

Opinia nt. rozprawy doktorskiej Pani mgr Ewy Szymanek pt.
Modelowanie numeryczne i analiza przepływu ciepła i masy w
materiałach o strukturze granularnej.

Niniejsza opinia została sporządzona na zlecenie Rady Naukowej Dyscypliny Inżynieria Mechaniczna Politechniki Częstochowskiej (umowa nr RN-UC-180/22 z dn. 03.01.2022 r.)

1. Tematyka pracy, hipoteza badawcza i cele pracy

Tematyką opiniowanej rozprawy jest modelowanie komputerowe zjawisk ciepłno-przepływowych w złożach materiałów granularnych. Zjawiska transportu w tej klasie materiałów charakteryzują się wielką złożonością pod względem geometrycznym, co wynika zarówno z nieregularnego rozmieszczenia przestrzennego elementów granulatu jak i z samej, nierzadko dość złożonej geometrii tych elementów. Złożoność geometryczna obszaru przekłada się na skomplikowaną kinematykę przepływu charakteryzująca się obecnością silnie oddziałujących struktur wirowych i obszarów intensywnego ścinania płynu. Taka struktura przepływu rzutuje na globalne charakterystyki granulatów, w szczególności ich parametry związane ze zdolnością transportu ciepła i z oporami hydraulicznymi. Dokładne wyznaczenie tych parametrów ma kluczowe znaczenie z punktu rozmaitych zastosowań technicznych tego typu struktur.

Modelowanie matematyczne i numeryczne procesów transportu masy/ciepła w strukturach granularnych nie jest zagadnieniem nowym. Istnieje bogata literatura dotycząca tego obszaru badań, opisująca rozmaite podejścia do konstrukcji modeli fizycznych i powiązanych z nimi metod numerycznych. Należy podkreślić, że modelowanie zjawisk transportu w granulatach jest szczególnie trudnym wyzwaniem, ponieważ mamy tu do czynienia z ośrodkiem dwu- (granulat i ciecz, granulat i gaz) lub trójfazowym (granulat, ciecz i gaz), w którym „ziarna” granulatu są nieregularnie rozmieszczone i przypadkowo zorientowane przestrzennie. Może to powodować – i zazwyczaj powoduje – anizotropowość i heterogeniczność makroskopowych właściwości fizycznych takich ośrodków. Z tego powodu klasyczne podejścia oparte na założeniu lokalnej homogenizacji (modele takie opisuje Doktorantka w Rozdziale 2 rozprawy), stosowane także do materiałów porowatych, mają ograniczoną stosowalność.

Na podstawie obszernego studium literaturowego i przeglądu stanu rozwoju metod modelowania zjawisk stanowiących temat rozprawy, Doktoranta wyciąga – słuszny, moim zdaniem - wniosek, że zjawiska transportu ciepła/masy w złożach granularnych nie są aktualnie opisane w sposób wystarczający. Nie istnieją także w pełni zadowalające metody obliczeniowe, gwarantujące wysoką dokładność modelowania i charakteryzujące się zarazem efektywnością numeryczną na poziomie oczekiwanym od metod stosowanych w praktyce inżynierskiej i projektowej. Ponownie, w pełni zgadzam się z taką diagnozą. W konsekwencji poczynionych

obserwacji Doktoranta uznaje za pożądane i celowe opracowanie efektywnej metody symulacyjnej dla złożeń granularnych o realnie spotykanej złożoności geometrycznej, która bazuje na pełnym modelu zjawisk przepływowych i cieplnych na poziomie rzeczywistej struktury wewnętrznej granulatu. Narzuca się tu analogia do stosowanego coraz częściej sposobu modelowania takich zjawisk w strukturach o otwartej porowatości polegającego na konstrukcji algorytmów umożliwiających śledzenie przebiegu zjawiska w skali indywidualnych porów.

Biorąc pod uwagę znaczenie naukowe i praktyczne zagadnień modelowania zjawisk transportu wewnątrz materiałów granularnych, a także aktualny stan wiedzy i rozwoju metod obliczeniowych dedykowanych tym zagadnieniom, mogę stwierdzić, że tematyka badań podjętych przez Doktorantkę w ramach rozprawy jest aktualna i interesująca, a wobec tego bez żadnych wątpliwości może stanowić przedmiot rozprawy doktorskiej w dyscyplinie inżynieria mechaniczna.

Z numerycznego punktu widzenia kluczowe znaczenie ma (re)konstrukcja wewnętrznej geometrii struktury granularnej, a następnie metoda dyskretyzacji przestrzennej obszaru obliczeniowego. Klasyczne metody polowe, np. takie, jak metoda objętości skończonych lub metoda elementów skończonych, w szczególności ich realizację w dostępnych, komercyjnych lub otwartych, środowiskach obliczeniowych bazują na siatkach obliczeniowych dopasowanych do brzegu obszaru. Ta powszechnie stosowana metoda dyskretyzacji natrafia na poważne trudności w przypadku geometrii stanowiących przedmiot analizy w opiniowanej rozprawie. Nadzwyczajna złożoność realistycznych złożeń granularnych czyni generację poprawnych siatek dopasowanych do brzegu zagadnieniem samym w sobie, ponadto jest procesem pracochłonnym, trudnym do automatyzacji i kosztownym obliczeniowo. W rozprawie Doktorantka proponuje interesujące podejście alternatywne polegające na zastosowaniu niedopasowanej do brzegu obszaru siatki kartezyjskiej i wykorzystaniu metody zanurzonego brzegu. Jakkolwiek sama idea tej metody nie jest nowa, to wykorzystanie jej w tej konkretnej aplikacji, a także umiejętne włączenie jej w solver LES bazujący na wykorzystaniu kompaktowych różnic skończonych wysokiego rzędu, należy uznać za pomysł oryginalny i nowatorski.

Doktorantka stawia w pracy dwie tezy badawcze, a mianowicie:

Teza 1: Metoda zanurzonego brzegu w połączeniu z metodą dyskretyzacji wysokiego rzędu pozwala na analizę zagadnień przepływowych z wymianą ciepła w skomplikowanych geometrycznie konfiguracjach z dużą dokładnością.

Teza 2: Konfiguracja przestrzenna i kształt granulatu w warstwie granularnej mają istotny wpływ na pole przepływu i zmienność temperatury.

Pierwsza z tych tez dotyczy samej metody modelowania, druga zaś cech fizycznych zjawiska, których istnienie uzasadnia de facto potrzebę jej stosowania i określa jej wymagania.

Aby potwierdzić wyżej sformułowane tezy badawcze, Doktoranta realizuje w pracy program badań obejmujący następujące etapy:

- Sformułowanie modelu matematycznego w ramach modelu przepływu z niską liczbą Macha opisanego układem równań różniczkowych cząstkowych złożonym z równania zachowania masy, równania Naviera-Stokesa i równania energii (de facto równania transportu dla pola temperatury). Dwa ostatnie równania zawierają człony odpowiadające sztuczemu polu siłowemu (w przypadku równania ruchu) lub polu źródeł ciepła, niezbędnymi do wymuszenia warunków brzegowych w metodzie zanurzonego brzegu. Do otrzymanego układu Doktorantka stosuje następnie procedurę filtracji skal ruchu (metoda LES) i aplikuje model lepkości Vremana podając uzasadnienie tego wyboru.
- Konstrukcja metody obliczeniowej opartej na wykorzystaniu kompaktowych różnic skończonych wysokiego (szóstego) rzędu w siatce kartezjańskiej nakrywającej obszar zajęty przez płyn i materiał granulatu, oraz schematu całkowania po czasie typu predyktor-korektor drugiego (formalnie) rzędu. W każdym kroku czasowym Doktoranta rozwiązuje także (dwukrotnie) równanie Poissona dla ciśnienia. Warunki brzegowe dla pola prędkości i temperatury realizowane są metodą zanurzonego brzegu. Zastosowane podejście jest, jak zasadnie stwierdza Doktorantka, niskiego rzędu, ale w połączeniu z metodą kompaktową i „podejściem krokowym” uzyskuje się – jak twierdzi Doktorantka - drugi rząd dokładności.
- Weryfikacja metody IB-VP w oparciu o sekwencję testów w regularnej geometrii o rosnącej złożoności i porównanie otrzymanych wyników w rezultatach otrzymanymi przy użyciu programu ANSYS/Fluent. Otrzymane wyniki jednoznacznie świadczą o poprawności implementacji opracowanej metody symulacyjnej wykazując imponującą zgodność w wynikami referencyjnymi.
- Wykonanie symulacji procesu przenikania ciepła w przegrodach w celu porównania wyników z eksperymentem. Otrzymane w pracy wyniki wykazują bardzo dobrą zgodność z danymi pomiarowymi, co tym bardziej uwiarygadnia poprawność modelowania numerycznego.
- Wykonanie symulacji w złożach o złożonej, także nieregularnej strukturze, dla różnych przypadków kształtu elementów granulatu. Doktoranta przedstawia bardzo obszerny zbiór wyników otrzymanych w symulacjach przypadków izotermicznych i nieizotermicznych, dla kilku kształtów granulatu. Szczególnie imponująco przedstawiają się obliczenia niestacjonarne przepływu z wymianą ciepła z złożu nieregularnie rozłożonych i zorientowanych pierścieni Raschiga. Otrzymane wyniki stanowią cenny materiał do porównań z innymi metodami, a także z eksperymentem.
- Wykonanie symulacji przepływu nad ścianą o złożonej strukturze powierzchni. W tej części pracy Doktorantka analizuje – przy zastosowaniu metody IB-VP – wpływ kilku konfiguracji regularnego pofalowania powierzchni oraz „sztucznej chropowatości” (uzyskanej poprzez nałożenie na ścianę regularnej matrycy sferycznych wypukłości) na cechy kinematyczne takie, jak profil prędkości średniej, profile pulsacji prędkości i długość stref recyrkulacji. W pracy przedstawiono również wyniki symulacji przepływu w kanale z gorącą ścianą wyposażoną w opisany rodzaj „sztucznej chropowatości”, a więc przepływ z wymianą ciepła.

Reasumując, wykazanie sformułowanych w rozprawie tez badawczych wiązało się z koniecznością realizacji szeregu złożonych zadań szczegółowych, wymagających od Doktorantki opanowania zaawansowanej wiedzy w dziedzinie fizyki przepływów, metod obliczeniowych i ich praktycznej implementacji. **Tym samym, Doktorantka potwierdziła swoje kompetencje do prowadzenia oryginalnych i nowatorskich badań naukowych w dziedzinie inżynierii mechanicznej.**

2. Struktura pracy

Rozprawa Pani mgr Ewy Szymanek napisana jest w języku polskim i obejmuje dziewięć rozdziałów. Całkowita objętość pracy to 120 stron. Bibliografia liczy 113 pozycji. Wybór cytowanych prac jest adekwatny i świadczy o dobrej orientacji Doktorantki w obszarze badań obejmującym tematykę rozprawy. Zgodnie z dobrą praktyką, praca zawiera także spis rysunków i spis tabel.

Struktura i zawartość merytoryczna poszczególnych rozdziałów jest przemyślana, prezentacja kolejnych etapów badań i otrzymanych wyników nie budzi moich zastrzeżeń. Wnioski końcowe są jasno sformułowane i mają pełne uzasadnienie w treści rozprawy.

3. Uwagi krytyczne/polemiczne i problemy do wyjaśnienia.

1. Pod koniec strony 8 rozprawy autorka stwierdza, że lepkość gazów wzrasta proporcjonalnie do trzeciej potęgi temperatury bezwzględnej. To stwierdzenie nie jest prawdziwe. Poprawna zależność wynika z prawa Sutherlanda (wzór (4.15) na str. 18).
2. Nie jest do końca jasne stwierdzenie dotyczące rzędu dokładności sformułowane pod koniec punktu 4.1 (str. 20). Jest tam mowa o wnioskach w pracy Tyliczaka i Księżyka (poz. [98] w bibliografii). Czy chodzi tam o rząd dokładności względem dyskretyzacji przestrzennej czy względem czasu?
3. W opisie algorytmu obliczeniowego (str. 20 i 21) podane jest równanie Poissona dla ciśnienia, rozwiązywane w każdym kroku czasowym symulacji. Kandydatka nie informuje jaki jest warunek brzegowy dla tego równania. Kwestia sformułowania tego warunku jest jednak kluczowa dla ogólnego rzędu schematu całkowania względem czasu. Wiadomo bowiem, że w metodach typu pressure-splitting pewne sformułowania warunku brzegowego typu Neumanna dla ciśnienia skutkują obniżeniem rzędu metody (definiowanego na bazie odpowiednich norm) nawet o 1. Biorąc pod uwagę fakt, że w metodzie IB brzeg obszaru reprezentowany jest pośrednio poprzez dodatkowe pole siłowe, powstaje pytanie jak implementowany jest ciśnieniowy warunek brzegowy i jaki jest wpływ jego postaci na ogólną dokładność/rozdzielczość przestrzenną algorytmu. Ponadto, czy wpływ ten zależy od stopnia regularności brzegu elementów granulatu i – jeśli tak – to w jaki sposób?

Proszę, aby podczas obrony Doktorantka wyjaśniła opisaną wyżej kwestię.

4. Zastosowanie metody zanurzonego brzegu nie tylko umożliwia obejście problemu generacji siatki dopasowanej do złożonej geometrii granulatu, ale także – jak mierniam – umożliwia zwiększenie efektywności obliczeniowej i skrócenie czasu obliczeń w porównaniu z innymi metodami (np. przy użyciu programu ANSYS/Fluent). Praca nie zawiera jednak żadnych informacji na temat czasu obliczeń.

Proszę uprzejmie o odniesienie się do tej kwestii w trakcie obrony rozprawy.

4. Konkluzja

Przedłożona przez Panią mgr Ewę Szymanek rozprawę doktorską oceniam bardzo wysoko. Doktorantka podjęła się opracowania oryginalnej metody obliczeniowej dedykowanej zjawiskom ciepłno-przepływowym w strukturach granularnych o dowolnie skomplikowanej, realistycznej geometrii. W serii starannie i zgodnie z zasadami sztuki opracowanych testów o wzrastającej złożoności dowiodła poprawności i efektywności numerycznej zaproponowanej metody, porównując uzyskane wyniki w rezultatach obliczeń solverem komercyjnym i z dostępnymi – w tym własnymi – rezultatami badań eksperymentalnych. Wyniki przeprowadzonych badań podsumowała obszernie w ostatnim rozdziale rozprawy, a także sformułowała poprawne wnioski, które są dobrze ugruntowane w przedstawionych w rozprawie wynikach i logicznie z nich wynikają.

Rozprawa jest napisana przejrzysto, a kolejne etapy przeprowadzonych badań doprowadziły do potwierdzenia postawionych w pracy tez badawczych. Uzyskane w pracy wyniki są oryginalne i przedstawiają dużą wartość naukową. Otwierają moim zdaniem także nowe, obiecujące perspektywy rozwoju wydajnych obliczeniowo metod symulacji zjawisk transportu w ośrodkach o złożonej strukturze wewnętrznej takich jak ośrodki porowate i granularne.

Mając powyższe na uwadze stwierdzam, że rozprawa Pani mgr Ewy Szymanek spełnia wszystkie wymagania stawiane pracom doktorskim, zarówno ustawowe jak i te związane z najlepszymi praktykami prowadzenia współczesnych badań naukowych. Dlatego bez wahania wnioskuję o dopuszczenie Pani mgr Ewy Szymanek 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

