

Gdańsk, 3 września 2022 r.

prof. dr hab. inż. Jacek Pozorski
Instytut Maszyn Przepływowych PAN
ul. Fiszera 14, 80-231 Gdańsk
tel.: 58 5225145, e-mail: jp@imp.gda.pl

Recenzja rozprawy doktorskiej mgra inż. Jakuba Stempki
pt. **Modelowanie numeryczne zapłonu wymuszonego
i samozapłonu w turbulentnych przepływach wielofazowych**

Niniejszą opinię opracowano na życzenie prof. dr hab. inż. Małgorzaty Klimek, Dziekan Wydziału Inżynierii Mechanicznej i Informatyki Politechniki Częstochowskiej (PCz), wyrażone w piśmie z dnia 22 sierpnia 2022 roku.

1. Ogólna charakterystyka rozprawy

Praca doktorska została przygotowana pod kierunkiem prof. dr. hab. inż. Artura Tyliczaka. Przedmiotem zainteresowania Doktoranta są zagadnienia przepływów turbulentnych z reakcjami chemicznymi, a w szczególności modelowanie matematyczne i metody obliczeniowe. Tematyka turbulencji – w tym warstwa przyścienna, przepływy w strugach, zagadnienia spalania, symulacje wielkowirowe – jest od lat rozwijana na wysokim poziomie naukowym w macierzystej jednostce, czyli w Katedrze (Instytucie) Maszyn Ciepłych PCz, Zapewniło to Doktorantowi znakomitą pozycję wyjściową do podjęcia trudnych badań będących przedmiotem niniejszej rozprawy: jest to analiza obliczeniowa zagadnień zapłonu i samozapłonu w przepływach dyspersyjnych, w których paliwo występuje początkowo w fazie ciekłej. Zagadnienia te cechuje bogata fizyka, którą należy ująć przynajmniej na pewnym poziomie szczegółowości, a do modelowania numerycznego niezbędne są zaawansowane narzędzia w postaci wydajnego równoległego kodu obliczeniowego, najlepiej wysokiego rzędu dokładności. Promotor rozprawy jest autorem takiego właśnie, skutecznego i sprawdzonego kodu, testowanego wcześniej w różnorodnych konfiguracjach przepływów turbulentnych (w tym strug), także ze spalaniem. Zadaniem Doktoranta było opracowanie procedur ujmujących ruch i odparowanie kropeł paliwa ciekłego w sprzężeniu z dynamiką fazy nośnej (utleniacz w fazie gazowej), ich weryfikacja oraz zastosowanie do badania początkowej fazy spalania, czyli zapłonu i samozapłonu. Tak postawione zadanie wymaga szczegółowego opisu fizyki zjawiska, zwłaszcza w zakresie interakcji turbulencja-chemia (ang. TCI), co skutkuje dużymi i czasochłonnymi zadaniami obliczeniowymi. Z tego powodu, rozważano dwie konfiguracje geometryczne będące uproszczeniem sytuacji rzeczywistych. Należy przyjąć, że dalekosiężną motywacją Doktoranta było lepsze rozpoznanie możliwości obliczeniowych w zakresie analizy procesów spalania w urządzeniach spotykanych w praktyce przemysłowej, takich jak palniki na paliwo ciekłe w turbinach gazowych, silniki tłokowe z zapłonem samoczynnym oraz iskrowym.

Natomiast bezpośrednią motywację stanowiły: (i) wciąż nie w pełni rozpoznane aspekty fizykalne zjawisk zapłonu i samozapłonu w turbulentnych przepływach dwufazowych oraz (ii) próba oceny wpływu aspektów numerycznych (w tym metod dyskretyzacji) na wyniki. Jak słusznie zauważa Autor, możliwości eksperymentalne w zakresie badań początkowej fazy i inicjacji procesu spalania są ograniczone, natomiast szczegółowe analizy obliczeniowe uwzględniające pełne rozwiązanie wszystkich skal przepływu (metoda DNS) w połączeniu z odwzorowaniem procesu atomizacji strugi paliwa, przemiany fazowej i spalania pozostają wciąż poza zasięgiem współczesnych możliwości obliczeniowych. Dla tych przyczyn, przyjęta w rozprawie metoda postępowania, omówiona poniżej, odpowiada obecnemu stanowi wiedzy. Zakres podjętych i zrealizowanych przez Doktoranta badań oraz stopień ich trudności z pewnością wypełniają oczekiwania stawiane pracom doktorskim. Od strony klasyfikacji formalnej, rozprawa sytuuje się w dyscyplinie *Mechanika* (obecnie: *Inżynieria Mechaniczna*).

Struktura i zawartość pracy doktorskiej

Rozprawę podzielono na dwie części. Pierwsza z nich, nazwana Wprowadzeniem, rozpoczyna się od przeglądu literatury (rozdział 1) na temat zjawisk zapłonu i samozapłonu w układach jednofazowych (gaz), a następnie dwufazowych (gazowy utleniacz i krople paliwa nazywane sprejem), a także modelowania numerycznego tych zjawisk. W rozdziale 2 przedstawiono motywację oraz cel i zakres pracy. Sformułowano także tezę rozprawy, która mówi, że wyniki symulacji zjawiska zapłonu zależą zarówno (literalnie: „w podobnym stopniu”) od (i) modeli przepływu dyspersyjnego jak też (ii) od ich numerycznej implementacji (co nie jest zbyt jasne) i metod dyskretyzacji wynikowych równań. Po szczegółowym zapoznaniu się z rozprawą stwierdzam, że tak postawioną tezę można uznać za udowodnioną. Rozdział 3 zawiera omówienie wyjściowych równań ewolucji przepływów reaktywnych oraz związków konstytutywnych i kinetyki chemicznej, a także sformułowanie metody dużych wirów i przegląd domknięć tensora naprężeń podsiatkowych. W rozdziale 4 w sposób zwięzły przedstawiono cechy podstawowych reżimów spalania, kinetycznego i dyfuzyjnego, także w przepływie turbulentnym, po czym następuje krótki przegląd podstawowych modeli spalania turbulentnego oraz mechanizmów kinetyki chemicznej. W rozdziale 5 omówiono proces atomizacji strugi cieczy, rozkłady wielkości kropeł, równanie ruchu kropeł oraz modele odparowania; są to elementy składowe proponowanego podejścia (submodele), istotne dla dalszej części pracy. Rozdział 6 zawiera omówienie używanego w pracy algorytmu obliczeniowego, ze szczególnym uwzględnieniem wprowadzonych przez Doktoranta modyfikacji, ważnych w przedstawianej rozprawie, takich jak implementacja sprzężenia ruchu faz (interpolacja parametrów gazu do położenia kropeł, wyznaczanie pochodzących od fazy dyspersyjnej członów źródłowych w równaniach ruchu gazu). Opisano dyskretyzację przestrzenną (schematy typu TVD i WENO).

W drugiej części rozprawy, nazwanej Wynikami, udokumentowano rezultaty badań Autora. W rozdziale 7 zamieszczono wyniki obliczeń testowych wykonanych bez rozwiązywania pełnego układu równań przepływu. Dotyczą one submodeli odparowania oraz porównania jednostopniowego (globalnego) i szczegółowego mechanizmu kinetyki chemicznej dla etanolu w stanie gazowym wstępnie zmieszanego z powietrzem. Na bazie tych doświadczeń, zestawiono wyniki obliczeń czasu samozapłonu kropli paliwa. Rozdział 8 jest najobszerniejszy: przedstawiono w nim wyniki wielowariantowych analiz obliczeniowych zjawiska samozapłonu oraz zapłonu iskrowego w konfiguracji warstwy ścinającej (strefy

zmieszania), której grubość rośnie w czasie. Wreszcie, badania numeryczne zjawiska samozapłonu oraz dalszej fazy procesu spalania w konfiguracji strugi współprądowej przedstawiono w rozdziale 9. Podsumowanie rozprawy wraz z krótką dyskusją zawarto w rozdziale 10. Ponadto w załączniku A przedstawiono zestaw reakcji w zredukowanym mechanizmie kinetyki spalania etanolu oraz parametry fizyczne tegoż paliwa. Piśmiennictwo jest obszerne (liczy 167 pozycji cytowanej literatury) i obejmuje wiele istotnych prac w zakresie turbulencji, spalania, przepływów dyspersyjnych, jak również tematyki obliczeniowej mechaniki płynów, w tym zawansowanych metod dyskretyzacji przestrzennej i symulacji wielkowirowych.

2. Szczegółowa ocena rozprawy

Układ rozprawy jest charakterystyczny dla prac doktorskich: na tle wprowadzenia do podejmowanej tematyki postawiono tezę, po czym następuje szczegółowy opis zastosowanej metody (model fizyczny, model numeryczny) wraz z autorskim wdrożeniem nowych elementów do istniejącego kodu obliczeniowego i szczegółowym omówieniem uzyskanych wyników. Pracę czyta się dobrze: jest ciekawa, a jej struktura zasadniczo przejrzysta i logiczna. Doktorant przekonująco uzasadnił celowość wyboru tematyki rozprawy na kanwie przeglądu literatury przedmiotu.

Na odpowiednim poziomie szczegółowości i z dobrym zrozumieniem złożonych zagadnień omówił przyjęte modele cząstkowe, w tym konieczne uproszczenia. Uważam w szczególności, że w rozdziale 4 rozprawy Autorowi udało się z sukcesem przedstawić trudne zagadnienie modelowania spalania turbulentnego, co wskazuje na jego dobre rozeznanie złożonej problematyki interakcji turbulencja-chemia. Równie ciekawie przedstawiono zagadnienie zapłonu w przepływach dyspersyjnych (rozd. 1.1.4).

Odnosnie modeli odparowania kropeł, przedstawione w rozdziale 7.1 interesujące wyniki dokumentują różnice między nimi w uproszczonej konfiguracji (kropla statyczna, brak przepływu). Warto dodać, że ostatnich latach intensywnie rozwija się podejście obliczeniowe do przepływów dyspersyjnych, w którym zamiast cząstek punktowych (PP) rozważa się w DNS cząstki/krople o skończonej średnicy (ang. *particle-resolved simulation*) i ich dynamikę, przy naturalnie ujętym międzyfazowym sprzężeniu pędu. Jeśli istnieją takie prace ujmujące również przemianę fazową oraz efekty konwekcji swobodnej, być może pozwoliłoby to na uzasadnienie wyboru jednego modelu odparowania do dalszych symulacji w przybliżeniu PP? Przy braku szczegółowych danych eksperymentalnych, Doktorant nie jest w stanie tej kwestii przesądzić. Natomiast wpływ mechanizmu kinetyki chemicznej jest łatwiejszy do oceny (co pokazano w rozdziale 7.2), a przeszkodą w wyborze lepszego fizycznie mechanizmu bardziej szczegółowego jest głównie koszt obliczeniowy. Z drugiej strony, Doktorant wykazał, że wpływ mechanizmu kinetyki na czas samozapłonu jest ograniczony (rozdział 7.3).

Przechodząc teraz do głównej części oryginalnego osiągnięcia Doktoranta: wyniki dla zmiennej w czasie strefy zmieszania, opisane w rozdziale 8, są bardzo obszerne i obejmują zarówno analizę parametryczną wpływu czynników fizycznych (polidispersyjność początkowego rozkładu kropeł), niepewności modelowania (3 warianty modelu odparowania kropeł), intensywności turbulencji, wpływ modelu spalania turbulentnego oraz mechanizmu kinetyki chemicznej. Mimo braku walidacji (z braku szczegółowych danych referencyjnych), uważam te analizy za bardzo wartościowe osiągnięcie Doktoranta. Umożliwiają one pewien wgląd w istotę procesu samozapłonu, a także zapłonu iskrowego. Zapewne nie bez znaczenia

jest tu fakt, że symulacje zostały przeprowadzone w stosunkowo dobrej rozdzielczości przestrzennej i czasowej (ang. *well-resolved*), co zdaje się być potwierdzone przez niewielki wpływ modelu spalania turbulentnego oraz niski poziom lepkości podsiatkowej w stosunku do lepkości molekularnej (str. 88). Drugim obszarem zainteresowania Doktoranta był wpływ schematu dyskretyzacji (TVD, WENO). Te analizy również są ciekawe i użyteczne – zaobserwowano różnice (m.in. w czasie samozapłonu), natomiast trudniej jest o jednoznaczne wnioski co do wyższości jednego z badanych schematów nad drugim. Rola członów nieliniowych w układach równań opisujących przepływy, także reaktywne, jest oczywista i kluczowa, natomiast ich analiza numeryczna jest w ogólności dalece nieoczywista. W rozprawie potwierdzono znaczenie schematu dyskretyzacji i jego wpływ na uzyskane wyniki, natomiast kwestia optymalnego doboru pozostaje otwarta (ostatni punkt na str. 122).

Analizy samozapłonu w konfiguracji zmiennej w czasie strefy mieszania zostały następnie (rozdział 9) powtórzone dla przypadku strugi osiowosymetrycznej, bliskiego sytuacji praktycznym. W tym przypadku możliwa była częściowa walidacja na drodze porównania profili średniej prędkości i temperatury z eksperymentem. Uzyskano dość dobrą zgodność; podano pewne możliwe przyczyny rozbieżności. Podobnie jak w strefie mieszania, rozdzielczość przestrzenna symulacji LES była dobra, o czym pośrednio świadczą niewielkie różnice wyników uzyskanych dla pięciu testowanych modeli tensora naprężeń podsiatkowych.

W zakresie analiz zapłonu wymuszonego (rozdział 8.3), do zestawu parametrów kontrolnych zjawiska dochodzą jeszcze: intensywność turbulencji oraz rozmiar iskry. Ich wpływ został szczegółowo zbadany w pracy. Natomiast przeprowadzone analizy wpływu momentu zapłonu na prawdopodobieństwo jego sukcesu, czyli inicjacji trwałego procesu spalania, wymagałyby zapewne dodatkowego komentarza (zob. Pytanie 4 poniżej).

Opisane powyżej osiągnięcia, należy udokumentowane w rozprawie, składają się na oryginalne rozwiązanie przez Doktoranta problemu naukowego. Dla lepszego zrozumienia kilku kwestii szczegółowych, proszę jeszcze o odpowiedź na następujące pytania:

1. Ponieważ jako model spalania turbulentnego w rozprawie wykorzystywana jest metoda stochastycznych pól Eulerowskich (ang. ESF), pożądane byłoby wyjaśnienie, jakie są zalety ESF w stosunku do metody transportowanego PDF? Ponadto: czy w równaniu ewolucji pól stochastycznych (6.14) dla entalpii ξ_h wystąpi człon źródłowy ω_h (jeśli tak, to co fizycznie reprezentuje)?
2. Strefa mieszania (rozdz. 8.1) jest przykładem swobodnego przepływu ścinającego; wiadomo, że turbulencja w takich przepływach nie jest izotropowa (w ogólności nie jest też homogeniczna). Czy nałożenie pola izotropowego na początkowy profil prędkości w równaniu (8.1) nie jest zbyt silną ingerencją w naturę przepływu w strefie mieszania?
3. Odnośnie wyników rozdziału 8.2.2: interesujące byłoby stwierdzenie, czy występuje korelacja stref samozapłonu („regiony inicjalizacji płomienia”, rys. 8.5) z lokalnymi strukturami pola prędkości określonymi np. przez niezmiennik Q (proporcjonalny do $\Omega^2 - S^2$)? NB: Korelacja taka, w formie preferencyjnej koncentracji, występuje w dyspersyjnych przepływach turbulentnych. Czy Autor próbował ją określić we własnych badaniach? Ponadto, bardzo ciekawe są wyniki dla indeksu Takeno (TI , rys. 8.7). Być może ich interpretację ułatwiłaby prezentacja w formie mapy warunkowej rozkładu $TI(\mathbf{x}/T)$ (jedynie dla obszaru reakcji).

4. Odnośnie rozdziału 8.3: wydaje się, że z praktycznego punktu widzenia moment zapłonu t_0 powinien być tak dobrany, aby uzyskać prawdopodobieństwo sukcesu zapłonu na poziomie (bliskim) 100 %. W rozważanej konfiguracji strefy mieszania, dodatkowo z odparowaniem kropeł, uzyskanie sukcesu okazało się niemożliwe przy $t_0=1$ ms, stąd dalsze analizy prowadzono dla czasu 2 ms. Rozumiem, że Autorowi chodziło o potwierdzenie wystąpienia wszystkich trzech scenariuszy ewolucji procesu zapłonu (por. rys. 8.20), gdyż przy większych wartościach t_0 , na przykład 3-4 ms, zapewne wystąpiłby zawsze udany zapłon (czy tak?).

Uwagi rzeczowe i redakcyjne

W rozprawie dostrzegłem stosunkowo niewiele błędów rzeczowych i niejasności. Proszę jednak Doktoranta o odniesienie się do nich w formie pisemnej, podobnie jak do wyżej sformułowanych pytań.

- A. str. 22: czym rzeczywiście jest człon III w równ. (3.4)? – określenie „oddziaływanie sił oporów lepkościowych” jest niefortunne (a nawet błędne); ponadto, czy tensor naprężeń lepkich wyglądałby inaczej w polu sił masowych? (równ. 3.9 i tekst powyżej);
- B. modele podsiatkowe: rozumiem, że zarówno w modelu Vremana (tekst poniżej równ. 3.40) jak i w modelu σ (tekst powyżej równ. 3.42) wystąpi wielkowirowe pole $\tilde{\mathbf{u}}$;
- C. płomień kinetyczny (str. 33): wydaje się, że stwierdzenie „strumień reagentów dostarczanych do strefy reakcji” odnosi się do rozważań w układzie związanym z propagującym się płomieniem, czy tak? W istocie spalanie kinetyczne może zachodzić w układzie zmieszanych wstępnie składników (substratów) będących początkowo w bezruchu, gdzie trudno mówić o „dostarczonym strumieniu”. Ponadto wydaje się, że ważny termin w przypadku spalania kinetycznego czyli *progress variable* (str. 41) lepiej jest tłumaczyć na jako „zmienną postępu reakcji”;
- D. str. 46 (środek): gwoli ścisłości, z przesłanek fizycznych wynika, iż kryterium rozdziału między jedno- a dwustronnym sprzężeniem pędu jest udział *masowy* fazy dyspersyjnej. Przyjmuje się często, że jest to wartość 10^{-3} , co przekłada się na podany udział objętościowy (10^{-6}) jedynie przy założeniu, że stosunek gęstości obu faz wynosi 1000 (co w rozważanej w pracy sytuacji jest prawdą).
- E. Rys. 5.3(b): nie bójmy się podpisu, że jest to po prostu „rozkład (prawdopodobieństwa) średnic kropeł” zamiast „ dQ/dD ”. Podobnie, na rys. 8.2 (i w tekście powyżej rysunku), termin „rozkład skumulowany” (ang. CDF) proponowałbym zastąpić przez „dystrybuantę rozkładu kropeł” a jego pochodną (PDF) przez „rozkład średnic kropeł”;
- F. równ. (5.16): zazwyczaj czas relaksacji kropeł definiuje się jako wielkość zależną jedynie od parametrów materiałowych. Wówczas jest on jednoznaczny miarą bezwładności kropeł (i występuje dalej w definicji liczby Stokesa St), natomiast czynnik nieliniowy siły oporu lepkiego pozostaje w równaniu (5.15).
- G. rozdz. 7.1: nie jest jasne dla Czytelnika, dlaczego wprowadza się czas znormalizowany w formie t/D_0^2 – przydatne byłoby krótkie wprowadzenie w rozdziale 5.3 (np. ze scałkowaniem równania 5.18);
- H. rys. 8.9 i następane: oznaczenia „s1d1” itd. nie są oczywiste, podobnie jak „9 losowych realizacji przepływu” (str.82) – czy chodzi o warunki początkowe dla pól HIT, realizacje pól stochastycznych, czy różne zestawy średnic kropeł z zadanego rozkładu?

Praca przygotowana jest poprawnie od strony redakcyjnej, skład tekstu jest przejrzysty. Należy podkreślić dużą staranność przygotowania większości rysunków. Potknięcia językowe, błędy literowe, braki w oznaczeniach itp. są nieliczne. Dla porządku wymienię kilka przykładów:

- str. viii: ściśle biorąc, E jest gęstością *widmową* energii kinetycznej turbulencji;
- „współrzędne wektora sił” (str.21) – lepiej „składowe wektora” albo „wektor”;
- nie zawsze przy nazwiskach obcych stosujemy apostrof (Autor pisze: Fick’a, Stokes’a, Courant’a, Friedrichs’a itd);
- równ. (3.12): nie podano czym jest X_k .
- „pozycje kropel” (str. 59 i dalej) – lepiej „położenia”;
- po lewej stronie równań (5.10)-(5.14) występują wielkości wektorowe;
- równ. (6.3) – czym jest σ ? (por. równ. 3.2);
- „interpolacja 3-go stopnia” (str. 60) to zapewne skrót myślowy;
- czym jest masa m w równ. (7.1)-(7.2)?
- czy czasy t_0 w równ. (8.7) oraz t_{sp} (str.99) oznaczają tę samą wielkość (?);
- definicje Δ_s oraz Δ_t w linii poniżej równ. (8.8) są pomieszane.

3. Podsumowanie i wniosek końcowy

Przedłożona rozprawa świadczy o bardzo dobrym rozeznaniu Doktoranta we współczesnej literaturze naukowej poświęconej dyspersyjnym przepływowi turbulentnym z reakcjami chemicznymi, aspektom fizykalnym takich przepływów oraz ich modelowaniu numerycznemu. Przeprowadzone badania dowodzą jego kompetencji w zakresie metod obliczeniowej mechaniki płynów, a w szczególności umiejętności opracowania procedur (submodeli) obliczeniowych, ich walidacji w wybranych konfiguracjach geometrycznych, umiejętności prowadzenia wielowariantowych analiz. Jako całość, praca doktorska stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego. Uzyskano obszerny zestaw wyników, które zostały poprawnie i w interesujący sposób omówione.

Rozprawa potwierdza ogólną wiedzę teoretyczną Doktoranta, a także umiejętność prowadzenia przez niego pracy naukowej w dyscyplinie *inżynieria mechaniczna*.

Konkludując uważam, że opiniowana praca spełnia wymagania stawiane zwyczajowo rozprawom doktorskim oraz odpowiada warunkom określonym w przepisach obowiązującej Ustawy o Stopniach i Tytule Naukowym. Tym samym **wnioskuję o dopuszczenie mgra inż. Jakuba Stempki do publicznej obrony**.

Ponadto, podkreślić należy znaczny stopień trudności pracy: złożoność fizyki analizowanych w rozprawie zagadnień, jak również zastosowanie i dalsze rozwinięcie zaawansowanych metod obliczeniowych. Z tego względu, jak również z uwagi na uzyskane oryginalne i różnorodne wyniki, po części opublikowane w kilku czasopismach naukowych z listy JCR (w tym *Combustion Science and Technology* oraz *Archives of Mechanics*), uważam za zasadne rozważenie przez Radę Dyscypliny **wyróżnienia pracy doktorskiej**.

