

Prof. dr hab. inż. Henryk PETRYK

Warszawa, 12.08.2021 r.

Instytut Podstawowych Problemów Techniki

Polskiej Akademii Nauk

ul. Pawińskiego 5B

02-106 Warszawa

Recenzja osiągnięć naukowych i aktywności naukowej
dr. Stefanosa Papanikolaou w postępowaniu habilitacyjnym
w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie Nauki ścisłe i przyrodnicze
w dyscyplinie Nauki fizyczne

Podstawa opracowania recenzji: pismo Sekretarza Naukowego Narodowego Centrum Badań Jądrowych (NCBJ Świerk) z dnia 17 czerwca 2021 r. informujące o wyznaczeniu mnie na recenzenta przez Radę Doskonałości Naukowej, oraz załączona do ww. pisma dokumentacja przygotowana przez Habilitanta.

1. Sylwetka Habilitanta

Habilitant pełni obecnie funkcję Lidera Grupy Badawczej (RGL) w Centrum Doskonałości Materiałów Wielofunkcyjnych NOMATEN w Narodowym Centrum Badań Jądrowych w Polsce, wybrany na drodze międzynarodowego konkursu.

Stefanos Papanikolaou otrzymał licencjat z fizyki w Narodowym Uniwersytecie Ateńskim w Grecji. Stopień doktora w zakresie fizyki uzyskał w University of Illinois: Urbana-Champaign, USA w 2008 roku, który uprawnia do ubiegania się o nadanie stopnia doktora habilitowanego w Polsce. Tytuł doktoratu: Badanie topologii i porządku w zaburzonych układach spinów kratowych (*Studies of topology and order in frustrated lattice spin systems*), promotor doktoratu: Professor Eduardo H. Fradkin. Od 01/08/2008 do 30/10/2011 Postdoctoral Fellow na Wydziale Fizyki, Laboratorium Fizyki Półprzewodnikowej i Atomowej, gdzie kierował projektami, które obejmowały międzynarodową współpracę z instytucjami włoskimi i

brazylijskimi. Od 01/08/2011 do 30/11/2013 Associate Research Scientist w Uniwersytecie Yale, Wydział Inżynierii Materiałowej i Materiałoznawstwa, New Haven, CT, USA. W 2013 roku zdobył prestiżowy, pięcioletni grant "VIDI career excellence" przyznawany przez Netherlands Research Council (NWO). W okresie od 20/10/2014 do 30/06/2016 był adiunktem (Assistant Research Professor) w Johns Hopkins University, Wydział Inżynierii Mechanicznej, Baltimore, MD, USA, a w okresie 21/07/2016 - 30/07/2020 adiunktem na Uniwersytecie Wirginii Zachodniej, Wydział Mechaniczny i Inżynierii Lotniczej, Morgantown, WV, USA. W 2018 roku otrzymał nagrodę Research Excellence Award w West Virginia University, przyznaną najbardziej produktywnym adiunktom uniwersytetu. Od 01/08/2016 do teraz jest adiunktem (Adjunct Professor) w Johns Hopkins University, Wydział Inżynierii Mechanicznej, Baltimore, MD, USA. Jego zainteresowania badawcze obejmują teorie i zastosowania metod statystycznych do wieloskalowego modelowania mechanicznego zachowania się materiałów.

2. Ocena osiągnięć naukowych

Jako osiągnięcie habilitacyjne pod tytułem „**Modelowanie wieloskalowe, przewidywanie i uczenie maszynowe wahań odkształceń stochastycznych w ciałach stałych**” (*Multiscale modeling, prediction and machine learning of stochastic strain fluctuations in solids*) Habilitant przedłożył cykl ośmiu powiązanych tematycznie artykułów naukowych, wymienionych poniżej:

1. S. Papanikolaou, Y. Cui, N. Ghoniem, *Avalanches and Plastic Flow in Crystal Plasticity: An Overview*, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 26, no. 1, 013001, (2017).
2. S. Papanikolaou, *Shearing a glass and the role of pin-delay in models of interface depinning* (arxiv: 1310.5761) Phys. Rev. E 93, 032610 (2016).
3. S. Papanikolaou, H. Song, E. Van der Giessen, *Obstacles and sources in dislocation dynamics: Strengthening and statistics of abrupt plastic events in nanopillar compression* (arxiv:1511.04613) J. Mech. Phys. Solids, **102**, 17 (2016).
4. S. Papanikolaou, D.M. Dimiduk, W. Choi, J.P. Sethna, M.D. Uchic, C.F. Woodward, S. Zapperi, *Quasi-periodic events in crystal plasticity and the self-organized avalanche oscillator*. Nature, **490**, 517-21, (2012).

5. H. Song, D. Dimiduk, S. Papanikolaou, *Universality Class of Nanocrystal Plasticity: Localization and Self-Organization in Discrete Dislocation Dynamics*. Phys. Rev. Letters **122**(17), 178001, (2019).
6. H. Song, S. Papanikolaou, *From statistical correlations to stochasticity and size effects in sub-micron crystal plasticity*, Metals, **9**(8), 835 (2019).
7. S. Papanikolaou, *Learning local, quenched disorder in plasticity and other crackling noise phenomena*. NPJ Computational Materials, **4**, 27, (2018).
8. S. Papanikolaou, *Microstructural Inelastic Fingerprints And Data-Rich Predictions of Plasticity and Damage in Solids*. Computational Mechanics, **66**, 141-154, (2020).

Trzy pozycje cyklu [2], [7], [8] są samodzielnymi publikacjami Habilitanta, a pozostałe pięć publikacjami współautorskimi. Z przedstawionych w Autoreferacie oświadczeń Habilitanta, popartych załączonymi oświadczeniami współautorów, jednoznacznie wynika jasno wyodrębniony i wiodący indywidualny wkład Habilitanta w przygotowanie publikacji współautorskich. **Powyższy cykl publikacji spełnia wymogi formalne określone w Art. 219 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce – Dz. U. z 2020 r. poz. 85 z późn. zm.** Wszystkie publikacje składające się na cykl 8-miu powiązanych tematycznie artykułów naukowych zostały opublikowane w czasopismach naukowych o zasięgu międzynarodowym, w tym zdecydowana większość o wysokiej, a nawet bardzo wysokiej (np. *Nature*), renomie międzynarodowej.

Autoreferat w języku polskim zawiera wiele nieścisłości terminologicznych w porównaniu z wersją przygotowaną w j. angielskim (np. 'prawa podstawowe' zamiast 'prawa konstytutywne', 'reakcja mechaniczna' zamiast 'właściwości mechaniczne', 'tempo odkształceń' zamiast 'prędkość odkształcenia', 'pęknięcia' zamiast 'impulsy', itd.). Nie wpływa to jednak na niższą ocenę osiągnięć Habilitanta, opracowaną na podstawie oryginalnych publikacji z przedłożonego do recenzji cyklu oraz wersji anglojęzycznej autoreferatu.

W wartościowym artykule przeglądowym [1], o objętości 45 stron i zawierającym 285 pozycji literatury, Habilitant wykazał, że chociaż przebieg odkształceń plastycznych w makroskopowej skali objętościowej kryształu może wydawać się gładki, to jednak fizyka zjawisk przebiegających w nanoskali jest całkowicie odmienna. W szczególności, w elemencie materiału o wymiarach nanometrycznych, plastyczne płynięcie następuje w sposób

przerywany (*intermittent*), poprzez stochastyczne impulsy odkształcenia (*stochastic strain bursts*) lub lawiny dyslokacji (*dislocation avalanches*). Jest to związane z samą naturą dynamiki dyslokacji i ich gwałtownego ruchu. Poza przeglądem obserwacji doświadczalnych pokazujących powszechność powyższych zjawisk w rozmaitych materiałach, oraz opisem szeregu różnych podejść do ich modelowania, w pracy [1] sformułowano szereg interesujących otwartych pytań, np. dotyczących powiązania pęknięcia z plastycznością o charakterze dynamicznym wzmiankowanym powyżej. We wnioskach podkreślono, że w odróżnieniu od możliwości deterministycznego opisu właściwości mechanicznych w makroskali, w skalach nano i mikro opis deterministyczny jest niewystarczający i warto wówczas używać rozkładów statystycznych.

Stochastyczne fluktuacje odkształcenia, przede wszystkim w czasie lecz również w przestrzeni, stanowią główny temat badawczy przedłożonego cyklu publikacji. Prowadzi on do głębszego zrozumienia fizyki odkształceń plastycznych w różnorodnych materiałach, z naciskiem na unifikującą cechę, jaką jest przerywane dynamiczne płynięcie plastyczne o charakterze stochastycznym. Publikacja [2] dotyczy plastyczności ciał amorficznych (*metallic glasses*) odkształcanych poprzez impulsy odkształcenia, które w przestrzeni organizują się w pasma ścinania. Zaproponowano nową skalę czasową tych zjawisk, związaną z mechanizmem opóźnienia kolejnego gwałtownego lokalnego poślizgu (*pinning delay*). Praca [3] dotyczy dynamiki dyslokacji w ściskanych kryształach metali o wymiarach około lub poniżej 1 mikrometra (*nanopillars, thin films*). Zaproponowano dwuwymiarowy dyskretny model dynamiki dyslokacji (*discrete dislocation dynamics – DDD*) działających na jednym systemie poślizgu, w którym istotną rolę odgrywa konkurencyjne oddziaływanie źródeł dyslokacji i przeszkód. Przeprowadzono analizę statystyczną fluktuacji naprężenia i odkształcenia oraz zdarzeń lawinowych, wykazując, że zaproponowany model, pomimo jego uproszczonego charakteru, poprawnie odwzorowuje obserwowane efekty stochastyczne plastycznego płynięcia kryształu w skali nanometrycznej.

We wcześniejszej pracy [4] zaobserwowano niekonwencjonalne quasi-periodyczne zmiany o charakterze skokowym przy powolnym ściskaniu mikro-kolumn niklu, które szczegółowo opisano, odnosząc się do podobnego zachowania się dyskretnego modelu dyslokacji. Istotnym osiągnięciem było wykazanie, że w trakcie deformacji plastycznych mikrokryształu, zespół dyslokacji ewoluuje w różnych skalach czasowych, a lawinowe poślizgi dyslokacyjne

powodujące gwałtowne impulsy plastyczne rozdzielone są etapami wolniejszej relaksacji o innych barierach aktywacji. Zaobserwowano, że zmniejszenie prędkości odkształcenia z 10^{-4} do 10^{-6} s^{-1} powoduje zmianę przebiegu odkształcenia na oscylacyjny z silniejszymi pikami poślizgu w czasie, skorelowany z bardziej zlokalizowaną postacią deformacji plastycznych w przestrzeni. W pracy [5] zaobserwowano podobne efekty w zakresie wyższych prędkości odkształcenia przy wykorzystaniu bardziej szczegółowego (choć wciąż uproszczonego, por. [3]) dyskretnego modelu dynamiki dyslokacji z dwiema wewnętrznymi skalami czasu dla nukleacji i oporu dyslokacji. Zbadano różnice w zachowaniu się materiału, w tym korelacji statystycznych, wywołane innym sposobem wymuszenia odkształceń plastycznych poprzez sterowanie naprężeniem albo odkształceniem. W pracy [6] rozszerzono zakres analizy na przypadek dwóch aktywnych systemów poślizgu w kryształach oraz zbadano m.in. wpływ wymiaru poprzecznego próbki oraz początkowej gęstości dyslokacji na zachowanie się materiału.

Cykl prac [1] – [6] wnosi znaczny wkład w zrozumienie fizyki odkształcenia plastycznego w małych objętościach metali o postaci krystalicznej, jak również amorficznej. W szczególności, jest to istotny wkład w wyjaśnienie i modelowanie podstawowego zjawiska w niskich skalach wymiarowych, jakim jest przerywane płynięcie plastyczne w wyniku stochastycznych impulsów odkształcenia pomiędzy okresami wolniejszej relaksacji.

Pozostałe dwie prace Habilitanta, [7] i [8] w ramach recenzowanego cyklu, są samodzielne i powiązane tematycznie z poprzednimi, lecz dotyczą dalej idącego zagadnienia przewidywania właściwości mechanicznych materiału aż do zniszczenia. Habilitant zaproponował podejście bazujące na uczeniu maszynowym (*machine learning, ML*) przy wykorzystaniu zaawansowanych narzędzi analizy statystycznej. Główna idea polega na przyłożeniu małego obciążenia mechanicznego do badanej próbki, zarejestrowaniu cech korelacji przestrzennych odkształcenia w próbce oraz ich wprowadzeniu do schematu ML. Zdaniem recenzenta, zaproponowane podejście jest ciekawe, o sporym potencjale naukowym i aplikacyjnym, ale potwierdzenie jego skuteczności wymaga jeszcze dalszych badań. Dopracowania wymaga również stosowana terminologia. W pracy [8] Habilitant używa sformułowania „Elastic Instability Modes (EIM)”. To sformułowanie może być jednak mylące, gdyż termin „elastic instability” jest często używany w literaturze jako odnoszący się do ciał i materiałów podlegających odkształceniom czysto sprężystym, a nie plastycznym.

Podsumowując, powyższa charakterystyka osiągnięcia habilitacyjnego dr. Stefanosa Papanikolaou prowadzi do konkluzji, że **Habilitant wniósł znaczny wkład w rozwój dyscypliny Nauki fizyczne w dziedzinie Nauki ścisłe i przyrodnicze.**

3. Ocena aktywności naukowej

Aktywność naukowa Habilitanta obejmowała m.in.:

- Opublikowanie 1 monografii naukowej: S. Papanikolaou, Studies of topology and order in frustrated spin systems, LAP LAMBERT Academic Publishing, ISBN-13:978-3-8454-0966-5, <https://www.lappublishing.com> (2012);
- Opublikowanie 2 rozdziałów monografii naukowych;
- Opublikowanie 42 artykułów w czasopismach naukowych (nieuwzględnionych w cyklu habilitacyjnym), prawie wszystkich indeksowanych w Web of Science;
- Członkostwo w Radach Redakcyjnych 2 recenzowanych czasopism;
- 47 prezentacji na konferencjach naukowych;
- 40 prezentacji zaproszonych;
- Kierownictwo 5 projektów naukowych, finansowanych łącznie w wys. ~1.5 mln EUR;
- Recenzje Funding Proposals in: DOEEERE (2018), NSF Mathematical & Physical Sciences (2017), DOE Basic Sciences (2016). Recenzje publikacji w: Nature Physics, Phys. Rev. Letters, Phys. Rev B, Phys. Rev. E, Soft Matter, Int. J. Plasticity, Acta Materialia, Int. J. Mech. Sci., J. Physics A, Materials Theory, J. of Mechanics;
- Międzynarodową współpracę naukową z wieloma badaczami, udokumentowaną m.in. współautorstwem oraz podziękowaniami za dyskusję zamieszczonymi w publikacjach.

Informacje naukometryczne podane przez Habilitanta:

- Google scholar: Cytowania 1510, Indeks H: 20, 50 publikacji
- Web of Science: Cytowania 907, Indeks H: 16, 49 publikacji
- Scopus: Cytowania 930, Indeks H: 16, 47 publikacji

Stwierdzam, że aktywność naukowa Habilitanta spełnia z nadmiarem wymagania stawiane kandydatowi do stopnia doktora habilitowanego.

4. Wniosek końcowy

Stwierdzam, że cykl ośmiu powiązanych tematycznie artykułów naukowych autorstwa lub współautorstwa dr. Stefanosa Papanikolaou stanowi osiągnięcie habilitacyjne na wysokim poziomie naukowym. Habilitant wniósł znaczny wkład w rozwój dyscypliny Nauki fizyczne w dziedzinie Nauki ścisłe i przyrodnicze. Habilitant wykazał się istotną aktywnością naukową realizowaną w więcej niż jednej uczelni zagranicznej, spełniając z nadmiarem wymagania stawiane kandydatowi do stopnia doktora habilitowanego. Wnoszę o dopuszczenie dr. Stefanosa Papanikolaou do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.