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

Gdańsk, 17 grudnia 2024

Recenzja rozprawy doktorskiej

Study of fluid transport phenomena using meshless Lattice Boltzmann Method

mgr. Dawida Strzelczyka

Promotor: dr hab. Maciej Matyka, prof. UWr
(Wydział Fizyki i Astronomii, Uniwersytet Wrocławski)

1. Wprowadzenie

Obliczeniowa mechanika płynów (ang. CFD) na przestrzeni blisko stu lat rozwoju stała się użytecznym i stosunkowo dojrzałym narzędziem w wielu zastosowaniach inżynierskich. Ujmując rzecz bardzo skrótowo: ważną składową metod CFD jest w ogólności odpowiednia dyskretyzacja obszaru obliczeniowego (w postaci siatek obliczeniowych) lub alternatywnie w postaci zbioru punktów/cząstek w metodach bezsiatkowych, tak by optymalnie oddać zmienność przestrzenną wyznaczanych pól wielkości przepływowych. Obok stosunkowo dobrze rozpoznanych metod rozwiązywania równań makroskopowych (metody objętości skończonych i elementów skończonych), przedmiotem badań są także podejścia alternatywne, takie jak metoda siatkowa Boltzmanna (LBM, ang. *Lattice-Boltzmann method*) wywodząca się z kinetycznej teorii gazów. W LBM rozwiązuje się równania transportu na poziomie mezoskopowym (funkcji rozkładu odpowiednich wielkości), typowo na siatkach jednorodnych celem maksymalizacji efektywności obliczeń. Badania prowadzone przez Doktoranta ambitnie obejmują oba te alternatywne aspekty CFD: sformułowanie bezsiatkowe oraz opis mezoskopowy (przynajmniej „technicznie", bo finalnie istotne są uzyskiwane pola wielkości makroskopowych, na poziomie hydrodynamicznym). Jako że Doktorant postrzega świat dynamiki płynów bardziej z perspektywy fizyka niż inżyniera, a w pracy podejmuje się szeregu rozważań teoretycznych z wykorzystaniem pojęć z zakresu mechaniki statystycznej, to w tytule rozprawy – i słusznie – akcentuje się „studium zjawisk transportu płynu…" (o ile można przyjąć takie tłumaczenie na język polski) raczej niż bardziej typowe w języku CFD określenie „numeryczne badania/analizę przepływów…".

Zagadnienia podjęte w pracy są aktualne. Podejście LBM jako względnie nowe w obszarze CFD (jego początki datują się na lata 1980-te) jest przedmiotem wielu prac badawczych, a zastosowane/rozwinięte w niniejszej rozprawie doktorskiej sformułowanie bezsiatkowej metody gazu sieciowego jest jeszcze o dekadę nowsze i zasadniczo słabiej rozpoznane. Podjęcie pracy doktorskiej w tak określonej tematyce wydaje się więc bardzo zasadne – tym bardziej, że Promotor i jego zespół posiadają uznany dorobek w zakresie LBM, w tym także matematycznego modelowania przepływów w ośrodkach porowatych, które są również istotnym przedmiotem badań w przedstawianej pracy. Ponadto wydaje się, że uzyskane w rozprawie wyniki – po dalszym rozwinięciu zastosowanych w niej metod i procedur obliczeniowych – mogą mieć pewne znaczenie aplikacyjne.

W moim przekonaniu, zakres podjętych badań oraz stopień ich trudności odpowiadają z naddatkiem zwyczajowym oczekiwaniom wobec prac doktorskich. Z punktu widzenia klasyfikacji formalnej rozprawę doktorską można przypisać do dyscypliny Nauki Fizyczne ze względu na dwa ważne jej aspekty: (i) użycie złożonego formalizmu metody gazu sieciowego Boltzmanna z pogranicza mechaniki statystycznej (ii) oraz badania fizyki układów złożonych (za takie mogą uchodzić ośrodki porowate). Poza dominantą nauk fizycznych, ważne są w pracy także aspekty mechaniki płynów oraz nauk obliczeniowych.

2. Zawartość rozprawy

Rozprawa liczy 110 stron, została napisana w języku angielskim, zawiera streszczenia w języku angielskim i polskim (nie podano jednakże polskiego tytułu pracy). Streszczenia są dość krótkie, ale dobrze oddają zakres pracy oraz istotę raportowanych w niej osiągnięć. Jako w pewnym sensie uzupełnienie streszczenia, przedstawiono listę tychże oryginalnych osiągnięć; po zapoznaniu się z treścią całej rozprawy, mogę zdecydowanie potwierdzić, że lista jest dobrze przygotowana i użyteczna. Rozprawa zawiera także wykaz publikacji Doktoranta (wszystkie z lat 2023-24): są to 2 artykuły naukowe w czasopismach z listy JCR oraz 2 rękopisy prac złożonych do recenzji (preprinty), a także listę wystąpień konferencyjnych. Bibliografia rozprawy składa się ze 143 pozycji; ich dobór pośrednio dowodzi bardzo dobrego rozeznania Doktoranta w tematyce LBM, w wariantach metody (w tym bezsiatkowym) oraz w jej aspektach numerycznych.

Praca składa się z siedmiu rozdziałów pokrótce opisanych poniżej. Obszerne wprowadzenie do tematyki zawarte w rozdziałach 1-3 stanowi połowę objętości rozprawy nadając jej rys monografii; oryginalny wkład Doktoranta zawierają rozdziały 4-6.

W bardzo krótkim **rozdziale 1** Doktorant przedstawia rolę zjawisk transportu, zależności je opisujące, motywację do ulepszeń metod numerycznego rozwiązywania równań transportu, a na tym tle formułuje cel rozprawy oraz jej zakres. Jest to w skrócie: analiza wybranych przypadków przepływu z zastosowaniem bezsiatkowej LBM (ang. *meshless* LBM, MLBM), a przy tym ocena efektywności obliczeniowej tego podejścia. **Rozdział 2** składa się z dwóch części. W pierwszej zawarto krótkie repetytorium podstaw dynamiki płynów i stosowanych metod obliczeniowych, a w drugiej przywołano równanie transportu Boltzmanna oraz wyprowadzenie stąd makroskopowych równań przepływu. Na kanwie tych informacji, w **rozdziale 3** przedstawiono elementy wiedzy literaturowej na temat standardowej (siatkowej) metody LBM, używanych schematów dyskretyzacji, aproksymacji członu zderzeniowego z pojedynczym czasem relaksacji (SRT) oraz w wersji macierzowej (MRT). W tej części rozdziału Doktorant wykazuje się dużą wiedzą i znajomością literatury z zakresu LBM; ciekawym interludium jest informacja o zastosowaniu technik uczenia maszynowego (tu: CNN) do zagadnienia dyfuzji w ośrodku porowatym, którego rozwiązanie uzyskano w symulacji LBM. Informacje te są jednak przedstawione skrótowo, zapewne dlatego, że sytuują się obok głównego nurtu rozprawy. W kolejnej części rozdziału przedstawiono zarys ogólnej prezentacji metod bezsiatkowych jako tło do wprowadzenia następnie bezsiatkowej LBM będącej w centrum rozprawy (NB: w pierwszym kontakcie termin „bezsiatkowa metoda siatkowa Boltzmanna" może wydać się oksymoronem, a przynajmniej jest zaskakujący). W **rozdziale 4** przedstawiono wyniki badań MLBM uzyskane dla wybranych przypadków przepływów dwuwymiarowych z zastosowaniem oryginalnej implementacji w kodzie obliczeniowym Doktoranta. Są to: (i) przepływ Taylora-Greena (periodyczne w.b.), (ii) przepływ w pierścieniu przy występowaniu siły masowej o kierunku azymutalnym (granica obszaru przepływu nie pokrywa się z liniami siatki

regularnej, występuje tylko obwodowa składowa prędkości) oraz (iii) przepływ w ośrodku porowatym (periodyczne w.b. założone w głównym kierunku przepływu). W **rozdziale 5** przedstawiono wyniki przeprowadzonego studium przepływu 3D przez ośrodek porowaty, wywołanego przez pole siły masowej, oraz ich dyskusję i interpretację. Ośrodek utworzony jest przez regularny układ kul; dobór promienia kul pozwala na uzyskanie szerokiego zakresu wynikowej porowatości. **Rozdział 6** dotyczy efektywnego zastosowania MLBM do przepływów w zakresie bezwładnościowym (poza reżimem przepływu pełzającego Stokesa i prawa Darcy). Jak przypadek testowy posłużył opływ cylindra przy $\mathrm{Re}=O(10^2)$ oraz modelowy ośrodek porowaty złożony z cylindrycznych przeszkód. W **rozdziale 7** zawarto krótkie podsumowanie treści rozprawy i najważniejszych uzyskanych wyników.

3. Ocena rozprawy i pytania do Doktoranta

Rozprawa jest wymagająca w lekturze, ale zredagowana starannie, logicznie i konsekwentnie, potwierdzając umiejętność prowadzenia przez Doktoranta pracy badawczej na wysokim poziomie; nie dostrzegłem niedoskonałości merytorycznych odnośnie sformułowań, metodyki badań, prowadzenia dyskusji uzyskanych wyników ani przedstawienia wniosków.

Zastosowany przez Doktoranta bezsiatkowy wariant LBM w założeniu pozwala na przezwyciężenie dwóch ograniczeń związanych z zastosowaniem regularnego, jednorodnego przestrzennie rozkładu punktów węzłowych. Są to kwestie wynikające wprost z natury różnorakich zagadnień przepływowych i znane także w innych metodach CFD: uwzględnienie złożonej geometrii (granica obszaru przepływu niepokrywająca się z liniami siatki) oraz potrzeba adaptacji lokalnej gęstości siatki do zmienności przestrzennej rozwiązania (np. w pobliżu ścianek ciała stałego). Kosztem, który w MLBM należy ponieść, jest większa złożoność algorytmu metody oraz konieczność interpolacji, co pokazano także w schemacie pseudokodu tego wariantu (str. 53-54).

Oceniając rozprawę, należy docenić duży wkład pracy Doktoranta: w pierwszej kolejności na dogłębne zrozumienie metody LBM na poziomie teorii oraz praktyki metod numerycznych, a następnie na opracowanie własnego kodu obliczeniowego w podejściu bezsiatkowej LBM z zastosowaniem dostępnej biblioteki oprogramowania w języku C++.

Zasadnicze osiągnięcia przedstawione z rozprawie to: (i) rozwinięcie technik uzyskiwania niejednorodnego przestrzennie rozkładu węzłów, w tym także tak zwanych strefowo-hybrydowych (ang. *zonal-hybrid*) – na przykład w układzie: warstwa węzłów oddająca zakrzywiony kształt brzegu (walca, kuli), strefa przejściowa o rozkładzie niejednorodnym, wreszcie obszar regularnej siatki węzłów (por. rys. 6.7); (ii) umiejętny dobór przypadków testowych przepływów lepkich dwu- i trójwymiarowych oraz (iii) przeprowadzenie przez Doktoranta szczegółowych analiz, które wykazały przewagę rozwijanego podejścia nad standardowym LBM w wybranych przypadkach i jednocześnie wskazały na obszary występujących trudności, aż po – niekiedy – niemożliwość uzyskania zbieżnego rozwiązania.

Bardzo interesujące jest studium przepływu w geometrii reprezentującej ośrodek porowaty, zwłaszcza 3D, oraz uzyskane wyniki dla dużego zakresu porowatości wraz z przeprowadzoną analizą zbieżności rozwiązania, wpływu nierównomierności rozkładu przestrzennego węzłów, poziomu błędów oraz skalowania złożoności obliczeniowej. Równie ciekawa jest analiza zastosowania bezsiatkowej metody gazu sieciowego Boltzmanna z hybrydowym rozkładem węzłów w zastosowaniu do kanonicznego przypadku opływu walca w zakresie laminarnym z okresowym schodzeniem wirów. W obu tych przypadkach

(zob. pytania poniżej) pożyteczne byłoby jednak podanie większej liczby szczegółów i ewentualnie porównanie z innymi metodami obliczeniowymi.

Proszę jeszcze Autora o odpowiedź na kilka pytań, które nasunęły się po lekturze rozprawy – głównie chodzi o rozwinięcie przedstawionych tam informacji.

Pytanie 1: przegląd literatury na temat *off-grid LBM* (rozdz. 3.3.1) jest ważny i potrzebny; przydałoby się jeszcze (o ile na tym etapie jest to możliwe) syntetyczne podsumowanie, na ile te metody są już dojrzałe, czy i jakie są perspektywy ich dalszego rozwoju, itd. Podobnie przedstawione w rozdz. 6.4 i 7 konkluzje z własnych badań MLBM warto jeszcze rozwinąć.

Pytanie 2: zastosowana procedura iteracyjna relaksacji położenia węzłów aby uzyskać rozkład bliższy jednorodnemu (ostatni akapit rozdz. 3.2.5) jest ciekawa – przydałoby się jednak więcej szczegółów: jak określa się kolejne przemieszczenia, jaka jest zbieżność procedury (i jakie kryterium stopu przyjęto), jaki jest koszt obliczeniowy tego modułu, itd.

Pytanie 3: czy raportowany przez Doktoranta brak zbieżności MLBM w niektórych sytuacjach można powiązać z niedoskonałością powyższej procedury relaksacji, np. występująca lokalna anizotropia rozkładu węzłów, która znacząco pogarsza dokładność (z powiązaniu z interpolacją, problem znany na przykład w metodzie SPH)?

Pytanie 4: przedstawione w rozdz. 5 porównanie wyników MLBM i bezsiatkowego rozwiązania MNS jest bardzo ciekawe. Natomiast pouczającym byłoby zestawienie ich z rozwiązaniem uzyskanym przy zastosowaniu klasycznej metody CFD, np. metody objętości skończonych, bądź to z użyciem siatki ściśle oddającej geometrię granicy obszaru przepływu (*body-fitted mesh*), bądź to z użyciem podejścia zanurzonego brzegu (*immersed boundary method, IBM*). W szczególności, jak przedstawiałby się koszt obliczeniowy (rys.5.14) np. w zestawieniu z FVM?

Pytanie 5: w rozdz. 5.4 opisano brak zbieżności rozwiązania wynikający z małej liczby węzłów w obszarze szczeliny między sąsiednimi kulami (rys. 5.6). Jak rozumiem, osiągnięto granicę możliwości obliczeniowych – czy jednak dalsze zmniejszenie h_{min} celem lokalnego zwiększenia rozdzielczości metody w tym obszarze byłoby tu pomocne? I jak tę trudność związaną z obecnością wąskiej szczeliny pokonano w cytowanych pracach [130-131]?

Pytanie 6: przedstawione wyniki opływu walca budzą zaufanie, ale dotyczą dość wąskiego zakresu liczb Reynoldsa. Czy dla celów ilościowej weryfikacji jakości rozwiązania z zastosowaniem hybrydowego rozkładu węzłów nie byłoby wskazane rozważenie najpierw opływu ustalonego (Re<40)? Ponadto, przydatne byłoby wyznaczenie innych wielkości poza liczbą Stokesa: współczynnika oporu oraz współczynnika siły nośnej, których przebieg w funkcji Re są dobrze udokumentowany w literaturze. Idąc w drugą stronę: jakie wartości Re są w zasięgu metody dla przypadku opływu walca i ewentualnie także dla 3D opływu kuli?

Uwagi redakcyjne. Praca napisana jest bardzo dobrym językiem angielskim, zarówno od strony gramatyczno-stylistycznej jak i używania fachowych pojęć; czyta się ją dobrze. Należy również docenić dużą dbałość Autora o stronę redakcyjną rozprawy, a także staranność w przygotowaniu większości rysunków. Dla porządku przedstawiam poniżej listę istotniejszych uwag redakcyjnych. Nie mają one wpływu na czytelność pracy i jej zrozumienie. Podobnie jak w przypadku sformułowanych wyżej pytań rzeczowych, także i tu prosiłbym Doktoranta o odpowiedź.

a) w streszczeniu rozprawy jest zapowiedź, że ośrodek porowaty będący przedmiotem badań w rozdz. 4.3 został wygenerowany w oparciu o teselację Woronoia, natomiast informacja na ten temat nie pojawia się dalej (?);

b) występujące w streszczeniu oraz w rozdz. 4 określenie „zbieżność błędu” jest nieoczywiste: czy nie lepiej mówić o zbieżności rozwiązania oraz skalowaniu błędu (z wartością h, z liczbą węzłów N)?;

c) zapis $\boldsymbol{a} \equiv a_i$ (str. 6) jest jasny ale niezupełnie poprawny – lepiej z użyciem wersorów: $\boldsymbol{a} \equiv a_i \boldsymbol{e}_i$;

d) istotnie, każdy przepływ wiąże się z transportem *masy*, natomiast – ściśle biorąc – równania Eulera i Naviera-Stokesa rządzą transportem *pędu* (str. 9);

e) na str. 10 mowa o polach *zmiennych stanu* takich jak ciśnienie i prędkość; w języku termodynamiki zmienne stanu odnoszą się do wielkości określających np. energię wewnętrzną, natomiast (makroskopowa) prędkość taką wielkością nie jest;

f) w równaniach 2.11 i 2.12 jest błąd indeksu;

g) str. 20, warunek CFL – poprawnie: Fr**i**edrichs i Le**w**y;

h) rozdz. 5.3: termin *boundary layer* jest zazwyczaj używany w węższym znaczeniu, do przepływów „szybkich” (w przybliżeniu warstwy przyściennej Prandtla);

i) czy wyrażenie 5.8 na tensor naprężeń jest poprawne?

j) równanie 5.17 (zapewne poprawne): skąd bierze się tam liczba 56? (czy związek z DnQm?).

4. Podsumowanie

Przedstawiona do oceny rozprawa dokumentuje ogólną wiedzę teoretyczną Doktoranta w dyscyplinie Nauki Fizyczne (w szczególności w zakresie metod obliczeniowych fizyki) oraz umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy badawczej i stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego. W pracy przedstawiono własne badania Doktoranta przeprowadzone z użyciem zaawansowanych metod modelowania matematycznego przepływów oraz własnego programu obliczeniowego. Szczegółowo opisano i krytycznie zinterpretowano uzyskane nowe wyniki wnoszące wkład w lepsze rozumienie mocnych stron oraz zakresu stosowalności tych metod.

Z pełnym przekonaniem stwierdzam, że opiniowana praca spełnia wymagania stawiane zwyczajowo rozprawom doktorskim oraz odpowiada warunkom określonym w odpowiednich przepisach obowiązującej Ustawy o Stopniach i Tytule Naukowym. W konkluzji **wnioskuję o dopuszczenie mgr. Dawida Strzelczyka do publicznej obrony rozprawy doktorskiej**.

Biorąc pod uwagę złożoność zastosowanego podejścia MLBM do analizy przepływów, tak od strony fizykalnej jak i obliczeniowej, a także ze względu na uzyskane nowe i interesujące wyniki, po części już opublikowane (uznane czasopismo *Computers & Fluids* z listy JCR), wnioskuję o rozważenie możliwości **wyróżnienia rozprawy**.