Warszawa, 19 grudnia 2024 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej Pana mgra inż. Dawida Strzelczyka pt. *Study of fluid transport phenomena using meshless Lattice Boltzmann Method.*

Niniejsza recenzja została sporządzona na zlecenie Rady Dyscyplin Naukowych Astronomia i Nauki Fizyczne Uniwersytetu Wrocławskiego (umowa nr WFA.412.22.2024.KD)

1. Ogólny kontekst i tematyka pracy

Trwający od kilkudziesięciu lat intensywny rozwój metod obliczeniowych dedykowanych szeroko pojętej mechanice płynów zaowocował wielkim bogactwem podejść i sformułowań. Rozwojowi temu towarzyszył szybki wzrost możliwości obliczeniowych komputerów, w systemów wieloprocesorowych, umożliwiających rozwiązywanie bardzo złożonych problemów w trybie obliczeń zrównoleglonych. Rozwój technologii obliczeniowej, ostatnio opartej także ma wykorzystaniu kart graficznych (GPU), stymuluje, czy też wręcz preferuje, skupienie się na metodach lokalnych i z jawnymi schematami całkowania względem czasu. Do tej grupy należą metody oparte na koncepcji gazu sieciowego Boltzmanna. Używam tu celowo liczby mnogiej, bowiem liczba wariantów tego podejścia skłania raczej do mówienia o rodzinie metod. Metody te wyrastają ze wspólnego pnia, którym jest centralne równanie mechaniki statystycznej czyli równanie Boltzmanna. W klasycznym ujęciu metody LB polegają na zastąpieniu ciągłego rozkładu gęstości prawdopodobieństwa w sześciowymiarowej przestrzeni fazowej dla pojedynczej cząstki gazu skończoną liczbą gęstości przypisanych do z góry określonego, skończonego zbioru kierunków wektora prędkości, a także na zastąpieniu całki zderzeń Boltzmanna jej łatwo obliczalną aproksymacją, czyli tzw. operatorem kolizji. Kolejnym krokiem klasycznej metody LB jest wprowadzenie w obszarze przepływu dyskretnego zbioru położeń hipotetycznych cząstek, z reguły tworzącego siatkę kartezjańską. Istotna cechą metod LB jest ścisłe powiązane pomiędzy krokiem czasowym (metody te są z samej natury niestacjonarne) a dyskretyzacja przestrzenną - cząstki gazu sieciowego, a w zasadzie wartości chwilowe gęstości prawdopodobieństwa dla poszczególnych kierunków prędkości, przesuwane są do sąsiednich węzłów siatki. Operator kolizji powoduje lokalną zmianę wartości w węzłach siatki, przy czym jest to operacja całkowicie lokalna. W najprostszym wariancie (podstawowy model BGK) zmiana wywołana „kolizją" jest proporcjonalna do odchylenia aktualnej wartości gęstości od jej wartości równowagowej. W operatorze kolizji pojawia się także tzw. czas relaksacji, który, wraz z krokiem czasowym, determinuje makroskopową lepkość. Znajomość wartości chwilowych wartości gęstości prawdopodobieństwa w węzłach sieci pozwala na obliczenie lokalnych wartości gęstości i pola prędkości, a te z kolei determinują lokalne wartości równowagowe. Ciśnienie rozumiane jako makroskopowa funkcja stanu obliczane jest z bardzo prostego równania stanu.

Jednym z istotnych problemów w metodach LB jest kwestia formułowania warunków brzegowych, które – na poziomie makroskopowym – odpowiadałyby warunkom stawianym w

klasycznym podejściu polowym, czyli w przypadku nieściśliwego płynu lepkiego, dla równania Naviera-Stokesa. O ile postawienie warunku Dirichleta (w szczególności zerowania się prędkości na brzegu materialnym) nie nastręcza większych problemów, to implementacja warunków bardziej złożonych (jak warunki naprężeniowe, otwarte i ich nieliniowe uogólnienia) jest nietrywialne. Pewnym wyzwaniem, szczególnie dla początkujących użytkowników, jest także kwestia zachowania podobieństwa dynamicznego. Zmiana jednego z parametrów symulacji metodą LB (np. rozmiaru oczka siatki) wiąże się koniecznością dostosowania innych parametrów tak, aby zachować wartość istotnych cech makroskopowych, np. liczb podobieństwa. Możliwość manipulacji parametrami symulacji LB jest dodatkowo ograniczona koniecznością utrzymania w ryzach implikowanej dyskretyzacją liczby Macha na poziomie, który minimalizuje efekty ściśliwości gazu sieciowego i wynikające z niej artefakty na poziomie makroskopowym.

Po stronie niewątpliwych zalet metod LB należy wymienić ich lokalność, a także to, że są to metody jawne i de facto 2-ego rzędu dokładności względem czasu. Jako takie poddają się względnie łatwej masywnej paralelizacji i wykazują dobrą skalowalność. Obecnie metody LB są metodami pierwszego wyboru w szeregu zastosowań, szczególnie w przypadkach bardzo złożonych geometrii (np. struktury porowate). Metody te, w klasycznej postaci, mają problemy z przepływami z wyższymi liczbami Reynoldsa, chociaż odnotować należy systematyczny postęp w kierunku możliwości modelowania takich przepływów, a nawet turbulencji. Istnieje bowiem sformułowanie metody w terminach tzw. kumulantów, zaproponowano także skuteczne metody hybrydowe np. LBM-LES.

Tematyką rozprawy doktorskiej mgra inż. Dawida Strzelczyka (zwanego dalej Doktorantem) jest sformułowanie i wszechstronne przetestowanie nowego wariantu metody gazu sieciowego Boltzmanna (LBM). Wariant ten, zwany Meshless LBM (MLBM) charakteryzuje się rezygnacją ze stosowanie regularnej kartezjańskiej siatki w obszarze przepływu i zastąpieniu jej chmurą swobodnych węzłów służących jako centra odpowiedniej procedury interpolacyjnej. Zaletą takiego podejścia jest brak jawnej zależności pomiędzy rozdzielczością przestrzenną symulacji a krokiem czasowym. Umożliwia to elastyczne kształtowanie lokalnej rozdzielczości przestrzennej metody bez konieczności manipulowania krokiem czasowych, który z kolei implikuje efektywną lepkość płynu. Ponadto, podejście bezsiatkowe znacząco ułatwia realizacje warunków brzegowych stawianych na liniach/powierzchniach zakrzywionych, a zatem niedopasowanych do klasycznej siatki kartezjańskiej.

Jako pomysł relatywnie nowy, aktualna wiedza na temat właściwości bezsiatkowej metody LB jest znacząco uboższa w porównaniu ze standardowymi wariantami tej metody. Fakt ten, a także potencjał wariantu bezsiatkowego jako skutecznej i efektywnej obliczeniowo metody symulacji procesów transportu w obszarach o złożonej geometrii, uzasadnia podjęcie pogłębionych badań nad tym wariantem przez Doktoranta. Badania te mają dwojaki charakter. Z jednej strony, Doktorant skupia się w rozprawie na systematycznej analizie dokładności badanego wariantu LB i konfrontuje jakość uzyskiwanych wyników z wynikami wariantu klasycznego. Z drugiej strony, Doktorant koncentruje się również na aspekcie efektywnej implementacji i przeprowadza obszerną analizę porównawcza w zakresie wydajności

obliczeniowej. Oba te aspekty, rozważane w ścisłym związku ze sobą, mają kluczowe znaczenia dla wykazania tezy rozprawy. Tezę tę – choć Doktorant nie formułuje jej jawnie – można by ująć słowami: odpowiednio sformułowana i zaimplementowana bezsiatkowa metoda LB nie ustępuje pod względem dokładności i efektywności obliczeniowej metodzie klasycznej, górując nad nią pod innymi, istotnymi dla jej zastosowania, względami.

Rozprawa doktorska Doktoranta wpisuje się we współczesny trend podążania w kierunku najlepszych rozwiązań w ramach metody gazu sieciowego Boltzmanna. Będąc przekonanym, że metody LB są i pozostaną jednym z najsilniej rozwijanych podejść do modelowania numerycznego zjawisk i procesów w rozmaitych gałęziach fizyki, w szczególności szeroko rozumianych termodynamice i mechanice płynów i ich wielorakich zastosowaniach, mogę stwierdzić, że tematyka badań podjętych przez Doktoranta i przedstawionych w Jego rozprawie doktorskiej jest aktualna i naukowo interesująca. Nie mam też wątpliwości, że problemy naukowe poruszone i rozwiązane przez Doktoranta mogą być przedmiotem rozprawy doktorskiej w dyscyplinie Nauki Fizyczne i Astronomia.

2. Struktura i zawartość merytoryczna pracy

Recenzowana rozprawa napisana jest bardzo poprawnym i precyzyjnym językiem angielskim, świadczącym zarówno o znakomitym opanowaniu tego języka przez Doktoranta, jak i o ogólnej umiejętności logicznego i klarownego formułowania myśli. Całkowita objętość rozprawy to 107 stron, w tym zasadnicza część rozprawy liczy ok. 90 stron. Zasadnicza część obejmuje siedem rozdziałów. W pierwszym rozdziale Doktorant przedstawia dość szeroko motywację podjęcia przedstawionej z rozprawie tematyki badań. Doktorant nie formułuje jawnie tezy badawczej, co można uznać za pewne uchybienie, ale, jak wspomniałem wyżej, teza ta wyłania się z sposób dość oczywisty z opisanej motywacji. W rozdziale drugim Autor wprowadza czytelnika w zagadnienia teoretyczne z zakresu modelowania matematycznego przepływów i metod numerycznych. Przegląd ten jest zwięzły, a jego zakres ściśle podporządkowany dalszym rozważaniom. Doktorant przytacza tu podstawowe równania klasycznej mechaniki płynów i wspomina i metodzie homogenizacji zastosowanej do ośrodka porowatego, co, jak wiadomo, prowadzi do modelu Darcy'ego. Autor przedstawia także schemat całkowania równia adwekcji, w szczególności przekształcenie stabilnego niejawnego schematu 2-ego rzędu do postaci jawnej. Jak wiadomo, możliwość takiego przekształcenia prowadzi do uzyskania 2-ego rzędu dokładności w metodach LB. Autor wspomina także schematy eulerowskie i metodę objętości skończonych. W tym miejscu należy zwrócić uwagę na błąd edycji wzoru (2.32) – zawiera on zbędne wyrażanie po lewej stronie pierwszego znaku równości. W dalszej części tego rozdziału Autor zdecydował się zamieścić dość szczegółowe wyprowadzenie równań mechaniki płynów z kinetycznego równania Boltzmanna (w wariancie ciągłym). Jakkolwiek jest to wynik znany i dobrze opisany w literaturze, posunięcie Autora uważam za trafne z następujących powodów. Po pierwsze, w przedstawionym wyprowadzeniu podkreśla się fakt, że opisywane przejście do opisu makroskopowego „działa" o ile operator kolizji spełnia warunki (2.36). To istotne, bo wynika stąd pewna swoboda wyboru postaci tego operatora. Po drugie, rozważania na str. 25 pokazują z pełna jasnością, że wprowadzenie do modelu

makroskopowej lepkości wymaga analizy odchylenia stanu od postaci równowagowej i w konsekwencji „tarcie wewnętrzne" czyli makroskopowa dyssypacja to proces nierównowagowy, de facto prowadzący do produkcji entropii.

W podobnym duchu prowadzone są rozważania w kolejnym rozdziale, gdzie Doktorant przedstawia rachunki prowadzące do wniosku, że metoda LB aproksymuje makroskopowy model hydrodynamiczny płynu newtonowskiego. Autor przedstawia tam również koncepcję wariantu metody z wieloma (w szczególności dwoma) czasami relaksacji, czyli MRT (TRT). Ponownie, pomimo faktu, że są to zagadnienia dobrze opisane w literaturze (nawet podręcznikowej), uważam, że Doktorant postąpił słusznie, ponieważ w moim przekonaniu rozprawa doktorska powinna być – oczywiście w rozsądnym zakresie – „samowystarczalna" pod względem opisu podstaw teoretycznych. Pozostała część rozdziału trzeciego poświęcona jest stopniowemu omówieniu zagadnień o charakterze algorytmicznym/numerycznym. W szczególności, Doktorant koncentruje się na kluczowej dla dalszych rozważań kwestii aproksymacji funkcji przy użyciu niestrukturalnej chmury węzłów. Omawia także szczegółowo wszystkie aspekty bezsiatkowej metody LB, a także jej efektywnej implementacji i złożoności obliczeniowej. Za bardzo dobry pomysł uznaję prezentowanie kolejnych algorytmów z formie pseudokodów, co znakomicie ułatwia zrozumienie przebiegu operacji i różnic pomiędzy rozmaitymi wariantami.

Systematyczne badanie właściwości zaproponowanej metody i jej porównanie ze „standardową" LBM Doktorant rozpoczyna z rozdziale 4, a następnie kontynuuje w rozdziałach 5 i 6. Pierwsze z testów dotyczą przepływów Taylora-Greena i Taylora-Couette'a, w obu przypadkach opisanych analitycznymi rozwiązaniami nieściśliwego równania Naviera-Stokesa. Autor analizuje tu zależność błędu symulacji (mierzonego w dyskretnej normie L_2) od liniowej miary gęstości chmury węzłów eulerowskich. W kolejnym teście, tym razem dotyczącym przepływ Stokesa przez układ kanałów symulujących wnętrze struktury porowatej, autor pokazuje zgodność wartości miary skrętności obliczonej za autorskiej metody bezsiatkowej i klasycznej metody LB. W kolejnym rozdziale Doktorant analizuje działanie swojej metody w przypadku trójwymiarowego przepływu pełzającego (model Stokesa) przez periodyczne przestrzennie złoże sferycznych ziaren. Autor porównuje uzyskane wyniki, a także złożoność i efektywność obliczeniową metody autorskiej z bezsiatkową metoda sztucznej ściśliwości opracowaną przez jednego ze współpracowników. Na końcu rozdziału autor formułuje krytyczne wnioski, stwierdzając m.in., że żadna z metod nie wykazuje zdecydowanej i systematycznej przewagi nad drugą.

W mojej ocenie najciekawsze testy dotyczą przepływów z większymi liczbami Reynoldsa, przedstawione w rozdziale 6. Pierwszy z nich dotyczy przepływu dwuwymiarowego wokół konturu kołowego umieszczonego w płaskim kanale. Jest to klasyczny „benchmark", stanowiący temat wielu wcześniejszych badań, zarówno numerycznych jak i eksperymentalnych. W teście tym autor koncentruje się przede wszystkim na porównaniu efektywności numerycznej metody bezsiatkowej i klasycznej. Wyniki dotyczące fizyki i parametrów ilościowych tego przepływu ograniczają się do próby wyznaczenia zależności

liczby Strouhala w funkcji liczby Reynoldsa, w dość wąskim zakresie zmienności tej ostatniej. Szerszym omówieniem koncepcji tego testu zajmę się w następnym rozdziale.

Drugi z testów to periodyczny i także dwuwymiarowy przepływ przez nieregularny układ przeszkód, który, przy odrobinie dobrej woli, można uznać za model „luźnej" struktury porowatej. Podobnie jak we wcześniejszych testach takich przypadków jedyne wyniki ilościowe przedstawione w pracy (oprócz map konturowych pola prędkości) to zależność uśrednionej prędkości od wielkości członu siłowego (jest to de facto wykres zmian opory hydraulicznego) oraz wykres zależności parametru skrętności pola przepływu w funkcji liczby Reynoldsa. Informacja na obu tych wykresach jest spójna i pokazuje, ze nieliniowe efekty inercyjne pojawiają się po przekroczeniu „krytycznej" wartości prędkości średniej i skorelowanej z nią liczby Reynoldsa.

Rozdział siódmy zawiera krótkie podsumowanie i wnioski końcowe.

3. Ocena rozprawy, uwagi krytyczne/polemiczne i problemy do wyjaśnienia.

Przechodząc do ogólnej oceny pracy podkreślę powtórnie właściwy dobór tematyki koncentrującej się wokół aktualnych problemów i niedostatków metod LB. W tym kontekście każdy sensownie sformułowany i przeprowadzony program badan i testów jest pożądany i zasługuje na uznanie. Takimi atrybutami legitymuje się w szczególności program badań zrealizowanych przez Doktoranta, z których udanym raportem jest zarówno recenzowana rozprawa jak i towarzyszące jej współautorskie publikacje.

Duże wrażenie zrobiła na mnie obszerność cytowanej w pracy literatury, a także sposób jej wykorzystania i omawiania świadczące o autentycznie głębokiej znajomości obszary badań. O świetnej jakości i precyzji języka już wspomniałem. Logiczna jest także struktura pracy, jakość edycyjna i graficzna. Doceniam także zamieszczenie w pracy umiejętnie napisanych sekcji prezentujących, także w szczegółach, podstawy teoretyczne. Wynika to z mojego przekonania, że rozprawa doktorska, chociaż będąc przede wszystkim raportem oryginalnych wyników naukowych, powinna mieć także walory dydaktyczne. Recenzowana rozprawa jest przykładem właśnie takiej kombinacji i to w dobrych proporcjach.

Podczas lektury rozprawy nasunęły mi się pewne uwagi i pytania. Poniżej zamieszczam listę najważniejszych z nich i proszę uprzejmie Doktoranta do odniesienie się do nich w trakcie publicznej obrony.

1. Jak realizowany jest warunek brzegowy bounce-back w bezsiatkowej metodzie LB zastosowanej w testach numerycznych omówionych w rozprawie? Jak zrealizowałby Pan w tej metodzie inne (niż Dirichleta) warunki brzegowe, w szczególności popularny w modelowanie przepływów wewnętrznych warunek otwarty tj.
   $$p\mathbf{n} - \mu \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{g}$$

2. Jak wyglądałoby uogólnienie zaproponowanej metody na przypadki z ruchomymi granicami? Jak rozumiem, wiązałoby się to typowo z koniecznością zmiany położenia punktów Eulera, a nawet – w przypadku dużych deformacji – ich ponownej generacji (re-meshingu). Z jakim kosztem dodatkowym kosztem numerycznych wiązałyby się te operacje? Jak wypadałoby porównanie efektywności metody bezsiatkowej LB z metoda „klasyczną".
3. Zastosowany z pracy „benchmark" w postaci matrycy wirów Taylora-Greena można uogólnić. Okazuje się bowiem, że przepływ, którego funkcja prądu określona jest wzorem

$$\psi(t,x,y) = e^{-\nu k^2 t} \sum_{(j)} \sin \alpha_j x \sin \beta_j y \ , \ \forall j : \alpha_j^2 + \beta_j^2 = k^2$$

jest ścisłym rozwiązaniem równania N-S na płaszczyźnie. Warto zwrócić uwagę, że 'flow pattern" tego przepływu może być bardzo nieregularny w przestrzeni, ale ewoluuje w trywialny sposób, taki jak pojedyncza periodyczna matryca wirów T-G. Jak się wydaje jest to bardzo wymagający benchmark.
4. W kontekście testu polegającego na symulacji opływu konturu kołowego narzuca się uwaga, że postawienie na wylocie w kanału warunku Dirichleta, czyli zadanie wylotowego profilu prędkości jest matematycznie dopuszczalne, ale niefizyczne. Z oczywistych powodów profil wylotowy nie będzie stały w czasie, ani też nie będzie symetryczny. Zafiksowanie wylotowego profilu prędkości powoduje także inną dynamikę wirów w śladzie i może mieć wpływ na okresowość spływania wirów z przeszkody, czyli na postać zależności liczby Strouhala of liczby Reynoldsa. W takiej sytuacji trudno oczekiwać dobrej zgodności z eksperymentem, gdzie warunek wylotowy z pewnością się nie realizuje, chyba, że wylot kanału jest daleko za przeszkodą.

   Nawiasem mówiąc, sama idea użycia przepływu wokół przeszkody umieszczonej w kanale jest bardzo dobra. Przepływy z większymi przeszkodami (tzw. blockage ratio, BR, na poziomie 30 % i więcej) mają bardzo ciekawą dynamikę. Ponieważ wiry schodzące w przeszkody indukują periodyczną generację wirów na ścianach kanału i silnie nieliniową interakcję.
5. Kontynuując wątek z poprzedniego punktu: szkoda, że w teście z przepływem z przeszkodą Doktorant nie pokusił się o porównanie chwilowych profili prędkości, nie pokazał także pola wirowości.
6. Jednym ze standardowych z CFD benchmarków z „niezliczoną" liczbą testów i powszechnie dostępnymi wynikami jest przepływ w jamie z ruchomą pokrywą (lid-driven cavity flow). Zastanawia mnie bak tego standardowego testu. Przeoczenie czy celowa decyzja?

4. Konkluzja

Przedłożoną przez Pana mgra Dawida Strzelczyka rozprawę doktorską oceniam bardzo wysoko, a sformułowane wyżej uwagi, raczej polemiczne niż krytyczne, nie mają istotnego wpływu na tę ocenę. Doktorant podjął się złożonego zadania polegającego na opracowaniu

bezsiatkowej metody gazu sieciowego Boltzmanna, co samo w sobie jest nietrywialne i wymagało sformułowania/rozwiązania szeregu problemów szczegółowych, przede wszystkim z zakresu metod obliczeniowych i ich efektywnej implementacji. Poprawności i efektywności obliczeniowej opracowanych algorytmów Doktorant dokazał poprzez przeprowadzenie w większości adekwatnie dobranych testów, wykazując się przy tym znajomością zasad i dobrych praktyk, a także uczciwością naukowa i krytycyzmem względem własnych osiągnięć. Doktorant dowiódł także, że umiejętnie łączy głęboką wiedzę teoretyczną z umiejętnościami programistycznymi, co jest nieczęstym połączeniem. Doktorant wykorzystał w umiejętny sposób bogatą literaturę przedmiotu, dowodząc znakomitego rozeznania w aktualnym stanie rozwoju metod LB. Wnioski formułowane w pracy przez Doktoranta znajdują pokrycie w otrzymanych wynikach i świadczą o dużej dojrzałości badawczej. Doktorant ma także świadomość aktualnych ograniczeń proponowanych metod i, jak się wydaje, ma plan na dalszą działalność w celu ich pokonania.

Przedłożona rozprawa jest napisana przejrzyście, a kolejne etapy przeprowadzonych badań prowadzą do uzasadnienia oczekiwań wobec nowej metody, czyli potwierdzenia (niejawnie sformułowanej!) tezy badawczej. W moim przekonaniu uzyskane w pracy wyniki są oryginalne i przedstawiają dużą wartość naukową. Otwierają także nowe, obiecujące perspektywy rozwoju dokładnych i wydajnych obliczeniowo metod symulacji procesów transportu, także w tak złożonych przypadkach jak przepływy w strukturach porowatych.

Mając powyższe na uwadze stwierdzam, że rozprawa Pana mgra Dawida Strzelczyka spełnia wszystkie wymagania stawiane pracom doktorskim, zarówno ustawowe jak i te związane w najlepszymi praktykami prowadzenia współczesnych badań naukowych. Dlatego bez wahania wnioskuję o dopuszczenie Pana mgra Dawida Strzelczyka do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Ponadto, biorąc pod uwagę zdecydowanie ponad przeciętny poziom naukowy przedłożonej rozprawy, a także wartość i oryginalność uzyskanych przez Doktoranta wyników, zarówno pod względem poznawczym jak i potencjalnych zastosowań w modelowaniu zjawisk i procesów fizycznych, a wreszcie to, że wyniki badań Doktoranta były już publikowane w czasopismach i materiałach konferencyjnych o zasięgu międzynarodowym, wnioskuję o wyróżnienie rozprawy.

Prof. dr hab. inż. Jacek Szumbarski