsystemów opisujących funkcjonowanie poszczególnych

elementów dziedziny. Celem projektu dziedziny problemem jest opisanie jak największej liczby istotnych wymagań dla tworzonego systemu przy zachowaniu elastyczności oferowanej przez opracowany model.

Na rysunku 10 zobrazowałem sposób interpretowania zagadnień poruszanych w przedłożonych pracach w kontekście modelowania dziedziny problemu. Poziom M1 obrazuje piękny związek pomiędzy fizyką a informatyką. Okazuje się, że modele eksperymentów fizycznych można opisać za pomocą związków dedykowanych klas, gdzie klasy (będąc podstawowymi jednostkami wiedzy) reprezentują byty ze świata rzeczywistego wraz ze swoimi atrybutami, właściwościami i operacjami, zaś związki między klasami (generalizacje, powiązania, zależności oraz agregacje) reprezentują postulowane relacje między bytami.

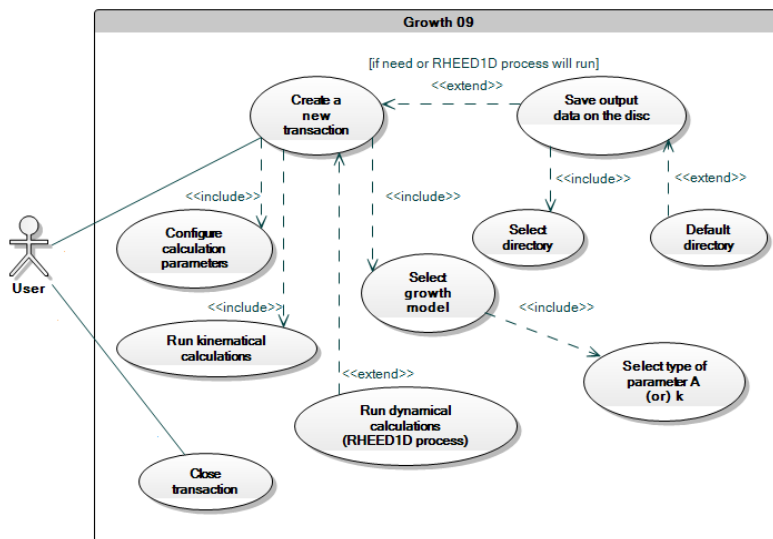
Z rysunku 10 jasno wynika, iż w trakcie analizy przedłożonych prac nie można rozerwać relacji łączących je. W [1-3] opisano odpowiednio podstawowy i rozszerzony model matematyczny dziedziny problemu, [4-6] zawierają podstawowe dane testowe, w [7] opisano pełną specyfikację modelu logicznego eksperymentu RHEED, zaś [8-10] zawierają implementację z warstwą prezentacji.



Rys.10. Specyfikacja znaczenia vs specyfikacja modelu eksperymentu RHEED. Jako język specyfikacji modelu używane są diagramy przypadków użycia, klas oraz sekwencji

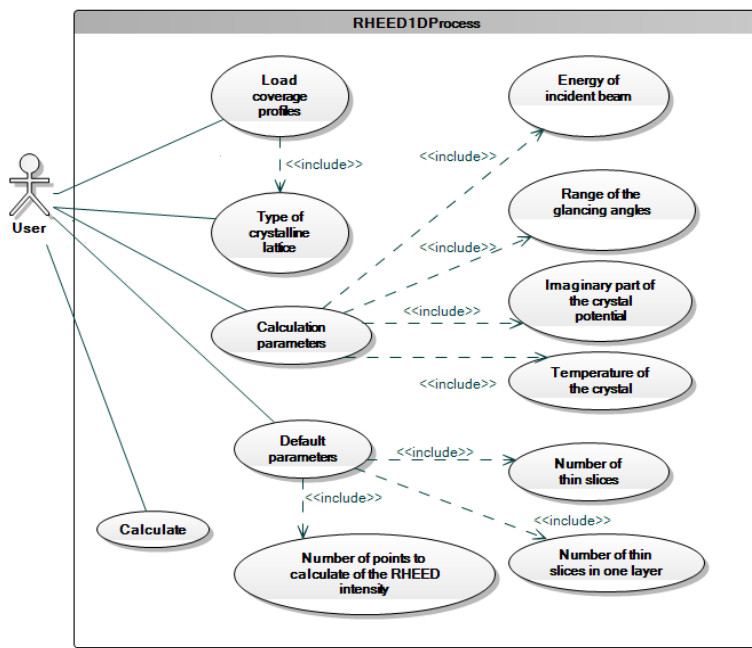
### III.3.1. Elementy specyfikacji modelu eksperymentu RHEED

Niezwykle istotnym elementem w analizie, projektowaniu i implementacji oprogramowania są przypadki użycia. Przypadek użycia służy do modelowania funkcjonalności systemu i jest niczym więcej niż ogólnym opisem tego, w jaki sposób system będzie używany. Przedstawia usługi, które system świadczy aktorom, lecz bez wskazywania konkretnych rozwiązań technicznych. Przypadki użycia nie tylko ukierunkowują analizę, ale także pomagają w zbudowaniu obiektowego modelu dziedziny problemu i są szczególnie ważne podczas testowania oprogramowania. Na rysunkach 11 i 12 pokazano przypadki użycia dla problemów obliczeniowych *Growth09* oraz *RHEED1Process*. Model obliczeniowy *Growth09* bazuje na najprostszej, kinematycznej teorii dyfrakcji RHEED, gdzie zakłada się jednokrotny akt rozproszenia elektronów na powierzchniowych atomach kryształu. Model ten dobrze sprawdza się przy założeniach, że kąt padania wiązki elektronów jest niewielki ( $\sim 1^\circ$ ) i wiązka elektronów nie wnika w głąb kryształu, zaś natężenie wiązki zwierciadlane odbitej silnie zależy od formy frontu wzrostu powierzchni [A. Daniluk, *Kinematical calculations of RHEED intensity oscillations during the growth of thin epitaxial films*, Computer Physics Communications 170 (2005) 265]. Model obliczeniowy *RHEED1Process* bazuje na dynamicznej teorii dyfrakcji elektronów RHEED z uwzględnieniem wielokrotnych rozprożeń fali elektronowej na potencjałach atomów tworzących sieć.

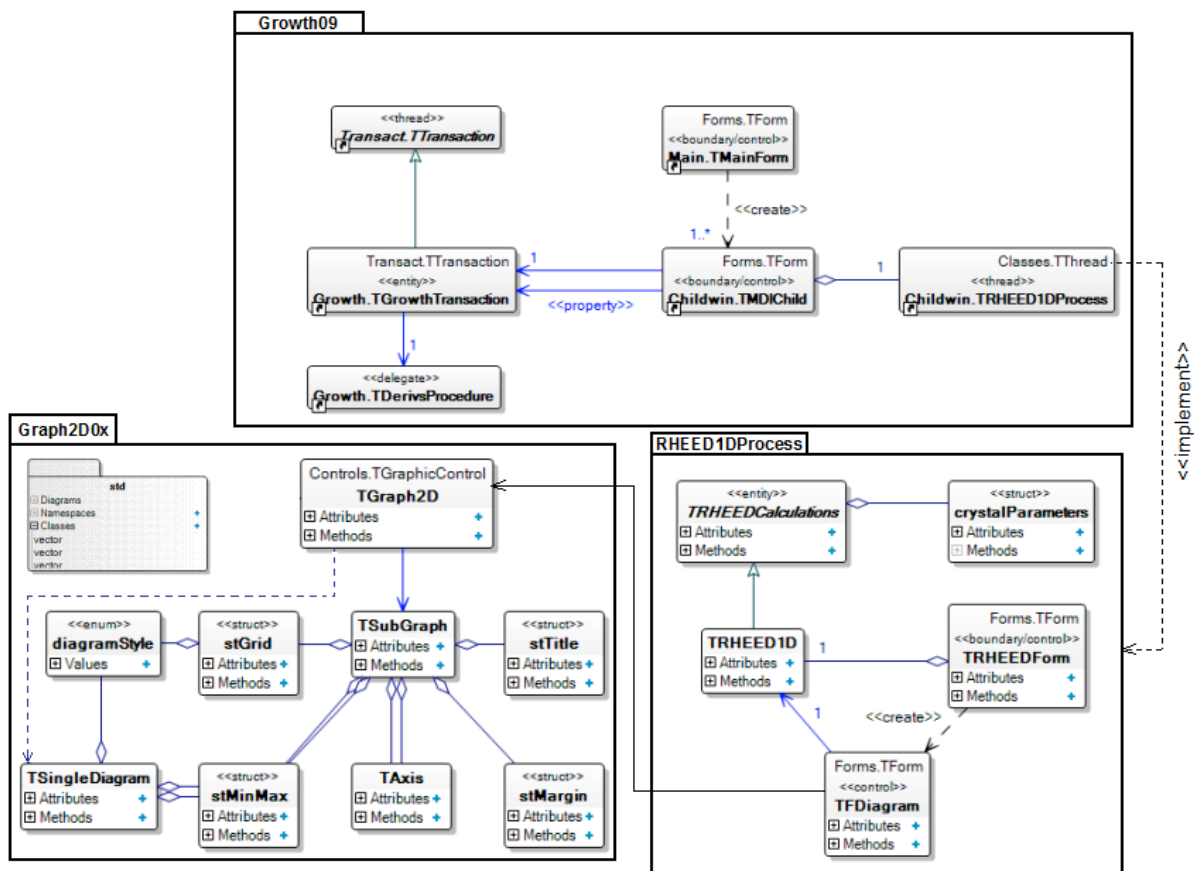


Rys.11. Przypadki użycia podsystemu *Growth09*. Diagram dostępny w elektronicznej wersji pracy [8]

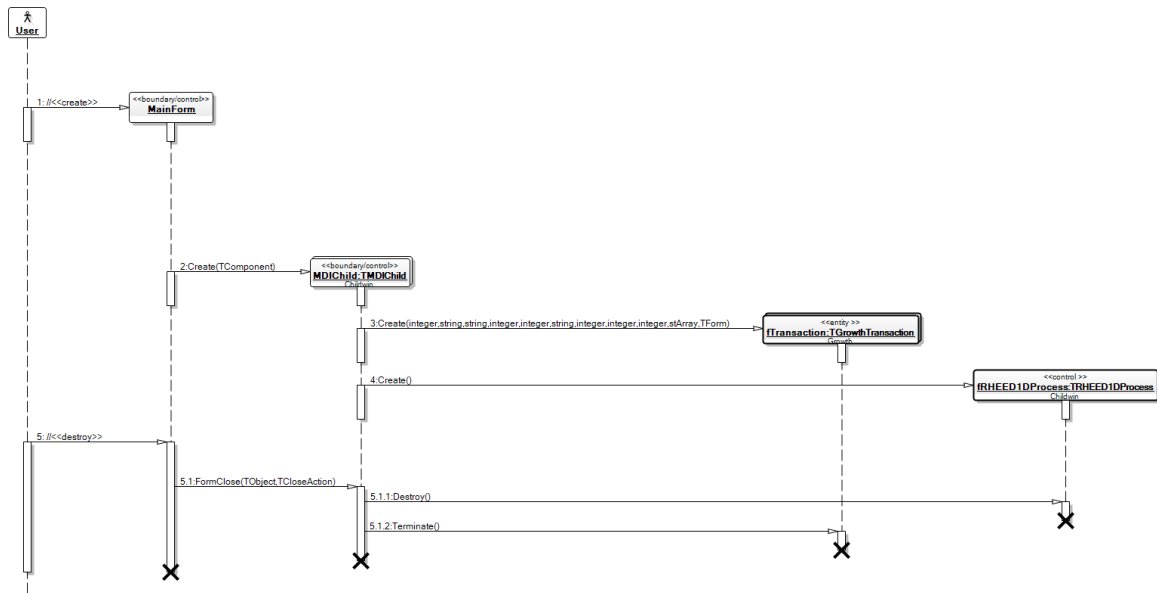




Rys.12. Przypadki użycia podsystemu *RHEED1DProcess*. Diagram dostępny w elektronicznej wersji pracy [9]



Rys.13. Struktura logiczna środowiska obliczeniowego RHEED [7]. Pakiet *RHEED1DProcess* implementuje wzorec projektowy dla problemu RHEED, pakiet *Graph2D0x* implementuje wzorec projektowy dla warstwy prezentacji RHEED, zaś pakiet *Growth09* – ogólny wzorec dla transakcyjnych, wielowątkowych symulacji przykładowych (podstawowych) modeli wzrostu warstw.



Rys.14. Diagram sekwencji obrazujący dynamiczne aspekty logicznego modelu środowiska z rys. 13. Diagram dostępny w wersji elektronicznej pracy [7]

Na rysunkach 13 i 14 pokazano odpowiednio strukturę logiczną klas będących podstawą konstrukcji środowiska obliczeniowego [8-9] oraz aspekty dynamiczne systemu w postaci odpowiedniego diagramu sekwencji.

Niektórzy projektanci (a także naukowcy) rozumieją i używają diagramów specyfikacji modelu jako narzędzia pomocnego w trakcie szkicowania projektów tylko po to, aby szkicami podzielić się ze współpracownikami. Jednak diagramy specyfikacji modelu to coś znacznie więcej niż tylko ładne obrazki. Nowoczesne narzędzia modelowania mogą uchwycić sens elementów diagramów i ich związków w formie przeznaczanej do odczytu maszynowego, a następnie użyć tej wiedzy w trakcie projektowania, wykonywania kontroli spójności, a nawet automatycznie generować części kodu aplikacji. Możliwość tworzenia, przechowywania i przekształcania modeli sprawia, że modelowanie należy umiejscowić w sercu procesu produkcji oprogramowania stanowiąc podstawę paradygmatu MDA.

### III.4. Powtórne użycie artefaktów systemu

Analizując proces pokazany na rys. 7 można dostrzec potencjalnie jeszcze jedną korzyść z proponowanego w pracy [7] podejścia do tworzenia oprogramowania dla celów naukowych. Korzyścią tą jest możliwość powtórnego użycia niemal wszystkich elementów systemu - począwszy od idiomów opisujących pojedyncze funkcjonalności, poprzez bardziej złożone struktury danych w postaci komponentów, a skończywszy na architekturze jako całości.

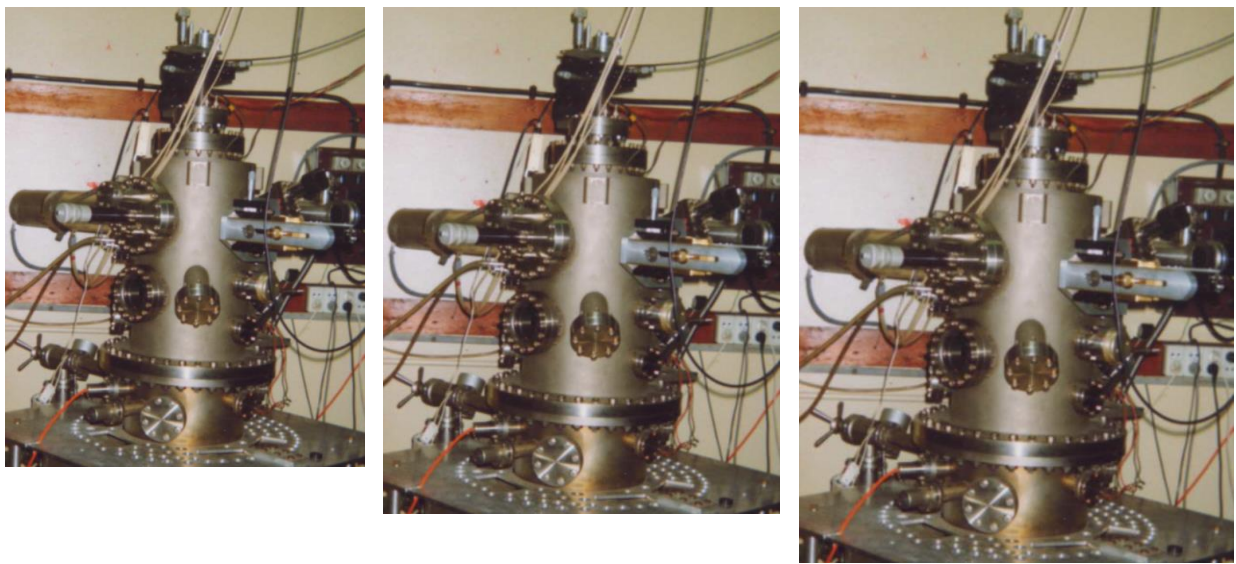
Co niemniej ważne – dzięki artefaktom systemu zawierającym kompletne metadane możliwe jest odtworzenie architektury systemu w zapisie dowolnego języka obiektowego. Przykładem takiego podejścia jest opracowana przeze mnie i zaprezentowana w pracy:

[10] A. Daniluk, *Cooperative and competitive concurrency in scientific computing. A full open-source upgrade of the program for dynamical calculations of RHEED intensity oscillations*, Computer Physics Communications 182 (2011) 1389,

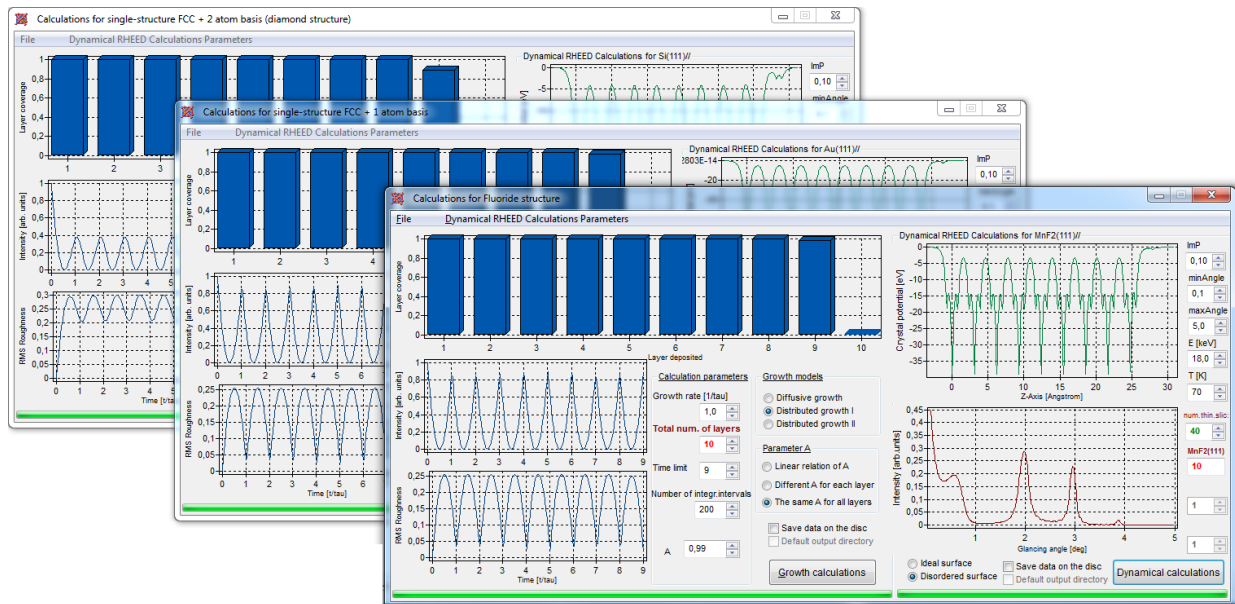
uogólniona forma wdrożenia [8-9]. Należy pamiętać, że nieodłączną częścią tego projektu jest 36-stronnicowy dokument projektowy udostępniany przez wydawnictwo w formie elektronicznej. Oba modele [8-9] oraz [10] stanowią podstawę konstrukcji pełnego, wirtualnego, działającego w czasie rzeczywistym środowiska obliczeniowego. Środowisko to ma charakter *otwarty* i posiada opracowany i udokumentowany przeze mnie interfejs użytkownika. Otwartość oznacza zezwolenie na legalne i nieodpłatne kopiowanie, zarówno kodu wynikowego jak i źródłowego oraz na dowolne modyfikacje kodu źródłowego. Wynika z tego, że wszystkie elementy środowiska [10] mogą zostać zastąpione całkowicie innymi rozwiązaniami. Np., moduły wyrażające odpowiednio klasy z implementacją przykładowych modeli wzrostu warstwy oraz modeli potencjału rozpraszającego mogą być dowolnie modyfikowane przez użytkownika lub zastąpione innymi – zawierającym implementację nowych modeli wzrostu lub funkcjonalności potencjału rozpraszającego. Należy zwrócić uwagę, że konkretne modele wzrostu (dyfuzyjny i dystrybucyjny) zostały użyte w [8-10] w celach implementacyjnych wzorca, oraz aby zaprezentować podstawowe czynniki wpływające na obliczenia RHEED w zależności od modelu stanu powierzchni. Jednak delegat z rys. 13 (element oznaczony stereotypem <<delegate>>) może wskazywać na dowolne funkcje użytkownika implementujące np. algorytmy bazujące na symulacjach MC (Monte Carlo) lub MD (dynamiki molekularnej) [S.-P. Kim, S.-Ch. Lee, K.-R. Lee and Y.-Ch. Chung, *Molecular Dynamics Simulation at the Early Stage of Thin-Film Deposition: Al or Co on Co(111)*, Jpn. J. Appl. Phys., Vol. 43, No. 6B (2004) 3818]. Ten sam efekt można uzyskać dołączając do istniejącego projektu np. bibliotekę *.dll* (lub *.lib*) implementującą nowe, aktualnie żądane funkcjonalności (np. nowe modele potencjału rozpraszającego). Należy też zwrócić uwagę, iż projekt [10] zawiera opcje asymilacji danych zewnętrznych (np. doświadczalnych) dostępnych poprzez operacje plikowe.

### III.5. Wielowątkowe transakcje

Tworzenie w formie sekwencyjnej wielowątkowych aplikacji obliczeniowych jest procesem skomplikowanym. Przede wszystkim należy posiadać wiedzę na temat zjawiska potencjalnych wyścigów wątków, synchronizacji oraz współdzielonych zmiennych. Obecnie większość nowoczesnych środowisk obliczeniowych projektowana jest w oparciu o reguły transakcyjne.



(a)



(b)

Rys.15. (a) Hipotetyczny przykład laboratorium z wieloma stanowiskami RHEED/MBE, gdzie w tym samym czasie można wykonywać wiele różnych eksperymentów lub wiele wersji tego samego eksperymentu porównując ich wyniki. (b) Wirtualny, wielowątkowy odpowiednik wielu różnych eksperymentów RHEED na przykładzie działającej aplikacji [10]

Termin „transakcja” zyskał w naukach informatycznych ścisłe znaczenie – jest to dowolna operacja charakteryzująca się czterema własnościami ACID:

- A – niepodzielność (ang. *atomicity*) – nie są widoczne jakiegokolwiek pośrednie stany wykonywania transakcji. Oznacza to wykonanie transakcji w całości lub niewykonanie jej w ogóle. Transakcja może zostać zatwierdzona (zakończyć pracę normalnie) lub zostać anulowana (odrzucona).

- C – spójność (ang. *consistency*) – widoczne zmiany stanu nie naruszają niezmienników systemu. Spójność wiąże się z niepodzielnością – różnica polega na tym, że za spójność odpowiada programista, a za niepodzielność implementacja systemu transakcyjnego.
- I – izolacja (ang. *isolation*) – wiele transakcji może być wykonywanych współbieżnie bez wzajemnych oddziaływań. Ich wykonanie przypomina operacje wykonywane sekwencyjnie.
- D – trwałość (ang. *durability*) – wynik działania programu zostaje zachowany po zakończeniu jego pracy (np. w postaci zbioru danych na dysku).

Poza rozbudowanymi systemami o charakterze bazodanowym wszystkie cztery własności ACID nie zawsze są wymagane do prawidłowej pracy programu symulacyjnego. W aplikacjach [8-10] została przewidziana możliwość pracy programu obliczeniowego w trybie tzw. transakcji lekkich. Charakteryzują się one wszystkimi własnościami ACID, jednak program może też prawidłowo funkcjonować bez konieczności spełnienia zasady trwałości. Transakcje można w każdym momencie bezpiecznie przerwać nie powodując konfliktu w obrębie wykonywanych obliczeń. Implementacje [8-10] bazują na zastosowaniu modelu wykorzystującego metodę szablonu uzupełnioną o oryginalną koncepcję dowiązywania delegatów pośredniczących w wywołaniu żądanych metod implementujących podstawowe, przykładowe modele wzrostu warstw. Konstrukcja logiczna aplikacji [10] modelującej eksperyment RHEED umożliwia jednoczesne przeprowadzenie wielu wirtualnych eksperymentów lub wielu wersji tego samego eksperymentu, tak jak pokazano to na rys. 15.

Konstrukcja środowiska [10] w oparciu o koncepcję wielowątkowych transakcji umożliwia przeprowadzenie obliczeń z uwzględnieniem możliwości manipulacji w czasie rzeczywistym wybranymi parametrami wirtualnego eksperymentu, które zdaniem eksperymentatora mają wpływ na jego przebieg. W szczególności realizacja modelu [10] umożliwia:

- wykonanie "transferu próbki" (przykładowe dane dla wybranych struktur homo i heteroepitakcyjnych zapisane są we własnej bazie danych aplikacji);
- manipulację zmiennymi (czynniki) opisującymi wybrane podstawowe typy wzrostu warstwy, temperaturę, energię padających elektronów, zakres kątowny pomiaru i wiele innych;
- kontrolowanie poziomu zaburzenia potencjału rozpraszającego kryształu;
- pomiar natężenia wiązki odbitej zwierciadlane od warstwy przypowierzchniowej.

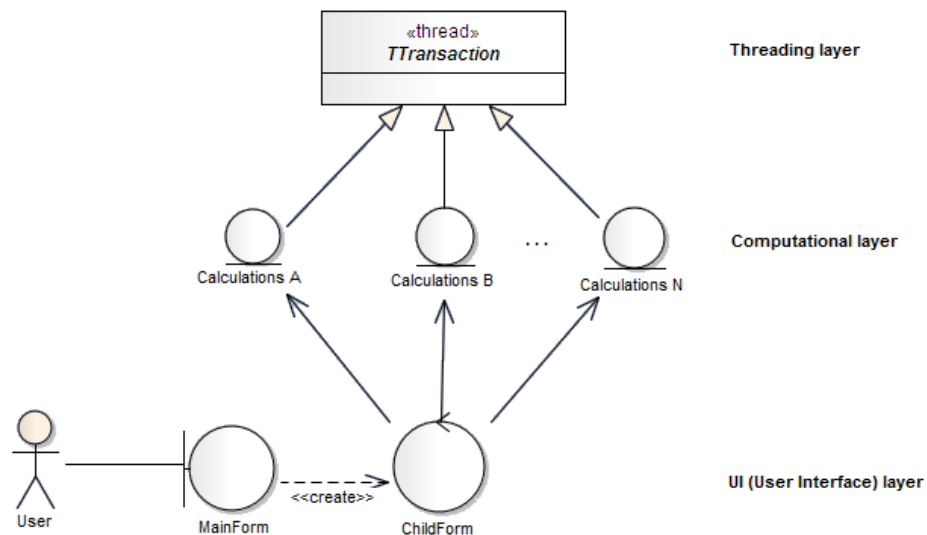
### III.6. Możliwości ogólniejszych zastosowań

W trakcie pracy nad różnego rodzaju projektami często napotykamy na powtarzające się problemy. Wzorce to próba systematyzacji takich doświadczeń i próba ułożenia ich w postaci poręcznych i sprawdzonych rozwiązań. Ogólna definicja wzorca została podana przez Alexandra, Ishikawę i Silversteina [Ch. Alexander, S. Ishikawa and M. Silverstein, *A Pattern Language, Buildings,*

*Construction*, Oxford University Press, 1977]: “Each pattern describes a problem which occurs over and over again in our environment, and then describes the core of the solution to the problem, in such a way that you can use this solution a million times over, without ever doing it the same way twice”.

Ważną kategorią wzorców stosowanych w informatyce są wzorce projektowe programowania obiektowego, często określane po prostu jako wzorce projektowe. Stanowią one udokumentowane opisy ogólnych rozwiązań problemów, które często pojawiają się w trakcie tworzenia oprogramowania w określonym kontekście.

Skuteczne wdrożenie różnych algorytmów (np. rozwiązywanie układów nieliniowych równań różniczkowych czy równań Schrödingera) jest problemem często pojawiającym się w naukach stosowanych. W projekcie [10] zaproponowano nieskomplikowany wzorec projektowy opierający się na teorii transakcji wielowątkowych. Jego wykorzystanie znacznie ułatwia realizację różnego rodzaju algorytmów w środowiskach wielowątkowych. Rozwiązanie zaprezentowane w [10] zostało zaimplementowane oraz przetestowane w składniowo i semantycznie nowoczesnym, a zarazem nieskomplikowanym języku programowania - jest więc proste do zrozumienia, modyfikacji i wdrożenia w innych językach obiektowych. Ponadto projekt [10] przedstawia możliwy sposób realizacji obliczeń opartych na modelu wielowątkowych transakcji w nowoczesnym, wieloplatformowym środowisku programowania wizualnego sterowanego zdarzeniami.



Rys.16. Umiejscowiony w architekturze MVC wzorec projektowy dla wielowątkowych obliczeń [10]

Pokazany na diagramie z rys. 16 i zaimplementowany w projekcie [10] wzorec może być użyteczny w sytuacjach wymagających wielowątkowych obliczeń z wykorzystaniem różnych algorytmów, gdzie architektura systemu opisana jest poprzez standard Model-Widok-Kontroler (MVC).

## IV. Podsumowanie głównych osiągnięć

1. Współdział w opracowaniu praktycznych eksperymentalnych procedur otrzymywania metodami MBE (epitaksji z wiązki molekularnej) oraz SPE (epitaksji z fazy stałej) bardzo dobrej jakości heterostruktur  $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$ ,  $\text{MgO}/\text{YSi}_{2-x}/\text{Si}(100)$  oraz  $\text{CoSi}_2/\text{Si}(111)$ . Materiały tego typu są technologicznie bardzo atrakcyjne i mają duże możliwości zastosowań komercyjnych.
2. Opracowanie i zaimplementowanie oryginalnego podstawowego algorytmu do dynamicznych obliczeń krzywych dyfrakcyjnych RHEED oraz jego przetestowanie w odniesieniu do danych eksperymentalnych uzyskanych w Instytucie Fizyki UMCS oraz niezależnych wyników opublikowanych przez innych autorów, np. [Y. Fukaya, Y. Shigeta, *Fast measurement of rocking curve of reflection high-energy electron diffraction by using quasi-1D convergent beam*, Surface Science 530 (2003) 175], [Y. Shigeta, Y. Fukaya, *Structural phase transition and thermal vibration of surface atoms studied by reflection high-energy electron diffraction*, Applied Surface Science 237 (2004) 21].
3. Opublikowanie i formalne wdrożenie odpowiedniego programu obliczeniowego [1]. W momencie zaprezentowania (praca wysłana do druku w 2004) był to jeden z bardzo niewielu otwartych tego typu projektów dostępnych w literaturze. Pozostałymi były projekty opublikowane mniej więcej w tym samym czasie przez grupy z Cambridge i Oxfordu: [A. Ichimiya, P.I. Cohen, *Reflection High-Energy Electron Diffraction*, Cambridge University Press, Cambridge, 2004] oraz [L.-M. Peng, S.L. Dudarev, M.J. Whelan, *High Energy Electron Diffraction and Microscopy*, Oxford University Press, Oxford, 2004] jednak bazujące na odmiennym formalizmie obliczeniowym.
4. Zaproponowanie nowego modelu potencjału rozpraszającego dla krystalicznych heterostruktur z uwzględnieniem rozpraszania dyfuzyjnego od warstwy przypowierzchniowej [3]. Przy użyciu proponowanego podejścia wykazano, że możliwym jest uzyskanie cennych informacji przydatnych w trakcie analizy danych doświadczalnych. Wykazano też, że rozwój bardziej zaawansowanych modeli obliczeniowych uwzględniających bardziej szczegółowe formy rozpraszania dyfuzyjnego może być niezwykle pomocny dla ilościowego opisu danych doświadczalnych (przynajmniej dla warunku jednowiązkowego). W oparciu o modele [3] wykazano ponadto, że w trakcie aktu rozpraszania wysokoenergetycznych elektronów od warstw przypowierzchniowych oscylacje RHEED są generowane przez superpozycję dwóch czynników: (1) periodyczną strukturę sieci krystalicznej ze szczególnym uwzględnieniem periodycznych zmian średniego potencjału rozpraszającego monowarstwy powierzchniowej, oraz (2) część wiązki jest rozpraszana dyfuzyjnie przez formujące się na powierzchni wyspy o periodycznie zmieniających się rozmiarach.
5. Oryginalny algorytm obliczeniowy umożliwia redukcję czasu wykonywania obliczeń dla heterostruktur do wartości  $n^2$ , gdzie  $n$  jest liczbą monowarstw przyjętą do obliczeń.

6. Opracowanie obiektowego modelu obliczeniowego RHEED. Zgodnie z wiedzą autora jest to obecnie jedyne tego typu *interdyscyplinarne opracowanie* dostępne w literaturze [7-10]. *De facto* opracowano od podstaw oryginalny model konceptualny dziedziny problemu RHEED, który jest wyrażony w sposób zapewniający jego automatyczne przetwarzanie i wnioskowanie na jego podstawie nowych informacji. Jednocześnie stanowi zbiór przetwarzalnych maszynowo artefaktów zdolnych rejestrować wiedzę dziedzinową, w formie czytelnej dla dedykowanego oprogramowania.
7. Opracowanie i formalne przetestowanie użyteczności oryginalnego cyklu wspomagającego proces tworzenia oprogramowania dla celów naukowych [7]. Naukowa metoda zaprezentowana w pracy [7] traktuje proces wytwarzania oprogramowania obliczeniowego jako proces modelowania polegający na konstrukcji ciągu modeli począwszy od ogólnego, opisującego dziedzinę problemu po szczegółowy model implementacji konkretnego systemu. Przejścia pomiędzy poszczególnymi modelami polegają na transformacji modeli wyrażonych na wysokim poziomie abstrakcji do modeli szczegółowych, właściwych finalnej platformie programistycznej. Kończącym elementem transformacji są modele na poziomie kodu systemu.
8. Skonstruowanie otwartego, wirtualnego, działającego w czasie rzeczywistym transakcyjnego i wielowątkowego środowiska obliczeniowego pełniącego rolę wirtualnego eksperymentu RHEED. Zgodnie z wiedzą autora jest to obecnie jedyne tego typu formalnie opublikowane, udokumentowane i udostępnione na zasadzie *open-source* środowisko. Implementacja [10] nie uwzględnia możliwości występowania rozpraszania dyfuzyjnego [3]. Jednak sposób prezentacji modeli [3] pozwala na ich bardzo szybką implementację jako elementu(ów) dowolnego wzorca (w szczególności wzorca przedstawionego w [10]).



31.05.2016



## V. Spis publikacji

### **Oryginalne naukowe prace twórcze udostępnione w obiegu społecznym zgodnie z rokiem opublikowania z podziałem na okres po i przed doktoratem**

#### **Po doktoracie**

40. A. Daniluk, *RHEED intensities from two-dimensional heteroepitaxial nanoscale systems of GaN on a Si surface*, Computer Physics Communications (2016) praca przyjęta do druku.
39. A. Daniluk, *RHEED intensities from two-dimensional heteroepitaxial nanoscale systems*, Computer Physics Communications 185 (2014) 3001.
38. A. Daniluk, *GRAPPLE for Measurement Systems*, Journal of Information Technology & Software Engineering 3:1 (2013) – Editorial.
37. A. Daniluk, *Modeling in the Process of Constructing the Software for Scientific Purposes*, Journal of Information Technology & Software Engineering 2:3 (2012) - Editorial.
36. A. Daniluk, *Visual modeling for scientific software architecture design. A practical approach*, Computer Physics Communications 183 (2012) 213.
35. A. Daniluk, *Cooperative and competitive concurrency in scientific computing. A full open-source upgrade of the program for dynamical calculations of RHEED intensity oscillations*, Computer Physics Communications 182 (2011) 1389.
34. A. Daniluk, *Model-Driven Development for scientific computing. Computations of RHEED intensities for a disordered surface. Part II*, Computer Physics Communications 181 (2010) 709.
33. A. Daniluk, *Model-Driven Development for scientific computing. Computations of RHEED intensities for a disordered surface. Part I*, Computer Physics Communications 181 (2010) 707.
32. A. Daniluk, *Model-Driven Development for scientific computing*, 7th Conference on Computer Methods and Systems CMS'09, Kraków, (2009), 339.
31. A. Daniluk, *Model-Driven Development for scientific computing. An upgrade of the RHEEDGr program*, Computer Physics Communications 180 (2009) 2394.
30. A. Daniluk, *Multithreaded transactions in scientific computing. The Growth06\_v2 program*, Computer Physics Communications 180 (2009) 1219.
29. A. Daniluk, *An extension of the computer program for dynamical calculations of RHEED intensity oscillations. Heterostructures*, Computer Physics Communications 176 (2007) 70.
28. M. Brzuszek, A. Daniluk, *Multithreaded transactions in scientific computing: New versions of a computer program for kinematical calculations of RHEED intensity oscillations*, Computer Physics Communications 175 (2006) 678.
27. A. Daniluk, K. Skrobas, *A new version of a computer program for dynamical calculations of RHEED intensity oscillations*, Computer Physics Communications 174 (2006) 83.
26. A. Daniluk, *Dynamical calculations for RHEED intensity oscillations*, Computer Physics Communications 166 (2005) 123.

25. A. Daniluk, *Kinematical calculations of RHEED intensity oscillations during the growth of thin epitaxial films*, Computer Physics Communications 170 (2005) 265.
24. P. Mazurek, A. Daniluk, K. Paprocki, *Substrate temperature control from RHEED intensity measurements*, Vacuum 72 (2004) 363.
23. A. Daniluk, *Transakcje*, Materiały IV Krajowej Konferencji Metody i Systemy Komputerowe w Badaniach Naukowych i Projektowaniu Inżynierskim, Krakowskie Centrum Informatyki Stosowanej, Kraków (2003) 691.
22. A. Daniluk, *Concurrent programming and futures*, Annales UMCS Informatica AI, 1 (2003) 303.
21. P. Mazurek, A. Daniluk, K. Paprocki, *Forming the high quality  $CoSi_2$  by solid phase epitaxy*, Optica Applicata 32 (2002) 389.
20. P. Mazurek, A. Daniluk, K. Paprocki, *Analysis of RHEED intensities during formations of the  $CaF_2/Si(111)$  and  $MgO/YSi_{2-x}/Si(100)$  interface*, Vacuum 57 (2000) 229.
- Przed doktoratem**
19. A. Daniluk, *Komputerowy system rejestracji i analizy obrazów z kamery CCD*, Materiały II Krajowej Konferencji Metody i Systemy Komputerowe w Badaniach Naukowych i Projektowaniu Inżynierskim, Krakowskie Centrum Informatyki Stosowanej, Kraków (1999) 515.
18. A. Daniluk, *Symulacje komputerowe w czasie rzeczywistym wzrostu warstw epitaksjalnych*, Materiały II Krajowej Konferencji Metody i Systemy Komputerowe w Badaniach Naukowych i Projektowaniu Inżynierskim, Krakowskie Centrum Informatyki Stosowanej, Kraków (1999) 307.
17. A. Daniluk, P. Mazurek, K. Paprocki, P. Mikołajczak, *Initial growth stage of  $CaF_2$  on  $Si(111)$  studied by RHEED*, Electron Technology (1998), 31(3-4) 338.
16. A. Daniluk, P. Mazurek, K. Paprocki, P. Mikołajczak, *RHEED intensity oscillations observed during the growth of  $CaF_2$  on  $Si(111)$* , Physical Review B57 (1998) 12443.
15. A. Daniluk, P. Mazurek, K. Paprocki, P. Mikołajczak, *RHEED intensity oscillations observed during the growth of  $YSi_{2-x}$  on  $Si(111)$  substrates*, Surface Science 391 (1997) 226.
14. A. Daniluk, P. Mazurek, K. Paprocki, P. Mikołajczak, *Monte-Carlo simulation of  $Ge$  on  $Si(111)$  MBE growth: Analysis of percolative structure*, Thin Solid Films 306 (1997) 220.
13. A. Daniluk, P. Mazurek, K. Paprocki, P. Mikołajczak, *Distributed growth model used for the interpretation of RHEED intensity oscillations observed during the growth of  $Pb$  on  $Si(111)$* , substrates, Thin Solid Films 306 (1997) 228.
12. A. Daniluk, and P. Mikołajczak, *Perkolacyjne modelowanie wzrostu Stranski-Krastanov dla  $Ge/Si(111)$* , Abstrakt [w:] IV Seminarium Powierzchnia i Struktury Cienkowarstwowe, 18-21 IX Kazimierz Dolny (1996).
11. A. Daniluk, P. Mazurek, P. Mikołajczak, *RHEED intensity oscillations observed during growth of  $Ge$  on  $Si(111)$  substrates*, Surface Science 369 (1996) 91.
10. W. I. Gruszecki, M. Matuła, A. Daniluk, Z. Krupa, *Increased heat emission in photosynthetic apparatus of rye subjected to light stress*, Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology 32 (1996) 67.

9. S. Krawczyk, A. Daniluk, *Solvent effects and vibrational dependence in electrochromic spectra of carotenoids*, Chemical Physics Letters 236 (1995 ) 431.
8. A. Daniluk, P. Mazurek, K. Paprocki, P. Mikołajczak, *Epitaxial growth of YSi<sub>2-x</sub> films on Si(111) substrates*, IF UMCS Scientific Report 1995, ed. A. Baran, Institute of Physics, Maria Curie-Skłodowska University, 49, Lublin 1995.
7. A. Daniluk, P. Mazurek, K. Paprocki, P. Mikołajczak, *RHEED intensity oscillations observed for growing films Ge/Si(111) at room temperature*, IF UMCS Scientific Report 1995, ed. A. Baran, Institute of Physics, Maria Curie-Skłodowska University, 47, Lublin 1995.
6. A. Daniluk, and P. Mikołajczak, *Growth of Ultrathin Films Composed of Si/Si and Pb/Si Analysed by the Distributed Growth Model*, Abstract of the Workshop on MBE Growth Physics and Technology, December 12-14 Warsaw (1994).
5. C. W. Domański, A. Daniluk, *Z badań nad preferencjami i symboliką barw*, Annales UMCS Sect. J. Vol. 7 (1994) 37.
4. A. Daniluk, *Statystyczny program obliczeniowy. Test Psychologiczno-Pedagogiczny*, Annales UMCS Sect. J. Vol. 6, (1993) 213.
3. Z. Mitura, A. Daniluk, *Studies on RHEED oscillations at low glancing angles*, Surface Science 277 (1992) 229.
2. Z. Mitura, A. Daniluk, M. Stróżak, M. Jałochowski, A. Smal and M. Subotowicz, *Analysis of Shapes of RHEED Intensity Oscillations Observed for Growing Films*, Proceedings of XX International School of Semiconducting Compounds, Jaszowiec, 1991, Acta Physica Polonica A80 (1991) 365.
1. Z. Mitura, A. Daniluk, M. Stróżak, M. Jałochowski, A. Smal and M. Subotowicz, *Growth of Ultrathin Films Composed of Pb and/or In Analysed by the Distributed Growth Model*, Abstract of the 15-th International Seminar on Surface Physics in Przesieka, May 20-25, A-45, (1991).

**Prace konstrukcyjne (programy komputerowe) opublikowane w naukowych bazach danych o dostępie ogólnodostępnym. International CPC Program Library, School of Electronics, Electrical Engineering and Computer Science, Queen's University of Belfast <http://cpc.cs.qub.ac.uk/> (po doktoracie)**

3. Programy: RHEED\_DIFFx, *Catalogue Id: AETW*
2. Programy: RHEEDxxx, *Catalogue Id: ADUY*
1. Programy: GROWTHxxx, *Catalogue Id: ADVL*

**Opublikowane ćwiczenia, książki oraz skrypty akademickie (po doktoracie)**

16. A. Daniluk, *USB. Praktyczne programowanie z Windows API w C++*. Wydanie II, Helion 2013.
15. A. Daniluk, *Bluetooth. Praktyczne programowanie*, UMCS 2012 – skrypt akademicki.
14. A. Daniluk, *Pracownia programowania obiektowego*, UMCS 2011 – skrypt akademicki.
13. A. Daniluk, *USB. Praktyczne programowanie z Windows API w C++*, Helion 2009.
12. A. Daniluk, *RS 232C - praktyczne programowanie. Od Pascala i C++ do Delphi i Buildera*. Wydanie III, Helion 2007.

11. A. Daniluk, *C++Builder Borland Developer Studio 2006. Kompendium programisty*, Helion 2006.
10. A. Daniluk, *C++Builder 2006. Ćwiczenia praktyczne*, Helion 2006.
9. A. Daniluk, *C++Builder. Kompendium programisty*, Helion 2003.
8. A. Daniluk, *C++Builder 6. Ćwiczenia zaawansowane*, Helion 2003.
7. A. Daniluk, *C++Builder 6. Ćwiczenia praktyczne*, Helion 2003.
6. A. Daniluk, *ABC Delphi 7*, Helion 2003.
5. A. Daniluk, *ABC Delphi 6*, Helion 2002.
4. A. Daniluk, *Delphi 6. Nowe narzędzia obliczeniowe*, Helion 2002.
3. A. Daniluk, *RS 232C - praktyczne programowanie. Od Pascala i C++ do Delphi i Buildera*.  
Wydanie II, Helion 2002.
2. A. Daniluk, *RS 232C - praktyczne programowanie. Od Pascala i C++ do Delphi i Buildera*,  
Helion 2001.
1. A. Daniluk, *C++ Builder 5. Ćwiczenia praktyczne*, Helion 2001.



31.05.2016