

## **Załącznik 2 w postępowaniu habilitacyjnym**

### **AUTOREFERAT**

**przedstawiający opis dorobku i osiągnięć naukowych,  
w szczególności określonych w art. 16 ust. 2 ustawy  
z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym  
oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki**

**Henryk Radosław Jedynek**  
Uniwersytet Technologiczno-Humanistyczny  
im. Kazimierza Pułaskiego w Radomiu  
Wydział Informatyki i Matematyki  
Katedra Matematyki

Radom, 25 kwietnia 2019 roku

## SPIS TREŚCI

1.	Imię i nazwisko.....	3
2.	Posiadane dyplomy, stopnie naukowe z podaniem nazwy, miejsca roku ich uzyskania oraz tytułu rozprawy doktorskiej.....	3
3.	Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych.....	4
4.	Wskazanie osiągnięcia wynikającego z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. 2017 r. poz. 1789): .....	4
	a) Tytuł osiągnięcia naukowego/artystycznego.....	4
	b) Wykaz publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe.....	5
	c) Omówienie celu naukowego/artystycznego ww. pracy/prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania.....	7
5.	Omówienie pozostałych osiągnięć naukowych – badawczych.....	40
6.	Przebieg pracy naukowej.....	46
6.1	Działalność naukowo-badawcza, dydaktyczna i organizacyjna przed uzyskaniem stopnia doktora nauk technicznych (1988 – 2000).....	46
	a) Działalność naukowa przed uzyskaniem stopnia doktora.....	46
	b) Działalność dydaktyczna i organizacyjna przed uzyskaniem stopnia doktora.....	46
6.2	Działalność naukowo-badawcza, dydaktyczna i organizacyjna po uzyskaniu stopnia doktora nauk technicznych (2000 – 2019).....	47
	a) Działalność naukowo-badawcza po uzyskaniu doktoratu (2000-2019).....	47
	b) Działalność dydaktyczna prowadzona po uzyskaniu stopnia doktora nauk technicznych (2000 – 2019).....	49
	c) Działalność organizacyjna prowadzona po uzyskaniu stopnia doktora nauk technicznych (2000 – 2019).....	51
6.3	Uczestnictwo w programach europejskich oraz innych programach międzynarodowych i krajowych.....	52
6.4	Udział w komitetach organizacyjnych międzynarodowych i krajowych konferencji naukowych.....	54
6.5	Członkostwo w międzynarodowych i krajowych organizacjach oraz towarzystwach naukowych.....	54
6.6	Osiągnięcia dydaktyczne i w zakresie popularyzacji nauki lub sztuki.....	55
6.7	Opieka naukowa nad studentami.....	55
6.8	Staże w zagranicznych ośrodkach akademickich.....	55
6.9	Wykonane ekspertyzy, udział w zespołach eksperckich i konkursowych.....	56
6.10	Recenzowanie publikacji w czasopismach międzynarodowych i krajowych.....	57
6.11	Współpraca z zagranicznymi i krajowymi ośrodkami akademickimi.....	58
6.12	Nagrody, wyróżnienia i odznaczenia.....	58
	Podsumowanie działalności naukowo-badawczej.....	59

## 1. Imię i Nazwisko

Henryk Radosław Jedynak

## 2. Posiadane dyplomy, stopnie naukowe/ artystyczne – z podaniem nazwy, miejsca i roku ich uzyskania oraz tytułu rozprawy doktorskiej.

W 1988 roku ukończyłem studia na Wydziale Matematyki, Fizyki i Chemii Uniwersytetu Łódzkiego i uzyskałem stopień magistra w zakresie specjalności Fizyka Ciała Stałego - fizyka doświadczalna. Otrzymałem dyplom z wyróżnieniem. Tytuł pracy "Widmo anihilacji nietermicznych pozytonów". Została napisana pod kierunkiem dr Wiesława Tkaczyka, zaś recenzentem był dr Szczepan Karakuła.

W 2000 roku na Wydziale Mechanicznym Politechniki Radomskiej obroniłem rozprawę doktorską pt.: "Model tarcia zewnętrznego i jego doświadczalna weryfikacja" i uzyskałem stopień naukowy doktora nauk technicznych w zakresie Budowy i Eksploatacji Maszyn specjalność: Tribologia. Praca została obroniona z wyróżnieniem. Promotorem pracy był prof. dr hab. Marian Włodzimierz Sułek, zaś recenzentami byli: prof. dr hab. inż. Jan Sadowski (Politechnika Radomska) oraz prof. dr hab. inż. Krzysztof Wierzcholski (Politechnika Koszalińska)

Stopień naukowy	Uczelnia	Wydział	Dyscyplina naukowa	Data uzyskania
<b>magistra</b>	Uniwersytet Łódzki	Wydział Matematyki, Fizyki i Chemii	Fizyka	1988
	Temat pracy: "Widmo anihilacji nietermicznych pozytonów". Promotor pracy: dr hab. Wiesław Tkaczyk, recenzent dr Szczepan Karakuła.			
<b>doktora</b>	Politechnika Radomska (obecnie Uniwersytet Technologiczno-Humanistyczny)	Wydział Mechaniczny	Budowa i Eksploatacja Maszyn	2000
	Temat pracy: "Model tarcia zewnętrznego i jego doświadczalna weryfikacja". Promotor pracy: prof. dr hab. Marian Włodzimierz Sułek, recenzenci: prof. dr hab. inż. Jan Sadowski (Politechnika Radomska), prof. dr hab. inż. Krzysztof Wierzcholski (Politechnika Koszalińska)			

### 3. Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych

Po zakończeniu studiów w 1988 roku rozpocząłem pracę w Centrum Informatyki w Wyższej Szkole Inżynierskiej (obecnie Uniwersytet Technologiczno-Humanistyczny) w Radomiu na stanowisku asystenta stażysty, a następnie po roku asystenta. W 1992 roku utworzono Wydział Nauczycielski i Centrum Informatyki zostało włączone w jego skład jako Katedra Informatyki. W 1996 roku WSI została przemianowana na Politechnikę Radomską. W 2000 roku, po obronie pracy doktorskiej, zostałem zatrudniony na stanowisku adiunkta. W tym samym roku przenieśliem się do Katedry Matematyki. Zostałem kierownikiem Laboratorium Komputerowego Zastosowań Matematyki, którą pełnię do chwili obecnej. W 2002 roku, po utworzeniu Wydziału Informatyki w Wyższej Szkole Handlowej w Radomiu, podjąłem pracę na drugim etacie na stanowisku adiunkta. Do roku 2011 współpracowałem z WSH prowadząc wykłady, seminaria dyplomowe oraz sprawując opiekę naukową nad pracami inżynierskimi. Byłem także organizatorem dydaktycznego laboratorium sieciowego. W 2012 roku w ramach reorganizacji Wydziału Nauczycielskiego Politechniki Radomskiej powstało kilka nowych wydziałów, w tym Wydział Informatyki i Matematyki, w którym znalazłem zatrudnienie i pracuję do chwili obecnej na stanowisku adiunkta. Od 2012 roku moja uczelnia nosi nazwę Uniwersytetu Technologiczno-Humanistycznego.

### 4. Wskazanie osiągnięcia wynikającego z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. 2017 r. poz. 1789):

#### a) tytuł osiągnięcia naukowego/artystycznego

Osiągnięciem stanowiącym podstawę wszczęcia postępowania habilitacyjnego według art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. 2017 r. poz. 1789) jest jednotematyczny cykl 11 publikacji [A1-A11] zatytułowany.:

#### **Opracowanie nowych formuł analitycznych i metod aproksymacyjnych do modelowania wybranych efektów nieliniowej sprężystości**

Przedstawione publikacje stanowią własne osiągnięcia badawczo-naukowe dotyczące aproksymacji wybranych zagadnień inżynierii mechanicznej z zakresu fizyki polimerów oraz tribologii w obszarze nieliniowych odkształceń sprężystych. Treść i główne wyniki badań zostały opisane w punkcie 4c niniejszego autoreferatu.

## b) wykaz publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe

Ip.	Opis publikacji wchodzących w skład cyklu:	Procentowy udział habilitanta	IF	MNiSW
A1.	<b>Jedynak R.</b> , Exact and <b>approximate</b> solutions of the infinite integrals of the asperity height distribution for the Greenwood-Williamson and the Greenwood-Tripp asperity contact models, Tribology International, 130, 2019, p: 206-215, DOI:10.1016/j.triboint.2018.09.009, ISSN: 0301-679X	100%	3.246	35
A2.	Walasek J., <b>Jedynak R.</b> , Inverse Langevin-like function for statistical description of the polymer chain in orienting fields, International Journal of Solids and Structures, 163,2019, p. 15-24, ISSN: 0020-7683	50%	2.556	40
A3.	<b>Jedynak R.</b> , A comprehensive study of the mathematical methods used for <b>approximation</b> of the inverse Langevin function, Mathematics and Mechanics of Solids, 1-25, 2018, DOI: 10.1177/1081286518811395, ISSN: 1081-2865	100%	2.545	25
A4.	<b>Jedynak R.</b> , Gilewicz J., Magic efficiency of <b>approximation</b> of smooth functions by weighted means of two N-point Padé approximants, Ukrainian Mathematical Journal. 70(9), 2019, p. 1375-1394, ISSN:1573-9376	90%	0.343	15
A5.	<b>Jedynak R.</b> , New facts concerning the <b>approximation</b> of the inverse Langevin function, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 249, 2017, p. 8-25, ISSN: 0377-0257	100%	2.536	35
A6.	<b>Jedynak R.</b> , <b>Approximation</b> of the inverse Langevin function revisited, Rheologica Acta, 54, p: 29-39, 2015, ISSN: 0035-4511	100%	2.184	35
A7.	Walasek J., <b>Jedynak R.</b> (2015). Numerical Verification of Analytical Results for Statistical Description of Polymer Chains in Nematic Systems, Macromolecular Theory And Simulations 24, p. 133-140, 2015, ISSN: 1022-1344	50%	2.294	30
A8.	Walasek J., <b>Jedynak R.</b> (2014). Stress–Strain Relations for Nematic Polymer Networks with Various Concentrations of Flexible and Stiff Parts, Macromolecular Theory and Simulations, WILEY-VCH. 2014, Volume 23, Issue 5, p. 353–360, ISSN:1022-1344	50%	1.667	30
A9.	<b>Jedynak R.</b> , Gilewicz J., <b>Approximation</b> of smooth functions by weighted means of N-point	90%	0.230	15

	Padé approximants, Ukrainian Mathematical Journal. 65(10), p: 1566-1576, 2014, ISSN:1573-9376 2014			
<b>A10.</b>	Walasek J., <b>Jedynak R.</b> (2013). Stress-strain relation for polymer networks near the isotropic-nematic transition, Macromolecular Theory and Simulations, WILEY-VCH. 22, 385–393, ISSN:1022-1344	<b>50%</b>	<b>1.793</b>	<b>30</b>
<b>A11.</b>	<b>Jedynak R.</b> , Gilewicz J., <b>Approximation</b> of the Integrals of the Gaussian Distribution of Asperity Heights in the Greenwood-Tripp Contact Model of Two Rough Surfaces Revisited, Journal of Applied Mathematics, vol. 2013, Article ID 459280, 7 pages. doi:10.1155/2013/459280, ISSN:1110-757X	<b>90%</b>	<b>0.72</b>	<b>25</b>
Sumaryczny Impact Factor/punkty MNiSW			<b>20.114</b>	<b>315</b>

Wkład habilitanta w poszczególne prace

[A1] Jestem jedynym autorem pracy.

[A2] Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu procedur numerycznych i wykonaniu obliczeń, stworzeniu wykresów, częściowej redakcji manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 50%.

[A3] Jestem jedynym autorem pracy.

[A4] Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu całego manuskryptu na podstawie wstępnych ustaleń dotyczących jego zakresu przed śmiercią współautora (2016r.). Mój udział procentowy szacuję na 90%.

[A5] Jestem jedynym autorem pracy.

[A6] Jestem jedynym autorem pracy.

[A7] Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu procedur numerycznych i wykonaniu obliczeń, stworzeniu wykresów, częściowej redakcji manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 50%.

[A8] Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu procedur numerycznych i wykonaniu obliczeń, stworzeniu wykresów, częściowej redakcji manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 50%.

[A9] Jestem autorem koncepcji pracy. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu procedur numerycznych i wykonaniu obliczeń, stworzeniu wykresów, tabel oraz częściowej redakcji manuskryptu. Jestem autorem korespondencyjnym. Mój udział procentowy szacuję na 90%.

[A10] Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu procedur numerycznych i wykonaniu obliczeń, stworzeniu wykresów, częściowej redakcji manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 50%.

[A11] Jestem autorem koncepcji pracy. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu procedur numerycznych i wykonaniu obliczeń, stworzeniu wykresów, tabel oraz wstępnej redakcji całego manuskryptu. Jestem autorem korespondencyjnym. Mój udział procentowy szacuję na 90%.

### **c) omówienie celu naukowego/artystycznego ww. pracy/prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania**

W cyklu prac dokumentujących osiągnięcie naukowe (publikacje A1-A11) omawiane są problemy nieliniowości w zagadnieniach sprężystości. Prace mają charakter podstawowych badań teoretycznych, choć końcowe wyniki są porównywane do literaturowych danych doświadczalnych. Koncentruję się na opisie zagadnień w aspekcie dziedziny zastosowań matematyki w ramach mechaniki komputerowej (Computational mechanics), która korzysta z metod badawczych matematyki i informatyki. W technice komputerowej stosuję metody numeryczne oraz związane z nimi metody aproksymacyjne.

#### **Cele naukowe**

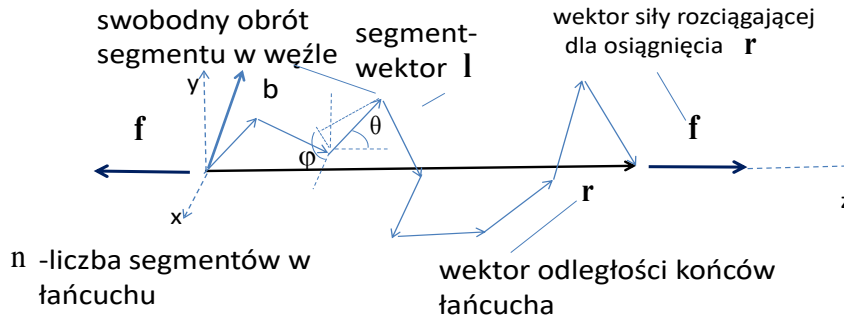
Moimi celami naukowymi była ocena stopnia nieliniowości w:

- 1) relacji naprężenie-odkształcenie dla układów łańcuchów polimerowych w polach orientujących molekularnych lub zewnętrznych, lub też w przypadku ich braku
- 2) relacji siła oddziaływania powierzchni chropowatych – odległość powierzchni.
- 3) opracowanie nowych metod aproksymacyjnych z ich aplikacją do omówionych zagadnień fizycznych

#### **1) Relacja naprężenie-odkształcenie dla układów łańcuchów polimerowych**

Prezentowane w części 1) opracowania wyniki powstały w wyniku stopniowego rozwoju teorii w cyklu prac [A10, A8, A7, A2] oraz dzięki pracom poświęconym problemom odwrotnej funkcji Langevina [A6, A5, A3].

Punktem wyjścia dla uzyskania relacji naprężenie - odkształcenie jest wyznaczenie energii swobodnej łańcucha polimerowego z założoną odległością jego końców  $\mathbf{r}$ . Proponowany jest model swobodnie związanych segmentów statystycznych Kuhna  $\mathbf{l}$  w jednorodnym polu orientacyjnym o dowolnym kierunku  $\mathbf{b}$ . Sytuacja jest przedstawiona na rysunku 1.



Rys. 1. Model łańcucha polimerowego

gdzie  $\mathbf{l} = l_0 \mathbf{l}^*$  zaś  $\mathbf{l}^* = [\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta]$ .  $\phi$  jest składową horyzontalną,  $\theta$  - wertykalną zaś  $l_0$  długością wektora  $\mathbf{l}$ .  $\mathbf{b}$  wektor osi pola orientującego.

### Energia swobodna

Energia swobodna  $F$  jest zdefiniowana przez równanie:

$$F = \langle E \rangle - TS \quad (1)$$

gdzie  $\langle E \rangle$  jest średnią energią układu zaś  $S$  jego entropią.  $T$  jest temperaturą termodynamiczną. W termodynamice statystycznej  $S$  jest zdefiniowane przez równanie:

$$S = -k \langle \ln \omega(\Omega) \rangle \quad (2)$$

gdzie  $k$  jest stała Boltzmanna zaś  $\omega(\Omega)$  - funkcją gęstości prawdopodobieństwa stanu układu.  $\Omega$  oznacza wszystkie elementy przestrzeni fazowej. Średnie są liczone z funkcją  $\omega(\Omega)$ . Dla uproszczenia wielkości fizyczne w dalszym ciągu tekstu będą wyrażane w jednostkach  $kT$ .

W rozważanym przypadku układu segmentów w polu orientującym, wykorzystując równania (1) i (2), można zapisać energię swobodną  $\tilde{F}$  na jeden segment w postaci:

$$\tilde{F} = \langle \ln \omega(\mathbf{l}^*) \rangle + \langle \tilde{V}(\mathbf{l}^*) \rangle \quad (3)$$

gdzie  $\omega(\mathbf{l}^*)$  jest funkcją gęstości prawdopodobieństwa wektora orientacji segmentu  $\mathbf{l}^*$ .  $\tilde{V}(\mathbf{l}^*)$  jest energią potencjalną orientacji segmentu w polu. Średnie dla segmentów w łańcuchu są liczone z funkcją  $\omega(\mathbf{l}^*)$  zmodyfikowaną przez ograniczenia narzucone na orientację segmentu przez powiązanie ich w liniowy łańcuch o danym wektorze odległości końców  $\mathbf{r}$ . W kartezjańskim układzie osi  $x, y, z$  zorientowanym tak jak na rys. 1 warunki te można zapisać w postaci równań (4) i (5):



$$\sum_{i=1}^n \mathbf{l}_{xi}^* = \sum_{i=1}^n \mathbf{l}_{yi}^* = 0 \quad (4)$$

oraz

$$\sum_{i=1}^n \mathbf{l}_{zi}^* = \frac{\mathbf{r}}{l_0} \quad (5)$$

Tutaj  $\mathbf{l}_{xi}^*$ ,  $\mathbf{l}_{yi}^*$  oraz  $\mathbf{l}_{zi}^*$  są składowymi wektorów  $\mathbf{l}_i^*$  w łańcuchu.  $r$  jest długością wektora  $\mathbf{r}$ .

Warunki w równaniu (4) wynikają z topologicznej struktury łańcucha liniowego i są zawsze spełnione dla dowolnego pola orientującego i dowolnej założonej wartości  $r$ . Po obliczeniu obustronnie średnich w równaniu (5) ze zmodyfikowaną funkcją  $\omega(\mathbf{l}^*)$  jednocześnie pamiętając, że  $r$  ma wartość ustaloną, otrzymujemy następujące równanie:

$$\langle \mathbf{l}_z^* \rangle = \frac{\mathbf{r}}{nl_0} = \tau \quad (6)$$

Warunek ten obowiązuje dla wszystkich segmentów z wszystkich łańcuchów z grupy o jednakowych wektorach  $\mathbf{r}$ .

Funkcja  $\omega(\mathbf{l}^*)$  jest obliczona metodą warunkowej optymalizacji Lagrange'a funkcjonału  $\tilde{F}'[\omega(\mathbf{l}^*)]$  danego równaniem:

$$\tilde{F}'[\omega(\mathbf{l}^*)] = \langle \ln \omega(\mathbf{l}^*) \rangle + \langle \tilde{V}(\mathbf{l}^*) \rangle - \gamma \langle \mathbf{l}_z^* \rangle \quad (7)$$

które jest równoważne równaniu

$$\tilde{F}'[\omega(\mathbf{l}^*)] = \int \omega(\mathbf{l}^*) \ln \omega(\mathbf{l}^*) d\mathbf{l}^* + \int \omega(\mathbf{l}^*) \tilde{V}(\mathbf{l}^*) d\mathbf{l}^* - \gamma \int \omega(\mathbf{l}^*) \tilde{V}(\mathbf{l}^*) d\mathbf{l}^* \quad (8)$$

Całkowania są wykonane po powierzchni jednostkowej kuli.  $\gamma$  jest nieoznaczonym mnożnikiem Lagrange'a. Warunek na wariacje funkcjonału  $\delta \tilde{F}'[\omega(\mathbf{l}^*)] = 0$  daje równanie:

$$\omega(\mathbf{l}^*) = Z^{-1} \exp[-\tilde{V}(\mathbf{l}^*) + \gamma \mathbf{l}_z^*] \quad (9)$$

Funkcja partycji  $Z$  dana jest równaniem:

$$Z = \int \exp[-\tilde{V}(\mathbf{l}^*) + \gamma \mathbf{l}_z^*] d\mathbf{l}^* \quad (10)$$

Warunek  $\tau = \langle \mathbf{l}_z^* \rangle$  można przepisać w postaci równania:

$$\tau = Z^{-1} \int \mathbf{l}_z^* \exp[-\tilde{V}(\mathbf{l}^*) + \gamma \mathbf{l}_z^*] d\mathbf{l}^* \quad (11)$$

Rozwiązanie tego równania daje funkcję  $\gamma(\tau)$ . W przypadku braku ustalenia odległości końców łańcucha warunek w równaniu (6) nie obowiązuje i  $\gamma$  w równaniach (9), (10) i (11) jest równe zero.

Wstawiając  $\omega(\mathbf{l}^*)$  z równania (9) do równania (3) otrzymujemy:

$$\tilde{F}(\tau) = \gamma(\tau)\tau - \ln Z(\tau) + \text{const} \quad (12)$$

Pochodna  $\frac{\partial \tilde{F}(\tau)}{\partial \tau} = \gamma(\tau) = f(\tau)$  gdzie  $f$  jest siłą jak na rys. (1). Stąd

$$\tilde{F}(\tau) = \int_0^{\tau} f(\zeta) d\zeta + \text{const} = \int_0^{\tau} \gamma(\zeta) d\zeta + \text{const} \quad (13)$$

Równanie (10) może być przepisane jak poniżej:

$$\tau = \frac{\partial \ln Z(\gamma)}{\partial \gamma} \quad (14)$$

Walasek<sup>1</sup> wykazał, że funkcja  $\ln Z(\gamma)$  może być rozwinięta po kumulantach funkcji  $\gamma_l^*$ . Jako wynik otrzymał następujący szereg:

$$\ln Z(\gamma) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\mu_i}{i!} \gamma^i \quad (15)$$

gdzie  $\mu_i$  są kumulantami. Stosując rekurencyjną formułę Berberana-Santosa<sup>2</sup> otrzymuje się równania:

$$\begin{aligned} \mu_1 &= m_1 \\ \mu_i &= m_i - \sum_{p=1}^{i-1} \binom{i-1}{p-1} m_{i-p} \mu_p \quad \text{for } i \geq 2 \end{aligned} \quad (16)$$

gdzie  $m_i$  są następującymi momentami

$$m_i = \frac{\int (\mathbf{l}_z^*)^i \exp[-\tilde{V}(\mathbf{l}^*)] d\mathbf{l}^*}{\int \exp[-\tilde{V}(\mathbf{l}^*)] d\mathbf{l}^*} \quad (17)$$

$i$  są liczone w fizycznym stanie braku wymuszenia przez deformację odległości końców łańcucha.

Teraz równanie (14) może być przepisane w postaci:

$$\tau - m_1 = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \gamma^i \quad (18)$$

gdzie  $a_i = \frac{\mu_{i+1}}{i!}$ . Szereg odwrotny można zapisać w postaci:

$$\gamma(\tau) = \sum_{j=1}^{\infty} b_j (\tau - m_1)^j \quad (19)$$

Używając ogólnej reguły Dargazanego i innych<sup>3</sup> otrzymamy następujące równania:

<sup>1</sup> Walasek, J. , 2012. Gas-like theory of polymer networks. *Macromol. Theory Simul.* 21, 4 82–4 91 .

<sup>2</sup> Berberan-Santos, M.N. , 2007. Expressing a probability density function in terms of another PDF: A generalized Gram-Charlier expansion. *J. Math. Chem.* 42, 585–594 .

<sup>3</sup> Dargazany, R. , Hörnes, K. , Itskov, M., 2013. A simple algorithm for the fast calculation of higher order derivatives of the inverse function. *Appl. Math. Comput.* 221, 833–838 .

$$b_1 = \frac{1}{a_1}$$

$$b_j = -\frac{1}{a_1^j} \sum_{k=1}^{j-1} c_{j-k,k} b_k a_1^k \quad \text{dla } j=2,3,\dots \quad (20)$$

gdzie

$$c_{0,k} = 1$$

$$c_{j-k,k} = \frac{1}{(j-k)a_1} \sum_{p=1}^{j-k} [pk - j + k + p] a_{p+1} c_{j-k-p,k} \quad \text{dla } j=2,3,\dots; k=1,2,\dots,j-1$$

Stąd, funkcja  $\tilde{F}(\tau)$  w równaniu (13) jest reprezentowana przez następujący szereg potęgowy po  $\tau$ :

$$\tilde{F}(\tau) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j+1} b_j [(\tau - m_1)^{j+1} + (-1)^j m_1^{j+1}] + \text{const} \quad (21)$$

Współczynniki rozwinięcia są liczone dla  $\gamma = 0$  czyli dla braku deformacji. Innymi słowy, efekt deformacji jest wprowadzony tylko przez parametr  $\tau$  jako zaburzenie dla fizycznego stanu braku deformacji.

Ogólne powyższe wyniki pracy [A2] mogą być zastosowane w przypadku obecności dowolnego jednorodnego pola orientującego.

### Brak pola orientującego

W tym przypadku układu czysto entropowego dla  $\tilde{V}(\mathbf{l}^*) = 0$ , równanie (11) przybiera postać:

$$\tau = Z^{-1} \int \mathbf{l}_z^* \exp[\gamma \mathbf{l}_z^*] d\mathbf{l}^* \quad (22)$$

gdzie  $Z = \int \exp[\gamma \mathbf{l}_z^*] d\mathbf{l}^*$ . Stąd równanie (22) redukuje się do następującego:

$$\tau = \text{cth}(\gamma) - \frac{1}{\gamma} = L(\gamma) \quad (23)$$

i stąd  $\gamma = L^{-1}(\tau)$ , gdzie  $L^{-1}(\tau)$  jest odwrotną funkcją Langevina. Wyniki te otrzymali Kuhn i Grün<sup>4</sup>.

Równania (12) i (13) redukują się odpowiednio do następujących:

$$\tilde{F}(\tau) = \tau L^{-1}(\tau) + \ln \frac{L^{-1}(\tau)}{\sinh L^{-1}(\tau)} + \text{const} \quad (24)$$

i

$$\tilde{F}(\tau) = \int_0^{\tau} L^{-1}(\zeta) d\zeta + \text{const} \quad (25)$$

<sup>4</sup> Kuhn, W., Grün, F., 1942. Beziehungen zwischen elastischen Konstanten und Dehnungsdoppelbrechung hochelastischer Stoffe. Kolloid Z. 101, 248–271.

Wynik ten był podstawą do sformułowania wielu aspektów teorii sprężystości kauczuku<sup>5,6,7,8</sup>.

Jak widać niezbędna dla obliczenia  $\tilde{F}(\tau)$  jest znajomość funkcji  $L^{-1}(\tau)$ .

Jej reprezentacja przez szereg Taylora z największą liczbą wyrazów rozwinięcia została podana przez Itskova i innych<sup>9</sup> jak poniżej

$$L^{-1}(\tau) = 3\tau + \frac{9}{5}\tau^3 + \dots + \frac{519588001407316958447129785511020819131555326399179970047767492196701159902903623205422824379381653441368510859764577156376354396343231201171875}{O(\tau^{61})}\tau^{59} + \quad (26)$$

Funkcja  $f(\tau)$  w równaniu (13) jest liniowa tylko dla reprezentacji  $L^{-1}(\tau)$  przez pierwszy wyraz. Takie przybliżenie jest możliwe tylko dla  $\tau \rightarrow 0$ . Jest to równoważne z żądaniem aby  $r \rightarrow 0$  lub  $n \rightarrow \infty$ . Taki warunek modelowy nie ma odzwierciedlenia w realnych łańcuchach polimerowych. Odstępstwa od warunków granicznych powoduje, że nieliniowa sprężystość wymaga włączenia wyższych wyrazów rozwinięcia.

Druga metoda reprezentacji  $L^{-1}(\tau)$  to jej aproksymacje dające wyniki analityczne w skończonej formie.

W obu metodach reprezentacji konieczne jest bardzo dokładne przybliżenie. Konieczność stosowania bardzo dokładnych aproksymacji wynika z faktu, że rezultaty weryfikowalne doświadczalnie są wynikiem przekształceń dokonanych na funkcji  $L^{-1}(\tau)$ . W konsekwencji błąd obliczeń się powiększa. Kumulacja błędów w przypadku mało dokładnej aproksymacji  $L^{-1}(\tau)$  może doprowadzić do poważnych błędów dla wyników końcowych. Sytuacja taka była omawiana w literaturze między innymi przez Ammara<sup>10</sup> oraz Marchiego i Arrude<sup>11</sup>

<sup>5</sup> Treloar, L.R.G. , 1975. The Physics of Rubber Elasticity. Clarendon Press, Oxford .

<sup>6</sup> Arruda, E.M. , Boyce, M.C. , 1993. A three-dimensional constitutive model for the large stretch behavior of rubber elastic materials. J. Mech. Phys. Solids 41, 389–412 .

<sup>7</sup> Boyce, M.C. , Arruda, E.M. , 2000. Constitutive models of rubber elasticity: a review. Rubber Chem. Technol. 73, 504–523 .

<sup>8</sup> McLachlan, J.R.A. , Smith, D.J., Chmel, N.P. , Rodger, A. , 2013. Calculations of flow-induced orientation distributions for analysis of linear dichroism spectroscopy. Soft Matter 9, 4 977–4 984 .

<sup>9</sup> M. Itskov , R. Dargazany , K. Hörnes , 2011. Taylor expansion of the inverse function with application to the langevin function, Math. Mech. Solids 17, 693–701 .

<sup>10</sup> A. Ammar , 2016. Effect of the inverse Langevin approximation on the solution of the Fokker–Planck equation of non-linear dilute polymer, J. Non-Newton Fluid 231, 1–5 .

<sup>11</sup> B.C. Marchi , E.M. Arruda, 2015. An error-minimizing approach to inverse langevin approximations, Rheol. Acta 54, 887–902 .

## Problemy funkcji $L^{-1}(\tau)$

### Reprezentacja przez szereg Taylora

Pierwsze aproksymacje  $L^{-1}(\tau)$  były związane z rozwinięciem w szereg Taylora. Ponieważ funkcja posiada osobliwość w punkcie  $\tau=1$ , nie potrafiły one oddać wiernie jej charakteru przebiegu. W pracy [A6] podałem prosty skrypt, napisany w języku programu Mathematica, umożliwiający szybkie obliczanie współczynników rozwinięcia w szereg Taylora omawianej funkcji. Wszystkie parzyste współczynniki są równe 0. Wartości numeryczne dla pierwszych 100 nieparzystych wyrazów zostały zaprezentowane graficznie. Szczegółowe studia dotyczące badania zbieżności wspomnianego szeregu kontynuowałem w [A5]. Jako pierwszy wykorzystałem do tej analizy 1500 niezerowych wyrazów, a następnie stosując zaawansowaną procedurę numeryczną Mercera i Robertsa<sup>12</sup> obliczyłem promień zbieżności szeregu Taylora  $\rho=0.904$ . Obliczenia te nieznacznie poprawiły poprzedni wynik publikowany dla 250 niezerowych wyrazów<sup>13</sup>, który wynosił  $\rho=0.902$ . Badania te dokumentują, że dla  $\tau>0.904$  szereg Taylora jest rozbieżny. Dalsze obliczenia numeryczne pozwoliły ustalić optymalne ilości niezerowych wyrazów szeregów dla których maksymalny błąd względny obciętego szeregu jest najmniejszy. Z praktycznego punktu widzenia rozpatrzyłem dwa przedziały  $[0, 0.95]$  oraz  $[0, 0.98]$ . W pierwszym przypadku jest ich 49 (maksymalny błąd względny 0.53%), w drugim zaś 42 (2.30%). Szczegółowe wyniki dla innych optymalnych ilości wyrazów zawarłem w tabelach 4, 5 oraz na rys. 5, 6 [A5]. Badania te potwierdzają, że do przybliżenia odwrotnej funkcji Langevina w pobliżu osobliwości należy użyć innej metody aproksymacyjnej.

### Wzory aproksymacyjne

Z analizy dostępnych metod aproksymacyjnych najprostszym kandydatem do rozwiązania problemu aproksymacji  $L^{-1}(\tau)$  wydaje się wymierna aproksymacja Padé. Tą metodę wybrał, jako jeden z pierwszych Cohen<sup>14</sup> (1991). Otrzymał następujące przybliżenie (27)

$$L_C^{-1}(\tau) = \tau \frac{3 - \frac{36}{35}\tau^2}{1 - \frac{33}{35}\tau^2} \quad (27)$$

Wzór (27) został następnie zaokrąglony przez Cohena, tak aby osobliwość pojawiła się dla  $\tau=1$ , zgodnie z przebiegiem przybliżanej funkcji.

$$L_C^{-1}(\tau) = \tau \frac{3 - \tau^2}{1 - \tau^2} \quad (28)$$

<sup>12</sup> Mercer, GN, and Roberts, AJ., 1990. A centre manifold description of contaminant dispersion in channels with varying flow properties. *SIAM J Appl Math*, 50: 1547–1565.

<sup>13</sup> Itskov, M, Dargazany, R, and Hornes, K., 2011. Taylor expansion of the inverse function with application to the Langevin function. *Math Mech Solids*, 17: 693–701.

<sup>14</sup> Cohen, A., 1991. A Pade approximant to the inverse Langevin function. *Rheol Acta*; 30, 270–273.

Od momentu opublikowania, wzór (28) stał się najczęściej używaną formułą aproksymacyjną odwrotnej funkcji Langevina. Jego prostota, bardzo duża popularność w literaturze oraz względnie duża dokładność (maksymalny błąd względny nie przekracza 5%) zachęciła mnie do podjęcia badań nad wyprowadzeniem podobnej pod względem złożoności formuły ale bardziej dokładnej. Moje badania skupiłem na wielopunktowej aproksymacji Padé (NPA), która powinna poprawić klasyczną jednopunktową ponieważ wykorzystuje informacje o funkcji i jej pochodnych w różnych punktach. W ten sposób otrzymałem mój pierwszy wzór aproksymacyjny dla odwrotnej funkcji Langevina, który w wersji zaokrąglonej ma postać (29)

$$L_J^{-1}(\tau) = \tau \frac{3 - 2.6\tau + 0.7\tau^2}{(1-\tau)(1+0.1\tau)} \quad (29)$$

zaś jego maksymalny błąd względny nie przekracza 1.5%. W pracy [A6] przedstawiłem także autorski program komputerowy napisany w języku Mathematica, który posłużył do wyprowadzenia wspomnianej formuły.

Formuła ta, po kilku latach od publikacji (2015), zyskała liczne cytowania (WoS raportuje 32, Scopus 34, Scholar Google 48). Przekłada się to także na jej praktyczne wykorzystanie wśród badaczy stosujących odwrotną funkcję Langevina. Jej użycie w procesie modelowania zostało wskazane w następujących publikacjach<sup>15,16,17,18</sup>, gdzie zastąpiła klasyczną aproksymację Cohena. Została także zaimplementowana do programu AMath obliczającego wartości różnych funkcji specjalnych napisanego przez Wolfganga Ehrhardta. Szczegółowy opis można znaleźć w „Reference Manual and Implementation Notes” na stronie 152<sup>19</sup>.

Należy nadmienić, że opisana przeze mnie metodyka aproksymacji NPA, stała się inspiracją dla Darabi i Itskova<sup>20</sup>, którzy wyprowadzili następujący wzór (30)

$$L_D^{-1}(\tau) = \tau \frac{3 - 3\tau + \tau^2}{1 - \tau} \quad (30)$$

Błąd maksymalny tej formuły jest 2.6%. Poprawił on dokładność formuły Cohena natomiast w tym czasie moje przybliżenie było najdokładniejsze w dziedzinie funkcji wymiernych.

<sup>15</sup> R. Brighenti, F. Artoni, F. Vernerey, M. Torelli, A. Pedrini, I. Domenichelli, E. Dalcanale, 2018. Mechanics of responsive polymers via conformationally switchable molecules, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 113, 65-81

<sup>16</sup> S. R. Tee (2018). Computer-aided design and statistical thermodynamics of DNA bipedal nanowalkers, Ph.D Theses, <http://scholarbank.nus.edu.sg/handle/10635/142757>

<sup>17</sup> J. Johnsen, A. H. Clausen, F. Grytten, A. Benallal, O. S. Hopperstad, 2019. A thermo-elasto-viscoplastic constitutive model for polymers, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 124, 681-701

<sup>18</sup> S. R. Tee, Z. Wang (2018). How Well Can DNA Rupture DNA? Shearing and Unzipping Forces inside DNA Nanostructures, *ACS Omega* 3(1),292-301 DOI: 10.1021/acsomega.7b01692

<sup>19</sup> <http://www.wolfgang-ehrhhardt.de/specialfunctions.pdf>

<sup>20</sup> Darabi, E, and Itskov, M., 2015. A simple and accurate approximation of the inverse Langevin function. *Rheol Acta*; 54, 455–459.

Dalsze badania nad poprawą otrzymanych wzorów doprowadziły mnie do zaimplementowania metody aproksymacji jednostajnej (minimax). Metoda ta minimalizuje maksymalny błąd przybliżenia. Dostępnych jest kilka algorytmów numerycznych aproksymacji minimax, z których najczęściej stosowanym jest algorytm Remeza. Podstawowe informacje na temat tej metody aproksymacyjnej zawarłem w [A5]. Punktem odniesienia do moich kolejnych wzorów aproksymacyjnych była praca Krögera<sup>21</sup>, który stosując nowatorską metodę wyprowadził następujący wzór (31)

$$L_K^{-1}(\tau) = \frac{3\tau - \frac{\tau}{5}(6\tau^2 + \tau^4 - 2\tau^6)}{1 - \tau^2} \quad (31)$$

i w ten sposób poprawił dokładność wcześniejszych osiągnięć aproksymacyjnych. Maksymalny błąd względny formuły wynosi 0.28%. W trakcie moich studiów numerycznych okazało się, że optymalne rozwiązanie zaproponowane przez Krögera nie jest najlepszym w rozumieniu aproksymacji jednostajnej. W pracy [A5] zaproponowałem optymalne rozwiązanie, które wykorzystywało algorytm Remeza oraz dodatkowe warunki narzucone na funkcję błędu, zgodne z badaniami Krögera.

Problem matematyczny został sformułowany dla funkcji błędu  $f(\tau)$  w postaci następującego układu równań nieliniowych (32)

$$\begin{cases} f(\tau_i) = (-1)^i \epsilon, & i = 1 \dots 4 \\ f'(\tau_i) = 0 \\ a_1 + a_2 + a_3 - b_1 = -2 \end{cases} \quad (32)$$

$$f(\tau) = \frac{y(3 + a_1\tau^2 + a_2\tau^4 + a_3\tau^6)}{L^{-1}(\tau)(1 - \tau)(1 + b_1\tau)} - 1$$

Rozwiązanie numeryczne tego problemu daje następującą formułę aproksymacyjną (33)

$$R_{7,2}(\tau) = \frac{\tau(3 - 1.33293\tau^2 + 0.0235\tau^4 + 0.288834\tau^6)}{(1 - \tau)(1 + 0.979404\tau)} \quad (33)$$

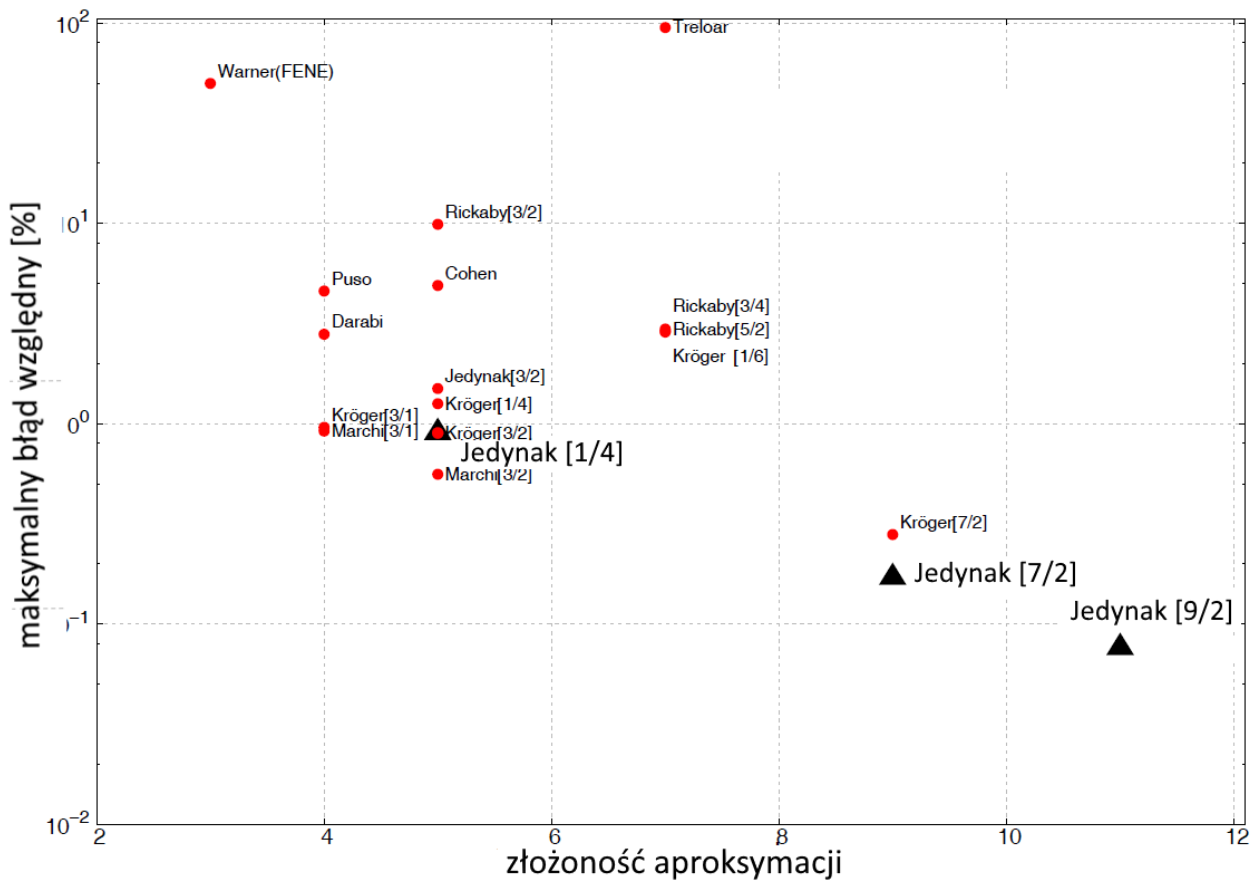
Zastosowana przeze mnie metoda aproksymacyjna pozwoliła poprawić jakość wzoru Krögera (maksymalny błąd względny 0.17%). Dalsze intensywne prace nad możliwościami otrzymania bardziej precyzyjnych formuł, których maksymalny błąd względny jest poniżej 0.1%, doprowadziły do znalezienia przybliżenia (maksymalny błąd względny 0.076%) (34)

$$R_{9,2}(\tau) = \frac{\tau(3 - 1.00651\tau^2 - 0.962251\tau^4 + 1.47353\tau^6 - 0.48953\tau^8)}{(1 - \tau)(1 + 1.01524\tau)} \quad (34)$$

Należy zauważyć, że tą istotną poprawę dokładności uzyskano tylko poprzez zwiększenie ilości poszukiwanych współczynników o jeden w stosunku do wcześniejszej formuły (33). Zgodnie z założeniami zawartymi w pracy Krögera<sup>21</sup> starałem się poszukiwać optymalnych aproksymacji w

<sup>21</sup> Kröger, 2015. M. Simple, admissible, and accurate approximants of the inverse Langevin and Brillouin functions, relevant for strong polymer deformations and flows. *J Non-Newtonian Fluid Mech*; 223, 77–87

obszarze jak najprostszycy funkcji wymiernych. Miarą złożoności wymiernych funkcji aproksymujących, przyjętą zgodnie z pracą Krögera, był parametr  $c=m+n$ , równy sumie stopni licznika i mianownika. W pracy [A5] dokonałem podsumowania aktualnego stanu wiedzy na temat istniejących aproksymacji wymiernych odwrotnej funkcji Langevina, zestawiając mój wkład prezentowany w tej pracy. Został on przedstawiony na wykresie pokazującym względny błąd procentowy w funkcji stopnia złożoności funkcji aproksymujących (parametr  $c$ ) (rys. 2). Czarne trójkąty pokazują nowe przybliżenia, zaproponowane przeze mnie w [A5]. Nowa formuła  $R_{9,2}(\tau)$  zapewniła największą dokładność obliczeń, spośród dokumentowanych w literaturze wzorów aproksymujących, z maksymalnym błędem poniżej 0.1%.



Rys. 2. Przegląd raportowanych w literaturze aproksymacji wymiernych odwrotnej funkcji Langevina. Czarne trójkąty oznaczają nowe propozycje podane w [A5]

Kolejna praca [A3] była inspirowana wynikami opublikowanymi przez Marchi i Arruda<sup>22</sup>. W swoich obliczeniach zastosowali oni algorytmy ewolucji różnicowej (ang. differential evolution - DE) do otrzymania serii aproksymacji o różnych stopniach złożoności. Funkcja celu miała następującą postać (35):

<sup>22</sup> Marchi, BC, and Arruda, EM. Generalized error-minimizing, rational inverse Langevin approximations. Math Mech Solids. Epub ahead of print 16 February 2018. DOI: 10.1177/1081286517754131.



$$f_{\text{obj}}^{MA} = \max_{\tau \in [0,1]} \left| \frac{L^{-1}(\tau, \tilde{\mathbf{a}}, \tilde{\mathbf{b}})}{L^{-1}(\tau)} - 1 \right| \quad (35)$$

Algorytmy te mają charakter statystyczny, co oznacza że trzeba wykonać serię obliczeń by móc wybrać optymalne rozwiązanie. W przypadku większej ilości parametrów proces ten jest bardzo pracochłonny co przekłada się na długi czas obliczeń. Marchi i Arruda podawali, że wartość odwrotnej funkcji Langevin musi być obliczana 10000 razy w każdej iteracji. Jeśli zauważymy, że proponowane wcześniej rozwiązanie minimax zawiera w sobie przepis na znalezienie optymalnego rozwiązania, to połączenie tych dwóch metod może dać doskonałe rezultaty. Dlaczego nie można pozostać przy wspomnianej metodzie minimax? W przypadku stosowania aproksymacji minimax dla większej ilości współczynników napotykamy na problemy numeryczne, które wiążą się z dokładnością wyznaczania nieznanych parametrów. Powstało wiele algorytmów numerycznych, które mają pomóc w rozwiązaniu tego problemu, ale wydaje się że najbardziej skuteczny jest zaproponowany w pracy [A3]. Teraz w każdej iteracji liczymy tylko  $m+n+1$  wartości odwrotnej funkcji Langevin oraz jej pochodnej co jest liczbą dużo razy mniejszą od podanej wartości 10000. Dodatkowo otrzymanie w jednym procesie obliczeniowym bardzo małej wartości funkcji celu, bliskiej zero, gwarantuje znalezienie optymalnego rozwiązania (36).

$$f_{\text{obj}} = \sum_{i=1}^{i=m+n+1} \max_{\tau \in [0,1]} |f(\tau_i, \tilde{\mathbf{a}}, \tilde{\mathbf{b}}) - (-1)^i \varepsilon| + |f'(\tau_i, \tilde{\mathbf{a}}, \tilde{\mathbf{b}})| \quad (36)$$

gdzie  $\tilde{\mathbf{a}}, \tilde{\mathbf{b}}$  wektory współczynników aproksymacji (odpowiednio licznik, mianownik),  $\varepsilon$  maksymalny błąd względny.

W pracy podałem także szczegółowe wzory po rozpisaniu pochodnej funkcji błędu. **Wzór (36) ma charakter ogólny i może być stosowany do rozwiązania dowolnego problemu aproksymacyjnego.** Wykorzystując zaproponowaną metodę aproksymacyjną obliczyłem szereg przybliżeń odwrotnej funkcji Langevina o różnych złożonościach, a następnie wyselekcjonowałem najbardziej efektywne przybliżenia z grupy wszystkich rozwiązań o zadanej złożoności. Otrzymane wyniki przedstawia tabela 1.

Tabela 1. Optymalne przybliżenia odwrotnej funkcji Langevina wraz z ich maksymalnymi błędami względnymi.

c	Optymalna aproksymacja odwrotnej funkcji Langevina	Maksymalny błąd względny $\varepsilon$ [%]
3	$R_{2,1}(\tau) = \frac{-2\tau^2 + 3\tau}{1 - \tau}$	13
4	$R_{3,1}(\tau) = \frac{0.88\tau^3 - 2.88\tau^2 + 3\tau}{1 - \tau}$	0.95
5	$R_{3,2}(\tau) = \frac{1.1571\tau^3 - 3.3533\tau^2 + 3\tau}{(1 - \tau)(1 - 0.1962\tau)}$	0.56
6	$R_{5,1}(\tau) = \frac{0.756\tau^5 - 1.383\tau^4 + 1.5733\tau^3 - 2.9463\tau^2 + 3\tau}{1 - \tau}$	0.16
7	$R_{3,4}(\tau) = \frac{2.14234\tau^3 - 4.22785\tau^2 + 3\tau}{(1 - \tau)(0.71716\tau^3 - 0.41103\tau^2 - 0.39165\tau + 1)}$	0.082

Wzory aproksymacyjne w tabeli 1 zostały wyprowadzone przy założeniu, że na końcach przedziału błąd względny jest równy 0. Są to najdokładniejsze, wśród możliwych do uzyskania, przybliżenia wymierne, charakteryzujące się względnie małą złożonością. W pracy [A3] dyskutowane są także inne możliwe ograniczenia oraz wyprowadzone z ich założeniem optymalne aproksymacje odwrotnej funkcji Langevina.

### Pole orientujące

Rozpatrzone jest pole z następującym potencjałem:

$$\tilde{V}(\mathbf{l}^*) = -q(\mathbf{b} \cdot \mathbf{l}^*)^w + \text{const} \quad (37)$$

gdzie  $q$  jest parametrem natężenia pola,  $\mathbf{b}$  jest wektorem (jednostkowym) orientacji pola,  $\mathbf{l}^*$  i symbol  $\cdot$  oznacza iloczyn skalarny wektorów. Wzór ten można zapisać jak poniżej

$$\tilde{V}(\vartheta, \varphi) = -q(\cos\Phi \sin\Theta \cos\varphi \sin\vartheta + \sin\Phi \sin\Theta \sin\varphi \sin\vartheta + \cos\Theta \cos\vartheta)^w + \text{const} \quad (38)$$

gdzie  $\Phi$  i  $\Theta$  są odpowiednio horyzontalną i wertykalną zmienną wektora  $\mathbf{b}$ . Dla  $w=1$  potencjał jest charakterystyczny dla pola zorientowanego np. zewnętrznego pola elektrycznego, zaś dla  $w=2$  jest taki jak dla pola niezorientowanego jak np. molekularne pole nematyczne. Równanie (11), z którego wyznaczamy  $\gamma(\tau)$ , można teraz przepisać jak następuje:

$$\tau = Z^{-1} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \cos\vartheta \exp\left\{q(\sin\Theta \cos\varphi \sin\vartheta + \cos\Theta \cos\vartheta)^w + \gamma \cos\vartheta\right\} \sin\vartheta d\vartheta d\varphi \quad (39)$$

gdzie

$$Z = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \exp\left\{q(\sin\Theta \cos\varphi \sin\vartheta + \cos\Theta \cos\vartheta)^w + \gamma \cos\vartheta\right\} \sin\vartheta d\vartheta d\varphi \quad (40)$$

We wzorach tych przyjęto dla uproszczenia, że  $\Phi = 0$ . Jest to możliwe, ponieważ całki w równaniach (39) i (40) są niezmiennikami obrotu układu wokół osi z. Zgodnie z ogólnym równaniem (19) funkcja  $\gamma(\tau)$  jest reprezentowana przez szereg potęgowy. Jednak współczynniki rozwinięcia są zależne od parametrów  $q, w, \Theta$ . Dla każdej kombinacji wartości tych parametrów, wartości liczbowe współczynników są różne. W praktyce uniemożliwia to zastosowanie metod aproksymacyjnych dla funkcji  $\gamma(\tau)$  tak jak jest to możliwe dla odwrotnej funkcji Langevina.

O wiele bardziej efektywnym sposobem znalezienia  $\gamma(\tau)$  jest numeryczne rozwiązanie równania (39). Pośrednim krokiem w rozwiązaniu tego równania jest obliczenie całek powierzchniowych po jednostkowej sferze.

### Metody rozwiązywania całek

Szukamy wartość całki

$$I(q; w, t, \Theta) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \cos^t \vartheta \exp\left\{q(\sin\Theta \cos\varphi \sin\vartheta + \cos\Theta \cos\vartheta)^w + \gamma \cos\vartheta\right\} \sin\vartheta d\vartheta d\varphi \quad (41)$$

Całka w równaniu (41) jest obliczana za pomocą procedury NIntegrate, która jest wbudowana w oprogramowanie Mathematica. Wysoka dokładność obliczeń całek ( $10^{-8}$ ), jest zapewniona przez zastosowanie globalnej strategii adaptacyjnej optymalnej bisekcji subregionu o największej szacowanej wartości błędu.

Algorytm obliczeń jest następujący:

$$f[\vartheta, \varphi, q, \Theta, w] := q(\sin[\varphi]\sin[\vartheta]\sin[\Theta] + \cos[\vartheta]\cos[\Theta])^w$$

$$\text{In}[x, q, \Theta, t, w]:$$

$$= \text{NIntegrate}[\text{Cos}[\vartheta]^t \text{Sin}[\vartheta] \text{Exp}[f[\vartheta, \varphi, q, \Theta, w]] \\ + x \text{Cos}[\vartheta]], \{\vartheta, 0, \text{Pi}\}, \{\varphi, 0, 2\text{Pi}\}, \text{PrecisionGoal} \rightarrow 8];$$

Otrzymane wyniki całkowania porównano także z najbardziej popularnymi metodami całkowania po sferze, cytowanymi w literaturze, takimi jak kubatura Bazanta i Oh<sup>23</sup>, Fliege i Maier<sup>24</sup> oraz Hannay i Nye<sup>25</sup>. Metody te wykorzystują do przybliżania całek ważone sumy wartości funkcji

<sup>23</sup> Bažant, P., Oh, B.H., 1986. Efficient numerical integration on the surface of a sphere. Z. Angew. Math. Mech. 66, 37–49.

<sup>24</sup> <http://www.personal.soton.ac.uk/jf1w07/nodes/nodes.html>.

<sup>25</sup> Hannay, J.H., Nye, J.F., 2004. Fibonacci numerical integration on a sphere. J. Phys. A 37 (48), 11591–11601.

podcałkowej liczone w odpowiednio wybranych punktach na sferze jednostkowej. W przypadku Bazanta i Oh algorytm obliczeniowy ma postać

$$I(x; q, u, t, w) \approx 8\pi \sum_{j=1}^v \psi(p_j, v_j, z_j) g(p_j, z_j) \quad (42)$$

gdzie  $p = \cos\varphi \sin\vartheta$ ,  $v = \sin\varphi \sin\vartheta$  i  $z = \cos\vartheta$ . Funkcja  $g(p, z)$  ma postać

$$g(p, z) = z^t \exp\left\{ q(p \sin u + z \cos u)^w + xz \right\} \quad (43)$$

Wartość wagi  $\psi(p_j, v_j, z_j)$  jest podana w tablicach publikowanych przez autorów. Maksymalna ilość wag wynosi 61. Ta metoda nie jest skuteczna w przypadku funkcji używanych w tej pracy. Bardziej rozbudowane tablice wag zostały podane przez Fliege i Maier<sup>26</sup> i sięgają 900 elementów. Najdokładniejszą z badanych metod okazała się ostatnia, którą można zapisać następująco:

$$I(x; q, u, t, w) \approx \frac{2\pi}{F} \sum_{j=1}^F (1 + \cos(\pi z_j^*)) \left\{ g\left(\varphi_j^*, z_j^* + \frac{\sin(\pi z_j^*)}{\pi}\right) + g\left(\pi\varphi_j^*, z_j^* + \frac{\sin(\pi z_j^*)}{\pi}\right) \right\} \quad (44)$$

gdzie  $z_j^* = 2j/F - 1$ ,  $\varphi_j^* = \pi j F' / F$ , oraz  $F'$  i  $F$  są kolejnymi liczbami Fibonacciego  $F' < F$ .

Ogólnie rzecz biorąc, funkcja  $g(\Phi, Z)$  w równaniu (44) jest określona wzorem:

$$g(\Phi, Z) = Z^t \exp\left\{ q\left(\sqrt{1-Z^2} \sin u \cos\Phi + Z \cos u\right)^w + xZ \right\} \quad (45)$$

gdzie  $\Phi$  jest zastąpiona przez  $\varphi_j^*$  oraz przez  $\pi\varphi_j^*$  i  $Z$  jest zastąpione przez  $z_j^* + \frac{\sin(\pi z_j^*)}{\pi}$ .

Algorytm obliczeniowy tej metody zapisany w języku Mathematica ma postać

`zg[j_, n_] := 2 j / Fibonacci[n] - 1;`

`fig[j_, n_] := Pi j Fibonacci[n - 1] / Fibonacci[n] - 1;`

`zz[j_, n_] := zg[j, n] + Sin[Pi zg[j, n]] / Pi;`

`f[fi_, t_, Teta_, gamma_, q_]:`

`= t Exp[q (Sin[fi + Pi/4] Sqrt[1 - t^2] Sin[Teta] + t Cos[Teta])^2 + gamma t];`

<sup>26</sup> <http://www.personal.soton.ac.uk/jf1w07/nodes/nodes.html>

$I[n, q, \Theta, \gamma]$ :

$$= 2 \text{Pi}/(\text{Fibonacci}[n]) \text{Sum}[(1 + \text{Cos}[\text{Pi} \text{zg}[j, n]]) (f[\text{fig}[j, n], \text{zz}[j, n], \Theta, \gamma, q] + f[\text{Pi} + \text{fig}[j, n], \text{zz}[j, n], \Theta, \gamma, q]), \{j, 1, \text{Fibonacci}[n] - 1\}]$$

Okazało się, że tylko ostatnia metoda dawała praktycznie takie same wyniki jak zaproponowana w pracy, nawet dla dużych  $q$  i różnych wartości  $w, u$  i  $x$ .

### Numeryczne rozwiązanie równania

Równanie (39) można przepisać w postaci:

$$\tau = \frac{I(q; w, t = 1, \Theta)}{I(q; w, t = 0, \Theta)} \quad (46)$$

Algorytm obliczeń jest następujący:

$$\gamma[y, u, q, w] := \text{Block}[\{\text{sol}, \text{sol1}\}, \text{sol} = \text{FindRoot}[\{\text{Ln}[\gamma, q, u, 1, w]/\text{Ln}[\gamma, q, u, 0, w] = y\}, \{y, 1\}]; \text{sol1} = \text{sol}[[1, 2]]];$$

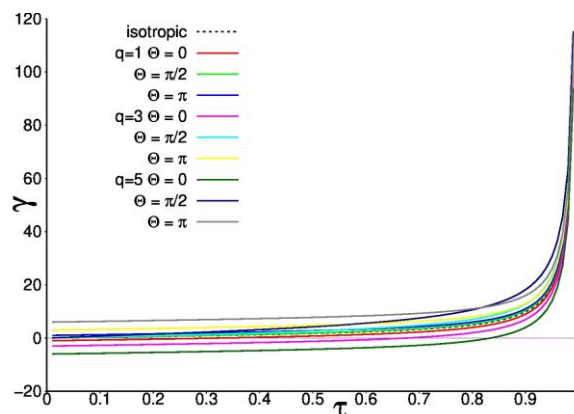
Dla pola zorientowanego równanie to redukuje się do następującego:

$$\tau = \frac{I(q; w = 1, t = 1, \Theta)}{I(q; w = 1, t = 0, \Theta)} \quad (47)$$

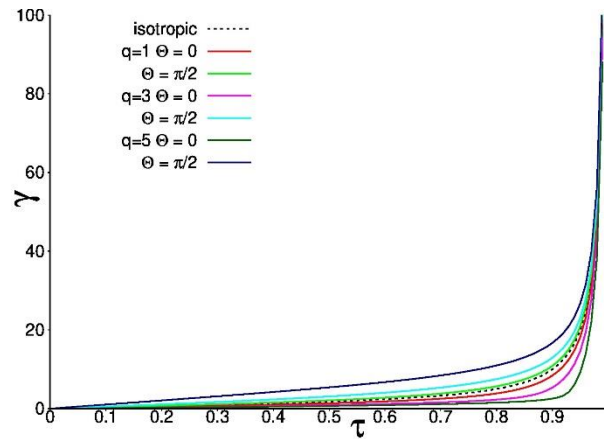
zaś dla pola niezorientowanego ma postać

$$\tau = \frac{I(q; w = 2, t = 1, \Theta)}{I(q; w = 2, t = 0, \Theta)} \quad (48)$$

Rozwiązania tych równań są pokazane na rys. (3) i (4).

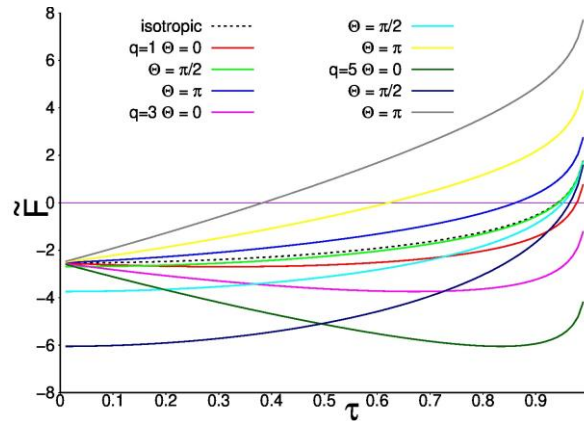


Rys. 3. Wykres  $\gamma(\tau)$  dla  $w = 1$  i dla różnych wartości parametrów  $q$  i  $\Theta$ . W legendzie etykieta „isotropic” oznacza funkcję, która jest niezależna od  $\Theta$ , czyli dla układu czysto entropowego. Legenda ta zostanie użyta do oznaczenia wszystkich dalszych wykresów podanych w tej prezentacji. W przypadku „isotropic” funkcja  $\gamma(\tau)$  jest odwrotną funkcją Langevina  $L^{-1}(\tau)$ .

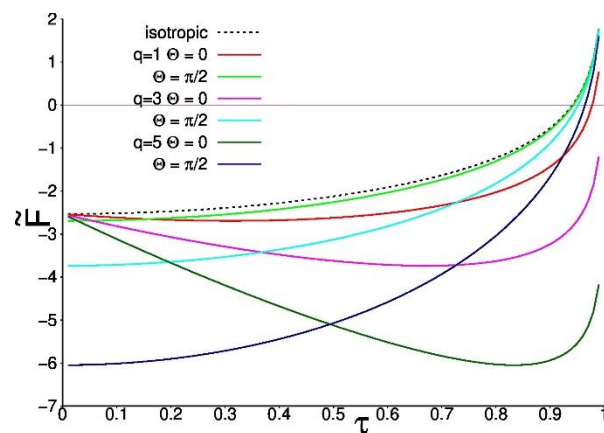


Rys. 4. Wykresy  $\gamma(\tau)$  dla  $w = 2$  i dla różnych wartości parametrów  $q$  i  $\Theta$ . Wykresy dla  $\Theta = 0$  i  $\Theta = \pi$  są takie same.

Na rys. (5) i (6) są pokazane wykresy energii swobodnej  $\tilde{F}(\tau)$  dane równaniem (12):



Rys. 5. Wykresy  $\tilde{F}(\tau)$  dla  $w = 1$  i dla różnych wartości parametrów  $q$  i  $\Theta$ .



Rys. 6. Wykresy  $\tilde{F}(\tau)$  dla  $w = 2$  i dla różnych wartości parametrów  $q$  i  $\Theta$ . Wykresy dla  $\Theta = 0$  i  $\Theta = \pi$  są takie same.

Krzywe dla  $\Theta = 0$  na rys. 5 i 6 posiadają minima dla  $\tau \neq 0$  podczas gdy dla  $\Theta \neq 0$  minima występują dla  $\tau = 0$ . Minimum funkcji  $\tilde{F}(\tau)$  jest równoważne minimum energii swobodnej dla na

łańcuch  $F(\tau) = n\tilde{F}(\tau)$ . Minima funkcji  $F(\tau)$  wyznaczają parametry równowagi termodynamicznej dla łańcucha.

Dalsze obliczenia są wykonane dla liczącej się klasy ciekłokrystalicznych materiałów polimerowych z nematycznym uporządkowaniem wewnętrznym. Dla takich układów  $w = 2$ .

### Weryfikacja intensywności pola przez parametr orientacji

Parametrem bezpośrednio mierzalnym w doświadczeniu przy zastosowaniu metod takich jak SAXS<sup>27</sup>, WAXS<sup>28</sup>, LD jest parametr orientacji  $s$  zdefiniowany przez równanie:

$$s = \frac{3\langle(\mathbf{b} \cdot \mathbf{l}^*)^2\rangle - 1}{2} \quad (49)$$

$\langle(\mathbf{b} \cdot \mathbf{l}^*)^2\rangle$  oznacza średnią liczoną z funkcją rozkładu orientacji  $\mathbf{l}^*$ .

Stosowane podejście w prezentacji bazuje na potraktowaniu funkcji  $\gamma l_z^*$  jako zaburzenia energii potencjalnej  $\tilde{V}(\mathbf{l}^*)$  w stanie niezaburzonym czyli dla  $\gamma = 0$ . Jak było dyskutowane  $\gamma = 0$  odpowiada brakowi deformacji końców łańcucha. Równanie (49) dla  $s$  w tym stanie przybiera postać:

$$s = \frac{3\int(\mathbf{b} \cdot \mathbf{l}^*)^2 \exp[q(\mathbf{b} \cdot \mathbf{l}^*)^2] d\mathbf{l}^*}{2\int \exp[q(\mathbf{b} \cdot \mathbf{l}^*)^2] d\mathbf{l}^*} - \frac{1}{2} \quad (50)$$

albo ze względu na niezmienniczość całek dla dowolnego obrotu układu współrzędnych

$$s = \frac{3}{2} \frac{\int_0^1 x^2 e^{qx^2} dx}{\int_0^1 e^{qx^2} dx} - \frac{1}{2} \quad (51)$$

albo

$$s = \frac{3}{2} \frac{e^q}{\sqrt{\pi} \sqrt{q} \operatorname{erfi}(\sqrt{q})} - \frac{3}{4q} - \frac{1}{2} \quad (52)$$

Prawa strona równania może być przedstawiona w postaci szeregu potęgowego. Stąd

$$s = \frac{2q}{15} + \frac{4q^2}{315} - \frac{8q^3}{4725} - \frac{16q^4}{31185} + \frac{736q^5}{212837625} + O(q^{11/2}) \quad (53)$$

Wzór ten pozwala zastosować metody aproksymacji Padé i otrzymać następujący wzór:

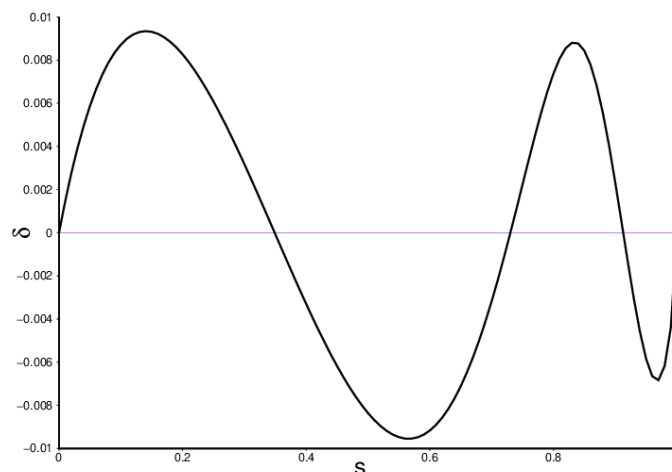
<sup>27</sup> Small-angle X-ray scattering

<sup>28</sup> Wide-angle X-ray scattering

$$q = \frac{s \left( \frac{15}{2} - \frac{316s}{27} + \frac{77s^2}{17} \right)}{(1-s) \left( 1 - \frac{18s^2}{23} \right)} \quad (54)$$

Ma on znaczenie formalne i nie można go fizycznie interpretować jako faktu, że  $q$  jest generowane przez  $s$ .

Dokładność aproksymacji w równaniu (40) jest zilustrowana na rys. (7).



Rys. 7. Wykres błędu względnego  $\delta$  w zależności od  $s$ . Błąd względny nie przekracza 1%.

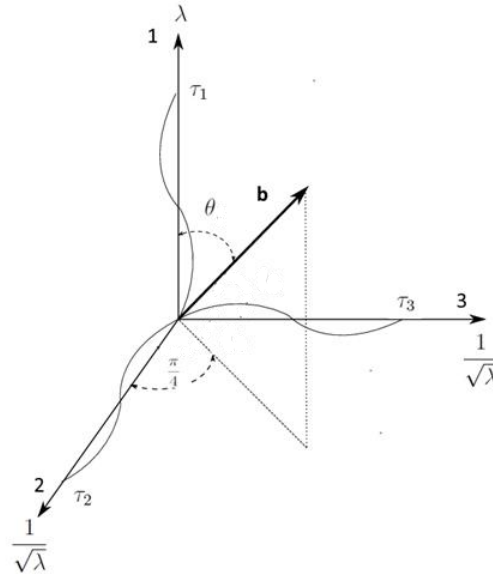
gdzie  $\delta = \frac{q - q_e}{q_e}$  zaś  $q_e$  jest dokładną wartością otrzymaną przez numeryczne rozwiązanie równania (51).

W przypadku deformacji  $s$  jest jej funkcją i w równaniu (50) średnia musi być liczona z funkcją rozkładu orientacji dla  $\gamma \neq 0$ .

### Układ deformowany

Dla opisu układu deformowanego zastosowano model trzylańcuchowy jak na rys. (8).





Rys. 8. Model trzylącuchowy.

Model ten jest prosty w porównaniu z modelami włączającymi większą liczbę łańcuchów jak stosowanymi przez Arrudę i Boyce<sup>6</sup> i innych. Jednak prace tych autorów dotyczą układów czysto entropowych czyli dla braku pola. W przypadku obecności pól orientujących stopień trudności obliczeniowych dla układów wielołańcuchowych wzrasta gwałtownie, choć wyniki prezentowane tutaj dla łańcucha w polu są ogólne i można je stosować dla tych układów. Stąd wybór prostego modelu, który dobrze opisuje zmiany w zachowaniu układu w polu w porównaniu do analogicznego zachowania w przypadku braku pola.

Układ podlega jednoosiowej izochorycznej deformacji opisanej przez stopień deformacji  $\lambda$ . Układy polimerowe charakteryzują się praktycznie stałą objętością dla jednoosiowej deformacji. Orientacja osi pola  $\mathbf{b}$  jest wybrana jak na rysunku aby można było założyć jednakowe własności sprężyste w kierunkach osi 2 i 3. Orientacja ta jest dla układu niezdeformowanego tzn. dla  $\lambda = 1$ . Jest to wynikiem omawianej już poprzednio metody opisu efektów deformacji w odniesieniu do stanu niezdeformowanego.  $\tau_1 = \lambda \tau_0$  zaś  $\tau_2 = \tau_3 = \frac{\tau_0}{\sqrt{\lambda}}$ . Zgodnie z pracami Arruda i Boyce<sup>6</sup>

przyjmuje się, że  $\tau_0 = \sqrt{\langle \tau^2 \rangle}$  gdzie średnia  $\langle \tau^2 \rangle$  jest liczona dla układu niezdeformowanego czyli dla  $\gamma = 0$ . W tym przypadku  $\langle \mathbf{I}_i \cdot \mathbf{I}_j \rangle = \langle \mathbf{I}_i \rangle \cdot \langle \mathbf{I}_j \rangle = 0$  i  $\langle r^2 \rangle = n l_0^2$ . Stąd  $\tau_0 = \frac{1}{\sqrt{n}}$ .

Średnia swobodna energia deformacji przypadająca na segment łańcucha jest dana równaniem:

$$\tilde{F}(\lambda) = \frac{1}{3} \left[ \tilde{F}_{\parallel} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{n}}; \theta \right) + 2 \tilde{F}_{\perp} \left( \frac{1}{\sqrt{\lambda} \sqrt{n}}; \theta \right) \right] \quad (55)$$

gdzie symbol  $\parallel$  oznacza łańcuch z  $\tau_1$  zaś  $\perp$  oznaczają łańcuchy z  $\tau_2 = \tau_3$ .

## Relacja naprężenie-odkształcenie

Praca deformacji na segment układu wykonana w procesie izotropowym  $\tilde{W}(\lambda)$  jest dana równaniem:

$$\tilde{W}(\lambda) = \tilde{F}(\lambda) - \tilde{F}(\lambda = 1) \quad (56)$$

Stąd siła deformacji zdefiniowana przez pochodną pracy  $\tilde{W}(\lambda)$  po  $\lambda$  jest dana wzorem

$\tilde{f}(\lambda) = \frac{\partial \tilde{W}(\lambda)}{\partial \lambda} - \frac{\partial \tilde{W}(\lambda)}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=1}$ . Wyraz  $\frac{\partial \tilde{W}(\lambda)}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=1}$  odpowiada fizycznemu faktowi, że w stanie

niezdeformowanym układ pozostaje w równowadze. Stąd mamy

$$\tilde{f}(\lambda) = \frac{1}{3\sqrt{n}} \left[ \gamma_{\parallel} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{n}} \right) - \gamma_{\parallel} \left( \frac{1}{\sqrt{n}} \right) + \gamma_{\perp} \left( \frac{1}{\sqrt{n}} \right) - \frac{1}{\lambda^{\frac{3}{2}}} \gamma_{\perp} \left( \frac{1}{\sqrt{\lambda} \sqrt{n}} \right) \right] \quad (57)$$

gdzie symbole  $\parallel$  i  $\perp$  mają takie samo znaczenie jak w równaniu (41).

Naprężenie normalne  $\sigma$  na łańcuch jest zdefiniowane przez równanie  $\sigma = n\lambda\tilde{f}(\lambda)$  i można je napisać w postaci

$$\sigma = \frac{\lambda\sqrt{n}}{3} \left[ \gamma_{\parallel} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{n}} \right) - \gamma_{\parallel} \left( \frac{1}{\sqrt{n}} \right) + \gamma_{\perp} \left( \frac{1}{\sqrt{n}} \right) - \frac{1}{\lambda^{\frac{3}{2}}} \gamma_{\perp} \left( \frac{1}{\sqrt{\lambda} \sqrt{n}} \right) \right] \quad (58)$$

## Reprezentacja naprężenia przez szereg

Ogólne wzory przedstawione w tej prezentacji pozwalają zapisać  $\sigma$  w postaci szeregu:

$$\sigma = \sum_{j=1}^{\infty} \sigma_j \quad (59)$$

gdzie

$$\sigma_1 = \frac{1}{3} \left[ b_{\parallel} (\lambda^2 - \lambda) + b_{\perp 1} \left( \lambda - \frac{1}{\lambda} \right) \right]$$

$$\sigma_2 = \frac{1}{3n} \left[ b_{\parallel 3} (\lambda^4 - \lambda) + b_{\perp 3} \left( \lambda - \frac{1}{\lambda^2} \right) \right]$$

$$\sigma_3 = \frac{1}{3n^2} \left[ b_{\parallel 5} (\lambda^6 - \lambda) + b_{\perp 5} \left( \lambda - \frac{1}{\lambda^3} \right) \right]$$

$$\sigma_j = \frac{1}{3n^{j-1}} \left[ b_{\parallel(2j-1)} (\lambda^{2j} - \lambda) + b_{\perp(2j-1)} \left( \lambda - \frac{1}{\lambda^j} \right) \right]$$

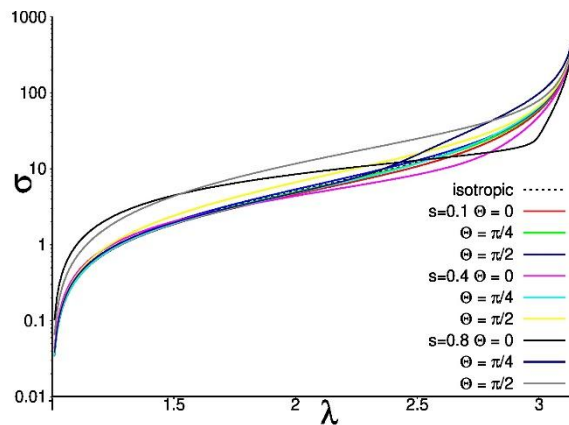
Symbole  $\parallel$  i  $\perp$  tak jak poprzednio. Dla układów czysto entropowych  $b_{\parallel} = b_{\perp} = 3$  i  $\sigma_1 = \lambda^2 - \frac{1}{\lambda}$ .

Wynik ten jest taki jak otrzymany przez innych autorów dla gaussowskiej statystyki łańcuchów. (Wall i Flory<sup>29</sup>)

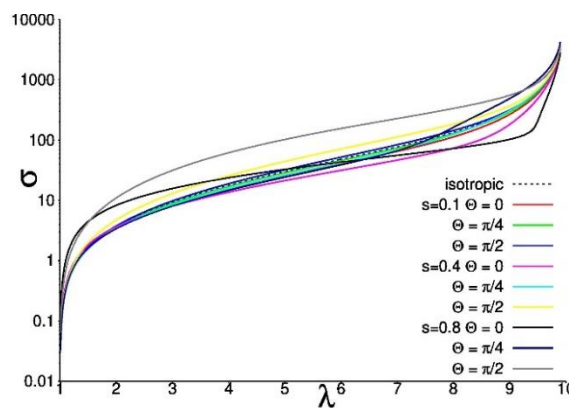
### Ścisłe rozwiązania dla relacji naprężenie – odkształcenie

Otrzymuje się je stosując równanie (58) licząc dokładne gammy z równania (48)

Wyniki obliczeń są pokazane na rysunkach (9) i (10).



Rys. 9. Zależność  $\sigma$  od  $\lambda$  dla różnych wartości  $s$ ,  $\theta$  i dla  $n = 10$ .



Rys. 10. Zależność  $\sigma$  od  $\lambda$  dla różnych wartości  $s$ ,  $\theta$  i dla  $n = 100$ .

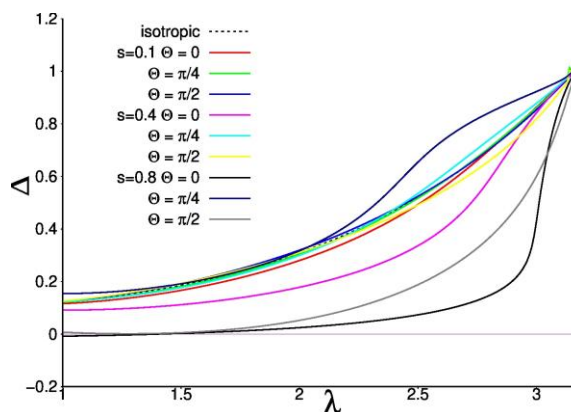
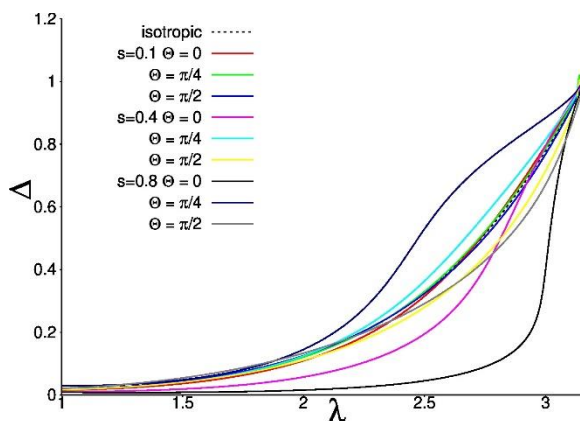
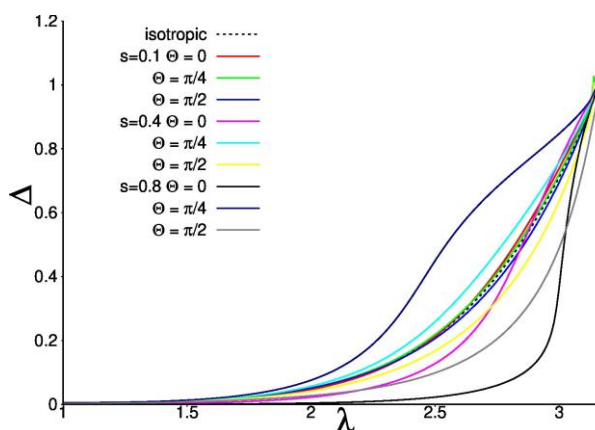
### Oszacowanie przybliżeń

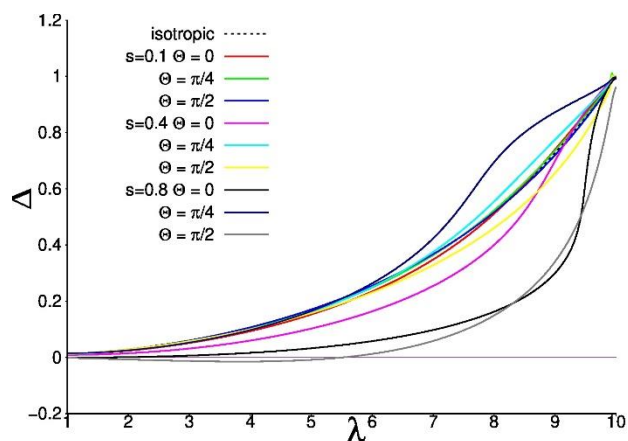
Błąd przybliżeń  $\sigma$  w równaniu (59) jest opisywany przez błąd względny

$$\Delta = \frac{\sigma - \sigma_a}{\sigma} \quad (60)$$

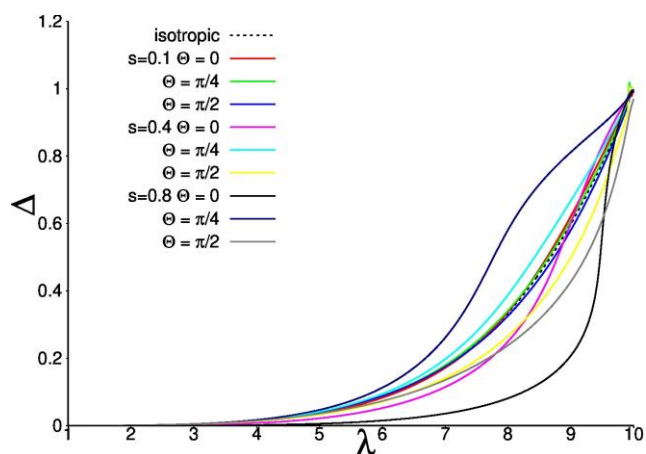
gdzie  $\sigma$  jest dokładną wartością zaś  $\sigma_a$  jest wielkością aproksymowaną przez pewną liczbę wyrazów rozwinięcia. Wyniki obliczeń są przedstawione na rysunkach (11) – (16)

<sup>29</sup> Wall, F.T., Flory, P.J., 1951. Statistical thermodynamics of rubber elasticity. J. Chem. Phys. 19, 1435–1439.

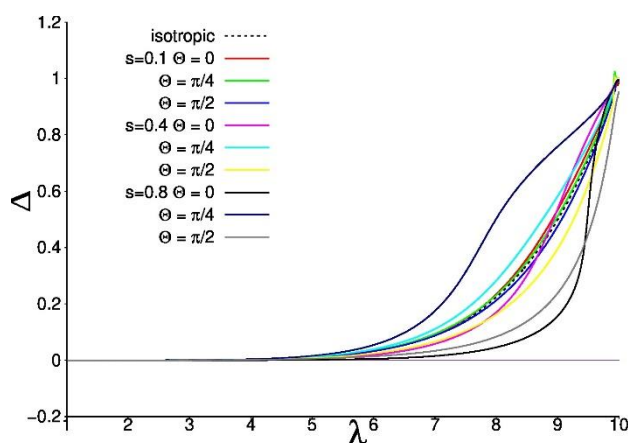
Rys. 11. Zależność  $\Delta$  od  $\lambda$  dla różnych wartości  $s$ ,  $\theta$  i dla  $n=10$ . Aproksymacja jednym wyrazem.Rys. 12. Zależność  $\Delta$  od  $\lambda$  dla różnych wartości  $s$ ,  $\theta$  i dla  $n=10$ . Aproksymacja dwoma wyrazamiRys. 13. Zależność  $\Delta$  od  $\lambda$  dla różnych wartości  $s$ ,  $\theta$  i dla  $n=10$ . Aproksymacja trzema wyrazami



Rys. 14. Zależność  $\Delta$  od  $\lambda$  dla różnych wartości  $s$ ,  $\theta$  i dla  $n = 100$ . Aproksymacja jednym wyrazem.



Rys. 15. Zależność  $\Delta$  od  $\lambda$  dla różnych wartości  $s$ ,  $\theta$  i dla  $n = 100$ . Aproksymacja dwoma wyrazami



Rys. 16. Zależność  $\Delta$  od  $\lambda$  dla różnych wartości  $s$ ,  $\theta$  i dla  $n = 100$ . Aproksymacja trzema wyrazami

### Podsumowanie części 1) prezentacji

- Otrzymano ogólne reguły dla wyznaczenia relacji naprężenie - odkształcenie dla układu łańcuchów polimerowych w obecności pola orientującego segmenty lub też w przypadku

jego braku. Wyniki te zastosowano do polimerów nematycznych. Otrzymane rezultaty są zgodne z danymi doświadczalnymi<sup>30,31</sup> i przewidują istnienie charakterystycznego *plateau* na krzywej opisującej zależność naprężenia od deformacji. Oszacowane są efekty nieliniowe w tej relacji.

2. Zastosowano metodę optymalizacji warunkowej w celu wyznaczenia funkcji rozkładu orientacji segmentów niezbędnej dla otrzymania relacji naprężenie – odkształcenie. Dla jej obliczenia potrzebna jest znajomość nieoznaczonego mnożnika Lagrange’a związanego z optymalizacją.
3. Sformułowano równanie dla wyznaczenia tego mnożnika. Jest to równanie, które można rozwiązać tylko numerycznie. W szczególnym przypadku braku pola, mnożnik Lagrange’a redukuje się do odwrotnej funkcji Langevina. Wkład w to zagadnienie jest wyłącznie mój i polega na:
  - a) wyprowadzeniu serii najdokładniejszych aproksymacji wymiernych odwrotnej funkcji Langevina charakteryzujących się małą złożonością
  - b) zbadaniu zbieżności szeregu Taylora odwrotnej funkcji Langevina oraz znalezieniu optymalnego szeregu powyżej promienia zbieżności dającego minimalny błąd względny rozwinięcia
  - c) opracowaniu procedur numerycznych do wyznaczenia funkcji Langevino-podobnej z wykorzystaniem bibliotek programu Mathematica
  - d) opracowaniu procedur numerycznych do wyznaczenia ścisłego rozwiązania dla relacji naprężenie – odkształcenie z wykorzystaniem wspomnianego oprogramowania
  - e) obliczeniu wzorów przybliżonych dla relacji naprężenie-odkształcenie i ich realizacja numeryczna w przypadku jednego, dwóch oraz trzech wyrazów

## 2) Relacja siła oddziaływania powierzchni chropowatych – odległość powierzchni

### Model GW oraz GT

Jednym z najbardziej popularnych modeli statystycznych opisujących relację pomiędzy siłą oddziaływania powierzchni chropowatych w funkcji ich zbliżenia jest model tribologiczny

---

<sup>30</sup> Dey S., Agra-Kooijman D. M., Ren W., McMullan P. J., Griffin A. C., Kumar S., 2013. Soft elasticity in main chain liquid crystal elastomers, *Crystals* 3, 363-390

<sup>31</sup> Ren W., McMullan P.J., Griffin A.C., 2008. Poisson’s ratio of monodomain liquid crystalline elastomers, *Macromol. Chem. Phys.* 209, 1896–1899

opracowany przez Greenwooda i Williamsona (model GW)<sup>32</sup>, a następnie udoskonalony przez Greenwooda i Trippa (model GT)<sup>33</sup>. Pierwszy, pionierski model GW, odnosi się do opisu statycznego kontaktu pomiędzy idealnie gładką powierzchnią oraz chropowatą. Autorzy założyli ze względów statystycznych, że chropowata powierzchnia pokryta jest dużą ilością mikronierówności (rys. 17), których wierzchołki mają kształt sferyczny o jednakowym dla wszystkich nierówności promieniu krzywizny  $\beta$ . Dla celów modelowych postuluje się, że wysokości mikronierówności zmieniają się losowo, zaś prawdopodobieństwo tego, że wybrana mikronierówność ma wysokość z przedziału  $(z; z+dz)$  wynosi  $\phi(z)dz$ .  $\phi(z)$  oznacza rozkład statystyczny, jakiemu podlegają wysokości mikronierówności pokrywające powierzchnię chropowatą. Wysokość z mikronierówności mierzy się od linii średniej profilu. W wyniku kontaktu powierzchni następuje deformacja mikronierówności, przy czym wielkości geometryczne i fizyczne opisujące kontakt pojedynczej nierówności opisane są nieliniową teorią sprężystości Hertza<sup>34</sup>. Promień styku wybranej mikronierówności z powierzchnią gładką ( $a_1$ ), powierzchnię tego styku ( $A_1$ ) oraz nacisk ( $P_1$ ) odpowiadający określonej deformacji możemy wyznaczyć za pomocą następujących wzorów (61a-c):

$$a_1 = \sqrt{\beta(z-d)} \quad (61a)$$

$$A_1 = \pi\beta(z-d) \quad (61b)$$

$$P_1 = \frac{4}{3} E_r \sqrt{\beta(z-d)}^{3/2} \quad (61c)$$

gdzie:  $\beta$  – promień krzywizny mikronierówności,  
 $z$  – wysokość mikronierówności mierzona od linii średniej profilu,  
 $d$  – zbliżenie powierzchni (odległość pomiędzy średnimi liniami ich profilów),

$$E_r = \left( \frac{1-v_1^2}{E_1} + \frac{1-v_2^2}{E_2} \right)^{-1} \text{ - zredukowany moduł sprężystości,}$$

$E_i$  – moduły sprężystości powierzchni,  
 $v_i$  – współczynniki Poissona powierzchni.

Wykładnik 3/2 (wzór 61c) jest słuszny dla przypadku, w którym występuje rozkład paraboliczny naprężeń kontaktowych, tak jak w pierwotnej pracy Hertza. W przypadku szkła czy polimerów wykładnik ten może się różnić od 3/2<sup>35</sup>. W obszarze oddziaływań sprężystych autorzy wyprowadzili następujące wzory na  $A_a$  - wartość oczekiwaną powierzchni rzeczywistego styku

<sup>32</sup> Greenwood JA, Williamson JB., 1966. Contact of nominally flat surfaces. Proc Roy Soc Lond A;295:300–19.

<sup>33</sup> Greenwood JA, Tripp JH., 1970. The contact of two nominally flat rough surfaces. Proc Inst Mech Eng;185(1),625–33.

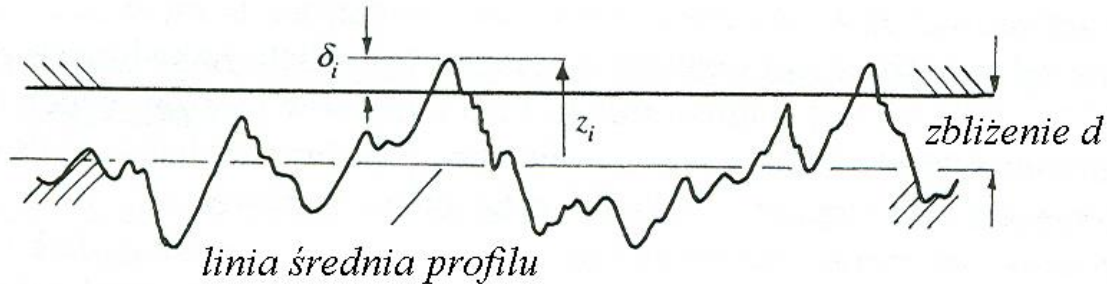
<sup>34</sup> Hertz H., 1881. Über die Berührung fester elastischer Körper. J reine und angewandte Mathematik 92:156–171

<sup>35</sup> Paulo Flores, Hamid M. Lankarani, 2016. Contact Force Models for Multibody Dynamics, SMIA 226, Springer

(62a) oraz  $P$  - wartość oczekiwaną siły nacisku (62b), odpowiadającą zbliżeniu  $d$  rozpatrywanych powierzchni ( $\eta$  - gęstość powierzchniowa mikronierówności,  $A$  - powierzchnia nominalna styku):

$$A_a = \eta A \pi \beta \int_d^{\infty} (z-d) \phi(z) dz, \quad (62a)$$

$$P = \frac{4}{3} \eta A E_r \sqrt{\beta} \int_d^{\infty} (z-d)^{3/2} \phi(z) dz. \quad (62b)$$



Rys. 17. Odształcenie powierzchni chropowatej w kontakcie z płaszczyzną (model GW),  $d$  - oznacza zbliżenie w dowolnej chwili, zaś linia przerywana położenie linii średniej profilu

We wzorach tych występują całki nieskończone typu (63)

$$F_n(d) = \int_d^{\infty} (z-d)^n \phi(z) dz \quad (63)$$

które w przypadku najczęściej postulowanych rozkładów nie posiadają analitycznego rozwiązania (wyjątkiem jest rozkład wykładniczy).

W większości publikowanych prac, wykorzystujących model GW oraz rozszerzony GT, przyjmuje się, że wysokości mikronierówności mają rozkład normalny. Wartości tych całek obliczane są numerycznie, bądź rzadziej za pomocą wzorów aproksymacyjnych.

Model zaproponowany przez Greenwooda i Trippa (GT) rozszerzył model GW na kontakt między dwiema chropowatymi powierzchniami. Model GT jest szeroko stosowany w obszarze tarcia elastohydrodynamicznego.

Najczęściej cytowane równania podane w modelu GT dotyczą powierzchni rzeczywistego styku (64)

$$A_a(\lambda) = \pi^2 (\eta \beta \sigma)^2 A F_2(\lambda) \quad (64)$$

oraz obciążenia przenieszonego przez mikronierówności (65)

$$P(\lambda) = \frac{8\sqrt{2}}{15} \pi (\eta \beta \sigma)^2 \sqrt{\frac{\sigma}{\beta}} E' A F_{5/2}(\lambda), \quad (65)$$



gdzie  $\eta\beta\sigma$  oznacza parametr chropowatości ( $\eta$  - gęstość powierzchniowa mikronierówności,  $\beta$  - promień mikronierówności,  $\sigma$  - odchylenie standardowe rozkładu normalnego wysokości mikronierówności),  $\lambda$  parametr olejowy Stribecka.

Podsumowując omówione modele tribologiczne (GW, GT) chciałbym zwrócić uwagę na fakt, że punktem wyjścia dla ich wyprowadzenia jest analiza nieliniowej siły sprężystej Herta w pojedynczym kontakcie mikronierówności płaszczyzna lub dwóch mikronierówności, a następnie stosując wybraną statystykę rozkładu wysokości mikronierówności obliczenie sił makroskopowych, które także mają charakter nieliniowy. Nieliniowości dla relacji siła oddziaływania powierzchni chropowatych – odległość powierzchni określone są przez funkcję  $F_{3/2}(d)$  (model GW) i  $F_{5/2}(d)$  (model GT) dla przypadku rozkładu gaussowskiego wysokości mikronierówności.

#### Wzory aproksymacyjne

W pracy [A11] przedstawiłem podstawowe założenia związane ze stosowaniem klasycznej aproksymacji Padé oraz jej uogólnieniem NPA w odniesieniu do całki statystycznej  $F_{5/2}(h)$  z modelu GT. Istotnym elementem pracy było omówienie problemu „best PA”, czyli doboru stopni  $m$  i  $n$  aproksymacji Padé  $[m/n]$  aby uzyskać optymalne przybliżenie dla rozpatrywanej funkcji. Dla rozwiązania tego problemu zastosowałem dwa następujące algorytmy: metodę  $\rho$  (ang.  $\rho$ -method) i metodę dolin w c-tabeli (ang. method of valleys in c-table), obie oparte na analizie współczynników rozwinięcia w szereg Taylora rozważanej funkcji<sup>36</sup>. W wyniku tej analizy otrzymałem następujące optymalne przybliżenie (66).

$$F_{5/2}(h) = \exp(-h^2/2) \frac{.616634+.0587436h+.0186433h^2-.0000525721h^3}{1.+1.83868h+1.48582h^2+.680187h^3+.187771h^4+.0300186h^5+.0022127h^6} \quad (66)$$

gdzie  $h=d/\sigma$  ( $d$  – parametr zbliżenia powierzchni,  $\sigma$  - odchylenie standardowe rozkładu normalnego wysokości mikronierówności).

Maksymalny błąd względny wyprowadzonej aproksymacji, w przedziale  $[0, 4]$ , wynosi 0.06%. Dla porównania jedna z najczęściej cytowanych formuł Hu<sup>37</sup> ma odpowiednio 100%.

Stosując metodykę związaną z NPA otrzymałem następującą formułę (67):

$$F_{5/2}(h) = \frac{.616634-.457287h+.1141502h^2-.0095798h^3}{1.+1.3788066h-.997978h^2+2.988216h^3-1.651924h^4+.5588187h^5} \quad (67)$$

<sup>36</sup> Gilewicz, J., 1978. Approximants de Padé. Lecture Notes in Mathematics, vol. 667, Springer, Berlin

<sup>37</sup> Hu YZ, Cheng HS, Arai T, Kobayashiy, Aoyama S. 1994. Numerical-simulation of piston ring in mixed lubrication - a non axisymmetrical analysis. J Tribol Trans ASME JUL;116(3):470-8. STLE/ASME Tribology Conference, New Orleans, LA, Oct 24-27, 1993.

W tym przypadku, maksymalny błąd względny wyprowadzonej aproksymacji, w przedziale  $[0, 4]$ , jest jeszcze mniejszy i wynosi 0.00078%. Zgodnie z sugestiami numerycznymi zawartymi przez Greenwooda<sup>38</sup> obliczenia były prowadzone na zmodyfikowanej funkcji (68)

$$G_{5/2}(h) = \exp(h^2/2)F_{5/2}(h) \quad (68)$$

która w badanym przedziale  $[0,4]$  maleje znacznie wolniej do zera niż rozpatrywana  $F_{5/2}(h)$ .

Praca zawiera także omówienie zagadnień tribologicznych oraz przykłady stosowalności przyjętego rozkładu normalnego wysokości mikronierówności w przypadku powierzchni spotykanych w praktyce inżynierskiej. W pracy zacytowałem także wyniki badań własnych<sup>39</sup>, które potwierdzały występowanie takich rozkładów w przypadku niektórych rodzajów metalowych powłok galwanicznych naniesionych na stalowe tarcze.

Do problemu aproksymacji wzorów całkowych  $F_n(h)$  dla modelu GW oraz GT powróciłem w pracy [A1]. Zastosowałem tym razem nowe techniki aproksymacyjne omówione w pracy [A5]. Wzory podałem w postaci dwóch rodzajów funkcji wymiernych (69) i (70).

$$R_{2,4}(h) = \frac{a_0 + a_1 h + a_2 h^2}{1 + b_1 h + b_2 h^2 + b_3 h^3 + b_4 h^4} \exp\left(-\frac{h^2}{2}\right) \quad (69)$$

$$R_{3,6}(h) = \frac{a_0 + a_1 h + a_2 h^2 + a_3 h^3}{1 + b_1 h + b_2 h^2 + b_3 h^3 + b_4 h^4 + a_5 h^5 + b_6 h^6} \exp\left(-\frac{h^2}{2}\right) \quad (70)$$

Wzór (69) charakteryzuje się złożonością  $c=6$ . Został tak dobrany, aby w przyjętej skali złożoności cechował się maksymalną prostotą, a jednocześnie zapewniał najdokładniejsze obliczenia w grupie już istniejących aproksymacji. Z kolei wzór (70) o złożoności  $c=9$  miał zapewniać dokładność porównywalną lub lepszą od standardowych obliczeń numerycznych (całkowania). Dobór stopni wynikał z licznych prób numerycznych wykonanych dla różnych kombinacji tych stopni i wybrania optymalnych rozwiązań.

W tabeli 2 podane są wartości współczynników, które wyznaczyłem dla dokładniejszej aproksymacji  $R_{3,6}(h)$ , wzór (70), dla poszczególnych funkcji  $F_n(h)$  wraz z ich maksymalnymi błędami względnymi. Ilość cyfr znaczących po przecinku została tak dobrana by zapewnić prawidłowe wyniki przybliżeń.

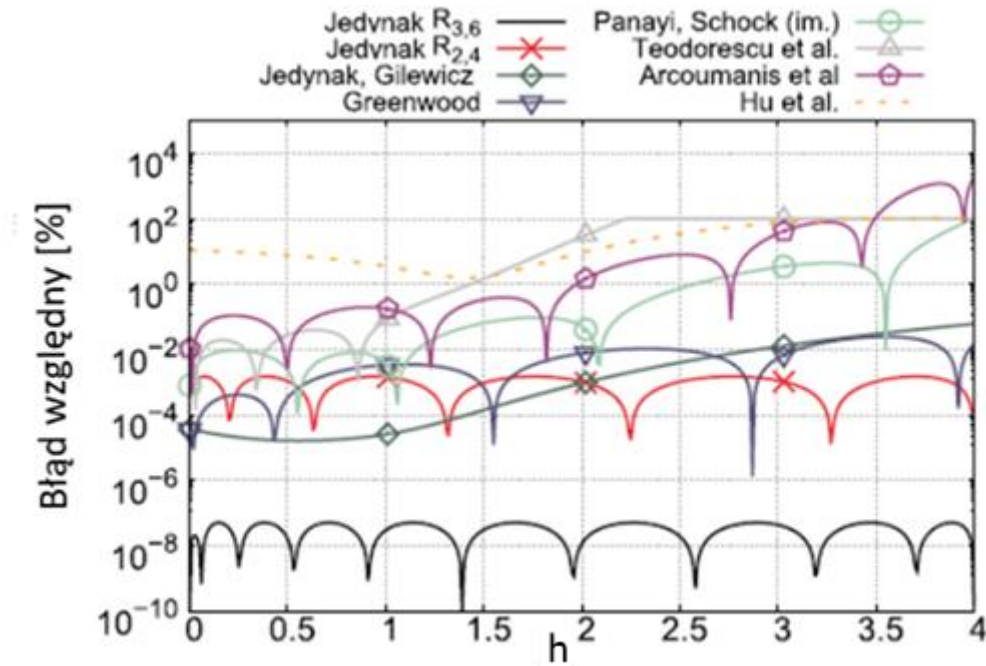
<sup>38</sup> Greenwood JA, Panayi AP, Schock HJ., 2008. Approximation of the integral of the asperity height distribution for the greenwood-tripp asperity contact model discussion. Proc Inst Mech Eng J NOV;222(J7):995–6

<sup>39</sup> Jedynek R., Sułek M., 2014. Numerical and Experimental Investigation of Plastic Interaction Between Rough Surfaces, Arabian Journal For Science And Engineering 30, p. 4165-4177, ISSN: 1319-802

Tabela 2. Wartości współczynników dla aproksymacji  $R_{3,6}(h)$  dla poszczególnych funkcji  $F_n(h)$  wraz z ich maksymalnymi błędami względnymi.

n	Współczynniki [ $a_0, a_1, a_2, a_3$ ]	Współczynniki [ $b_1, b_2, b_3, b_4, b_5, b_6$ ]	Maksymalny błąd względny [%]
1	[0.398942280401, 0.159773702775, 0.0389687688311, 0.00364356495452]	[1.653807476138, 1.170419428529, 0.448892964428, 0.095197170916, 0.00931642803836, -6.383774657279*10 <sup>-6</sup> ]	9.93*10 <sup>-8</sup>
3/2	[0.430019993662, 0.101979509447, 0.022904062958, 0.000688602924]	[1.671117125984, 1.199586555505, 0.46936532151, 0.102632881122, 0.010686348714, 0.0000517200271]	1.91*10 <sup>-7</sup>
2	[0.5, 0.182536384941, 0.039812283118, 0.003684879001]	[1.960841785003, 1.708677456715, 0.856592986083, 0.264996791567, 0.049257843893, 0.004640740133]	1.68*10 <sup>-7</sup>
5/2	[0.616634218997, 0.108855827811, 0.023453835635, 0.000449332509]	[1.919948267476, 1.635304362591, 0.799392556572, 0.240278859212, 0.043178653945, 0.003863334276]	4.98*10 <sup>-8</sup>

Rys. 18 prezentuje porównanie błędu względnego procentowego dla różnych wzorów aproksymacyjnych  $F_{5/2}(h)$ . Wskazuje ogromne zróżnicowanie dokładności używanych formuł. Wyprowadzana aproksymacja oferuje największą dokładność, zaś jej maksymalny błąd względny jest  $10^{10}$  razy mniejszy od często stosowanych w praktyce. Zaproponowane wzory mają najczęściej większą dokładność niż obliczenia numeryczne całek z wykorzystaniem standardowych procedur numerycznych, które są na poziomie  $10^{-6}$  %.



Rys.18. Porównanie błędu względnego procentowego obliczonego dla różnych wzorów aproksymacji na  $F_{5/2}(h)$ . Wykresy są wykonane w skali logarytmicznej.

#### Dokładne wzory analityczne

Bardzo ważnym osiągnięciem pracy [A1] jest wyprowadzenie ścisłych analitycznych formuł dla obydwu modeli tribologicznych. Wyrażone są one za pomocą funkcji specjalnych (nieelementarnych) następująco (71-74):

$$F_1(h) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}h^2\right) - \frac{1}{2}h \operatorname{erfc}\left(\frac{h}{\sqrt{2}}\right) \quad (71)$$

$$F_{3/2}(h) = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{h^2}{4}\right) \sqrt{h} \left( (h^2 + 1) K_{\frac{1}{4}}\left(\frac{h^2}{4}\right) - h^2 K_{\frac{3}{4}}\left(\frac{h^2}{4}\right) \right) \quad (72)$$

$$F_2(h) = \frac{1}{2} (h^2 + 1) \operatorname{erfc}\left(\frac{h}{\sqrt{2}}\right) - \frac{h}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{h^2}{2}\right) \quad (73)$$

$$F_{5/2}(h) = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{h^2}{4}\right) h^{3/2} \left( (2h^2 + 3) K_{\frac{3}{4}}\left(\frac{h^2}{4}\right) - (2h^2 + 5) K_{\frac{1}{4}}\left(\frac{h^2}{4}\right) \right) \quad (74)$$

We wzorach tych  $\operatorname{erfc}(x)$  – oznacza komplementarną funkcję błędu (complementary error function),  $K_n(x)$  – zmodyfikowaną funkcję Bessela drugiego rodzaju (modified Bessel function of the second kind). Funkcje te są standardowo dostępne w specjalistycznym oprogramowaniu inżynierskim i matematycznym (np. Matlab, Mathematica). Zastosowanie wzorów aproksymacyjnych (69), (70) ma miejsce w przypadku, gdy do obliczeń nie jest wykorzystane oprogramowanie mające zaimplementowane wspomniane funkcje.

Istotnym elementem pracy [A1] jest dyskusja stosowalności otrzymanych wzorów w przypadku powierzchni mających inżynierskie zastosowanie. Przytoczyłem między innymi wyniki badań

eksperymentalnych Leightona<sup>40</sup>, którzy przeprowadzili serię testów eksperymentalnych, na powierzchniach typu „cross-hatched honed”. Takie powierzchnie są przykładem teksturowanych powierzchni, które, jak wykazano, poprawiają właściwości tribologiczne w różnych kontaktach polegające na zmniejszeniu tarcia i zużycia. Rozkłady nierówności takich powierzchni nie są gaussowskie i mają plato. Jednocześnie wymienieni naukowcy zbadali, że spłot rozkładów wysokości nierówności kontaktujących się powierzchni ściśle odpowiada przybliżonemu rozkładowi Gaussa. Z tych eksperymentów można wywnioskować, że model GT jest nadal ważny dla tych powierzchni, jeśli zastosuje się specyficzny dla powierzchni rozkład. Dla tej nowej metodyki autorzy wprowadzili pojęcie „surface-specific representation”. W ostatnio opublikowanych pracach<sup>41,42</sup> można znaleźć zastosowanie rozszerzonej metody GT i wspomnianej metody dla przypadku teksturowanych powierzchni, takich jak wstawki wkładek tulejowych. Autorzy wykorzystali wielomianowe przybliżenia  $F_2$  i  $F_{5/2}$  w celu uzyskania ostatecznych wzorów. Model przedstawiony przez Gore<sup>43</sup> modyfikuje oryginalny model GT poprzez uwzględnienie krzywizny taśmy ślizgowej w regularnym kontakcie we wkładkach tulei cylindrowych. Założyli, że powierzchnia pierścienia ma kształt paraboliczny i wyprowadzili poprawione formuły dla tego przypadku. Wzory opisujące poprawiony obszar styku wyrażają się następująco (75) i (76)

$$A_a = \pi^2 (\eta\beta\sigma)^2 L\sqrt{2\sigma R} \int_{\lambda_0}^{\lambda_c} F_2(\lambda) \lambda^{-1/2} d\lambda, \quad (75)$$

$$P = \frac{8\sqrt{2}}{15} \pi (\eta\beta\sigma)^2 \sqrt{\frac{\sigma}{\beta}} E' L\sqrt{2\sigma R} \int_{\lambda_0}^{\lambda_c} F_{5/2}(\lambda) \lambda^{-1/2}(\lambda) d\lambda, \quad (76)$$

Wykorzystując dokładne wzory (73) i (74) wyprowadziłem następujące ściśle rozwiązania dla tego modelu (77) i (78)

$$\int_{\lambda_0}^{\lambda_c} F_2(\lambda) \lambda^{-1/2} d\lambda = \frac{1}{5} \sqrt{\lambda} ((\lambda^2 + 5) \operatorname{erfc}\left(\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\right) - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp\left(-\frac{\lambda^2}{2}\right) \lambda - \frac{4\sqrt{2}\lambda\Gamma\left(\frac{3}{4}\right)}{\sqrt{\pi}(\lambda^2)^{3/4}}) \Big|_{\lambda_0}^{\lambda_c} \quad (77)$$

$$\int_{\lambda_0}^{\lambda_c} F_{5/2}(\lambda) \lambda^{-1/2}(\lambda) d\lambda = \frac{\sqrt{\lambda}}{20790\sqrt[4]{2}\sqrt{\pi}} (154\sqrt{2}\Gamma\left(\frac{7}{4}\right)(\lambda^2(10\lambda^2 2F_2\left(\frac{3}{4}, \frac{9}{4}; \frac{3}{2}, \frac{13}{4}; -\frac{\lambda^2}{2}\right) + 452F_2\left(\frac{3}{4}, \frac{5}{4}; \frac{3}{2}, \frac{9}{4}; -\frac{\lambda^2}{2}\right) + 362F_2\left(-\frac{1}{4}, \frac{5}{4}; -\frac{1}{2}, \frac{9}{4}; -\frac{\lambda^2}{2}\right)) + 2702F_2\left(-\frac{1}{4}, \frac{1}{4}; -\frac{1}{2}, \frac{5}{4}; -\frac{\lambda^2}{2}\right)) -$$

<sup>40</sup> Leighton M, Morris N, Rahmani R, Rahnejat H., 2017. Surface specific asperity model for prediction of friction in boundary and mixed regimes of lubrication. *Meccanica*;52(1):21–33

<sup>41</sup> Leighton M, Rahmani R, Rahnejat H., 2016. Surface-specific flow factors for prediction of friction of cross-hatched surfaces. *Surf Topogr*;4(2):025002.

<sup>42</sup> Mohammadpour M, Morris NJ, Leighton M, Rahnejat H., 2016. Effect of surface topography upon micro-impact dynamics. *Surf Topogr*;4(1):014001.

<sup>43</sup> M. Gore, N. Morris, R. Rahmani, H. Rahnejat, P. D. King, and S. Howell-Smith., 2016. A combined analytical-experimental investigation of friction in cylinder liner inserts under mixed and boundary regimes of lubrication. *Lubric Sci*, 29(5):293–316

$$45\lambda\Gamma\left(\frac{5}{4}\right)\left(33\lambda^2\left(42F_2\left(\frac{1}{4}, \frac{7}{4}; \frac{1}{2}, \frac{11}{4}; -\frac{\lambda^2}{2}\right) + 2F_2\left(\frac{5}{4}, \frac{7}{4}; \frac{5}{2}, \frac{11}{4}; -\frac{\lambda^2}{2}\right)\right) + 7702F_2\left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}; \frac{1}{2}, \frac{7}{4}; -\frac{\lambda^2}{2}\right) + 14\lambda^4 2F_2\left(\frac{5}{4}, \frac{11}{4}; \frac{5}{2}, \frac{15}{4}; -\frac{\lambda^2}{2}\right)\right)\Big|_{\lambda_0}^{\lambda_c} \quad (78)$$

które poprawiły rozwiązania przybliżone uzyskane przez Gore. W ten sposób pokazałem aplikację moich dokładnych rozwiązań do wzorów występujących w modelu GT.

### Podsumowanie części 2) prezentacji

1. Wyprowadzenie najdokładniejszych wzorów przybliżonych dla modeli tribologicznych GW i GT w przypadku rozkładu normalnego
2. Wyznaczenie ścisłych analitycznych rozwiązań dla modeli tribologicznych GW i GT w przypadku rozkładu normalnego

### 3) Opracowanie nowych metod aproksymacyjnych z ich aplikacją do omówionych zagadnień fizycznych

W pracy [A9] przedstawiłem nową metodę numeryczną wykorzystującą średnie ważone wielopunktowych aproksymacji Padé (weighted means of N-point Padé). Jej algorytm jest następujący. Niech  $f$  będzie funkcją, którą chcemy przybliżyć w przedziale  $[x_1, x_N]$ . Znane są współczynniki rozwinięć w szereg Taylora funkcji  $f$  w punktach  $x_1, x_2, \dots, x_N$  (zaś  $p_1 > 1, p_2, \dots, p_N$  oznaczają ich liczbę). Zaczynamy od obliczenia dwóch sąsiadujących aproksymacji NPA funkcji  $f$ , mianowicie  $f_1 = [m/n]$  i  $f_2 = [m - 1/n]$ . Druga wartość NPA jest obliczana przy zmniejszonej ilości informacji przez usunięcie jednego współczynnika z rozwinięcia  $f$  w punkcie  $x_1$  (w przypadku ogólnym w dowolnym  $x_i$ ). Zakładamy, że funkcja  $f$  posiada właściwość TSE (z ang. two-sided estimation, dwustronną właściwość estymacji), tzn. wartości przybliżeń spełniają warunek  $f_1(x) f_2(x) < 0$  w każdym przedziale  $(x_i, x_{i+1})$ . Właściwość tę posiadają na przykład funkcje Stieltjesa oraz wiele innych funkcji, mających praktyczne zastosowanie (głównie wypukłych). Wybieramy następnie znaną funkcję  $\tilde{f}$  mającą dwustronną właściwość estymacji o wartościach  $\tilde{f}(x_i)$  jak najbliższej wartości  $f(x_i)$ . Obliczamy przybliżenia  $\tilde{f}_1 = [m/n]$  i  $\tilde{f}_2 = [m - 1/n]$ , wykorzystując wartości w punktach  $x_i$  i określając dla wszystkich  $x$  funkcję wagową  $\alpha$  z równania  $\tilde{f} = \alpha\tilde{f}_1 + (1 - \alpha)\tilde{f}_2$ . Stosując tę wagę do obliczenia ważonej średniej  $\alpha f_1 + (1 - \alpha) f_2$  uzyskujemy znacznie lepsze przybliżenie  $f$ .

Powyższy algorytm zastosowałem w pracy [A9] do funkcji  $F_{5/2}(h)$ . Do znalezienia przybliżenia wybrałem następującą funkcję referencyjną (przeskalowana funkcja Stieltjesa) (79)

$$\tilde{s}(x) = \frac{\ln(\frac{x}{2}+1)}{\frac{x}{2}} (-0.279408x + 0.616634) \quad (79)$$

oraz dwa przybliżenia [2/3] (wzór 80) i [1/3] (wzór 81).

$$f_1(x) = \frac{0.0131008x^2 - 0.133611x + 0.617026}{0.287364x^3 + 0.917832x^2 + 1.53293x + 1} \quad (80)$$

$$f_2(x) = \frac{0.621943 - 0.0611792x}{0.500488x^3 + 1.00966x^2 + 1.71168x + 1} \quad (81)$$

Rozpatrzyłem 4 punkty  $x_i$ : .5; 1; 1.5; 2. Obliczyłem następnie dyskretne wagi w odpowiednich przedziałach  $(x_i, x_{i+1})$ , ze wzorów (82) i (83)

$$\alpha(x) = \frac{\tilde{s}(x) - \tilde{s}_2(x)}{\tilde{s}_1(x) - \tilde{s}_2(x)} \quad (82)$$

$$\alpha_i = \alpha\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) \quad (83)$$

co dało  $\alpha_1 = .992$   $\alpha_2 = .982$   $\alpha_3 = .974$

Ostatecznie wartość przybliżoną funkcji  $F_{5/2}(h)$  w przedziale  $[x_i, x_{i+1}]$  obliczamy ze wzoru (84)

$$m_i(x) = \alpha_i f_1(x) + (1 - \alpha_i) f_2(x), x \in [x_i, x_{i+1}] \quad (85)$$

W [A4] udowodniłem, że funkcja wagowa (82) zdefiniowana przez  $\tilde{s}$  i przez dwa oscylujące przybliżenia  $\tilde{s}_1$  i  $\tilde{s}_2$  jest funkcją gładką i wypukłą. Oznacza to, że możemy naszą metodą zastosować do ciągłej funkcji wagowej (86).

$$m(x) = \alpha(x) f_1(x) + (1 - \alpha(x)) f_2(x), x \in [x_1, x_N] \quad (86)$$

Wykonane obliczenia wskazały na poprawę dokładności otrzymanych wzorów w porównaniu do metody z dyskretnymi wagami. Poprawioną metodę wykorzystałem także do aproksymacji odwrotnej funkcji Langevina.

### Oryginalne elementy prezentowanego cyklu publikacji [A1-A11]

(\*) Teoria odwrotnej funkcji Langevina w zastosowaniu do przewidywania nieliniowych efektów w sprężystości układów polimerowych .

#### 1. układy czysto entropowe

- najdokładniejsza aproksymacja odwrotnej funkcji Langevina przez wzór analityczny o małej złożoności
- dyskusja zbieżności wyników aproksymacyjnych obliczeń z dokładnymi wynikami (w zakresie błędu obliczeniowego) uzyskanymi przez zastosowanie proponowanych procedur numerycznych
- dyskusja zbieżności z wynikami otrzymanymi na podstawie formuł proponowanymi przez innych autorów

#### 2. układy z wewnętrznymi oddziaływaniami orientującymi

- sformułowanie algorytmu w celu dokładnego obliczenia numerycznego funkcji Langevino-podobnej

- dyskusja zbieżności wyników obliczeń z wynikami otrzymanymi przybliżoną metodą Bazanta i Oh oraz innych autorów

(\*\*) Teoria funkcji statystycznych  $F_n$  występujących w modelach GW i GT w opisie efektów nieliniowych dla sprężystych oddziaływań powierzchni chropowatych

- sformułowanie dokładnych wzorów na funkcje statystyczne  $F_n$  występujące w modelach GW i GT determinujących siłę nacisku
- porównanie rozbieżności wyników obliczeń z przybliżonymi wynikami otrzymanymi w modelu GT w zakresie występowania efektów nieliniowych.

(\*\*\*) Wyprowadzenie nowych algorytmów aproksymacyjnego z ich zastosowaniem do omawianych zagadnień fizycznych

## 5. Omówienie pozostałych osiągnięć naukowych - badawczych

Pozostałe wybrane osiągnięcia [B1-B8] dotyczą: badania właściwości Padé i N-point Padé aproksymacji [B1-B3], badania własności tribologicznych polimerów [B4] oraz modelowania procesów tribologicznych w zakresie nieliniowych oddziaływań sprężystych [B5-B8]. Wszystkie wymienione prace są dostępne w portalu ResearchGate w moim profilu<sup>44</sup>.

[B1]. **Jedynak R.**, Gilewicz J.. Distributions of zeros and poles of N-point Padé approximants to complex-symmetric functions defined at complex points, Ukrainian Mathematical Journal. 2019, (w druku), ISSN:1573-9376

[B2]. **Jedynak R.**, Gilewicz J. (2013). Computation of the c-table related to the Padé approximation, Journal of Applied Mathematics, vol. 2013, Article ID 185648, 10 pages <http://dx.doi.org/10.1155/2013/185648>, ISSN:1110-757X

[B3]. Gilewicz J., **Jedynak R.** (2010). Compatibility of Continued Fraction Convergents with Padé Approximants, Approximation and Computation – In Honor of Gradimir V. Milovanovic (W. Gautschi, G. Mastroianni, Th. M. Rassias, eds.) Springer Optimization and its Application 42, Springer Verlag, pp. 135-144 ISBN: 978-1-4419-6593-6

[B4]. Sułek W., **Jedynak R.** (2018). The effect of the formation of polymer /surfactant complexes on selected tribological properties of their aqueous solutions, Tribologia, nr 4, ISSN 0208-7774, 117-122

[B5]. **Jedynak R.** (2009): Computer modelling of the elastic impact of rigid spherical particle against a plane with the regard of the friction, MITECH 2009, Prague, Czech Republic, 25-26.06. 2009, 102-107, ISBN 978-80-213-1931-8

[B6]. **Jedynak R.** (2009): Some aspects of computer modelling of mechanical behaviour of rigid spherical particle against a plane. [W:] Machine modeling and simulations Red. Naukowa S. Medvecký, M. Saga, M. Zmindak, Scientific and Technical Society at the University of Zilina, Zilina 2009, 61-68,

[B7]. **Jedynak R.** (2009). Some aspects of computer modeling of the tribology processes. [W:] Modeling and Simulations in Machine Design. Red. Naukowa M. Dudziak, G. Domek, Department

<sup>44</sup> [https://www.researchgate.net/profile/Radoslaw\\_Jedynak](https://www.researchgate.net/profile/Radoslaw_Jedynak)



of Dynamics and Machine Design Kazimierz Wielki University, Bydgoszcz, 277-287, ISBN 83-922233-5-7

[B8]. **Jedynak R.** (2008). Komputerowe modelowanie kontaktu pomiędzy chropowatymi powierzchniami, *Tribologia: teoria i praktyka*, 2008, nr 5, ISSN 0208-7774, 55-72

### **Badanie właściwości Padé i N-point Padé aproksymacji**

Cykl 3 publikacji [B1-B3] odnosi się do badania wybranych właściwości przybliżeń Padé i NPA. Stanowi on uzupełnienie matematyczne prac wykazanych do jednotematycznego cyklu [A1-A11]

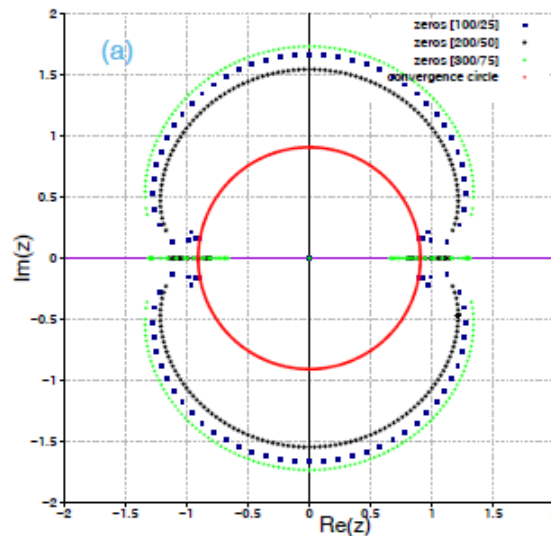
Artykuł [B1] poświęcony jest badaniu zagadnień związanych z rozkładem zer i biegunów aproksymacji Padé i wielopunktowych przybliżeń Padé funkcji typu „complex-symmetric” reprezentowanych w szczególności przez całki Stieltjesa, w dziedzinie liczb zespolonych (87)

$$f(z) = \int_0^{1/R} \frac{d\mu(t)}{1-zt} \quad (87)$$

Podstawową funkcją typu Stieltjesa, wybraną do badań numerycznych jest  $f(z) = -\frac{\ln(1-z)}{z}$ .

Przybliżenia Padé takich funkcji w punkcie  $z = 0$  mają ciekawą właściwość: ich bieguny i zera leżą na cięciu  $(R, +\infty)$  i wzajemnie przeplatają się. W artykule, badane są bardziej skomplikowane sytuacje, a mianowicie rozwinięcia dla  $z \neq 0$ , a także dwupunktowe i wielopunktowe aproksymacje Padé. Uzyskano szereg nowych interesujących wyników, podano liczne ilustracje graficzne.

W pracy odniosłem się także do odwrotnej funkcji Langevina, która jest rozpatrywana w cyklu publikacji [A1-A11]. Badania numeryczne wykazały, że należy do grupy „complex-symmetric”, to znaczy posiada właściwość  $f(\bar{z}) = \bar{f}(z)$ . Rysunek 19 przedstawia rozkład zer trzech aproksymacji Padé typu  $[4n/n]$  dla  $n=\{25, 50, 75\}$ . Zaznaczone koło prezentuje koło zbieżności rozwinięcia w szereg Taylora odwrotnej funkcji Langevina w dziedzinie liczb zespolonych. Szczegółowe obliczenia w dziedzinie liczb rzeczywistych zawarłem w pracy [A5]. Można zauważyć, że obliczone zera zbliżają się do tego koła. Badanie położenia zer aproksymacji Padé jest bardzo skuteczną i sprawdzoną metodą służącą do określenia promienia zbieżności badanej funkcji.



Rys.19. Rozkład zer aproksymacji Padé dla odwrotnej funkcji Langevina w dziedzinie liczb zespolonych

Praca [B2] wiąże się bezpośrednio z tematyką wyznaczania „best PA” omawianą w [A11], przy okazji znalezienia najlepszego przybliżenia funkcji tribologicznej  $F_{5/2}$ . Dla rozwiązania tego problemu zastosowałem dwa następujące algorytmy: metodę  $\rho$  (ang.  $\rho$ -method) i metodę dolin w c-tabeli, obie oparte na analizie współczynników rozwinięcia w szereg Taylora rozważanej funkcji. W pracy [B2] skupiłem się na wyprowadzeniu kilku efektywnych algorytmów rekurencyjnych do wyznaczania elementów c-table.

W pracy [B3] pokazałem związek przybliżeń Padé z ułamiłkami łańcuchowymi. Rozpatrzyłem modyfikację o jeden stopień ułamiłków łańcuchowych i zbadałem relacje między reduktami i przybliżeniami Padé stowarzyszonymi z tymi szeregami potęgowymi.

### Badanie własności tribologicznych polimerów

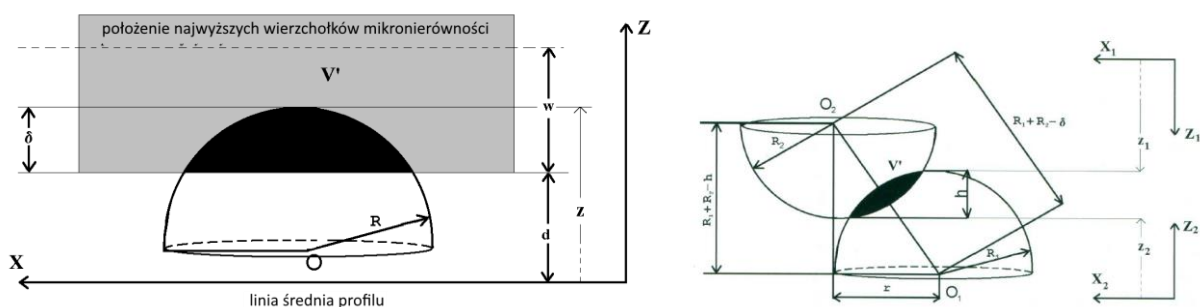
W pracy [B4] zająłem się zastosowaniem polimerów liotropowych jako dodatków mogących modyfikować właściwości tribologiczne substancji smarowych na bazie wody. Jako modelową substancję smarową zaproponowałem wodne roztwory alkilosiarczanu sodu (surfaktant) i poliwinylpiperolidonu (polimer), których właściwości fizykochemiczne, w tym zdolność do kompleksowania, zostały szeroko opisane w literaturze. Przeprowadzone badania na aparacie czterokulowym (Tester T-02) pokazały nieoczekiwane duże obniżenie oporów ruchu i zużycia oraz wzrost właściwości przeciwzatarciowych w odniesieniu do wody jako bazy. Niespodziewanie wysoka efektywność stosowanych dodatków wytłumaczyłem jako konsekwencją tworzenia

kompleksów surfaktanta z polimerem. Addukty te adsorbują na granicy faz, a w warunkach tarcia tworzą film smarny zdolny do przenoszenia wysokich obciążeń. Uzyskane wyniki są na tyle obiecujące, że roztwory o zoptymalizowanym składzie mogą znaleźć zastosowanie praktyczne.

### Modelowanie procesów tribologicznych w zakresie nieliniowych oddziaływań sprężystych

Prace [A1, A4, A9, A11] odnoszą się do aproksymacji funkcji tribologicznych  $F_n$ . Poniżej omówię kilka wybranych publikacji [B5-B8] związanych z modelowaniem procesów tribologicznych w zakresie nieliniowych oddziaływań sprężystych. Prace [B7] i [B8] rozszerzają model GW, dyskutowany w [A1], o kolejny nowy wzór.

Praca [B8] jest bezpośrednio związana z modelem GW. Wykorzystując geometryczne oraz statystyczne podejście zaproponowane w tym modelu wyprowadziłem nowy wzór, który opisuje wielkość odkształcenia objętościowego mikronierówności w funkcji wzajemnego zbliżenia chropowatej powierzchni z płaską w ustalonej chwili czasu (rys. 20a). Następnie korzystając z wyprowadzonego wcześniej przeze mnie modelu przestrzennego, podałem formułę opisującą wielkość odkształcenia objętościowego mikronierówności w funkcji wzajemnego zbliżenia dwóch chropowatych powierzchni w ustalonej chwili czasu (rys. 20b). Przeprowadzone wyniki symulacji komputerowej dla kontaktu między sztywną, gładką powierzchnią i chropowatą powierzchnią oraz między dwoma chropowatymi powierzchniami pokazały, że otrzymane zależności mają nieliniowy charakter i zależą silnie od typu rozkładu wysokości mikronierówności pokrywających rozpatrywane powierzchnie.

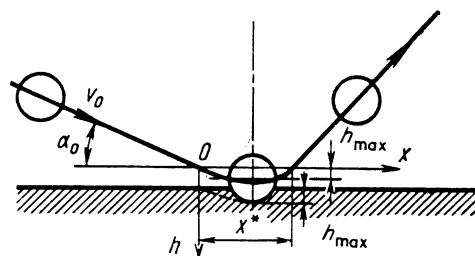


Rys.20. Konfiguracja geometryczna kontaktu a) mikronierówność płaszczyzna (model GW), b) dwóch mikronierówności powierzchni chropowatych

W pracy [B7] kontynuowałem badania zaprezentowane w [B8]. Przedstawiłem wyniki badań profilometrycznych powierzchni próbek pokrytych galwanicznie powłokami Zn i Ni. Udowodniłem, stosując metody statystyczne (test zgodności  $\lambda$  Kołmogorowa), że rozkłady

wysokości tarczy pokrytej Ni można opisać rozkładem Rayleigha, zaś Zn normalnym. Następnie korzystając ze wzorów wyprowadzonych w [B8], opisujących wielkość odkształcenia mikronierówności w funkcji zbliżenia chropowatych powierzchni w ustalonej chwili czasu, przeprowadziłem symulację komputerową. Do obliczeń wykorzystałem dane otrzymane z analizy powierzchni chropowatych. Modelowanie pokazało, że przykładowo wraz ze wzrostem parametru zbliżenia z  $1\mu\text{m}$  do  $2\mu\text{m}$  wielkość deformowanej objętości zwiększa się  $10^4$  razy dla powłoki Zn zaś tylko 10 razy dla powłoki Ni. Tak duża różnica wiąże się bezpośrednio z rodzajem statystyki rozkładu wysokości mikronierówności użytej do symulacji. Wyprowadzone wzory mogą być w dalszej kolejności wykorzystane do modelowania intensywności zużycia tribologicznego.

W artykule [B5] rozważyłem zderzenie sprężyste sztywnej sferycznej cząstki z odkształcalną sprężystą płaszczyzną z uwzględnieniem tarcia pomiędzy cząstką a płaszczyzną (rys. 21). Wyprowadziłem równania matematyczne opisujące takie zderzenie w postaci układu równań różniczkowych drugiego rzędu. Na podstawie ich rozwiązań otrzymałem równanie trajektorii cząstki [B5, wzór (14)]. Tor ruchu cząstki opisany jest za pomocą funkcji hipergeometrycznej (nieelementarnej) i zależy explicite od współczynnika tarcia oraz kąta zderzenia. Otrzymałem także analityczne rozwiązanie na maksymalne zagłębienie cząstki [B5, wzór (7)]. Równania te wykorzystałem następnie do komputerowej symulacji ruchu cząstki. Do obliczeń i prezentacji graficznej wyników użyłem pakiet matematyczny Mathematica. Obliczenia numeryczne wykonałem dla kilku współczynników tarcia przy ustalonych pozostałych parametrach zderzenia oraz różnych kątach zderzeniach i ustalonym współczynniku tarcia. Na podstawie analizy otrzymanych wykresów sformułowałem kilka interesujących wniosków. Otrzymane równania mogą być wykorzystane do analizy zużycia erozyjnego powierzchni i w rezultacie do obliczenia intensywności takiego zużycia.



Rys. 21. Schemat oddziaływania sztywnej sferycznej cząstki z płaszczyzną

Dalsze badania zapoczątkowane w [B5] zostały opublikowane w rozdziale monografii [B6]. Wyprowadziłem równanie opisujące głębokość wniesienia sztywnej kulistej cząstki w funkcji czasu kontaktu. Znalazłem rozwiązanie analityczne dla funkcji odwrotnej, które wyrażone jest za pomocą

funkcji hipergeometrycznej. Wyprowadziłem także równanie różniczkowe opisujące przemieszczenie sztywnej sferycznej cząstki równoległe do płaszczyzny w funkcji czasu kontaktu. To równanie rozwiązałem numerycznie. Na podstawie uzyskanych równań przeprowadziłem symulację komputerową przy użyciu pakietu matematycznego Mathematica. Analizę przeprowadziłem dla 3 różnych prędkości cząstki przy ustalonych pozostałych parametrach kontaktu.

### Podsumowanie

Przedstawione wybrane prace naukowe [B1-B8] uzupełniają tematycznie publikacje wybrane do jednolitego cyklu publikacji. Prace [B1-B3] uzupełniają badania matematyczne nad aproksymacjami PA i NPA, stosowanymi w pracach [A3, A4, A6, A9, A11] i zostały opublikowane w uznanych czasopismach z listy JCR (publikacja [B3] jest rozdziałem monografii indeksowanej przez WoS). W pracy [B1] wskazuję, że odwrotna funkcja Langevina należy do klasy „complex-symmetric”, której właściwości matematyczne w dziedzinie liczb zespolonych szczegółowo dokumentuję (położenie zer i biegunów dla różnych wariantów aproksymacji PA, NPA i punktów rozwinięcia).

Praca [B4] wskazuje na możliwą aplikację polimerów liotropowych jako dodatków do wody poprawiających w istotny sposób jej właściwości tribologiczne jako środka smarowego.

Prace [B5-B8] dokumentują moje wcześniejsze badania nad modelowaniem procesów tribologicznych w zakresie nieliniowej teorii sprężystości opisanej wzorami Hertza. Wyprowadziłem w nich szereg równań różniczkowych, które rozwiązałem na drodze analitycznej, poprzez wprowadzenie funkcji specjalnych. W przypadku niemożności uzyskania formuły analitycznej, zastosowałem także metody numeryczne. Wszystkie otrzymane formuły stanowiły punkt wyjścia do przeprowadzenia symulacji komputerowych i sformowania odpowiednich wniosków. Rozszerzyłem model GW o kolejny wzór, który opisuje wielkość odkształcenia objętościowego mikronierówności w funkcji wzajemnego zbliżenia chropowatej powierzchni z płaską w ustalonej chwili czasu, a także dla kontaktu dwóch chropowatych powierzchni. Rozważania matematyczne prowadzone w pracach [B5-B8] mogą stanowić punkt wyjścia do rozwiązania zagadnienia zużycia tribologicznego, w szczególności erozyjnego [B5-B6].

## 6. Przebieg pracy naukowej

### 6.1. Działalność naukowo-badawcza, dydaktyczna i organizacyjna przed uzyskaniem stopnia doktora nauk technicznych (1988 – 2000)

#### a) Działalność naukowa przed uzyskaniem stopnia doktora

W latach 1996 – 1999 prowadziłem pracę naukowo-badawczą „Symulacja komputerowa procesów tarcia. Weryfikacja eksperymentalna modelu”, nr 1429/12/B. Realizowane w ramach projektu badania dotyczyły dwóch aspektów. Pierwszy odnosił się do teoretycznego modelowania tarcia suchego uwzględniającego statystyczny charakter oddziaływań mikronierówności w obszarze sprężystym oraz plastycznym. Drugi natomiast był związany z doświadczalną weryfikacją modelu. W 1998 roku uczestniczyłem także w pracy naukowo-badawczej „Właściwości tribologiczne związków zdolnych do tworzenia tarciovych warstw powierzchniowych” jako wykonawca. Wyniki badań były prezentowane w postaci 7 wystąpień konferencyjnych oraz publikowane w 7 artykułach (szczegółowy spis w załączniku 4).

Zrealizowane prace badawcze stanowiły część mojej rozprawy doktorskiej nt.: *"Model tarcia zewnętrznego i jego doświadczalna weryfikacja"*, którą obroniłem w dniu 10 lutego 2000 roku na Wydziale Mechanicznym Politechniki Radomskiej. Promotorem rozprawy doktorskiej był prof. dr hab. Marian Włodzimierz Sułek.

Najważniejszym osiągnięciem tego etapu mojej działalności naukowo-badawczej było stworzenie modelu tarcia suchego oraz przeprowadzenie eksperymentu tarcioowego z zastosowaniem różnych materiałów (powłoki galwaniczne, ceramika), w układzie tarcza – trzpień, potwierdzających jego stosowalność.

#### b) Działalność dydaktyczna i organizacyjna przed uzyskaniem stopnia doktora

W ramach moich obowiązków w Centrum Informatyki a następnie Katedrze Informatyki prowadziłem zajęcia dydaktyczne z zakresu informatyki. W zależności od kierunku/specjalności obejmowały one różne aspekty jak podstawy programowania, metody numeryczne w przypadku kierunków technicznych (np. dla Wydziału Mechanicznego, Transportu) oraz miały charakter aplikacyjny np. dla Wydziału Ekonomicznego. Prowadziłem również ćwiczenia z fizyki dla Wydziału Mechanicznego, w przypadku niedoboru godzin do pensum rocznego.

W 1988 roku, przez jeden semestr pracowałem również w VI Liceum Ogólnokształcącym w Radomiu, w którym uczyłem fizyki. Związane to było z zastępstwem nauczyciela przebywającego na urlopie zdrowotnym. Była to moja macierzysta szkoła, którą ukończyłem w 1983r. z wyróżnieniem (świadectwo z paskiem).

W zakresie działalności organizacyjnej, przed uzyskaniem stopnia doktora, pełniłem od 1989 roku obowiązki stałego członka Uczelnianej Komisji Rekrutacyjnej. Głównym moim zadaniem było tworzenie corocznie komputerowego systemu rekrutacyjnego, który zgodnie z przyjętymi zasadami rekrutacyjnymi na dany rok, przetwarzał wszystkie informacje i tworzył odpowiednie listy kandydatów przyjętych na poszczególne kierunki/specjalności WSI/Politechniki Radomskiej. Równocześnie zajmowałem się obsługą tego systemu komputerowego w trakcie prowadzenia postępowania kwalifikacyjnego.

Byłem także członkiem Rady Wydziału Nauczycielskiego w kolejnych dwóch kadencjach w latach 1993-1999.

W tym czasie jako współautor, opracowałem także dwa skrypty uczelniane.

## **6.2. Działalność naukowo-badawcza, dydaktyczna i organizacyjna po uzyskaniu stopnia doktora nauk technicznych (2000 – 2019)**

### **a) Działalność naukowo-badawcza po uzyskaniu doktoratu**

Po uzyskaniu stopnia doktora kontynuowałem pracę naukową w ramach dyscypliny mechanika, skupiając się na zagadnieniach związanych z modelowaniem procesów tarcia oraz zużycia tribologicznego. Znajduje to odzwierciedlenie w prowadzonych pracach badawczo-naukowych: „Opracowanie procedur numerycznych i analitycznych do rozwiązania równań całkowych opisujących tarcie w obszarze zderzeń sprężysto-plastycznych”, „Matematyczny model tarcia” oraz „Matematyczne prognozowanie zużycia tribologicznego”, których wyniki były prezentowane na konferencjach oraz publikowane w czasopismach.

Od 2012 roku podjąłem również badania związane z modelowaniem reologii polimerów. Miało to wyraz w udziale w dwóch pracach badawczych (odpowiednio jako kierownik i wykonawca):

„Wpływ oddziaływań elektromagnetycznych, termotropowych oraz absorpcji na elektryczne i optyczne własności wybranych materiałów” oraz „Przewidywanie własności fizycznych i reologicznych deformowanych układów polimerowo-ciekłokrystalicznych”.

W tym czasie zająłem się także zastosowaniem metod aproksymacyjnych do opisu wybranych formuł matematycznych występujących w omawianych obszarach naukowych.

Prowadzone prace badawcze można umiejscowić w obszarze mechaniki komputerowej. Każdą z nich cechuje intensywne wykorzystanie aparatu matematycznego i informatycznego do rozwiązania postawionego problemu mechanicznego.

### **Udział w konferencjach**

Po obronie pracy doktorskiej uczestniczyłem w 30 konferencjach naukowo-technicznych krajowych i o zasięgu międzynarodowym, na których prezentowałem w formie referatu rezultaty

prowadzonych prac badawczych oraz badań własnych. Poniżej zamieściłem wykaz 16 konferencji tematycznie związanych z omawianymi zagadnieniami w części dorobku naukowego, a mianowicie:

1. **Jedynak R.** (7–10. 09. 2009). *Some aspects of computer modelling of mechanical behaviour of rigid spherical particle against a plane*. XIV Polish-Slovak Conference „Modeling and Simulations in Machine Design”, Horný Vadičov (Słowacja)
2. **Jedynak R.** (25-26.06. 2009). *Computer modelling of the elastic impact of rigid spherical particle against a plane with the regard of the friction*, MITECH 2009, Prague, Czech Republic,
3. **Jedynak R.** (3-5.09.2008). *Some aspects of computer modeling of the tribology processes*. XIII Polish-Slovak Conference „Modeling and Simulations in Machine Design”, Ciechocinek
4. **Jedynak R.** (10-18.09.2007) *Symulacja komputerowa procesów tribologicznych*, XXXVI Konferencja Zastosowań Matematyki, Zakopane
5. **Jedynak R.** (11-19.09.2006). *Aproksymacja metodą najmniejszych kwadratów symulowanej komputerowo zależności chwilowego zużycia objętościowego od nacisku dla różnych powłok galwanicznych*, XXXV Konferencja Zastosowań Matematyki, Zakopane
6. **Jedynak R.** (12-20.09.2005). *Symulacja komputerowa wielkości odkształcenia plastycznego chropowatych powierzchni*, XXXIV Konferencja Zastosowań Matematyki, Zakopane
7. Sułek W., **Jedynak R.** (22-24.09.2004): *Wpływ oddziaływań plastycznych mikronierówności na opory ruchu przy tarciu suchym*, XXVII Jesienna Szkoła Tribologiczna, Stare Jabłonki
8. **Jedynak R.** (15-23.09.2003). *Symulacja komputerowa kontaktu twardej cząstki z odkształcalną sprężystą płaszczyzną*, XXXII Konferencja Zastosowań Matematyki, Zakopane
9. Sułek W., **Jedynak R.** (25-28.08.2002): *Frictional forming of electroplated copper and zinc coatings*, SITC (Second International Tribology Conference), Zielona Góra
10. **Jedynak R.** (16-24.09.2002). *Ocena rozkładu wysokości mikronierówności dla różnych powłok galwanicznych*, XXXI Konferencja Zastosowań Matematyki, Zakopane
11. Sułek W., **Jedynak R.** (23-26.09.2002): *Wpływ powłok galwanicznych niklu i chromu na opory ruchu*, XXV Jesienna Szkoła Tribologiczna, Łądek Zdrój
12. Sułek W., **Jedynak R.** (14-15.11.2002): *The Effect Of Electroplated Copper And Zinc Coatings On Friction Conditions*, 11th International Baltic Conference MATERIALS ENGINEERING & TRIBOLOGY- 2002, Kaunas, Litwa
13. **Jedynak R.**, Sułek M. W. (25-28.09.2001): *Analiza oddziaływań plastycznych w układzie stal - ceramika*, Kongres Eksploatacji Urządzeń Technicznych, Krynica Górská.
14. Sułek W., **Jedynak R.** (11-14.09.2000): *Właściwości tribologiczne powłok galwanicznych srebra*, XXIV Jesienna Szkoła Tribologiczna, Krynica Górská
15. Sułek W., **Jedynak R.** (11-14.09.2000): *Analiza oddziaływań plastycznych w układzie stal - ceramika*, XXIV Jesienna Szkoła Tribologiczna, Krynica Górská
16. Sułek M. W., **Jedynak R.** (17-19.05.2000): *Моделирование сухого трения для узла диск – стержень*, Международная научно-техническая конференция ИИМ-2000, Chmielnicki Uniwersytet Techniczny Podola, Ukraina



Opracowałem również prezentacje do wystąpień w 3 prestiżowych konferencjach zagranicznych, w których zaproszonym gościem był mój współautor prof. J. Gilewicz:

1. Gilewicz J., **Jedynak R.** (25-29.08.2008): *Compatibility of Continued Fraction Convergents with Padé Approximants*, Approximation & Computation, Niš, Serbia
2. Gilewicz J., **Jedynak R.** (10-14.10.2011): *Approximation of Smooth Functions by Weighted Means of N-Point Padé Approximants*, International Conference on Scientific Computing S. Margherita di Pula, Sardinia, Italy
3. Gilewicz J., **Jedynak R.** (8-13.09.2015): *Mysterious, highly efficient approximation of smooth functions*, Mathematical Analysis, Differential Equations and their Applications, Baku-Azerbaijan

Pozostałe 14 konferencji wymienionych w załączniku 4 dotyczą aspektów związanych z wybranymi zagadnieniami matematycznymi oraz informatycznymi, z którymi spotkałem się podczas rozwiązywania problemów omówionych we wcześniejszych cyklach publikacyjnych. Ponieważ część moich obliczeń numerycznych wymagała sporych mocy obliczeniowych musiałem rozwiązać ten problem techniczny poprzez zainteresowanie się obliczeniami równoległymi i ich zastosowaniem w odpowiednio konstruowanych przeze mnie klastrach z posiadanych komputerów w laboratorium. Wiązało się to także z rozwiązaniem problemu ich zdalnego zarządzania. Cykl artykułów i wystąpień konferencyjnych poświęconych tej tematyce cieszy się szczególnym zainteresowaniem w portalach społecznościowych (ResearchGate, Academia). Podałem szereg praktycznych rozwiązań co znalazło swój oddźwięk między innymi w cytowaniu wybranych prac w bazie WoS<sup>45,46</sup> Część z wystąpień konferencyjnych dotyczyła także rozwiązywania wybranych problemów numerycznych (równania różniczkowe, układy równań liniowych), testowania hipotez statystycznych i innych.

## **b) Działalność dydaktyczna prowadzona po uzyskaniu stopnia doktora nauk technicznych (2000 – 2019)**

W trakcie mojej pracy zawodowej prowadziłem bardzo bogatą działalność dydaktyczną, której wyrazem jest między innymi różnorodność prowadzonych przedmiotów, ilość wypromowanych dyplomantów, wielorakość tematów prac dyplomowych, opracowane materiały e-learningowe jak i skrypty. Moja działalność dydaktyczna spotkała się z wysoką oceną studentów jak i władz uczelni. Poniżej charakteryzuję ją w układzie chronologicznym

---

<sup>45</sup> Rampazzo, M. , Cervato, A. and Beghi, A., 2017. Remote refrigeration system experiments for control engineering education. *Comput Appl Eng Educ*, 25: 430-440. doi:10.1002/cae.21810

<sup>46</sup> Alessandro Beghi, Andrea Cervato, Mirco Rampazzo, 2015. A Remote Refrigeration Laboratory for Control Engineering Education, *IFAC-Papers OnLine*, Volume 48, Issue 29, Pages 25-30,

Realizowana przeze mnie działalność dydaktyczna jest bezpośrednio powiązana z obszarem moich zainteresowań naukowych, a mianowicie metodami informatycznymi i matematycznymi (analiza numeryczna) oraz ich aplikacją w mechanice. Rozprawa doktorska, obejmująca część teoretyczną oraz doświadczalną wymagała w pierwszej części zastosowania wymienionych metod. Opracowany model matematyczny tarcia zewnętrznego można było rozwiązać tylko na drodze numerycznej co wymagało napisania zaawansowanych programów komputerowych.

Zajęcia dydaktyczne dla studentów prowadzę od 1988 r. Do 2000 roku jako asystent prowadziłem tylko ćwiczenia i laboratoria związane głównie z informatyką, natomiast od podjęcia zatrudnienia na stanowisku adiunkta w 2000 r. doszły wykłady i seminaria dyplomowe. W okresie mojej pracy zawodowej prowadziłem szereg przedmiotów z grupy informatycznej oraz fizyki. Z najważniejszych mogę wymienić:

- a) *Studia I stopnia (licencjackie) kierunku Matematyka* (wykłady i laboratoria): Wstęp do programowania i analizy algorytmów dla matematyków, Podstawy MathML, Informatyka i matematyka obliczeniowa, Podstawy użytkowania baz danych dla matematyków, Wstęp do programowania i algorytmizacji, Wstęp do programowania strukturalnego dla matematyków
- b) *Studia II stopnia kierunku Matematyka* (wykłady i laboratoria): Aplikacje matematyczne,
- c) *Studia I stopnia (inżynierskie) kierunku Informatyka*: Metody numeryczne, Podstawy programowania, Sztuczna inteligencja, Architektura systemów komputerowych, Programowanie niskopoziomowe, Aplikacje sieciowe, Grafika komputerowa, Inżynieria oprogramowania
- d) *Studia I stopnia (inżynierskie) kierunku Informatyka w WSH Radom* (wykłady i laboratoria): Fizyka, Metody numeryczne, Sieci komputerowe, Seminarium dyplomowe, Sztuczna inteligencja
- e) *Studia podyplomowe kierunku Informatyka* (wykłady i laboratoria): Propedeutyka informatyki, Wprowadzenie do systemów operacyjnych, Edytor tekstu, Arkusz kalkulacyjny, Grafika prezentacyjna, Edytor graficzny, Bazy danych, Programy edukacyjne, Sieci komputerowe z elementami projektowania stron WWW, Technologia informacyjna
- f) *Studia podyplomowe kierunku Matematyka* (wykłady i laboratoria): Informatyka

Za wzorową działalność dydaktyczną zostałem wyróżniony w 2003 roku Medalem Komisji Edukacji Narodowej.

Zajęcia dydaktyczne prowadzone przeze mnie uzyskały wysokie oceny studentów, co potwierdzają wyniki badań ankietowych prowadzonych w ostatnich latach na wydziale w ramach badania jakości kształcenia.

Od początku lat 2000, wraz z upowszechnieniem się dostępu do Internetu, starałem się popularyzować naukę poprzez udostępnianie wszystkich materiałów dydaktycznych w postaci kursów e-learningowych. Możliwości wykorzystania Internetu na rzecz dydaktyki, stały się moim dodatkowym zainteresowaniem. Efektem tego było napisanie podręcznika akademickiego dla studentów, opublikowanie szeregu artykułów poświęconych różnym nowoczesnym technologiom internetowym a także wypromowanie kilkunastu dyplomantów.

### **c) Działalność organizacyjna prowadzona po uzyskaniu stopnia doktora nauk technicznych (2000 – 2019)**

W trakcie mojej pracy zawodowej prowadziłem także bardzo aktywną działalność organizacyjną, która obejmowała wiele płaszczyzn, między innymi opracowywanie programów kształcenia, kierowanie studiami podyplomowymi i nadzorowanie procesu dydaktycznego, funkcje kierownicze wydziałowe i uczelniane. Poniżej charakteryzuje je w układzie chronologicznym.

Jestem współautorem programów kilku kierunków studiów podyplomowych stanowiących ofertę dydaktyczną Studium Doksztalcania i Doskonalenia działającego przy Wydziale Nauczycielskim Politechniki Radomskiej i prowadzonych w latach 2000-2012: Informatyka, Matematyka, Matematyka z Informatyką. Tworzyłem również programy dla studiów podyplomowych Informatyka w Biznesie oraz Administrator sieci komputerowych prowadzonych przez Wyższą Szkołę Handlową w Radomiu. Jestem autorem większości programów nauczania z zakresu zastosowania informatyki na kierunku Matematyka (UTH).

W latach 2000-2002 byłem **Przewodniczącym Regionalnego Konkursu Informatycznego** Politechniki Radomskiej dla uczniów szkół ponadgimnazjalnych okręgu radomskiego. Celem konkursu było rozwijanie wiedzy informatycznej młodzieży i promowanie młodych talentów w dziedzinie informatyki.

W latach 2001-2005 sprawowałem funkcję **Sekretarza naukowo-organizacyjnego studiów podyplomowych** w zakresie Informatyki wchodzących w skład Studium Doksztalcania i Doskonalenia w Wydziale Nauczycielskim. Głównym zadaniem było opracowanie projektów programów studiów i planów nauczania, przeprowadzenie rekrutacji, odpowiedzialność za przebieg procesu dydaktycznego oraz prowadzenie dokumentacji kształcenia, promowanie studiów wśród nauczycieli naszego regionu w postaci różnych akcji informacyjnych.

W latach 2002-2007 byłem **Pełnomocnikiem Rektora ds. rekrutacji**. Funkcja ta wiązała się z zaangażowaniem w działalność organizacyjną i dydaktyczną uczelni. Obejmowała między innymi: przygotowywanie projektów uchwał, zarządzeń i decyzji związanych z rekrutacją na studia, organizowanie pracy Uczelnianej Komisji Rekrutacyjnej i jej sekretariatu, opracowywanie zasad pracy Wydziałowych Komisji Rekrutacyjnych i koordynację ich działania, w tym akcji „Drzwi Otwarte”, prowadzenie ogólnouczelnianej akcji promocyjnej i informacyjnej dla kandydatów na studia, organizowanie postępowania kwalifikacyjnego dla kandydatów na studia, w tym przygotowania tematów sprawdzianów, prowadzenie sprawozdawczości związanej z rekrutacją, współpracę z Senacką Komisją ds. Dydaktyki i Wychowania. W ramach tej działalności opracowałem nową formułę informatora uczelnianego, który ukazał się w 4 kolejnych latach 2004-

2007, a także zbioru zadań dla kandydatów w 2004. W uznaniu mojego ogromnego zaangażowania otrzymałem w 2008 roku nagrodę indywidualną Rektora Politechniki Radomskiej III stopnia.

W latach 2005-2012 sprawowałem funkcję **dyrektora Studium Doksztalcania i Doskonalenia**. W tym czasie podejmowałem starania aby poszerzyć ofertę dydaktyczną o nowe kierunki studiów podyplomowych i kursy kształcące dla studentów. Wiązało się to także z opracowywaniem licznych materiałów informacyjnych i reklamowych dla mediów lokalnych (prasa, telewizja, radio) jak i krajowych (Perspektywy, Telbit, Forum Akademickie, i inne wydawnictwa). Dzięki mojemu zaangażowaniu udało się wygrać przetarg na organizację i wykonanie projektu unijnego przez SDiD realizowanego dla Powiatu Bełchatowskiego w ramach Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki, Działanie 9.4 - „Wysoko wykwalifikowane kadry systemu oświaty”. Projekt był zatytułowany „Nowe kwalifikacje szansą na stabilizację- studia podyplomowe i kursy kwalifikacyjne dla nauczycieli z terenu Powiatu Bełchatowskiego”.

Pełniłem funkcję **Prodziekana ds. nauki, studiów niestacjonarnych i spraw ogólnych** Wydziału Informatyki i Matematyki Politechniki Radomskiej (2012-2013). Funkcja ta przypadła mi w momencie reorganizacji Wydziału Nauczycielskiego w 2012 roku. Z macierzystego wydziału wyłoniło się kilka mniejszych w tym Wydział Informatyki i Matematyki. Jednym z najważniejszych zadań jakie musiałem zrealizować było utworzenie misji i regulaminu nowego wydziału.

W mojej działalności organizacyjnej na poziomie uczelni pełniłem także następujące funkcje: **członek Senatu** Politechniki Radomskiej ( dwukrotny wybór: 2002-2005, 2005-2008), **członek Stałej Komisji Senackiej ds. Dydaktyki i Wychowania** Politechniki Radomskiej (2005-2008), **członek Stałej Komisji Senackiej ds. Badań Naukowych i Rozwoju Kadry** Uniwersytetu Technologiczno-Humanistycznego (2012-2016)

Jako **kierownik Laboratorium Komputerowego Zastosowań Matematyki** (od 2000 do chwili obecnej) jestem odpowiedzialny za prawidłowe jego funkcjonowanie. W uznaniu wkładu w rozwój laboratorium dydaktycznego otrzymałem w 2002 roku nagrodę indywidualną Rektora Politechniki Radomskiej trzeciego stopnia. W roku akademickim 2006/2007, w związku z przeniesieniem laboratorium do nowego budynku, kierowałem ekipą remontową, której zadaniem było utworzenie nowego laboratorium dydaktycznego. Należało z trzech niezależnych małych pomieszczeń biurowych zbudować jedno duże osieciowane laboratorium komputerowe. Po wykonanej przebudowie, zgodnie z moim planem, nowe laboratorium posiada 24 stanowiska komputerowe dla studentów i jedno dla wykładowcy. Studenci pracują w laboratorium w ramach wydzielonej lokalnej sieci komputerowej. Sprawną pracę zapewnia opracowany przeze mnie i wdrożony wyspecjalizowany serwer komputerowy.

### 6.3 Uczestnictwo w programach europejskich oraz innych programach międzynarodowych i krajowych

Czynnie uczestniczyłem w programie ERASMUS, w ramach którego odbyłem cztery tygodniowe wizyty z serią wykładów w języku angielskim dla studentów następujących uczelni:

1. **Słowacja, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika.** Wygłosiłem wykłady dla studentów oraz doktorantów wydziału przyrodniczego nt. projektowania stron internetowych zawierających treści matematyczne z wykorzystaniem MathML. Wyjazd finansowany przez fundusz UE, 10.5.-16.5.2009.
2. **Słowacja, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika.** Wygłosiłem wykłady dla studentów oraz doktorantów wydziału przyrodniczego nt. wykorzystania „recovery cards” do zarządzania laboratorium komputerowym. Wyjazd finansowany przez fundusz UE, 9.5.-15.5.2010.
3. **Słowacja, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika.** Wygłosiłem wykłady dla studentów oraz doktorantów wydziału przyrodniczego nt. jak wykorzystać oprogramowanie matematyczne Mathematica do prowadzenia wydajnych obliczeń równoległych. Wyjazd finansowany przez fundusz UE, 8.5.-14.5.2011.
4. **Słowacja, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika.** Wygłosiłem wykłady dla studentów oraz doktorantów wydziału przyrodniczego nt. wirtualnych klastrów obliczeniowych. Wyjazd finansowany przez fundusz UE, 12.5.-18.5.2013.

Brałem także udział w dwóch innych programach finansowanych ze źródeł UE:

5. Program Operacyjny Kapitał Ludzki, **Działanie 9.4 - „Wysoko wykwalifikowane kadry systemu oświaty”.** Projekt był zatytułowany „**Nowe kwalifikacje szansą na stabilizację studia podyplomowe i kursy kwalifikacyjne dla nauczycieli z terenu Powiatu Belchatowskiego**”. Projekt zakładał wyposażenie 80 nauczycieli mieszkających na terenie powiatu w kwalifikacje do nauczania dodatkowego przedmiotu. Jako dyrektor, Studium Doksztalcania i Doskonalenia w Wydziale Nauczycielskim Politechniki Radomskiej, byłem odpowiedzialny za zorganizowanie i przeprowadzenie studiów podyplomowych w zakresie informatyki. Zajęcia odbywały się w Belchatowie w formie spotkań sobotnio-niedzielnych co dwa tygodnie od września 2010 do grudnia 2011 r. i zakończyły się wręczeniem świadectw ukończenia studiów podyplomowych.
6. Program Operacyjny Kapitał Ludzki, **Działanie 4.1.2 „Zwiększenie liczby absolwentów kierunków o kluczowym znaczeniu dla gospodarki opartej na wiedzy”** Program dotyczył tzw. „kierunku zamawianego” na kierunku Matematyka, WiM UTH. Projekt nosił nazwę

„**Matematyka - logiczny wybór na przyszłość**” i był realizowany w latach 2012-2015. W ramach projektu opracowałem program nauczania i prowadziłem specjalistyczne zajęcia dodatkowe: Warsztaty - kurs programu TeX, które przygotowały uczestników do napisania prac dyplomowych z wykorzystaniem tego narzędzia.

#### 6.4 Udział w komitetach organizacyjnych międzynarodowych i krajowych konferencji naukowych

Brałem udział w przygotowaniu i prowadzeniu międzynarodowej konferencji naukowej:

- DIDINFO, Bańska Bystrzyca (Słowacja), 2011

#### 6.5 Członkostwo w międzynarodowych i krajowych organizacjach oraz towarzystwach naukowych

- Współpraca z Mathematical Reviews będącego działem **Amerykańskiego Towarzystwa Matematycznego** (AMS) w ramach pisania opinii o opublikowanych artykułach (umowa podpisana w 2019 roku)
- Członek Wolfram Faculty Program - towarzystwo naukowe, która zrzesza nauczycieli wykorzystujących aktywnie w nauczaniu program komputerowy Mathematica (producent Wolfram Research) (począwszy od 2010 roku)

#### 6.6 Osiągnięcia dydaktyczne i w zakresie popularyzacji nauki lub sztuki

**Do moich osiągnięć dydaktycznych mogę zaliczyć:**

1. Autorstwo i współautorstwo dwóch podręczników akademickich:
  - a) **Jedynak R.** (2008). *Technologie internetowe dla matematyków*, Wyd. Naukowe Politechniki Radomskiej, Radom, ISBN 978-83-7351-420-1, 202 strony
  - b) Rutkowski A., **Jedynak R.**, Bielawski W. (2004). *Matematyka, historia, języki obce: pytania i odpowiedzi na egzaminach wstępnych na studia dzienne*, Radom, Politechnika Radomska, 157 stron
2. Opracowanie czterech informatorów uczelnianych (w latach 2003-2006), według całkowicie nowej formuły sporządzonej przeze mnie, promującej studia na Politechnice Radomskiej oraz ukazującej życie studenckie.
3. Stworzenie i opracowanie laboratoriów dydaktycznych:
  - a) Zastosowań Matematyki (UTH Radom)
  - b) Sieci komputerowych (WSH Radom)

4. Opracowanie dwóch zagadnień, popularyzujących moje osiągnięcia naukowe, do wersji angielskiej Wikipedii
5. Uczestniczenie w zadaniach o charakterze naukowo - informacyjnym związanych z promocją całej uczelni (jako Pełnomocnik Rektora ds. rekrutacji) oraz Wydziału Informatyki i Matematyki (jako Prodziekan ds. naukowych) na Uczelni oraz poza: spotkania otwarte, targi edukacyjne, pikniki naukowe, wieczór nauki i inne.

### 6.7 Opieka naukowa nad studentami

Jestem promotorem 162 prac dyplomowych (76 inżynierskich, 51 licencjackich i 35 magisterskich) i recenzentem około 150.

### 6.8 Staże w zagranicznych ośrodkach akademickich

1. **Słowacja, Uniwersytet Pavla Jozefa Šafárika, Koszyce.** Wygłosiłem wykłady dla studentów oraz doktorantów wydziału przyrodniczego nt. projektowania stron internetowych zawierających treści matematyczne z wykorzystaniem MathML. Wyjazd finansowany przez fundusz UE, 7 dni, maj 2009.
2. **Słowacja, Uniwersytet Pavla Jozefa Šafárika, Koszyce.** Wygłosiłem wykłady dla studentów oraz doktorantów wydziału przyrodniczego nt. wykorzystania „recovery cards” do zarządzania laboratorium komputerowym. Wyjazd finansowany przez fundusz UE, 7 dni, maj 2010.
3. **Słowacja, Uniwersytet Pavla Jozefa Šafárika, Koszyce.** Wygłosiłem wykłady dla studentów oraz doktorantów wydziału przyrodniczego nt. jak wykorzystać oprogramowanie matematyczne Mathematica do prowadzenia wydajnych obliczeń równoległych. Wyjazd finansowany przez fundusz UE, 7 dni, maj 2011.
4. **Słowacja, Uniwersytet Pavla Jozefa Šafárika, Koszyce.** Wygłosiłem wykłady dla studentów oraz doktorantów wydziału przyrodniczego nt. wirtualnych klastrów obliczeniowych. Wyjazd finansowany przez fundusz UE, 7 dni, maj 2013.

Odbyte staże [1-4] pozwoliły na rozwinięcie międzynarodowej współpracy naukowo-dydaktycznej z Uniwersytetem UPJS. Ich konsekwencją było między innymi opublikowanie 3 prac w czasopiśmie MIF (Mathematics Informatics Physics) wydawanym przez Uniwersytet Pavla Jozefa Šafárika (Koszyce). Każda z prac posiadała długi wstęp (streszczenie najważniejszych aspektów), napisany po słowacku, przez prof. L. Snajdera z Koszyc. Taka forma

miała służyć popularyzacji moich artykułów napisanych w języku angielskim wśród słowackich nauczycieli.

Dzięki tej współpracy zostałem także organizatorem międzynarodowej konferencji DidInfo 2011, organizowanej przez UPJS i Uniwersytet Mateja Beja w Banskej Bystrzycy. Na konferencji tej miałem referat zamawiany inauguracyjny jej rozpoczęcie. W ramach tej współpracy, w latach 2009-2014, gościłem kilkakrotnie na UTH w Radomiu prof. L. Snajdera i prof. G. Andrejkovą. W trakcie tych pobytów zorganizowałem seminaria, w których goście mogli podzielić się swoimi doświadczeniami dydaktycznymi oraz naukowymi.

5. **Słowacja, Uniwersytet Konstantyna Filozofa, Nitra.** Wizyta na zaproszenie uniwersytetu w ramach współpracy naukowej. Głównym celem było uczestniczenie w wykładzie habilitacyjnym pracownika mojego wydziału (byłem wówczas Prodziekanem) w obecności Rady Naukowej. Podczas pobytu miałem dodatkowo możliwość szczegółowego poznania bazy dydaktyczno-badawczej Wydziału Pedagogicznego a także prowadziłem rozmowy na temat możliwości dalszego rozszerzenia współpracy. Wyjazd finansowany przez UTH, 3 dni, lipiec 2012.

#### 6.9 Wykonane ekspertyzy, udział w zespołach eksperckich i konkursowych

- Na prośbę dr S. Uddina (pracującego na stanowisku profesora wizytującego w Georgia Southern University, USA) napisałem opinię o jego pracy naukowej (pismo z lipca 2018). Wykonana ekspertyza dotyczyła 7 projektów badawczych, których główne osiągnięcia były publikowane w wysoko notowanych czasopismach oraz prezentowane na konferencjach z zakresu dyscypliny inżynieria mechaniczna. Obejmują one między innymi zagadnienia modelowania polimerów i elastomerów Opracowanie to jest związane z obowiązującą procedurą formalną w USA („Petition for the United States Permanent Residency”) dla osób starających się o stałą pracę naukowo-badawczą.
- W okresie maj - czerwiec 2011 pracowałem w zespole opiniującym regionalny **projekt Foresight dla szkół wyższych Warszawy i Mazowsza "Akademickie Mazowsze 2030"**. Projekt realizowany był przez konsorcjum uczelni **Politechnika Warszawska (Lider Projektu)**, Szkoła Główna Gospodarstwa Wiejskiego w Warszawie, Uniwersytet Kardynała Stefana Wyszyńskiego w Warszawie, Polsko-Japońska Wyższa Szkoła Technik Komputerowych, Szkoła Główna Handlowa w Warszawie i Akademia Leona Koźmińskiego przy współdziałaniu przedstawicieli administracji centralnej i samorządowej, przedsiębiorców oraz organizacji pozarządowych i osób publicznych. Celem badania było wypracowanie możliwych kierunków



rozwoju szkolnictwa wyższego w Warszawie i na Mazowszu w perspektywie najbliższych 20 lat.

- Pełniąc funkcję Pełnomocnika Rektora ds. rekrutacji brałem trzykrotnie udział w naradach organizowanych przez MENiS w roli eksperta.
- 1. Trzydniowa **narada organizowana przez MENiS i AWF J. Piłsudskiego** w Warszawie oddział w Białej Podlaskiej w maju 2006 w celu rozwiązywania najbardziej palących problemów kształcenia w szkołach wyższych. Narada miała umożliwić wymianę doświadczeń oraz poszukiwanie nowych rozwiązań podejmowanych problemów.
- 2. Jednodniowa **narada organizowana przez MENiS i UKSW** w kwietniu 2004 w celu rozwiązywania najistotniejszych problemów związanych z nową maturą 2005 w odniesieniu do rekrutacji studentów na wyższe uczelnie.
- 3. Trzydniowa **narada organizowana przez MENiS i Politechnikę Białostocką** w kwietniu 2003 w celu rozwiązywania najbardziej palących problemów kształcenia w szkołach wyższych. W naradzie brało udział blisko 90 osób z 60 uczelni.
- W latach 2000-2002 byłem przewodniczącym **Regionalnego Konkursu Informatycznego** Politechniki Radomskiej dla uczniów szkół ponadgimnazjalnych okręgu radomskiego. Celem konkursu było rozwijanie wiedzy informatycznej młodzieży i promowanie młodych talentów w dziedzinie informatyki. Był to trzyetapowy konkurs, który kończył się rozwiązaniem finałowych zadań w Katedrze Informatyki. Laureaci konkursu byli zwalania z egzaminu wstępnego na Politechnikę Radomską.

#### 6.10 Recenzowanie publikacji w czasopismach międzynarodowych i krajowych

Jestem recenzentem następujących czasopism zagranicznych z listy JCR:

1. **Rheologica Acta**, Springer (IF=1.833). Od 2015 roku, recenzja dwóch artykułów.
2. **Mathematics and Mechanics of Solids**, Sage (IF=2.545). Od 2017 roku, recenzja dwóch artykułów.
3. **IMA Journal of Applied Mathematics**, Oxford University Press (IF=1.369). Od 2018 roku, recenzja jednego artykułu.
4. **Measurement**, Elsevier (IF=2.62). Od 2019 roku, recenzja jednego artykułu.
5. **Kuwait Journal of Science**, Academic Publication Council of Kuwait University (IF=0.693). Od 2019 roku, recenzja jednego artykułu.

Ponadto recenzowałem liczne artykuły zamieszczone w zagranicznych czasopismach z zakresu zastosowań matematyki, mechaniki obliczeniowej oraz informatyki a także dla Mathematical Reviews (AMS).

#### 6.10 Współpracy z zagranicznymi i krajowymi ośrodkami akademickimi

1. **Francja, Aix-Marseille Université, Centre de Physique Théorique, CNRS.** Współpraca w latach 2005-2016 w zakresie: badania właściwości aproksymacji Padé i N-point Padé i ich zastosowania. Efektem jej były wspólne prace wymienione w dorobku naukowym.
2. **Słowacja, Uniwersytet Pavla Jozefa Šafárika, Koszyce.** Współpraca (od 2009 do chwili obecnej) w zakresie: zastosowania sieci neuronowych, wybranych zagadnień algorytmicznych, programowania w Pythonie, a także innych zagadnień informatycznych. Efekty tej współpracy zostały omówione w pkt. III L (załącznik 4, dot. staży)
3. **Iran, Islamic Azad University Ahvaz Branch.** Współpraca (od 2018 do chwili obecnej) w zakresie: rozwiązania numerycznego i aproksymacji równania Colebrooka, które stosowane jest między innymi przy analizie przepływów cieczy z uwzględnieniem tarcia. Efektem jej ma być opracowanie wspólnego artykułu "Comparison of numerical methods for solution Colebrook equation"
4. **Uniwersytet Łódzki, Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej, Katedra Fizyki Ciała Stałego oraz Instytut Informatyki.** Współpraca (od 2015 do chwili obecnej) w zakresie zastosowania algorytmów genetycznych do rozwiązywania wybranych problemów aproksymacyjnych. Efektem jej jest opracowanie wspólnego artykułu „Genetic Algorithm as the efficient approach to the problem of the inverse Langevin function approximation” (nieopublikowany)
5. **Uniwersytet Kardynała Stefana Wyszyńskiego w Warszawie, Wydział Biologii i Nauk o Środowisku.** Współpraca (od 2013 do chwili obecnej) w zakresie badania właściwości tribologicznych różnych materiałów w tym polimerów. Efektem jej były wspólne prace wymienione w dorobku naukowym.

#### 6.12 Nagrody, wyróżnienia i odznaczenia

Po uzyskaniu stopnia doktora otrzymywałem nagrody za działalność naukową:

1. Nagroda Rektora UTH indywidualna III stopnia, 2018
2. Nagroda Rektora UTH indywidualna II stopnia, 2016
3. Nagroda Rektora Politechniki Radomskiej indywidualna III stopnia, 2010
4. Nagroda Rektora Politechniki Radomskiej indywidualna II stopnia, 2009

5. Nagroda Rektora Politechniki Radomskiej indywidualna III stopnia, 2008
6. Nagroda Rektora Politechniki Radomskiej indywidualna I stopnia, 2001  
oraz za działalność dydaktyczną i organizacyjną:
  1. Nagroda Rektora Politechniki Radomskiej indywidualna III stopnia, 2008, za osiągnięcia organizacyjne
  2. Wyróżniony przez Minister MNiSW Medalem Komisji Edukacji Narodowej, 2003, za istotny wkład w obszarze działalności dydaktycznej (stworzenie nowoczesnych programów nauczania) oraz ogromne zaangażowanie w sprawy organizacyjne Politechniki Radomskiej
  3. Odznaczony przez Prezydenta Srebrnym Krzyżem Zasługi, 2003
  4. Nagroda Rektora Politechniki Radomskiej indywidualna III stopnia, 2002, za opracowanie i wdrożenie nowatorskiego systemu informatycznego dla studentów z kierunku Matematyka

### Podsumowanie działalności naukowo-badawczej

Szczegółowe zestawienie dorobku naukowo-badawczego zamieściłem w tabeli 3, która zawiera publikacje w czasopismach zagranicznych i krajowych z wyszczególnieniem wartości współczynnika oddziaływania i liczby punktów a także inne wykazy związane z działalnością naukową i dydaktyczną.

**Tabela 3. Zestawienie dorobku naukowo-badawczego habilitanta**

Wyszczególnienie	Przed doktoratem	Po doktoracie	Razem
<b>Publikacje w czasopismach zawartych w bazach Journal Citation Reports - lista A MNiSW</b>	<b>0</b>	<b>15 (w tym 1 w druku)</b>	<b>15</b>
<b>Publikacje w innych recenzowanych czasopismach krajowych lub zagranicznych</b>	<b>7</b>	<b>17</b>	<b>24</b>
<b>Autorstwo podręczników akademickich</b>	<b>2</b>	<b>2</b>	<b>4</b>
<b>Rozdziały w monografiach</b>	<b>0</b>	<b>10</b>	<b>10</b>
<b>Autorstwo innych publikacji książkowych popularyzujących ofertę dydaktyczną Politechniki Radomskiej (informatorów)</b>	<b>0</b>	<b>4</b>	<b>4</b>
<b>Pozostałe recenzowane publikacje i materiały konferencyjne</b>	<b>6</b>	<b>13</b>	<b>19</b>
<b>Dokumentacja prac badawczych</b>	<b>1</b>	<b>9</b>	<b>10</b>
<b>Razem</b>	<b>16</b>	<b>70</b>	<b>86</b>
<b>Wygłoszone referaty na zagranicznych konferencjach naukowych</b>	<b>1</b>	<b>10</b>	<b>11</b>
<b>Wygłoszone referaty na międzynarodowych i krajowych konferencjach w Polsce</b>	<b>6</b>	<b>20</b>	<b>26</b>
<b>Razem</b>	<b>7</b>	<b>30</b>	<b>37</b>
<b>Organizacja konferencji naukowych</b>	<b>-</b>	<b>1</b>	<b>1</b>
<b>Liczba cytowań według bazy</b>			

a) Web of Science	-	<b>65</b>	<b>WoS=65</b>
b) Scopus	-	73	Scopus=73
<b>Indeks Hirscha</b> według bazy:			
a) Web of Science	-	<b>5</b>	<b>H<sub>WoS</sub>=5</b>
b) Scopus	-	5	H <sub>Scopus</sub> =5
<b>Sumaryczny impact factor</b> publikacji naukowych według listy Journal Citation Reports	-	<b>21.544</b>	<b>IF=21.544</b>
<b>Sumaryczne punkty MNiSW</b>			
a) lista A	-	<b>390</b>	
<b>b) lista B</b>	-	<b>129</b>	<b>519</b>
<b>Prace naukowo badawcze zlecone przez MNiSW</b>			
a) kierownik	<b>1</b>	<b>4</b>	<b>5</b>
b) wykonawca	<b>1</b>	<b>7</b>	<b>8</b>
<b>Uczestnictwo w programach europejskich</b>	-	<b>6</b>	<b>6</b>
<b>Recenzje dla czasopism</b>			
a) zawartych w bazach JCR	-	<b>7*</b>	<b>7*</b>
b) innych międzynarodowych	-	<b>102*</b> (+47 czekających na weryfikacje)	<b>102*</b> (+47 czekających na weryfikacje)
<b>Udział w radach naukowych czasopism</b>	-	<b>2*</b>	<b>2*</b>
<b>Liczba decyzji redaktorskich</b>	-	<b>46*</b>	<b>46*</b>
<b>Staż w zagranicznych ośrodkach akademickich</b>	-	<b>5</b>	<b>5</b>
<b>Udział w zespołach eksperckich i konkursowych</b>	-	<b>5</b>	<b>5</b>
<b>Opieka naukowa nad studentami</b>			
a) prace magisterskie	-	<b>35</b>	<b>35</b>
b) prace licencjackie	-	<b>51</b>	<b>51</b>
c) prace inżynierskie	-	<b>76</b>	<b>76</b>
<b>Razem</b>	-	<b>162</b>	<b>162</b>

\*Według danych potwierdzonych przez Publons <https://publons.com/researcher/1215133/radoslaw-jedynak/>

Efekty zrealizowanych prac naukowo-badawczych przedstawione zostały w 86 publikacjach, w tym 70 po uzyskaniu stopnia doktora<sup>47</sup>, w szczególności:

**15** (jeden w druku) publikacji w czasopismach z listy JCR, wszystkie po doktoracie (w tym 4 autorskie i dodatkowo 2 napisane samodzielnie po śmierci współautora J. Gilewicza w 2016r.)

24 publikacji w czasopismach, w tym **17** po doktoracie (w tym 5 autorskich)

19 publikacji w materiałach konferencyjnych, w tym **13** po doktoracie

**10** publikacji w rozdziałach monografii, wszystkie po doktoracie (wszystkie autorskie)

4 podręczniki akademickie, w tym **2** po doktoracie (jeden autorski)

<sup>47</sup> Szczegółową listę publikacji przedstawiono w załączniku 4

Publikacje w czasopiśmie z listy JCR wraz z wartością współczynnika oddziaływania IF oraz pozostałe artykuły, które opublikowano w czasopiśmie związanych tematycznie z zagadnieniami realizowanych prac badawczych zestawiono w załączniku 4.

Wyliczony Impact Factor publikacji zamieszczonych w czasopiśmie z listy JCR zgodnie z rokiem opublikowania, wynosi **21.544**. Natomiast sumaryczna liczba punktów uzyskanych za publikacje według listy MNiSW zgodnie z rokiem opublikowania wynosi **519**.

Liczba cytowań według bazy Web of Science wynosi **65**, według bazy Scopus – **73** (różnica spowodowana jest dłuższym czasem indeksacji artykułów przez WoS). Współczynnik Hirscha: według Web of Science - **5**, według Scopus - **5**.

W okresie pracy zawodowej brałam udział w realizacji 12 prac naukowo-badawczych (finansowanych przez MNiSW), w tym byłam kierownikiem 5 z nich<sup>48</sup>. Brałam udział w 6 projektach finansowanych z funduszy unijnych. Szczegółowy wykaz zrealizowanych prac badawczych zamieściłam w załączniku 4.

Henryk Radosław Jedynak

---

<sup>48</sup> Wykaz realizowanych projektów badawczych zawiera załącznik 4