

Dr hab. inż. Maciej Marek
prof. Politechniki Częstochowskiej
Katedra Maszyn Ciepłych
Wydział Inżynierii Mechanicznej i Informatyki
Politechnika Częstochowska

Recenzja pracy doktorskiej
mgr. inż. Adama Kajzera
pt.: Modelling of interfacial flows with the diffuse-interface method
using weakly compressible approach
(Modelowanie przepływów z powierzchniami międzyfazowymi
metodą rozmytego interfejsu w podejściu słabo ściśliwym)
Promotor: prof. dr hab. inż. Jacek Pozorski

Przedmiotem pracy jest numeryczne modelowanie przepływów z ruchomą powierzchnią rozdziału faz z wykorzystaniem oryginalnej kombinacji metod EDAC (modelu entropowo tłumionej sztucznej ściśliwości) oraz DI (metody rozmytego interfejsu). Obiektem badań Autora są przepływy nieściśliwe lub słabo ściśliwe (zakres niskich liczb Macha), zaś użycie metody wprowadzającej sztuczną ściśliwość podyktowane jest zasadniczo usprawnieniem procesu obliczeniowego na procesorach wielordzeniowych (CPU) lub graficznych (GPU). Głównym problemem przy modelowaniu przepływów w pełni nieściśliwych jest konieczność rozwiązywania dużego, globalnego układu równań (co wynika z częściowej eliptyczności problemu), a tym samym utrudnione się staje zrównoleglenie obliczeń szczególnie efektywne dla metod jawnych w czasie oraz zagadnień w pełni lokalnych. Modelowanie przepływu dwufazowego, w którym śledzi się powierzchnię międzyfazową, jest bardzo trudnym problemem numerycznym ze względu na: nieciągłość właściwości fizycznych płynów, m. in. gęstości i lepkości, obecność sił skupionych na powierzchni rozdziału (w szczególności napięcia powierzchniowego) oraz wymóg zachowania masy obu śledzonych płynów. W ostatnich dwóch dekadach mogliśmy zaobserwować bardzo duże zainteresowanie modelami tego rodzaju. Przyczynił się do tego bezprecedensowy wzrost mocy obliczeniowej komputerów oraz rozwój technik obliczeń równoległych. Chociaż pewne metody symulacji przepływów dwufazowych zyskały szczególnie na popularności (należy do nich np. metoda Volume-of-Fluid, VoF, lub metoda gazu sieciowego Boltzmanna, LBM), każdego roku można spotkać się z nowymi propozycjami ujęcia tego problemu. Czy potrzebna jest kolejna metoda, w szczególności metoda EDAC-DI zaproponowana w niniejszej rozprawie? Moim zdaniem Autor niewątpliwie wykazał duży potencjał tego ujęcia, a fakt, że większa część rozprawy została już opublikowana w recenzowanych, prestiżowych czasopismach, wskazuje, że podobnego zdania jest międzynarodowe środowisko naukowe zajmujące się tym niełatwym obszarem badań. **Tematyka pracy bezsprzecznie wpisuje się w ramy dyscypliny naukowej „mechanika” (obecnie „inżynieria mechaniczna”).**

Praca napisana jest w języku angielskim, co powinno wyraźnie przyczynić się do jej widoczności w środowisku międzynarodowym. Czynnikiem silnie zwiększającym tę widoczność jest także wspomniany już fakt, że dwa zasadnicze rozdziały rozprawy zostały wcześniej opublikowane jako odrębne artykuły w rozpoznawalnych czasopismach z listy JCR. Można jedynie żałować, że Autor zdecydował się włączyć je w tekst rozprawy w niemal niezmienionej formie. O ile rozdziały 2 i 3 doskonale bronią się jako odrębne artykuły, o tyle w ramach jednolitego tekstu mogą wywołać u czytelnika wrażenie stylistycznej niekonsekwencji oraz niepokojące uczucie *déjà vu*. Po ogólnym wprowadzeniu w rozdziale 1 napotykamy kolejne, niezależne wprowadzenia w rozdziałach 2 i 3 – ponownie czytamy o zaletach podejścia słabo ściśliwego, o krytyce metod LBM i SPH; ponownie pojawiają się podstawowe równania przepływu. W rozdziałach 1 i 4 Autor wyraża się w pierwszej osobie liczby pojedynczej (co mnie akurat nie razi, ale może zaskoczyć bardziej konserwatywnego czytelnika), zaś w rozdziałach 2 i 3 – bardziej tradycyjnie, w pierwszej osobie liczby mnogiej. Nie jest to dziwne, jeśli weźmie się pod uwagę, że artykuły stanowiące treść rozdziałów 2 i 3 są współautorskie z promotorem rozprawy. Ze względu na rodowód rozdziałów 2 i 3 można się w nich

spotkać ze zwrotem „in this paper” lub „the paper is organised as follows”. W pozostałych rozdziałach Autor używa w analogicznym kontekście poprawnego zwrotu „chapter”. Pomijając te niezręczności edycyjne strukturę pracy należy uznać za poprawną. Autor w bardzo zwarty, ale przejrzysty sposób przedstawia swoje badania na tle literatury (rozdział 1). W rozprawie brak jest niepotrzebnych, podręcznikowych treści, a omawiając wyniki innych badaczy Autor wykazuje się dużą kompetencją i zdrowym krytycyzmem.

Praca z pewnością zyskałaby dzięki zamieszczeniu spisu terminów i oznaczeń, szczególnie, że Autor używa wielu nieugruntowanych w literaturze akronimów np. PBWC (Pressure Based Weakly Compressible) lub OFF (One Fluid Formulation).

Pod koniec rozdziału 1 Autor formułuje tezę pracy. Można dyskutować, czy nie jest ona sformułowana zbyt ogólnie i czy w tej postaci jest w ogóle możliwa do udowodnienia. Chociaż Autor pisze, że model EDAC dostarcza dokładnych wyników w obliczeniach DNS przepływów jednofazowych, na pewno zdaje sobie sprawę, że wykazał to tylko w szczególnych warunkach przepływu, m.in. przy określonych zakresach liczby Reynoldsa i liczby Macha.

Rozdział 2 poświęcony jest w pełni metodzie EDAC wprowadzonej przez J. R. Clausena w 2013r. Ponieważ metoda ta jest podstawowym składnikiem proponowanego ujęcia EDAC-DI dla przepływów dwufazowych, naturalne jest wcześniejsze, bardziej szczegółowe przeanalizowanie i przetestowanie metody EDAC w kontekście przepływów jednofazowych. I znowu, w oderwaniu od reszty rozprawy treść rozdziału 2 wskazuje na znaczny, własny wkład Autora w rozwój metody EDAC m.in. po raz pierwszy przeprowadza tą metodą obliczenia DNS turbulentnego przepływu ograniczonego ścianami. W kontekście całej rozprawy przypadek ten jednak wydaje się mało adekwatny. Zastosowania metody EDAC-DI przedstawione w kolejnych rozdziałach nie dotyczą ani przepływu turbulentnego, ani ściany nie odgrywają w nich istotnej roli (poza jednym przypadkiem – uwarstwionym przepływem Poiseuille’a w podrozdziale 4.2.3). Należy jednak podkreślić, że rozdział ten zawiera szereg bardzo istotnych elementów modelu numerycznego – schematy dyskretyzacji w przestrzeni, schemat całkowania w czasie (metoda Rungego-Kutty IV rzędu, w wersji niskozasobowej, sześćoetapowej) oraz implementację na procesorze graficznym (GPU).

Ukoronowaniem rozprawy są rozdziały 3 i 4, gdzie została przedstawiona w szczegółach metoda EDAC-DI, czyli sprzężenie metody EDAC, użytej tutaj do rozwiązania równań przepływu w ujęciu jednoprzynowym, z metodą rozmytego interfejsu (DI) do identyfikacji i adwekcji powierzchni rozdziału faz. Rozdział 3 poświęcony jest oryginalnemu sformułowaniu metody EDAC-DI w publikacji będącej pierwowzorem rozdziału, natomiast rozdział 4 zawiera szereg propozycji modyfikacji metody polepszających z jednej strony elastyczność i dokładność symulacji, z drugiej strony pogarszających w pewnym stopniu efektywność implementacji przeznaczonej dla procesorów graficznych. Modyfikacje te obejmują: a) wprowadzenie mniej dyfuzyjnego schematu dla członów adwekcyjnych; b) identyfikację powierzchni międzyfazowej niezależną od liczby Macha; c) wprowadzenie dodatkowego wygładzania w pobliżu interfejsu; oraz d) wprowadzenie silnie stabilnej metody Rungego-Kutty do całkowania w czasie.

Rozważane w rozprawie testowe przypadki przepływów dwufazowych obejmują: zderzenie czołowe kropeł wody w powietrzu, stacjonarną kroplę wody w powietrzu (studium prądów pasożytniczych oraz skoku ciśnienia jako efektu napięcia powierzchniowego), zderzenie mimośrodowe kropeł węglowodanu w azocie, uwarstwiony przepływ Poiseuille’a, niestabilność Rayleigha-Taylora oraz pęcherz gazu unoszący się w cieczy pod wpływem siły wyporu. Wybór konkretnych przypadków testowych zawsze jest do pewnego stopnia dyskusyjny – podyktowany jest zainteresowaniami badacza, przeznaczeniem metody numerycznej do modelowania określonego typu przepływów lub aktualnymi trendami w literaturze. Autor dużo miejsca poświęca zderzeniom kropeł. Przypadek ten jest bardzo interesujący z punktu widzenia zastosowań i samej fizyki zjawiska. Zachowanie się kropeł uzależnione jest od efektów bezwładnościowych, lepkościowych i kapilarnych. Dużą rolę odgrywają niestabilności przepływu, w tym niestabilność Plateau-Rayleigha, dochodzi do zmiany topologii powierzchni rozdziału faz, czy to przy łączeniu się kropeł czy na skutek wtórnego rozpadu po zderzeniu. Prezentując wyniki obliczeń z wykorzystaniem metody EDAC-DI Autor wykazał, że proponowany model pozwala na odtworzenie charakterystycznych cech tego skomplikowanego zjawiska zgodnych jakościowo z danymi literaturowymi.

Należy tutaj podkreślić, że numeryczne modelowanie przepływów dwufazowych, w których dochodzi do zmian topologii powierzchni międzyfazowej, np. jej rozerwania lub połączenia, skazane

jest na niemożliwe do uniknięcia niedoskonałości. Przynajmniej z punktu widzenia modelu matematycznego tego procesu zjawiska kapilarne prowadzą do formowania się osobliwości w krytycznym momencie zmiany postaci powierzchni; osobliwości, której nie sposób odwzorować na skończonej siatce obliczeniowej. Pewne rozwiązania typu AMR (adaptacyjnego zagęszczania siatki), o których wspomina Autor, jako o potencjalnym rozszerzeniu proponowanego modelu, pozwalają wprowadzić bardziej zbliżyć się do momentu krytycznego, nie mogą jednak w pełni zaradzić problemowi osobliwości.

Rozpatrując inne złożone zagadnienie – unoszący się pęcherz gazu w cieczy – Autor uzyskał ewolucję prędkości unoszenia się pęcherza ilościowo zgodną z danymi literaturowymi.

Poza tymi dwoma bardziej złożonymi przypadkami, Autor podaje wyniki ilościowe dla przypadków akademickich, za które należy uznać statyczną kroplę, uwarstwiony przepływ Poiseuille’a czy niestabilność Rayleigha-Taylor’a. Wydaje mi się, że zabrakło tutaj przypadku weryfikującego ilościowo poprawność implementacji napięcia powierzchniowego i metody śledzenia powierzchni rozdziału faz w teście bardziej wymagającym niż statyczna kropla (względem wartości wynikającej z prawa Younga-Laplace’a). Takim przypadkiem mogłyby być małe oscylacje zdeformowanej wstępnie kropli pod wpływem sił kapilarnych. Można by porównać z rozwiązaniem analitycznym nie tylko uzyskaną częstość drgań własnych, ale także zbadać szybkość tłumienia drgań, która zależy od fizycznej lepkości, ale także od sztucznej dyssypacji wprowadzanej przez użyte schematy numeryczne. Inną alternatywą była analiza początkowej szybkości deformacji interfejsu w niestabilności Rayleigha-Taylor’a w obecności napięcia powierzchniowego. Tutaj także istnieje rozwiązanie analityczne, zawsze bardziej przekonujące niż wyniki innych rozwiązań numerycznych (w rozprawie użyto jako danych referencyjnych wyników obliczeń metodą LBM-DI).

Podczas lektury rozprawy nasunęło mi się szereg bardziej szczegółowych uwag i pytań. Jeżeli Autor uzna za stosowne, może się do nich odnieść podczas publicznej obrony:

1. Autor w kilku miejscach wspomina o „false gas bubbles” (fałszywe pęcherze?). Faktycznie, niedokładności modelowania, np. niewystarczająca gęstość siatki obliczeniowej, mogą prowadzić do sztucznego efektu uwięzienia gazu wewnątrz fazy ciekłej przy łączeniu się różnych fragmentów powierzchni międzyfazowej. Nie jest jednak do końca jasne, dlaczego Autor uznaje ten efekt **w określonym przypadku** za efekt czysto numeryczny. W pewnych sytuacjach może on być w pełni uzasadniony fizycznie.
2. Str. 42 – Autor na podstawie równań 3.9 i 3.10 formułuje tezę, że „płyny są niemieszalne wtedy i tylko wtedy, gdy istnieje na ich styku napięcie powierzchniowe” (w oryginale: „the fluids are immiscible if and only if they exhibit the surface tension”; podobna teza znajduje się u dołu strony 8). Ma to wynikać, jak rozumiem, z tego, że współczynnik przy członie kompresyjnym w równaniu Cahn-Hilliarda jest proporcjonalny do współczynnika napięcia powierzchniowego. Ponieważ Autor uznaje to za ważną cechę **fizyczną** płynów, pozwolę sobie zwrócić uwagę, że napięcie powierzchniowe obserwuje się także w przypadku płynów mieszających się (patrz np. Lacaze et al., Phys. Rev. E, 82, 041606, 2010). Także z punktu widzenia czysto matematycznego modelu nietrudno sobie wyobrazić sytuację, w której istnieją dwie niemieszające się fazy, a nie występuje między nimi napięcie powierzchniowe (jest to dość częsta sytuacja w modelowaniu przepływów dwufazowych w dużej skali). Oczywiście, mamy wtedy do czynienia z układem nieopisywanym równaniem Cahn-Hilliarda (np. tzw. model z ostrym frontem przemieszczanym zgodnie z równaniem adwekcji w polu prędkości przepływu). Trzeba jednak wyraźnie podkreślić, że teza Autora ma charakter dygresyjny i nie jest istotna dla ciągłości wywodu.
3. Str. 52, 53 - Jak zachowanie konturów na wykresach 3.1, 3.2 zależy od gęstości siatki? Czy zagęszczanie siatki prowadzi do zmniejszenia zniekształcenia kolistych konturów?
4. Autor korzysta z modelu CSS (Continuum Surface Stress) do wprowadzenia sił napięcia powierzchniowego. Jak wiadomo z literatury, podobnie jak w przypadku modelu CSF (Continuum Surface Force), może on prowadzić do problemów ze zbieżnością przy zagęszczaniu siatki. Czy prowadzone były testy z innymi metodami (np. funkcjami wysokości; ang. height functions, HF) dobrze zachowującymi się przy testach zbieżności?

5. Str. 86 – Uwarstwiony przepływ Poiseuille’a to jedyny rozpatrywany w rozprawie przypadek przepływu dwufazowego ograniczonego ścianą, ale nie odgrywa ona istotnej roli dla ruchu powierzchni międzyfazowej (jej kształt pozostaje niezmienny). Autor podaje, że warunek początkowy dla pola prędkości był zgodny z rozwiązaniem analitycznym. Jak rozumiem, pozwoliło to uniknąć generowania fal akustycznych, a nie one były przedmiotem analizy w podrozdziale 4.2.3. A jeżeli warunek początkowy nie jest zerowy, jak długo trzeba czekać na wytłumienie fal akustycznych? Czy w stanie ustalonym uzyskuje się takie same wyniki jak te, przedstawione w 4.3.2. Wydaje mi się, że nieustalony przepływ Poiseuille’a był bardzo dobrym przypadkiem do analizy ograniczeń modelu słabo ściśliwego i ubocznego efektu generowania fal akustycznych (poszerzającym analizę zawartą w rozdziale 4.4).
6. Str. 86 – W ostatnim paragrafie Autor stwierdza, że metoda DI cechuje się pierwszym rzędem dokładności i zwiększenie rzędu wymagałoby zmniejszania liczby Cahna przy zagęszczaniu siatki obliczeniowej. Dokładniej – parametr ε opisujący rozmycie interfejsu powinien być zmniejszany szybciej niż krok siatki. Trzeba tutaj zauważyć, że rząd dokładności bliski jedności dla metod typu DI jest zupełnie naturalny (dotyczy to także wielu innych popularnych metod jak np. VoF). Rozmycie interfejsu bezpośrednio wiąże się z krokiem siatki i w metodach typu DI nie może być od niego mniejsze. Sam Autor zresztą stwierdza w rozprawie, że zbyt mała wartość ε prowadzi do zniekształceń śledzonego interfejsu oraz zwiększa wielkość prądów pasożytniczych. Jak rozumieć zatem zmniejszanie ε szybciej niż krok siatki?

Pozostałe, mniej istotne uwagi:

7. Str. 2 - „relevant material properties do not change due to flow” – lepiej po prostu napisać, że są to wielkości stałe; ich zmiana nie musi wynikać z warunków przepływu – mogą na przykład być funkcjami czasu.
8. Str. 3 – Znikająca dywergencja prędkości nie musi eliminować zmian gęstości przy obecności sił masowych (w podanych równaniach nie są uwzględnione, ale w ogólnym przypadku mogą się pojawić).
9. Str. 5, wiersz 1 – zamiast „Eq. 1.10” powinno być raczej „Eq 1.13”; równanie 1.10 jak najbardziej ma fizyczną interpretację.
10. Str. 7 – błędy we wzorach 1.23, 1.24, 1.25 – źle zapisane ostatnie człony po lewej stronie równań – brak drugiego rzędu przy operatorze nabla. Błąd tym bardziej rzuca się w oczy, że w równaniach 1.23 i 1.24 człon ten jest najważniejszym, nowym elementem wnoszonym przez model EDAC lub jego warianty.
11. Str. 8, wiersz 4 od dołu - Pojęcie „interfacial flow” dotyczy zwykle przepływu dwufazowego, zatem na granicy dwóch faz (zgodnie z definicją pojęcia fazy) powinna wystąpić nieciągła zmiana przynajmniej jednej wielkości fizycznej. Można oczywiście rozważać teoretyczny przypadek płynów o identycznej gęstości i lepkości, ale z napięciem powierzchniowym. Jest to jednak przypadek dość abstrakcyjny.
12. Str. 16, wiersz 10 od dołu - zwrot „this notation” jest mało precyzyjny, bo nie określa jednoznacznie, jak będą oznaczane pochodne po współrzędnych przestrzennych. Czytelnik nie powinien mieć jednak problemu ze zrozumieniem intencji Autora.
13. Str. 59, wiersz 6 od dołu – Chociaż okresowe warunki brzegowe w pewnym sensie faktycznie pozwalają na symulację nieskończonego obszaru obliczeniowego, jednak jest to obszar wypełniony okresowo rozmieszczonymi kroplami. Czy możemy uznać, że nie oddziałują one ze sobą? Jak bardzo to oddziaływanie różni się od oddziaływania ze ścianami z warunkiem braku poślizgu?

Dostrzeżone błędy językowe:

1. Str. 1 – „astrophyscial”, powinno być „astrophysical”.
2. Str. 9 – „what is another reason”, lepiej “which is...”.
3. Str. 26 – Figure 2.4 – “divegnce”, powinno być „divergence”.

Pomijając drobne niezręczności językowe oraz wspomniane wcześniej niekonsekwencje wynikające z łączenia tekstów stanowiących samodzielną całość, trzeba podkreślić, że rozprawa jest napisana starannie, z dbałością o styl i jakość edycyjną.

Podsumowując, mimo pewnych przedstawionych powyżej zastrzeżeń i uwag krytycznych (w wielu przypadkach dyskusyjnych), nie mam żadnych wątpliwości, że przedstawiona rozprawa doktorska spełnia wymogi stawiane przez Ustawę o Stopniach i Tytule Naukowym. Wnioskuje o dopuszczenie rozprawy do publicznej obrony.

Ponadto, biorąc także pod uwagę wysoki poziom pracy, dużą wartość naukową i aktualność opisanych w rozprawie badań oraz szerokie kompetencje Autora - zarówno w zakresie zaawansowanych metod numerycznych, jak i programowania oraz wykorzystania sprzętu dedykowanego masowym obliczeniom równoległym - wnioskuje o wyróżnienie rozprawy.

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Magdalena' followed by a stylized flourish.