

Warszawa, 18 października 2024 r.

Opinia nt. rozprawy doktorskiej Pani mgr Leny Caban pt.
Development of an approximate deconvolution method for modeling non-reactive and reactive turbulent flows.

Niniejsza opinia została sporządzona na zlecenie Rady Naukowej Dyscypliny Inżynieria Mechaniczna Politechniki Częstochowskiej (umowa nr RN-UC-96/24 z dn. 20.08.2024 r.)

1. Tematyka pracy, hipoteza badawcza i cele pracy

Rozprawa doktorska Pani Leny Caban (zwanej dalej Doktorantką) dotyczy numerycznego modelowania przepływów turbulentnych i spalania turbulentnego realizowanego przy użyciu metody wielkich wirów (Large Eddy Simulation, w skrócie LES). Metoda LES, rozwijana intensywnie od ponad pół wieku, oparte są na wykorzystaniu operacji filtrowania skal przestrzennych zastosowanego do równań rządzących zjawiskiem, w szczególności równania Naviera-Stokesa i, ewentualnie, sprzężonych z nim równań ewolucji pól skalarnych. Efektem tej procedury jest opis matematyczny ewolucji struktur przepływowych o rozmiarze powyżej skali przestrzennej (szerokości) zastosowanego filtra. Kluczowa dla metody LES jest kwestia poprawnego odzwierciedlenia w symulacjach oddziaływania pomiędzy strukturami charakteryzującymi się skalami przestrzennymi i czasowymi obecnymi w symulacji i strukturami usuniętymi z symulacji w wyniku procesu filtrowania. Generalnie, odtworzenie takie ma zapewnić tzw. modelowanie podsiatkowe, które może być zrealizowane na wiele sposobów.

W początkowej fazie swojego rozwoju metoda LES stanowiła przedmiot zainteresowania przede wszystkim środowiska naukowego, ustępując pola alternatywnemu podejściu do modelowania przepływów turbulentnych opartemu na wykorzystaniu modelu RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes), względnie jego niestacjonarnego wariantu Unsteady RANS (URANS). Głównym powodem takiej sytuacji był koszt obliczeniowy - metody LES są z reguły bardziej kosztowne

numerycznie niż metody typu RANS. Metoda LES jest także kłopotliwa w implementacji w obszarach o złożonej geometrii, wymagających stosowania siatek niestukturalnych. Z drugiej strony metoda LES przewyższa znacząco metodę RANS (a także URANS) pod względem zdolności do wiernego i dokładnego modelowania przepływów turbulentnych z istotnymi niestacjonarnościami. Fakt ten wynika wprost z procedury uśredniania Reynoldsa, która jest uśrednianiem względem czasu, a nie – jak w LES – „uśrednianiem” (de facto filtrowaniem) przestrzennym.

Możliwość skutecznej i dokładnej rekonstrukcji numerycznej niestacjonarnych przepływów turbulentnych metodą LES jest szczególnie atrakcyjna w szeregu zastosowań technicznych, by wymienić tu procesy przepływowe i ciepłno-przepływowe w maszynach wirnikowych, zagadnienia niestacjonarnej aero/hydrodynamiki czy modelowanie procesów spalania i detonacji. Biorąc po uwagę nieustanny wzrost mocy obliczeniowej dostępnych komputerów, na znaczeniu traci stopniowo także przeszkoda w praktycznym/rutynowym stosowaniu LES związana z podwyższonymi kosztami numerycznymi w porównaniu z metodami RANS. W ciągu ostatnich dwóch dekad pokonano także w znacznym stopniu ograniczenia LES związane z geometrią obszaru, m.in. łącząc LES z metodą zanurzonego brzezi (Immersed Boundaries LES).

Podsumowując, w aktualnym stanie rozwoju obliczeniowej mechaniki płynów (CFD) i technologii maszyn liczących, metody LES, a także metody hybrydowe (np. DES lub LBM-LES) nabierają nowego znaczenia jako techniki modelowania potencjalnie użyteczne w praktyce inżynierskiej, w procesach projektowania i optymalizacji urządzeń i procesów obecnych w rozmaitych dziedzinach techniki.

Praktyczne zastosowanie tak złożonego narzędzia jak metoda LES wymaga podania potencjalnemu użytkownikowi (szczególnie w środowisku przemysłowym) jasnych rekomendacji co do wyboru szczegółowych „ustawień” solwera, gwarantujących szybkie uzyskanie wiarygodnego i możliwie dokładnego wyniku. Na poziomie bardziej podstawowym można zadać pytanie o wybór konkretnego wariantu metody LES, w szczególności algorytmu filtrowania. Nawet pobieżna analiza historii rozwoju tej rodziny metod i kluczowych publikacji pokazuje, że sformułowanie definitywnych opinii i rekomendacji jest trudne, o ile w ogóle możliwe. Pojawiają się wciąż kolejne publikacje proponujące modyfikacje już istniejących lub istotnie nowe pomysły i/lub szczegółowe algorytmy w celu ulepszenia dokładność/efektywności obliczeń

metodami LES. W pracach tej kategorii spotykamy zwykle porównania z wynikami referencyjnymi, uzyskiwanymi z reguły za pomocą metody bezpośredniej symulacji oryginalnych równań (Direct Numerical Simulation – DNS) i alternatywnymi wariantami metody LES. Tam, gdzie to możliwe, wyniki z symulacji LES są konfrontowane z eksperymentem.

Rozprawa doktorska Doktorantki wpisuje się dokładnie w ten współczesny trend podążania w kierunku najlepszych rozwiązań w ramach LES. Biorąc pod uwagę autentyczną potrzebę doskonalenia tej rodziny metod jako najbardziej perspektywicznych narzędzi modelowania szeroko pojętych procesów turbulentnych, szczególnie w zastosowaniach technicznych, mogę stwierdzić, że tematyka badań podjętych przez Doktorantkę jest aktualna i naukowo bardzo interesująca. Nie mam też wątpliwości, że badania przeprowadzone przez Doktorantkę mogą być przedmiotem rozprawy doktorskiej w dyscyplinie inżynieria mechaniczna.

Badania przedstawione w rozprawie Pani Leny Caban dotyczą szczególnego sformułowania metody LES, w której struktury przepływowe o skalach poniżej rozdzielczości filtru rekonstruowane są metodą przybliżonej dekonwolucji (Approximate Deconvolution Method, ADM) opartej na iteracyjnym algorytmie van Citterta. Za podstawową tezę naukową pracy należy uznać stwierdzenie pojawiające się w ostatnim akapicie na str. 3. Doktorantka stwierdza mianowicie, że przedłożona praca ma wykazać, że LES-ADM jest obiecującym narzędziem symulacji numerycznych przepływów turbulentnych i procesów spalania charakteryzujących się spalaniem w trybie mieszanym. W celu wykazania w/w tezy Doktorantka formułuje cele badawcze obejmujące sformułowanie, implementację i weryfikację metody LES-ADM. Doktorantka wskazuje jednocześnie na elementy nowości naukowej w pracy, a mianowicie: opracowanie implementacji opartej na wykorzystaniu kompaktowych schematów różnicowych (Compact Difference Schemes, CDS) zapewniających wyjątkowo wysoką, praktycznie spektralną zbieżność aproksymacji w przestrzeni, przeprowadzenie wszechstronnej analizy właściwości LES-ADM na odpowiednio wymagających przypadkach testowych, oraz przeprowadzenie symulacji wybranych przypadków niestacjonarnych przepływów turbulentnych o dużej złożoności, takich, jak przejście laminarno-turbulentne i propagacja frontu płomienia w przepływie turbulentnym ze spalaniem.

Reasumując, Doktorantka formułuje tezę ogólną oraz szczegółowe cele niezbędne do jej wykazania. Należy podkreślić, że realizacja każdego z postawionych celów wiązało się z koniecznością wykorzystania przez Doktorantkę zaawansowanych metod matematycznych, wykazania się dogłębnym rozumieniem teorii i właściwości rozmaitych wariantów metody LES oraz fizyki modelowanych zjawisk, a także biegłością w posługiwaniu się metodami numerycznymi i ich implementacji. Tym samym, Doktorantka potwierdziła swoje kompetencje do prowadzenia oryginalnych i nowatorskich badań naukowych w dziedzinie inżynierii mechanicznej.

2. Struktura i zawartość merytoryczna pracy

Rozprawa napisana jest w języku angielskim i jest obszerna - jej łączna objętość to ok. 250 stron. Zasadnicza część pracy liczy 178 stron i jest podzielona na 8 rozdziałów.

Rozdział 1 opisuje zwięźle motywację do podjęcia tematyki opisanej w pracy rozważań, formułuje cele i tezę, a także wymienia elementy nowości naukowej. Ostatnia sekcja tego rozdziału to opis osiągnięć naukowych Doktorantki, w tym lista publikacji w czasopismach naukowych i referatów konferencyjnych.

Rozdział 2 zawiera wprowadzenie do modelowania przepływów metodą LES, ze szczególnym uwzględnieniem modeli wykorzystujących metodę dekonwolucji ADM. W rozdziale tym Doktorantka przedstawiła podstawy modelowania przepływów turbulentnych ze spalaniem, w szczególności modele klasyczne i modele bazujące na dekonwolucji.

Rozdział 3 Doktorantka poświęciła opisowi kompaktowych schematów różnicowych i ich zastosowaniu w kontekście obliczeniowej mechaniki płynów. Istotną wartością naukową przedstawiają ogólne formuły na współczynniki kompaktowych wzorów różnicowych. Należy podkreślić, że ich wyprowadzenie, analiza błędów obciążenia oraz analiza Fouriera tych formuł to oryginalne osiągnięcie Doktorantki. W dalszej części rozdziału Doktorantka omawia krótko schematy TVD i WENO. Następnie przechodzi do bardzo istotnego z punktu widzenia tematyki pracy zagadnienia konstrukcji filtrów oraz technik interpolacyjnych opartych na wykorzystaniu kompaktowych różnic

skończonych. Kluczowym wynikiem w tym rozdziale jest pokazanie i analiza efektu filtrowania skal związanego z różnicową aproksymacją pochodnych.

Szczegółowa analiza przybliżonej metody dekonwolucji ADM jest przedmiotem rozważań w Rozdziale 4. Doktorantka wprowadza w nim iteracyjną procedurę dekonwolucji van Citterta, będącą w istocie przybliżeniem operatora odwrotnego aproksymowanego obciętyym szeregiem Neumanna. Doktorantka bada właściwości tej procedury na przypadku testowym (wielomodalny sygnał fourierowski), stosując rozmaite kombinacje filtrów indukowanych przez schematy różnicowe.

Przeprowadzone testy pozwalają Doktorantce na dobre zrozumienie mechanizmów działania badanej procedury i wypracowanie wniosków co do dalszego jej stosowania w kontekście docelowego wariantu metody LES.

Rozdział 5 to pierwszy z rozdziałów poświęconych testowaniu autorskiego wariantu metody LES-ADM. W rozdziale tym przypadkiem testowym jest ewolucja podwójnie okresowej dwuwymiarowej matrycy wirów Taylora-Greena. Wybór takiego przypadku jest dobrze uzasadniony, ponieważ wiry TG w 2D są powszechnie stosowanym „benczmakiem” jako analityczne rozwiązanie równania Naviera-Stokesa. Doktorantka wykonuje również obliczenia testowe dla przypadku okresowego dwuwymiarowego przepływu chaotycznego (dwuwymiarowa „turbulencja”) badając ewolucję pola wirowości i globalne cechy przepływu (w szczególności ewolucję i widmo energii kinetycznej) za pomocą rozmaitych wariantów swojej metody. Generalnie, metoda ADM została użyta do przybliżonej rekonstrukcji skal utraconych w procesie filtrowania, a następnie wykorzystania ich do określenia „podsiatkowego” tensora naprężeń w filtrowanych równaniach wirowości. Podobnie jak w przypadku testów w rozdziale 4, Doktorantka wnioskuje konieczność odpowiedniego wyboru metody filtrowania. Stwierdza także, że jednoznaczna rekomendacja najlepszego filtra nie może być sformułowana.

W rozdziale 6 Doktorantka kontynuuje badania testowe, tym razem dla przypadku trójwymiarowego. Narzędziem obliczeniowym jest solver SAILOR, opracowany oryginalnie ponad 20 lat temu przez Artura Tyliszczaka i od tego czasu systematycznie ulepszany i rozwijany. SAILOR jest kodem opartym na kompaktowych schematach różnicowych wysokiego rzędu. Schemat całkowania względem czasu oparty jest na kombinacji jawnej i niejawnej metody Adamsa 2-ego rzędu, czyli jest schematem typu predyktor-korektor. Wyposażony w rozmaite modele

podsiatkowe, w tym oczywiście ADM, solver ten został wykorzystany przez Doktorantkę w testach trójwymiarowych. Przypadkiem referencyjnym był trójwymiarowy wariant periodycznego przepływu Taylora-Greena. W trakcie ewolucji początkowo regularnego układu struktur wirowych dochodzi do turbulizacji pola przepływu, co w rozprawie zilustrowano sekwencją obrazów pokazujących układ izopowierchni wybranego składnika wirowości. Przepływ referencyjny, a także referencyjne widma energii i widma dyssypacji energii zostały wyznaczone dla dwóch niewielkich liczb Reynoldsa (400 i 1600) metodą bezpośredniej symulacji (DNS). Otrzymane wyniki są pozytywnie weryfikowane względem wyników otrzymanych innymi metodami i dostępnymi w literaturze. W dalszej części rozdziału Doktorantka porównuje wyniki otrzymane metodą LES z różnymi wariantami ADM z wynikami DNS. Następnie, Doktorantka przeprowadza analogiczne testy dla przypadku przepływu z tzw. wymuszoną turbulencją izotropową, tj. periodycznego przestrzennie przepływu w sześciianie, wymuszanego w taki sposób, że całkowita energia kinetyczna płynu pozostaje niezmienna w czasie. Podobnie jak w przypadku wirów TG, przypadek referencyjny uzyskany jest metodą DNS, a otrzymane wyniki wykazują znakomitą zgodność z wynikami znanymi z literatury. Następnie Doktorantka prowadzi obszerne badania porównawcze dokładności różnych wariantów Jej metody i metod alternatywnych (Vreman, Smagorinsky). W konkluzji przeprowadzonych testów Doktorantka zauważa pewną przewagę metody LES-ADM z filtrami wyższych rzędów pod względem dokładności wyznaczenia wyższych momentów statystycznych rozkładów prędkości.

Rozdział 7 rozprawy Doktorantka poświęciła opisowi testom metody LES-ADM zastosowanej do modelowania spalania turbulentnego (model trójwymiarowy). Przedmiotem rozważań w tym rozdziale są dwa przypadki testowe, z których pierwszy (przebieg spalania w przepływie z przestrzennie okresowym, jednorodnym i izotropowym polem turbulencji) ma charakter przygotowawczy i służy ocenie wpływu różnych wariantów na przybliżonej dekonwolucji ADM na skład widmowy temperatury i udziału paliwa i utleniacza. Interesujące jest także porównanie przebiegów maksymalnej temperatury w czasie, które pokazuje, że jedynie modele ESF zapewniają dość dokładną predykcję czasu inicjacji procesu spalania. Testowana metoda ADM daje tu znaczny błąd (inicjacja procesu jest przedwczesna), ale i tak działa lepiej niż model LCM.

Zwieńczeniem kampanii testowej autorskich metod LES-ADM jest przeprowadzenie symulacji procesu spalania w swobodnym strumieniu wstępnie wymieszanego paliwa z utleniaczem do przestrzeni wypełnionej gorącym powietrzem. Tak sformułowany test stanowi poważne wyzwanie ze względu na zmienne w czasie i przestrzeni parametry strumienia, brak jednorodności/izotropii i szerokie spektrum skali przestrzennej struktur wirowych. W rozdziale tym Doktorantka przeprowadza złożoną procedurę badania wpływu ustawień autorskiego solwera (wybór rodzaju i kombinacji filtrów, liczba iteracji dekonwolucji metodą van Citterta) wyznaczając skład widmowy pól temperatury i udziałów składników chemicznych, a także pola tempa reakcji chemicznej. Po tym etapie (zwanym analizą a priori) Doktorantka przeprowadza testy z pełną sekwencją reakcji chemicznych i ich etapów, porównując wyniki uzyskane autorskim solwerem LES-ADM i metodą symulacji bezpośredniej DNS. Doktorantka pokazuje przebiegi czasowe dwóch wielkości: udziału pośredniego składnika reakcji HO_2 oraz maksymalnej temperatury w procesie. Okazuje się, że odpowiedni dobór ustawień solwera LES-ADM (wynikający z doświadczenia z testach a priori) umożliwia zadowalająco dokładne wyznaczenie przebiegu temperatury, i to w dość szerokim zakresie liczb Reynoldsa. Przewidywania przebiegu czasowego maksymalnej wartości frakcji HO_2 obarczone jest większym błędem, w szczególności zanik tej frakcji jest zbyt wczesny (tu ponownie najlepiej spisuje się model ESF), chociaż błąd ten maleje ze wzrostem liczby Reynoldsa.

Rozdział 8 zawiera wnioski końcowe, formułowane ostrożnie rekomendacje, a także uwagi na temat ewentualnych kierunków dalszych badań. Doktorantka widzi tu perspektywy dalszego rozwoju metod LES-ADM w oparciu o wykorzystanie metod optymalizacji i uczenia maszynowego.

Praca zawiera także dwa załączniki, z których szczególnie interesujący jest Załącznik B poświęcony sformułowaniu i analizie metody ADM na siatkach niejednorodnych. Załącznik ten zawiera opis algorytmów i formuły niezbędne do implementacji filtrów i dekonwolucji (także członów nieliniowych) w przypadku stosowania takich siatek.

3. Ocena rozprawy, uwagi krytyczne/polemiczne i problemy do wyjaśnienia.

Oceniana rozprawa ma formę monografii naukowej prowadzącej czytelnika od przedstawienia aktualnego stanu wiedzy i rozwoju metody LES, poprzez dość kompletne omówienie podstaw teoretycznych do bardzo szczegółowej prezentacji wyników oryginalnych i wniosków końcowych. Znaczna, ponad przeciętna, objętość rozprawy wynika bezpośrednio z obszerności poruszanej tematyki oraz szerokiego repertuaru i złożoności testów opracowanych przez Doktorantkę metod. Decyzję Doktorantki o zamieszczeniu w pracy sporej dawki informacji nt. podstaw teoretycznych uważam za trafną. Taka konstrukcja pracy ułatwia czytelnikowi zrozumienie treści pracy bez nieustannego odwoływania się do innych źródeł. Słuszną decyzją Doktorantki było także przeniesienie części rozważań, mających w znacznym stopniu techniczny charakter do załączników. Z drugiej strony należy podkreślić, że zamieszczone w załącznikach informacje są bardzo wartościowe i stanowią element oryginalnego dorobku Doktorantki.

Struktura pracy jest logiczna i przejrzysta. Moje jedyne zastrzeżenie dotyczy miejsca, w którym Doktorantka formułuje cele pracy (str. 3). W moim przekonaniu sformułowanie celów pracy w sekcji 1.2 na stronach 3 i 4 jest przedwczesne. Moim zdaniem sformułowanie tezy oraz szczegółowych celów i etapów rozprawy powinno następować po zarysowaniu ogólnego stanu wiedzy (the state of the art.) w dziedzinie/obszarze, którego dotyczy rozprawa. Z prezentacji tego stanu powinna wynikać potrzeba podjęcia badań szczegółowych ujętych w rozprawie, nakierowanych na rozwinięcie i/lub realizację oryginalnych idei, uzupełnienie pewnych luk, dokonanie uogólnień, itp. Brak ogólnego kontekstu opisanego dopiero w rozdziale 2 powoduje, że sformułowanie celów pracy w sekcji 1.2 jest dość ogólnikowe, a tezy trzeba się domyślać.

Kolejna uwaga dotyczy kwestii edytorskich, a dokładnie czytelności wykresów. Generalnie, znakomita większość ilustracji na niewielkie rozmiary, zawiera natomiast z reguły kilka linii. Stosowanie różnego typu linii i różnych kolorów zwiększa czytelność, podobnie jak czyni to zabieg wstawiania powiększonego fragmentu (zoom). Doktorantka nie jest jednak do końca konsekwentna i część ilustracji, szczególnie w rozdziale 7, jest mało czytelna.

Imponującym elementem ocenianej rozprawy jest rozmiar bibliografii liczącej aż 352 pozycje. Jest to liczba godna obszernej monografii naukowej. Cytowania dobrane są starannie i celowo, w znakomitej większości dotyczą artykułów naukowych o

tematyce ściśle związanej z zakresem rozprawy. Nietrudno domyślić się jak gigantycznej pracy wymagało zebranie i uporządkowanie tego zbioru, nie wspominając o zapoznaniu się z zawartością merytoryczną, chociaż pobieżnie.

Bardzo poprawna i całkowicie zgodna z dobrymi praktykami jest także przedstawiona w pracy metodyka testowania zaproponowanych metod symulacyjnych. Doktorantka zaprezentowała sekwencję testów posługując się przypadkami o wzrastającej złożoności. Dla części z nich dostępne są rozwiązania analityczne, w pozostałych rozwiązanie referencyjne zostało uzyskane na drodze wysoko rozdzielczej symulacji bezpośredniej DNS. Przede wszystkim jednak praca przedstawia bardzo obszerne i wszechstronne porównania z alternatywnymi sformułowaniami LES, w tym metodami wykorzystującymi koncepcje lepkości turbulentnej (Smagorinsky, Vreman) i metodami opartymi na dekonwolucji. Ponadto, Doktorantka bada szczegółowo zachowanie rozmaitych wariantów autorskiej realizacji ADM, ocenia krytycznie otrzymane wyniki i, tak gdzie to właściwe, formułuje pewne rekomendacje. Zwraca uwagę krytycyzm i naukowa uczciwość Doktorantki, która nie próbuje forsować u Czytelnika przekonania, że Jej pomysły są zdecydowanie lepsze niż wszystkie wcześniejsze metody. W niektórych przypadkach padają stwierdzenia o nieoczekiwanym zachowaniu badanych metod i trudności we wskazaniu najlepszych ich wariantów. Świadczy to o dużej dojrzałości i wysokich standardach poznawczych Doktorantki.

Podczas lektury rozprawy nasunęły mi się liczne uwagi i komentarze. Przytoczę tu najważniejsze z nich, zwracając się z prośbą do Doktorantki o odniesienie się do nich w trakcie publicznej obrony.

1. Na stronie 18, w akapicie poprzedzającym wzór (2.18) pada stwierdzenie, że filtr odwrotny do zadanego może być przedstawiony w postaci rozwinięcia w szereg potęgowy. Istotnie – w teorii operatorów ograniczonych istnieje odpowiednie twierdzenie o zbieżności tzw. szeregu Neumanna. Operator filtrowania zadany poprzez konwolucję spełnia warunek organiczności o ile jądro uśrednienia jest całkowalne z kwadratem w R , co z reguły ma miejsce. Wówczas formuła (2.18) jest (zbieżnym) przybliżeniem $G^{-1}f$. Nie rozumiem zatem dlaczego w zdaniu poprzedzającym tę formułę pojawia się sugestia, że tak może nie być. Gdyby rzeczywiście tak nie było, obcięty szereg Neumanna nie stanowiłby rozsądnej aproksymacji operatora, w szczególności

zwiększanie wartości N_{ADM} nie prowadziłyby do zwiększenia dokładności formuły. Proszę o komentarz.

2. Na str. 38 Doktorantka wspomina o trudności stosowania kompaktowych schematów różnicowych w przypadku ogólniejszych warunków brzegowych niż zastosowane we wszystkich przypadkach w pracy warunki okresowe. To oczywiście słuszna uwaga. W tym kontekście narzuca się pytanie ogólne o sens stosowania metod różnicowych wysokiego rzędu (nawet kompaktowych) w przypadku konieczności stawiania ogólnych warunków brzegowych, w szczególności warunków typu otwartego, które sprzęgają ciśnienie i pochodne pola prędkości. Warunek ten ma bardzo naturalną postać, gdy problem początkowo-brzegowy dla układu Naviera-Stokesa jest postawiony w formie słabej (wariacyjnej), dzięki czemu nie następuje on żadnych trudności (nie licząc problemu ze stabilnością) w implementacji w ramach metody elementów skończonych. Jak wyobraża sobie Pani implementację takiego warunku w ramach CDS, tak, aby zachować wysoki rząd aproksymacji?
3. W kwestii właściwości solwera SAILOR narzuca mi się następujący komentarz. Zgodnie z opisem na str. 108-109, w solwerze tym zastosowany jest schemat całkowania po czasie typu predyktor-korektor, oparty na kombinacji jawnej i niejawnej dwukrokowej metody Adamsa. Jest to formalnie schemat drugiego rzędu. Rzecz w tym, że jest on wkomponowany w algorytm typu pressure-correction (krok P3 de facto poprzedza P2). O schematach tego typu wiadomo, że ich faktyczny rząd zbieżności względem czasu (w odpowiednich normach) jest mniejszy niż 2. Przy poprawnie sformułowanych warunkach brzegowych dla ciśnienia (periodyczne są w tej klasie) rząd ten jest równy $3/2$. Jak to wygląda (czy było to testowane) w przypadku SAILOR-a?
4. W zdaniu poprzedzającym wzory (5.8) (pole prędkości TGV) pada uwaga o maksymalizacji „fałszywej dyfuzji” dla wybranej orientacji kierunku ruchu płynu w matrycy wirów T-G. Proszę o wyjaśnienie tej kwestii.
5. W kontekście testu metody na przypadku trójwymiarowego przepływu Taylora-Greena narzuca się pytanie, czy liczby Reynoldsa 400 i 1600 (szczególnie ta pierwsza) są dostatecznie wielkie, aby uznać ruch za turbulentny. Widma energii pokazane na rysunku 6.4, szczególnie (a) i (b) pokazują, że inercjalny fragment widma ze skalowaniem Kolmogorowa w zasadzie nie istnieje. Czy

zatem powodem wyboru tych wartości Re była dostępność innych wyników z literatury (Brachet, Van Rees)?

6. Pod koniec str. 30 Doktorantka cytuje pracę Nikolau et al. [20], w której autorzy proponują procedurę optymalizacyjną konstrukcji dyskretnych i odwrotnych filtrów dla ADM, która eliminuje kosztowną obliczeniowo procedurę przybliżonego wyznaczania odwrotności filtra przewyższając pod względem wydajności o rząd wielkości metodę van Citterta. Z jakiego powodu metoda ta nie została zastosowana w pracy, skoro jest tak efektywna? Czy ma Pani plany, aby ją zaimplementować?
7. W testach przedstawionych w rozdziale 7 Doktorantka porównuje wyniki symulacji autorskich, bazujących na wykorzystaniu ADM do równań transportu pól frakcji chemicznych i entalpii, z wynikami uzyskanymi przy użyciu modelu Eulerowskich Pól Stochastycznych (ESF). Implementacja (nie wspominając o samym sformułowaniu!) EPS wydaje się być bardzo złożona. Czy jest ona dziełem Doktorantki?
8. Jaka może być przyczyna (przyczyny) lepszej dokładności przewidywania momentu inicjacji procesu spalania w testach a posteriori niż w testach a priori (Rozdział 7, wykresy na rys. 7.14 a,b versus rys. 7.31 i 7.33)?

4. Konkluzja

Przedłożona przez Panią mgr Lenę Caban rozprawę doktorską oceniam bardzo wysoko, a sformułowane wyżej uwagi krytyczne dotyczą kwestii edytorskich i, jako takie, mają znaczenie marginalne. Doktorantka podjęła się opracowania metody LES wykorzystujących przybliżoną dekonwolucję pozwalającą na rekonstrukcję struktur pola prędkości (a także sprzężonych z przepływem pól skalarnych) o wielkości poniżej szerokości filtra. Zastosowana metodyka uwzględnia efekt filtrowania skal ruchu płynu spowodowany dyskretyzacją przestrzenną, w tym wypadku opartą na wykorzystaniu kompaktowych schematów różnicowych wysokiego rzędu.

Doktorantka przeprowadziła wszechstronną i dobrze zaprojektowaną kampanię testową, opartą na wykorzystaniu sekwencji przypadków o wzrastającym stopniu złożoności, w tym przypadki przepływów trójwymiarowych, również sprzężonych z procesem spalania. Tam, gdzie było to możliwe, Doktorantka przedstawiła porównanie wyników autorskich z wynikami dostępnymi w literaturze, a uzyskanych

przy pomocy innych wariantów metody LES. W każdym z przypadków Doktorantka przeprowadziła krytyczną dyskusję otrzymanych wyników, formułując dobrze uzasadnione wnioski i, w niektórych przypadkach, także rekomendacje. Wnioski formułowane na bieżąco pod koniec każdego rozdziału oraz wnioski końcowe zostały sformułowane jasno i logicznie, ale jednocześnie z dużą dozą krytycyzmu świadczącego o pełnej świadomości Doktorantki ograniczeń proponowanych rozwiązań i konieczności kontynuowania poszukiwania jeszcze lepszych rozwiązań.

Przedłożona rozprawa jest napisana przejrzysto, a kolejne etapy przeprowadzonych badań doprowadziły do potwierdzenia postawionych w pracy tez badawczych. W moim przekonaniu uzyskane w pracy wyniki są oryginalne i przedstawiają dużą wartość naukową. Otwierają także nowe, obiecujące perspektywy rozwoju dokładnych i wydajnych obliczeniowo metod symulacji przepływów turbulentnych w reakcjami chemicznymi, w szczególności procesów spalania.

Mając powyższe na uwadze stwierdzam, że rozprawa Pani mgr Leny Caban spełnia wszystkie wymagania stawiane pracom doktorskim, zarówno ustawowe jak i te związane w najlepszych praktykach prowadzenia współczesnych badań naukowych. Dlatego bez wahania wnioskuję o dopuszczenie Panią mgr Lenę Caban do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Ponadto, biorąc pod uwagę zdecydowanie ponad przeciętny poziom naukowy przedłożonej rozprawy, a także wartość i oryginalność uzyskanych przez Doktorantkę wyników, zarówno pod względem poznawczym jak i potencjalnych zastosowań w praktyce inżynierskiej, a wreszcie to, że wyniki badań Doktorantki były już opublikowane w czasopiśmie i materiałach konferencyjnych o zasięgu międzynarodowym, wnioskuję o wyróżnienie rozprawy.

Prof. dr hab. inż. Jacek Szumbariski