

płk dr hab. inż. Krzysztof Dragan, prof. ITWL

Warszawa, 10.09.2026 r.

Instytut Techniczny Wojsk Lotniczych

ul. Ks. Bolesława 6

01-494 Warszawa

RECENZJA

rozprawy doktorskiej mgr inż. Sachina Poudela pt. „Scale Bridging Computational and Data-Driven Design of Microstructures in Multicomponent Alloys for Advanced Functional Materials”.

Podstawa

Recenzję opracowano na podstawie zlecenia Przewodniczącej Rady Dyscypliny Inżynieria Mechaniczna Politechniki Śląskiej (pismo nr RDJMe. 512.2.2026 z dnia 15.07.2026 r).

Do oceny przedstawiono następujące materiały:

1. Rozprawę doktorską w języku angielskim, liczącą 196 stron, obejmującą część monograficzną (rozdziały 1÷5 zawarte na stronach 1÷37), bibliografię odniesioną do tej części – obejmującą 41 pozycji (zawarte na stronach s. 38÷42) w tym z dwoma odnośnikami do bazy danych eksperymentalnych Zenodo. Praca zawiera Załącznik A z pełnymi tekstami siedmiu publikacji (s. 43–174) oraz Załącznik B z podpisanymi oświadczeniami współautorów (s. 175–196);
2. Streszczenia rozprawy w języku angielskim
3. Streszczenia rozprawy w języku polskim;
4. Rozszerzonego streszczenia w języku polskim obejmującego zakres i cel rozprawy, postawione cele i zdefiniowaną tezę, streszczenie metodologii badawczej oraz uzyskane wnioski. Dodatkowo streszczenie obejmuje listę publikacji wraz z deklaracją wkładu własnego.
5. Rozszerzone streszczenie w języku angielskim obejmujące analogiczne elementy jak streszczenie w języku polskim.

1. Ogólna i formalna charakterystyka pracy

Projektowanie nowych materiałów oraz wykorzystanie narzędzi wspartych wielomodalnym modelowaniem ich funkcjonalnych parametrów w tym w szczególności opartych o wymagania eksploatacyjne jest ciekawym zagadnieniem, które ma coraz większe zastosowanie w wielu gałęziach praktyki przemysłowej. W przedstawionym w pracy podejściu doktorant skupia się na trzech obszarach projektowych dla różnych zastosowań w inżynierii materiałowej. Głównym celem jest możliwość kształtowania parametrów użytecznych materiału jako odpowiedzi na stosowane deskryptory materiałowe. Przedstawiona do oceny rozprawa zawiera zbiór siedmiu

tematycznie powiązanych artykułów, poprzedzonych częścią monograficzną stanowiącą odniesienie do ich zawartości.

Część monograficzna obejmuje pięć rozdziałów o następującym układzie:

Rozdział 1 Introduction (Wprowadzenie) — rozdział obejmuje charakterystykę trzech badanych klas materiałów przedstawionych w pracy. Ponadto przedstawia opis podejścia stosowanego do modelowania w oparciu transformację deskryptorów dla parametrów materiałowych. Charakteryzowane w pracy klasy materiałów to: stopy wieloskładnikowe, materiały piezoelektryczne oraz interfejsy elektroda–elektrolit w ogniwach litowych. Dla każdej z klas materiałów autor wprowadza wstępną logikę deskryptorów i definiuje istotne ich parametry na kształtowanie własności materiałowych. Ciekawym i ilustrującym potrzebę działania w tym obszarze jest zestawienie przedstawione w tabelicy 1.1 (str. 3) które przypisuje każdej klasie materiałów wyzwanie projektowe i przyjęte w pracy podejście. W rozdziale tym autor definiuje też centralną konstrukcję pracy — pośredni stan materiału (mikrostruktura, stany naprężeń, orientacja i towarzyszące pola fizyczne) jako ogniwo między warstwą deskryptorów a odpowiedzią na poziomie komponentu. Całość schematycznie przedstawiono na (Rys. 1.1) — opisuje ona warstwową logikę deskryptorów i wykorzystanie metod bibliometrycznych i przetwarzania języka naturalnego (t.j. wektoryzacji wyszukiwań) do strukturyzacji danych literaturowych. W rozdziale tym autor wyznacza również główny zakres pracy oraz kierunki pomocnicze ukierunkowane na procesy obliczeniowe w szczególności z uwagi na pośredni proces projektowania (t.j. wsparcie w doborze materiałów i specyfikacji procesu).

Rozdział 2 Scientific Problems and Hypotheses (Problemy Naukowe i Hipotezy) - autor definiuje zagadnienia i luki badawcze oraz formułuje hipotezy badawcze. W pierwszej kolejności doktorant przedstawia krokowe podejście do projektowania poprzez modelowanie oparte o projektowanie, następnie przez obliczenia a finalnie dokonuje syntezy tych danych poprzez skalowane łączenie. Takie podejście można opisać jako następujące procesy:

- projektowanie obliczeniowe (obejmujące DFT, pole fazowe, MES, plastyczność przy skończonych odkształceniach),
- projektowanie oparte na danych,
- mikrostrukturę traktowaną jako zmienną projektową, a nie wyłącznie deskryptor charakteryzujący,
- zaawansowane materiały funkcjonalne.

Autor formułuje przegląd stanu wiedzy i identyfikuje pięć luk powiązanych tematycznie z wybranymi materiałami i przedstawia je w tabelicy (Tab. 2.1). Obejmują one wcześniej zidentyfikowane zagadnienia związane z procesem projektowania, modelowania i transferu parametrów, ale też wskazuje na znaczne rozrzuty i brak powiązania między procesami badawczymi w obszarze identyfikacji własności materiałowych w szczególności przy niedoborze danych.

Luki badawcze doktorant przekształca w problemy badawcze zidentyfikowane jako P1–P5, a te z kolei w dwupoziomą strukturę hipotez: tzw. Hipotezę główną CH przedstawiającą tzw. transfer międzyskalowy dla poszczególnych procesów oraz użycie fizycznych deskryptorów (dla różnych klas materiałów) obejmujące hipotezy H1–H4 z towarzyszącymi im kryteriami. Ponadto doktorant

formułuje tzw. propozycję syntetyzującą SPI jako możliwość odniesienia proponowanych rozwiązań dla poszczególnych klas materiałowych.

Autor definiuje pojęcia używane w dalszym wywodzie: Kluczowe jest zdefiniowanie transferu skalowanego tzw. (ang. scale-bridging) jako mechanizmu o dwóch własnościach:

- bezpośredniego transferu parametrów między skalami (np. stałe sprężystości z DFT do modelu pola fazowego),
- pośredniego wiązania deskryptorów, w którym wielkości opisujące skład, historię technologiczną, krystalografię i morfologię reprezentują informację z niższej skali.

Rozdział 3 Research Objectives (Cele badawcze) - w rozdziale przedstawiono cel ogólny i trzy cele szczegółowe (oznaczone jako O1 ÷ O3) odniesione tabelą powiązań z problemami i postawionymi w poprzednim rozdziale hipotezami. Cel ogólny został sformułowany jako opracowanie i zastosowanie wieloskalowych metod obliczeniowych łączących modelowanie fizyczne z metodami opartymi na danych, wiążących deskryptory materiałowe i stany pośrednie z odpowiedzią strukturalną i funkcjonalną.

Przedstawiony cel ogólny został uszczegółowiony na trzy cele badawcze:

- **Cel 1** – obejmuje opracowanie modeli wieloskalowych dla stopów w szczególności wspierających dobór materiału i procesu dla określania własności mechanicznych. Dokładność tych modeli jest następnie weryfikowana poprzez walidację krzyżową i ilościową co pozwala ona ocenić wrażliwość morfologii struktury na parametryzację temperaturową;
- **Cel 2** — obejmuje modelowanie odpowiedzi piezoelektrycznej dla aktuatorów i przetworników umożliwiających odzysk energii. W szczególności autor deklaruje możliwość modelowania odpowiedzi dla materiałów ceramicznych AlN oraz nanowłókien (PVDF/SnO₂);
- **Cel 3** — obejmuje ocenę niestabilności dendrytycznej sterowanej warstwą SEI i zbudowanie wieloskaźnikowych wytycznych projektowych dla oceny trwałości i niezawodności ogniw baterijnych.

W dalszej części rozdziału autor poprzez Tablicę 3.1 dokonuje powiązania przedstawionych celów z problemami badawczymi i hipotezami postawionymi w poprzednim rozdziale. Ponadto autor wprowadza istotne rozgraniczenie: prace obejmujące charakteryzowanie korozji w stali duplex oraz opis plastyczności (przedstawione w publikacjach P-VI i P-VII) traktowane są jako wkład wspierający i obejmujący weryfikację materiałów wielofunkcyjnych jako perspektywiczną.

Rozdział 4 Scale Bridging Design of Advanced Functional Materials (Wieloskalowe projektowanie zaawansowanych materiałów funkcjonalnych) – autor przedstawia merytoryczne podsumowanie uzyskanych wyników w przedstawionych trzech obszarach badawczych opisanych w trzech podrozdziałach oraz dokonuje syntezy uzyskanych wyników odnosząc się do wyników przedstawionych w publikacjach oraz integruje te wyniki w tablicy (Tab. 4.1).

W pierwszym opisywanym obszarze (podrozdział 4.1) przedstawiono podejście do możliwości wytwarzania materiałów o kształcie zbliżonym do gotowego z wykorzystaniem algorytmów (ang. AlloyManufacturingNet [P-I]) wraz z bezwymiarową funkcją celu $F(x, y)$ oraz deskryptorami o

interpretacji fizycznej jak i z powiązaniem trendu makroskopowego z mechanizmem atomowym. Ponadto przedstawiono trójfazowy model pola fazowego układu Al-Cu-Ni [P-III] zaimplementowany w modelu MOOSE, dla różnych stanów fazowych. Autor przedstawia również wykorzystanie tej samej metodologii badawczej badającej wpływ czynników skład-proces na odpowiedź powierzchniową dla stali wytwarzanych technikami przyrostowymi dokonując grupowania pierwiastków na rodziny ferrytyczne i austenityczne[P-VI].

Finalnie autor opisuje perspektywiczną filtrację znacznej ilości danych t.j. formuł tlenkowych i azotowych prowadzącą do wskazania typów tlenków jako wiodących kandydatów do dalszych testów.

W drugim opisywanym obszarze dotyczącym struktur piezoelektrycznych odniesiono się do metodologii przedstawionej w publikacji [P-II], w którym klasyfikacja wpływa na aktywację modułu regresyjnego a wyniki poprzez odpowiednią transformację wykorzystywane są w modelu MES. Autor przedstawia również możliwości kształtowania własności nanowłókien PVDF poprzez optymalizację morfologiczną a nie składnikową co uwidoczniło w publikacji [P-V]. Finalnie autor podsumowuje obszar badawczy stwierdzeniem, iż elementy ceramiczne i polimerowe wykorzystują różne dane wejściowego modelu, ale umożliwiają wykorzystanie podobnych zasad projektowania. Optymalizacja materiału jest określana przez reakcję wewnętrzną, podczas gdy to architektura elementu decyduje o tym, w jakim stopniu ta reakcja jest realizowana.

W obszarze ogniów autor opisuje problematykę kształtowania elementów strukturalnych baterii poprzez wykorzystanie procesu osadzenia elektrochemicznego. Autor wnioskuje w publikacji [P-IV], iż model pola fazowego ujawnia wzmacniające się sprzężenie zwrotne między morfologią, transportem i potencjałem osadzania. Dokonany przegląd przedstawiony w publikacji [P-IV] porządkuje relacje pomiędzy parametrami osadzania a strategią tłumienia sprzężenia wzmacniającego.

Finalnie autor dowodzi, że właściwości materiału i wydajności komponentu są odrębnymi etapami projektowania.

Rozdział zamyka opis pięciu schematów projektowych których brzmienie ma następującą postać:

1. Skład i parametry wytwarzania należy projektować łącznie;
2. Stan pośredni jest nośnikiem informacji między skalami, a spójność termodynamiczna dla parametrów modelu ma istotność równą zbieżności numerycznej;
3. Komponenty aktywne wymagają zrównoważenia dla stosowanych procesów projektowych a nie kształtowania pojedynczej właściwości;
4. Właściwości materiału i wydajność komponentu to odrębne etapy projektowania;
5. Modele oparte na danych wymagają ograniczeń fizycznych i etapowej walidacji, z jawnym rozróżnieniem modelu wstępnego od walidacyjnego.

Rozdział 5 Conclusions and Future Work (Wnioski i kierunki dalszych) - w rozdziale tym autor dokonuje podsumowania swojej pracy przez zestawienie realizacji celów przedstawionych w pracy poprzez odniesienie się do rozdziału 3:

Cel 1 — odnosi się do stopów konstrukcyjnych. Autor odwołuje się do opracowanej metody symulacyjnej dla wytwarzania elementów nośnych. Model oparty na danych umożliwia powiązanie parametrów procesu z wytrzymałością i sprężystością w układach

wieloskładnikowych co wskazano w publikacji [P-I]. Sprężony model pola fazowego wykorzystuje zależne od temperatury stałe sprężystości do modelowania struktury ziarna podczas obróbki cieplnej co przedstawiono w publikacji [P-III]. Analogiczną logikę procesu zastosowano do kształtowania odporności korozyjnej stali duplex wytwarzanej metodami przyrostowymi co przedstawiono w publikacjach [P-VI, P-VII]. Określono, że zastosowany kierunek na wybranych strukturach jest przyszłościowy z uwagi na możliwości kształtowania własności.

Cel 2 — odnosi się do elementów piezoelektrycznych. W ramach opisu celu przedstawiono podejście do projektowania czujników, elementów wzbudzających tj. aktuatorów i urządzeń do odzyskiwania energii. Podejście to ujęto przez stosowanie modeli wykorzystujących modelowanie za pomocą tensorów i symulację na poziomie urządzenia. Dla materiałów o sieci krystalicznej metoda przewiduje wykorzystanie niezredukowanego tensora elektromechanicznego z uwzględnieniem więzów symetrii i modelu MES do czego odnosi się publikacja [P-II]. Dla polimerów aktywnych deskryptory procesu pozwalają przewidzieć efektywną odpowiedź elementów wytwarzanych metodą elektro-przędzenia i pracujących pod obciążeniem mechanicznym do czego odnosi się publikacja [P-V].

Cel 3 — odnosi się do elektrod akumulatorowych. Autor przedstawia ocenę niezawodności elektrod bateryjnych z wykorzystaniem symulacji pola fazowego w oparciu o teorię sprzężenia pól. Model odtwarza degradację międzyfazową pod wpływem pola elektrycznego i transportu masy oraz wyjaśnia, dlaczego te zmiany przyspieszają zniszczenie mechaniczne. Przegląd dokonujący podsumowania tych zastosowań odniesiony do baterii litowo-jonowych został przedstawiony w publikacji [P-IV].

W kolejnej części rozdziału 5 (podrozdział 5.2) autor dokonuje komparatywnego zestawienia postawionych hipotez z Rozdziału 2 z wynikami z Rozdziału 4. Istotnym elementem jest fakt, iż każda z przedstawionych hipotez jest zakończona uzasadnieniem potwierdzających jej zasadność. Poniżej przedstawiono charakterystykę zaproponowanych hipotez:

CH (hipoteza główna) — Zintegrowana, wielkoskalowa struktura modelowania pozwala utworzyć ścieżki modelujące przejście od procesu projektowania do właściwości użytkowych, czego pojedyncze podejścia modelowe nie były w stanie osiągnąć samodzielnie. Kluczowy jest tu stan pośredni, pełniący funkcję medium transferu między parametrami o niższej skali a odpowiedzią układu. Konieczne okazało się wykorzystanie spójnego transferu parametrów i deskryptorów opartych na fizyce procesu. Co istotne, deskryptory i równania pozostają zależne od układu dla którego mają zastosowanie.

Hipoteza pierwsza - H1. Modele sprzężone umożliwiły uzyskanie wyników niedostępnych dla modeli jednoskalowych. Przewidywanie z wykorzystaniem modelowania tensorowego i modelu MES zostało potwierdzone i pozwoliło na uzyskanie wyników nie otrzymanych metodami realizowanymi samodzielnie – odniesienie do publikacji [P-II]. Analogicznie przeniesienie stałych sprężystości skalibrowanych temperaturowo do modelu pola fazowego poprawiło symulacje procesu i wsparło optymalizację ścieżki cieplnej – odniesienie do publikacji [P-III].

Hipoteza druga- H2. Deskryptory procesu wskazały obszary zrównoważonej wytrzymałości i plastyczności w stopach wieloskładnikowych oraz umożliwiły łączną optymalizację składu i parametrów wytwarzania co przedstawiono w publikacji [P-I]. Stałe sprężystości zostały odniesione temperaturowo oraz zmieniły przewidywaną morfologię ziarna, co pokazuje, że spójność temperaturowa jest warunkiem koniecznym przewidywania geometrii istotnej dla realizowanego procesu – odniesienie do publikacji [P-III].

Hipoteza trzecia - H3. Niezredukowane modele tensora elektromechanicznego pozwoliły na predykcję zależności od orientacji w elementach krystalicznych a modelowanie metodą elementów skończonych wykazało, że odpowiedź urządzenia jest zależna od przyjętego modelu tensora. Dla polimerów aktywnych parametry procesu pozwoliły na predykcję efektywną przy zoptymalizowanych parametrach wytwarzania – odniesienie do publikacji [P-V].

Hipoteza czwarta - H4. Przeprowadzone symulacje ze sprzężeniem pól pozwoliły odtworzyć mechanizmy sprzężenia zwrotnego, co z kolei umożliwiło lokalizować degradację struktury na wierzchołkach granicy poprzez mechanizm uszkodzania międzyfazowego. Dokonana synteza literatury pogrupowała metody zapobiegania degradacji w łączne zbiory celów, zamiast izolowanych wskaźników – co zostało odniesione do publikacji [P-IV].

Hipoteza SP1. Badane komponenty podlegają wspólnej logice, w której parametry procesu wpływają na właściwości użytkowe poprzez stan pośredni. Na bazie tej hipotezy określonych jest pięć schematów przedstawionych w podrozdziale 4.4. Ponieważ jednak dane wejściowe i równania konstytutywne pozostają specyficzne dla zastosowania, szersza skalowalność takiego podejścia wymaga oceny w dalszych badaniach.

Rozprawę zamyka konkluzja, że projektowanie wielkoskalowe nie wymaga stosowania jednego uniwersalnego modelu, lecz fizycznie ugruntowanych deskryptorów, spójnego transferu międzyskalowego i jawnej reprezentacji stanu pośredniego. Co ciekawe autor przytacza dla każdej z przedstawionych hipotez uzasadnienie jej postawienia przez potwierdzenia w każdym przypadku (dla hipotez 1,2,3 potwierdzenie obliczeniowe) w przypadku hipotezy SP 1 częściowe potwierdzenie. W ramach rozdziału autor przedstawia również kierunki dalszych prac.

W dalszej części autor proponuje wielkoskalowe podejście do projektowania komponentów, w którym parametry procesu przekładają się poprzez reprezentowany stan pośredni na właściwości użytkowe t.j. poprzez geometrię ziaren, orientację tensorową, lub ewoluującą granicę międzyfazową. Dalsze prace obejmują rozbudowę modeli o pełniejszą fizykę, modele zastępcze do projektowania odwrotnego, ponowne wykorzystanie przestrzeni składów stopowych do komponentów wielofunkcyjnych oraz zamkniętą pętlę aktywnego uczenia. Wniosek generalny brzmi, że projektowanie z łączeniem skalowania nie wymaga jednego uniwersalnego modelu, lecz deskryptorów opartych na fizyce i spójnego transferu parametrów między skalami.

Przedstawiona w części monograficznej bibliografia liczy 41 pozycji (w tym 9 prac własnych Doktoranta oraz 2 zbiory danych Zenodo). W ramach przedstawionej bibliografii siedem publikacji to publikacje będące podstawą oceny oraz dwie w których doktorant jest współautorem.

Załącznik A zawiera pełne teksty siedmiu artykułów. Załącznik B — podpisane oświadczenia współautorów. Streszczenia w języku angielskim i polskim zostały przygotowane poprawnie. Polska wersja jest napisana poprawnym językiem technicznym i zawiera właściwą terminologię. Układ pracy jest logiczny i konsekwentny: od zdefiniowania luk badawczych, przez problemy i hipotezy, po cele, wyniki i ich weryfikację. Zastosowanie tabel powiązań (Tab. 2.1, 2.2, 3.1, 4.1) jest właściwy i ułatwia czytającemu prześledzenie spójności wywodu.

2. Ocena tematu, celu i zakresu pracy

Podjęta problematyka wpisuje się w nurt zintegrowanego projektowania materiałów i procesów oraz w koncepcję projektowania komponentów z uwzględnieniem stanu materiału jako zmiennej projektowej. Jest to kierunek o dużym znaczeniu praktycznym. Takie podejście wpisuje się w ramy przemysłu 4.0 co powoduje skrócenie kosztownych cykli w projektowaniu stopów konstrukcyjnych, przetworników piezoelektrycznych i ogniw litowych. Takie podejście może mieć bezpośrednie przełożenie na koszty i czas wdrożeń przemysłowych.

Za interesującą problematykę naukową uważam sformułowanie centralnej idei pracy — wprowadzenie „pośredniego stanu materiału” (ang. intermediate material state) jako ogniwa łączącego w modelowaniu poprzez stosowane modele oparte na fizyce w tym deskryptory niskoskalowe z odpowiedzią na poziomie komponentu.

Stosowanie takiej konstrukcji pozwala doktorantowi uporządkować trzy pozornie odległe obszary badawcze ulokowane w dziedzinie inżynierii materiałowej w jedną pracę. Kolejnym bardzo ważnym elementem jest stosowanie zaawansowanych metod uczenia maszynowego w obszarze predykcji cech materiału. Zasadne jest również konsekwentne łączenie modelowania opartego na fizyce z metodami uczenia maszynowego, przy jednoczesnym stosowaniu deskryptorów o interpretacji fizycznej zamiast tzw. cech statystycznych. W tak przedstawionym ujęciu opisana możliwość pozwala na określenie obszaru badawczego mającego na celu określenie transferu (przenoszenia) modeli i skalowalności. Temat pracy jest interdyscyplinarny i łączy ze sobą elementy inżynierii mechanicznej, w szczególności inżynierii materiałowej, ale również problemów obliczeniowych i modelowania.

Temat uważam za w pełni zasadny, naukowo aktualny i wymagający rozwiązania problemu naukowego o charakterze oryginalnym. Stosowane podejście jest ciekawe z naukowego punktu widzenia, jak również zastosowania testowania metod oceny i analizy dużych zbiorów danych a co szczególnie ciekawe potencjalnie wykorzystania modeli językowych w oparciu o przedstawione publikacje, co stanowi o nowoczesnym warsztacie badawczym używanym przez doktoranta.

Podstawę oceny rozprawy stanowi siedem artykułów opublikowanych w czasopismach z listy JCR. Poniżej przedstawiam opis każdej z prac wraz z deklarowanym udziałem i oceną jej roli w cyklu. Teza pracy opiera się na jednym założeniu: żadne pojedyncze podejście nie pokrywa całej drogi od deskryptorów składu i procesu do właściwości komponentu, więc potrzebny jest spójny transfer międzyskalowy przez jawny **stan pośredni** (CH). Siedem publikacji rozkłada to na trzy cele szczegółowe — z czego dwie prace autor sam klasyfikuje jako wspierające a nie niosące nowych implikacji badawczych.

P-I — AlloyManufacturingNet for discovery and design of hardness–elongation synergy in multi-principal element alloys (*Engineering Applications of Artificial Intelligence* 2024, pierwszy autor, udział - 51%).

Praca przedstawia problem modelowania szeregu procesów wytwarzania (odlewanie, przeróbka plastyczna, spiekanie, wyżarzanie) w jednym modelu predykcyjnym dla oceny twardości i wydłużenia stopów wieloskładnikowych. Wprowadzono bezwymiarową funkcję celu $F(x,y)$ standaryzującą obie odpowiedzi, co pozwala na porównywanie uzyskiwanych wyników bez wag arbitralnych. Uzupełnienie predykcji symulacjami dynamiki molekularnej uważam za wartościowe, ponieważ wiąże to trend makroskopowy z mechanizmem ruchliwości dyslokacji.

Zrealizowana praca jest znacząca dla wyznaczonego celu **O1** oraz wnosi dowód dla postawionej hipotezy **H2a**, z wyraźnym, wiodącym wkładem Doktoranta.

P-II — PiezoTensorNet: Crystallography informed multi-scale hierarchical machine learning model for rapid piezoelectric performance finetuning (*Applied Energy* 2024, pierwszy autor, udział - 61%).

Praca jest połączona z celem O2 i stanowi główny dowód dla sformułowanych hipotez H1 oraz H3. Autor przedstawia analizę symetrii tensora dla sieci a klasyfikator grup punktowych kieruje wybraną wartością do jednego z pięciu modułów regresyjnych (PG1–PG5). Wprowadzona norma e_{mod} służy jako miara filtracyjna. Przedstawiony przykład współdomieszkowania a następnie transformacji tensora i wprowadzeniu do modelu MES powoduje znaczący wzrost uzyskanej mocy dla przykładu belki. Jest to ciekawy przykład współdzielonej przestrzeni integrującej mechanikę obiektu, inżynierię materiałową oraz modele regresyjne, niedostępnej dla żadnej realizowanych kroków osobno. Tak jak autor wspomina w dowodzie tezy cała ścieżka jest predykcją obliczeniową.

Zrealizowana praca jest znacząca dla wyznaczonego celu **O2** oraz wnosi dowód dla postawionej hipotezy **H1 i H3** w szczególności z uwagi na fakt, iż ani model właściwości, ani sama analiza MES nie dałyby osobno oszacowania odpowiedzi. Praca została wykonana również z wyraźnym, wiodącym wkładem Doktoranta.

P-III — Unraveling elastochemical effects in microstructural evolution of Al–Cu–Ni system through DFT-informed multi-phase field simulations (*International Journal of Solids Structures*, pierwszy autor, udział - 65%).

Przedstawiona publikacja opisuje zmianę własności faz dla materiałów (Al_2Cu , Al_3Ni oraz FCC bogata w Al) z zachowaniem pełnych anizotropowych tensorów sztywności. Co jest ciekawe, przedstawiona praca realizuje badania nad wpływem zmiany energii sprężystej na zmianę mikrostruktury w stopach dwu- i wielofazowych na podstawie wcześniejszych prac odnoszących się do stałych sprężystości wyznaczonych dla niskiej temperatury, mimo że symulowane procesy zachodzą w temperaturach podwyższonych. Przedstawiona praca odnosi się zatem do postawionych hipotez o istniejące niespójności i opisuje jak kalibracja temperaturowa tensorów sprężystości zmienia przewidywaną geometrię mikrostruktury w porównaniu z przedstawioną parametryzacją dla niskiej temperatury. Doktorant ustanowił tu procedurę takiego transferu, co stanowi bezpośrednie potwierdzenie hipotezy **H2b** i — łącznie z **P-II** — materiał dowodowy dla **H1**.

Praca została wykonana również z wyraźnym, wiodącym wkładem Doktoranta.

P-IV — Roadmaps for dendrite suppression in next generation lithium-ion batteries: Toward sustainable energy solutions (*Energy Storage Materials*. 2026, drugi autor, udział - 35%).

Przedstawiony artykuł obejmuje tworzenie się dendrytów litowych w akumulatorach litowo-jonowych nowej generacji tzw. struktur igłowych, które nie tylko obniżają pojemność ogniwa, lecz stwarzają zagrożenie zwarcie wewnętrznym i dyfuzją termiczną. W artykule przedstawiono podejście do oceny mechanizmu sprzężenia zwrotnego odpowiedzialnego za lokalizację degradacji wpływającej na zmniejszanie pojemności oraz uporządkowanie rozproszonych strategii zapobiegania temu zjawisku poprzez modelowanie wieloskalowe w spójną strukturę. Takie podejście ma pozwolić na wykorzystanie takiego procesu do celów projektowania.

Praca stanowi przedstawienie materiału wspierającego dla dowiedzenia hipotezy nr **H4**.

P-V — Physics-Guided Machine Learning for Enhanced Piezoelectric Performance in Electrospun PVDF/SnO2 Nanofibers (*Sustainable Materials and Technologies*. 2026, pierwszy autor, udział 50%).

Artykuł jest ciekawym połączeniem metod wykonywania optymalizacji procesu elektroprzędzenia z wykorzystaniem metod przetwarzania języka naturalnego w celu syntezy danych z rozproszonych źródeł danych w celu określenia kierunków badawczych do wyszukiwania wypełniacza o określonym potencjale. Optymalizacja parametrów elektroprzędzenia pozwoliła w modelu na dwukrotne obniżenie średniej średnicy włókien. Artykuł poprzez realizację modelowania i obliczeń adresuje spełnienie hipotezy **H3**.

P-VI — Integrating experiments and phase field method through informatics for tailored corrosion performance of additively manufactured steel microstructures (*Metals and Materials International*, 2026, drugi autor, udział - 14%)

P-VII — Post-process heat treatment design for tunable strength and toughness in L-PBF 2507 super duplex stainless steel (*Materialia* 2026, drugi autor, udział - 25%).

Obydwie prace stanowią element wspierający, nie odnoszący się bezpośrednio do przedstawionych hipotez badawczych, jednakże łączą się z logiką hipotezy syntetyzującej SP1 która odnosi się do możliwości przenoszenia opracowanej logiki na inne rodzaje materiałów.

Średni deklarowany udział Doktoranta w siedmiu pracach wynosi ok. 43%, przy czym w pięciu pracach przekracza 35%, a w trzech kluczowych dla rozprawy (P-I, P-II, P-III) mieści się w przedziale 51–65%. Uważam, że wkład Doktoranta w prace P-I, P-II, P-III i P-V jest wystarczający do uznania go za samodzielnego autora rozwiązania naukowego przedstawionego w rozprawie.

Na podstawie opisu oceny celu i zakresu pracy oraz przedstawionych dokonań, **uważam, iż podjęcie zaproponowanej tematyki jest celowe i użyteczne** a praca z uwagi na jej zakres badawczy obejmujący modelowanie fizyczne, analitykę danych oraz zaawansowane metody syntezy materiałowej jak również stosowanie nowoczesnego warsztatu badawczego ma charakter **użyteczny**.

3. Ocena rozprawy

W przedstawionej do oceny pracy autor sformułował pięć problemów badawczych (P1–P5), hipotezę główną (CH), cztery hipotezy szczegółowe (H1–H4) hipotezę dodatkową będącą propozycją syntetyzującą (SP1) oraz trzy cele szczegółowe (O1–O3).

Co istotne autor zaproponował zastosowanie do każdej hipotezy kryteriów oceny co uwidacznia możliwość jej weryfikacji na podstawie załączonych publikacji oraz opisu w części monograficznej.

Analizując cykl publikacji oraz część monograficzną, za oryginalny i własny wkład Doktoranta w rozwój dyscypliny uznaję:

- Opracowanie metodologii umożliwiającej modelowanie odpowiedzi badanego elementu z możliwością predykcji jego własności z wykorzystaniem tzw. stanu pośredniego. Co jest istotne w ramach rozprawy przedstawione zagadnienia modelowania obejmują konkretne parametry – materiałowe takie jak: geometria ziarna, orientacja tensora, zmienność granicy międzyfazowej.
- Opracowanie architektury środowiska wieloskalowego (PiezoTensorNet), umożliwiającej zastosowanie architektury sieci neuronowej osadzonej w uwarunkowaniu sieci krystalicznej. Jest to rozwiązanie oryginalne, wnoszące wkład metodyczny wykraczający poza zastosowaną dziedzinę materiałową.
- Przedstawienie modelowego podejścia do wpływu transferu stałych sprężystości o spójnej temperaturowo charakterystyce do predykcji zmian mikrostruktury.
- Opracowanie metodyki modelowania wspomaganego wiedzą fizyczną (z wykorzystaniem w warunkach skrajnego niedoboru danych - PGMLpiezo), w której człon fizyczny funkcji straty ogranicza przestrzeń rozwiązań modelu uczonego na 52 próbkach.
- Praca poza wynikami modelowania oraz opracowaniem metod transferu przedstawia również wkład poznawczy. Jest to niewątpliwie wkład przedstawiony w publikacji P-IV i opisujący tzw., mechanizm samowzmacniającego sprzężenia zwrotnego odpowiedzialnego za określanie lokalizacji degradacji na wierzchołkach wypukłości granicy międzyfazowej.
- Praca ponadto przynosi wkład użyteczny pozwalający na pozyskanie danych i narzędzi obliczeniowych stworzonych przez doktoranta z repozytoriów online (narzędzia obliczeniowych wraz z danymi dla m.in. PiezoTensorNet).

Niewątpliwie praca z uwagi na szeroki zakres prowadzonych prac nie jest wolna od pewnych mankamentów do których zaliczam:

- Pewną niezręczność wynikającą z tytułu pracy z jej zakresem.
Przedstawiony tytuł pracy odnosi się do „mikrostruktury w stopach wieloskładnikowych”. Jednakże z załączonych publikacji wynika, iż z siedmiu publikacji cztery z nich (P-II, P-IV, P-V oraz częściowo P-VI) dotyczą ceramiki i polimerów piezoelektrycznych oraz interfejsów elektroda–elektrolit.
- Rozprawa deklaruje przynależność do dyscypliny inżynieria mechaniczna, a w wykazie publikacji zamieszczono adnotację, że wszystkie prace mieszczą się w tej dyscyplinie.
Moją wątpliwość wynika z załączonych do oceny materiałów. W znaczącej części praca jest związana z analizą danych, modelami, krystalografią – co jest z natury bliższe inżynierii materiałowej. Przedstawione elementy w pracy które mają najsilniejszy udział w ocenianej dziedzinie są zawarte we wkładzie wspierającym.
- Praca nie zawiera weryfikacji eksperymentalnej. Wszystkie przedstawione w pracy wyniki i kluczowe wartości modyfikacji parametrów są wyłącznie liczbowe i stanowią wielkości predykcyjne bez weryfikacji eksperymentalnej. Autor ma tego świadomość, akcentując sposób dowiedzenia tezy w sposób obliczeniowy. Jest ważne ograniczenie implikujące możliwość jedynie dowodowego a nie eksperymentalnego wykazania skutecznej predykcji dla przygotowanych modeli.
- Część merytoryczna jest bardzo ograniczona i nie zawiera dobrego wprowadzenia do załączonych publikacji. W ramach przygotowania do analiz zawartych w publikacjach brakuje opis metod stosowanych w publikacjach i dotyczących zarówno modeli jak i parametrów obliczeń. Zastosowanie zwięzłego rozdziału wprowadzającego merytorycznie do cyklu przygotowanych publikacji poprawiłoby znacząco możliwość oceny

Powyższe uwagi mają charakter dyskusyjny i poza wyszczególnionymi wyjątkami nie podważają wartości rozprawy jako całości. Uporządkowano je od uwag o charakterze ogólnym do szczegółowych uwag merytorycznych i redakcyjnych.

Praca w części monograficznej jest napisana zwięzłym i oszczędnym językiem z dowodami opartymi na odniesieniu do publikacji wraz z zastosowaniem punktacji oraz łączy do literatury.

W ramach uwag należy wspomnieć o drobnych uwagach edycyjnych związanych z brakiem odniesień do niektórych skrótów oraz braku wyjaśnień rysunkowych. Podkreślam, że uwagi krytyczne dotyczą przede wszystkim sposobu prezentacji, uzasadnienia i weryfikacji wyników, nie zaś ich wartości naukowej ani poprawności zastosowanego warsztatu obliczeniowego. Żadna z nich nie podważa oryginalności rozwiązania naukowego przedstawionego w rozprawie.

Pytania do dyskusji podczas obrony:

Proszę doktoranta o odniesienie się do poniższych pytań:

1. Jedynym przypadkiem, w którym poprawność transferu międzyskalowego zmierzono wprost, jest różnica 18,18% pola ziarna między parametryzacją dla 0 K i 723 K. Czy takie kryterium da się uogólnić jako stosowne w pozostałych obszarach przedstawionych przez doktoranta?
2. Czy propozycja SP1 o wspólnej logice projektowej została potwierdzona faktycznym transferem modelu lub deskryptorów pomiędzy dziedzinami, czy pozostaje analogią koncepcyjną? Który konkretnie element został przeniesiony między obszarami i z jakim wynikiem ilościowym?
3. Które elementy rozprawy Doktorant uznaje za wkład w dyscyplinę inżynieria mechaniczna, a nie w inżynierię materiałową? Proszę o wskazanie konkretnych rezultatów i uzasadnienie przyporządkowania dyscypliny naukowej do realizowanej pracy.

4. Wniosek końcowy

Stwierdzam, że rozprawa doktorska mgr. inż. Sachina Poudela stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego, jakim jest opracowanie i weryfikacja wieloskalowych metod obliczeniowych łączących modelowanie oparte na fizyce z metodami uczenia maszynowego dla potrzeb projektowania materiałów konstrukcyjnych i funkcjonalnych oraz komponentów z nich wykonanych. Rozprawa pomimo przedstawionych niedoskonałości wykazuje wiedzę Kandydata w zakresie modelowania struktur od procesu projektowania i skalowania do wytwarzania. Ponadto przedstawiona praca i osiągnięcia pozwalają wnioskować o jego umiejętności samodzielnego prowadzenia pracy naukowej, potwierdzonej wiodącym autorstwem publikacji w renomowanych czasopismach o zasięgu międzynarodowym.

Podsumowując, uważam, że recenzowana rozprawa spełnia wymagania określone w art. 187 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r (t.j. (Dz. U. z 2024 r poz 1571). Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, w tym warunek przedłożenia rozprawy w formie zbioru opublikowanych i powiązanych tematycznie artykułów naukowych.

W związku z powyższym wnoszę o dopuszczenie mgr. inż. Sachina Poudela do publicznej obrony rozprawy doktorskiej.

plk dr hab. inż. Krzysztof Dragan, prof. ITWL