

РЕЦЕНЗИЯ

върху дисертационен труд
за придобиване на образователната и научна степен „доктор“

Автор на дисертационния труд
Росен Михов Михов

Тема на дисертационния труд
„Монте Карло подход за оптимизация на биметални наноструктури“

По професионално направление
4.6 Информатика и компютърни науки
Докторска програма „Информатика“

Подготвил рецензията
проф. д-р Олимпия Роева
Институт по биофизика и биомедицинско инженерство, БАН

1. Актуалност на разработвания в дисертационния труд проблем в научно и научно-приложно отношение

Проблемът за численото моделиране и оптимизация на биметални наноструктури е изключително актуален поради широкото им приложение в катализа, енергетиката, наномедицината и оптоелектрониката, където свойствата силно зависят от размер, форма и повърхностна конфигурация. Класическите детерминистични и континуумни модели често се оказват неадекватни на нанониво, тъй като не отчитат коректно флуктуациите, стохастичните преходи и мултискалния характер на процесите. Монте Карло (МС) подходите предоставят естествена рамка за описание на термодинамичното поведение, редките събития и стабилните конфигурации на наноструктури, като позволяват изследване на големи конфигурационни пространства при приемлива изчислителна цена. Особено при биметалните системи, където взаимодействията и енергийните ландшафти са силно нелинейни, МС методите превъзхождат класическата молекулна динамика при оптимизация и анализ на равновесни състояния. В този контекст дисертационен труд, посветен на МС подход за оптимизация на биметални наноструктури, е научно значим и отговаря на актуални международни изследователски тенденции.

Докторантът си поставя за цел да разработи Монте Карло подход със симулирано закаляване, използващ потенциала на силно свързване, за оптимизация на различни видове биметални наноструктури, включително наночастици, наножици и нанофилми.

За изпълнение на поставената цел са дефинирани шест задачи:

1. Да се предложи метод за оптимизация на биметални наноструктури, включително наночастици, наножици и нанофилми.
2. Да се изследва ефективността на предложения метод.
3. Да се предложи подходящ начин за определяне и регулиране на параметрите на метода.
4. Да се определи кои от следните фактори влияят най-съществено върху оптималния избор на начална температура на симулирано закаляване: химичният елемент, размерът на наночастицата, видът на решетката, големината на решетката.
5. Да се предложи софтуерна архитектура и да се разработи софтуерна система, реализираща новия метод, която да позволява високо ниво на оптимизиране ефективността на изчисленията, гъвкавост за вариране на алгоритмите и техните параметри и добра съвместимост с външни приложения за анализ и визуализация на резултатите.
6. Да се направи изследване, прилагащо предложения метод за конкретен клас златно-сребърни наноклъстери с 3000 атома, които представляват интерес за много приложения, за да се установи как разликите в съотношението Au:Ag и симетрията на кристалната решетка влияят върху атомното подреждане и процесите на повърхностна сегрегация.

2. Степен на познаване на състоянието на проблема и на литературния материал

В дисертационни труд са цитирани 149 литературни източника и бих искала да отбележа перфектното библиографско описание на литературата. Докторантът представя много добър анализ на методите за моделиране и числова оптимизация на атомните конфигурации на метални и биметални наноструктури. Систематично и аналитично са представени стъпките и подходите използвани при изследване на стабилността на металните наноструктури чрез решаване на оптимизационен проблем; методи за оптимизация на метални и биметални наноструктури; и моделиране на дифузия при биметални наноструктури.

Росен Михов показва висока степен на познаване на състоянието на проблема и на подходящите инструменти и подходи за решаване на поставените задачи и постигане на целта на дисертационния труд.

3. Обща аналитична характеристика на дисертационния труд

Дисертационният труд е добре структурирана и логически последователен съгласно поставените задачи за решаване. Трудът е в обем от 124 страници и

съдържа: благодарности, увод, глава 1 (обзор на съществуващите методи); глави 2-6 с основни теоретични постановки, научни резултати от изследването и приложения, заключение – резюме на получените резултати, приноси на дисертационния труд, списък на публикациите по дисертационния труд, списък на забелязаните цитирания, участие в научноизследователски проекти, декларация за оригиналност на резултатите и библиография, наброяваща 149 литературни източника.

В Глава 1 се представя преглед на съществуващите методи за моделиране на метални и биметални наноструктури. Описва се постановката на проблема и се обяснява как може да се разработи алгоритъм за глобална оптимизация. Обсъжда се изборът на функционална енергия и активността на Монте Карло симулациите, които осигуряват инструмент за работа с данни.

В Глава 2 се разглеждат два подхода за оптимизация на биметални наноструктури, включително математически модел, три стандартни алгоритъма и оценка на тяхната ефективност чрез симулационни резултати. Методът с два етапа е описан в пет стъпки. Първият етап на метода е базиран на симулирано закаляване във широки решения, а вторият – на симулирана дифузия.

В Глава 3 са представени резултатите от тестването на двуетапния метод, който е съпоставен с едноетапен подход. Анализира се оптималната процедура за разделяне на изчислителните ресурси между двата етапа и се предоставят експериментални данни за определяне на параметрите на методите. Резултатите служат за оценка на ефективността на методите за оптимизация на наноструктури.

Глава 4 представя изследване на връзката между началната температура и работата на алгоритъма на Монте Карло за широка решетка. Провеждат се тестове с голям брой наноструктури на два химически елемента (сребро и кобалт), при различни размери и условия. Резултатите, представени от Р. Михов, показват, че алгоритъмът на Монте Карло е подходящ за оптимизация на биметални наноструктури и позволява адаптиране на параметрите при симулации.

Глава 5 описва методи за изследване на автономното поведение и процесите на повърхностна сегрегация в златно-сребърни наноклетки от 3000 атома. Акцентът е върху спецификата на работата с наноклетки и анализ на резултатите за трите основни Au:Ag кристални решетки. Представени са също експериментални наблюдения и оценка на влиянието на локалния порядък върху макроскопичните свойства на биметалните наноструктури. Систематизирани са ограниченията на двуетапния метод и насоки на бъдещи изследвания.

Глава 6 разглежда софтуерната система, разработена като част от работата по дисертационни труд. Представен е софтуерен архитектурен дизайн за реализиране на двуетапния метод, който позволява високопроизводително изпълнение на оптимизационни ефекти и паралелно пускане на алгоритми при различни условия. Софтуерната система работи на Linux и Windows и използва стандартен XYZ формат за входни и изходни данни от атомни конфигурации.

Всяка глава завършва със систематизирани изводи от проведените изследвания. Добро впечатление прави декларираното от Р. Михов, че получените резултати в дисертационния труд се използват и се доразвиват за прилагане за различни видове биметални наноструктури.

4. Оценка на приноси на дисертационния труд и тяхната значимост

Приемам формулираните в дисертационния труд приноси, а именно:

1. **Предложен е двуетапен решетъчен Монте Карло метод** за оптимизация на биметални наноструктури, включително наночастици, наножици и нанофилми, с първи етап симулирано закаляване върху широка решетка и втори етап симулирана дифузия. Методът се реализира с помощта на структури от данни и стратегия за предварителна обработка, които значително повишават ефикасността му, и позволяват да се оптимизират наноструктури от няколко стотици до няколко хиляди атома на стандартен персонален компютър.
2. **Експериментално е установено**, че за разпределението на изчислителните ресурси между двата етапа на метода ефективна стратегия представлява да се използва 30% от времето за първия етап и 70% от времето за втория етап.
3. **Експериментално е установено**, че конкретният начин, по който методът е формулиран в 5 стъпки, е уместен и води до успешно регулиране на параметрите.
4. **Изследвано е влиянието на началната температура** върху работата на ширококорешетъчния Монте Карло алгоритъм при различни решетки и химични елементи. Експериментално е установено, че за избирането на подходяща начална температура, най-важен фактор е размерът на решетката, като най-високи температури се изискват при поставянето на малка частица върху голяма решетка. Видът химичен елемент също има известно значение, а видът на решетката не оказва съществено влияние.
5. **Направена е адаптация** на предложения двуетапен метод за работа с наноклетки. С него са изследвани атомното подреждане и процесите на повърхностна сегрегация в златно-сребърни наноклетки от 3000 атома. Сравнителен анализ на резултатите за три състава ($\text{Au:Ag} = 1:1, 1:3, 3:1$) и две решетки (fcc и икосаедрична) показва, че fcc наноклетките имат по-тънки стени, кухня с по-голям радиус и повече нискокоординирани атоми на повърхността в сравнение с икосаедричните. Ag атомите показват тенденция да мигрират към двете повърхности на наноклетката, поради което вътрешните слоеве на Au-обогащените сплави са практически лишени от Ag и преобладават Au-Au връзките. Ag-обогащените сплави имат максимален брой смесени Ag-Au връзки и по-еднороден локален порядък и на двете кристални решетки.
6. **Предложена е софтуерна архитектура** за реализиране на двуетапния метод, която позволява високо ниво на оптимизиране ефикасността на изчисленията, гъвкаво паралелно пускане със съчетаване на съставните алгоритми при различни условия и добра съвместимост с външни приложения за анализ и визуализация на резултатите.

5. Преценка на публикациите по дисертационния труд

Резултатите от дисертационния труд са получили широко разпространение в научната област. Докторантът представя 4 публикации в сборници от международни конференции и списание WSEAS Transactions on Electronics. Един от сборниците е публикуван в престижната научна поредица Studies in

Computational Intelligence и има импакт ранг (SJIR). Две от публикациите са индексирани в Scopus. Росен Михов е първи автор на 3 от публикациите. Две от публикациите имат общо 6 цитирания в Scopus и едно в дисертационен труд. Scopus Хирш индексът на Р. Михов е 3. Всичко това показва високото ниво на научните изследвания и резултати, както и личното участие на докторанта в изпълнението на задачите.

6. Оценка на съответствието на автореферата с изискванията за изготвянето му, както и на адекватността на отразяване на основните положения и приносите на дисертационния труд.

Авторефератът правилно отразява съдържанието на дисертацията и дава представа за разглежданите проблеми, както и за приносите на дисертационния труд.

7. Критични бележки по дисертационния труд

Нямам критични бележки по дисертационния труд.

8. Заключение с ясна положителна или отрицателна оценка на дисертационния труд

Предвид доказаната научна стойност на проведените научни изследвания и приносния характер на постигнатите резултати, оценявам изключително положително дисертационния труд на Росен Михов Михов.

Дисертационният труд отговаря на изискванията на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), Правилника за прилагане на ЗРАСРБ, Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в ИИКТ – БАН. Постигнатите научни и научно-приложни резултати ми дават основание да предложа на уважаемото научно жури да присъди образователната и научна степен „доктор” на Росен Михов Михов в професионално направление 4.6 Информатика и компютърни науки, докторска програма „Информатика“.

09.01.2026 г.
София

