

PROF. MAREK MORZYŃSKI

Poznan University of Technology,
Chair of Virtual Engineering, Jana Pawla II 24,
PL 60-965 Poznań, Poland
Tel.: +48-61-665 2778
Fax: +48-61-665 2618
Email: Marek.Morzynski@put.poznan.pl



Prof. Marek Morzynski · PUT · Jana Pawla II 24 · 60-965 Poznan · Poland

Poznań, 14.04.2019r.

***Opinia o rozprawie doktorskiej
mgr Marka Bukowickiego***

Dynamics of settling pairs of elastic particles a low Reynolds number regime

Opinia została sporządzona zgodnie z życzeniem Rady Naukowej Instytutu Podstawowych Problemów Techniki PAN, wyrażonym w piśmie z dnia 4 lutego 2019r., przesłanym przez Sekretarza Rady Naukowej Instytutu Podstawowych Problemów Techniki PAN, Pana dr hab. inż. Zbigniewa Ranachowskiego, profesora IPPT PAN.

Struktura pracy i jej zawartość merytoryczna

Praca doktorska Marka Bukowickiego jest napisana w języku angielskim. Liczy, wraz z Dodatkiem, 148 stron, składa się z 9 rozdziałów i bibliografii o 173 pozycjach. Zawiera streszczenie w języku polskim i angielskim.

Praca poprzedzona jest informacją o publikacjach indeksowanych, jakie powstały w związku z jej zawartością.

We wstępie autor omawia specyfikę ruchu mikrocząsteczek w płynie, wagę rozważanych problemów i podkreśla różnice modeli stosowanych w tym przypadku w stosunku do modelowania zjawisk zachodzących w przepływach w skali makro. Przytacza literaturę istniejącą dla zjawiska osiadania cząsteczek. Ponadto definiuje model przyjęty w pracy. Obliczeniową specyfiką skali i modelu przyjętego w pracy jest możliwość wyznaczania prędkości cząsteczek w płynie bez rozważania ruchu samego płynu. Inna jest też specyfika ruchu grupy cząstek.

Rozdział drugi zawiera opis metodologii stosowanej w pracy. Wydłużone cząsteczki - włókna - zastąpione zostają szeregiem stykających się kul, tworząc „bead model” (model koralikowy). Wyróżnione zostają układy dumbbell i trumbbell złożone odpowiedni z 2 i 3

cząsteczek. Wskazane zostają uproszczenia jakie związane są z poszczególnymi układami. Wprowadzone zostają siły sprężyste, związane z rozciąganiem włókna i jego zginaniem. W przypadku zginania, zademonstrowano trzy modele potencjału, o różnej ważności dla dużych ugięć. Siły sprężyste są wyznaczone jako pochodne tych potencjałów. Zdefiniowane zostają własności materiałowe układu cząsteczek, w szczególności, oprócz tradycyjnych parametrów sprężystych, wprowadzona zostaje bezwymiarowa miara łącząca siłę grawitacji i sztywność zginania włókna.

Model hydrodynamiczny jest diametralnie różny od modeli stosowanych w przypadku skali makro. W pracy zastosowano modele addytywne, umożliwiające superpozycję rozwiązań dla pojedynczych cząsteczek lub kul (PP & RPY - point-particle lub Rotne-Prager-Yamakawa). Cała hydrodynamika jest wyrażona przez 3×3 „mobility matrix” zawierającą oddziaływania między kolejnymi cząsteczkami, przy czym wyrazy „mobility matrix” są wyznaczone analitycznie. Opisana jest normalizacja wartości parametrów i zmiennych. W końcowej części rozdziału 2.5 mowa o alternatywnych sformułowaniach potencjału sprężystego i oddziaływań hydrodynamicznych, stosowanych przez innych badaczy.

Wyjaśnione zostaje zastosowanie symetrii układu i badania perturbacji tej symetrii w pracy.

Autor wprowadza metodykę zazwyczaj nazywaną „periodic boundary conditions” (nie używając tego określenia).

Rozdział trzeci przedstawia modelowanie osiadania pary cząsteczek typu dumbbell. Zastosowano tu model oddziaływania hydrodynamicznego typu PP, wskazując na równoważność z modelem RPY. Przedstawiono przyjęty układ początkowy cząsteczek. Wyznaczono oscylacyjne ruchy - trajektorie kul dla granicznych wartości sztywności ich połączenia. Zbadano zachowanie się systemu dla różnych odległości kul w parze. W dalszej kolejności uwzględniono elastyczność kul i porównano z przypadkiem sztywnego układu. Wskazano na istnienie uniwersalnej trajektorii. W dalszej części badań przeprowadzono wariację parametrów i geometrii układu.

W rozdziale czwartym rozważa się osiadanie dwóch nieskończenie sztywnych włókien zamodelowanych jako pręty składające się z 6 lub 10 cząstek. Konfiguracja początkowa to równoległe ułożenie obu analizowanych obiektów. Wyznaczono trajektorię ruchu układu. Porównano zachowanie włókien dłuższych i krótszych. Rozważono przypadek gdy ruch włókien nie jest ograniczony w płaszczyźnie pionowej. W kolejności, rozważono ruch sztywnych układów złożonych z 2 i 3 cząstek.

W rozdziale piątym rozważany jest model sprężystych włókien. Omawiane są różne, uproszczone formy potencjału i sił zginających w porównaniu z modelem ciągłym. Analizowane jest jedno osiadające, sprężyste włókno dla różnych sztywności i liczby cząstek użytych do modelowania. Stwierdzono, że system dwóch układów składających się z trzech cząstek każdy, osiadających w płaszczyźnie pionowej, nie ma ustalonej konfiguracji, do której zbiegałoby się rozwiązanie.

W rozdziale szóstym rozważane jest osiadanie układu dwóch włókien sprężystych. Rozważane są różne długości włókien. Analizowana jest dynamika podwójnego układu sprężystego trzech cząstek. Stwierdzono, że dla takiego układu, dla szerokiego zakresu parametrów, dynamika ruchu cząstek jest podobna. Wskazano, iż niewłaściwy model sprężysty prowadzi do błędnych rozwiązań.

W rozdziale siódmym analizowana jest dynamika symetrycznej pary wydłużonych cząstek elastycznych, których ruch nie jest ograniczony do płaszczyzny pionowej. Wskazano różnice i podobieństwa z ruchem analogicznego układu, dla modelu sztywnego włókna. Opi-

sano oscylacje i ich tłumienie a także końcowy, stacjonarny układ dla pary charakteryzującej się małą sprężystością. Opisano różnice w zbieżności do końcowej konfiguracji dla pojedynczego włókna i dla pary włókien. Następnie testowano przydatność układu trzech cząstek jako najprostszego modelu włókna. Wskazano też na istotne różnice zachowania się układu dwu- i trójcząstkowego.

Rozdział ósmy jest analizą wpływu braku symetrii na dynamikę cząstek. Wybrano wprowadzenie perturbacji do układu symetrycznego. Analiza ta ma na celu zasymulowanie wymuszenia ruchami Browna lub innym losowym sygnałem. Ruch cząstek nie jest ograniczony do płaszczyzny pionowej. Omówiono zastosowane sposoby perturbacji i zakres parametrów je określający. Przedstawiono rozwiązania dla różnej sztywności włókien. Wskazano na zjawisko wspólnego unoszenia i rotacji układu dwóch cząstek w przypadku obliczeń z zastosowaniem perturbacji.

Rozdział dziewiąty zawiera wnioski i podsumowanie i wskazuje możliwe kierunki przyszłych badań. Jednym z nich są prace eksperymentalne.

Uwagi szczegółowe

Lektura rozprawy nasuwa szereg pytań i uwag. Większość z nich ma charakter redakcyjny.

Zakres pracy opisany jest w rozdziale 1.6. Tam też postawiono pytania, na które odpowiedzieć ma praca. Jaki jest jednak generalny cel badania dynamiki cząstek i włókien w płynie i polu grawitacyjnym, w układzie jaki przyjęto w pracy, nie jest jasne. Wymienione są liczne przypadki innych badań, o bardzo różnym zakresie, a stwierdzenie „the dissertation aims to extend the list given above” nie wydaje się definiować celu zbyt precyzyjnie.

Kolejna uwaga dotyczy wstępu. Zazwyczaj wstęp wskazuje dotychczasowy stan wiedzy, obszary nie objęte badaniami, motywację działania i planowane w dalszej części rozprawy prace. W przypadku analizowanej tu pracy, już we wstępie, omawiany jest częściowo model zagadnienia czy zakresy badanych parametrów. We wstępie cytowana jest literatura dla „amazing range of applications of nanofibres”, wydaje się, że przytoczenie choć kilku z wskazanych zastosowań podniosłoby zaciekawienie problemem rozważanym w dalszej części pracy.

W kilku miejscach pracy, w tym we wstępie, używane są nieostre określenia typu „rather stiff elastic elongated”, „rather close”, „rather distant”. W miarę możliwości, czytelnik chciałby wiedzieć co dokładniej oznaczają te określenia.

Z przytaczanej literatury wynika ogromna różnorodność badanych nano geometrii. Obejmują one „spheres, discs, blood cells, fibres, cloud of rods, rigid particles” (cytowane w różnych partiach tekstu). Pewne niedowierzanie wywołuje fakt, iż cytowany Goldfriend et.al. odkrył dopiero niedawno, iż „shape of the particle influence the motion”.

W trakcie definicji modelu w rozdziale pierwszym niezbędnym wydaje się schematyczny szkic konfiguracji i rozważanych geometrii. Zastąpiłby on znakomicie opisy tam zamieszczone (rozdział 1.3.3).

Pewną wątpliwość budzi rozważanie w pracy wyidealizowanych geometrii np. idealnie symetrycznych, o ruchu ograniczonym do jednej z płaszczyzn itp. W pracy przyjęto w niektórych przypadkach „lustrzane odbicie” ruchu cząstek czy obiektów. Czy wyidealizowany model ma jakkolwiek sens fizyczny pokazać może jedynie analiza wrażliwości lub stabilności układu. Próba zastosowania perturbacji idealnego układu, taka jak podjęta w rozdziale 7 jest więc ważna i potrzebna.

W rozdziale 2 (2.1-2.4) zdefiniowane są modele przyjęte w pracy. W rozdziale 2.5 dyskutowana jest literatura i uzasadnienie przyjętego modelu. Wydaje się, iż z krytycznej dyskusji literatury powinien wynikać przyjęty model - rozdział 2.5 powinien poprzedzać wcześniejsze rozdziały.

W przyjętym modelu hydrodynamicznym zakłada się możliwość superpozycji i dodawania oddziaływań poszczególnych cząstek. Oczywistym jest, jak znacząco takie założenie upraszcza sam model i obliczenia. Wydaje się jednak, że sama możliwość przyjęcia takiego założenia powinna być przedyskutowana w szczegółach, przed przyjęciem modelu.

W wielu miejscach pracy, elementy własne opracowania (np. definicje modeli) połączone są z ponowną, rozległą, dyskusją literatury problemu. O ile przytaczanie rozwiązań znanych z innych opracowań jest jak najbardziej wskazane, to połączenie w jednym opisie własnych założeń z szerokimi opisami innych badań zakłóca percepcję osiągnięć autora.

Komentarza wymaga też stosowane, nie tylko w omawianej tu pracy, sprowadzenie całej hydrodynamiki układu nanocząsteczek do kilkuwymiarowej „mobility matrix” a własności sprężystych do modelu energii sprężystej zginania. Korzyści obliczeniowe nie podlegają żadnej dyskusji jednak argument „computational cost of hydrodynamical model” - w sensie zwiększenia lub zmniejszenia go dla pewnych modeli, w przypadku tak zredukowanego układu, nie jest istotny gdyż i tak koszt obliczeniowy jest bliski zeru. Podobnie można ocenić zastosowanie modelu sprężystości włókien.

W pracy nie przedstawiono weryfikacji uzyskanych wyników, ograniczając się do porównania z innymi badaniami w przypadkach, gdy było to możliwe. Pytanie jakie jednak się nasuwa, to możliwość oceny i weryfikacji przyjętego w pracy modelu. W tym przypadku metody numeryczne wydają się być ostateczną i definitywną odpowiedzią. Modelowanie sprężenia przepływu opisanego równaniem Stokesa z ciągłym włóknem sprężystym jest trywialne, koszt rozwiązania znikomy, możliwość popełnienia błędu w modelowaniu (jak np. pokazane w pracy „spurious solutions” dla niewłaściwego modelu potencjału sprężystego zginania) jest zerowa, możliwości stosowania perturbacji czy wręcz analizy stabilno-

ści lub wrażliwości układu sprzężonego, nieograniczona. W modelu CFD zbędne stają się dodatkowe, zapowiadane w pracy, rozszerzenia o „lubrication model” trudne do zastosowania a inherentne w przypadku rozwiązania numerycznego. Metoda numeryczna, jakkolwiek mniej elegancka matematycznie, nie stosuje praktycznie żadnych uproszczeń i jest ekwiwalentem eksperymentu np. prowadzonego w skali makro. Eksperyment taki będący częścią planów przyszłych badań, wskazanych w podsumowaniu pracy, jest tyleż trudny co kosztowny i jego celowość należałoby, w kontekście powyższych uwag, przeanalizować.

Ocena pracy i wnioski końcowe

Praca napisana jest poprawnym językiem angielskim, co znacznie zwiększa jej zasięg i możliwości publikacyjne. Rozważany problem jest przedmiotem ożywionych badań w zakresie dynamiki nanocząstek, podlegających siłom grawitacji w płynach. Praca obejmuje niezwykle szerokie studium różnych przypadków, modeli i konfiguracji. Przytoczona, nadzwyczaj obszerna literatura świadczy o dogłębnej znajomości problemu przez jej autora. Metodyka stosowana w pracy jest właściwa i zgodna z metodami stosowanymi współcześnie w analizach tego typu zjawisk. Ciekawymi wnioskami z przedstawionej rozprawy jest oscylacyjny charakter dynamiki sztywnych cząsteczek, wskazanie na zjawisko „koziółkowania” włókien elastycznych, stacjonarny, poziomy, układ równoległy, analiza perturbacji początkowej konfiguracji symetrycznej. Pracy towarzyszą publikacje, z których najważniejsze to:

M. Bukowicki, M. Gruca, M. L. Ekiel-Jeżewska, “Dynamics of elastic dumbbells sedimenting in a viscous fluid: oscillations and hydrodynamic repulsion”, *Journal of Fluid Mechanics*, 767, pp. 95-108 (2015).

M. Bukowicki, M. L. Ekiel-Jeżewska, “Different bending models predict different dynamics of sedimenting elastic trumbbells”, *Soft Matter*, 14, pp. 5786-5799 (2018)

Bukowicki M., Franssen S.U., Schloetterer C., „High rates of phasing errors in highly polymorphic species with low levels of linkage disequilibrium”. *MOLECULAR ECOLOGY RESOURCES*, Vol. 16.4, pp. 874-88232, (2016).

Należy zaznaczyć, iż są to czasopisma o wysokim Impact Factor. W przypadku *Journal of Fluid Mechanics* Impact Factor za rok 2017 wynosi 2.893 a w przypadku *Soft Matter* Impact Factor za lata 2017/2018 wynosi 3.709 a w przypadku *Molecular Ecology Resources* 7.059. W przypadku wszystkich tych publikacji mgr Marek Bukowicki jest pierwszym autorem artykułów.

Autor jest więc autorem poważnych, „peer reviewed” artykułów wydrukowanych w znaczących wydawnictwach, co oznacza, że conajmniej kilku innych recenzentów również wysoko oceniło jego pracę.

Biorąc pod uwagę wszystkie wymienione wyżej fakty i wnioski stwierdzam, że rozprawa mgr Marka Bukowickiego spełnia wymagania sformułowane w Ustawie z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz stopniach i tytule w zakresie sztuki Dz.U. 2003 nr 65 poz. 595 i Ustawy z dnia 21 kwietnia 2017 r. o zmianie ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki oraz niektórych innych ustaw Dz.U. 2017 poz. 859 i może być podstawą do ubiegania się przez mgr Marka Bukowickiego o nadanie mu stopnia naukowego doktora.

A handwritten signature in blue ink, appearing to read 'Jarek Janowski'.