

RECENZJA PRACY DOKTORSKIEJ  
mgr inż. Beaty Barbary Gracz  
*pt. „Opracowanie algorytmu odtwarzania rozkładu wielkości podłoża  
zarodkowania heterogenicznego na przykładzie stopu AlZn7”*  
promotor: Prof. dr hab. inż. Witold K. Krajewski

**Podstawa wykonania recenzji.**

Recenzję wykonano w odpowiedzi na pismo Przewodniczącego Rady Dyscypliny Inżynieria Materiałowa Akademii Górniczo Hutniczej im. Stanisława Staszica w Krakowie z dnia 20.02.2020 roku.

**Zasadność podjętego tematu.**

Przedmiotem rozprawy doktorskiej mgr inż. Barbary Gracz jest modelowanie rozkładu wielkości podłoża zarodkowania heterogenicznego oraz możliwość przewidywania na tej podstawie kształtowania się struktury pierwotnej stopów metali lekkich, na przykładzie stopu aluminium AlZn7. Funkcjonujemy obecnie w dobie czwartej rewolucji przemysłowej nazywanej przemysłem 4.0, który cechuje się integracją ludzi oraz sterowanych cyfrowo maszyn z Internetem i technologiami informacyjnymi co oznacza unifikację świata rzeczywistego maszyn produkcyjnych ze światem wirtualnym Internetu i technologii informacyjnej. W odlewnictwie integracja ta polega na tworzeniu i wdrażaniu systemów wirtualnego prototypowania na bazie istniejących narzędzi komputerowych, ale co ważniejsze ich rozwoju i tworzeniu nowych dokładniejszych i wydajniejszych algorytmów i opartych na nich narzędzi informatycznych. Wirtualizacja całego procesu wytwarzania i użytkowania odlewu począwszy od materiałów wsadowych, a skończywszy na przewidywaniu czasu eksploatacji w założonych warunkach i kosztach recyklingu wymaga zastosowania coraz dokładniejszych modeli matematycznych. Niemal wszystkie aspekty związane z czasem życia odlewu można sprowadzić do, lub uzależnić od procesu krzepnięcia co właściwie w przypadku stopów metali sprowadza się do krystalizacji. Zatem tworzenie i rozwój narzędzi komputerowych do symulacji procesów zachodzących w ciekłym i krzepnącym metalu wydaje się niezwykle istotne i uzasadnione.

Za taką też należy uznać problematykę podjętą w opiniowanej pracy doktorskiej Pani Beaty Gracz, problematyka ta doskonale wpisuje się w aktualny nurt poszukiwań nowych narzędzi do modelowania procesu krystalizacji, w których kluczowe jest modelowanie procesu zarodkowania, gdyż stanowi podstawę kształtowania się struktury pierwotnej. Podjęte przez Autorkę badania nad opracowaniem algorytmu obliczania rozkładu wielkości podłoża w procesie zarodkowania cechują się zarówno wysokim potencjałem poznawczym jaki i użytecznym ponieważ wykorzystanie wyników obliczeń może posłużyć do opisu procesu kształtowania się pierwotnej struktury odlewu, a stąd już niewielki krok do sterowania tym procesem, czyli świadomego i w pełni kontrolowanego projektowania struktury pierwotnej odlewu. Jest to niezwykle istotne w aspekcie powszechnie stosowanego zabiegu modyfikacji zarówno pod względem kontrolowania jego efektów jak i analizy samego procesu, a w efekcie lepszego poznania jego mechanizmu.

### **Ocena ogólna pracy.**

Oceniana praca doktorska napisana jest w języku polskim, składa się z 6 głównych rozdziałów z licznymi podrozdziałami, krótkiego wprowadzenia oraz streszczenia w języku polskim i angielskim, ponadto zawiera wykaz ważniejszych oznaczeń, spisy tabel i rysunków oraz niezwykle obszerny, liczący 274 pozycji, wykaz źródeł bibliograficznych. Praca liczy 157 stron, z czego jej zasadnicza treść zawarta jest na 121 stronach, w tym udział tzw. przeglądu literatury stanowi 28% natomiast opis badań i zastosowanej metodyki 23%, prezentacja wyników z ich dyskusją, podsumowaniem i wnioskami 48%, co w sumie i po uzupełnieniu o część zawierającą tezy i cele stanowi 72%. Proporcje poszczególnych części dysertacji oraz sam układ można uznać za typowy dla tego typu opracowań.

Studium literatury rozpoczyna się zwięzłym opisem procesu krystalizacji i zjawiska zarodkowania homogenicznego i heterogenicznego, bez pominięcia jego szczególnych typów: katalitycznego i dynamicznego, jednak ze szczególnym uwzględnieniem zarodkowania heterogenicznego i matematycznego opisu jego mechanizmu. Następnie chronologicznie przedstawione zostały znane i opisane w literaturze modele zarodkowania wraz z ich krytyczną analizą. Szczególnie wnikliwej analizie poddany został model swobodnego wzrostu wraz ze spotykanymi w literaturze sposobami jego rozwinięcia. Treści zawarte w tej części opracowania należy uznać za zasadne i nieprzeładowane zbędnymi informacjami, co przy tak niezwykle obszernej bibliografii zasługuje na szczególne uznanie. W podsumowaniu tej części pracy Autorka syntetycznie przedstawia dziedzinę swoich badań i precyzyjnie wskazuje ich kierunek w wyniku tego postawienie tez i określenie celów pracy właściwie

stało się formalnością. Co następuje w rozdziale 2 otwierającym część pracy poświęconą badaniom własnym. Tezy, których słuszności „postanowiono” dowieść, uznać należy za poprawnie sformułowane i adekwatne do przedstawionych wyników analizy literatury oraz, jak twierdzi Autorka powołując się na liczne publikacje, których jest współautorką, doświadczeń własnych. Cele pracy, główny i dodatkowy zostały określone w sposób nie budzący wątpliwości, że ich osiągnięcie ma udowodnić postawione tezy, chociaż cel główny sprawia wrażenie zbyt obszernego.

Kolejny rozdział poświęcony jest wyselekcjonowaniu materiału do badań i zastosowanej metodyce badawczej, podzielony jest, w sposób dość naturalny, na część eksperymentalną i obliczeniową. Zawiera on szczegółowy opis metodologii eksperymentalnych i obliczeniowych badań, a wartość zastosowanych wielu technik badawczych, co w tego rodzaju opracowaniach jest rzadkością, jest właściwa i adekwatna do postawionych tez i wyznaczonych celów. Ponadto przedstawiony został w nim szczegółowy opis opracowanego algorytmu obliczeniowego i jego implementacji w programie komputerowym napisanym w języku C++. Niejako wstępem do opisu metodyki badań jest zamieszczony na początku rozdziału 3 rysunek schematu badań, na którym w postaci bloków przedstawione są poszczególne etapy badań połączone liniami obrazującymi ich współzależność. Generalnie schemat pozwala łatwo zorientować się w idei planu badań jednak doprecyzowania wymaga znaczenie linii kropkowej i wyjaśnienie dlaczego bloki XRD i EDS stanowią zakończenie gałęzi schematu?

Rozdział 4, najobszerniejszy, to zestawienie wyników badań eksperymentalno-obliczeniowych wykonanych dla wybranego stopu  $Al_2Zn_7$ , wraz z ich prostą analizą statystyczną. Zestawienie to obejmuje wyniki: analizy termicznej, przeprowadzonej za pomocą Uniwersalnego Symulatora i Analizatora Procesów Metalurgicznych (UMSA), eksperymentalnej i teoretycznej analizy cieplnego efektu krystalizacji (skaningowa kalorymetria różnicowa DSC, obliczenia za pomocą oprogramowania Thermo-Calc), a także wyniki identyfikacji mikro- i makrostrukturalnej wraz z analizą ilościową fazy pierwotnej  $\alpha$ -Al. Prezentacja wyników wykonana jest systematycznie i przejrzysto z wykorzystaniem dobrej jakości zdjęć mikro- i makrostruktury badanego stopu oraz czytelnych wykresów, dlatego trochę dziwi fakt zastosowania różnych skali temperatury w opisach osi.

W kolejnym rozdziale pracy, stanowiącym zasadniczą jej część, dla dobranych parametrów kontroli obliczeń i własności termofizycznych przeprowadzone zostały symulacje rozkładu wielkości podłoża zarodkowania heterogenicznego dla ustalonych w ramach badań eksperymentalnych i obliczeń warunków z wykorzystaniem opracowanego modelu

bazującego na rozkładzie logarytmiczno-normalnym. Parametry kontroli zostały dobrane, jak twierdzi Autorka, w oparciu o m. in. doświadczenia nabyte w trakcie budowy programu i przeprowadzone wcześniej symulacje, jednak pewnego doprecyzowania wymagałyby kryteria tej selekcji. Wyniki symulacji szczegółowo przedstawione zostały zarówno graficznie jak i w formie zestawień tabelarycznych uzupełnionych stosownym komentarzem. Ponadto opracowane metodyka i algorytm obliczeniowy poddane zostały swego rodzaju kontroli poprzez porównanie otrzymanych wyników obliczeń objętościowej gęstości podłoża zarodkowania z danymi eksperymentalnymi i wynikami obliczeń przeprowadzonych z wykorzystaniem konkurencyjnych modeli eksponencjalnym Frasia i wykładniczym Oldfielda. Co pozwoliło na weryfikację autorskich metodyki, algorytmu i programu Doktorantki, chociaż dane eksperymentalne użyte w procesie weryfikacji zdają się tożsame z danymi użytymi do tzw. walidacji opracowanego algorytmu.

Całość wieńczy rozdział 6 zatytułowany „Podsumowanie wyników badań i wnioski”, w którym Autorka przedstawia raczej mini streszczenie, a nie podsumowanie (o ile w ogóle możliwe jest podsumowanie wyników), stwierdzając udowodnienie postawionych tez i odpowiednio argumentując zasadność swojego twierdzenia. Niestety wnioski, płynące z pracy nie zostały odpowiednio wyeksponowane, czytelnik zmuszony jest do wyłuskania ich z lapidarnie, a fragmentami enigmatycznie sformułowanej treści drugiej części finalnego rozdziału.

Pragnę zaznaczyć, że pomimo interdyscyplinarnej złożoności prezentowanych zagadnień lektura dysertacji należy do przyjemności, co niewątpliwie jest zasługą dogłębnego poznania tematyki przez Doktorantką, ale także rzadko spotykanej umiejętności swobodnego i przystępnego prezentowania trudnych zagadnień, niewątpliwie jest to także wynik nienaganej strony edycyjnej i językowej pracy.

### **Ocena merytorycznej strony pracy.**

Oceniając rozprawę pod względem merytorycznym należy stwierdzić, że zarówno zaplanowane eksperymenty, dobór technik badawczych i obliczeniowych, analiza i interpretacja wyników jako całość nie budzą zastrzeżeń. Praca napisana jest poprawnie i nie zawiera błędów podważających jej wartości poznawcze i użytkowe, na podstawie jej lektury stwierdzam, że Doktorantka wykazała się wiedzą zarówno teoretyczną jak i praktyczną w zakresie badania, analizy i modelowania procesu krystalizacji oraz umiejętnie swoją wiedzę wykorzystwała realizując przedstawione badania. Ponadto poznała i z powodzeniem stosowała nowoczesne techniki badawcze niezbędne w pracy naukowej.

Niestety pomimo ogólnego bardzo wysokiego poziomu merytorycznego rozprawy Autorka nie ustrzegła się pewnych niedoskonałości skłaniających do polemiki, a które z racji ciężącego na mnie obowiązku muszę wykazać, w niektórych przypadkach zaś domagać się także wyjaśnienia.

Na stronie 61 w oparciu o wykres przedstawiający krzywą stygnięcia oraz jej pierwszą i drugą pochodną (rysunek 3.15) przedstawiony został sposób określania temperatury początku i końca zarodkowania oraz rekalescencji. O ile wyznaczenie temperatury początku zarodkowania nie wzbudza żadnych zastrzeżeń to sposób określenia temperatury końca zarodkowania i utożsamienie jej z temperaturą rekalescencji wymaga wyjaśnienia.

W pracy kilkukrotnie jest mowa o analizie statystycznej ziaren pierwotnych (m. in. str. 65, 75 i 107). Jak mi nie wiadomo chodzi o analizę ilościową makrostruktury z wykorzystaniem automatycznego analizatora obrazu w celu określenia wartości średniej średnicy zastępczej ziarna. Z opisu sposobu przeprowadzenia analizy zamieszczonego na stronie 65 nie wynika czy spełnione zostały wymogi statystycznej poprawności przeprowadzenia takiej analizy. Poza tym korzystniej byłoby wyniki analizy ilościowej zaprezentowane w tabeli 4.14 na stronie 106 uzupełnić o wartości parametrów rozkładu liczby ziaren w klasach np. średnicy zastępczej czy pola powierzchni. Pozwoliłoby to uniknąć subiektywnego stwierdzenia: „Próbki,...cechował *bardzo wyraźny* rozrost ziarna oraz *duże* zróżnicowanie rozmiarowe poszczególnych wydzieleni fazy pierwotnej...” zamieszczonego na stronie 103.

Nie do końca jasny jest cel wykonania tzw. eksperymentu porównawczego opisanego w rozdziale 4.6. Oprócz enigmatycznego stwierdzenia, że „wykazał on słuszność zastosowania aparatu UMSA, co pozwoliło na uzyskanie znaczącego kompromisu (?) między szybkością chłodzenia, a otrzymaną mikrostrukturą”. Wykorzystanie wyników uzyskanych w eksperymencie, w którym próbki krzepły w warunkach determinowanych przez materiał formy, zatem zbliżonych do warunków krzepnięcia rzeczywistych odlewów, miało by większy potencjał gdyby zostały użyte do sprawdzenia „...poprawności, dokładności i efektywności działania...” opracowanego algorytmu w miejsce lub obok porównania z innymi modelami. Szczególnie nadają się do tego wyniki uzyskane dla próbki odlanej do formy gipsowej, dla której uzyskana prędkość stygnięcia była zbliżona do największej uzyskanej w eksperymencie zasadniczym. Ponadto wykorzystanie wyznaczonych statystycznie zależności do obliczenia danych wejściowych pierwszego typu, zamiast lub obok eksperymentalnie wyznaczonych, pozwoliłoby także na ich weryfikację.

Do modelowania procesu zarodkowania „postanowiono” zastosować wartość entropii obliczoną dla szybkości chłodzenia  $\sim 0,1\text{K/s}$ , kiedy szybkości chłodzenia badanych próbek

(UMSA) mieściły się w zakresie  $\langle 2,73;3,61 \rangle$ . Jakie jest uzasadnienie takiego wyboru, gdy dysponowano także wartością entropii wyznaczoną dla szybkości 0,5K/s?

*Uwagi pomniejsze:*

W pracy terminy weryfikacja i walidacja używane są niejako zamiennie i w niektórych przypadkach niepoprawnie, dla rozwiania wątpliwości na wstępie należałoby określić ich znaczenie.

W napisanym programie komputerowym do numerycznego całkowania zastosowana została metoda prostokątów, co przemawiało za wyborem właśnie tej metody zamiast np. metody trapezów lub parabol?

Nie w pełni jasna jest przyczyna statystycznego wyznaczania, niemal dla wszystkich uzyskanych wyników, metodą regresji funkcji, które opisują współzależność danych w bardzo wąskim przedziale wartości znacznie odbiegającym od wartości parametrów procesu krzepnięcia rzeczywistych odlewów, na co wskazują wyniki „eksperymentu porównawczego”. Ponadto posługiwanie się do oceny poprawności oszacowania funkcji jedynie współczynnikiem korelacji, pomimo istotnie uzyskiwanych wysokich jego wartości, w tego typu opracowaniach jest istotnym niedopatrzeniem. Dla poparcia statystycznej istotności funkcji regresji należałoby posłużyć się wartościami testów Fischera-Snedecora, t-Studenta czy chociażby obliczoną wartością poziomu istotności.

W trakcie procedury przygotowywania materiału stosowano 10 minutowe przetrzymanie go w piecu w temperaturze 720°C jak twierdzi Autorka „w celu ujednoczenia temperatury kąpielii w całej objętości...”. Czy w piecu indukcyjnym (intensywne mieszanie kąpielii w wyniku indukowania prądów wirowych) taki zabieg jest konieczny, a może jego celem było wygrzanie ceramicznego tygla?

W tabeli 5.4 na stronie 121 dla czytelniejszego przedstawienia analizowanych danych warto było zamieścić wartości eksperymentalnej gęstości podłoża, brak tych danych lub wskazania miejsca ich zamieszczenia (np. tabela 4.16 lub 4.19), zmusza czytelnika do przeszukiwania pracy.

Ponadto w treści pracy można natknąć się na niezbyt fortunate określenia, będące najprawdopodobniej tzw. skrótami myślowymi np.: na stronie 50 „Brak szczelnej atmosfery ochronnej...”, str. 55 „...zewnętrznego źródła chłodzenia.”, str. 57 i str. 76 tabela 4.1 oraz str. 77 rys 4.2 „...moc chłodząca...” wyrażona w % (?), str. 109 „...liczby podłoży zarodkowania...”.

## Podsumowanie

Opiniowaną dysertację oceniam bardzo pozytywnie, mając jednocześnie nadzieję, że moje uwagi będą pożyteczne przy przygotowaniu publikacji lub planowaniu kolejnych badań. Kandydatka w sposób wzorowy zrealizowała postawione sobie cele, a tym samym zrealizowała zakres merytoryczny pracy wykazując słusność postawionych tez. Podjęła problem, którego rozwiązanie ma istotne znaczenie z punktu widzenia zarówno poznawczego jak i aplikacyjnego. Mgr inż. Beata Gracz wykazała się znaczącą wiedzą w dziedzinie modelowania procesu krystalizacji, a stosowane przez nią metody i techniki badawcze świadczą pozytywnie o Jej wszechstronnym przygotowaniu do pracy badawczej oraz zdolności do samodzielnego zaplanowania i przeprowadzenia eksperymentu naukowego.

Reasumując uważam, że przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska mgr inż. Beaty Gracz ma charakter oryginalnej pracy naukowej i zawiera istotne elementy poznawcze. Wykazała się Ona wiedzą umożliwiającą samodzielne prowadzenie badań naukowych, a Jej praca jest oryginalnym i utylitarnym osiągnięciem stanowiącym istotny wkład w stan wiedzy w reprezentowanej dyscyplinie. Na podstawie szczegółowej analizy przedłożonej mi do recenzji rozprawy doktorskiej mgr inż. Beaty Gracz pt. *„Opracowanie algorytmu odtwarzania rozkładu wielkości podłoża zarodkowania heterogenicznego na przykładzie stopu AlZn7”*, wykonanej pod kierunkiem Prof. Witolda Krajewskiego, **stwierdzam, że praca ta w pełni spełnia wymagania stawiane pracom doktorskim w Ustawie „O stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki” z dnia 14 marca 2003 roku z późniejszymi zmianami i zwracam się do Rady Dyscypliny Inżynieria Materiałowa w Akademii Górniczo Hutniczej im. Stanisława Staszica w Krakowie o dopuszczenie jej do publicznej obrony.**

/dr hab. inż. Dariusz Bartocha Prof. PŚ/

Gliwice 15.04.2020