

RDJMe. 512. u. 2023

dr hab. inż. Agnieszka Boltuc
Uniwersytet w Białymstoku
Instytut Informatyki
ul. Konstantego Ciołkowskiego 1M
15-245 Białystok
e-mail: a.boltuc@uwb.edu.pl
tel. +48 85 745 7694

Białystok, 26-06-2023

RECENZJA

Rozprawy doktorskiej mgr inż. Anny Skorupy pt.

Multi-scale modelling of heat and mass transfer in tissues and cells during cryopreservation including interval methods

Recenzję opracowano w odpowiedzi na pismo przewodniczącej Rady Dyscypliny Inżynieria Mechaniczna Politechniki Śląskiej prof. dr hab. inż. Ewy Majchrzak z dnia 26.04.2023.

1. Przedmiot rozprawy

Oceniana rozprawa poświęcona jest wieloskalowemu modelowaniu wymiany ciepła i masy podczas kriokonserwacji. Jej główny cel to uwzględnienie nieprecyzyjnie zdefiniowanych parametrów w modelach matematycznych opisujących wspomniane procesy poprzez wprowadzenie liczb przedziałowych i rozmytych. Sformułowane problemy brzegowo-początkowe rozwiązywane są numerycznie za pomocą metody różnic skończonych (MRS) zaimplementowanej przez Autorkę w wersji przedziałowej i rozmytej. Niektóre uzyskane wyniki zostały porównane z danymi z symulacji oraz eksperymentów występującymi w literaturze.

Teza pracy została zapisana następująco:

„Uwzględnienie nieprecyzyjnych parametrów występujących w opisie matematycznym pozwala na efektywne wieloskalowe modelowanie procesu wymiany ciepła i masy podczas kriokonserwacji tkanek i komórek.”

2. Zakres rozprawy

Praca zawarta jest na 200 stronach. Napisana jest w języku angielskim. Składa się z wykazu oznaczeń, siedmiu rozdziałów, spisu literatury oraz streszczenia w języku polskim i angielskim.

Rozdział pierwszy wprowadza w tematykę rozprawy oraz definiuje jej cele i zakres.

Kolejna część pracy odpowiada za omówienie metod kriokonserwacji wraz z przeglądem literatury. Poruszono w niej także procedury etapu chłodzenia, rodzaje krioprotektantów i sposób ich dostarczania do próbki.

Przedmiotem rozdziału trzeciego są mechanizmy transportu zachodzące podczas kriokonserwacji. Autorka opisuje mechanizmy wymiany ciepła wraz z wybranymi modelami używanymi do definiowania procesów termicznych i krystalizacji. Ponadto w części tej omówiono model transferu masy w kontekście przepływu płynu oraz dyfuzji molekularnej, a także mechanizm transportu osmotycznego wynikający z transferu krioprotektantów przez błony komórkowe.

Rozdział czwarty dotyczy wprowadzenia w zagadnienia związane z liczbami przedziałowymi oraz rozmytymi, a także ich arytmetyką. Zaprezentowano również metodę do rozwiązywania przedziałowych układów równań.

Rozdziały piąty oraz szósty dotyczą rozpatrywanych przykładów. Problemy dotyczące wymiany ciepła analizowano na trzech przypadkach: 1) model określony równaniem Fouriera, 2) model uzupełniony o przemiany fazowe wprowadzone do równania Pennesa z użyciem metody jednego obszaru, 3) uwzględniając krystalizację z wykorzystaniem modelu strefowego oraz równania nieizotermicznego Bourtona-Mehla. W przypadku testów związanych z transferem masy zaprezentowano następujące przypadki: 1) przenoszenie masy opisane drugim prawem Ficka (z pominiętym zjawiskiem adwekcji), 2) transport osmotyczny opisany modelem zdefiniowanym za pomocą formalizmu 2-P oraz 3) model układu mikroprzepływowego, w którym rozważono zjawisko adwekcji i wykorzystano równanie konwekcji-dyfuzji. Modele numeryczne dla badanych przypadków oparto na metodzie MRS w wersji przedziałowej i/lub rozmytej, gdyż w modelach matematycznych zamiast parametrów deterministycznych wprowadzono je w wersji z uwzględnieniem niepewności. Należy podkreślić, że w niektórych przypadkach parametry są zależne od temperatury co wymusza wprowadzanie różnych przedziałów dla różnych stanów fizycznych.

Ostatni rozdział to wnioski oraz sformułowane rekomendacje dotyczące dalszych kierunków badawczych.

Bibliografia zawiera 208 pozycji literaturowych, w tym 9 jest współautorstwa Doktorantki.

3. Uwagi krytyczne oraz dyskusyjne

1) Główny cel rozprawy doktorskiej dotyczy uwzględnienia nieprecyzyjnie zdefiniowanych parametrów w modelach matematycznych opisujących proces kriokonserwacji. To zaś, cytując tezę pracy, „*pozwała na efektywne wieloskalowe modelowanie*”. Moje wątpliwości dotyczą słowa efektywne użytego w tym kontekście. Co konkretnie wspomniana efektywność tutaj oznacza, czym jest wyrażona?

2) Jakie jest uzasadnienie wyboru metody MRS do numerycznego rozwiązywania zdefiniowanych zagadnień? Pytanie to jest zasadne szczególnie w kontekście wspomnianej w tezie efektywności.

3) Zgodnie z moją wiedzą MRS w wersji nieprecyzyjnej była już wykorzystywana przez innych badaczy do rozwiązywania zagadnień brzegowych. Ciekawym byłoby dokonanie przeglądu takich zastosowań. Ponadto Doktorantka opisując MRS powołuje się na dwie pozycje bibliograficzne (88 i 100). Tymczasem obie dotyczą klasycznej wersji metody bez uwzględnienia niepewności. Skoro istnieją prace dotyczące nieprecyzyjnej MRS, uważam, że warto było się powołać właśnie na nie.

4) Mankamentem pracy jest brak przeglądu zastosowań liczb przedziałowych i rozmytych do modelowania matematycznego różnych zjawisk fizycznych. Doktorantka stwierdza w rozdziale pierwszym, że *“The use of both fuzzy set theory and interval numbers allows many physical phenomena to be better represented in a mathematical model.”*, jednak nie wskazuje gdzie, do czego, w jaki sposób i z jakim skutkiem nieprecyzyjne modelowanie było wykorzystane przez innych badaczy.

5) Rozdział 4.7 zawiera opis rozwiązywania przedziałowych układów równań liniowych. Metoda rozkładu LU jest zaprezentowana na przykładowym układzie z przedziałową macierzą \bar{A} oraz wektorem \bar{b} . Powstaje pytanie jak wygląda układ równań rozwiązywany w ramach metody MRS. Czy przedziałowość parametrów wpływa na niepewność zarówno \bar{A} , jak i \bar{b} ?

6) W niektórych przykładach (6.2, 6.3) uzyskane przedziały rozwiązań nie zawsze są zgodne z wynikami eksperymentów oraz symulacji numerycznych przeprowadzonych przez innych

badaczy. Doktorantka wskazuje, że różnice te mogą wynikać z zastosowania innego równania w proponowanym przez nią modelu. Wydaje się to zasadne, niemniej jednak interesującym byłoby pokazanie, iż błędy te nie wynikają z samego wprowadzenia przedziałów, poprzez policzenie zdegenerowanego rozwiązania MRS dla środkowych wartości przedziałowych parametrów. Na wykresie 6.7 to widać, ale tylko dla konkretnego kroku w konkretnej fazie a nie podczas całej symulacji. Dodatkowo zastanawiającym jest czy takie rezultaty mogą być wynikiem zastosowanych parametrów metody MRS (kroku czasowego, siatki)? Innymi słowy czy były przeprowadzane analizy wyników na bazie innej konfiguracji metody? Z drugiej strony czy powodem tych niedokładności może być sama metoda MRS? Czy były podjęte próby rozwiązania chociaż jednego z problemów inną metodą numeryczną czy nie jest to możliwe bez dużego nakładu pracy?

7) W pracy brakuje jednolitości w stosowaniu rodzajów reprezentowania nieprecyzyjności. Generalną zasadą Doktorantki wydaje się być rozwiązywanie przykładów z zastosowaniem liczb przedziałowych oraz rozmytych, jednak dwa z nich są analizowane jedynie z wykorzystaniem tych pierwszych. Autorka nie uzasadnia tego wyboru. Z drugiej strony brak również wyjaśnienia dlaczego obie reprezentacje są używane w pozostałych przykładach testowych, tym bardziej, że ostatecznie w pracy nie wskazano, która z nich jest rekomendowana. Czy nie lepiej było ograniczyć się jedynie do liczb rozmytych skoro stosowanie α -przekrojów i tak sprowadza problem do wersji przedziałowej?

8) Ciekawym byłoby zaprezentowanie chociaż w jednym z testowanych przykładów w sekcji dotyczącej rozwiązań rozmytych kilku funkcji przynależności odpowiadających kolejnym krokom symulacji. Praca zawiera takie wykresy tylko dla pojedynczych kroków (np. Rys. 6.7).

9) Każdy z rozwiązyanych przykładów kończy się podsumowaniem i konkluzjami. Ostatni rozdział to wnioski ogólne. Mimo to w pracy brakuje mi informacji dotyczących wniosków związanych z modelowaniem nieprecyzyjnym, czy i jaki mają sens w tym przypadku, co dały, co z nich wynika, czy są przeszacowane czy nie? Interesującym byłoby przeprowadzenie analizy rozwiązań przedziałowych w porównaniu z rozwiązaniami zdegenerowanymi uzyskanymi za pomocą MRS dla górnych i dolnych krańców przedziałów parametrów.

10) Rozprawa nie jest wolna od błędów redakcyjnych, które utrudniają jej czytanie.

- W rozdziale "*Fuzzy and interval numbers*" panuje lekki chaos. W części " *α -cuts*" autorka pisze „*Applying the rules of the classical interval arithmetic...*”, tymczasem jest ona

wprowadzona i omawiana dopiero w kolejnym podrozdziale. W podrozdziale 4.3 opisano reguły arytmetyki rozmytej, która jednak nie jest w praktyce wykorzystywana w pracy.

- Wielokrotnie, aby zapoznać się z opisem rysunku czy tabeli trzeba cofnąć się nawet o kilka stron.
- Część rysunków nie zawiera legendy. Na przykład Rys. 5.8 i 5.10 prezentują temperaturę w punkcie A i B, jednak opis która linia jest dedykowana któremu punktowi znajduje się 2 strony wcześniej. Dodatkowo wyniki te zasymulowano dla dwóch różnych α -przekrojów w dwóch różnych punktach i zgrupowano je właśnie według punktów. Czy nie lepiej byłoby na jednym wykresie pokazać oba α -przekroje, tak aby jednoznacznie stwierdzić czy jeden mieści się w drugim?
- Wyniki zaprezentowane na Rys. 6.3 nie wyglądają na przedziałowe pomimo tego, że są tak podpisane. Zabrakło przybliżenia jakie pokazano np. na Rys. 5.23 i 5.24.
- Na Rys. 6.5 pokazane są rozkłady uzyskanych rozwiązań w badanym obszarze dla górnego i dolnego krańca przedziału. Niestety wizualnie wykresy są identyczne. Co więc taka prezentacja wnosi?
- W Tab. 6.4 zaprezentowano rozwiązania w postaci m.in. trójkątnych liczb rozmytych. Ich reprezentacja nie zawiera jednak wartości środkowej. Czy jest to błąd w nazwie nagłówka?
- Mieszana w opisie przykładu 5.2.2. Pierwsze zdanie mówi: "*Let us consider the same case with application of a different model including fuzzy arithmetic*". Dalej mamy stwierdzenie, że "*...complicated arithmetic operations on fuzzy numbers are avoided...*" poprzez wprowadzenie α -przekrojów. Akapit niżej oraz w podsumowaniu ponownie pojawia się opis: "*The calculation of the example using fuzzy arithmetic...*". W końcu jest w tym przykładzie używana arytmetyka rozmyta czy nie?
- Czy w Tabeli 5.7 dla czasu $t=50$ uzyskano tak szeroki przedział czy jest to błąd redakcyjny?
- Drobne błędy redakcyjne jak na przykład: „*our work proposes*” na str. 66, przecinek zamiast kropki po wzorze 5.8, brak kropki w zdaniu „*... (algebraic equations)*” na str. 69, itd.

4. Ocena

Tematyka poruszona przez Doktorantkę w rozprawie doktorskiej jest aktualna i interesująca naukowo. Zawiera ona oryginalne i nowatorskie wyniki symulacji numerycznych procesów wymiany ciepła i masy podczas kriokonserwacji z wykorzystaniem liczb przedziałowych i rozmytych. Według mojej oceny główne osiągnięcia Autorki to:

1) uwzględnienie nieprecyzyjnych parametrów w opisie matematycznym procesu kriokonserwacji co pozwala na jego bardziej naturalne modelowanie bez konieczności użycia czasochłonnych modeli stochastycznych,

2) przeprowadzenie wieloskalowego modelowania wymiany ciepła i masy podczas kriokonserwacji z użyciem nieprecyzyjnie zdefiniowanych modeli matematycznych i numerycznych wykorzystujących liczby przedziałowe oraz rozmyte,

3) opracowanie autorskich programów komputerowych bazujących na metodzie różnic skończonych (MRS) w wersji nieprecyzyjnej,

4) weryfikację zaproponowanych nieprecyzyjnie zdefiniowanych modeli numerycznych na bazie wyników znanych z literatury.

Należy podkreślić, że tematyka poruszana w rozprawie jest bardzo szeroka. Obejmuje i łączy wiedzę z zakresu wielu dyscyplin (mechaniki, biologii, chemii) i zjawisk fizycznych. Dodatkowo Doktorantka wykazała się umiejętnościami programistycznymi, gdyż użyła dostępnych narzędzi do samodzielnego stworzenia programów za pomocą których dokonała symulacji numerycznych. Na plus jest również wysoka świadomość dalszych kierunków badań będących kontynuacją tematyki poruszonej w rozprawie.

4. Wniosek końcowy

Oceniana rozprawa doktorska stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego jakim było opracowanie modeli z nieprecyzyjnie zdefiniowanymi parametrami występującymi w opisie matematycznym procesu wymiany ciepła i masy podczas kriokonserwacji tkanek i komórek. Cel pracy został osiągnięty poprzez zastosowanie liczb przedziałowych i rozmytych. Potwierdzenie tezy nastąpiło w wyniku dokonania symulacji numerycznej wspomnianych zagadnień z wykorzystaniem przedziałowej i rozmytej metody różnic skończonych.

Zauważone i wskazane usterki oraz pytania nie umniejszają wartości merytorycznej rozprawy. Mają raczej charakter dyskusyjny i liczę na to, że mogą być pożyteczne podczas dalszej pracy naukowej Doktorantki.

W wyniku dokonanej oceny stwierdzam, iż praca prezentuje rozległą wiedzę teoretyczną Doktorantki w dyscyplinie Inżynieria Mechaniczna w zakresie analizowanych w niej zjawisk. Ponadto Doktorantka charakteryzuje się umiejętnością samodzielnego prowadzenia pracy naukowej.

Podsumowując stwierdzam, iż rozprawa doktorska mgr inż. Anny Skorupy spełnia wymagania stawiane rozprawom doktorskim określone w Art. 187 Ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dnia 20.07.2018 r.

Wniosuję do Rady Dyscypliny Inżynieria Mechaniczna Politechniki Śląskiej o dopuszczenie rozprawy mgr inż. Anny Skorupy do publicznej obrony.

Agnieszka Bożur