

Dr hab. inż. Dariusz M. Perkowski, prof. PB
Politechnika Białostocka
Wydział Mechaniczny
Katedra Mechaniki i Informatyki Stosowanej
Ul. Wiejska 45C, Białystok 15-351
Email: d.perkowski@pb.edu.pl, tel. +48 571 443 034

Białystok, 30 listopada 2020 r.



Recenzja pracy doktorskiej mgr inż. Mikołaj Bilski
„Badania współczynnika Poissona mikroskopowych modeli materiałów za pomocą symulacji komputerowych”

1. Podstawa opracowania recenzji:

Pismo Dziekana Wydziału Inżynierii Mechanicznej Politechniki Poznańskiej dr hab. inż. Olafa Ciszaka o numerze DM.63.221.2020 z dnia 30.09.2020r.

2. Opis zawartości pracy:

Recenzowana rozprawa doktorska dotyczy symulacji komputerowych z wykorzystaniem metody Monte Carlo do wyznaczania właściwości mechanicznych, głównie współczynnika Poissona dla układów wielocząsteczkowych. Doktorant podjął się tematyki trudnej, a jednocześnie bardzo aktualnej, o możliwościach aplikacyjnych w zastosowaniach inżynierskich. Wykazując się dobrą znajomością literatury związanej z badaną problematyką sformułował i rozwiązał szereg przypadków dotyczących wyznaczania właściwości mechanicznych hipotetycznych układów, a w szczególności na analizie współczynnika Poissona. W większej części pracy poświęcono uwagę dwuwymiarowym układom składających się z twardych heksametrów cyklicznych. W rozprawie doktorskiej zostały rozważone różne kształty molekuł. Interesującym faktem, poruszonym w pracy jest, że w przypadku struktury chiralnej, układ wykazuje właściwości anomalne tj. współczynnik Poissona przyjmuje wartości ujemne. W literaturze układy takie nazywane są auksetykami. W przedstawionej do recenzji pracy doktorskiej Doktorant podjął się rozwiązania tego problemu. Określony cel pracy oraz jej zakres w ocenie recenzenta jest jak najbardziej prawidłowy i zasadny.

Perkowski

Recenzowana rozprawa doktorska stanowi opracowanie zawierające 132 strony. Praca składa się z 6 rozdziałów, spisu literatury oraz dodatku. Doktorant rozpoczął od omówienia aktualności badanych zagadnień, ich możliwości aplikacyjnych. Rozdział pierwszy „Wprowadzenie” zawiera wstęp do problematyki związanej z podstawowymi informacjami z wiązaniem z auksetykami oraz cząstkami twardymi. W niniejszym rozdziale Doktorant przedstawił rodzaje materiałów auksetycznych, makrostruktur auksetycznych oraz ich zastosowań inżynierskich. Ponadto, przedstawione zostały modele oddziaływania twardych cząstek oraz informacje na temat twardych kul, dysków oraz multimetrów cyklicznych. Na podstawie przeglądu literatury Doktorant formułuje cele oraz hipotezy badawcze rozprawy doktorskiej.

Rozdział 2 zatytułowany „Zastosowane metody obliczeniowe” zawiera podstawy teoretyczne użytych modeli oraz metod obliczeniowych. Na wstępie Doktorant skupia się na podstawach mechaniki ośrodków ciągłych tj. definicji tensora odkształcenia, naprężenia oraz równań konstytutywnych. Na podstawie przeprowadzonej analizy Doktorant formułuje wnioski, że w przypadku materiałów izotropowych spełnienie warunku stabilności termodynamicznej zapisane wzorem (2.11) jest możliwe, gdy współczynnik Poissona przyjmuje wartości z zakresu zgodnie ze wzorem (2.17). W rozdziale 2.2 została opisana metoda Monte Carlo w zastosowaniu do ewolucji symulowanego układu poprzez losowe generowanie kolejnych stanów na podstawie stanu wejściowego. Podstawowy schemat blokowy tej metody został przedstawiony na rysunku 2.1. W pracy jednak brakuje informacji na temat użytych narzędzi programistycznych lub gotowych aplikacji realizujących obliczenia numeryczne. Kolejne podrozdziały zawierają informacje na temat zmodyfikowanych wersji metody Monte Carlo dla zespołów kanonicznych (NVT) oraz izobaryczno-izotermicznych (NpT) z uwzględnieniem zmiany kształtu pudła symulacyjnego przy izotropowym ciśnieniu zewnętrznym lub tensorze naprężenia termodynamicznego. Istotnym faktem niniejszego rozdziału jest omówienie metody Frenkla-Ladda stosowanej do obliczania energii swobodnej lokalizacji przejść fazowych. Doktorant kończy rozdział krótkim omówieniem sposobu obliczania przybliżonej objętości swobodnej oraz generatora liczb pseudolosowych użytego w pracy opracowanego przez Mersenne Twister [134].

Kolejny rozdział zatytułowany „Układy twardych heksametrów cyklicznych” jest poświęcony badaniom symulacyjnym przy użyciu metody Monte Carlo w zespole izobarycznym NpT oraz kanonicznym NVT . Pierwszy cel badawczy zrealizowany w niniejszym rozdziale dotyczył informacji o równaniach stanu układów tj. ich struktury oraz analizie

Pełkowski

właściwości sprężystych otrzymywanych układów. Następnie przebadano energię swobodną faz oraz lokalizacji przejść fazowych I rodzaju.

Rozdział czwarty zatytułowany jest „Metoda modyfikacji współczynnika Poissona kryształów” poświęcony jest zaproponowanej przez Doktoranta metodzie modyfikacji współczynnika Poissona kryształów. Ideą tej metody jest wprowadzenie do pewnego materiału A równoległych warstw, innym materiałem B. Pokazano to na przykładzie dwóch materiałów, gdzie przyjęto, że materiał A jest kryształem HD a materiał B, to twardy heksamer cykliczny HCH. Przebadano dwa typy ułożenia warstw, a mianowicie poziomy H oraz pionowy V. Zbadano również wpływ liczby warstw znajdujących się w badanej strukturze. W niniejszym rozdziale Doktorant dla przypadku dwuwymiarowych układów anizotropowych wyprowadził analityczną postać współczynnika Poissona dla przypadku ogólnego (patrz. (4.3)). W rozdziale 4.1.3 na podstawie zbieżności otrzymanych wyników symulacji współczynnika Poissona Doktorant w funkcji wielkości $N = 224, 896, 2016$ stwierdził, iż układ przy $N = 224$ można uznać za reprezentatywny. Na rysunku 4.3 zestawiono wyniki współczynnika Poissona dla różnych rozmiarów układów N oraz w funkcji liczby rzędów/kolumn twardych heksamerów cyklicznych w pojedynczej warstwie. Z rysunku 4.3 widać, że przy odpowiedniej liczbie warstw HCH współczynnik Poissona przyjmuje wartości ujemne, a więc zaproponowana modyfikacja pozwala na utworzenie układu akustycznego. Podobnie na rysunku 4.4 można zaobserwować efekt koncentracji twardych heksamerów cyklicznych tj. w zależności od wielkości dysku (im większa średnica dysku HD) średni współczynnik Poissona już przy mniejszych stężeniach c przyjmuje wartości ujemne. Pan mgr inż. Mikołaj Bilski kończy rozdział podsumowaniem i propozycją modyfikacji kryształów przestrzennych na rysunku 4.5.

Piąty rozdział „Układy izotropowe o ekstremalnie dużych wartościach współczynnika Poissona” opisano modele dwuwymiarowych struktur składających się z binarnych twardych dysków (tj. o dwóch, nieznacznie różniących się średnicach). Niniejszy rozdział jest kontynuacją pracy [143], której Doktorant jest współautorem. Doktorant przebadał bardzo wiele układów, których schematy zostały przedstawiono na rysunkach 5.1, 5.2 oraz w Dodatku. Istotnym wnioskiem wypływającym z przeprowadzonej, szerokiej analizy jest fakt, że różnica rozmiarów twardych dysków HD nabiera znaczenia dopiero przy wysokich ciśnieniach (w dużych gęstościach). Doktorant tłumaczy ten fakt, iż wspólne oddziaływania wielu dysków zaczynają mieć dominujący wpływ na właściwości układu.

We wnioskach Pan mgr inż. Mikołaj Bilski omówił najważniejsze rezultaty rozprawy doktorskiej. Praca zawiera streszczenie w języku polskim oraz angielskim oraz spis literatury liczący 146 pozycji prac i monografii, które zostały przez Doktoranta wcześniej zacytowane.

3. Oryginalność pracy

W mojej ocenie oryginalne osiągnięcia pracy to:

1. Zaproponowanie metody modyfikacji współczynnika Poissona kryształów oraz przykład realizacji tej metody z wykorzystaniem układów twardych dysków oraz twardych heksamerów cyklicznych. Zaproponowana metoda może być stosowana do wcześniejszego prognozowania właściwości mechanicznych wytwarzanych struktur auksetycznych, nieauksetycznych i częściowo auksetycznych.
2. Analityczna postać wyrażenia do wyznaczania współczynnika Poissona w funkcji kąta przykładanego naprężenia, dla ogólnego przypadku 2D.
3. Wykorzystanie metod symulacji komputerowych przy zastosowaniu metody Monte Carlo i jej modyfikacji pozwoliło na zaprezentowanie wielu nowych wyników badań oraz możliwości lokalizacji przejść fazowych oraz obliczania właściwości sprężystych.

4. Wartości użytkowe pracy

Przedstawiona do oceny praca doktorska charakteryzuje się podstawowym charakterem badań, niemniej jednak uzyskane wyniki symulacji numerycznych przy użyciu metody Monte Carlo oraz jej modyfikacji można wykorzystać do modyfikacji wartości współczynnika Poissona oraz wyznaczania właściwości sprężystych. Zaproponowane podejście może być użyte przy projektowaniu nowych materiałów z żądanym współczynnikiem Poissona.

5. Uwagi krytyczne i dyskusyjne do pracy

Przedstawiona do recenzji praca jest oryginalna i wartościowa, napisana zwięźle i przejrzysto, zilustrowana licznymi wykresami i rysunkami. Zaproponowane i zastosowane metody analiz zagadnień związanych z wyznaczaniem właściwości sprężystych, współczynnika Poissona oraz lokalizacji przejść fazowych zasługują na uznanie. Ogólna ocena pracy przez recenzenta jest pozytywna. Rozprawa doktorska porusza ważny problem i przedstawia oryginalne i wartościowe rezultaty. Opracowane modele numeryczne podparte analizą zbieżności uzyskanych wyników pozwalają twierdzić, iż zaproponowane podejście może znaleźć szerokie uznanie.



Kwestie, które chciałbym wyjaśnić z Doktorantem są następujące:

1. Dlaczego Autor nie zaprezentował w rozprawie doktorskiej użytych narzędzi komputerowych tj.: użytych środowisk programistycznych, opracowanych przez Doktoranta programów komputerowych?
2. W tabeli 3.3 wartość energii swobodnej dla fazy prostej przy $d^* = 3$ lub 5 przyjmuje wartości ujemne, co to oznacza fizycznie?
3. Dlaczego wartość parametru anizotropii w jednym przypadku tj. d^* przyjęta wartość 0.500001 jest podana, aż z taką precyzją? Jaki to ma wpływ na prezentowane obliczenia?
4. Na jakiej podstawie uzyskiwano wyniki dla $N \rightarrow \infty$ na przykład w tabeli 3.6?
5. Na Rys. 3.43 zaprezentowano wyniki dotyczące deformacji belki bez powłoki oraz z powłoką o ujemnym współczynniku Poissona. Dlaczego Doktorant nie przedstawił wyników obliczeń dla naprężeń?

W pracy można znaleźć nieliczne tzw. uwagi redakcyjne, które pokrótce wymieniam poniżej:

1. W spisie „Wykaz ważniejszych oznaczeń” brakuje jednostek dla wprowadzonych. Podanie jednostek, którymi posługuje się Doktorant ułatwiło by czytanie rozprawy.
2. Str. 11, co oznacza wyrażenie „naprężenie zewnętrzne”?
3. Str. 16 jest „gwóździ” powinno być „gwoździ”.
4. Str. 32 wzór (2.23) co oznaczają stałe λ_1 oraz λ_2 . Wyjaśnienie tych stałych jest na stronie 43.
5. Str. 33, co oznacza „W efekcie, po odpowiednio dużej liczbie kroków, układ osiąga stan równowagi termodynamicznej”
6. Str. 85 jest „ n ” powinno być „ N ”.

6. Wniosek końcowy

Podsumowując stwierdzam, że w moim przekonaniu, praca spełnia warunki stawiane pracom doktorskim przez ustawę „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce”. Biorąc pod uwagę podstawowy charakter przedstawionych badań kwalifikowałbym ją do dziedziny nauk inżynierjno-technicznych w dyscyplinie *inżynieria mechaniczna* (art. 177 ust. 3 Ustawy z dnia 3 lipca 2018 r. Przepisy wprowadzające ustawę – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, Dz.U. z 2018 r., poz. 1669 oraz komunikat Centralnej Komisji do Spraw Stopni i Tytułów z dn. 30.04.2019 r.), której zakres obejmuje wnioskowaną przez mgr inż. Mikołaja Bilskiego



dyscyplinę *mechanika* (Rozporządzenie MNiSW z dnia 20 września 2018 r. w sprawie dziedzin i dyscyplin naukowych i artystycznych, Dz. U. z dnia 25 września 2018 r. poz. 1818). Biorąc powyższe pod uwagę, stawiam wniosek o dopuszczenie pracy mgr inż. Mikołaja Biłskiego do publicznej obrony.

Dariusz Pełkawski