

prof. dr hab. Maria L. Ekiel-Jezewska
Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN
Pawińskiego 5b, 02-106 Warszawa

Warszawa, 31 maja 2016

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Pawła Jana Żuka
pt. *“Dynamika płynów złożonych w przepływach i polach
zewnętrznych”*

Rozprawa doktorska pt. *Dynamika płynów złożonych w przepływach i polach zewnętrznych* została przygotowana przez mgr Pawła Jana Żuka na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego pod kierunkiem dr. hab. Piotra Szymczaka, prof. UW, w ramach projektu TEAM Fundacji na rzecz Nauki Polskiej.

Praca ma na celu zbadanie, jak przepływ zewnętrzny oraz obecność oddziaływań hydrodynamicznych wpływają na proces agregacji cząstek w układach wielocząstkowych. Autor systematycznie konstruuje teoretyczny i numeryczny opis tego procesu. W pierwszym rozdziale opisuje motywację podjęcia tej tematyki badawczej oraz przedstawia układ, jego teoretyczny opis i parametry charakterystyczne. Przedmiotem zainteresowania jest brownowski ruch cząstek w lepkim płynie unoszonych przez zewnętrzny przepływ ścinający i oddziałujących między sobą poprzez obcięty potencjał Lennarda-Jonesa. Przepływ płynu opisywany jest stacjonarnymi równaniami Stokesa.

W drugim rozdziale oraz dodatkach A, B i C pan mgr Paweł Żuk przedstawia model oddziaływań hydrodynamicznych między wieloma sferycznymi cząstkami oparty na uogólnieniu przybliżenia Rotne-Pragera-Yamakawy. Autor w sposób systematyczny wyprowadza wyrażenia dla wszystkich elementów tej uogólnionej macierzy ruchliwości, która opisuje układ, a zatem uwzględnia translacyjne, rotacyjne i dipolowe stopnie swobody. Podane wzory są słuszne dla kul o równych lub różnych od siebie promieniach. Stosują się one zarówno do cząstek dowolnie przekrywających się jak i cząstek o powierzchniach oddzielonych warstwą płynu. Punktem wyjścia w prezentowanej analizie jest przypadek nieograniczonego płynu, a następnie wzory zostają uogólnione na układy o takiej geometrii, dla której znana jest funkcja Greena, a zatem w szczególności dla periodycznych warunków brzegowych oraz dla płynu ograniczonego jedną albo dwiema równoległymi płaskimi ściankami. Wyrażenia dla elementów macierzy ruchliwości podane są w dodatku C. Stanowią one istotne uogólnienie znanego i szeroko w literaturze stosowanego przybliżenia dla składowych translacyjno-translacyjnych macierzy ruchliwości. Ważnym elementem jest także zastosowanie omówionych powyżej wyrażeń do wyznaczenia jawnej postaci macierzy ruchliwości dla periodycznych warunków brzegowych Leesa-Edwardsa (wyrażenia te nie są wprawdzie wypisane w recenzowanej pracy, ale

zostały wykorzystane w programach numerycznych stworzonych w ramach rozprawy). Opisany wyżej tematyczny cykl wyników został niedawno opublikowany w renomowanych międzynarodowych czasopismach naukowych jako trzy artykuły, których pan Paweł Żuk jest współautorem. Kolejne rozdziały rozprawy zawierają nowe wyniki, które jeszcze nie zostały opublikowane.

Tematem trzeciego rozdziału jest konstrukcja modelu i analiza procesu agregacji cząstek dla rozrzedzonej zawiesiny w przepływie ścinającym. Podstawą jest równanie Smoluchowskiego dla dwucząstkowej funkcji rozkładu prawdopodobieństwa. Pozwala ono na wyznaczenie tempa agregacji. Najpierw przeanalizowany został układ o sferycznej symetrii w nieobecności przepływu ścinającego. Znana analityczna postać rozwiązania bez oddziaływań hydrodynamicznych prowadzi do zależnego od czasu tempa agregacji postaci stała plus człon proporcjonalny do $1/\sqrt{t}$. Równanie Smoluchowskiego z uwzględnieniem oddziaływań hydrodynamicznych w przybliżeniu Rotne-Pragera-Yamakawy zostało w rozprawie rozwiązane metodą objętości skończonych za pomocą programu OpenFOAM. Okazało się, że uwzględnienie oddziaływań hydrodynamicznych prawie nie wpływa na zależność od czasu tempa agregacji. Następnie pan mgr Paweł Żuk przedyskutował sposoby rozwiązywania równania Smoluchowskiego dla granicznych przypadków bardzo małych i bardzo dużych liczb Pecleta, podając jak wtedy stacjonarne tempo przepływu zależy od szybkości ścinania zewnętrznego przepływu płynu. W dalszej części rozdziału 3 została przedstawiona i zastosowana do obliczeń metoda dynamiki brownowskiej dla okresowych warunków brzegowych Leesa-Edwardsa. W granicy małych i dużych liczb Pecleta wyniki symulacji numerycznych dają zależność tempa agregacji od liczby Pecleta zbliżoną do wyników teoretycznych, zarówno przy uwzględnieniu jak i braku oddziaływań hydrodynamicznych. Sposób porównania graficznego współczynnika nachylenia na rysunkach 3.10 oraz 3.11 jest jednak mylący, gdyż sugeruje, że pomarańczowe krzywe opisane jako „teoria” są znane dokładnie, a nie tylko z dokładnością do stałej addytywnej. Ważne jest to, że wyniki numeryczne dla tempa agregacji uzyskane z uwzględnieniem i bez uwzględnienia oddziaływań hydrodynamicznych znacznie różnią się od siebie.

W czwartym (najbardziej obszernym) rozdziale autor analizuje wyniki symulacji numerycznych przeprowadzonych dla gęstszych zawiesin o różnych wartościach ułamka objętościowego ($\phi = 0.01, 0.05, 0.1$) i analizuje wpływ oddziaływań hydrodynamicznych i tempa ścinania (dwadzieścia różnych wartości liczby Pecleta) na kształt i dynamikę agregatów, porównując zachowanie cząstek sferycznych i wydłużonych. Te ostatnie modelowane są jako liniowe łańcuchy złożone z 5 kul, przy czym środki najbliższych sąsiadów połączone są bardzo sztywnymi sprężynkami, podobnie jak sąsiednie pary kul, co praktycznie uniemożliwia zarówno rozciąganie/skracanie cząstek jak i ich wyginanie. Kształt agregatów jest scharakteryzowany ilościowo poprzez tensory bezwładności i żyracji oraz ich wartości i wektory własne.

Systematyczna analiza dynamiki brownowskiej prowadzi do wniosku, że oddziaływania hydrodynamiczne mają bardzo istotny wpływ na strukturę tworzonych agregatów. Dla cząstek sferycznych i wydłużonych występuje podobny efekt. Otóż w nieobecności oddziaływań hydrodynamicznych powstają wydłużone klastry o najdłuższej osi ustawionej wzdłuż przepływu, poruszające się ruchem translacyjnym w kierunku przepływu.

Natomiast uwzględnienie oddziaływań hydrodynamicznych prowadzi do tworzenia agregatów o kształtach zbliżonych do kulistego, obracających się podczas przemieszczania wzdłuż przepływu. Różnica ta zmniejsza się wraz ze wzrostem ułamka objętościowego. Przeanalizowano także ruch cząstek wewnątrz agregatu. Przy uwzględnieniu oddziaływań hydrodynamicznych jest on zbliżony do obrotu ciała sztywnego (tylko nieco wolniejszy) podczas gdy przy braku oddziaływań hydrodynamicznych najdłuższa oś klastra nie obraca się, a pozostaje zorientowana wzdłuż przepływu. Cząstki natomiast ślizgają się wzdłuż powierzchni agregatu i jego wewnętrznych warstw.

W rozdziale czwartym zbadano także wytrzymałość agregatów w przepływie ścinającym. Za pomocą symulacji brownowskich numerycznie wyznaczono tempo rozpadu k_r w zależności od liczby Pecleta (k_r silnie rośnie ze wzrostem Pe) oraz wielkości klastra (większe agregaty są bardziej stabilne) i zinterpretowano wyniki za pomocą modelu opartego na równaniu Smoluchowskiego.

W celu ilościowego opisu agregacji zawieszin wprowadzono cztery miary jej zagregowania, a następnie wyliczono je dla układów, których ewolucja była badana numerycznie. W ten sposób wykazano, że dla niewielkich wartości ułamka objętościowego istnieje optymalna wartość szybkości ścinania (liczby Pecleta), dla której agregaty powstają najszybciej. Pokazano także, że obecność oddziaływań hydrodynamicznych znacznie przyspiesza tempo agregacji. Wnioski te są uzasadnione zarówno dla cząstek sferycznych jak i wydłużonych.

Najistotniejszym wynikiem przeprowadzonej w rozdziale czwartym analizy jest pokazanie, że oddziaływania hydrodynamiczne mają istotny wpływ na kształt powstających klastrów, dynamikę i tempo procesu agregacji w ścinającym przepływie zewnętrznym, a zatem nie można ich zaniedbać.

Ostatni rozdział zawiera skrótowe podsumowanie treści rozprawy. Ciekawe byłoby dodanie popartej obliczeniami dyskusji, która oszacowałaby efekty związane z hydrodynamicznym oddziaływaniem cząstek poprzez warstwę smarowania.

Wyniki rozprawy stoją na wysokim poziomie merytorycznym, natomiast redakcja tekstu pozostawia pewien niedosyt. Brakuje streszczenia. Praca zawiera szereg omyłek i nieścisłości. Przykładowo, w paragrafie 1.2 warto omówić także inne ważne charakterystyczne skale długości i czasu (lepka relaksacja płynu), w prawie zachowania (1.2) powinien być znak $+$ zamiast $-$, w równaniu Naviera-Stokesa (1.7) należy usunąć pierwsze ρ oraz u zamienić na v , na str. 18 należy zmienić zapis $1 = \delta_{ij}$, na str. 19 warto przedyskutować stosowalność stacjonarnego równania Stokesa (liczba Strouhala), dyskutowane na str. 22 cząstki nie są molekułami, na str. 27 przy relacji ruchliwości chodzi o siły zewnętrzne lub hydrodynamiczne (a nie całkowite), znaki we wzorach (2.1) oraz (2.2) są słuszne o ile $\mathcal{F}_j$ i $\mathcal{T}_j$ są siłami i momentami sił wywieranymi przez cząstki na płyn (a nie odwrotnie), na str. 44 w akapicie pod rysunkiem brakuje znaków $-$ przed wartościami parametru b . W podpisach pod rysunkami 3.10, 3.11 oraz 4.1 we wzorach dla dużych liczb Pecleta brakuje nawiasów (Pe mnoży obie wartości, a nie tylko jedną). Na str. 68 brak definicji jądra rozpadu k_r (procesy rozpadu omawiane są znacznie później w rozdz. 4.3.2), nachylenia na rys. 4.1 są znacznie mniejsze niż wartości podane w podpisie tego rysunku i równaniu (3.86). W podpisach pod rysunkami 4.30 i 4.31 brakuje

informacji, czy wyniki uzyskano uwzględniając oddziaływania hydrodynamiczne.

Uzyskane w rozprawie wyniki teoretyczne i numeryczne są istotne dla zrozumienia wpływu ścinającego przepływu zewnętrznego na tempo i sposób agregacji cząstek. Ich uzyskanie wymagało od autora zdobycia obszernej wiedzy teoretycznej z zakresu fizyki statystycznej i hydrodynamiki, a także wykształcenia umiejętności prowadzenia zaawansowanych obliczeń numerycznych oraz analizowania ich wyników. Uwagę zwraca bardzo staranne przetestowanie konstruowanych programów numerycznych oraz ilościowa ocena dokładności numerycznej. Mgr Paweł Żuk bardzo dobrze wywiązał się z realizacji postawionych celów badawczych, a jego rozprawa doktorska prezentuje wysoki poziom naukowy.

Podsumowując, recenzowana praca pt. *Dynamika płynów złożonych w przepływach i polach zewnętrznych* spełnia wymogi stawiane rozprawom doktorskim przez *Ustawę o stopniach naukowych i tytule naukowym*. Praca ta zawiera konstrukcję ważnego i użytecznego modelu teoretycznego oddziaływań hydrodynamicznych oraz interesujące wyniki teoretyczne i numeryczne, które mają istotne znaczenie poznawcze dla zrozumienia procesu agregacji cząstek w przepływie ścinającym. Dlatego wnoszę o przyjęcie tej rozprawy doktorskiej oraz dopuszczenie mgra Pawła Jana Żuka do jej publicznej obrony.



prof. dr hab. Maria L. Ekiel-Jezewska