

2019 -10- 08

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

Warszawa, 5 października 2019

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Pawła Rafała Sznajdera
pt. „Stan stacjonarny sedymentującej zawiesiny przy małej
liczbie Reynoldsa i dużej liczbie Pecleta”

Wprowadzenie

Przedmiotem niniejszej recenzji jest rozprawa doktorska pt. *Stan stacjonarny sedymentującej zawiesiny przy małej liczbie Reynoldsa i dużej liczbie Pecleta*, przygotowana przez mgr. Pawła Rafała Sznajdera pod kierunkiem prof. dr hab. Bogdana Cichockiego, w Instytucie Fizyki Teoretycznej Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego.

Cel tej pracy – w znacznym uproszczeniu – postrzegam jako zastosowanie zaawansowanych metod fizyki statystycznej do stworzenia teorii pozwalającej na wyznaczenie struktury i właściwości makroskopowych zawiesiny złożonej z mikrocząstek opadających grawitacyjnie w lepkim płynie. Bez wątpienia zagadnienie to jest bardzo ważne z punktu widzenia licznych zastosowań w przemyśle, ochronie środowiska, medycynie, biologii, tworzeniu innowacyjnych technologii w mikroskali. Zasadnicza trudność polega na tym, że ze względu na długi zasięg oddziaływań hydrodynamicznych, dla układu wielu cząstek wyrażenia na ich prędkości, a także na fluktuacje tych prędkości, zawierają człony skalujące się jak odwrotność odległości między cząstkami, lub jej kolejne potęgi. Niektóre człony są więc niecałkowalne po całej przestrzeni i nie istnieje dla nich granica termodynamiczna. Procedura uśredniania po zespole statystycznym położenia cząstek musi zatem poradzić sobie z eliminacją członów rozbieżnych. Rozwiązanie problemu sedymentacji wymaga zbudowania podstaw nierównowagowej fizyki statystycznej zawiesin. Jest to zadanie niezmiernie trudne i jako takie do tej pory nie doczekało się realizacji. Dotąd nie było pełnego opisu teoretycznego procesu sedymentacji opartego na podstawowych prawach fizyki, pozwalającego na wyjaśnienie dotychczasowych wyników eksperymentalnych.

Tym bardziej więc należy docenić pana mgr. Pawła Rafała Sznajdera i jego promotora, prof. dr hab. Bogdana Cichockiego, za podjęcie tej tematyki. Aby naświetlić skalę trudności problemu poruszanego w rozprawie, warto odwołać się do jego historii. Klasyczny opis procesu sedymentacji zwiesin stworzony został w latach 70. i 80. ubiegłego wieku przez George’a Keitha Batchelora, wybitnego specjalistę dynamiki płynów, osobistość centralną powstałej w tamtym czasie na Uniwersytecie w Cambridge szkoły hydrodynamiki. Kluczową pracę na ten temat, czyli referencję [11] z recenzowanej rozprawy doktorskiej, opublikował w 1972 r. Doczekała się ona 1000 cytowań, przy nie słabnącym tempie cytowania w kolejnych latach, co ilustruje aktualność tej tematyki. Podstawą opisu sformułowanego w [11] i następnych pracach tegoż autora jest obserwacja, że średnią prędkość zawieszonych w płynie cząstek należy liczyć względem średniej prędkości

zawiesiny, czyli cząstek i otaczającego je płynu. Wprawdzie, przy założeniu jednorodności i uwzględnieniu tylko oddziaływań dwucząstkowych, Batchelor usunął w ten sposób rozbieżności prędkości sedymentacji, ale nie stworzył pełnego opisu statystycznego. Jego wyrażenia na prędkość sedymentacji polidispersyjnych cząstek o różnych gęstościach nie dają jednoznacznej granicy dla cząstek identycznych. W dodatku obliczona przez Batchelora wartość współczynnika sedymentacji dla rozrzedzonych zawiesin monodispersyjnych jest inna niż wartość wyznaczona później przez Cichockiego i Sadleja na podstawie systematycznego opisu statystycznego.

Co więcej, okazało się, że istotne jest zastosowanie fizyki statystycznej nie tylko do wyznaczenia prędkości sedymentacji zawiesiny, ale także do opisu fluktuacji prędkości cząstek. Eksperymentatorzy przekonali się o tym podczas pomiarów PIV ruchu sedymentujących mikrocząstek. Zaobserwowali bowiem, że w opadającej grawitacyjnie niebrownowskiej zawieszynie przy liczbach Reynoldsa znacznie mniejszych od jedności samoistnie tworzą się struktury wirowe zawierające tysiące cząstek, z bardzo dużymi względnymi fluktuacjami ich prędkości.

Wyniki rozprawy doktorskiej

Rozprawa doktorska liczy 150 stron, ma 11 rozdziałów, 4 dodatki oraz cytuje 101 pozycji literatury. Znaczną część tej pracy zajmuje przedstawienie podstawowych pojęć i wyników literaturowych, co jest konieczne do zrozumienia nowych rezultatów tej pracy. W rozdziale 1 autor wprowadza w tematykę rozprawy, wyjaśnia pojęcia liczb Reynoldsa i Peckleta, a także formułuje jej główny cel: sformułowanie warunków na funkcje korelacji sedymentującej zawiesiny w stanie stacjonarnym oraz znalezienie schematu postępowania pozwalającego wyznaczyć te funkcje tak, aby te warunki spełniały.

Rozdziały 2 i 3 zawierają opis teoretyczny oddziaływań hydrodynamicznych między wieloma kulistymi cząstkami poruszającymi się w lepkim płynie w zakresie liczb Reynoldsa znacznie mniejszych od jedności. W szczególności przedstawione są wyrażenia dla macierzy ruchliwości, szeregu rozproszeniowego i współczynników przesunięcia. W rozdziale 4 przeprowadzone zostaje rozwinięcie grupowe macierzy ruchliwości, a więc i prędkości sedymentacji, a następnie przedstawiona jest procedura uśredniania po zespole statystycznym z użyciem zredukowanych funkcji rozkładu prawdopodobieństwa w przestrzeni położenia środków kul oraz szeregu rozproszeniowego. Podane są wyrażenia na średnią prędkość sedymentacji, średnią prędkość zawiesiny oraz fluktuacje prędkości cząstek. W rozdziale 5, z wykorzystaniem [53] i [94], przedstawione zostają diagramy pomocne w analizie i klasyfikacji poszczególnych członów w tych wyrażeniach. W szczególności chodzi o indentyfikację członów rozbieżnych w granicy termodynamicznej. Wprowadzone są pojęcia redukowalności i linii mostowych.

Rozdział 6 poświęcony jest identyfikacji członów rozbieżnych w wyrażeniu na średnie fluktuacje prędkości cząstek, przy czym rozbieżności liniowa i logarytmiczna analizowane są oddzielnie. Dla funkcji korelacji h_2 sformułowane zostają warunki (6.37)-(6.39), które pozwalają na skompensowanie się do zera członów rozbieżnych liniowo. Zostały także przeanalizowane człony zawierające rozbieżności logarytmiczne. Sformulowano warunki (6.45)-(6.46) kompensacji tych rozbieżności do zera. Tym razem są to warunki dla funkcji

korelacji h_k i h_{k+1} opisujących odpowiednio grupę k cząstek i tę samą grupę uzupełnioną o jedną dodatkową cząstkę w znacznej od tej grupy odległości.

Kolejne rozdziały poświęcone są poszukiwaniu jawnej postaci funkcji korelacji i sprawdzeniu, czy sformułowane warunki ekranowania rozbieżności będą dla nich spełnione. W tym celu w rozdziale 7 wypisano hierarchię równań BBGKY dla równania Smoluchowskiego/Liouville'a w zastosowaniu do stanu stacjonarnego. Rozważono dwa przypadki: w obecności i nieobecności ruchów Browna. W rozdziale 8 przeprowadzona została analiza długozasiegowej asymptotyki poszczególnych członów tych równań hierarchii. Okazało się, że sformułowane wcześniej warunki ekranowania nie wystarczają do tego, aby zapewnić całkowalność stacjonarnych rozwiązań równań hierarchii BBGKY dla zawieszin niebrownowskich.

W rozdziale 9 opisano mankamanety dodatkowych warunków nałożonych wcześniej na funkcje korelacji przez Cichockiego i Sadleja w celu usunięcia tych rozbieżności. Żądanie, aby dwucząstkowa funkcja korelacji nie dawała wkładów do trójcząstkowej funkcji korelacji prowadzi do izotropowości dwucząstkowej funkcji korelacji, ale ograniczone jest tylko do przypadku monodispersyjnego. Batchelor rozważał cząstki polidispersyjne, ale jego wyrażenia nie dają jednoznacznego wyniku w granicy równych promieni wszystkich cząstek, a ich zastosowanie do wkładów trójcząstkowych prowadzi do członów rozbieżnych logarytmicznie.

W rozdziale 10 hierarchia BBGKY zostaje więc przeformułowana do postaci, w której nie ma niecałkowalnych, długozasiegowych wyrażeń. W metodzie tej wszystkie człony hierarchii są przeskalowane (podzielone) przez amplitudę dominującego wyrazu, czyli przez logarytm objętości układu. Poprzez spełnienie warunku izotropowości m -cząstkowych funkcji korelacji wyeliminowane zostały niecałkowalne wyrażenia, które mają interpretację wpływu liniowego pola prędkości, wygenerowanego przez jedną grupę cząstek, na prędkości cząstek w innej, oddalonej od niej grupie. Rozwiązania nowej hierarchii stają się krótkozasięgowe i warunek ekranowania przestaje być potrzebny. Istnieje stan stacjonarny, ale występują w nim fluktuacje prędkości, które w granicy termodynamicznej stają się nieskończone. Osiągnięta zostaje spójność opisu dla zawieszin mono i polidispersyjnych. Nowa metoda otwiera drogę do numerycznego policzenia współczynników sedimentacji dla zawieszin polidispersyjnych i porównania wyników z eksperymentami.

Uwagi krytyczne

Jednym z kluczowych elementów rozprawy są współczynniki przesunięć S^{+-} , S^{--} and S^{++} , obliczone w pracy Felderhofa i Jonesa [75]. W rozprawie pojawiają się jednak nieścisłości w ich zapisie. Współczynniki te zależą od indeksów $l', m', \sigma', l, m, \sigma$. Posługiwanie się konwencją sumacyjną, poczynsz już od wzorów (3.12)-(3.13), a później skrótową notacją, powinno być uzupełnione o podanie zakresu zmienności tych wskaźników. Zamieszczone na górze str. 33 uwagi na temat zakresu zmienności l oraz l' są niezgodne z Ref. [75], gdzie obliczono, że są to dodatnie liczby całkowite spełniające dodatkowe warunki $l' \leq l$ dla S^{++} oraz $l \leq l'$ dla S^{--} . Porównując wzór (3.15) na S^{++} ze wzorami (3.7) w pracy [75] widzę, że indeksy primowane zamienione zostały z indeksami bez primów. Ze względu na wzór (3.13) w pracy [75] ta sama uwaga ma zastosowanie do S^{--} . Ma to

istotne znaczenie, gdyż zarówno w rozprawie jak i w pracy [75] sumowanie odbywa się po wskaźnikach primowanych. Ten sam problem pojawia się później przy wprowadzeniu skrótowej notacji $\mathcal{P}_k^{k'}$ oraz $\mathcal{M}_k^{k'}$.

Należałoby również uwzględnić, że w referencji [75] omyłkowo we wzorze (3.2a) pominięty został człon S^{++} ze wskaźnikami $l' = l + 1$ oraz $\sigma = 2$ i $\sigma' = 0$, który ma postać wynikającą ze wzoru (3.7) z pracy [75]. Istnienie tego brakującego członu zostało zauważone w pracy J. Chem. Phys. 121, 2305 (2004), na str. 2314, pod wzorem (B2). Analogiczny dodatkowy człon występuje także w S^{--} , zgodnie ze wzorem (3.13) w [75].

Mam zatem pytanie: jak uwzględnienie tych wszystkich poprawek związanych z zakresem zmienności wskaźników w sumach współczynników S^{++} oraz S^{--} wpłynie na wyniki rozprawy?

Istotnym elementem rozprawy są warunki (6.47) na funkcje korelacji konieczne do zbieżności fluktuacji prędkości cząstek zawiesiny. Na str. 79 w prawej kolumnie wzoru (6.47), równości w pierwszym i drugim rzędzie nie są jednak ze sobą zgodne dla $k = 1$. Prosiłabym o odpowiednie uzupełnienie tego wzoru i jego opisu.

Mam również uwagi dotyczące rozdziału 11 zawierającego podsumowanie rozprawy. Na str. 121 autor pisze, że dzięki izotropowości funkcji korelacji „można poprawnie policzyć współczynniki sedymentacji dla przypadków mono i polidispersyjnych, co do tej pory było nieosiągalne. Otrzymane wyniki zgadzają się z danymi doświadczalnymi oraz z symulacjami w okresowych warunkach brzegowych”. Co autor miał na myśli, skoro:

1) Współczynniki sedymentacji dla zawiesin monodispersyjnych zostały poprawnie policzone wcześniej przez Cichockiego i Sadleja i nie zgadzają się one z wynikami Batchelora, a wyniki doświadczeń są bliskie i jednych i drugich przewidywań teoretycznych.

2) Współczynniki sedymentacji dla zawiesin polidispersyjnych (o ile mi wiadomo) nie zostały jeszcze policzone zgodnie z procedurą rozdziału 10 rozprawy i wyników takich nie ma w rozprawie doktorskiej.

Prosiłabym o rozwinięcie i uściślenie także treści następnego zdania: „Wynik ten wraz z analizami skalowania świadczy o tym, że w sytuacji jednorodnej zawiesina osiąga stan stacjonarny o korelacjach krótkiego zasięgu”. O jaki wynik autorowi tu chodzi i na czym polega rozumowanie?

Sprawa porównania z wynikami doświadczeń w zasadzie nie jest w rozprawie dyskutowana. Na str. 118 w podrozdziale 10.1 wyniki eksperymentów pojawiają się tylko w tytule. W podrozdziale tym autor posługuje się wynikami symulacji dr. Gustavo Abade aby porównać poziome i pionowe fluktuacje prędkości z rezultatami teoretycznymi Ladda. Chciałabym jednak prosić o dodanie wyjaśnienia zasadniczej kwestii, a mianowicie tego, w jaki sposób z teorii przedstawionej w rozprawie wynika znacząca nieizotropowość fluktuacji prędkości obserwowana w eksperymentach oraz jaki jest związek wyrażenia na fluktuacje prędkości cząstek podanych w rozprawie z teoretycznymi wynikami Ladda, symulacjami Abade oraz danymi z eksperymentów.

Podsumowanie

Skonstruowana w rozprawie doktorskiej teoria sedymentującej zawiesiny ma istotne znaczenie poznawcze i otwiera drogę do dalszych obliczeń numerycznych i porównania z

wynikami eksperymentów. Przygotowanie rozprawy wymagało od kandydata zgromadzenia, zrozumienia i zastosowania bardzo szerokiej wiedzy teoretycznej w zakresie fizyki statystycznej oraz teorii oddziaływań hydrodynamicznych między cząstkami opartej na metodzie multipolowej rozwiązania równań Stokesa w obecności cząstek. Niezbędne było także wnikliwe zapoznanie się z bogatą literaturą dotyczącą procesu sedymentacji zawiesin.

Niewątpliwie pan mgr Paweł Rafał Sznajder wykazał się umiejętnością prowadzenia badań naukowych. Ich wyniki przedstawił w rozprawie w sposób rzetelny i systematyczny. Przydatne byłyby obszerniejsze komentarze i objaśnienia ułatwiające zrozumienie trudnych kroków myślowych, a także bardziej wnikliwe podsumowanie i dyskusja wyników oraz bardziej szczegółowe pokazanie dalszych perspektyw ich zastosowań.

Moje końcowe wnioski są takie, że recenzowana praca z nadmiarem spełnia wymogi stawiane rozprawom doktorskim przez *Ustawę*. Szczególnie ważne jest to, że w rozprawie podana została ogólna metoda teoretyczna pozwalająca na zrozumienie i dalszą analizę podstawowych właściwości makroskopowych sedymentujących zawiesin. Pan mgr Paweł Rafał Sznajder wykazał się wiedzą w zakresie fizyki teoretycznej oraz umiejętnością jej zastosowania do rozwiązania trudnego koncepcyjnie problemu naukowego.

Dlatego wnoszę o przyjęcie rozprawy doktorskiej pt. *Stan stacjonarny sedymentującej zawiesiny przy małej liczbie Reynoldsa i dużej liczbie Pecleta*, wyróżnienie jej za sformułowanie teorii sedymentującej zawiesiny oraz dopuszczenie pana mgr. Pawła Rafała Sznajdera do jej publicznej obrony.



prof. dr hab. Maria L. Ekiel-Jezewska