

Recenzja pracy doktorskiej

mgra inż. Jakuba Galeckiego

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

Recenzja pracy doktorskiej została przygotowana na podstawie uchwały Rady Naukowej Dyscypliny Inżynieria Mechaniczna Politechniki Warszawskiej nr 261/III-IM/2025 z dnia 08.10.2025 oraz pisma nr RNDIM/521/3/2025, przesłanego przez Przewodniczącego Rady Naukowej Dyscypliny Inżynieria Mechaniczna, Pana dr. hab. inż. Marka Wojtyrę, prof. uczelni. Promotorem pracy doktorskiej jest Pan prof. dr hab. inż. Jacek Szumbariski.

1. Wstęp

Ogólnie wiadomo, że obliczeniowa mechanika płynów (Computational Fluid Dynamics - CFD) jest jednym z podstawowych narzędzi wykorzystywanych w analizie zagadnień naukowych oraz rozwiązywaniu problemów inżynierskich. Można wymieniać różne sektory przemysłu i dziedziny nauki, w których te metody są wykorzystywane, np.: lotnictwo, motoryzacja, energetyka, inżynieria biomedyczna, czy nauki o Ziemi lub prognozy pogody, ale należy jednoznacznie podkreślić, że zakres zastosowań tych metod jest bardzo szeroki i wciąż się powiększa. Metody numeryczne w rozwiązaniu zagadnień przepływu płynów są nie tylko alternatywą dla skomplikowanych i kosztownych badań laboratoryjnych lub pomiarów na obiektach rzeczywistych, ale także komplementarnie uzupełniają te badania. Z jednej strony dąży się do zwiększonej rozdzielczości w czasie i przestrzeni rozwiązywanych zagadnień, a z drugiej strony nakłada się coraz większe wymagania na efektywność całego procesu obliczeniowego i możliwie szybkie uzyskiwanie wyników przy odpowiednio wysokiej dokładności rozwiązania. Dokładność rozwiązania jest problemem dotyczącym każdej metody numerycznej, a w odniesieniu do rozwiązywanych zagadnień technicznych bezpośrednio przekłada się na poprawność przewidywanych sprawności procesów przepływowych, wyznaczanych sił lub innych wielkości charakterystycznych dla badanego zjawiska. Dokładność rozwiązania oraz czas całego procesu obliczeniowego są często decydującym kryterium przy wyborze metody w rozwiązywaniu zagadnień inżynierskich, co bezpośrednio przekłada się na koszty, nie tylko procesu obliczeniowego, ale całego procesu wytwarzania produktu.

Wśród obecnie rozwijanych technik dyskretyzacji szczególną rolę odgrywają metody wysokiego rzędu, takie jak metody spektralne i spektralne metody elementów skończonych typu hp, oferując bardzo wysoką dokładność dyskretyzacji. W ich ramach stosuje się różne sformułowania ciągłe i nieciągłe Galerkina, czy Petrowa–Galerkina oraz sformułowanie

najmniejszych kwadratów (least-squares), którego zastosowanie do przepływów nieściśliwych stanowi temat niniejszej pracy.

2. Charakterystyka pracy i uwagi ogólne

Praca doktorska Pana mgr inż. Jakuba Gałękiego została napisana w języku angielskim i jest zredagowana na 100 stronach, w 7 rozdziałach i zakończona jest spisem bibliograficznym zawierający 112 pozycji.

W pierwszym rozdziale, zatytułowanym „Introduction”, Doktorant przedstawił aktualny stan badań, cel i zakres zrealizowanych prac. Przegląd literatury jest bardzo skrótowy i koncentruje się na podstawowych informacjach dotyczących metod elementów spektralnych. Warto byłoby ten fragment pracy rozszerzyć oraz podać zalety i wady tych metod na tle innych, chociażby obecnie najbardziej popularnej metody objętości skończonych.

Doktorant stwierdza, że zagadnienia związane z efektywnością obliczeniową proponowanych metod LSFEM (Least-Squares Finite Element Method) są rzadko omawiane. Natomiast technika sum-factorization, kluczowa dla wydajności innych typów metod elementów spektralnych (SEM), nie była rozważana w kontekście metody najmniejszych kwadratów, co prowadzi do sformułowania tezy rozprawy:

„...least-squares spectral/hp element method can be applied to solve incompressible flow problems efficiently”

a w języku polskim:

„spektralna metoda elementów skończonych typu spectral/hp oparta na najmniejszych kwadratach może być efektywnie stosowana do rozwiązywania problemów przepływów nieściśliwych”.

Celem niniejszej pracy jest opracowanie wydajnych i skalowalnych algorytmów do rozwiązywania problemów przepływów nieściśliwych z wykorzystaniem LSFEM.

Podstawowe równania transportu dla płynu nieściśliwego przedstawione są w rozdziale 2. Ze względu na cel pracy i ograniczenia wynikające z zastosowania metody elementów skończonych opartej na najmniejszych kwadratach, równania te zostały przekształcone do równoważnych postaci pierwszego rzędu. Doktorant zwraca uwagę na dwa podejścia stosowane do linearyzacji, metodę Picarda i Newtona, podkreślając, że metoda Newtona charakteryzuje się większą dokładnością, ale posiada mniejszy promień zbieżności niż metoda Picarda. W recenzowanej pracy doktorskiej stosowana jest metoda Newtona.

Do dyskretyzacji w czasie zastosowano schemat niejawni różniczkowania wstecznego (Backward Differentiation Formulae, BDF).

W tej części pracy omówiony jest także problem definiowania warunków brzegowych, a w szczególności warunków typu „outflow”, co zostało rozszerzone w ostatniej sekcji tego rozdziału poświęconej schematom rozprzegającym. Schemat rozprzegający składowe rozwiązania został omówiony w ostatniej części rozdziału. W swojej pracy Doktorant zastosował schemat rozdzielenia (*splitting scheme*) zaproponowany przez Pontazę, rozszerzając go o otwarty wylotowy warunek brzegowy, a wybór motywuje kolejnymi cechami: 1- schemat ten został zaprojektowany z myślą o metodzie elementów skończonych opartej na najmniejszych kwadratach, 2- zapewnia doskonałą zachowawczość masy wynikającą z jawnego wymuszenia równania ciągłości, 3- autor metody deklaruje „zwiększoną” szybkość zbieżności.

Charakterystyka metody spektralnej/hp elementów skończonych opartej na metodzie najmniejszych kwadratów została przedstawiona w rozdziale 3. Doktorant omówił sformułowanie metody najmniejszych kwadratów, które jest wykorzystane do dyskretyzacji układu równań różniczkowych cząstkowych oraz linearyzacji układu równań. Wymienił i scharakteryzował zalety metody najmniejszych kwadratów oraz wady i wyzwania jakie są związane z jej wykorzystaniem.

W dalszej części rozdziału został przedstawiony sposób formułowania funkcji bazowych stosowanych w aproksymacji metodą elementów skończonych oraz omówiono ich transformację między przestrzenią referencyjną a fizyczną, w układach krzywoliniowych odpowiednich dla skomplikowanych, rzeczywistych kształtów.

Natomiast ostatni podrozdział poświęcony jest numerycznemu całkowaniu na zdefiniowanych brzegach i obszarach dla sformułowanych postaci dyskretnych.

W rozdziale 4 zostały przedstawione wybrane strategie wyznaczania operatorów, które mogą być wykorzystane w trakcie iteracyjnego rozwiązywania układu równań algebraicznych, a które decydują o wydajności solvera.

Doktorant zwraca uwagę, że największą popularność wśród metod elementów skończonych zdobyły metody podprzestrzeni Kryłowa, a jedna z nich, metoda gradientów sprzężonych ma szczególne znaczenie dla zrealizowanej pracy. Podkreślone zostały zasadnicze cechy tej metody, a w szczególności jej bardzo dobra zbieżność.

Omówione zostały dwie metody wyznaczania operatora, globalna (*global assembly approach*) i lokalna (*local element approach*), gdzie zamiast budowania macierzy w sposób jawny, udział każdego elementu jest wyznaczany lokalnie, a następnie stosowane są techniki sumowania.

Jak podkreśla Doktorant, iloczyn macierzy przez wektor stanowi zasadniczą część nakładu obliczeniowego pojedynczej iteracji metody CGM, wybór strategii obliczania operatora ma kluczowe znaczenie dla wydajności procesu obliczeniowego, a z kolei odpowiedni wybór może zależeć od rzędu aproksymacji typu p . Badanie tego zagadnienia w kontekście metody najmniejszych kwadratów jest nowatorskim wkładem Doktoranta.

W ostatniej części rozdziału zostały zamieszczone porównania wydajności metod dla przypadków dwu- i trójwymiarowych na siatkach kartezjańskich. Niestety zabrakło informacji dla jakich warunków brzegowych uzyskano rozwiązania. Doktorant koncentruje się tutaj na efektywności procesu obliczeniowego, ale warto byłoby podać dla jakich warunków fizycznych te przykłady są analizowane.

Rozdział 5 zatytułowany „Software Implementation and Computational Considerations” opisuje kod L3STER, w którym zostały zaimplementowane metody numeryczne i algorytmy omawiane w pracy. Należy zaznaczyć, że istnieje wiele bibliotek elementów spektralnych/hp, ale jak podkreśla Doktorant nie ma kodu przeznaczonych specjalnie do formułowania metodą najmniejszych kwadratów, a bynajmniej nie jest ogólnie dostępny. Można znaleźć publikacje:

[1] Voronin et al., *Space-time discretizations using constrained first-order system least squares (CFOSLS)*, Journal of Computational Physics, Volume 373, 2018

[2] J. H. Adler, I. Lashuk, S. P. MacLachlan, L. T. Zikatanov, *Discrete Energy Laws for the First-Order System Least-Squares Finite-Element Approach*, arXiv:1709.00385, 2017

gdzie LSFEM jest stosowana w pracach badawczych wykorzystujących biblioteki MFEM (Modular Finite Element Methods Library) rozwijane przez Lawrence Livermore National Laboratory, ale brak dedykowanego kodu.

Doktorant postanowił wypełnić tę lukę oraz w pełni wykorzystać elastyczność oferowaną przez LSFEM i opracował bibliotekę nazwaną L3STER. Oprogramowanie typu open source

jest dostępne na platformie GitHub <https://github.com/kubagalecki/L3STER>. W momencie pisania tej pracy L3STER dostępny jest w wersji 0.3.0.

To jest niewątpliwe wartościowe osiągnięcie Doktoranta.

W rozdziale czwartym porównano wydajność różnych algorytmów, a czasy wykonania mierzono przy użyciu biblioteki Google Benchmark. Na końcu zbadano skalowalność opracowanego kodu, a jako problem testowy wykorzystano trójwymiarowe równanie adwekcji–dyfuzji w periodycznej domenie sześcienniej i zastosowano rząd aproksymacji $p=3$. Tutaj nasuwa się pytanie dlaczego test skalowania przeprowadzono dla relatywnie małej ilości stopni swobody (15,482,880 DOFs) i tylko 32 rdzeniach.

Przykłady zastosowań rozwijanego kodu omówiono w rozdziale szóstym zatytułowanym „Applications”. Pierwszy podrozdział poświęcony jest badaniu zbieżności *splitting scheme*. Testy przeprowadzono dla dwóch typów warunków brzegowych: Dirichleta dla prędkości na wszystkich ograniczeniach obszaru oraz warunek typu „open” na części obszaru (*on the right boundary and the right half of the top boundary*).

Kolejnym przykładem, gdzie badano zbieżność schematu rozdzielania (*splitting scheme*), jest trójwymiarowe rozwiązanie wirów Taylora-Greena. Ponadto, wydajność i dokładność schematu *splitting* porównano z podejściem *un-split*, w którym układ równań jest bezpośrednio całkowany w czasie. W tym celu przeprowadzono symulacje z wykorzystaniem obu strategii dla różnych kroków czasowych. W podsumowaniu porównania Doktorant stwierdza, że *splitting scheme* zapewnia porównywalną dokładność oraz jest bardziej efektywny niż schemat *un-split*.

Kolejnym przypadkiem prezentującym zastosowanie kodu jest opływ cylindra dla liczby Reynoldsa $Re = 400$. Doktorant argumentuje wybór istnieniem bogatej, trójwymiarowej struktury przepływu przy relatywnie niedużych wymaganiach dotyczących rozdzielczości siatki. Wyniki obliczeń typu Direct Numerical Simulations, przy założeniu rzędu aproksymacji $p=3$, porównano z wynikami w publikacji Jiang, Cheng (Journal of Fluid Mechanics, 2017). W zasadzie porównanie przedstawione w pracy ograniczyło się do liczby Strouhala. Doktorant uzyskał bardzo dobrą zgodność tej liczby z wartościami w powyższej publikacji, ale szkoda, że w pracy nie ma zamieszczonego szerszego porównania wpływu np. rzędu aproksymacji na ewolucję śladu, albo porównania z wybranymi danymi eksperymentalnymi.

Ostatnim analizowanym przypadkiem jest przepływ w szczelinie skalnej. To bardzo interesujący przypadek, bo pokazuje potencjał metody w zastosowaniu do geometrii o nieregularnych kształtach. Obliczenia wykonano dla trzech przypadków różniących się chropowatością powierzchni. Dla każdej z geometrii przeprowadzono symulacje z wykorzystaniem trzech modeli: dwuwymiarowego równania Reynoldsa oraz trójwymiarowych równań Stokesa i Naviera–Stokesa. Liczbę Reynoldsa przyjęto jako $Re = 20$. Rząd aproksymacji jest równy $p=3$. Doktorant omówił wpływ chropowatości na przepuszczalność oraz zamieścił wizualizację przepływu wskazując na złożoność struktur wirowych w przepływie szczelinowym. Niestety zabrakło informacji dlaczego ten przypadek został wybrany do analizy, tzn. dlaczego liczba Reynoldsa $Re = 20$, czy wybór podyktowany przypadkiem rzeczywistym, czy innym przypadkiem analizowanym numerycznie w literaturze. Nasuwa się pytanie, jak wzrost liczby Re będzie prowadził do wzrostu różnic pomiędzy stosowanymi modelami.

Praca jest zakończona podsumowaniem wnioskami i rekomendacjami dotyczącymi propozycji zakresu przyszłych prac. Wnioski są ogólne, nie zawierają ilościowych parametrów, ale wskazują na w pełni osiągnięty cel zdefiniowany na początku pracy.

3. Uwagi szczegółowe

Układ pracy oraz podział materiału na poszczególne rozdziały nie budzi zastrzeżeń. Przedstawiona praca doktorska jest napisana w języku angielskim w jasny sposób. Jednak ze względu na dużą ilość symboli, warto byłoby dodać ich spis, ponieważ przeszukiwanie tekstu utrudnia jego czytanie.

Poza ogólnymi uwagami i komentarzami w pierwszej części recenzji nasuwają się poniższe spostrzeżenia i pytania.

1. Proszę o podanie szczegółów dotyczących rozwiązywanych przypadków 2D i 3D w rozdziale 4.4. W pracy podano, że dotyczy to przypadków na siatkach kartezjańskich, ale jakie są warunki brzegowe dla wybranych równań?
2. Testy skalowalności wykonano dla rzędu aproksymacji $p=3$. Czy testowano i zaobserwowano wpływ rzędu aproksymacji ($p > 3$) na skalowalność kodu? Czy to może mieć znaczenie w przypadku obliczeń dla równań N-S i większych liczb Reynoldsa.
3. W sekcji 6.2 (Taylor-Green Vortex) podano, że przeprowadzenie symulacji w pełni okresowej domenie nie było możliwe ze względu na drugą i trzecią fazę *splitting scheme*. (str. 87: *Performing the simulations in a fully periodic domain was precluded by the second and third phases of the splitting scheme*). Czy to implikuje jakieś trudności w rozwiązywaniu zagadnień inżynierskich z warunkami periodycznymi?
4. Czy w ramach prowadzonych prac i testowania kodu były prowadzone jakieś bardziej szczegółowe porównania wybranych wielkości charakteryzujących przepływ (np. prędkość w śladzie w opływie cylindra) z innymi rozwiązaniami, kodami lub danymi eksperymentalnymi?
5. Czy Doktorant wykonał jakieś porównania dowolnych przypadków (może innych niż zamieszczone w pracy) z danymi eksperymentalnymi dla różnych rzędów aproksymacji typu p ?
6. W podsumowaniu pracy Doktorant pisze, że chociaż przeprowadzone analizy obliczeniowe wykonano na stosunkowo starej architekturze CPU, technika sum-factorization umożliwia efektywne wykorzystanie nowocześniejszego sprzętu, w tym procesorów z jednostkami wektorowymi (AVX512), a przede wszystkim procesorów graficznych (GPU). Czy były prowadzone już jakieś testy na innych zasobach niż prezentowanych w pracy, np. jednym z dostępnych centrów obliczeniowych? Jeśli tak, to proszę o podanie szczegółów.

4. Podsumowanie

Podsumowując recenzowaną pracę uważam, że Pan mgr inż. Jakub Gałęcki przedstawił interesujące wyniki uzyskane przy wykorzystaniu programu L3STER. Należy podkreślić, że L3STER opracowany przez Doktoranta jest nowym narzędziem numerycznym udostępnionym na platformie GitHub, które może być wykorzystywane przez innych użytkowników do prowadzenia symulacji. Ponadto, Doktorant zastosował technikę sum-factorization w kontekście metody najmniejszych kwadratów, co poprawia wydajność procesu obliczeniowego, a także zastosował w schemacie *splitting scheme* warunki brzegowe typu „open”, co w tym ujęciu nie było wcześniej realizowane.

Na koniec należy jeszcze raz podkreślić dużą wartość rozwijanego przez Doktoranta kodu obliczeniowego L3STER, który w formule otwartej jest ogólnie dostępny i może być wykorzystywany do analiz złożonych zagadnień fizycznych. Wobec czego można stwierdzić, że wybrana tematyka ma istotne znaczenie poznawcze i aplikacyjne oraz spełnia kryteria prac w ramach dyscypliny „inżynieria mechaniczna”.

Uważam, że praca Pana mgra inż. Jakuba Gałęckiego pt.: „Efficient and Scalable Application of the Least-Squares Spectral/hp Element Method to Incompressible Flow Problems” odpowiada warunkom określonym w art. 187 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 roku „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce” i wnoszę o dopuszczenie jej do publicznej obrony.

A handwritten signature in blue ink, appearing to be 'J. Gałęcki', is located in the right-center of the page.