



KATEDRA INFORMATYKI STOSOWANEJ I MODELOWANIA

Wydział Inżynierii Metali
i Informatyki Przemysłowej

**AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA IM. STANISŁAWA
STASZICA W KRAKOWIE**

Dr hab. inż. Łukasz Rauch, prof. AGH

Kraków, 2024.08.05

Recenzja

pracy doktorskiej mgr inż. Mohammeda Javeeda Akhtera zatytułowanej "Design and Optimization of 2D Nanostructures based on Molybdenum".

Zlecenie na opracowanie recenzji otrzymałem od Rady Naukowej Instytutu Podstawowych Problemów Techniki pismem z dnia 25 maja 2024 roku. Pracę otrzymałem 6 czerwca 2024 roku. Po zapoznaniu się z rozprawą doktorską mgr inż. Mohammeda Javeeda Akhtera przedstawiam poniższą opinię.

1. PRZEDMIOT OCENY

Przedmiotem oceny jest praca doktorska składająca się z czterech rozdziałów zasadniczych oraz podsumowania z wnioskami i spisu literatury. Spis literatury obejmuje 233 pozycje. W spisie literatury zawarto ważne publikacje związane z tematyką rozprawy, w przeważającej większości opublikowane w ostatnich dwóch dekadach. Pracę uzupełniają streszczenia w języku polskim i angielskim oraz preambuła, w której autor przedstawia projekt naukowy, z jakim związane są jego badania oraz publikacje, w których już zostały opublikowane cząstkowe wyniki niniejszej pracy. Rozdziały 1-4 wnoszą następujące treści:

- Rozdział 1 wprowadza czytelnika w tematykę nanomateriałów, skupiając się głównie na grafenie i dwusiarczku molibdenu (MoS₂). Autor omawia podstawowe właściwości grafenu, podkreślając jego znaczenie jako jednoatomowej warstwy węgla o wyjątkowych właściwościach mechanicznych i elektronicznych. Następnie przechodzi do omówienia dichalkogenków metali przejściowych (TMD), w tym MoS₂, który jest głównym przedmiotem badań w pracy. Opisuje strukturę i właściwości MoS₂, wskazując na jego potencjalne zastosowania jako alternatywy dla grafenu, ze względu na jego unikalne właściwości mechaniczne i elektroniczne.

**Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie | Wydział inżynierii Metali
i Informatyki Przemysłowej | Katedra Informatyki Stosowanej i Modelowania**

al. A. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków, Polska

tel. +48 12 617 38 75, fax +48 12 617 28 89

e-mail: lrauch@agh.edu.pl, <http://home.agh.edu.pl/lrauch>



KATEDRA INFORMATYKI STOSOWANEJ I MODELOWANIA

Wydział Inżynierii Metali
i Informatyki Przemysłowej

**AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA IM. STANISŁAWA
STASZICA W KRAKOWIE**

W dalszej części rozdziału autor definiuje cele i założenia pracy, które koncentrują się na optymalizacji mechanicznych właściwości MoS₂ za pomocą algorytmów ewolucyjnych. Przedstawia również ogólny zarys proponowanej techniki badawczej, która obejmuje modelowanie wytrzymałości MoS₂ i zastosowanie algorytmów ewolucyjnych w procesie optymalizacji. Autor podkreśla znaczenie zastosowania wielokryterialnej optymalizacji do uzyskania optymalnych właściwości mechanicznych nanostruktur na bazie MoS₂, co ma potencjalne zastosowanie w zaawansowanych technologicznie urządzeniach. Rozdział kończy się krótkim podsumowaniem oraz omówieniem zakresu pracy, który obejmuje szczegółowe badania teoretyczne i praktyczne niezbędne do osiągnięcia wyznaczonych celów badawczych.

- Rozdział 2 pracy skupia się na symulacjach dynamiki molekularnej (MD), które są metodą symulacji komputerowej wykorzystującą zasady mechaniki do śledzenia ewolucji czasowej układu oddziałujących ze sobą atomów. Omówiono podstawy teoretyczne dynamiki molekularnej, w tym równania ruchu, regulację temperatury oraz ciśnienia układu. Wyjaśniono również pojęcie zespołów statystycznych oraz zastosowanie potencjału Stillinger-Webera do modelowania dwuwymiarowych materiałów takich jak MoS₂. Rozdział zawiera także procedurę przeprowadzania symulacji dynamiki molekularnej oraz opis narzędzi symulacyjnych, takich jak LAMMPS i OVITO, używanych do wizualizacji i analizy wyników symulacji.

W drugiej części rozdziału omówiono optymalizację ewolucyjną jako paradygmat wyszukiwania obliczeniowego. Przedstawiono różne warianty algorytmów ewolucyjnych oraz wyjaśniono, dlaczego algorytmy te są skuteczne w optymalizacji. Omówiono również warunki, w których algorytmy ewolucyjne są najbardziej efektywne, oraz ich ograniczenia. W szczególności, wskazano na znaczenie parametryzacji algorytmów ewolucyjnych oraz wyzwania związane z analizą wrażliwości i zbieżnością tych metod. Rozdział podkreśla potencjał zastosowania optymalizacji ewolucyjnej w projektowaniu nanostruktur MoS₂, szczególnie w kontekście materiałów o zadanych właściwościach mechanicznych.

- Rozdział 3 rozpoczyna się od wprowadzenia do znaczenia właściwości mechanicznych materiałów, podkreślając kluczową rolę elastyczności w ocenie wydajności mechanicznej monowarstwowych materiałów, takich jak MoS₂. Następnie przedstawiono metody eksperymentalne i symulacyjne służące do pomiaru elastyczności, z naciskiem na symulacje molekularne. Omówiono szczegółowo wady

**Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie | Wydział inżynierii Metali
i Informatyki Przemysłowej | Katedra Informatyki Stosowanej i Modelowania**

al. A. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków, Polska

tel. +48 12 617 38 75, fax +48 12 617 28 89

e-mail: lrauch@agh.edu.pl, <http://home.agh.edu.pl/lrauch>



KATEDRA INFORMATYKI STOSOWANEJ I MODELOWANIA

Wydział Inżynierii Metali
i Informatyki Przemysłowej

**AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA IM. STANISŁAWA
STASZICA W KRAKOWIE**

atomowe w monowarstwowym MoS₂, w tym mechanizmy powstawania defektów, takie jak wakancje siarki i anty-symetryczne defekty, oraz ich wpływ na właściwości mechaniczne materiału.

W dalszej części rozdziału przeprowadzono symulacje mające na celu zbadanie warunków stabilności elastycznej w układach krystalicznych, ze szczególnym uwzględnieniem materiałów dwuwymiarowych. Wyniki symulacji elastyczności monowarstwowego MoS₂ zostały zaprezentowane dla materiałów wolnych od wad oraz z losowymi defektami wakancyjnymi. Analiza wyników wykazała istotny wpływ tych defektów na właściwości mechaniczne, takie jak moduł sprężystości. Rozdział kończy się podsumowaniem wyników i ich znaczenia dla przyszłych badań nad optymalizacją i projektowaniem nanostruktur MoS₂ z wykorzystaniem algorytmów ewolucyjnych.

- Rozdział 4 omawia zastosowanie bioinspirowanych algorytmów ewolucyjnych do optymalizacji monowarstwy MoS₂. Podkreśla znaczenie metod obliczeniowych jako alternatywy dla tradycyjnych eksperymentów, które mogą być kosztowne obliczeniowo. W szczególności, rozdział koncentruje się na projektowaniu nanostruktur o zadanych właściwościach mechanicznych, wykorzystując algorytmy ewolucyjne zintegrowane z metodą MD. Celem badania jest określenie optymalnych rozmiarów pustek w monowarstwie MoS₂, aby osiągnąć wymagane właściwości sprężyste. Algorytmy ewolucyjne, inspirowane naturalną selekcją, są stosowane do rozwiązywania złożonych problemów związanych z projektowaniem nanomateriałów, w tym przypadku prowadzących do identyfikacji i rozmiarowania pustek w nanoszlachach MoS₂.

Znaczenie tego badania polega na udowodnieniu zdolności proponowanej metody do dokładnego otrzymywania nanostruktur o predefiniowanych właściwościach mechanicznych poprzez strategiczne wprowadzenie eliptycznych pustek w nanoszlachach MoS₂. Ta metoda umożliwia kontrolowaną manipulację właściwościami mechanicznymi tych materiałów, oferując potencjalne postępy w dostosowywaniu zachowania materiału do specyficznych zastosowań. Rozdział rozpoczyna się od omówienia wyzwań związanych z zapotrzebowaniem na materiały o dostosowanych właściwościach w nanotechnologii i podkreśla wyjątkowe właściwości mechaniczne, elektryczne i chemiczne MoS₂.

Łączna objętość tekstu pracy wraz ze spisem literatury wynosi 133 strony.

**Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie | Wydział inżynierii Metali
i Informatyki Przemysłowej | Katedra Informatyki Stosowanej i Modelowania**

al. A. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków, Polska

tel. +48 12 617 38 75, fax +48 12 617 28 89

e-mail: lrauch@agh.edu.pl, <http://home.agh.edu.pl/lrauch>



KATEDRA INFORMATYKI STOSOWANEJ I MODELOWANIA

Wydział Inżynierii Metali
i Informatyki Przemysłowej

**AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA IM. STANISŁAWA
STASZICA W KRAKOWIE**

2. OCENA PRACY

Ogólna ocena

Praca doktorska mgr inż. Mohammeda Javeeda Akhtera pt. "Design and Optimization of 2D Nanostructures based on Molybdenum" stanowi ważny wkład w dziedzinie nauk technicznych, szczególnie w zakresie projektowania i optymalizacji nanostruktur dwuwymiarowych opartych na MoS₂. Praca ta dotyczy zarówno teoretycznych, jak i praktycznych aspektów badania własności mechanicznych MoS₂ oraz optymalizacji jego struktury za pomocą algorytmów ewolucyjnych.

Mocnymi stronami pracy jest przede wszystkim wybór tematu oraz dobór odpowiedniej metodyki badań. Temat pracy jest aktualny i istotny z punktu widzenia rozwoju nowoczesnych technologii, szczególnie w kontekście miniaturyzacji urządzeń elektronicznych i sensorów. Dwuwymiarowe materiały, takie jak MoS₂, mają ogromny potencjał w zastosowaniach przemysłowych, co czyni badania przedstawione w pracy szczególnie wartościowymi. Praca wykorzystuje zaawansowane techniki symulacyjne, takie jak statyka i dynamika molekularna, co pozwala na dokładne badanie własności mechanicznych wirtualnie wytworzonych materiałów. Wykorzystanie algorytmów ewolucyjnych do optymalizacji struktury jest innowacyjne i świadczy o bardzo dobrym rozeznaniu Autora w obszarze metod optymalizacji wykorzystywanych w optymalizacji wielokryterialnej. Praca dostarcza cennych informacji na temat wpływu defektów strukturalnych na własności mechaniczne MoS₂. Wyniki te mogą być bezpośrednio wykorzystane do projektowania nanostruktur o dedykowanych własnościach.

Do słabszych stron należy z pewnością przegląd literatury, który jest bardzo obszerny, a jednak brakuje w nim krytycznego spojrzenia na istniejące badania. Warto byłoby bardziej szczegółowo omówić, jakie luki w aktualnej wiedzy istnieją i jak praca Autora je wypełnia. Ponadto, można mieć wrażenie, że przegląd literatury znajduje się we wszystkich rozdziałach pracy, co w tym gąszczu informacji bardzo utrudnia identyfikację wkładu, który w rozwój nauki wniósł sam Autor. Wyniki badań są prezentowane w sposób przejrzysty, jednakże brakuje głębszej analizy porównawczej z wynikami innych badaczy. Takie porównanie mogłoby wzmocnić wiarygodność i znaczenie przedstawionych wyników. Chociaż praca teoretyczna jest wykonana bardzo dobrze, brakuje w niej dyskusji na temat potencjalnych wyzwań związanych z praktycznym wdrożeniem wyników badań, o ile w ogóle jest taki potencjał patrząc na

**Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie | Wydział inżynierii Metali
i Informatyki Przemysłowej | Katedra Informatyki Stosowanej i Modelowania**

al. A. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków, Polska

tel. +48 12 617 38 75, fax +48 12 617 28 89

e-mail: lrauch@agh.edu.pl, <http://home.agh.edu.pl/lrauch>



KATEDRA INFORMATYKI STOSOWANEJ I MODELOWANIA

Wydział Inżynierii Metali
i Informatyki Przemysłowej

**AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA IM. STANISŁAWA
STASZICA W KRAKOWIE**

możliwości obecnych technologii. Warto byłoby omówić, jakie kroki są niezbędne, aby przekształcić teoretyczne wyniki w rzeczywiste zastosowania.

Istotne uwagi szczegółowe

Sumarycznie oceniam pracę pozytywnie. Układ rozdziałów utrzymany jest w klasycznej konwencji – najpierw przedstawiony jest stan literaturowy, czyli część analityczna, a następnie część syntetyczna zawierająca badania przeprowadzone przez Doktoranta oraz ich wyniki, choć jak już zostało wspomniane wcześniej przegląd pozycji literaturowych jest wplatany w treść wszystkich rozdziałów pracy. Szczegółowa analiza poszczególnych badań opisanych w pracy budzi jednak pewne wątpliwości. Moje główne krytyczne lub dyskusyjne uwagi są następujące:

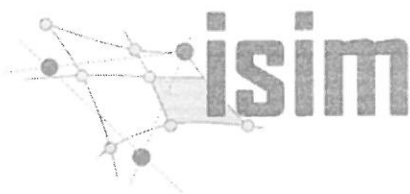
1. Tytuł pracy „*Design and Optimization ...*” już jest dla mnie dyskusyjny. W końcu projektowanie jest niczym innym jak zastosowaniem odpowiednich metod optymalizacji, które pozwalają osiągnąć zakładane parametry/własności. Jeśli mówimy o projektowaniu procesów, wówczas chcemy osiągnąć parametry procesu, które pozwolą nam wyprodukować produkt o odpowiednich własnościach – parametrów procesu poszukuje się najczęściej z wykorzystaniem symulacji numerycznych, które są częścią funkcji celu metod optymalizacji. Podobnie, gdy projektuje się materiał, wówczas poszukuje się optymalnych własności, dokładnie jak w przypadku niniejszej pracy, gdzie symulacje numeryczne metodą MD stanowią obliczeniową część funkcji celu zastosowanej metody optymalizacji. Czym zatem różni się w rozumieniu Autora pracy *design* od *optimization* i czy te dwa sformułowania w tytule pracy nie są swego rodzaju powtórzeniem?
2. W pracy można zauważyć bardzo dobre przygotowanie warsztatu związanego z symulacjami numerycznymi metodą MD, natomiast dużo słabsze przygotowanie warsztatu związanego z optymalizacją, a przynajmniej słabsze przygotowanie opisu przeprowadzonych badań. Niniejsza lista przedstawia uwagi związane właśnie z tym aspektem:
 - 2.1. Opis optymalizacji wzorem 4.1, w tym funkcji celu, może przedstawiać chyba każdą optymalizację zmierzającą do minimum, gdzie rozwiązaniem optymalnym jest zero. Następnie w rozdziale 4.4 Autor przedstawia przykładowe wyniki optymalizacji, gdzie zapewne musiał zdefiniować funkcję celu precyzyjnie, choć nadal opisuje ją tylko tekstowo, a nie podaje wzoru. Można się tylko domyślić, że jest to pierwiastek sumy kwadratów różnic parametrów P_{11} i P_{ref11} oraz P_{22} i P_{ref22} . Ponadto, na podstawie opisu w pracy, gdzie Autor wspomina o możliwości zdefiniowania w funkcji celu innych

**Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie | Wydział inżynierii Metali
i Informatyki Przemysłowej | Katedra Informatyki Stosowanej i Modelowania**

al. A. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków, Polska

tel. +48 12 617 38 75, fax +48 12 617 28 89

e-mail: lrauch@agh.edu.pl, <http://home.agh.edu.pl/lrauch>



KATEDRA INFORMATYKI STOSOWANEJ I MODELOWANIA

Wydział Inżynierii Metali
i Informatyki Przemysłowej

**AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA IM. STANISŁAWA
STASZICA W KRAKOWIE**

własności niż mechaniczne, nasuwa się również pytanie jak powinna być zdefiniowana dla nich funkcja celu i czy porównanie dwóch skalarów wystarczy czy może należy porównać oczekiwane własności inaczej? W szczególności pytanie to może być istotne, gdy analizowane są własności magnetyczne i ich uwarunkowanie na brzegach pustek.

- 2.2. Jak zdefiniowany jest wektor **ch**? Czy są to tylko dwie wartości g_1 i g_2 , co wynikałoby z rysunku 4.2? Jeśli tak, to jakie ograniczenia zostały narzucone na te parametry i czy wynikają one z rozmiaru przyjętej domeny czy też są wynikiem ograniczeń technologicznych lub materiałowych?
- 2.3. Na stronie 101 Autor pisze, że nie ma możliwości osiągnięcia minimum funkcji celu w zerze (co zwykle jest prawdą), ale akceptowalne są dla Niego małe odchyłki cyt. „... *a small difference between the reference and obtained properties might also be acceptable* ...” – co to w praktyce oznacza? W momencie gdy nie wiadomo, jak zdefiniowana jest funkcja celu (nie wiadomo co oznacza norma we wzorze 4.1), to ciężko jest stwierdzić, jaka wartość jest satysfakcjonująca. Ta sama uwaga dotyczy wartości błędów przedstawionych w tabeli 4.1. Ponadto, Autor powinien zaprezentować wartość funkcji celu, przy jakiej skończył obliczenia, a nie przedstawiać jej wykres na rysunku 4.6, gdzie można jedynie domyślać się wartości z zaprezentowanej skali.
- 2.4. Definicja funkcji celu i jej wartości mogą decydować o warunku stopu. W pracy Autor przyjął liczbę iteracji jako jedyny warunek stopu optymalizacji, podczas gdy pozostałe warunki nie są wzięte pod uwagę, choć wielokrotnie Autor wspomina w pracy o efektywności obliczeniowej. Przyjęcie progu błędu jako warunku końca obliczeń mogłoby je znacząco przyspieszyć.
- 2.5. Efektywność obliczeniowa optymalizacji metodami inspirowanymi naturą była wiele razy podnoszona w pracy. Niestety nic nie wiadomo o czasach obliczeń, a także nie wiadomo jak został zrównoleglony cały proces obliczeń. Autor wspomina jedynie na stronie 108, że zastosowane zostało podejście do zrównoleglenia, natomiast nie opisuje jak dobrane zostały parametry obliczeń równoległych, jak wyglądała synchronizacja. Biorąc pod uwagę koszt obliczeniowy, jest to zagadnienie bardzo ciekawe.
- 2.6. Mocną stroną algorytmów ewolucyjnych jest możliwość ich stosowania w optymalizacji wielokryterialnej, co również Autor opisuje w pracy (strona 60). W niniejszym zagadnieniu ma to niebagatelne znaczenie, ponieważ z jednej strony maksymalizować można elastyczność materiału, zwiększając udział pustek, a minimalizując tym samym wagę lub inne własności materiału. Jeśli taki lub podobny problem jest rozwiązywany,



KATEDRA INFORMATYKI STOSOWANEJ I MODELOWANIA

Wydział Inżynierii Metali
i Informatyki Przemysłowej

**AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA IM. STANISŁAWA
STASZICA W KRAKOWIE**

wówczas uzasadnione jest użycie dedykowanego algorytmu wielokryterialnego lub inspirowanego naturą, ale konieczne jest przedstawienie obliczeń wyznaczających front Pareto. Jeśli brakuje drugiego kryterium, można się zastanawiać nad użyciem deterministycznych algorytmów optymalizacji, które w rozwiązaniach jednokryterialnych i nie wielomodalnych mogą dać satysfakcjonujące wyniki w bardzo krótkim czasie. Czy w tym przypadku można byłoby użyć takich algorytmów, a jeśli tak, to jakie kryteria Autor proponowałby, aby wziąć pod uwagę?

3. Jednym z elementów automatyzacji całego procesu obliczeń jest generowanie wirtualnego materiału, który stanowi wejście do symulacji numerycznych, a który jest wynikiem działania algorytmu optymalizacji. Autor nie wyjaśnia, jak wykonywany jest ten etap obliczeń. To pytanie również nasuwa się w rozdziale 3, gdzie generowany jest materiał z defektami – nie mogłem znaleźć w pracy wyjaśnienia jak wygenerowane zostały te nanostruktury, czy losowość była zgodna z rozkładem normalnym, czy wykorzystany został jakiś inny algorytm generowania losowych defektów?
4. Praca porusza zagadnienie obecności w nanostrukturze jednej pustki o kształcie eliptycznym. Jeśli chodzi o materiały o własnościach anizotropowych, ciekawe byłoby rozważenie kształtów nieregularnych lub różnej liczby pustek w materiale (patrz publikacje w obszarze reprezentatywnych elementów objętościowych <<RVE>> i statystycznie podobnych RVE, czyli <<SSRVE>>). W pracy temat ten nie jest poruszony, choć teoretycznie możliwy do rozważenia. Pytanie czy w przypadku tych materiałów rozwiązanie takie miałoby sens, a jeśli tak, to jakich wymagałoby zabiegów, aby wprowadzić te obliczenia w życie wykorzystując symulacje MD i optymalizację ewolucyjną? To z pewnością wzbogaciłoby treść rozdziału 4.4 o nowe nietrywialne przypadki obliczeń.
5. Rozszerzając komentarz przedstawiony w poprzedniej uwadze pozostaje spytać o możliwość jednoczesnego generowania pustek i losowy układ defektów w materiale, co mogłoby przybliżyć materiał wytworzony w warunkach przemysłowych – taki, gdzie pustki w materiale byłyby działaniem zamierzonym, a defekt skutkiem ubocznym. Czy takie rozwiązanie byłoby możliwe do przeanalizowania z wykorzystaniem zaproponowanej metodyki i czy ewentualnie stanowiłoby wyzwanie na jakimś etapie obliczeń?

Mniej istotne uwagi szczegółowe

1. Przedstawiona w pracy teza w zasadzie nie jest postawiona jako klasyczna teza, a sformułowana jako wyzwanie. Teoretycznie jest to dopuszczalnie i praca doktorska



KATEDRA INFORMATYKI STOSOWANEJ I MODELOWANIA

Wydział Inżynierii Metali
i Informatyki Przemysłowej

**AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA IM. STANISŁAWA
STASZICA W KRAKOWIE**

formalnie nie musi posiadać tezy, aczkolwiek tu aż się prosi o sformułowanie, iż połączenie metod symulacji numerycznych z wykorzystaniem dynamiki molekularnej oraz efektywnych obliczeniowo metod optymalizacji inspirowanych naturą pozwoli na zaprojektowanie monowarstwowych materiałów MoS₂ z wymaganymi własnościami mechanicznymi. Czy Autor mógłby zaproponować sformułowanie tezy, którą broni niniejsza praca?

2. Autor kilka razy w pracy pisze o realizacji badań w liczbie mnogiej np.: „we” lub „authors of this study” podczas, gdy jest jedynym autorem rozprawy. Zakładam, że to przyzwyczajenie nabyte podczas pisania artykułów wraz ze współautorami.
3. Skopiowane lub mylnie opisane są fragmenty tekstu wyglądające jak z artykułów – str. 109: „Table 4.1 in the paper ... „. Podobnie zakładam, iż jest to drobna pomyłka wynikająca z przyzwyczajenia.
4. Pracę czyta się dobrze, jest napisana poprawnym językiem angielskim, jednakże zawiera pewne drobne błędy stylistyczne i gramatyczne, które mogłyby zostać poprawione w celu zwiększenia czytelności tekstu. Natomiast sama struktura pracy jest dobrze zaplanowana, choć bardzo często w jednym rozdziale znaleźć można opis różnych zagadnień przeplatanych ze sobą jak np.: dynamika molekularna i optymalizacja w rozdziale 2, co powoduje, że czytelnik może się pogubić – zawartość takiego rozdziału mogłaby posłużyć za temat dwóch odrębnych rozdziałów głównych w pracy.

Podsumowując ocenę pracy stwierdzam, że Doktorant udowodnił dobre przygotowanie do prowadzenia oryginalnych badań podstawowych w zakresie inżynierii mechanicznej, a w szczególności w zakresie badań nad projektowaniem monowarstwowych nanostruktur materiałowych. Potwierdził On swoją wiedzę i zrozumienie problemów w tym zakresie. Wykazał się biegłością w stosowaniu nowoczesnych metod modelowania procesów oraz optymalizacji. Z drugiej strony, w pracy jest kilka aspektów wymagających wyjaśnienia, które wymieniałem w niniejszej recenzji. Te niedociągnięcia jednak nie podważają faktu, iż Autor samodzielnie rozwiązał istotne problemy naukowe. Stąd sumaryczna ocena pracy jest pozytywna.

3. UWAGI EDYTORSKIE

Praca napisana jest przejrzysto w aspekcie merytorycznym. Od strony edytorskiej również



KATEDRA INFORMATYKI STOSOWANEJ I MODELOWANIA

Wydział Inżynierii Metali
i Informatyki Przemysłowej

**AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA IM. STANISŁAWA
STASZICA W KRAKOWIE**

przygotowana jest bardzo starannie. Ciężko znaleźć potknięcia Autora lub niedomówienia, które uchybiałyby pracy w sposób znaczący. Poniżej lista niedociągnięć natury edytorskiej i raczej drobnych błędów:

- w połowie pracy brakuje numerów stron – przed publikacją elektroniczną pracy warto byłoby uzupełnić ten brak;
- błędne oznaczenia rozdziałów – 3.6 jest dwa razy w spisie treści, a w samej treści jest rozdział 3, przypuszczalnie zamiast 3.6.2;
- rozdział zagnieżdżony 2.3.1 nie specjalnie ma sens skoro nie ma rozdziału 2.3.2 – jeśli już miałyby być wykonany podział na podrozdziały, to można było rozdział 2.3.1 poświęcić na ogólną charakterystykę potencjału Stillinger-Webera, a rozdział 2.3.2 na opis potencjału dla analizowanego materiału.

4. WNIOSEK KOŃCOWY

Podsumowując opinię należy stwierdzić, że Doktorant:

- wykazał się umiejętnością prowadzenia badań naukowych obejmujących zaplanowanie i wykonanie eksperymentów numerycznych, przeprowadzenie obliczeń optymalizacji, pozyskanie danych do przeprowadzenia analizy numerycznej i modelowania matematycznego oraz integracji metod obliczeniowych, tworząc metodykę umożliwiającą projektowanie nanostruktur materiałowych;
- biegle porusza się w obszarze nowoczesnych materiałów ich własności i zastosowań, a także przeprowadził wnikliwą analizę możliwości ich projektowania z wykorzystaniem nowoczesnych metod obliczeniowych, pozwalających na opracowanie struktur materiałowych w sposób teoretyczny nawet, jeśli ich wytworzenie byłoby obecnie niewykonalne z wykorzystaniem znanych technologii;
- przeprowadził analizę wybranych metod numerycznych, poprawnie je zastosował i umiejętnie dobrał własności materiałowe, aby przeprowadzane symulacje były zgodne z rzeczywistym zachowaniem materiału, co ma kluczowe znaczenie dla wiarygodności prowadzonych obliczeń.

Recenzja pracy zawiera uwagi krytyczne i dyskusyjne komentarze, ale nie umniejszają one sumarycznej merytorycznej wartości pracy. Praca jest bardzo obszerna, a wykonane badania stanowią ciekawy wkład w rozwój nauki. Doceniam warsztat badawczy i dobór metod, którymi posłużył się Autor pracy i uważam, że pozytywne aspekty przeprowadzonych przez Autora



KATEDRA INFORMATYKI STOSOWANEJ I MODELOWANIA

Wydział Inżynierii Metali
i Informatyki Przemysłowej

**AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA IM. STANISŁAWA
STASZICA W KRAKOWIE**

badan oraz wykazane przez Niego umiejętności w rozwiązywaniu problemów naukowych przeważają nad krytycznymi uwagami do pracy. Sumaryczna ocena pracy jest pozytywna, a rozprawa stanowi samodzielne rozwiązanie problemu naukowego w dyscyplinie inżynierii mechanicznej i spełnia wymagania zawarte w Art. 187. Ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. (Prawo o Szkolnictwie Wyższym i Nauce, Dz. U. 2022, poz. 574). W związku z tym wnoszę o dopuszczenie Pana mgr inż. Mohammeda Javeeda Akhtera do dalszych etapów przewodu doktorskiego.