

Dr hab. inż. Paweł Flaszynski, prof. IMP PAN

Gdańsk, 2024-10-14

Zakład Aerodynamiki

Instytut Maszyn Przepływowych

im. Roberta Szewalskiego

Polskiej Akademii Nauk

Tel: 58 5225 268

E-mail: pflaszyn@imp.gda.pl

Recenzja pracy doktorskiej

mgr. inż. Leny Caban

pt.: „Development of an approximate deconvolution method for modelling non-reactive and reactive turbulent flows”

1. Wstęp

Recenzja pracy doktorskiej została przygotowana na podstawie uchwały Rady Dyscypliny Naukowej Inżynieria Mechaniczna Politechniki Częstochowskiej nr 39/2024 z dnia 4 lipca 2024 roku oraz pisma, nr R-WIMil-BOD-5111.1.2024 z dnia 31.07.2024, przesłanego przez Panią prof. dr hab. inż. Małgorzatę Klimek, Dziekan Wydziału Inżynierii Mechanicznej i Informatyki.

Promotorem pracy doktorskiej mgr. inż. Leny Caban jest prof. dr hab. inż. Artur Tyliczszak, a promotorem pomocniczym dr inż. Agnieszka Wawrzak.

Motywacją podjęcia badań prezentowanych w pracy są wyzwania jakie stoją przed sektorami energetyki, transportu czy przemysłu chemicznego w zakresie redukcji emisji zanieczyszczeń będących efektem procesów spalania. Spalanie jest jednym z kluczowych procesów w układach energetycznych lub napędowych. Biorąc pod uwagę cele strategiczne, jakie są wyznaczane dla tych sektorów, wymagania dotyczące redukcji emisji dwutlenku węgla, dwutlenku siarki, tlenków azotu i sadzy oraz poprawa sprawności procesów konwersji energii i transportu, istnieje potrzeba rozwoju metod umożliwiających skuteczne i dokładne modelowanie spalania.

Spalanie jest procesem, który charakteryzuje formowanie się i rozwój struktur turbulentnych o szerokim zakresie skal przestrzenno-czasowych w obszarze z reakcjami chemicznymi oraz dużym zakresem i gradientem temperatury. Poprawne modelowanie całego procesu jest silnie zależne od dokładności z jaką przewiduje się rozwój struktur wirowych, z jednej strony wpływających na proces mieszania paliwa z utleniaczem, a z drugiej na ewolucję płomienia, dystrybucję temperatury i produktów spalania.

Zatem obniżenie emisji zanieczyszczeń i poprawa sprawności procesów energetycznych zależą między innymi od rozwoju metod numerycznych umożliwiających dokładne modelowanie procesów spalania, zrozumienie zachodzących zjawisk, a w efekcie kontrolowanie tego procesu. Powszechnie wiadomo, że dokładne modelowanie procesu spalania wymaga zastosowania metod Direct Numerical Simulations lub Large Eddy Simulations. Przy czym pojawia się problem zastosowania odpowiednich schematów numerycznych wysokiego rzędu, oraz w przypadku LES, metod filtrowania skal przestrzennych i modeli struktur tzw. podsiatkowych.

W swojej pracy Doktorantka koncentruje się na rozwoju metody Large Eddy Simulations z wykorzystaniem metody przybliżonej dekonwolucji (approximate deconvolution method - ADM), czego efektem jest poprawa jakości modelowania drobnoskalowych struktur wirowych tłumionych na etapie filtrowania.

Zaproponowana metoda przybliżonej dekonwolucji została zaimplementowana w programie SAILOR (Spectral And Compact Differences Low Mach number LES) rozwijanym na Politechnice Częstochowskiej od ponad 20 lat.

Wobec powyższego można jednoznacznie stwierdzić, że wybrana tematyka pracy doktorskiej ma istotne znaczenie poznawcze i aplikacyjne oraz spełnia kryteria prac w ramach dyscypliny „Inżynieria mechaniczna”.

2. Charakterystyka pracy i uwagi ogólne

Praca doktorska mgr. inż. Leny Caban została napisana w języku angielskim i jest zredagowana na 228 stronach. Materiał prezentowany w pracy ujęto w 8 rozdziałach i dwóch załącznikach. Pierwszy rozdział poprzedzony jest spisem rysunków i tabel. Natomiast na końcu pracy zostały zamieszczony spis literatury zawierający 352 pozycje, co jest rzadko spotykaną ilością w pracach doktorskich. W

pracy Doktorantka posługuje się dużą ilością skrótów i symboli, one są w tekście wyjaśniane, ale warto byłoby przy tak znacznej ich ilości zamieścić spis najważniejszych oznaczeń.

W pierwszym rozdziale Doktorantka krótko przedstawia motywację podjętej pracy oraz cel pracy, którym jest rozwój metody Large Eddy Simulations z wykorzystaniem metody przybliżonej dekonwolucji (approximate deconvolution method - ADM) oraz schematów wysokich rzędów w zastosowaniu do rekonstrukcji drobnych skal w przepływie turbulentnym bez i z reakcjami chemicznymi.

Cele zostały określone następująco:

- opracowanie kompaktowych schematów różnicowych wysokiego rzędu osiągających rozdzielczość charakterystyczną dla metod spektralnych,
- kompleksowa analiza metody ADM,
- wykonywanie obliczeń silnie niestacjonarnych zjawisk w przepływach turbulentnych takich jak przejście laminarno-turbulentne w izotermicznych przepływach nieściśliwych, samozapłon, czy propagacja płomienia w przepływach z reakcjami chemicznymi.

W ostatniej części pierwszego rozdziału Doktorantka wymienia swoje osiągnięcia: współautorstwo (jako pierwszy autor) 5 artykułów w czasopiśmie, 9 w materiałach konferencyjnych, 3 rozdziały w monografiach, 19 prezentacji na konferencjach lub seminariach, nagrody i wyróżnienia. Spośród których należy podkreślić nagrodę na Konferencji Mechaniki Płynów w konkursie im. Prof. J.W. Elsnera oraz Fulbright Junior Research Award.

W drugim rozdziale Doktorantka przedstawia aktualny stan wiedzy na temat metod modelowania przepływów turbulentnych i procesów spalania. Wymienia metody DNS, LES i RANS (Reynoldsa Averaged Naviera-Stokesa), koncentrując się na cechach modelowania LES.

Rozdział 3 zawiera studium literatury na temat metod numerycznych wysokiego rzędu stosowanych w mechanice płynów (CFD). Ponadto szczegółowo zostały omówione metody wysokiego rzędu wykorzystywane pracy, w szczególności metody dyskretyzacji przestrzennej, interpolacji i filtrowania. Nowatorskim elementem badań przedstawionych w tym rozdziale jest sformułowanie schematów bardzo wysokiego

rzędu osiągając dokładność aproksymacji do 20-ego, 30-ego rzędu, czy 40-ego jak podano w pierwszym rozdziale, osiągających rozdzielczość spektralną.

W rozdziale 4 Doktorantka przedstawiła teorię metody ADM (approximate deconvolution method) wraz ze szczegółowym opisem i testami iteracyjnej metody dekonwolucji van Citterta, która jest wykorzystana w pracy do analizy przepływu turbulentnego, i jak podkreśla Doktorantka, w analizie zagadnień w wielu różnych dziedzinach nauki, np. akustyce, czy obróbce i analizie obrazu.

Zastosowanie rozwijanej metody ADM do analiz zagadnień przepływowych prezentowane jest w kolejnych rozdziałach. W pierwszym kroku, w rozdziale 5, Doktorantka przedstawia testy dokładności schematów wysokiego rzędu wykorzystując przypadek ewolucji wirów Taylora-Greena oraz analizę wyników LES-ADM przypadku jednorodnego izotropowego dwuwymiarowego przepływu turbulentnego i ich porównane z wynikami DNS. Podsumowując ten rozdział Doktorantka stwierdza, że dokładność metody ADM zależy od zastosowanej metody dyskretyzacji i odpowiedniego doboru filtrów, i nie można jednoznacznie określić, który filtr powinien być używany dla danego algorytmu rozwiązania. W tej sytuacji pytanie czy można sformułować ogólne rekomendacje dotyczące zastosowania metody, albo czy i jakie ograniczenia można nałożyć przy doborze odpowiednich filtrów.

W kolejnym rozdziale (6), omówione są wyniki zastosowania metody LES-ADM do modelowania nieściśliwego, trójwymiarowego przepływu turbulentnego w oparciu o dwa przypadki testowe: wiry Taylor-Green i jednorodnej turbulencji izotropowej. Obliczenia DNS i LES zostały wykonane programem SAILOR, rozwijanym na Politechnice Częstochowskiej, oraz porównane z danymi dostępnymi w literaturze. W pierwszym przypadku (Taylor-Green vortices) zaobserwowano, że rozwiązania dla różnych stosowanych filtrów (rys. 6.17) różnią się od siebie w znacznie mniejszym stopniu niż w sytuacji, gdy w procedurze ADM zastosowano filtr indukowany dyskretyzacją. Ponadto, w późniejszym etapie symulacji, gdy przepływ turbulentny jest już dobrze rozwinięty, zgodność z danymi DNS jest bardzo dobra

W przypadku wymuszonej jednorodnej turbulencji izotropowej, także wykonano obliczenia DNS za pomocą kodu SAILOR i w oparciu o bardzo dobrą zgodność z danymi literaturowymi, te wyniki potraktowano jako referencyjne dla wyników metodą LES. Doktorantka wykonała szereg obliczeń i przedstawiła porównanie wpływu

różnych modeli podsiatkowych i metod dekonwolucji. Interesującym wnioskiem jest stwierdzenie, że we wszystkich analizowanych przypadkach uzyskano bardzo zbliżone wyniki, a metoda interpolacji nie ma tak dużego wpływu na dokładność rozwiązania, jak w przypadku modelowania zagadnień z przejściem laminarno-turbulentnym (przykład Taylor-Green vortices).

Bardzo interesujące wyniki zostały przedstawione w rozdziale 7, gdzie metoda ADM jest wykorzystana do modelowania dwóch przypadków reprezentatywnych dla procesów spalania. Pierwszy z nich dotyczy wymuszonej homogenicznej turbulencji izotropowej, gdzie paliwo jest wstępnie zmieszane z utleniaczem. Drugi przypadek dotyczy propagacji płomienia w trójwymiarowej turbulentnej strudze, gdzie paliwo jest skierowane przeciwbieżnie do strugi gorącego powietrza. Paliwem jest mieszanina wodoru z azotem. Należy podkreślić, że dobór paliwa w analizowanym zagadnieniu wpisuje się w aktualne trendy badań i możliwości rozwoju technologii wodorowych oraz jego wykorzystania w procesach spalania.

Doktorantka w tej części pracy poddaje analizie dokładność metody ADM i wpływ jej parametrów na przewidywanie samozapłonu i ewolucji płomienia na jego wczesnym etapie. Obliczenia wykonano programem SAILOR, natomiast CHEMKIN jest wykorzystany do obliczeń reakcji chemicznych, a cały proces jest opisany 19 reakcjami.

W obu przypadkach wyniki LES z wykorzystaniem metod ADM, ESF (Eulerian stochastic fields) i LCM (laminar chemistry model) są porównywane z wynikami DNS. W pierwszym przypadku (wymuszonej homogenicznej turbulencji izotropowej) stwierdzono, że dla wszystkich modeli uzyskano podobną szybkość wzrostu temperatury podczas ewolucji płomienia. Jednak obserwuje się wyraźne różnice w wyznaczonym początku zapłonu (Fig.7.14), a najlepszą zgodność z wynikami DNS uzyskano dla modelu ESF. Doktorantka wyjaśnia co jest prawdopodobną przyczyną wcześniejszego zapłonu w przypadku ADM, ale interesującym byłoby porównanie energii kinetycznej dla wybranych przypadków tak, jak to pokazano na Fig.7.2. Poza tym temperatura w pierwszej fazie przed zapłonem, od czasu $t=0$ na Fig.7.14, jest różna dla różnych przypadków. Czy ta różnica ma wpływ na początek zapłonu?

Drugi analizowany dotyczy spalania w przepływie dwóch przeciwbieżnych strug. Podobnie do poprzednich przypadków model obliczeniowy jest dobrze opisany poza jedną niejasnością dotyczącą liczb Re . W pracy podano, że w zależności od długości

fazy wstępnej obliczanej metodą DNS wyznaczono różne wartości fluktuacji prędkości u_{rms} , które są wykorzystane do określenia liczby Re . Jednak w tabeli 7.5 podano po trzy wartości u_{rms} dla kolejnych czasów t_1 , t_2 i t_3 , czyli HRe , MRe i LRe . Niestety nie jest jasne z czego wynikają różnice dla np. $HRe-1$, $HRe-2$ i $HRe-3$.

Doktorantka wykonała szereg interesujących porównań, i co należy jeszcze raz podkreślić, w oparciu o czasochłonne obliczenia. Przedstawione wyniki wyraźnie wskazują na trudność jednoznacznego wyboru najlepszej metody. Widoczne są pewne różnice w przewidywaniu początku zapłonu, czy przebiegu procesu spalania, co widać np. na rys. 7.30 i 7.32, gdzie pokazano ewolucję udziału masowego HO_2 . Jednak porównanie rozkładu średniej temperatury wskazuje na bardzo dobrą zgodność wszystkich prezentowanych wyników LES z wynikami DNS dla niskiej liczby Re . W przypadku wyższej liczby Re występują pewne rozbieżności, ale jak wyjaśnia Doktorantka one mogą być spowodowane niewystarczającą rozdzielczością siatki DNS do wyznaczenia struktur na poziomie skali Kolmogorowa.

Należy ostatecznie stwierdzić, że wykonana w szerokim zakresie analiza wykazała znaczenie wpływu metod numerycznych stosowanych do dyskretyzacji równań transportu opisywanego przepływu oraz parametrów dyskretnych filtrów stosowanych w procedurze dekonwolucji.

3. Uwagi szczegółowe

Praca jest napisana w sposób jasny i komunikatywny, a materiał graficzny jest opracowany starannie. Można zauważyć kilka pomyłek, czy możliwych korekt do wprowadzenia celem uniknięcia nieporozumienia, np.:

- Na rys. 7.15. pokazano powiększenie fragmentu wykresu, gdzie pokazano przyrost temperatury odpowiadający początkowi zapłonu i zamieszczono ten fragment w górnej części wykresu. Warto byłoby zamieścić to powiększenie np. w ramce, bo obecnie krzywe sugerują zmiany w zakresie 1600K – 2000K. Podobny komentarz można zamieścić w przypadku innych podobnych wykresów.
- W podpisie Fig.6.23 chyba powinno być (DI), a nie (N-DI).

Wyniki przedstawione w pracy doktorskiej skłaniają do sformułowania poniższych pytań.

1. Na rys. 7.14 pokazano zmianę temperatury w czasie. W pierwszej fazie przed zapłonem, od czasu $t=0$, wartość temperatury jest różna dla różnych przypadków. Czy ta różnica ma wpływ na początek zapłonu?
2. Na rys. 6.22a jest pokazana ewolucja energii kinetycznej dla różnych metod. Co jest przyczyną spadku energii w pierwszej fazie w przypadku DNS podczas, gdy pozostałe metody prezentują jej przyrost. Na stronie 126 wyjaśniono, że wyniki DNS nie zależą od warunków początkowych, ale proszę o komentarz czy to samo można powiedzieć o wynikach LES i jeśli tak, to jaki to ma wpływ na czas obliczeń?
3. Doktorantka wyjaśnia w pracy, że niewłaściwie dobrany filtr w metodzie ADM może być odpowiedzialny za dodawanie нефизycznej energii do struktur o małej skali, co często prowadzi do niestabilności symulacji numerycznych. Czy można ocenić poziom/ilość tej dodatkowej energii?
4. W pracy omówione są przypadki charakteryzujące rozwój turbulencji i przejście laminarno-turbulentne oraz przedstawiono zastosowanie metody LES-ADM w przepływie turbulentnym z reakcjami chemicznymi, czyli spalaniem. Czy są jakieś ograniczenia w zastosowaniu tej metody w konfiguracjach z warstwą przyścienną? Czy doświadczenia dotyczące zastosowania odpowiednich filtrów mogą być przeniesione na takie przypadki?
5. Proszę o podanie informacji dotyczące czasu obliczeń przykładowych przypadków. Czy czas obliczeń jest silnie zależny od doboru metody i analizowanych filtrów? Jak proponowane schematy bardzo wysokich rzędów wpływają na wymagania np. pamięci w trakcie obliczeń?

4. Podsumowanie

Podsumowując recenzowaną pracę uważam, że Pani mgr inż. Lena Caban zrealizowała założone cele. Doktorantka przedstawiła bardzo interesujące i wartościowe wyniki, istotne dla rozwoju metod numerycznych i modelowania Large Eddy Simulations. Rozwijana i implementowana w programie SAILOR metoda przybliżonej dekonwolucji (approximate deconvolution method - ADM) jest wykorzystywana do efektywnego modelowania złożonych procesów zachodzących w przepływach turbulentnych ze spalaniem. Niewątpliwą wartością prezentowanej

pracy jest także analiza spalania z wykorzystaniem mieszaniny azotu z wodorem jako paliwa, co jest aktualnym zagadnieniem badanym w renomowanych ośrodkach badawczych.

Uważam, że praca doktorska Pani mgr. inż. Leny Caban pt.: „Development of an approximate deconvolution method for modelling non-reactive and reactive turbulent flows” spełnia wymagania określone w ustawie „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce” stawiane rozprawom doktorskim i wnoszę o dopuszczenie jej do dalszych etapów postępowania o nadanie stopnia doktora nauk inżynieryjno-technicznych w dyscyplinie Inżynieria Mechaniczna.

Biorąc pod uwagę istotny wkład w rozwój metody przybliżonej dekonwolucji i jej zastosowanie do modelowania złożonego zagadnienia jakim jest przepływ turbulentny ze spalaniem oraz ponadprzeciętny poziom naukowy prezentowany w pracy, czego dowodzi także dorobek mgr. inż. Leny Caban przedstawiony w pierwszym rozdziale, wnoszę o wyróżnienie pracy doktorskiej.