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, 12 kwietnia 2021 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej mgra inż. Michała Wichrowskiego

Fluid-structure interaction problems: velocity-based formulation and monolithic computational methods

Podstawę opracowania recenzji stanowiło pismo Sekretarza Rady Naukowej Instytutu Podstawowych Problemów Techniki PAN w Warszawie, dra hab. inż. Zbigniewa Ranachowskiego, z dnia 1.02.2021r. Praca doktorska została przygotowana pod kierunkiem prof. dra hab. inż. Stanisława Stupkiewicza (promotora) oraz dra Piotra Krzyżanowskiego (promotora pomocniczego).

Aktualność tematu

W mechanice obliczeniowej występują zagadnienia, w których przepływ (ruch płynu) sprzężony jest z ruchem ciała stałego, często w połączeniu z jego deformacją. Sprzężenie realizowane jest poprzez zadane warunki zgodności na powierzchni rozdziału faz niekiedy nazywanej interfejsem; utarła się nazwa „oddziaływanie płyn-struktura" (ang. FSI). Z uwagi między innymi na różne związki konstytutywne opisujące oddziałujące kontinua, zagadnienia FSI należą do klasy zadań o złożonej fizyce (ang. *multiphysics*). Zasadniczo, w rozwiązaniu numerycznym zagadnień FSI możliwe są dwa podejścia. W pierwszym z nich (ang. *partitioned*), oba kontinua materialne rozwiązywane są właściwymi dla siebie metodami, a podstawowym problemem pozostaje ich sprzężenie na interfejsie. Alternatywnie, można stworzyć opis jednolity, w którym rozwiązuje się jeden wspólny układ równań, a występujące w tych równaniach właściwości materiałowe mogą podlegać skokowi bądź też ciągłej zmianie na interfejsie. W mechanice obliczeniowej przepływów wielofazowych podejście takie nosi nazwę *one-fluid approach* w wariantach – odpowiednio – ostrego (*sharp*) lub rozmytego (*diffuse*) interfejsu. W mechanice ciała stałego przyjęto określenie: podejście monolityczne albo, po dyskretyzacji zadania, schemat monolityczny. Autor rozprawy postawił sobie bardzo ambitne zadanie rozwinięcia modelu matematycznego zagadnienia FSI w takim właśnie podejściu oraz opracowania własnego, wydajnego kodu z masowym zrównolegleniem procesu obliczeniowego. Towarzyszy temu systematyczna i bardzo szczegółowa weryfikacja tworzonego modelu oraz – w pewnym zakresie – jego walidacja z wykorzystaniem dostępnych wyników eksperymentu wzorcowego (także numerycznego). Do rozwiązania zadania metodą elementów skończonych (MES) wykorzystuje się zewnętrzną bibliotekę procedur numerycznych.

Uważam, że tak postawione zadanie bardzo dobrze lokuje się we współczesnej mechanice obliczeniowej. Temat jest aktualny naukowo i może mieć przy tym pewien walor aplikacyjny, a stopień trudności prawdopodobnie przewyższa zwyczajowo przyjęte oczekiwania wobec prac doktorskich. Od strony klasyfikacji formalnej rozprawa sytuuje się w dyscyplinie inżynieria mechaniczna (poprzednio: mechanika) z silnym komponentem tak zwanych nauk obliczeniowych, które jednakże nie występują dotąd oddzielnie w nomenklaturze krajowej.

Krótki opis rozprawy

Struktura pracy jest poprawna i przejrzysta. We Wprowadzeniu (rozdział 1) Autor przedstawia motywację do podjęcia zagadnienia FSI będącego przedmiotem rozprawy, dokonuje krótkiego przeglądu literatury przedmiotu, zwłaszcza w zakresie szczegółowych zagadnień podejmowanych w głównej części pracy, informuje o jej zakresie oraz celu, jakim jest opracowanie własnego, oryginalnego solwera FSI w podejściu monolitycznym z nastawieniem na zadania o dużej liczbie stopni swobody, co wymusza przyjęcie specyficznego podejścia (ang. *matrix-free*), bez przechowywania globalnych macierzy MES. W rozdziale 2 przedstawiono użyty model matematyczny przepływu oraz dynamiki ciała stałego odkształcalnego wraz ze stosownymi związkami konstytutywnymi dla cieczy newtonowskiej oraz nieściśliwego, hipersprężystego ciała stałego. Wprowadzono podejście *arbitrary Lagrangian-Eulerian* (ALE) w celu zastosowania siatki MES, która pozwala na dyskretyzację obszaru płynnego z uwzględnieniem ruchu interfejsu. Wreszcie, przedstawiono wyjściowe sformułowanie układu równań ciągłości i pędu użyte dalej do dyskretyzacji MES. Te zagadnienia, to znaczy dyskretyzacja przestrzenna oraz schematy całkowania w czasie są przedmiotem rozdziału 3. Rozwiązanie wynikowego układu równań algebraicznych dokonywane jest z użyciem metody wielosiatkowej (ang. *multigrid*). Z uwagi na uwarunkowanie zagadnienia, konieczne jest zastosowanie – połączonego z tą metodą – specyficznego, wielopoziomowego operatora uwarunkowania wstępnego (ang. *preconditioner*), zwanego też operatorem ściskającym (rozdział 4). Jego własności badane są na przykładzie dwóch zadań modelowych (2D oraz 3D) wraz z oceną wydajności obliczeniowej oraz skalowalności. W rozdziale 5 sformułowano oraz rozwiązano zadania cząstkowe: opływ przeszkody płynem lepkim w kanale, drgania belki o swobodnym końcu, oraz dobór metody ujmującej deformację siatki MES w obszarze płynu, co jest potrzebne w sformułowaniu ALE. W ten sposób Autor systematycznie testuje kolejne elementy rozwijanego przez siebie podejścia. Ich integrację przedstawiono w rozdziale 6, gdzie zawarto wyniki uzyskane dla konfiguracji pewnego eksperymentu wzorcowego FSI, zdefiniowanego wcześniej w literaturze: jest to dwuwymiarowy opływ sztywnego walca z dołączoną doń po stronie spływowej deformowalną płytą. Przedstawiono wynikowe mapy amplitudy prędkości wraz w występującymi przy wzroście liczby Reynoldsa drobnoskalowymi strukturami wirowymi tworzącymi się w wyniku oddziaływania z ciałem stałym; pokazano także zapis ruchu wybranego punktu tegoż ciała, wyznaczono jego amplitudę i okres drgań. W rozdziale 7 zawarto krótkie podsumowanie rozprawy oraz przedstawiono kierunki możliwych dalszych badań. Bibliografia obejmuje 135 pozycji z literatury światowej głównego nurtu, w tym znaczącą liczbę prac z ostatnich lat.

Szczegółowa ocena pracy oraz uwagi rzeczowe

W swojej rozprawie doktorskiej Autor udokumentował sformułowanie oraz rozwiązanie zaproponowanego przez siebie oryginalnego i poważnego zadania, zawierającego – w moim przekonaniu – szereg elementów nowości naukowej. Punktem wyjścia były: dobrze opracowane w literaturze techniki dyskretyzacji typu MES oraz wybór podejścia monolitycznego do zadań FSI. Można oczywiście dyskutować, czy w ostatecznym rozrachunku okaże się ono lepsze od metod łączących dwa różne solwery, ale nie jest to w żadnej mierze krytyką. W ramach dobrze określonego zadania Doktorant rozwinął i systematycznie zweryfikował jego istotne elementy. Zastosowano sformułowanie ALE, co – przy pewnej komplikacji matematycznego opisu zagadnienia – zapewnia „nadążanie” siatki za interfejsem, a jednocześnie umożliwia poprawną dyskretyzację MES zmiennego w czasie obszaru wypełnionego przez płyn. Z uznaniem należy przyjąć wykorzystanie zaawansowanych, dostępnych w postaci biblioteki oprogramowania, procedur numerycznych metody elementów skończonych. Do elementów nowości naukowej zaliczyć należy wprowadzenie techniki redukcji (relaksacji) pojawiających się niejednorodności gęstości ciała stałego (Autor używa tu sformułowania tłumienie objętościowe), rozwinięcie schematu GCE (*Geometry-Convective explicit*), jak również opracowanie złożonego operatora uwarunkowania wstępnego. Konieczność rozwiązania tej trudności obliczeniowej jest poniekąd konsekwencją sformułowania monolitycznego, w którym występuje skok stałych materiałowych na ostrym interfejsie.

Autor zebrał oraz poprawnie udokumentował oryginalny i interesujący poznawczo materiał. Być może miejscami rozprawa jest napisana zbyt zwięźle. Jest to oczywiście związane z założonym u Czytelnika poziomem wiedzy, ale uważam, że niektóre specjalistyczne pojęcia mogłyby być krótko wprowadzone lub objaśnione. Rozprawa obejmuje jednocześnie zagadnienia mechaniki ośrodków ciągłych (płynów i ciał stałych) oraz metod obliczeniowych, które są istotne i trudne. Dogłębne zrozumienie wszystkich aspektów pracy jest zatem prawie niemożliwe bez odniesienia się Czytelnika do cytowanej literatury. Rozprawa nie jest bardzo długa (łącznie liczy około 80 stron), więc byłaby przestrzeń do pewnego jej rozszerzenia. Jest to szczególnie zauważalne we wprowadzeniu do zagadnień FSI i metod ich analizy obliczeniowej, gdzie w jednym krótkim podrozdziale (strony 2-5 pracy) przytoczono łącznie blisko 70 (!) istotnych pozycji literatury przedmiotu. Uważam, że byłoby z dużym pożytkiem dla Czytelnika, gdyby Autor zechciał w tym miejscu nakreślić bardziej pogłębiony czy też szczegółowy obraz współczesnego stanu wiedzy w tym zakresie, który – jestem pewien – bardzo dobrze poznał, i podzielić się swymi przemyśleniami, zwłaszcza co do krytycznej analizy tegoż stanu. (Może nawet byłoby to z pożytkiem dla Autora?). W tym miejscu nasuwa się też drobna uwaga co do potrzeby doprecyzowania samego pojęcia FSI. **Pytanie 1**: w pierwszym akapicie Wprowadzenia, Autor nawiązuje (*signum temporis…*) do masek ochronnych sugerując, że FSI jest istotnym aspektem zagadnień filtracji. Otóż sam przepływ i separacja cząstek nie należą do tego obszaru – o ile faza dyspersyjna nie wpływa na ruch płynu (jednostronne sprzężenie pędu) i nie występuje znacząca deformacja włókien filtrów wskutek przepływu gazu. Czy to zdaniem Doktoranta rzeczywiście zagadnienia FSI? Innym miejscem, gdzie w moim odbiorze prezentacja i dyskusja są zbyt skrótowe, jest ekstrapolacja przemieszczeń ciała stałego na obszar płynny (rozdział 5.4) z rozwiązaniem pomocniczego równania liniowej sprężystości bądź też równania biharmonicznego.

Wracając do podstawowego sformułowania równań podejścia monolitycznego: ciekawym i przypuszczam, że oryginalnym pomysłem jest (używając słów Autora) tłumienie objętościowe mające zapewnić stałość gęstości ciała stałego. Autor wychodzi tu z równania ciągłości (2.60). NB: użyte tam określenie „lokalna produkcja masy” jest niefortunne, a nawet niepoprawne, gdyż równanie ciągłości wyraża prawo zachowania masy, zaś jej produkcja wymagałaby wprowadzenia członu źródłowego powiązanego z konkretnym mechanizmem fizykalnym (np. przemiana fazowa czy reakcja chemiczna), a lokalna pochodna gęstości takim członem nie jest. Ponadto, czy pod operatorem dywergencji w równaniu (2.65) nie zabrakło ρ_s? Pomijając te kwestie techniczne, znacznie ciekawsze wydaje się pytanie o rolę ciśnienia w płynie nieściśliwym. Jeśli q jest funkcją testową w sformułowaniu słabym (rozdział 2.3), to finalnie równanie ciągłości w ciele stałym (z ujęciem tłumienia objętościowego) zapisane jest w postaci (2.71b) i to samo równanie w schemacie monolitycznym (jego lewa strona to całka po Ω) ujmuje także równanie ciągłości w płynie, czy tak? W takim razie (**Pytanie 2**): (i) czy ciśnienie p, które w cieczy służy do spełnienia warunku nieściśliwości, a które występuje w drugim składniku równania (2.71a), w nieściśliwym ciele stałym odgrywa inną rolę? I dalej: standardowym zabiegiem w podejściu istotnie nieściśliwym w obliczeniowej mechanice płynów jest rozwiązywanie tak zwanego równania korekcji ciśnienia. To dodatkowe pole koryguje zmianę prędkości na kroku czasowym (w równaniu N-S) by spełnić w przybliżeniu warunek zerowej dywergencji pola prędkości. Innymi słowy: (ii) czy w rozważanym zagadnieniu występuje podobieństwo ról pełnionych przez p_f oraz p_s? Czy rozwiązywane jest równanie typu korekcji ciśnienia w płynie celem zapewnienia jego nieściśliwości? Jeśli tak, to gdzie można je dostrzec? A jeśli nie, to co wiemy o zapewnieniu stałości gęstości (i zachowaniu objętości) płynu?

W rozdziale 3 pojawiają się kolejne miejsca, gdzie – w moim odczuciu – ważne dla pracy pojęcia zostają wprowadzone w sposób bardzo skrótowy; są to schemat GCE (*nota bene* explicite przywołany w sformułowaniu celu pracy) oraz uogólnione zagadnienie Stokesa. **Pytanie 3:** proszę o odpowiedź (na naiwne być może pytanie) i wyjaśnienie następujących kwestii: (i) co się dzieje w tym miejscu z pochodną konwekcyjną, istotną w przepływach w ogólności, a pomijaną w przybliżeniu Stokesa? Oraz (ii): jaka jest rola ”zunifikowanej lepkości” (str. 28 u góry) w tymże zagadnieniu? Jak rozumiem, ta ważna dla pracy postać równania (3.68) stanowi istotę tytułowego „sformułowania prędkościowego” i jest wynikiem założonego modelu konstytutywnego dla ciała stałego, zob. równanie (2.45) oraz tekst poniżej (2.57). [NB: w (2.45) oraz (2.52) powinno raczej wystąpić σ_s]. Czy zatem (**Pytanie 4**) ogólność rozwiniętego w rozprawie modelu matematycznego jest ograniczona (i w jakim stopniu) przez przyjęty model konstytutywny oraz założenie o nieściśliwości obu ośrodków ciągłych?

W rozdziale 4 wprowadza się (z myślą o dyskutowanym wyżej uogólnionym zagadnieniu Stokesa w sformułowaniu dyskretnym) operator ściskający, ważny dla zapewnienia zbieżności i poprawy wydajności obliczeniowej rozwiązania dużego wynikowego układu równań liniowych. Jest on określony przez szereg parametrów numerycznych (zob. rozdział 4.2.2); niektóre z nich są następnie przedmiotem analizy pod kątem kosztu obliczeń. Nasuwa się zatem **Pytanie 5:** na ile uniwersalny jest tak uzyskany zestaw parametrów? Jak bardzo może on zależeć od zadanej geometrii rozwiązywanego zagadnienia? W Tabelach 5.3 i 6.2 podano ich wartości dla – odpowiednio – zadań przepływu lepkiego oraz dla FSI, ale (jeśli się nie mylę) nie podano wprost jak je uzyskano.

Interesujące i ważne dla osiągnięcia końcowego celu rozprawy są badania zagadnień cząstkowych przeprowadzone w rozdziale 5. Zadanie przepływu lepkiego z okresowym schodzeniem wirów za przeszkodą jest dobrze rozpoznane w mechanice płynów, więc trochę szkoda, że Autor nie pokusił się o porównania ilościowe, jak choćby zależność liczby Strouhala od liczby Reynoldsa, którą można uzyskać łatwiej niż współczynniki oporu i siły nośnej. Inną ciekawą informacją byłoby porównanie uzyskiwanych rozwiązań w zależności od rozmiaru siatki (Tab. 5.2). Jak rozumiem (**Pytanie 6**), celem było tu potwierdzenie działania metody dla bardzo dużych zadań w implementacji równoległej, gdyż zapewne nie zachodziła potrzeba wykorzystania tak dużej liczby węzłów jak 57 i 227 milionów w zadaniu 2D przy Re≤1000. Czy tak? To samo pytanie wypada zadać odnośnie finalnych wyników prezentowanych w rozdziale 6. Ponadto, wnioskując z danych geometrycznych przytoczonych w Tabeli 5.1 ($C_y \neq H/2$), zagadnienie nie posiada płaszczyzny symetrii (?) Jeśli tak, to warto było ten fakt podkreślić i uzasadnić taki wybór geometrii (**Pytanie 7**). Czy chodziło tu o szybszą destabilizację i uzyskanie schodzącej ścieżki wirów, a w zagadnieniu FSI także deformacji i oscylacji ciała? Ponadto (**Pytanie 8**): nieco niepokoi stwierdzenie Autora, że solwer nie jest odporny (*robust*) na wzrost liczby Reynoldsa – proszę o komentarz.

Wyniki dla ciała stałego (rozdział 5.3), a zwłaszcza dla zadania FSI (rozdział 6) są równie ciekawe, a przy tym najważniejsze z punktu widzenia realizacji celu pracy. Szkoda jedynie, że nie udało się dobrać ani znaleźć odpowiedniego przypadku do precyzyjnych porównań ilościowych. Autor tę kwestię wyjaśnia jednak (rozdział 6.3), podobnie jak brak podjęcia trójwymiarowego zagadnienia FSI (rozdział 7.2); podane tam argumenty są przekonujące.

Drobne uwagi rzeczowe oraz redakcyjne

Od strony redakcyjnej opracowanie rozprawy jest bardzo staranne; podkreślić należy wysoką estetykę pracy oraz dbałość o jej formę; jedynie niektóre rysunki są zbyt małe. Jak wspomniałem wcześniej, tekst miejscami wydaje się zbyt zwięzły a nawet lakoniczny, zważywszy także na wymagającą w odbiorze notację matematyczną do której czasem przydałyby się komentarze. Również język angielski rozprawy jest bardzo dobry, a miejscami wręcz elegancki. Stosunkowo niedużo jest drobnych potknięć językowych, bez wpływu na czytelność rozprawy. Podanie w bibliografii miejsc wystąpienia w tekście odwołań do poszczególnych pozycji jest miłym ukłonem w stronę Czytelnika.

Zauważonych w pracy pewnych niedoskonałości rzeczowych nie ma zbyt wiele. Oto lista uwag (proszę Autora jedynie o pisemne odniesienie się do nich):

a) O ile notacja wektorowo-tensorowa z użyciem symboli pogrubionych jest zwyczajowo przyjęta w mechanice płynów (choć niekoniecznie w tekstach matematycznych) i nie jest to problemem podczas lektury pracy, to niekonsekwentne stosowanie kropki (\cdot) w iloczynach skalarnych może powodować zamieszanie, por. równania (2.5) i (2.8). Podobnie uważam, że mylący może być sposób zapisu operatora pochodnej konwekcyjnej w równaniu (2.3); zapis v \cdot \nabla \kappa byłby tu jednoznaczny. Podobnie także w równaniach (2.12), (2.16) itd.

b) Powyżej (2.9): ściśle biorąc, warunki brzegowe na interfejsie (czyli na ściance) to "*impermeability and no-slip*". W ogólności, na ściance porowatej lub z transpiracją może wystąpić niezerowa składowa normalna prędkości płynu.

c) porównując równania (2.11) oraz (2.14) można się zastanawiać, czy i jakie znaczenie ma użycie średnika bądź przecinka w $A(t;x)$ w kontekście roli argumentów/parametrów t oraz x? Ponadto, na początku rozdziału 2.2 mówi się o $A(t)$ jako o dyfeomorfizmie – czym zatem jest A? Rozumiem, że „dyfeomorfizm" odnosi się tu raczej do argumentu przestrzennego, ale później pojawia się różniczkowanie względem t (?).

d) definicja płynu/przepływu nieściśliwego: zazwyczaj przyjmuje się $d\rho/dt=0$ (*), co jest równoważne zerowej dywergencji pola prędkości. Zapis z pochodnymi cząstkowymi, $\partial\rho/\partial t=0$, występujący w tekście poniżej (2.18) będzie prawdą tylko wówczas, jeśli gęstość jest stała, co jest silniejszym założeniem niż (*). Wówczas taki zapis nie bardzo w ogóle będzie potrzebny.

e) w mechanice płynów przyjmuje się część nielepką tensora naprężeń jako $-p_f \boldsymbol{I}$. Czy zatem w równaniach (2.35), (2.38) i dalej jest błąd w znaku?

f) równanie (3.22): czy zapis a_i to błąd (czym jest indeks i)? Ponadto, czy w równaniu (3.21a) nie powinny wystąpić zmienne dyskretne v_n oraz p_n zamiast v oraz p? Por. także (3.38).

g) W tekście kilkukrotnie mówi się o „liczbie Peceleta". Poprawne nazwisko to Peclet (a nawet Péclet). Przy okazji: Pe_K oraz Pe_τ na str. 27 oznaczają zapewne to samo?

Przede wszystkim jednak proszę Doktoranta o odpowiedź pisemną i wyjaśnienie podczas publicznej obrony kwestii podniesionych wcześniej (**Pytania 1-8**).

Podsumowanie i wniosek końcowy

Rozprawa niewątpliwie świadczy o ugruntowanej wiedzy Doktoranta z zakresu modelowania matematycznego w mechanice continuum oraz zagadnień sprzężenia płyn – ciało stałe, o jego dociekliwości i znakomitych praktycznych umiejętnościach samodzielnego przygotowania narzędzi oraz prowadzenia zaawansowanych obliczeń naukowych. Rzetelnie dokumentuje przeprowadzone przez niego badania z interpretacją uzyskiwanych wyników, umiejętność systematycznej pracy na kolejnych etapach rozwijanego podejścia wraz z pogłębioną analizą uzyskanych wyników. Są to istotne elementy składające się na bardzo dobry już teraz warsztat naukowy Autora. W rozprawie przedstawiono rozwiązanie ciekawego zagadnienia badawczego; zawiera ona szereg elementów nowości naukowej, w tym wprowadzenie wielopoziomowego operatora ściskającego, oryginalny sposób zapewnienia stałej objętości deformowanego ciała stałego oraz opracowanie mniej „zasobochłonnej" (*matrix-free*) metody w zastosowaniu do dużych zadań obliczeniowych.

Uważam, że opiniowana praca spełnia z naddatkiem wymagania stawiane rozprawom doktorskim przez przepisy obowiązującej Ustawy o Stopniach i Tytule Naukowym i **wnioskuję o dopuszczenie mgra Michała Wichrowskiego do publicznej obrony**. Ponadto, zważywszy na: duży stopień trudności i złożoność analizowanych w rozprawie zagadnień, podane wyżej elementy nowości w zaproponowanym podejściu oraz uzyskane oryginalne wyniki, zasadne jest w moim przekonaniu postawienie wniosku o **wyróżnienie pracy doktorskiej**.

J. Pozorski