ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
FAKULTA JADERNÁ A FYZIKÁLNĚ INŽENÝRSKÁ
Katedra matematiky

doc. Ing. Radek Fučík, Ph.D.
Trojanova 13, 12000, Praha 2

31. října 2025

Oponentský posudek disertační práce

Kandidát: Ing. et. Ing. BSc. František Prinz

Disertace: Development of the Lattice Boltzmann method for fiber transport and deposition

Shrnutí a aktuálnost tématu disertační práce

Předložená disertační práce (DP) se zabývá matematickým modelováním transportu a usazování částic (aerosolů) v lidském dýchacím traktu, což je aktuální a z mnoha hledisek zajímavé téma. Vedle běžných kulových částic jsou zkoumány také vláknité částice, které díky nepravidelnému tvaru pronikají hlouběji do dýchacího systému, ale zároveň představují výpočetní komplikaci, protože jejich odpor závisí na orientaci vůči proudu vzduchu. Pro popis transportu částic je použita metoda ELER (Euler-Lagrange Euler-Rotation), která je sice výpočetně náročnější než běžné modely založené na efektivním průměru částice, ale poskytuje přesnější výsledky. Pro simulaci proudění je primárně použita mřížková Boltzmannova metoda (lattice Boltzmann method, LBM) a pro účely porovnání též metoda konečných objemů (finite volume method, FVM).

Není pochyb, že studované téma je vysoce aktuální, což je doloženo 3 publikacemi (články I, II, & III) z roku 2024 a 2025 s podstatným autorským podílem předkladatele. Lze očekávat, že výsledky práce mohou nalézt přímé uplatnění ve zdravotnictví či v průmyslových aplikacích.

Splnění stanovených cílů

Vědecké cíle práce jsou přehledně formulovány pomocí tří hypotéz v sekci 6.1 a jejich platnost je poté podrobně zpracována v přiložených článcích, v kapitolách 7 až 10 a v závěru práce. Konkrétní cíle práce, uvedené v úvodu kapitoly 6, považuji za splněné.

Mám však formální výhradu k samotnému názvu práce a cílům popsaných jinde v práci (v abstraktu a v úvodu). Jedním z těchto cílů práce byla implementace metody ELER v propojení s LBM v rámci softwarové knihovny OpenLB, která je vyvíjena na Karlsruhe Institute of Technology. Jedná se však pouze o jednosměrné propojení metody LBM a ELER, kdy se z LBM použije unášivá rychlost, ale simulované částice neovlivňují proudění. Ve skutečnosti se tedy jednalo o implementaci ELER v rámci knihovny OpenLB, nikoliv však implementace „ELER do LBM“, jak je opakovaně uvedeno v práci i přiložených tezích. V tomto smyslu je název práce zavádějící, protože z textu disertace i dodaného vyjádření o autorském přínosu vyplývá, že autor se nijak nevěnoval vývoji metody LBM, ani nepoužil metodu LBM pro řešení modelu transportu a depozice částic.

Postup řešení problému a konkrétní přínosy doktoranda

Nejprve bych chtěl poděkovat za dodatečné zajištění a dodání potvrzení o autorském přínosu předkladatele, které dokládá autorův přínos a procentuální podíl na přiložených publikacích (viz strana 44 disertace):

- článek I: 31% (12 autorů, FP 1. autor),
- článek II: 50% (8 autorů, FP 1. autor),
- článek III: 30% (6 autorů, FP na 3. místě)

a obsahuje též shrnutí autorova přínosu ve vývoji software OpenLB.

Jak jsem již zmínil v předchozí sekci, práce se navzdory svému názvu ve skutečnosti nezabývá vývojem LBM a je to zřejmé i ze samotného textu práce. V práci totiž chybí širší rešerše (state-of-the-art) LBM, místo toho jsou jen zevrubně popsány základní principy LBM, aniž by se diskutovaly pokročilejší varianty LBM využívající numericky výhodnější kolizní operátory (MRT, CLBM, KBC, kumulantní, ...), numericky zpřesňující implementace (well-conditionning) nebo problematiku počátečních a okrajových podmínek. Například otázku implementace interpolovaných Bouzidiho bounce-back okrajových podmínek ve 3D považuji za netriviální, nicméně nikde se o této problematice v práci nemluví a Bouzidiho články nejsou v práci citovány. Čtenář se o použití těchto interpolovaných okrajových podmínek dočte až z přiložených článků. Že se autor vývojem LBM nezabýval, se nakonec potvrdilo i z později dodaného potvrzení o autorském přínosu kandidáta.

Za stěžejní téma (a název) práce považuji „matematické modelování dynamiky transportu a depozice vláknových částic“. Takové téma je v práci dobře zpracováno, je uveden přehled aktuálního stavu poznání (state-of-the-art v kapitole 5), je formulován, diskutován a implementován vhodný matematický model, který je jednosměrně propojený s řešičem pro proudění tekutin (LBM nebo FVM). V práci je pak tento model analyzován a validován vůči experimentu. V tomto smyslu považuji postupy řešení cílů uvedených v kapitole 6 za správné a rozumné i s ohledem na meze současných výpočetních možností. V práci však postrádám detaily ohledně implementace ELER metody v rámci OpenLB, zejména otázku výpočetní efektivity a diskuze možnosti implementace dané metody na GPU.

Z textu práce a článku I mi není jasná metodologie měření efektivity implementací ELER-LBM a ELER-FVM. Není zřejmé, jak byla stanovena přesnost (accuracy) těchto metod. Navíc není ani uvedena specifikace použitého hardware, na kterém byly tyto dva přístupy testovány, ani zda se jednalo o GPU či CPU v případě výpočtu na 3800 vláknech (viz strana 48 a článek I, sekce 3.3). Očekával bych, že v komentáři k článku I v kapitole 9 se o této problematice dozvíme více než v článku I (kde je pouze konstatováno, že porovnání je "challenging"), protože se jedná o první ze tří hlavních vědeckých hypotéz zkoumaných v práci – hypothesis 1: "LBM computation applied within the respiratory tract leads to faster computational performance while maintaining the comparable accuracy to FVM methods.". Minimálně by bylo vhodné ukázat, jak se na daném hardware liší výpočetní efektivita obou přístupů v závislosti na použité diskretizaci a na počtu částic. Bez takové studie a jen na základě jedné realizace (viz sekce 3.3 v článku I) přeci nelze o platnosti hypotézy 1 rozhodnout. Mimochodem, také by byla zajímavá diskuze o dostatečnosti použití dvojité či jednoduché přesnosti pro výpočty LBM (zejména na GPU).

Význam výsledků pro praxi či rozvoj vědního oboru

Výsledky disertační práce představují významný přínos k rozvoji numerického modelování transportu a depozice vláknových částic v dýchacím traktu prostřednictvím ELER přístupu,

implementovaného v software OpenLB. Provedené studie prokázaly, že metoda LBM dosahuje vyšší přesnosti a současně až pětinásobně rychlejších výpočtů než tradiční metoda FVM, čímž rozšiřuje možnosti simulací proudění a interakcí částic v komplexních geometriích dýchacích cest. Přestože byly identifikovány určité odchylky v popisu rotačního pohybu vláken, metoda ELER již nyní poskytuje realističtější výsledky než běžně používané zjednodušené modely a představuje perspektivní nástroj pro návrh a optimalizaci systémů cíleného plicního podávání léčiv. Z hlediska vědeckého přináší práce nový přístup k využití ELER ve spojení s LBM v biomechanice dýchacích cest a poskytuje otevřený rámec pro další výzkum interakcí částic s prouděním, turbulentními strukturami a stěnami v realistických podmínkách.

Formální a jazyková úroveň práce

Po formální a jazykové stránce je práce zpracována dobře a mám jen několik drobných připomínek:

1. Český překlad anglického abstraktu (v práci i v tezích) se mi nezdá být úplně přesným. Jednak je v české verzi chyba ve slově "Boltzmannov", ale pak je na konci uvedeno, že metoda ELER ve spojení s LBM je "přesným"nástrojem pro predikci (...). V anglické verzi se toto tvrzení nikde neobjevuje (a je zjevné, že není pravdivé). Nechal jsem si přeložit anglickou verzi abstraktu pomocí AI nástroje (deepl.com) a dostal jsem velmi podobné formulace. Je tedy potřeba zvýšené opatrnosti při používání těchto AI nástrojů, jejichž použití autor správně deklaruje na straně 4.

2. Uvítal bych, kdyby fyzikální jednotky byly uvedeny hned při první definici fyzikálních veličin. Takto by se například dalo vyhnout situaci, kdy je v přehledu značení uveden kolizní operátor bez rozměru (viz strana 74), přestože z rovnic uvedených na straně 22 je zřejmé, že rozměr kolizního operátoru se musí shodovat s rozměrem časové derivace funkce f (viz strana 72).

3. Tvrzení v popisku obrázku 4.2, že pro 3D je typickým LBM modelem D3Q19, je sporné.

4. V tezích na straně 8 není definován symbol $f_i^{(eq)}$.

Vyjádření k předloženým tezím

Předložené teze jsou odpovídajícím shrnutím předložené dizertační práce. Před publikací tezí doporučuji opravit českou verzi abstraktu (viz můj komentář č. 1 výše).

Dotazy k obhajobě

U obhajoby prosím o zodpovězení níže uvedených dotazů, které reflektují mé nejasnosti popsané výše:

1. Jakým způsobem je ELER implementováno v rámci OpenLB (viz obrázek 8.1)? Je propojení s LBM a výpočet iterací ELER modelu realizováno v rámci GPU nebo je nutné jednosměrné propojení s LBM realizovat na CPU?

2. Prosím o doplnění informací k použitému hardware při srovnávání výpočetní efektivity LBM a FVM a k použité přesnosti (jednoduché či dvojité) pro LBM. Lze odhadnout či vyzkoušet, jaký vliv má na efektivitu počet částic a použitý model pro odpor?

Verdikt

Předložená disertační práce, i přes výše uvedené nedostatky, splňuje požadavky kladené na doktorskou práci. Obsahuje původní řešení vědeckých úloh a představuje významný vědecký přínos, který potvrzují tři články kategorie Q1 s významným autorským podílem doktoranda.

Doktorand prokázal dobré teoretické znalosti v daném oboru i schopnost samostatné vědecké práce. Současně je vědecky aktivní i v jiných oborech. V době zpracování tohoto posudku má v databázi Web of Science evidováno 6 publikací, 9 citací (bez autocitací) a h-index 2. Je rovněž autorem několika konferenčních příspěvků.

Doporučuji disertační práci k obhajobě a kandidátovi udělit akademický titul Ph.D.

V Táboře dne 31. října 2025

doc. Ing. Radek Fučík, Ph.D.