Dr hab. inż. Ryszard Leniowski, prof. PRz
Katedra Informatyki i Automatyki
Wydział Informatyki i Elektrotechniki
Politechnika Rzeszowska

Rzeszów, 10 maj 2021 r.

Recenzja pracy doktorskiej

Tytuł rozprawy: **Modele wielkoskalowych procesów ciągłych dla ko-symulacji w projektowaniu systemów sterowania**

Autor rozprawy: **mgr inż. Artur Wodołażski**
Promotor rozprawy: **dr hab. inż. Dariusz Choiński, prof. Uczelni**

Recenzja została opracowana na zlecenie Przewodniczącego Rady Naukowej Automatyka, Elektronika i Informatyka Politechniki Śląskiej w Gliwicach, dr hab. Inż. Moniki Kwoki, prof. Uczelni, z dnia 02 lutego 2021 roku.

1. Ocena formalna pracy

Praca poświęcona jest zagadnieniu modelowania i symulacji złożonych i sprzężonych ze sobą układów dynamicznych oraz oryginalnym sposobom wykorzystania wyników, np. do precyzyjnej kalibracji urządzeń laboratoryjnych lub wirtualnej obserwacji zjawisk fizyko-biologicznych w mini-bioreaktorze zbiornikowym. Obserwując rozwój teorii poświęconej modelom złożonym oraz ogromny postęp w dziedzinie algorytmów obliczeniowych, często w dziedzinach zupełnie odległych od omawianej, można z dużą pewnością stwierdzić, że podejmowana w pracy tematyka jest ważna, zarówno z poznawczego jak i z aplikacyjnego punktu widzenia.

Celem rozprawy było zaproponowanie określonych procedur/ metod postepowania zapewniających skuteczne zbadanie złożonego systemu metodą symulacji komputerowej opartej o „dokładny" model obliczeniowy. Jest to podejście preferowane obecnie w wielu gałęziach nowoczesnego przemysłu, gdzie następuje wolne, ale stałe odejście od „redukcjonizmu" czyli posługiwania się tylko modelami uproszczonymi, względem zjawisk obserwowanych w rzeczywistości. Konsekwencją takiego podejścia jest znaczny wzrost wymagań stawiany badaczom i inżynierom - informatykom na etapie konstruowania wiarygodnych modeli łączących zjawiska o różnym stopniu komplikacji oraz ich wewnętrznej organizacji. Dyscypliny, takie jak fizyka, chemia, biologia, a często również ekonomia, budują wspólnie system dążąc do synergii różnych praw i własności.

Autor zaprezentował zagadnienie modelowania i symulacji złożonego systemu, stosując technikę przeplatania informacji teoretycznej z prezentacją dwóch przykładowych implementacji. Aby ustalić płaszczyznę dla analizowanych zjawisk dokonano analizy poruszanej problematyki

RAU
Biuro Dziekana
Wpłynęło dnia 31.05.2021
Nr 192/20/21 / zał. .....

w oparciu o szereg źródeł obejmujących obszary i zagadnienia takie jak: wielkoskalowe zjawiska transportowe, niepewność parametryzacji modeli multifizycznych, szacowanie stopnia sprzężenia w ko-symulacji oraz synteza i kalibracja modeli termiczno- przepływowych.

Po wprowadzeniu do analizowanych zjawisk, Autor zaprezentował pierwszy obiekt, czyli mikrokalorymetr NCM-9924, dla którego został wyprowadzony model wymiany ciepła połączony z kalibracją wrażliwego parametru, jakim jest grubość membrany (jeden z kluczowych elementów kalorymetru). Kalibracja została przeprowadzona w oparciu o eksperyment doświadczalny, gdzie referencyjnymi materiałami były: kropla wody destylowanej oraz kropla glikolu. W ten sposób Autor otrzymał szczegółowy model dynamiki, pozwalający określić stałe czasowe termicznych reakcji biochemicznych. W modelu uwzględniono, między innymi, wpływ grubości warstwy pasty silikonowej, przyklejającej aluminiową puszkę kalorymetru. Dzięki temu uzyskano poszerzenie zakresu pracy urządzenia.

W kolejnym, czwartym rozdziale Autor skupił się na głównym problemie pracy, czyli modelowaniu złożonych zjawisk wymiany ciepła dla obiektu rzeczywistego z zastosowaniem podziału przestrzeni na cztery domeny o regularnych kształtach. Przepływ ciepła pomiędzy domenami opisują równania różniczkowe cząstkowe. Jest on wyznaczany na podstawie rozkładu temperatur w domenach. Do rozwiązania równań dynamiki Autor zastosował metody siatkowe oraz wykorzystał oprogramowanie ANSYS-Fluent. Spośród dostępnych podziałów przestrzeni, zastosowano *„upwin II rzędu”* z parametryzacją materiałową opartą o bazy ANSYSa. Głównym problemem badawczym w rozważanym przykładzie było określenie grubości trzeciej domeny, czyli pasty silikonowej. Połączono w tym celu dwa moduły programowe ANSYS-Fluent oraz ASYS-Simplorter, pozwalające w trybie iteracyjnym dostroić model teoretyczny do danych pomiarowych. Dodatkowo, wykorzystano pakiet Matlab, w którym wykonywano minimalizację wskaźnika MSE. Uzyskane wyniki, połączone z walidacją modelu, wykazały wpływ dodatkowej pojemności cieplnej, wprowadzanej przez trzecią domenę, co objawiało się przesunięciem fazowym odpowiedzi oraz zmianą jej amplitudy. Wpływ pojemności cieplnej trzeciej domeny jest doskonale widoczny na wyjściowej charakterystyce napięcia termostatu. Dla przykładu, gdy grubość domeny wynosi 100 mikrometrów to różnica napięć wynosi aż 10mV. W ten sposób, Autor przekonywująco pokazał znaczenie dokładnego modelowania procesów termicznych, mających wpływ na jakość pracy sprzętu pomiarowego.

W rozdziale piątym dokonano przeniesienia metod sprawdzonych na mini-modelach do skali makro. Rozważono model hydrodynamiki i biodynamiki w reaktorze zbiornikowym. Część odpowiadająca za biodynamikę jest opisywana bilansem populacji fazy gazowej i stałej - PBM. Kluczowym zagadnieniem jest w tym przypadku dynamika mechanizmu rozpadu i koalescencji piany (zlepione pęcherzyki gazu) zachodzącego w reaktorze zbiornikowym. Model PDE został przeniesiony do wersji dyskretnej, zaimplementowanej w oprogramowaniu ANSYS-Fluent. Z uwagi na wielowymiarowy charakter wyników, zostały one przedstawione w postaci barwnych przekrojów zbiornika, dla różnych parametrów symulacji (np. dla różnych wartości prędkości mieszadła). Intersującym faktem, obserwowanym na przebiegach symulacyjnych, jest występowanie oscylacyjnego charakteru przyrostu biomasy. Dzięki symulacyjnej możliwości parametryzacji pozostałych wielkości opisujących reaktor można było wyznaczyć ilościowy wpływ tych parametrów na przebieg pracy reaktora, w wyniku którego tworzyła się biomasa.

Badając złożone układy dynamiczne Autor zwrócił uwagę na niedostatki oprogramowania, które wykorzystał w badaniach. Chodzi tu o kilka aspektów. Pierwszy dotyczy możliwości konfigurowania i parametryzowania aktualnej wersji programu ANSYS-Fluent, która obecnie jest niewystarczająca. Drugi problem wiąże się z widocznym niedopasowaniem platformy systemowej do zadań symulacyjnych, co zmniejsza znacząco wydajność obliczeniową systemu komputerowego. Ostatni zauważony problem jest związany z brakiem środowiska integrującego różne zasoby , czyli tzw. „frameworka", wyposażonego w użyteczne funkcje wizualizacji i animacji 3D, które można by konfigurować zgodnie z wymogami użytkownika.

Pracę kończy podsumowanie i spis literatury, zawierający 128 pozycji. Literatura przedmiotu cytowana przez Autora jest właściwie dobrana, chociaż brakuje klasycznej pozycji, dotyczącej modelowania zjawisk na siatkach 2D i 3D, czyli zbiorowej pracy pod redakcją T.J. Chunga, „Computational Fluid Dynamics", Cambridge Press 2003, która w objętości ponad tysiąc stron prezentuje bardzo bogaty materiał. Dodatkowo można byłoby podać odnośniki do literatury opisującej podobne problemy, ale klasyfikowanej w dziedzinie gier i grafiki komputerowej. Często są to prace pisane przez wybitnych matematyków i informatyków o „świeżym" spojrzeniu na zagadnienie i dużym doświadczeniu programistycznym.

2. Ocena merytoryczna pracy

Praca reprezentuje dobry poziom merytoryczny i pokazuje rzetelne przygotowanie warsztatowe Autora w zakresie modelowania i symulacji procesów przepływu masy, transportu ciepła oraz bilansu biomasy w reaktorach mieszalnikowych. Na uwagę zasługuje umiejętność prowadzenia często żmudnych i czasochłonnych badań doświadczalnych i łączenia ich rezultatów z badaniami symulacyjnymi, które z kolei opierają się na solidnej znajomości metod numerycznych, technologii programowych oraz sprzętowych. Wydaje się, że połączenie dwóch podejść jest właściwe dzisiaj, gdy mamy dostęp do bardzo szybkich komputerów oraz do zasobów programowych odpowiedniej jakości, pozwalających symulować złożone, silnie nieliniowe układy dynamiczne.

Z uwagi na obszerność podejmowanej tematyki, można przyjąć różne strategie postępowania (w zakresie symulacji) do realizacji zaplanowanych wcześniej badań. W związku z powyższym, można polemizować z pewnymi informacjami, sformułowaniami i wnioskami zawartymi w pracy. Poniżej zamieszczono listę uwag, w kolejności odwołania do problemów i zagadnień prezentowanych w pracy.

2.1 Str.11, teza 1. „Bieżące zmiany warunków brzegowych, na drodze programowej, umożliwiają przeprowadzenie ko-symulacji dla modeli wielkoskalowych zjawisk transportowych procesów ciągłych w celu rozszerzenia zakresu rozpatrywanych zjawisk multifizycznych w przestrzeni wielowymiarowej".
Wydaje się, że teza pracy jest sformułowana zbyt ogólnie. Wiadomo bowiem, że rozwiązanie PDE zależy silnie od warunków brzegowych, również dla układów złożonych, gdzie rozpatruje się sprzężone ze sobą procesy fizyko-chemiczne/ biologiczne. Pytanie, co oznacza „bieżąca zmiana warunków brzegowych"? Jeżeli ogranicza się ona tylko do zmiany parametrów, to problem jest stosunkowo łatwy do rozwiązania, np. można dodać odpowiedni interfejs użytkownika. Jeżeli zaś bieżąca parametryzacja oznacza zmianę

struktury modelu, np. zagęszczanie siatki „w locie", czy zmianę znaczenia węzła, np. „stan węzła powinien spełniać" na „stan węzła musi spełniać" to zadanie jest trudniejsze i często wymaga podania ścisłego dowodu matematycznego, że taka parametryzacja nie jest obarczona błędami.

2.2 Str.11, teza 2. Jest sformułowana zbyt ogólnikowo. Jest ona z pewnością prawdziwa dla wielu obiektów, w tym takich, jak rozważane w pracy. Może się jednak zdarzyć, że dla jeszcze trudniejszych zjawisk oraz parametrów je opisujących nie da się przeprowadzić odpowiedniej walidacji.

2.3 Str.13. W analizie źródłowej tematu brakuje informacji o modelach procesu spalania ciał, modelowaniu płomienia i dymu. Są to procesy na tyle istotne, że opracowano dla nich wiele interesujących technik obliczeniowych. Przykładem może być metoda *projekcji*, czyli realizacji przekształcenia nazywanego rozkładem Helmholtza - Hodga, w wyniku którego można pominąć obliczenia ciśnienia. Metoda ta rozkłada pierwotne pole wektorowe do sumy pół wektorowych: dywergencji oraz pola skalarnego gradientu (opisana prze Harrisa, schemat obliczeniowy podany przez Stama). Dzięki przekształceniu uzyskuje się taką postać obiektu, która jest dogodna do obliczeń komputerowych. Harris M. J., GPU Games.: „*Fast Fluid Dynamics Simulation On The GPU*", Nvidia 2004.

2.4 Str. 15, 2 w. d., mówiąc o klasycznych algorytmach stosowanych w modelowaniu zjawisk wielkoskalowych, warto wspomnieć nie tylko zagęszczaniu siatek, ale także o „remeshingu", czyli przekształceniu siatek w formę dogodniejsza do obliczeń (np. cechującą się większą stabilnością numeryczną, ze względu na bardziej zrównoważony podział przestrzeni).

2.5 Str. 16, 1 w. g., modelowanie obejmuje również zjawiska kontaktu omawianych obiektów. Zazwyczaj do wyznaczania kontaktu włącza się dodatkowy, specjalizowany moduł obliczeniowy, który może być synchronizowany z modelem „głównym" na różne sposoby.

2.6 Str.26-28. Omawiając „oprogramowanie do modelowania…" pominięto istotny jego element, a mianowicie wykorzystywane formaty danych. Złożone oprogramowanie korzysta zazwyczaj z dedykowanych formatów danych, ułatwiających zarzadzanie nimi. Często wykorzystuje się kilka takich formatów, np. wewnętrznych, obsługujących warstwę obliczeniową oraz osobno np. prezentacyjną.

2.7 Str. 32-33. Omawiając problemy symulacji złożonych procesów pominięto istotne osiągnięcia, które zastosowano z powodzeniem w branży gier komputerowych. Złożoność programowa wielu gier opartych na symulacji komputerowej zjawisk świetlnych, ciał elastycznych, cieczy oraz połączonych przegubowo równoległych mechanizmów, jest dużo bardziej skomplikowana od rozważanego w pracy modelu. Z tego chociażby powodu powinny być one wspomniane w pracy.

2.8 Str. 37, dolna część strony. Opisując problem całkowania równań na drodze numerycznej warto byłoby poświecić temu zagadnieniu więcej uwagi, odsyłając czytelnika do wartościowych materiałów. Całkowanie ma duży wpływ na przebieg symulacji i błędem jest zdanie się na domyślny algorytm zamontowany w „solverze". Oprogramowanie wysokiej klasy oferuje albo zestaw różnych algorytmów (rząd metody, symetria, itp.) albo pozostawia użytkownikowi możliwość włączenia własnego algorytmu poprzez mechanizm „plugin". Czasami warto zastosować jeszcze inne podejście polegające na symbolicznym rozwiązaniu całek i uzyskaniu zbioru algebraicznych relacji pozbawionych „zer".

2.9 Uzupełnienie opisu metod całkowania znajduje się na str. 80. Moim zdaniem temat ten powinien zostać zaprezentowany staranniej, zwłaszcza w kontekście zmniejszenia kroku całkowania z 0.01 [s] (ustawienia domyślne) do wartości 0.001 [s] oraz wyboru metody „adaptive trapezoidal-Euler", czyli dość prostej.

2.10 W przypadku większego obiektu, czyli reaktora, krok całkowania ustalono na 0.0001 [s] (str. 99, 4 w. g.) choć w tabeli 14 na str. 100 wartość ta wynosi 0.001 [s], która jest prawdziwa?

2.11 Dla „małego" obiektu (kalorymetr) zastosowano dość duży krok całkowania, zaś dla symulacji reaktora, czyli obiektu „dużego" przyjęto krok 10 krotnie mniejszy, dlaczego? Wydaje się, że podobne zjawiska powinny zachodzić z różną dynamiką, zależną od masy, wolniejszą dla reaktora, szybszą dla kropli cieczy.

2.12 Opis niedopracowania narzędzi Simplorera zawarty na str.89 osłabia tezę nr 2. Wtedy jego ograniczenia w naturalny sposób przenoszą się na ograniczone wspomaganie procesu projektowania układów sterowania.

2.13 Komentarz do symulacji zawarty w punkcie 5.4 wskazuje na duże znaczenie form wizualizacji procesów zachodzących w reaktorze, np. ewolucja frakcji binsów pokazana na serii rysunków o numerze 32. Niestety Autor nie wspomina o zastosowanych metodach interpretacji wyników. Jest to proces zamiany wartości numerycznej na formę graficzną i może mieć wiele interesujących postaci. Warto byłoby opisać techniki prezentacyjne zastosowane w ANSYS-Fluent.

2.14 Analizując ko-symulacje pominięto informacje na temat strategii i technologii przetwarzania równoległego z następstwem zdarzeń.

2.15 Realizacja złożonego zadania symulacyjnego wymaga opracowania i skonstruowania odpowiedniego interfejsu użytkownika, z poziomu którego można skutecznie sterować całym zadaniem. Bez takiego modułu programowego, sterowanie systemem obliczeniowym jest uciążliwe i nie pozwala badaczowi skupić się na rzeczach istotnych. Temat ten został praktycznie pominięty, dlaczego?

Konkludując ocenę merytoryczną do osiągnięć Autora zaliczam:

- Wyprowadzenie wiarygodnych modeli typu FEM dla kalorymetru laboratoryjnego i zbiornikowego bio-reaktora.
- Przeprowadzenie walidacji modeli na drodze eksperymentalnej.
- Zaproponowanie metody symulacji sprzężonych zjawisk fizyko-chemicznych za pomocą dwóch aplikacji programowych, zsynchronizowanych ze sobą.
- Przeprowadzenie ko-symulacji złożonego obiektu jakim jest zbiornikowy bio-reaktor produkujący masę biologiczną. W ten sposób nakreślono możliwą drogę postępowania w badaniu innych, skomplikowanych procesów fizycznych, chemicznych, biologicznych i prawdopodobnie ekonomiczno-społecznych.
- Pokazanie szczegółów procesów dynamicznych zachodzących w reaktorze, co pozwala dostrzec zjawiska wpływające na przebieg pracy bio-reaktora.

3. Analiza źródeł, pozycja rozprawy, znaczenie wyników Autora, umiejętność przedstawiania wyników.

Spis literatury, zawierający 128 pozycji świadczy o głębokiej analizie problemu, przeprowadzonej przez Autora. Literatura przedmiotu jest właściwie dobrana biorąc pod uwagę rozległość tematów, stopień komplikacji wykorzystywanych metod i algorytmów a także ilość czasu, która należy poświęcić na zapoznanie się z wynikami publikowanych prac. Uważam, że cennym uzupełnieniem tej literatury byłyby pozycje klasyfikowane w dziedzinie gier i grafiki komputerowej, o nowym, oryginalnym spojrzeniu na zagadnienia modelowania i symulacji złożonych zjawisk dynamicznych.

Doktorant jest autorem/ współautorem kilkunastu publikacji, z których większość ukazała się w renomowanych czasopismach naukowych, np. *Applied Thermal Engineering IF=4.725,* czy *Journal of Multiphase Flow IF=3.083*, Zarówno rozprawa doktorska jak i publikacje pokazują, że Autor ma dar jasnego, precyzyjnego i przekonywającego wyrażania myśli za pomocą języka technicznego.

4. Główne wady rozprawy, słabe strony, uwagi i pytania

Ocena merytoryczna rozprawy została zaprezentowana w punkcie drugim. W tym punkcie zebrano uwagi dotyczące formalnej strony pracy, które w nieznacznym stopniu mogą wpływać na proces poznawczy. Od strony redakcyjnej praca reprezentuje dobry poziom, choć Autor nie ustrzegł się drobnych, ale licznych błędów edycyjnych. W pracy występuje dużo sklejek wyrazów i nawiasów (kilkadziesiąt), np. str. 17, 9 w. d., "… solverów)[31].", ta sama strona, 17, w. d., parabolicznych(wymiana…". To samo dotyczy spójników pozostawianych na końcu linii.

3.1. Str.17, 2 w. g., tłumaczenie CFD powinno wystąpić wcześniej, po pierwszym użyciu.

3.2. Str.21, 13 w. g., zamienić „koordynata" na „współrzędna". Usuwamy makaronizmy.

3.3. Str. 23, wzór (19) oznaczenia symboliczne powinny posiadać ujednolicony rozmiar czcionki. Ponadto w opisie wzoru (19) powinno być raczej (19a)+(19b)=(19c)+(19d). To samo dotyczy wzoru (46), str. 59.

3.4. Str. 25, 8 w. g., styl. „…zjawisk przenoszenia w płynach". Raczej „…zachodzących w płynach".

3.5. Str. 28, 3 w. g., „pre-procesing" jest jednym ze standardowych etapów przetwarzania danych w przypadku profesjonalnego oprogramowania, które pozwala na elastyczną parametryzację.

3.6. W tekście pojawiają się czasami wyrazy, które można zastąpić powszechnie używanymi i lepiej dopasowanym do kontekstu. Np. str. 40, 10 w. d., „… partycjonowania ko-symulacji…". Może lepiej „… podziału ko-symulacji….". Występują również wyrazy pisane z niemieckimi znakami specjalnymi, np. „β „ , rs.2., str. 42.

3.7. Odmiana zagranicznych nazwisk, np. str. 49, 5 w. d., występuje nazwisko Tanak. W wierszu poniżej jest „…Tanaki…", czy nie powinno być „…Tanaka…".

3.8. Błędy stylistyczne, np. str.61, 3 w. g., „…została zbudowana geometria…". Lepiej „opracowana". Podobnie dalej „… układu przy pomiarach z użyciem…".

3.9. Wzory (52)--(55) warto złączyć klamrą. Będą czytelniejsze.

$$\begin{cases} T_1(R) = \\ \beta(R) = \\ T_2(R) = \\ T_3(R) = \\ T_4(R) = \end{cases}$$

3.10. Wartości współczynników równania (70) warto umieścić w tabeli.

3.11. Bibliografia powinna być uszeregowana wg zasad stosowanych w publikacjach z dziedziny nauk technicznych, tak aby ułatwić proces znajdywania odwołań, również po nazwiskach. Niezbędne jest stosowanie porządku alfabetycznego w wykazie bibliografii.

3.12. Wolne miejsca. Warto ujednolicić gospodarowanie wolnymi polami po akapitach, np. str. 99, tabela 12 powinna być dosunięta do tekstu (z zachowaniem ustalonego odstępu).

3.13. Str.100 oraz 101, dwie tabele mają ten sam numer- 14.

5. Podsumowanie recenzji i wniosek końcowy

Doktorant dowiódł postawionych tez otrzymując wartościowe rezultaty dotyczące walidacji złożonych i sprzężonych modeli fizyko-chemicznych w wyniku połączenia badań symulacyjnych i doświadczalnych. Samo badanie symulacyjne także jest oryginalne, gdyż wykorzystuje jednocześnie dwa narzędzia programowe, czyli ANSYS-Fluent i ANSYS-Simplorer, pozwalające analizować subtelne stany dynamiczne (w przypadku reaktora zbiornikowego) i poszerzając tym samym zbiór ważnych wyników. Zaproponowana technika może być z powodzeniem wykorzystana do badań innych, złożonych układów dynamicznych, które można wyrazić za pomocą modelu siatkowego płaskiego lub przestrzennego.

Na podstawie art. 179 Ustawy z dnia 3 lipca 2018 r. Przepisy wprowadzające ustawę – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. 2018 poz. 1669) stwierdzam, że rozprawa doktorska mgr inż. Artura Wodołażskiego, spełnia warunki określone w art. 13 ust. 1 i ust. 2 Ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. 2003 poz. 595, z późniejszymi zmianami). Ponadto wnoszę o dopuszczenie rozprawy mgr inż. Artura Wodołażskiego do publicznej obrony.

Ryszard Leniowski