



9 maja 2024 r.

dr hab. inż. Kamil Paduszyński, prof. PW
Katedra Chemii Fizycznej
Wydział Chemiczny
Politechnika Warszawska
e-mail: kamil.paduszynski@pw.edu.pl

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. JEREMIASZA PILARZA zatytułowanej:

Teoretyczne metody przewidywania prędkości ultradźwięków w warunkach zwiększonego ciśnienia i temperatury w wybranych cieczach jonowych

Przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska Pana mgr. Jeremiasza Pilarza została wykonana na Wydziale Nauk Ścisłych i Technicznych Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach. Badania zostały przeprowadzone pod kierunkiem Pana dr. hab. Mirosława Chorążewskiego, prof. UŚ. W dysertacji nie zamieszczono informacji nt. źródeł finansowania lub innych danych dotyczących projektów badawczo-rozwojowych/grantów, w ramach których zrealizowano opisane badania.

Rozprawę stanowi 205-stronicowa monografia napisana w języku polskim. Merytoryczna część pracy zawiera 43 ilustracje (podzielone przez Doktoranta na 4 rysunki i 39 wykresów), 14 tabel (nazywanych przez Doktoranta tablicami), oraz 179 odnośników do zewnętrznych źródeł literaturowych.

Jeśli chodzi o strukturę, praca ma raczej układ klasyczny, z podziałem na 8 "części" podzielonych, w przypadku tylko niektórych, na podrozdziały. Rozpoczyna ją część pt. "I. Wstęp", po której następują "II. Część literaturowa" (ok. 20 stron) oraz "III. Część obliczeniowa" (ok. 40 stron). Następnie Doktorant przedstawia dyskusję wyników w rozdziale "IV. Pochodne termodynamiczne" (ok. 15 stron) oraz reasumuje opisane badania rozdziałem "V. Podsumowanie". Pracę kończy bibliografia (część VI), osobiste podziękowania (część VII) oraz bardzo obszerny aneks ("VII. Dodatek") zawierający wydruki przykładowych skryptów w językach Python, MATLAB i Mathematica (ok. 20 stron). Aneks zawiera ponadto ok. 60 stron dodatkowych wykresów (średnio 6 wykresów stronę) oraz informację o możliwości pobrania plików z kodem źródłowym z publicznego repozytorium zespołu "Thermodynamics in Action" dostępnego z poziomu platformy GitHub.



W dalszej jej części omówię kolejne rozdziały rozprawy zaznaczając przy tym wyraźnie uwagi i komentarze, do których Doktorant powinien się ustosunkować w trakcie publicznej obrony.

Zanim przejdę do oceny rozprawy od strony merytorycznej, pozwolę sobie przedstawić uwagi nt. organizacji treści zawartych w pracy, jej warstwy edytorskiej oraz użytych metod prezentacji wyników. Ogólnie rzecz biorąc, w przypadku znaczącej części rozprawy żaden z tych elementów nie należy do jej najmocniejszych elementów. Każdy z elementów warstwy edytorskiej wymagałby znaczącej poprawy: rysunki są na ogół mało czytelne, opisane są szczegółowo w tekście zamiast w opisie rysunku, tabele opisane są zbyt ogólnie i sformatowane bardzo niestarannie. W końcu brakują wykazu rysunków i tabel, które w tak obszernych pracach znacząco ułatwiają lekturę.

Po lekturze części pt. "I. Wstęp" można odnieść wrażenie, że Doktorant potraktował ten rozdział jak streszczenie, może nawet podsumowanie, pracy. Moja stwierdzenie wynika z licznych odniesień do zastosowanych metod obliczeniowych, a nawet szczegółowych wyników (np. poprzez podawanie wartości błędów modelowania). Uważam, że rozdział "1.1. Wprowadzenie" nie powinien być potraktowany jako przestrzeń na prezentację metodyki badawczej, tym bardziej na omawianie rezultatów. Przestrzenią taką nie powinien być rozdział "1.2. Cel i przedmiot badań", którego to intencją powinno być przedstawienie hipotez badawczych oraz ewentualnie "enigmatyczne" zasygnalizowanie czytelnikowi pomysłów na ich zweryfikowanie. Tymczasem, już w podrozdziale 1.2. Doktorant "wykłada wszystkie karty na stół" pisząc o kluczowych wynikach (np. o tym, która metoda wykazuje najlepszą/najgorszą dokładność; str. 11: "metoda spinodalna pozwoliła na najdokładniejsze oszacowanie [...]", "wyniki modelowania prędkości dźwięku w przypadku metody CP-PC-SAFT obarczone były największym błędem [...]"), omawiając przy tym mniej istotne niuanse techniczne (np. nt. metody szacowania pojemności cieplnej w stanie gazu doskonałego, doboru funkcji aktywacji sieci neuronowej). Poza tym, w podrozdziale 1.2. Doktorant duplikuje częściowo informacje zawarte w podrozdziale 1.1.; m.in. ponownie wymienia zastosowane metody obliczeniowe oraz podaje informacje o jakości wyników uzyskanych z ich pomocą. W podrozdziale 1.2., Doktorant przedstawia również tablicę 1 (*notabene*: dlaczego tablicę a nie po prostu tabelę?) z listą cieczy jonowych z dostępnymi danymi nt. prędkości dźwięku (c) w zakresach zwiększonego ciśnienia oraz wykresy 1 do 3 ilustrujące rozkład wartości c oraz temperatury i ciśnienia, w których dostępne są te dane. Moim zdaniem takie zestawienia



należałoby zamieścić w (pod)rozdziale opisującym bazę danych fizykochemicznych ("data set"); odwołanie do tablicy 1 znajduje się również dużo później, rozdz. 2.4, str. 26, co dodatkowo uzasadnia moją sugestię. Poza tym, od strony edytorskiej tablica 1 jest niepotrzebnie wydłużona. Struktury jonów są na tyle powszechne, że wystarczyłoby podanie skrótów oraz ich zdefiniowanie na początku pracy lub w stopce tabeli. Przy okazji omawiania Tablicy 1 zabrakło mi również informacji nt. tego jak użyta przez doktoranta baza danych ma się do publicznie dostępnej bazy NIST ILThermo. Te same uwagi dotyczą tablicy nr 2. Proszę Doktoranta o ustosunkowanie się do nich w czasie publicznej obrony. Forma wykresu 1 (wykres pudełkowy/"box plot", choć niekompletny), którego celem jest ilustracja tego w jaki sposób zmienia się c w funkcji struktury cieczy jonowej, jest moim zdaniem zupełnie nieadekwatna. Byłoby inaczej, gdyby wartości c były z tego samego zakresu temperatury i ciśnienia dla każdej z cieczy jonowych. Na stronie 18 Doktorant stwierdza, że "różnice [...] [w zakresach c] wynikają z budowy molekularnej cieczy jonowych". Moim zdaniem jednak wynikają one po prostu z różnic w dostępie do danych. Ogólnie rzecz biorąc wykresy 1-3 nie wnoszą niczego interesującego, a ponadto są nieczytelne z uwagi na brak siatki. Dużo bardziej użytecznym rozwiązaniem byłoby zestawienie wartości c różnych cieczy jonowych w tej samej temperaturze/ciśnieniu (co jest zresztą zrobione na wykres 4, w rozdz. 2.5) lub chociażby posortowanie "pudełek" względem ich szerokości.

Rozdział "II. Część literaturowa" składa się z dwóch podrozdziałów. Pierwszy z nich (rozdz. 2.1.) poświęcony został budowie i właściwościom cieczy jonowych. Moim zdaniem temat został potraktowany bardzo powierzchownie, a dobór literatury nie wykracza poza klasyczne prace cytowane praktycznie w każdej dysertacji czy publikacji traktującej ogólnie o cieczach jonowych. Niestety, doktorant nie odwołuje się w tej części do najnowszej literatury, artykułów przeglądowych. Istotnie, najnowsze z cytowanych prac [57-69] pochodzą z przełomu XX/XXI w., najnowszą jest artykuł Weltona z roku 2018. Drugi z podrozdziałów (rozdz. 2.2) dotyczy zastosowań cieczy jonowych (o których, *notabene*, Doktorant już wspominał w rozdz. 1.1). Paradoksalnie, podrozdział ten jest dużo bardziej rozbudowany niż 2.1, mimo że praca ma raczej charakter podstawowy, aniżeli aplikacyjny. Zresztą niezrozumiałe jest dla mnie poruszanie w przedłożonej pracy zagadnień zastosowań cieczy jonowych w obszarach takich jak mikrobiologia, synteza organiczna, metalurgia, elektrochemia, kataliza, technologie półprzewodnikowe. Moim zdaniem Doktorant, powinien jedynie odnotować te obszary, a skupić się bardziej na



zastosowaniach, w których ważna jest znajomość parametrów fizykochemicznych analizowanych w badaniach własnych (gęstość, prędkość dźwięku, współczynniki termoelastyczne).

Rozdział "2.3. Prędkość dźwięku w ośrodku ciągłym" to zdecydowanie najlepiej zredagowany fragment pracy, w której doktorant przedstawia podstawy fizykochemiczne propagacji fal ultradźwiękowych w ośrodku ciągłym oraz zjawisk wpływających na prędkość propagacji (absorpcja fali akustycznej w cieczach, dyspersja prędkości fal akustycznych, relaksacja ultradźwięków). Rozdział ten potwierdza znajomość tematu przez doktoranta i daje czytelnikowi cenny zestaw odnośników literaturowych do prowadzenia dalszych samodzielnych studiów.

Rozdział 2.4 przedstawia przegląd literatury opisującej jak wymienione efekty wpływają na pomiary prędkości dźwięku w cieczach jonowych, zwłaszcza w warunkach zwiększonego ciśnienia. Podrozdział ten bardzo dobrze koresponduje z poprzednio omówionymi zagadnieniami. Ponadto wprowadza on czytelnika w zagadnienie pomiarów gęstości cieczy jonowych omawiając m.in. równanie Taita. Dodatkowo, Doktorant przedstawia w tablicy 2 (moim zdaniem znowu za wcześnie) listę cieczy jonowych, dla których opublikowano wyniki pomiarów gęstości pod zwiększonym ciśnieniem. Zaskoczyło mnie tutaj spostrzeżenie, że nie ma pełnej spójności między zestawem związków w tablicach 1 i 2 (zawierających odpowiednio 30 i 26 cieczy jonowych). Następnie Doktorant przedstawia równanie Newtona-Laplace'a oraz szereg relacji termodynamicznych, z których to można wyliczyć współczynnik rozszerzalności izobarycznej oraz współczynnik ściśliwości izotermicznej. Ta część jest napisana raczej przejrzyście i stosunkowo jasno, nie wnoszę do niej żadnych zastrzeżeń.

Podrozdział 2.5 traktuje o wpływie budowy cieczy jonowych na prędkość dźwięku i gęstość. Wpływ ten analizowany jest osobno pod kątem budowy kationu i anionu. Na przykład, analizy ilustrują wykresy 4 i 5, na których Doktorant dyskutuje ranking cieczy jonowych względem prędkości propagacji fal ultradźwiękowych oraz gęstości. O ile dyskusja nt. pierwszego parametru jest rzeczowa, to nie mogę odnieść takiego wrażenia nt. dyskusji nt. gęstości, która potraktowana została nieco po macoszemu. Przede wszystkim wydaje mi się, że parametrem dużo bardziej odpowiednim w tym kontekście byłaby objętość molowa, dla której niejednokrotnie wykazano, że zmienia się dość regularnie/addytywnie ze strukturą. Świadczy o tym mnogość różnego rodzaju metod udziałów grupowych (bazujących właśnie na objętości molowej),



z których wynika, jak konkretne grupy funkcyjne, czy też rodzaje jonów, wpływają na upakowanie przekładające się rzecz jasna na gęstość. Bardzo wartościową częścią tego podrozdziału jest wykres 6 udowadniający, że anion cieczy jonowych determinuje w pewien sposób to jak prędkość dźwięku w tych związkach ma się do ich gęstości. Ponownie jednak Doktorant omawia aspekty techniczne (algorytm K -średnich) w miejscu do tego nieprzeznaczonym; opis taki powinien się pojawić w sekcji dot. metod eksperymentalnych (tutaj obliczeniowych) lub w ogóle w załączniku. Rozdział kończy dyskusja nt. wpływu masy molowej kationu i anionu, którą to Doktorant podsumowuje na wykresie 7 w postaci diagramu typu "heat map". O ile sam pomysł takiego sposobu prezentacji danych wydaje się interesujący, to mam wątpliwości co jego realizacji. Doktorant nie wyjaśnił bowiem, w jaki sposób ustalona została skala na wspomnianym wykresie oraz jak ustalone zostały obszary na płaszczyźnie $M_{\text{kation}}/M_{\text{anion}}$ odpowiadające konkretnej wartości prędkości dźwięku.

Tytułem podsumowania rozdziału "II. Część literaturowa", uważam, że (mimo wspomnianych uchybień) rozdział ten merytorycznie i rzeczowo omawia tematykę badań nad prędkością propagacji fal ultradźwiękowych w cieczach jonowych.

Rozdział "III. Część obliczeniowa" stanowi meritum pracy, w której Doktorant w czterech kolejnych podrozdziałach (3. n) omawia metodykę/algorytmy/podstawy zastosowanych metod (3. n .1) oraz wyniki modelowania (3. n .2), gdzie numery $n = 1, 2, 3, 4$ odnoszą się odpowiednio metody spinodalnej, metody CP-PC-SAFT, sieci neuronowej, oraz klasycznego uczenia maszynowego. Ponownie, mam tutaj zastrzeżenie dotyczące układu treści: będę się upierał, że opis metod i dyskusja wyników powinny być przedstawiane w osobnych rozdziałach - nie podrozdziałach, jak ma to miejsce w części III.

Wszystkie podrozdziały części III zorganizowane są mniej więcej w ten sam sposób. W części pierwszej (3. n .1) doktorant omawia podstawy matematyczne i/lub termodynamiczne danej metody po czym przechodzi do przedstawienia wyników. Opisy podstaw są przedstawione poprawnie, opatrzone odnośnikami do literatury, w której to można uzyskać bardziej szczegółowe informacje nt. omawianej metody obliczeniowej. Od strony edytorskiej, należy jednak zwrócić uwagę (taka moja rola jako recenzenta) na błędy w formatowaniu niektórych równań. Opisy podstaw modeli poprzedzają omówienie wyników modelowania (3. n .2), które to zrealizowane jest w postaci wykresów rozrzutu ilustrujących jak wartości obliczone analizowanej wartości



mają się do wartości eksperymentalnych. Ponadto, w przypadku wszystkich metod poza klasycznym uczeniem maszynowym, Doktorant pokazuje przebiegi izoterm prędkości dźwięku oraz gęstości dla cieczy jonowych, dla których uzyskano najlepsze i najgorsze wyniki. Analiza statystyczna uzyskanych wyników sprowadza się jedynie do podania średniego błędu względnego (AARD) obliczonych wartości uzupełnionego w niektórych przypadkach współczynnikiem determinacji. Wartości AARD zestawiono w tablicach 3 (metoda spinodalna; w tytule brakuje informacji nt. wielkości, której dotyczy odchylenia), 5-6 (CP-PC-SAFT), 9-10 (sieć neuronowa) i 12 (klasyczne uczenie maszynowe). Taki sposób podsumowania wyników symulacji można uznać za stosowny. Niemniej jednak, uzupełniłbym go analogicznymi analizami przeprowadzonymi w obrębie cieczy jonowych ze wspólnym typem kationu (np. imidazoliowe, pirydyniowe, itp.) i anionu (organiczne, siarczany, itp.). Rozwinąłbym również omówienie metody CP-PC-SAFT w rozdz. 3.2.1 poprzez podanie bardziej szczegółowych równań odróżniających to podejście od "klasycznych" modeli z rodziny SAFT. W tym samym rozdziale Doktorant wspomina o tym, że "przeprowadzono dodatkowe obliczenia wykorzystujące pierwotną metodę PC-SAFT". Brakuje jednak szczegółów nt. tego jak przebiegały te obliczenia (schemat molekularny, sposób doboru parametrów, itp.).

Do podrozdziałów 3.n.1. nie ma uwag innych niż te przedstawione w poprzednim paragrafie. **Podrozdziały 3.n.2 stanowią kluczową merytoryczną część rozprawy, dlatego pozwolę sobie tutaj przedstawić bardziej szczegółowe komentarze oraz sformułować pytania i uwagi, do których Doktorant powinien ustosunkować się w trakcie publicznej obrony.**

Rozdział 3.2.1: Metoda spinodalna

1. W pracy nie znajdują wartości dopasowanych współczynników z równania (14). Nie znajdują również informacji nt. algorytmów dopasowania tych współczynników, ich istotności statystycznej, przedziałów ufności, itp. Proszę o uzupełnienie. To kluczowe informacje, bez których nie jestem w stanie odtworzyć przedstawionych obliczeń.
2. Odchylenia widoczne na wykresie 9 wykazują dość regularne przebiegi. Proszę o komentarz. Dobrze wykonana regresja daje na ogół losowy/przypadkowy rozrzut odchyleń wokół linii bazowej zerowego błędu. Ile parametrów zostało dopasowanych do przedstawionych danych?

Rozdział 3.2.2: Równanie stanu CP-PC-SAFT



1. Proszę o ustosunkować się do komentarza dot. równania PC-SAFT (por. wyżej). Proszę o przedstawienie tabeli parametrów oraz metody ich dopasowania.
2. Czy podjęta została próba wykonania obliczeń z użyciem parametrów dostępnych w literaturze?
3. Tablica 4. Parametrów tych nie nazywałbym "molekularnymi". To po prostu współczynniki rozwinięcia pewnych wyrazów w jednym w udziałów energii Helmholtza w szereg potęgowy. Z czego wynika tak duża liczba znaczących w przedstawionych wartościach? Czy zbadano istotność statystyczną wszystkich wyrazów? Być może niektóre z nich są nieistotne i "przeuczają" równanie stanu. Być może jest ich za mało? Jak ustalono wartości początkowe w procesie optymalizacji tych parametrów?
4. Czy w modelowaniu cieczy jonowych uwzględniono asocjację, czyli "flagowy" efekt opisywany przez modele z rodziny SAFT. Jeśli nie, to pojawia się ryzyko przewidywania wysokich lotności cieczy jonowych. Czy Doktorant wykonał obliczenia sprawdzające modelową prężność pary cieczy jonowych w zbadanym zakresie temperatury? Dobrą informacją nt. jakości modelu byłyby przewidywane punkty krytyczne równowagi ciec-para. Czy były podjęte próby wykonania takich obliczeń? - w końcu to wersja CP.
5. W pracy nie odnajduję parametrów molekularnych cieczy jonowych, poza korelacją empiryczną daną równaniami (19)-(21). Czy mam rozumieć, że parametry tak wyrafinowanego modelu jakim jest CP-PC-SAFT zależą tylko od masy molowej cieczy jonowej? Jeśli jest inaczej, proszę o przedstawienie tabeli parametrów.

Rozdział 3.3.2: Sieć neuronowa

1. W tablicy 8 pojawia się współczynnik "fi-kwadrat". W tekście natomiast nie znajduje dalszego wyjaśnienia. Proszę o komentarz.
2. I tym przypadku nie mam możliwości odtworzenia wyników. Ile wynoszą wartości wag sieci neuronowej. Ile wynosi liczba wag i jak ma się ona do liczby punktów treningowych?
3. Opis optymalizacji architektury sieci neuronowej jest wg mnie przedstawiony bardzo powierzchownie. Proszę o dokładne przedstawienie, ile było warstw ukrytych, ile było neuronów w poszczególnych warstwach?
4. Czym jest parametr IS_SYM użyty jako jedno z wejść sieci neuronowej?
5. Doktorant trafnie zauważa istotę walidacji zewnętrznej, czyli testowania, dlatego dokonuje sprawdzenia dokładności z jaką wytrenowana sieć



neuronowa przewiduje badane właściwości dla cieczy jonowych nieuwzględnionych w procesie uczenia. Chciałbym jednak zapytać o to w jaki sposób dokonano podziału na zbiory treningowy i testujący oraz czy sprawdzono jak wyniki modelowania zależą od takiego podziału. Jak wyglądają statystyki testowania na tle statystyk treningu (np. parametr Q^2)? - w pracy nie ma nic na ten temat poza wykresami 18 i 19.

6. Na stronie 67 Doktorant wspomina, że podjęto próbę implementacji metody udziałów grupowych, która zakończył się jednak niepowodzeniem. Proszę o rozwinięcie tego tematu.

Rozdział 3.4.2: Uczenie maszynowe

1. Proszę uzasadnić wybór zastosowanych algorytmów. Czy zastosowano optymalizację hiperparametrów, np. metodą siatkową, losową, czy optymalizacji bayesowskiej?
2. Dlaczego zdecydowano się na walidację wewnętrzną krzyżową z użyciem akurat $k = 25$ podzbiorów ("foldów"). Skąd taka wartość k ? Na ogół wartości te są dużo mniejsze, rzędu od 5 do 10. Czy Doktorant rozważał zastosowanie metody walidacji LOO?
3. Dlaczego w przypadku metod uczenia maszynowego nie zastosowano walidacji zewnętrznej / testowania?

Do rozdziału "III. Część obliczeniowa" mam jeszcze jedną ogólną (ale bardzo istotną) uwagę natury technicznej, rzutującą na czysto użytkowy aspekt pracy zarówno od strony naukowej jak i czysto aplikacyjnej. Praca naukowa powinna być zaprezentowana w sposób umożliwiający innym badaczom podjęcie próby odtworzenia wyników - to nie podlega żadnej dyskusji. Niestety, w tym przypadku brakuje wyraźnych instrukcji o tym, który kod załączony w aneksie dotyczy którego modelu. Sam kod jest zresztą napisany bardzo niestarannie, stosuje lokalne adresy plików na dysku Doktoranta, nie implikuje dobrych praktyk, nie jest udokumentowany, a obarczony nieprecyzyjnymi komentarzami. Poza tym, pod załączonym adresem internetowym nie znalazłem skryptów/notatników dotychczas do pracy. Wynika z tego, że Doktorant oczekuje od czytelnika/recenzenta, że ten przepisze ręcznie dziesiątki linii kodu. **Przed publiczną obroną będę zatem oczekiwał od Doktoranta, aby ten udostępnił mi kod z aneksu w formie edytowalnej, np. w formie osobnego publicznego repozytorium na platformie GitHub lub innej platformie dystrybucji otwartego oprogramowania.**



Część merytoryczną rozprawy kończy rozdział "IV. Pochodne termodynamiczne", w którym Doktorant przedstawia wyniki testowania opracowanych wcześniej modeli poprzez obliczenie dwóch fundamentalnych współczynników termoelastycznych. W uzyskanych rezultatów wynika, że model termodynamiczny CP-PC-SAFT daje najdokładniejsze przewidywania, jeśli chodzi współczynnik rozszerzalności termicznej. Sieć neuronowa i metody uczenia dają najgorsze wyniki. Osobiście uważam, że było to to przewidzenia (zwłaszcza w przypadku sieci neuronowych), ponieważ tego typu modele wykazują bardzo nieregularne przebiegi zarówno, jeśli chodzi interpolację jak również ekstrapolację. Doktorant podziela moją opinię na łamach omawianego rozdziału. Ponadto wydaje mi się, że przyczyną tak druzgocącej porażki sieci neuronowej może być jednak jej przeuczenie. Nie mogę jednak zweryfikować tej hipotezy z uwagi na brak danych nt. topologii sieci (por. powyższy komentarz do rozdz. 3.3.2). Główną konkluzją z tej części pracy jest to, że dokładne przewidywania pochodnych są możliwe tylko przy zastosowaniu eksperymentalnych danych wolumetrycznych pVT oraz modelowych przewidywań prędkości dźwięku.

Rozdział IV uzupełnia szczegółowe zestawienie wykresów obliczonych wartości współczynników dla każdej z cieczy jonowych. Uważam, że zestawienie to jest zupełnie niepotrzebne. Sztucznie wydłuża pracę, będąc przy tym przygotowanym niestarannie (różne rozmiary rysunków sprawiają, że momentami nie do końca wiadomo, który wykres dotyczy której cieczy jonowej; np. m. stronami 183 i 184 znajduje się pusta kartka, na której widnieje tylko nazwa/skrót cieczy jonowej). Dużo lepszym rozwiązaniem byłoby udostępnienie porządnie przygotowanego notatnika (np. w środowisku Jupyter Notebook) wraz z kompletną bazą danych (np. w formie arkusza XLSX lub pliku CSV).

Rozprawę zamyka podsumowanie pracy, w którym Doktorant jeszcze raz odnosi do uzyskanych wyników oraz poprawnie, a przy tym krytycznie, formułuje wnioski, przede wszystkim te na temat możliwości zastosowań sieci neuronowych i innych metod uczenia maszynowego w opisie temperaturowo-ciśnieniowych przebiegów gęstości i prędkości propagacji fal ultradźwiękowych.

Pomimo wymienionych w tej recenzji uchybień w aspektach edytorskich, stwierdzam, że z przedłożonej pracy wynikają duża wiedza i umiejętności Pana mgr. Jeremiasza Pilarza w obszarze cieczy jonowych oraz metod modelowania



matematycznego (termodynamicznego oraz z użyciem metod AI) właściwości fizykochemicznych. Poziom naukowy przedstawionej do recenzji rozprawy doktorskiej jest wysoki a wyniki mogą stanowić istotny wkład w zrozumienie związków struktura-właściwość w cieczach jonowych oraz przyspieszyć rozwój nowoczesnych modeli termodynamicznych jak również wdrożenie zastosowań metod uczenia maszynowego (ogólnie: sztucznej inteligencji) w chemii fizycznej. Uważam, że Doktorant poprawnie wykonał obliczenia i trafnie sformułował wnioski z przeprowadzonych badań, wykazał się samodzielnością naukową i techniczną.

W oparciu o przeprowadzoną analizę rozprawy doktorskiej stwierdzam, że przedłożona do recenzji dysertacja mgr. inż. Jeremiasza Pilarza pt. „Teoretyczne metody przewidywania prędkości ultradźwięków w warunkach zwiększonego ciśnienia i temperatury w wybranych cieczach jonowych” spełnia wymagania stawiane pracom doktorskim określone w Ustawie z dnia 20 lipca 2018 r. - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (art. 187, Dz. U. 2023 r. poz. 742). Wnoszę do Rady Naukowej Instytutu Chemii Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach o dopuszczenie Pana mgr. inż. Jeremiasza Pilarza do dalszych etapów postępowania w sprawie nadania stopnia doktora.

Kawul Podunyski