Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

■ posudek vedoucího ❑ posudek oponenta
❑ bakalářské práce ❑ diplomové práce

Autor/ka: Bc. Miroslav Tomášik
Název práce: Lattice gas cellular automata in hydrodynamics
Studijní program a obor: Fyzika, Matematické modelování ve fyzice
Rok odevzdání: 2017

Jméno a tituly vedoucího/oponenta: Mgr. Martin Scholtz, Ph.D.
Pracoviště: Ústav teoretické fyziky, MFF
Kontaktní e-mail:scholtz@utf.mff.cuni.cz

Odborná úroveň práce:
❑ vynikající ❑ velmi dobrá ■ průměrná ❑ podprůměrná ❑ nevyhovující

Věcné chyby:
❑ téměř žádné ■ vzhledem k rozsahu přiměřený počet ❑ méně podstatné četné ❑ závažné

Výsledky:
❑ originální ■ původní i převzaté ❑ netriviální kompilace ❑ citované z literatury ❑ opsané

Rozsah práce:
❑ veliký ■ standardní ❑ dostatečný ❑ nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:
❑ vynikající ❑ velmi dobrá ■ průměrná ❑ podprůměrná ❑ nevyhovující

Tiskové chyby:
❑ téměř žádné ■ vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet ❑ četné

Celková úroveň práce:
❑ vynikající ❑ velmi dobrá ■ průměrná ❑ podprůměrná ❑ nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/oponenta:

Motivace
Celulární automaty představují zajímavou alternativu k standardním numerickým metodám řešení Navierových—Stokesových rovnic v hydrodynamice. Jedná se o mikroskopický model založený na velmi zjednodušené dynamice částic tvořících kapalinu, který však přesto v makroskopické limitě reprodukuje, aspoň do určitého řádu, řešení hydrodynamických rovnic. Výhodou je také snadná paralelizovatelnost výpočtů a poměrně jednoduchý kód.

Z obecnějšího hlediska je zajímavá otázka, zda lze celulární automaty použít i v případě jiných nelineárních rovnic, kde standardní numerické metody nejsou tak úspěšné jako v případě Navier-Stokesových rovnic; příkladem takového složitého systému jsou Einsteinovy rovnice gravitačního pole, kde by existence příslušného celulárního automatu posloužila nejenom jako metoda řešení rovnic, ale mohla by vrhnout světlo i na potenciální mikroskopický kvantově-mechanický model gravitace.

V teorii turbulence existuje málo přesných, analytických výsledků. V teorii rozvinuté turbulence formulované Kolomogorovem však lze získat analytické výsledky použitím aparátu kvantové teorie pole a Feynmanových diagramů k výpočtu různých statistických veličin a charakteristik rychlostního pole kapaliny. Například lze zkoumat odchylky od původních fenomenologických postulátů formulovaných Kolmogorovem, vypočítat Kolmogorovovu konstantu, či zkoumat anomální škálování, a vliv anizotropie na tyto jevy.

Motivací práce bylo prozkoumat, do jaké míry se modely založené na celulárních automatech hodí ke zkoumání těchto problémů. Například lze očekávat, že pro celulární automaty je možné zkonstruovat diskretizovanou kvantovou teorii pole na mřížce. Aplikace takové teorie na hydrodynamické automaty by otevřela zcela nové metody *analytického* zkoumání Navier-Stokesových rovnic. Jelikož se jedná o dlouhodobý a náročný projekt, prvním krokem měla být analýza, zda lze pomocí celulárních automatů simulovat podmínky plně rozvinuté turbulence, zda lze adekvátně kontrolovat anizotropii systému, a podobně.

Cíle
Cílem diplomové práce bylo nastudovat problematiku celulárních automatů, implementovat různé modely v jazyce C++ nebo Python, simulace vhodně vizualizovat a extrahovat z nich kvantitativní charakteristiky toku. Dalším krokem měl být výpočet korelačních a strukturních funkcí rychlostního pole, vizualizace korelačního tenzoru, zkoumání škálovacích zákonů, etc.

Vypracování

Teoretická část práce je poměrně obsáhlá. Autor v ní postupuje od nejjednodušších celulárních automatů a vysvětluje jejich nedostatky, jako jsou absence izotropie či přítomnost nefyzikálních invariantů. V případě FHP modelu odvozuje vlastnosti rovnovážného stavu popsaného Fermi-Diracovou distribucí, a použitím Chapman-Enskogova rozvoje odvozuje makroskopické rovnice celulárního automatu a ukazuje, že tyto rovnice vykazují v prvním řádu odchylky od Navier-Stokesových rovnic, místo diskuse rozvoje do vyššího řádu se pouze odkazuje na literaturu.

Větší pozornost potom autor věnuje LG celulárním automatům s párovými interakcemi. Po detailním popisu propagace a kolizních pravidel opět podává statistický popis rovnovážného stavu a odvozuje Eulerovy a Navier-Stokesovy rovnice. Bohužel, argumentace není vždy zcela srozumitelná, v některých rovních jsou typografické chyby (nedokončené rovnice, chybějící závorky).

V další kapitole se autor věnuje standardní BBGKY hierarchii a Boltzmannově rovnici ve formalismu, který je vhodný pro následující kapitolu. V té sumarizuje použité numerické schéma.

Celkovým problém teoretické části je, že nejde dostatečně do hloubky, což vzhledem k velkému počtu témat ani není možné. Pak však některé části vyznívají poněkud samoúčelně, jelikož argumenty nejsou dovedeny do konce a vzbuzují pochybnosti, zda autor problematice rozumí do té míry, jakou prezentuje. Přesto považuji tuto část práce za poctivý pokus o zpracování problematiky s dostatečnými odkazy na literaturu.

V rozsáhlé implementační části autor implementuje popsané algoritmy a aplikuje je na řadu situací. Tuto část považuji za nejsilnější aspekt diplomové práce, protože je zřejmé, že autor zvládl implementaci algoritmů, paralelizaci výpočtů a dobrou znalost jazyka C.

Soustřeďuje se na dvě verze automatů s párovými interakcemi ve třech dimenzích. Kromě standardního deterministického modelu, autor navrhuje vlastní indeterministickou modifikaci a diskutuje jeho fyzikální přednosti. Jako nevýhodu uvádí zvýšenou výpočetní náročnost. Prezentované simulace „explodující krychle“ naznačují, že nedeterministický prvek algoritmu opravdu zvyšuje realističnost modelu, i když kvantitativní analýza chybí. Obzvláště zajímavá je simulace Taylor-Greenova víru, což je přesné řešení Navier-Stokesovy rovnice. Zde fyzikální plauzibilnost indeterministického modelu dokládá i kvantitativně, když ukazuje, že na rozdíl od deterministické verze, normalizovaná střední kinetická energie v čase monotonně klesá.

V další kapitole autor zkoumá problém obtékání překážek v FCHC modelu, prezentuje implementaci algoritmu a získané simulace, které svědčí o úspěšném zvládnutí algoritmu.

Teprve v závěrečné kapitole se autor dostává k původnímu cíli diplomové práce, kterým bylo studium plně rozvinuté turbulence. Z mého pohledu je tato část nezajímavější, bohužel však i nejméně dotažená a s nejasným závěrem.

Závěr

Po autorově předchozí neúspěšné obhajobě musím říct, že práce doznala zásadních vylepšení a je mnohem konzistentnější. Problémem práce zůstávájí poměrně četné překlepy, jazykové chyby, nedokončené věty, ale ty lze i k vzhledem k rozsahu práce tolerovat. Jak jsem napsal již v předchozím posudku, spolupráce se studentem byla značně sporadická a obtížná a můj vliv na její vývoj byl minimální. Bohužel, ani tentokrát jsem neměl možnost práci před odevzdáním prohlédnout.

Na druhé straně oceňuji, že i když se práce neubírala směrem, který jsem si představoval, autor zvládl řadu netriviálních kroků, zejména implementaci algoritmů, jejich úpravu pro výpočet na clustru, studium numerických metod, grafickou reprezentaci výsledků. Zdůrazňuji, že všechny kódy napsal student samostatně a nepoužil žádné existující knihovny pro celulární automaty. Přes výhrady, které mám k teoretické části, výsledky dosažené v implementační části považuji za velmi dobré.

Student zvládl základy teorie a implementace celulárních automatů, samostatně provedl řadu simulací, navrhl modifikovaný model s párovými interakcemi a na několika příkladech prokázal jeho přednosti oproti standardnímu modelu. Proto práci **doporučuji** uznat jako diplomovou práci.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- Vizualizace korelačního tenzoru (strany 130, 131) poukazuje na silnou anizotropii ve studovaném modelu, což bych nečekal. Má autor intuici, čím je to způsobeno? Je možnost, že je chyba v kódu, nebo lze tuto anizotropii vysvětlit jako důsledek použitého modelu? Souvisí to s anizotropií danou rovnicí (5.46)? Například z obrázků (15.1) – (15.7) není taková silná anizotropie zřejmá. Nenastává problém pouze při výpočtu korelačního tenzoru?
- Lze nějak srovnat časovou náročnost algoritmů založených na celulárních automatech s tradičními metodami numerického řešení Navier-Stokesových rovnic?

Práci
☒ doporučuji
☐ nedoporučuji
uznat jako diplomovou/~~bakalářskou~~.

Navrhuji hodnocení stupněm:
☐ výborně ☒ velmi dobře ☐ dobře ☐ neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

10. června 2017 v Brémách