



Uniwersytet Warszawski

Wydział Fizyki

Instytut Fizyki Teoretycznej

Hoża 69, 00-681 Warszawa, tel.: (0-22)6283396, fax: (0-22)6219475, e-mail: iftuw@fuw.edu.pl

Warszawa, 27 sierpnia 2011

dr hab. Piotr Szymczak
Instytut Fizyki Teoretycznej
Wydział Fizyki UW

Recenzja pracy doktorskiej mgr inż. Marcina Kędzierskiego pt. "Zastosowanie metody multipolowej do analizy oddziaływań hydrodynamicznych w cylindrycznym mikrokanale"

Zrozumienie własności układów cząstek zawieszonych w płynie jest ważne nie tylko ze względów czysto poznawczych, ale również praktycznych: poczynając od pozornie prostego problemu oszacowania szybkości przepływu zawiesiny przez cylindryczną rurę, poprzez próby sterowania ruchem mikrocząstek zawieszonych w cieczy czy też segregowania ich za pomocą przepływu. Wiedza ta przydatna jest też przy analizie wielu układów biologicznych, choćby przy próbach zrozumienia transportu krwinek w naczyniach krwionośnych.

Jednym z podstawowych problemów, na które natykamy się przy próbach zrozumienia takich układów, jest uwzględnienie efektów oddziaływań hydrodynamicznych – ruch jednej z cząstek powoduje przepływ, który oddziałuje na wszystkie pozostałe elementy układu. Oddziaływania te są nieproste w opisie, ze względu na swój długozasięgowy i wielociałowy charakter, stąd w wielu przypadkach są pomijane bądź traktowane za pomocą zbyt daleko idących przybliżeń, które mogą prowadzić do błędnych wyników dotyczących dynamiki problemu, nawet na poziomie czysto jakościowym. Jedną z możliwości uwzględnienia oddziaływań hydrodynamicznych w systematyczny sposób jest zastosowanie, jak to czyni Autor pracy, metody multipolowej, opierającej się na rzutowaniu pola prędkości wokół każdej cząstki na zupełny układ funkcji będących rozwiązaniami równań Stokesa. Sprzężony układ równań dla N cząstek rozwiązuje się następnie, korzystając z „twierdzeń o przesunięciach”, które podają związek pomiędzy rozwinięciami multipolowymi wokół różnych punktów. W ten sposób otrzymuje się ścisłe rozwiązania problemu hydrodynamicznego w postaci rozwinięć w odwrotności odległości pomiędzy cząstkami. Implementacja numeryczna tej metody, rozwijana m.in. przez dra hab. Eligiusza Wajnryba, promotora niniejszej rozprawy, wyróżnia się spośród innych algorytmów rozwiązywania równań Stokesa tym, iż w bardzo precyzyjny sposób można kontrolować jej dokładność, dzięki czemu świetnie nadaje się ona m.in. do wyznaczania współczynników transportu zawiesin.

Chociaż metoda multipolowa jest od lat używana do precyzyjnego opisu oddziaływań hydrodynamicznych w nieograniczonej przestrzeni, to dopiero stosunkowo niedawno została ona zastosowana do opisu układów ograniczonych ścianką bądź dwiema równoległymi ściankami. Zastosowanie tej metody w

ograniczonej geometrii jest nieproste ze względu na konieczność spełnienia dodatkowych warunków brzegowych na powierzchniach ograniczających układ. Warto przy tej okazji nadmienić, o czym Autor niestety nie wspomina w swoim przeglądzie metod numerycznych, że hydrodynamikę układów o skomplikowanej geometrii wyjątkowo prosto opisuje się za pomocą metod mezoskopowych, w rodzaju metody sieciowej Boltzmanna czy wielocząstkowego algorytmu zderzeniowego, gdyż w tych metodach warunki brzegowe są implementowane w sposób lokalny, który nie zależy od globalnej geometrii problemu. Nie oznacza to rzecz jasna, że konstrukcja metod multipolowych dla tych układów jest pozbawiona sensu – wręcz przeciwnie, wszędzie tam, gdzie to możliwe, należy starać się skonstruować formalizm multipolowy ze względu na dużą precyzję wykonywanych za jego pomocą obliczeń. Niestety, w przypadku układów o bardziej skomplikowanej geometrii nie zawsze jest to możliwe.

Głównym celem recenzowanej rozprawy była konstrukcja metody multipolowej dla cząstek umieszczonych w cylindrycznym kanale. Jak już wspomniano, geometria ta jest bardzo ważna ze względu na wielość zastosowań praktycznych, szczególnie istotnych w świetle burzliwego rozwoju mikrofluidyki w ostatnich latach, który znacznie rozszerzył możliwości przeprowadzania różnorodnych eksperymentów nad cząstkami czy kroplami zawieszonymi w mikrokanalach. Konstrukcja algorytmu multipolowego przeprowadzona w rozprawie opiera się na bardzo eleganckim pomysle zasadzającym się na tym, aby warunki brzegowe na ściankach układu uwzględnić za pomocą rozwinięcia w układzie funkcji o symetriach zgodnych z geometrią układu, w tym przypadku rozwiązań równań Stokesa w zmiennych cylindrycznych. W szczególności w tych zmiennych stosunkowo prosto można znaleźć pole odbite od ścianek cylindra. Z drugiej jednak strony najwygodniejszą bazą do opisu przepływu wytwarzanego przez daną cząstkę jest baza sferyczna, zgodna z geometrią cząstki. Dlatego też w pracy została przyjęta następująca procedura na wyliczanie pola odbitego od ścianek mikrokanalu: pole prędkości, którego źródłem jest cząstka, jest początkowo wyrażane w bazie sferycznej, która następnie przekształcana jest na cylindryczną, poprzez specjalnie skonstruowaną macierz T_{--} . Następnie pole to przesuwane jest do osi kanału, za pomocą kolejnej macierzy S_{--} , po czym odbijane od ścianek kanału (za pomocą operatora odbiciowego Z_c), a w końcu przesuwane do środka drugiej cząstki (za pomocą macierzy S_{++}) i transformowane do związanej z nią bazy sferycznej (za pomocą macierzy T_{++}). Mimo iż opis tej procedury brzmi prosto, to znalezienie elementów macierzowych wszystkich wspomnianych wyżej operatorów było bez wątpienia zadaniem trudnym, wymagającym od Autora dużej sprawności obliczeniowej, skrupulatności w rachunkach, jak też opanowania niełatwego formalizmu rozwinięć multipolowych. Recenzent z uznaniem przyznaje, że z zadaniem tym mgr Kędziński poradził sobie doskonale, tworząc strukturę teoretyczną, z której na pewno korzystać będą inni badacze dynamiki mikrocząstek w kanałach. Jedyne zarzut, jaki można mieć do tej części rozprawy, dotyczy pominięcia przez Autora dwóch klasycznych prac: H. Hasimoto „Slow motion of a small sphere in a cylindrical domain” J. Phys. Soc. Jpn. **41**, 2143 (1976) oraz N. Liron and R. Shahar „Stokes flow due to a Stokeslet in a pipe,” J. Fluid Mech. **86**, 727 (1978), które zawierają m.in. wyrażenie na funkcję

Greena dla przepływu w geometrii cylindrycznej (a więc wielkość zdefiniowaną przez Autora we wzorze (27), którą potem niezależnie on wylicza). Rodzi się pytanie, czy skorzystanie z wyników tych prac nie pozwoliłoby na pewne uproszczenie rachunków i szybsze dojście do celu postawionego sobie przez Autora.

Druga część rozprawy (rozdział 5) poświęcona jest zastosowaniom stworzonego w rozprawie formalizmu do szeregu przykładowych problemów, takich jak obliczenie osiowego współczynnika tarcia dla cząstki w kanale, analiza zjawiska ujemnego sprzężenia zwrotnego między ruchami dwóch cząstek położonych na osi symetrii cylindra czy obliczenie prędkości łańcuchów polimerowych w kapilarze. Niektóre z wyliczanych wielkości (jak tarcie osiowe) były wcześniej liczone w literaturze innymi metodami i dlatego porównanie z tymi wynikami może być traktowane jako sprawdzenie poprawności algorytmu, inne z kolei obliczenia (np. te dla mobilności łańcuchów polimerowych) dobrze ilustrują zjawisko ekranowania oddziaływań hydrodynamicznych w kanale. Przeprowadzenie tych obliczeń wymagało od doktoranta stworzenia implementacji numerycznej skonstruowanego wcześniej algorytmu. Autor musiał poradzić sobie z właściwą kontrolą numerycznej precyzji obliczeń, sprawą kluczową dla rachunków tego typu. Mgr Kędzierski sprostował również temu zadaniu, czym dowiódł swojej dojrzałości i wszechstronności naukowej.

Podsumowując powyższe uwagi i przyznając, że mimo wnikliwości z mojej strony nie doszukałem się w rachunkach autora żadnych błędów merytorycznych, oceniam rozprawę jednoznacznie pozytywnie. Ocenę tę wzmacnia dodatkowo fakt, że najważniejsze wyniki rozprawy zostały opublikowane w bardzo dobrym czasopiśmie (*The Journal of Chemical Physics*).

Pod względem formalnym konstrukcja rozprawy jest poprawna. Praca liczy 118 stron i podzielona jest na sześć rozdziałów, z których pierwszy stanowi wstęp ogólny, drugi i trzeci są wprowadzeniem do teorii oddziaływań hydrodynamicznych i metody multipolowej, czwarty zawiera wyprowadzenie metody multipolowej dla geometrii cylindra, piąty – wyniki numeryczne, a szósty – krótkie podsumowanie. Pracę uzupełniają trzy dodatki zawierające definicje funkcji specjalnych używanych w rozprawie oraz wyprowadzenie kilku tożsamości. Pracę zamyka spis literatury liczący 84 pozycje. Układ pracy jest logiczny i przejrzysty; pod względem językowym jest ona napisana starannie, a literówek jest stosunkowo mało (m.in. pusty odnośnik na stronie 36 oraz używanie nieistniejącego w języku polskim przymiotnika ‘zcentrowany’ zamiast ‘scentrowany’).

Podsumowując, stwierdzam, iż praca mgra Kędzierskiego stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego i spełnia w pełni wymagania ustawowe i zwyczajowe stawiane rozprawom doktorskim. Wnoszę o dopuszczenie mgra inż. Marcina Kędzierskiego do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

P. Szymczak

