

Opinia o rozprawie doktorskiej  
mgr **Marty Grucy**

*"Motion of regular systems of many particles interacting hydrodynamically under gravity"*

### Aktualność i wybór tematu

Przedmiotem rozprawy doktorskiej jest analiza dynamiki układów wielu cząstek w płynie lepkim w przybliżeniu Stokesa, w obecności pola sił masowych (grawitacji). Doktorantka kontynuuje tym samym badania prowadzone wcześniej przez Promotora rozprawy, p. prof. Marię Ekiel-Jezewską. W rozważanym zagadnieniu, wchodzącym w zakres teoretycznej mechaniki płynów, całkowane są trajektorie cząstek w różnych konfiguracjach ich początkowego położenia. Nieliniowość dynamiki takich układów powoduje występowanie różnych klas rozwiązań, w tym quasi-periodycznych i chaotycznych. Badania w tym zakresie mają pozwolić na lepsze zrozumienie mechaniki tak zwanych płynów złożonych (ang. *complex fluids*), które pozostają nie w pełni rozpoznane od strony teorii i modelowania. Wydaje się, że perspektywnym obszarem potencjalnych zastosowań mogą być mikroprzepływy, które z reguły mają miejsce w warunkach niskich liczb Reynoldsa. Badania dynamiki płynów złożonych mogą prowadzić także do ulepszonego opisu na poziomie makroskopowym, który operuje własnościami reologicznymi. Temat pracy jest zatem aktualny pod względem poznawczym oraz uzasadniony wynikami poprzednich badań, a skala trudności z pewnością odpowiada wymaganiam stawianym pracom doktorskim.

### Struktura i zawartość rozprawy

**Rozprawa** została zredagowana w języku angielskim, liczy około 140 stron, składa się z 10 rozdziałów, trzech załączników, dwustronicowych streszczeń w języku polskim i angielskim oraz bibliografii liczącej 106 pozycji. Brak jest tytułu w języku polskim (ale tłumaczenie nie sprawia trudności). Cytowana literatura przedmiotu obejmuje istotne monografie, podręczniki, prace przeglądowe i oryginalne artykuły z uznanych czasopism naukowych, wspomniane lub omawiane w tekście rozprawy. Na uwagę zasługuje fakt, że ponad 30 pozycji literatury to prace z ostatnich pięciu lat. Wskazuje to na dobre rozeznanie Doktorantki w obecnym stanie wiedzy.

**Rozdział 1** zawiera krótkie wprowadzenie w tematykę rozprawy, jej kontekst aplikacyjny oraz przegląd treści zawartych w jej poszczególnych częściach. Model matematyczny rozważanego w pracy zagadnienia przedstawiono w **Rozdziale 2**: są to równania Naviera-Stokesa w przybliżeniu przepływu powolnego (pełzającego) z członami źródłowymi pochodzącymi od układu cząstek (w przybliżeniu cząstek punktowych), a także równania dynamiki układu takich cząstek oddziałujących ze sobą hydrodynamicznie, opadających w płynie wskutek grawitacji. Od strony matematycznej, dynamikę opisuje układ sprzężonych równań różniczkowych zwyczajnych (URRZ). Rozważa się regularne układy cząstek, rozmieszczonych początkowo w wierzchołkach wielokątów foremnych leżących w płaszczyznach poziomych. Przy dużej liczbie cząstek (nawet  $10^5$ ) tworzą one pierścienie. Dynamika cząstek analizowana jest przy założeniu ograniczenia liczby stopni swobody (symetria osiowa układu, brak przemieszczeń w kierunku obwodowym). Taki zabieg, kluczowy dla dalszych rozważań, nazwany jest symetryzacją dynamiki układu. Przedstawiono krótką informację o metodzie rozwiązania

numerycznego URRZ i stosowanych w tym celu narzędziach (procedurach bibliotecznych). Przytoczono rozwiązanie analityczne dla pola prędkości sferycznej kropli cieczy lepkiej opadającej w płynie lepkiem (rozwiązanie Hadamarda-Rybczyńskiego). Jest ono ważne z uwagi na analogię z dyskretnym układem cząstek i wywoływaniem przezeń recyrkulacyjnym ruchem płynu. Rozdział kończy się przywołaniem wyników dla opadania pojedynczego pierścienia złożonego z cząstek (punktowych, albo skończonych rozmiarów).

Podstawowe dla pracy są **Rozdziały 3-5**, w których opisano dokonane uogólnienie wcześniejszych badań Promotora w zakresie dynamiki układu dwóch pierścieni i związanego z tym ruchu płynu, a zwłaszcza **Rozdziały 6-8**, w których opisano uzyskane wyniki dla układu czterech pierścieni o różnych średnicach.

W **Rozdziałach 3 i 6** przedstawiono szczegółową analizę parametryczną uzyskiwanych rozwiązań dla trajektorii cząstek, z zależności m.in. od całkowitej liczby cząstek, początkowej odległości pierścieni, a także ich średnic (rozdział 6). Uzyskano bogaty zestaw interesujących, niekiedy spektakularnych, wyników dla reżimów (quasi-)okresowych oraz chaotycznych.

W **Rozdziałach 4 i 7** zawarto uzyskane wyniki dla pola prędkości płynu, które wywołane jest przez opadające cząstki, w szczególności analizując sytuację w otoczeniu punktu będącego środkiem masy układu opadających cząstek.

W **Rozdziałach 5 i 8** omówiono wyniki uzyskiwane przy założeniu, że układy cząstek ewoluują w specyficznym continuum płynnym, zwanym ośrodkiem przepuszczalnym. W polskim streszczeniu rozprawy, doktorantka objaśnia to pojęcie jako „płyn z wtrąceniami stałymi” (może to być np. płyn w strukturze ośrodka ziarnistego/porowatego, jak rozumiem).

**Rozdział 9** ujmuje zagadnienie dynamiki pełnego układu równań ruchu cząstek (bez symetryzacji). Stwierdzono, że rozwiązanie bardzo szybko staje się chaotyczne, skąd wyprowadzono wniosek o konieczności stosowania przyjętego sposobu zmniejszenia stopni swobody układu.

Wreszcie, **Rozdział 10** zawiera podsumowanie osiągnięć Autora oraz wyszczególnienie oryginalnych elementów, stanowiących jego wkład. Recenzent dziękuje za tak przygotowane zestawienia, a po szczegółowej lekturze tekstu rozprawy pozostaje mu stwierdzić, że zasadniczo się z nimi zgadza. Dla porządku jednakże pozwalam sobie przedstawić własne ujęcie (poniżej).

**Dodatek A, B i C** zawiera szereg wyników uzupełniających (linie prądu jako wizualizacja przepływu, trajektorie cząstek w różnych wariantach). Być może z części informacji zawartych w Dodatku A dałoby się zrezygnować, a część włączyć do głównego nurtu rozprawy (dodatki B i C).

#### **Oryginalny wkład Autora (ważniejsze elementy):**

- (1) Doktorantka przedstawiła bardzo szczegółową, bogato udokumentowaną analizę dynamiki układu złożonego z cząstek punktowych oraz płynu lepkiego w przybliżeniu małej liczby Reynoldsa, w wariacie dwóch i czterech pierścieni jako konfiguracji początkowej, stanowiących pewien analog ruchu „kropli zawiesiny” (sformułowanie Doktorantki). Szczególnie interesujące są uzyskane wyniki dla konfiguracji czterech pierścieni, gdzie występuje różnorodny charakter ruchu (quasi-okresowy, chaotyczny z konsekwencjami dla kolektywnej dynamiki układu cząstek (długie życie klastra, jego rozpad) przy silnej wrażliwości na wybór parametrów początkowych.
- (2) Do celów określenia, czy trajektorie mają charakter quasi-okresowy, a także oceny ilościowej, Doktorantka z sukcesem zaadaptowała do własnych celów pewien algorytm zwany w literaturze *One-Way-Distance algorithm*, przygotowała stosowne procedury obliczeniowe i przeprowadziła obszerne obliczenia.
- (3) Wprowadzono nowe kryterium rozpadu klastra cząstek oparte na obserwacji względnego ruchu cząstek w parze, raczej niż na odległości cząstek.
- (4) Doktorantka przeprowadziła analizę przepływu cieczy lepkiej wywołanego przez opadanie cząstek badając, czy opadanie takiego klastra może mieć znaczący wpływ na transport płynu w obszarze obejmującym środek masy klastra.
- (5) Dla przypadku ruchu cząstek w tak zwanym ośrodku przepuszczalnym pokazano podobieństwa i różnice w porównaniu z dynamiką układów zawierających klasyczną ciecz lepka. Zasadniczo,

z malejącą przepuszczalnością zmniejsza się zakres parametrów, dla których występują rozwiązania (quasi-)okresowe.

- (6) Doktorantka opracowała efektywny obliczeniowo algorytm przeszukiwania przestrzeni parametrów (liczba cząstek, odległość pierścieni) w poszukiwaniu rozwiązań okresowych. Istotą pomysłu jest dobór wyjściowych wartości niektórych parametrów do przeszukiwania na bazie wartości innych parametrów (promienie pierścieni), uzyskiwanych w poprzednim kroku.

### Uwagi rzeczowe, pytania do Autora

Praca jest napisana zasadniczo przejrzyście; pewne kwestie wymagałyby jednakże wyjaśnienia przez Autora podczas publicznej obrony. Ponadto, podczas lektury nasuwa się kilka uwag krytycznych lub sugestii dotyczących niektórych szczegółowych aspektów pracy.

Oto uwagi i pytania:

- 1) Kluczowy dla rozprawy wydaje się być zabieg „symetryzacji” polegający na założeniu osiowej symetrii układu cząstek. Dzięki temu zmniejsza się nakład obliczeniowy potrzebny do całkowania numerycznego trajektorii. Przede wszystkim jednak, jak dowodzi Doktorantka (Rozdział 9, Dodatek C), w przypadku braku symetryzacji wszystkie (jak rozumiem) uzyskiwane rozwiązania stają się niestabilne po krótkim czasie wywołując chaotyczną dynamikę układu cząstek. Jeśli problem nie bierze się z kumulacji (nieuniknionych) błędów podczas numerycznego całkowania trajektorii, to może raczej sytuacja taka dowodzi inherentnie chaotycznego charakteru rozważanego pełnego układu równań różniczkowych zwyczajnych? Gdyby tak było, to poddany w wątpliwość byłby sens fizyczny wyników uzyskanych w rozdziałach 3-8 (?). Ponadto, ta ważna informacja na temat zastosowanej symetryzacji powinna znaleźć się w streszczeniu pracy.
- 2) W pracy bada się różne układy cząstki-płyn, natomiast trudno zorientować się, czy i w jakim przybliżeniu te układy te oddają rzeczywiste sytuacje fizyczne. Brak jest porównania z eksperymentem, co samo w sobie nie jest oczywiście zarzutem wobec pracy *stricte* teoretycznej, natomiast dobrze byłoby, gdyby taka możliwość potencjalnie istniała. Doktorantka odnosi się do tej kwestii jedynie w ostatnim zdaniu pracy (str. 110), co pozostawia uczucie pewnego niedosytu. Powtórzę raz jeszcze: bardzo obszerna analiza nieliniowych układów dynamicznych została dobrze w pracy przeprowadzona i szczegółowo udokumentowana, natomiast cenne byłoby nawet krótkie omówienie eksperymentów (prace [6] i [77]?, cytowania na str. 4?) w odniesieniu do analiz zaprezentowanych w rozprawie, jeśli to możliwe. Czy można wyobrazić sobie eksperyment, który pozwoliłby na odtworzenie nałożonych więzów symetryzacji?
- 3) Podstawowym „narzędziem” prowadzącym do uzyskania przedstawionych w pracy wyników jest metoda numeryczna i algorytm całkowania układu równań różniczkowych zwyczajnych opisujących dynamikę cząstek. Rozumiem, że schematy tego typu są dobrze rozpoznane i obecnie standardowo używane w bibliotecznych procedurach numerycznych, ale chociażby z powyższego względu prosiłoby się o nieco obszerniejsze omówienie tego narzędzia niż jeden krótki akapit w podrozdziale 2.1.3. W szczególności: (i) niejasne jest, czy *backward differentiation formula* oznacza schemat niejawnny? (ii) jak działa warunek przełączenia między schematem regularnym a schematem stosowanym w zagadnieniach sztywnych? (iii) jak definiuje się błąd (*the error per time step*)?
- 4) Analiza trajektorii cząstek w ośrodku z wtrąceniami (rozdziały 5 i 8) nasuwa wątpliwości co do możliwości fizycznej realizacji tego typu sytuacji. Otóż, w moim przekonaniu równanie Brinkmana-Debye’a-Buechego (BDB), które opisuje na poziomie makroskopowym ruch płynu w „cieczy z wtrąceniami” (sformułowanie Doktorantki) jest rzeczywiście bardzo użyteczne, pozwalając np. na wyznaczenie strumienia masy lub strat ciśnienia w przepływie w (geometrycznie uśrednionym) ośrodku porowatym lub ziarnistym, nie uwzględniając jednakże faktu istnienia „stałych wtrąceń”. Natomiast trajektorie cząstek nie są conceptem „geometrycznie uśrednionym”, więc obecność owych wtrąceń skutecznie je modyfikuje. Jak więc rozumieć uzyskane w pracy wyniki?

- 5) Opis metod porównywania trajektorii (metoda DTW, rozdział 6.4, str. 64-65) jest trudny w odbiorze. Natomiast - co może ważniejsze - oryginalne osiągnięcie Autorki, czyli adaptacja metody OWD, jest przedstawione zbyt skrótowo. Może przydałaby się ilustracja (zawierająca pary punktów na trajektoriach) do formuł (6.12) lub (6.15). Nie wiadomo, czy (i kiedy) OWD daje ten sam wynik co DTW? Czy jest znacząco efektywniejsza? Rozumiem też, że czynnik  $1/50$  przy  $\beta$  wiąże się z „gładkością” trajektorii?
- 6) Pewne pojęcia, istotne w rozprawie powinny zostać omówione przy pierwszym użyciu, na przykład: kropla zawiesiny (*suspension drop*), rozpraszanie chaotyczne (*chaotic scattering*). Podobnie, najważniejsze w rozprawie formuły:  $r$ -nia Stokesa z członem źródłowym, ich rozwiązanie w oparciu o tensory Greena,  $r$ -nia ruchu cząstek, czyli (2.1)-(2.8) powinny być opatrzone odwołaniem do klasycznej literatury przedmiotu; podobnie jak  $r$ -nie BDB (5.1);
- 7) Na małym rysunku (*inset*) wewnątrz rysunku 6.10 brak jest oznaczeń liczbowych osi pionowej, co nie pozwala stwierdzić, czy rzeczywiście występuje tam (bardzo skądinąd to ciekawe!) struktura fraktalna;
- 8) Tytuł rozdziału 7 *Fluid motion around periodic solutions...* jest niefortunny;
- 9) Wartości  $M$  w tabeli 3.2 można było dobrać tak, by – z uwagi na skalę logarytmiczną - uzyskać bardziej równomierny rozkład punktów na rysunku 3.4;
- 10) czy wzory (9.4), a także (9.5) albo (9.6) są poprawne?
- 11) W pracy wielokrotnie używane jest pojęcie „płyn Stokesa” (ang. *Stokes fluid*). Z kontekstu wynika, że chodzi o płyn, którego dynamika podlega równaniu N-S w przybliżeniu Stokesa. Czy nie lepszym określeniem angielskim (powszechnym w literaturze) byłoby *Stokes flow*?
- 12) Pytania mniej istotne (ale zachęcam Doktorantkę do przemyślenia tekstu):
  - i) pierwsze zdanie na str.3 rozprawy jest w ogólności nieprawdziwe - dlaczego?
  - ii) gdzie w drugim zdaniu (tamże) kryje się redundancja?
  - iii) jak rozumieć ostatnie pełne zdanie na str. 3 rozprawy?

Praca zredagowana jest dosyć starannie. Na uznanie zasługuje przygotowanie licznych rysunków – o przemyślanej zawartości i zasadniczo bardzo czytelnych. Tekst rozprawy zawiera pewną liczbę błędów stylistycznych, literowych lub interpunkcyjnych (średnio na stronę tekstu przypadają 2-3 takie usterki), ale nie utrudniają one zrozumienia tekstu. Poza tym, jest to zapewne pierwszy tak długi tekst przygotowany przez Doktorantkę w języku angielskim, więc błędów trudno się ustrzec. Zauważone typowe, często powtarzające się niedoskonałości to: (i) używanie przecinka w zdaniach złożonych przed *that* (odpowiednik polskiego „..., że”), np. P7L1, itd.; (ii) różne, niepoprawne warianty pisowni skrótów *e.g.* oraz *et al.*; (iii) niepotrzebne dodawanie rodzajników określonych we frazach typu: *the equations* (3.1), *the subsection 2.2.1*, *the Figure 11.1*; (iv) *4-rings system* czy raczej *4-ring system*? Uwagi redakcyjne mogą na życzenie przekazać Autorce – nie mają one znaczenia dla pozytywnej oceny rozprawy.

## Podsumowanie

Przedstawiana praca doktorska dotyczy interesującego zagadnienia teoretycznej mechaniki płynów, jakim jest dynamika układów płyn-cząstki w zakresie przepływów lepkich o niskiej liczbie Reynoldsa. Od strony klasyfikacji formalnej, rozprawę można zaliczyć do dziedziny nauk technicznych i dyscypliny mechanika. Rozprawa dowodzi dobrej znajomości przez Autora zagadnień mechaniki płynów, a także metod analizy nieliniowych układów dynamicznych i umiejętności interpretacji uzyskiwanych wyników. Rozprawa jest stosunkowo obszerna (co pośrednio wskazuje na duży wkład pracy) i dowodzi oryginalnego rozwiązania problemu naukowego. Ponadto, część przedstawionych w pracy wyników została niedawno opublikowana w czasopiśmie *Physical Review E* (2015; poz. [86] w bibliografii). Zważywszy na powyższe, moja końcowa opinia o przedstawionej rozprawie jest pozytywna: praca spełnia oczekiwania stawiane zwyczajowo rozprawom doktorskim, a także wymagania sformułowane w art. 13 ust. 1 Ustawy o Stopniach Naukowych i Tytule Naukowym i może być podstawą do ubiegania się p. mgr Marty Grucy o nadanie jej stopnia doktora.

