Wrocław, 2025-12-22

Recenzja rozprawy doktorskiej Mgr. inż. Jakuba Gałeckiego

Tytuł: "Efficient and Scalable Application of the Least-Squares Spectral/hp Element Method to Incompressible Flow Problems”

Informacje ogólne

Przedłożona mi do recenzji rozprawa doktorska składa się ze 125 stron, na które składa się 8 rozdziałów, włączając bibliografię i wstęp. Struktura pracy, podział tematyczny rozdziałów oraz zawartość bibliografii składającej się ze 112 pozycji, odpowiadają tematowi pracy i standardom pracy naukowej. Oprócz ogólnego wstępu w pracy znalazł się opis teoretyczny równań opisujących zjawiska fizyczne podejmowane do rozwiązania w pracy, opis metod numerycznych i ich analizę w kontekście złożoności obliczeniowej. W pracy jest też opisana implementacja opisanych technik oraz ich zastosowanie z użyciem stworzonego na jej potrzeby kodu obliczeniowego L3STER.

Dorobek naukowy doktoranta

W bibliografii, doktorant wymienia dwie pozycje, których jest autorem lub współautorem:

[30] J. Gałecki. L3STER. url: https://github.com/kubagalecki/L3STER
[31] J. Gałecki and J. Szumbarski. „Adjoint-based optimal control of incompressible flows with convective-like energy-stable open boundary conditions”. In: Computers and Mathematics with Applications 106 (2022), pp. 40–56. doi: 10.1016/j.camwa.2021.12.004

[30] jest kodem obliczeniowym z implementacją stworzoną na potrzeby rozprawy doktorskiej. Kod opublikowany jest na licencji GNU i nie jest to publikacja recenzowana. Ze względu na naukowy kontekst, oprócz platformy GitHub można rozważyć na jakimś etapie albo umieszczenie kodu w oficjalnym repozytorium uczelni albo, nawet lepiej, przejście procesu recenzji w jednym z czasopism, które dopuszcza publikacje kodu (jako przykład podam Computer Physics Communications).

[31] to praca naukowa o wartości 140pkt ministerialnych opublikowana w tematyce pokrewnej pracy doktorskiej (obliczenia numeryczne, przepływ płynu oraz otwarte warunki

brzegowe). Praca ta nie zawierająca wyników prezentowanych w rozprawie doktorskiej. Warto tu zauważyć wiodącą rolę doktoranta, który jest jej pierwszym autorem.

Na stronie domowej autora znalazłem dodatkową informację o dwóch streszczeniach wykładów zgłoszonych na konferencjach XXV i XXVI edycji konferencji Fluid Mechanics Conference (domyślam się, że ich publikacja wiązała się z wystąpieniami):

[K1] Gałecki Jakub, Szumbarski Jacek, High performance least-squares spectral/hp element method solvers for fluid dynamics problems, w: Book of Abstract: XXVI Fluid Mechanics Conference - FMC 2024 / Gepner Stanisław, Kubacki Sławomir, Wacławczyk Tomasz (red.), 2024, Politechnika Warszawska, Wydział Mechaniczny Energetyki i Lotnictwa. Politechnika Warszawska, s.83-84, ISBN 978-83-943935-1-9

[K2] Gałecki Jakub, Szumbarski Jacek, Reducing the cost of incompressible flow control problems using stabilized outflow boundary conditions, w: Book of Abstract: XXVI Fluid Mechanics Conference - FMC 2024 / Gepner Stanisław, Kubacki Sławomir, Wacławczyk Tomasz (red.), 2024, Politechnika Warszawska, Wydział Mechaniczny Energetyki i Lotnictwa. Politechnika Warszawska, s.83-84, ISBN 978-83-943935-1-9

Dorobek na tym etapie kariery nie jest imponujący (publikacje), ale w całości pozwala wyrobić sobie zdanie o aktywności doktoranta i stanowi argument za potwierdzeniem jego umiejętności w zakresie prowadzenia samodzielnej pracy naukowej. Należy podkreślić, że we wszystkich czterech obszarach (kod, publikacja i dwa wystąpienia) doktorant jest pierwszym autorem. Na tym etapie kariery to ważne, bo pokazuje jego wiodącą rolę oraz samodzielność naukową.

Rozprawa doktorska - tematyka

Rozprawa doktorska dotyczy zaawansowanych metod obliczeniowych, a dokładniej metody elementów skończonych do rozwiązywania równań różniczkowych. Autor rozwija i bada tutaj algorytmy oparte o metodę najmniejszych kwadratów, która jak sam wspomina posiada szereg zalet. Już w streszczeniu pojawia się też informacja o zastosowaniu wspomnianych metod do rozwiązania problemu opływu przez cylinder dla liczby Reynoldsa=400. W słowach kluczowych pracy pojawia się informacja o zagadnieniu obliczeń dużej mocy, ale nie ma o tym mowy w streszczeniu. Treść pracy odpowiada jej tytułowi, podjęty temat jest nowoczesny, zaawansowany numerycznie i ciekawy naukowo.

Krótki przegląd rozprawy

W rozdziale pierwszym przedstawiona jest motywacja oraz rys historyczny prowadzonych badań. Doktorant omawia tu sformułowanie najmniejszych kwadratów i wskazuje na problemy z zachowaniem masy. Tu mam od razu pytanie: czy biblioteka L3STER jest pozbawiona tych problemów, jeśli tak, w jaki sposób jest to zapewnione i czy testy jednostkowe są wykonywane w trakcie obliczeń, aby zapewnić spełnienie tego warunku zachowania? Jeśli warunek ten nie jest zachowany, jakie może to mieć konsekwencje dla przeprowadzonych dalej obliczeń w ostatnim rozdziale? Doktorant wskazuje, że jego głównym pomysłem, nie podjętym do tej pory, jest sformułowanie algorytmu opartego o faktoryzację sum (ang. sum factorization) w metodzie najmniejszych kwadratów, a zadaniem jakie sobie stawia jest rozwinięcie wydajnego i skalowalnego algorytmu rozwiązywania równań przepływu płynu nieściśliwego z użyciem stosowanych przez siebie technik.

W rozdziale drugim zaprezentowane są podstawowe zagadnienia fizyczne podejmowane w pracy, które opisane są za pomocą równań różniczkowych. Doktorant opisuje tu problemy adwekcji dyfuzji z adwekcją, równania Naviera-Stokesa w wersji nieściśliwej, opisuje warunki brzegowe i wprowadza definicję liczby Reynoldsa. W rozdziale znalazła się też analiza problemu nieliniowości zagadnienia, całkowania w czasie i problemu sprzężenia równań przepływu przez związanie prędkości i ciśnienia w jednym układzie równań. Tu, w rozdziale 2.4 prezentuje standardową metodę rozprzęgania w schemacie różnicowym, gdzie w algorytmie numerycznym stosowane są odrębnie równania na ciśnienie i prędkości z korektą wynikającą z warunku nieściśliwości. Tu mam pytanie, autor nie wspomina o metodach SIMPLE (Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations), PISO (Pressure-Implicit with Splitting of Operators) - standardzie w komputerowej dynamice płynów i metodach objętości skończonych używanych w oprogramowaniu OpenFOAM, czy Fluent. Jak bardzo stosowane przez niego algorytmy różnią się od ww algorytmów i czy próbował porównać wydajność lub dokładność swojej metody do obliczeń metodami standardowymi w komputerowej dynamice płynów?

W rozdziale trzecim opisana jest metoda elementów skończonych w sformułowaniu najmniejszych kwadratów (dalej zwany LSFEM) do dyskretyzacji równań różniczkowych. Opis jest bardzo matematyczny, bazuje na literaturze tematu, a sama metoda prowadzi do powstania układu równań liniowych (wzór 3.8), który należy rozwiązać numerycznie. W dalszej części, autor bazując na pozycji [52] dyskutuje właściwości metody LSFEM w porównaniu do innych podejść. Na stronie 30 padło stwierdzenie, że LSFEM jest dobrze przystosowane do problemów złożonych w fizyce, gdzie zjawiska o różnym pochodzeniu mogą być ze sobą rozwiązane w postaci jednego zagadnienia. Czy biblioteka L3STER stworzona przez doktoranta na to pozwala? Czy posiada on taki przykład (jeśli tak, jaki), który implementuje swoje metody do zagadnienia fizycznego złożonego bardziej od jednofazowego, nieściśliwego płynu? Na stronie 31. znajduje się stwierdzenie, że elementy na które podzielona została domena w metodzie elementów skończonych to tzw. "eponymous elements".

W rozdziale czwartym doktorant opisuje różne podejścia do rozwiązania układów równań liniowych. Na początku wspomina o standardowej faktoryzacji LU, algorytmie o dużej złożoności obliczeniowej, który umożliwia rozwiązanie bezpośrednie (ale też niepraktyczne) takiego układu równań. Naturalnymi metodami są tu metody typu Krylova i w tym kontekście dyplomant wybiera standardową metodę gradientów sprzężonych (CGM – Conjugate Gradient Method). Autor zauważa, że dzięki użytemu sformułowaniu LSFEM, przy rozwiązywaniu równań liniowych nie trzeba w pamięci trzymać wszystkich danych i macierzy powstających w procesie dyskretyzacji. Tu pojawia się pytanie, dlaczego autor ograniczył się do CGM i czy rozważał inne metody iteracyjne (BiCGStab - Biconjugate gradient stabilized method, GMRES - generalized minimal residual method) i czy jego metodologia jest na tyle ogólna, że stosowałaby się również tam? Być może takie porównanie różnych metod iteracyjnych do równań liniowych w kontekście LSFEM mogłoby być ciekawe z praktycznego punktu widzenia, jeśli nie zostało jeszcze zrobione? Doktorant zauważa, że zastosowanie rozkładu sum w trakcie obliczeń może dodatkowo być wykorzystane do wyeliminowania zbędnych operacji. Wskazuje też, że badania nad zagadnieniem sposobu wykonywania podstawowych operacji w iteracjach równań liniowych w kontekście metody najmniejszych kwadratów są zagadnieniem nowym i wg jego wiedzy nie podjętym w literaturze. To odważne stwierdzenie. Mój przegląd literatury nie przyniósł odkrycia żadnej pracy na ten temat, także tu można wskazać oryginalny wkład doktoranta do rozwoju metod numerycznych.

Dzięki użyciu formatu CSR do przechowywania macierzy, formatu dedykowanemu macierzom rzadkim opartemu o indeksowanie niezerowych elementów, autorowi udało się znacząco obniżyć zapotrzebowanie na pamięć w swoim rozwiązaniu. Dyplomant opisuje dość dokładnie (rozdział 4.2, rozdział 4.3) podejście lokalne, oraz metodę faktoryzacji sumy, które nie wymagają formułowania macierzy i jawnego jej zapisywania w iteracji równań liniowych, zwiększając jednocześnie wydajność (podsumowaną i porównaną dla różnych podejść i problemów pod koniec rozdziału).

W rozdziale 5. przedstawiony jest kod obliczeniowy L3STER (C++), który powstał na potrzeby praktycznej implementacji metod zaprezentowanych w rozprawie. Autor opisuje szczegóły techniczne związane z założeniami tego oprogramowania, jego wydajności i skalowalności (kod używa klasycznego interfejsu MPI i umożliwia uruchomienie na komputerach wieloprocesorowych). Celem projektu było stworzenie kodu o wysokiej wydajności, co zostało przebadane na stronach 78-80 rozprawy dla różnych problemów. Ciekawe w tym kontekście jest to, że dla problemów 2D (równania Naviera-Stokesa) zachowanie wydajności (np. porównanie metody SC z SF) jest inne, niż w przypadku 3D (np. rysunek 5.2 (d) kontra rysunek 5.3 (d). Czym spowodowane są te różnice, czy dodatnie jednego wymiaru aż tak zmienia algorytm, że wydajność metod się zmienia? Jak zatem mogłaby (to pytanie może wykraczać poza obszar zbadany przez doktoranta, ale zadam je prosząc o próbę oszacowania odpowiedzi na bazie doświadczeń zebranych w ramach pracy) wyglądać wydajność dla problemów bardziej złożonych z różnych procesów fizycznych i która ze strategii będzie tu wtedy najlepsza?

W rozdziale 6. autor stosuje opracowany kod i metody numeryczne do rozwiązania kilku problemów z zakresu dynamiki płynów. Najpierw bada zbieżność swoich swoich algorytmów, oraz podejmuje problem Taylora-Greena (standardowy problem dynamiki wirów) uwzględniając też otwarte warunki brzegowe. Nie zrozumiałem jednak metodologii na początku tego rozdziału i proszę o wyjaśnienie. Jakie zagadnienie fizyczne opisują równania 6.1a-c? Jak porównywane jest ono do wyników kodu obliczeniowego? Spodziewałbym się podania warunków brzegowych i rozwiązywanych równań, a doktorant podaje od razu rozwiązania na prędkości u, v oraz ciśnienie p spełniające równania Naviera-Stokesa nie pisząc jak w związku z tym uzyskuje rozwiązania numeryczne. Autor pisze, że cyt. "Defining the solution (6.1) a priori allows for an exact evaluation of the error obtained in numerical simulation." nie pisząc nic więcej o procedurze tego testu, ani nie odnosząc się do literatury.

Na wykresach 6.1 wyrysowane zostały zbieżności solwera w czasie oraz w funkcji rzędu elementu. Tu wydaje mi się, że metodologicznie nie jest dobrze, aby elementy rzędu p=12 były wybierane do analizy zbieżności w czasie. Na wykresie 6.1 (b) widać dziwne zachowanie, gdzie dokładność maleje wraz ze zwiększaniem p dla otwartych warunków brzegowych i dzieje się to właśnie przy p=12. Skoro nie da się tego łatwo wyjaśnić, dlaczego elementy tego rzędu zostały wybrane do analizy zbieżności z krokiem czasowym?

W dalszej części doktorant podejmuje się rozwiązania problemu Taylora-Greena w 3D. Kontury tzw. kryterium Q (rysunek 6.2) wyglądają ładnie, ale nie są wystarczające, aby stwierdzić zgodność rozwiązania z rozwiązaniem analitycznym. Zbieżności L2 zostały pokazane na wykresach 6.3. Mam tu uwagę edytorską, warto byłoby te wykresy podzielić, bo dotyczą różnych aspektów. Pokazane (i opisane) w ten sposób rodzą pytania – np. w podpisie jest mowa o czterech problemach, a na rysunku 6.3a mamy tylko dwa, z czego jeden (Split) w ogóle nie jest uwzględniony. Swoją drogą na czym polega różnica między NS i Split – to nie jest dla mnie jasne. Proszę o dokładniejsze omówienie wyników z wykresów na rysunku 6.3. z podziałem na podjęte problemy i zastosowane metody oraz wnioski z tych pomiarów.

Kolejne dwa podjęte problemy dotyczą ciekawszych zjawisk przepływu - opływu cylindra w 3D oraz przepływu przez szczelinę. W pierwszym przypadku autor rozwiązał równania przepływu dla liczby Reynoldsa Re=400. To ambitne zadanie wymagało uruchomienia kodu obliczeniowego na komputerach dużej mocy (w ICM), a wyniki z tabeli 6.2 gdzie porównana została liczba Strouhala oscylacji z danymi literaturowymi wykazują doskonałą zgodność wyników, szczególnie w przypadku 3D. Czy autor wykonał badania zbieżności rozwiązania liczby Strouhala w zależności od rozdzielczości użytej siatki obliczeniowej lub innych parametrów numerycznych symulacji? Może tutaj można byłoby doszukiwać się lepszej zgodności dla przypadku 2D? Czy masa w układzie jest zachowana w trakcie symulacji?

Na rysunkach 6.7-9 zaprezentowane zostały efektowne wizualizacje powierzchni z tzw. kryterium Q wskazujące na występujący ruch wirowy i rozwijanie się struktur dynamicznie w przepływie.

W ostatniej części zaprezentowane zostały wyniki badań przepływu przez szczelinę. Po wprowadzeniu teorii związanej z przepływem przez ośrodki porowate autor sformułował swoje zagadnienie jako problem przepływu przez szczelinę z periodycznymi warunkami brzegowymi z użyciem trzech różnych modeli transportu z uwzględnieniem najbardziej ogólnego równania Naviera-Stokesa. Autor użył pięciu elementów do dyskretyzacji w kierunku osi z – czy taka liczba elementów jest wystarczająca w kontekście zróżnicowanej geometrii i nagłych (ostre kanty) skoków w przestrzeni w obrębie szczeliny? Czy wyniki byłyby takie same, gdyby zmniejszyć lub zwiększyć liczbę elementów?

W tym rozdziale autor posługuje się pojęciem liczby Reynoldsa (Re) w kontekście szczeliny o skomplikowanym, losowym kształcie. Byś może przeoczyłem tę informację, ale co wziął za charakterystyczne wielkości prędkości i rozmiaru w definicji liczby Re?

Model geometryczny jest tu charakteryzowany przez liczbę β. Dla β=0 (równania 6.16a-b) mamy do czynienia ze szczeliną o stałej wysokości, a dla β=1 szczeliną pomiędzy dwiema losowymi powierzchniami (losowymi w sensie wysokości). Na stronie 105 doktorant wskazuje, że dla cyt. "β=0 (i.e. the standard diffusion equation with constant diffusivity)" rozwiązanie, które uzyskał było niefizyczne. Jak wartość β jest tu związana z modelem fizycznym transportu w badanym modelu? Czy β determinuje geometrię układu, czy rodzaj transportu?

Kolejne pytanie w tym kontekście sprowadza się do analizy najprostszego przypadku. J k była badana "fizyczność rozwiązania" i w jakim sensie solwer nie zbiega dla najprostszego przypadku powierzchni płaskich (β=0)? Uzyskanie zbieżności wydaje się tu niezbyt skomplikowane (czy nie jest to po prostu przepływ Poiseuille flow 3D pomiędzy płaskimi okładkami)?

Ocena pracy

1) Czy rozprawa prezentuje ogólną wiedzę teoretyczną kandydata w określonej dyscyplinie?

Zakres tematyczny wiedzy kandydata odpowiada tematycznie dyscyplinie inżynierii mechanicznej. Uzasadnienie: Doktorant w swojej rozprawie opisuje w sposób ścisły matematycznie, za pomocą równań, w tym równań różniczkowych i macierzowych, zarówno stosowane przez siebie zaawansowane metody obliczeniowe (w tym metodę elementów skończonych i jej sformułowanie z użyciem metody najmniejszych kwadratów) jak i zagadnienia praktyczne rozwiązywane w ramach rozprawy związane z problemami transportu płynów.

2) Ocena wraz z uzasadnieniem, czy rozprawa doktorska wykazuje umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej lub artystycznej przez osobę ubiegającą się o nadanie stopnia doktora.

Rozprawa wykazuje umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej kandydata. Uzasadnienie: doktorant zajmuje się obliczeniami numerycznymi i opracował oraz opisał wnikliwie metodę elementów skończonych w sformułowaniu najmniejszych kwadratów oraz rozwinął metodę rozwiązywania równań liniowych w sposób dopasowany do zagadnienia, które nazywa strategią ewolucji operatorów. Praca doktoranta była prezentowana na konferencji mechaniki płynów (Warszawa). Zarówno zawartość pracy, opis teoretyczny, jakość zaprezentowanych wyników praktycznych jak i uzyskane wyniki zbieżności i wydajności opracowanych algorytmów potwierdzają duża samodzielność doktoranta. Co więcej, jest on samodzielnym autorem oprogramowania, które istnieje w domenie publicznej i jest gotowe do użycia i sprawdzenia (L3STER), a w zgłoszeniach swoich wystąpień konferencyjnych i publikacji opublikowanej na wczesnym etapie jest pierwszym autorem.

3) Ocena wraz z uzasadnieniem, czy rozprawa doktorska stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego, oryginalne rozwiązanie w zakresie zastosowania wyników własnych badań naukowych w sferze gospodarczej lub społecznej albo oryginalne dokonanie artystyczne.

Rozprawa doktorska stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego i oryginalne rozwiązanie w zakresie zastosowania wyników własnych badań naukowych. Uzasadnienie:

doktorant stworzył własny kod obliczeniowy, zaimplementował go i opublikował w formie oprogramowania. Swój kod oparł nie tylko na standardowych metodach numerycznych i istniejących rozwiązaniach, ale zawarł w nim też rozwijane przez siebie metody ewolucji operatorów w iteracjach równań liniowych. Kod jest zaawansowany, używa technologii wielowątkowej, można go uruchamiać na komputerach dużej mocy, co doktorant zrobił, stosując go w obliczeniach dla dużych liczb Reynoldsa, potwierdzając jego działanie w praktyce. Zaawansowane metody numeryczne, ich wielowątkowe implementacje oraz kody obliczeniowe, szczególnie ogólnodostępne w przestrzeni publicznej, mają znaczenie zarówno dla sfery gospodarczej jak i społecznej, mogą być rozwijane dalej, stanowić podstawę rozwiązań inżynierskich czy rozwoju oprogramowania i wdrożeń rynkowych.

Podsumowanie

Przedłożona mi rozprawa doktorska prezentuje ogólną wiedzę teoretyczną kandydata w dyscyplinie inżynierii mechanicznej, potwierdza jego umiejętności prowadzenia samodzielnych badań naukowych. Za oryginalne osiągnięcie naukowe doktoranta uznaję rozwinięcie i optymalizację metody elementów skończonych w ujęciu najmniejszych kwadratów oraz napisanie biblioteki (kodu) L3STER, a także wykorzystanie swoich badań w praktyce do rozwiązania kilku postawionych problemów obliczeniowej mechaniki płynów. Moja ocena jest jednoznacznie pozytywna i zwracam się o dalsze procedowanie sprawy doktoranta w procedurze nadania stopnia naukowego doktora.

dr hab. Maciej Matyka, prof. UWr

Maciej Matyka

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wydział Fizyki i Astronomii

Uniwersytet Wrocławski