Wrocław, 2023-10-10

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Grzegorza Gruszczyńskiego

"Applications of the Lattice Boltzmann Method to solving advection-diffusion-reaction problems coupled with Navier-Stokes equations"

Informacje ogólne

Przedstawiona mi do oceny praca doktorska pt. "Applications of the Lattice Boltzmann Method to solving advection-diffusion-reaction problems coupled with Navier-Stokes equations" została napisana przez mgra Grzegorza Gruszczyńskiego, pod kierunkiem prof. Jacka Szumbarskiego (promotora) oraz dra Łukasza Łaniewskiego-Wołłka (promotora pomocniczego) w Instytucie Techniki Lotniczej i Mechaniki Stosowanej Wydziału Mechanicznego Energetyki i Lotnictwa Politechniki Warszawskiej.

W przedstawionej pracy doktorskiej omówione zostały badania nad metodą gazu sieciowego Boltzmanna w zastosowaniu do rozwiązania problemów adwekcji, dyfuzji i reakcji oraz przepływu płynów. W metodzie tej, na gruncie teorii kinetycznej, stosuje się opis dynamicznych układów fizycznych z użyciem tzw. funkcji rozkładu, która stanowi kompletny opis układu dynamicznego. Wprost z niej można obliczyć m. in. makroskopowe wielkości fizyczne takie jak pole wektorowe prędkości, pole skalarne ciśnienia czy koncentrację. Metoda ta jest relatywnie nowa i stanowi alternatywę dla standardowych metod obliczeniowych komputerowej dynamiki płynów (CFD). Oprócz badań nad transportem, w rozprawie znalazł się rozdział o badaniach numerycznych nad dynamiką procesów epidemiologicznych.

Przedstawiona mi rozprawa jest bardzo obszerna (238 stron) i składa się z 13 części włączając literaturę i wstęp. Jej główne wyniki zostały opublikowane w trzech pracach naukowych w takich czasopismach Inernational Journal of Heat and Mass Transfer (200pkt) oraz Computers and Mathematics with Applications (dwie prace, 140pkt). Autor rozprawy zaprezentował swoje wyniki na kilku konferencjach międzynarodowych, włączając jedną z najważniejszych konferencji tematycznie związanej z metodą gazu sieciowego Boltzmana - konferencji ICMMES w 2022 roku, która odbyła się we Francji. Wystąpił tam z wykładem ściśle związanym tematycznie z tematyką zaprezentowanej rozprawy.

Ocena zawartości rozprawy

W rozdziale 1 rozprawy przedstawiony jest ogólny wstęp, motywacja i hipotezy badawcze. Autor wprowadza równania Naviera-Stokesa, równania dyfuzji z reakcją i przedstawia uszczegółowienie tych ostatnich na przypadek transportu ciepła oraz ewolucji brzegu w przepływie wielofazowym. Równania nie są opisane zbyt dokładnie - brakuje podstawowych informacji o opisywanych przez nie zjawiskach fizycznych. Przydałoby się tu dodatkowe wyjaśnienie, za co odpowiadają poszczególne człony przedstawionych równań i jaka motywacja stoi za wyborem właśnie tych równań do rozwiązania? Dodatkowo wprowadzone są też równania przestrzennej wersji modelu epidemii SIR (WSIR). Autor stawia cztery hipotezy badawcze związane z numerycznym rozwiązaniem wprowadzonych równań. Wszystkie hipotezy związane są z bezpośrednim zastosowaniem metody gazu sieciowego Boltzmanna (LBM). Podnosi on takie kwestie, jak rząd zbieżności metody

Matyka

numerycznej, intensywność reakcji zależnej od wartości symulowanego pola skalarnego, transport ciepła w płynie o wysokiej liczbie Prandtla, wpływ dokładności warunków brzegowych oraz użytego operatora kolizji w metodzie LBM na otrzymane wyniki, wpływ układu odniesienia operatora kolizji na dokładność i stabilność rozwiązania problemu symulacji płynu dwufazowego. Niejako na deser pojawia się tu model przestrzenny WSIR i pytanie o to jak modelować nim problem rozwoju epidemii. Wg mojej wiedzy są to problemy ważne i nowe, a autor prezentuje swoją szeroką wiedzę dotyczącą zjawisk transportu, odpowiednio formułuje problemy badawcze. Jedynym problemem jaki widzę jest ujęcie w tym miejscu (hipotezy badawcze) problemu epidemii - odnoszę wrażenie, że trochę na wyrost w pracy, która w tytule ma równania Naviera-Stokesa.

Na końcu rozdziału autor wspomina o kodzie obliczeniowym TCLB, którego używał do wykonania swoich badań. Jest to zaawansowana biblioteka numeryczna, która może pracować w wersji wieloprocesorowej GPU. Zajrzałem na stronę domową biblioteki i doktorant jest wymieniony na liście osób współtworzących bibliotekę, ale bez precyzyjnego wskazania jego udziału. Trudno jest ocenić jego wkład w rozwój ww biblioteki, ale uznaję to za ważny punkt w ocenie dokonań w trakcie doktoratu.

W rozdziale 2 omówiona jest w szczegółach metoda gazu sieciowego Boltzmanna: równanie transportu dla funkcji rozkładu prędkości, podstawowe prawa zachowania dla operatora kolizji w tym równaniu, obliczenia makroskopowych wielkości fizycznych z użyciem kolejnych momentów funkcji rozkładu, przybliżenie jednorelaksacyjne BGK oraz przybliżenie Boussinesq. Następnie przedstawione są dwa podejścia wiążące zarówno równanie transportu Boltzmanna z jego dyskretnym odpowiednikiem jak i podejście odwrotne (oba podejścia są zaczerpnięte z literatury). To, czego mi zabrakło to powiązanie metody LBM z modelem automatu komórkowego gazu sieciowego, gdzie dyskretne cząsteczki poruszające się po sieci regularnej reprezentują płyn. Podejście to zaprezentowane zostało np. w pracy

G. McNamara, G. Zanetti
Use of a Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata
Phys. Rev. Lett., 61 (1988), p. 2332

którą cytuję w recenzji, bo autor rozprawy, pomimo imponującej liczby 270 pozycji literaturowych, nie wymienił tej klasycznej (2897 cytowań wg Google Scholar na dzień dzisiejszy) pracy z tej dziedziny. Proszę zatem o ustosunkowanie się doktoranta do ww pracy oraz odpowiedź na pytanie czy uznaje on taką interpretację genezy metody LBM i potrafi uzasadnić, bądź zakwestionować jej powiązanie z automatem komórkowym gazu sieciowego LGA.

Począwszy od podrozdziału 2.4 autor prezentuje przykłady numerycznych wyprowadzeń potrzebnych do analizy metody LBM. Ogólnie rozdział ten, pomimo że wstępny - potwierdza szeroką wiedzę doktoranta w dziedzinie podejmowanej w pracy doktorskiej, w tym zaawansowane metody numeryczne. Być może trochę więcej można byłoby tu wspomnieć o podstawach fizycznych kolizji międzycząsteczkowych oraz podstawowych założeniach teorii kinetycznej gazów.
W rozdziale na końcu zaprezentowany jest ciekawy schemat ukazujący zalety metody LBM (rys. 2.5, str. 27). Schemat jest atrakcyjny, ale tu spodziewałbym się jednak wypunktowania tych cech w tekście uzupełnionym o odniesienia do literatury, na bazie której tezy są sformułowane.

W rozdziale 3. opisane są różne operatory kolizji stosowane w metodzie LBM. Jest to kolejny rozdział teoretyczny dotyczący metody gazu sieciowego Boltzmanna. Uwzględnione są operatory jedno- (SRT) i wielo-relaksacyjne (MRT, TRT). Autor opisuje tu też konstrukcję siatki obliczeniowej i sposób na liczenie kolejnych momentów funkcji rozkładu. Uwzględnia tu też momenty centralne obliczane w

Mafyl

ruchomym układzie odniesienia. Jako ilustrację prezentuje wybór parametrów dla modelu dwuwymiarowego z dziewięcioma kierunkami prędkości (model D2Q9) prezentując jego opis w przestrzeni momentów (zamiast przestrzeni gęstości). Przy równaniu 3.15 autor enigmatycznie stwierdza, że w sposób oczywisty taki wybór momentów spełnia warunki dla równania adwekcji-dyfuzji i reakcji. Tu narzuca mi się pytanie - na jakiej podstawie można sformułować tak ogólne stwierdzenie i na czym polega ta oczywistość? W dalszej części autor popisuje się tu znajomością dość sporej literatury tematu, prezentuje procedury numeryczne (macierze transformacji) pomiędzy różnymi reprezentacjami w metodzie LBM. W rozdziale tym brakuje mi jedynie podsumowania. Prezentacja ma charakter przeglądu literatury, a autor nie wyciągnął wniosków i nie wskazał sugestii dotyczących użycia określonych operatorów kolizji w określonych zastosowaniach. Wiem, że to trudne zadanie i autor skupił się bardziej na wyprowadzeniu i pokazaniu tła teoretycznego, ale warto byłoby napisać dwa zdania co z tego wynika i dlaczego wybór pada na określone sposoby reprezentacji. Rozdział ten po raz kolejny potwierdza szerokie horyzonty doktoranta, tym razem związane z teorią LBM i fundamentalnym zagadnieniem różnych reprezentacji funkcji rozkładu w tym modelu.

W rozdziale 4. przeprowadzone są badanie numeryczne zbieżności metody LBM i wykazana została zbieżność 2. rzędu w zagadnieniu adwekcji i dyfuzji z reakcją. Autor używa tu wprowadzonego wcześniej operatora TRT. Rozdział ma charakter bardzo kompaktowy, jest tu nawet (co pasowałoby chyba bardziej do wcześniejszych rozdziałów z teorią) bardzo ogólny opis przeliczania wielkości fizycznych i bezwymiarowych w LBM w rozdziale 4.3. Pojawia się tu też po raz pierwszy definicja skalowania akustycznego.
W tej części rozwiązywane jest zagadnienie równania adwekcji z dyfuzją z dodatkowym członem źródłowym reakcji. Posiada ono rozwiązanie analityczne, dlatego możliwe było tu wykonanie testu zbieżności dla zagadnienia stacjonarnego (rys. 4.2), które pokazuje, że drugi rząd zbieżności jest osiągalny po rozwiązaniu dodatkowego zagadnienia niejawnego dla członu źródłowego. Przedyskutowany jest tu podział błędów na te których źródłem były różnice w równaniach jak i te, których źródłem jest sama dyskretyzacja metody LBM (rys. 4.3). Pełny zakres błędów związanych z dyskretyzacją przestrzenną i czasową jest przedstawiony na rysunkach 4.4. To cenne dane, ich obliczenie musiało kosztować doktoranta sporo pracy. Doktorant zauważa, że nie można badać zbieżności bez świadomego potraktowania skalowania kroku czasowego i kroku przestrzennego - należy świadomie stosować tzw. skalowanie akustyczne lub dyfuzyjne. W celu ilustracji omawianych zagadnień rozwiązane jest zagadnienie Allena-Cahna (rys. 4.5) ze zbieżnością drugiego rzędu wykazaną na rys. 4.7.
W dalszej części autor porównuje swoje wyniki do wyników wykonanych z użyciem metody elementów skończonych (FEM) do dyskretyzacji równań różniczkowych. Tu nie jest dla mnie jasna rola doktoranta. Proszę o odpowiedź, czy doktorant sam wykonał obliczenia FEM, jakie kroki w tym celu poczynił i czy samodzielnie opracował wyniki. Nawet jeśli nie – nie zmniejszy to mojej ogólnej oceny pozytywnej dla tego rozdziału. Użycie innej metody numerycznej do weryfikacji zmodyfikowanej metody LBM jest metodologicznie krokiem w dobrym kierunku i potwierdza szerokie horyzonty i wiedzę ogólną doktoranta. Istotne jest też to, że obie metody dają te same wyniki (rys. 4.9).

Samoistna zbieżność problemu adwekcji i dyfuzji z reakcją jest przedstawiona w sekcji 4.4.2.3. Być może tu warto było pokusić się o zbieżność do rozwiązania inną metodą numeryczną, zamiast zbieżność do własnego rozwiązania dla większej rozdzielczości? Zastanawiający jest też oczywiście tzw. magic parameter. Czy da się docelowo wykonać chociaż szczątkową analizę stabilności wyników od wartości tego parametru? Nie proszę tu doktoranta o zrobienie tego, ale próbę odpowiedzi na to pytanie.

Matyka

Rozdział 4 jest pierwszym z rozdziałów zawierających oryginalne wyniki doktoranta. Jest on napisany na bazie publikacji, w której doktorant jest pierwszym autorem (kolejność nie alfabetyczna sugeruje jego istotny wkład w napisaną pracę). Doktorant potwierdził tym samym wagę naukową i swój istotny wkład do dziedziny, tym bardziej, że została ona właśnie opublikowana w recenzowanym czasopiśmie Computers & Mathematics with Applications za 140pkt ministerialnych.

W rozdziale 5. Autor podejmuje się opisu dynamiki epidemii z użyciem modelu przestrzennego SIR. Rozdział ten jest ciekawy, ale odstaje tematycznie od głównego wątku pracy. Co więcej doktorant w przedstawionych w nim wnioskach (punkt 5.7) tylko stwierdza, że LBM może być metodą pierwszego wyboru dla tego typu zagadnień. To nie uzasadnia, aby rozdział ten był zawarty w (i tak obszernej, nawet jeśli pominąć ten rozdział) pracy.

W rozdziale 6. omówione są zagadnienia praw zachowania w omawianych systemach. Tu, dość niespodziewanie pojawił się opis założeń gazu idealnego (6.5.1) bez wyraźnego wprowadzenia i motywacji. Rozdział ma charakter teoretyczny, dość oderwany od głównego tematu pracy i dodatkowo, w odróżnieniu od reszty, nie odnosi się do literatury tematu (w tym rozdziale nie ma ani jednego cytowania). Zagadnienie wewnętrznej energii jest później wykorzystane w rozdziale 7., gdzie autor przedstawia wyprowadzenie równań różniczkowych dla zadanej funkcji równowagowej. W obu częściach doktorant udowadnia, że posiada wiedzę ogólną z zagadnień związanych z mechaniką płynów i fizyką zagadnienia i sprawnie posługuje się aparatem matematycznym.

Rozdział 8, opisujący warunki brzegowe w metodzie LBM jest głównie kompilacją wiedzy z kilku, wskazanych przez autora, źródeł i książek z tematyki. Widać tu ogromną pracę wykonaną przez dyplomanta. Przedstawia on warunki bez poślizgu, dyskutuje problem położenia ściany oraz omawia znów tzw. parametr magiczny odnosząc się przy tym do innej rozprawy doktorskiej. W rozdziale tym znajdziemy też warunek poruszającej się ściany, wpływ z prędkością lub ciśnieniem, warunek Dirichleta i Neumanna na koncentrację. Znajdują się tu formuły, zawierające też opis momentów dla warunków typu bounce-back i anti-bounce back na ścianach styku ścian z płynem.

W części 9. doktorant podejmuje się rozwiązania problemu przepływów termicznych dla wysokich liczb Prandtla. Tu problem polega głównie na różnych skalach czasowych dla zachodzących zjawisk dyfuzji pędu oraz dyfuzji ciepła. Tu imponująca jest tabela 9.1, gdzie doktorant podsumował aktualny stan badań w tym kontekście. Model przedstawiony jest za pomocą równań Naviera-Stokesa 9.1 oraz 9.2 oraz równania 9.3 na transport ciepła. W dalszej części doktorant formułuje zagadnienie i model LBM z użyciem momentów centralnych wprowadzonych wcześniej, które oryginalnie były stosowane do równań hydrodynamiki (tu celem jest też opis adwekcji i dyfuzji ciepła). Pierwszy test omawianej procedury jest przeprowadzony w sekcji 9.3.1, gdzie badany jest przypadek bez wpływu warunków brzegowych (dyfuzja z adwekcją rozkładu gaussowskiego). Wyniki przedstawione na są na rysunku 9.1 i różnią się w zależności od istnienia prędkości ux. Tu nasuwa się pytanie, co autor miał na myśli mówiąc o zewnętrznym polu prędkości – to niezbyt precyzyjne określenie. Podobne badanie jest później przeprowadzone w wersji trójwymiarowej solwera. Na rysunku 9.2 przedstawione są wyniki w formie map rozkładu temperatury. Widać tu wyraźnie artefakty - większe lub mniejsze w zależności od użytego operatora kolizji. Najbardziej niepokojący jest wynik dla ux!=0, bo widać wyraźnie, że żaden z użytych operatorów kolizji nie radzi sobie w 100%. Podobna analiza przeprowadzona jest dalej z uwzględnieniem warunków brzegowych (zagadnienie z dwoma cylindrami), gdzie dyplomant wykazał drugi rząd zbieżności z użyciem interpolowanych warunków anti-bounce-back. W dalszej części dyplomant powraca do pomysłu porównania wyników do wyników standardowej metody elementów skończonych FEM, gdzie podejmuje się rozwiązania problemu przepływu w kanale z rozgrzanym wkładem cylindrycznym. Przeprowadził on dość złożone obliczenia dla wielu operatorów kolizji i wielu siatek, co podsumował w tabelach 9.3 oraz 9.4.

Wykazał tu najlepsze zachowanie operatora CM-TRT dla najbardziej wymagającego przypadku o niskiej transmisyjności cieplnej medium. Co ciekawe przybliżenie jednorelaksacyjne CM-SRT dało również zadowalające efekty. Proszę tu o komentarz doktoranta - czy to znaczy, że przybliżenie jednorelaksacyjne jest tu dobrym wyborem i poleciłby je w praktyce? Jaką realnie przewagę dają tu przybliżenia wielorelaksacyjne? Wyniki te przedstawione są w formie map ciepła na rysunku 9.7.

Zawartość rozdziału 9 opiera się na pracy opublikowanej przez doktoranta (wraz z promotorem) w recenzowanym czasopiśmie International Journal of Heat and Mass Transfer (200 pkt), gdzie jest pierwszym autorem, co potwierdza po raz kolejny jego wkład w dziedzinę oraz szczególną wagę naukową jego wyników.

W rozdziale 10 przedstawione jest teoretycznie zagadnienie modelowania przepływów wielofazowych za pomocą równań adwekcji-dyfuzji. Stanowi on podstawy do rozdziału 11, gdzie omówiony jest model CLBM (Cumulant LBM) z uwzględnieniem modelu wielofazowego. Jest to jedno z bardziej złożonych zagadnień w opisie hydrodynamicznym, gdzie problem śledzenia linii rozdzielającej fazy płynu jest samo w sobie trudne do opisu numerycznego. Tu problem ten został rozwiązany metodami omawianymi wcześniej, z użyciem równania Allena-Cahna (11.3).
Autor weryfikuje swoje podejście na przykładzie dwufazowego przepływu Poiseuille posiadającego rozwiązanie analityczne (równania 11.30). Doskonała zgodność z rozwiązaniem analitycznym została potwierdzona na rysunku 11.2 z użyciem rozwiązania analitycznego dla ostrego warunku brzegowego oraz rozwiązania różnicami skończonymi dla przypadku rozmytego warunku brzegowego. Zabrakło mi tu dyskusji na temat różnic i zysków po stronie LBM – dlaczego warto rozwiązywać ten problem z użyciem modelu LBM i w czym będzie on wyraźnie lepszy od metody różnic skończonych? W kolejnej części doktorant używa opisanej metody do badań nad kroplami i powstawaniem specyficznych błędów w rozwiązaniu (tzw. spurious currents). Następnie (rozdział 11.3.3) zbadany został wpływ prędkości układu odniesienia na otrzymywane wyniki położenia środka masy i oscylacji kropli. W ostatniej części autor opisuje problem rozciągania się kropli (planar Taylor bubble) w wersji dwuwymiarowej i pokazał zgodność wyników (dla dużych czasów symulacji) z pracą źródłową [235] (rysunek 11.10). Dość duże odchylenia wyników symulacji dla dużych liczb Eötvösa tłumaczy zachowaniem się kropli Taylora: wydłużeniem, rozpadaniem i odrywaniem się kropel, etc.
W dalszej części zaprezentowane jest to samo zjawisko w poruszającym się układzie odniesienia.
Wyniki przedstawione na rysunku 11.13 powinny zostać zaprezentowane na osi y o innym zakresie, będzie wtedy widać faktyczne zachowanie błędu. Chciałbym zobaczyć ten sam wykres bez uwzględnienia wartości dla Fr=0, tak aby oś y miała zakres obejmujący tylko niezerowe wartości C0.
Pytanie dodatkowe - czy wartość 0 w punkcie Fr=0 faktycznie jest fizycznym i wnoszącym tu wartość rezultatem symulacji?

Zawartość rozdziału 11 oparta została o publikację, której pierwszym autorem jest doktorant. Praca została również opublikowana w recenzowanym czasopiśmie Computers & Mathematics with Applications za 140pkt ministerialnych.

Ogólne uwagi

Dostarczona mi praca jest wydrukowana w wyjątkowo wygodnej formie książki o formacie mniejszym od A4. Praca doktorska jest napisana w języku angielskim. Jest napisana dobrym językiem bez znaczących błędów. Praca jest złożona poprawnie, rysunki są czytelne, praca spełnia wszystkie wymagania techniczne i zwyczajowe dotyczące składu i zawartości, które stawiamy pracy doktorskiej.
Mam kilka drobnych uwag do tekstu. W jednym miejscu (strona 2., 5. linia od góry) doktorant definiuje funkcję rozkładu jako prawdopodobieństwo znalezienia cząsteczki w określonym czasie i

Matyka

miejscu (cyt. "It can be viewed as the probability of finding the particle at a certain time and place. ") - brakuje tu informacji o prędkości tej cząsteczki. W całej rozprawie używana jest oczywiście poprawna definicja.
We wstępie na str. 5. (jak i dalej w rozdziale 5.) równania dotyczące modelu WSIR są podane w postaci pochodnych cząstkowych. Mam tu wątpliwości, czy faktycznie muszą być to pochodne cząstkowe? Być może chodzi o to, że model opisuje zależność zarówno w czasie jak i w przestrzeni, ale tego z opisu modelu nie jestem pewien.
Na stronie 54, pierwszy nowy akapit od góry (linia 10.) - brakuje chyba słowa "Figure"?
Strona 91, rozdział 5.6 jest "implement", powinno być "implemented"? Zauważyłem też literówkę - na str. 9, zostao -> zostało, oraz drobny błąd w nazwisku w pozycji 240 w literaturze

Uważam, że praca jest zbyt obszerna. W części zagadnienia poruszane w niej są bardzo podstawowe i teoretyczne i część tej teorii można było po prostu zacytować z literatury. Rozdział o modelowaniu epidemii wręcz psuje dobre wrażenie całości i wygląda na dodany ad-hoc – ten w ogóle bym usunął, bo przy tych rozmiarach niepotrzebnie powiększa pracę. Liczba 270 referencji jest zaporowa i zniechęca nawet do pobieżnego przejrzenia literatury. W niektórych miejscach zamiast podawać kilka referencji na potwierdzenie tezy, można było podać po prostu jedną najbardziej pasującą.

Podsumowanie

Przedstawiona mi praca podejmuje trzy główne, oryginalne problemy naukowe – zagadnienie dyskretyzacji LBM równania adwekcji-dyfuzji-reakcji z członem źródłowym, implementację modelu tzw. cumulant LBM w odniesieniu do adwekcji-dyfuzji oraz użycie momentów centralnych w symulacji przypadków wielofazowych i modelu pola fazowego (phase field).

Rozprawa doktorska, do której szczegółowo odniosłem się powyżej, uwzględniając szczególnie zawarte w niej rozdziały, które oparte są o prace naukowe opublikowane w bardzo dobrych czasopismach, których dyplomant jest pierwszym autorem, potwierdza umiejętność prowadzenia skutecznych i ciekawych badań przez doktoranta.

Biorąc pod uwagę powyższe, stwierdzam, że rozprawa mgra Grzegorza Gruszczyńskiego spełnia wszystkie oczekiwania ustawowe i wnoszę o dopuszczenie go do dalszych etapów postępowania w celu nadania mu tytułu naukowego. Uważam też, że ze względu na szczególnie wysoki poziom naukowy, edytorski oraz ciekawą tematykę związaną z rozwojem nowoczesnych metod numerycznych, pracę tę warto wyróżnić.

Maciej Matyka

dr hab. Maciej Matyka, prof. UWr
Instytut Fizyki Teoretycznej
Wydział Fizyki i Astronomii
Uniwersytet Wrocławski