

Technická univerzita v Liberci

Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií

děkanát

Studentská 2,

461 17 Liberec

## Oponentský posudek habilitační práce

*Mgr. Jana Březiny, Ph.D.*

**Transport processes in fractured porous media**

předložené v oboru **Aplikované vědy v inženýrství**

### 1. Úvod

Předložená habilitační práce se týká vysoce aktuálního tématu – numerických metod pro modelování proudění v porézním prostředí s puklinami. Uvedené téma je aktuální z hlediska mnoha aplikací v geoinženýrství a v poslední době i v medicínských aplikacích. Práce je motivována geoinženýrskými aplikacemi, v nichž je angažováno pracoviště habilitanta, tedy především analýzou proudění v krystalinických horninách porušených systémy puklin (poruch). Taková analýza je potřebná pro posouzení různých koncepcí ukládání vyhořelého jaderného paliva, pro analýzu potenciálních lokalit podzemního úložiště a řešení dalších úloh možného šíření polutantů v horninovém prostředí.

Práce je inspirována aplikacemi, týká se však numerických metod pro úlohy popsané parciálními diferenciálními rovnicemi. Soustřeďuje se na témata popisu úloh pomocí smíšených sítí, čímž autor rozumí sítě popisující matici (kontinuum, základní horninové prostředí) a poruchy (pukliny a průsečky puklin). Pro takové sítě odvozuje matematické modely i jejich numerickou realizaci. Základní přístup je popsán v kapitole 2, numerické metody jsou pak rozvíjeny v kapitolách 3 a 4, a to pro proudění v plně saturovaném prostředí. V kapitole 3 je uvažován případ konformních smíšených sítí, kdy síť v oblasti vyšší dimenze generuje síť v oblastech nižší dimenze. Následně, v kapitole 4 je uvažován případ, kdy podmínka konformnosti není nutností, čímž vzniká možnost užití jednodušších a názornějších sítí. V kapitole 5 je potom uvažováno proudění v prostředí, které nemusí být plně saturováno. V tomto případě se uvažuje proudění popsané Richardsovim modelem. Obecně lze ještě říci, že práce je z velké části zaměřena na využití smíšené formulace a smíšené metody konečných prvků, která je alternativou k metodě konečných objemů a umožňuje získávat lokálně konzervativní numerické řešení s důrazem na dobrou aproximaci toků.

## 2. Charakteristika jednotlivých kapitol habilitační práce

Kapitola 1 je úvodní, zde autor popisuje aplikační motivace, které vedly k vlastní vědecké práci, jejíž popis začíná kapitolou 2 „Multidimenzionální model proudění v matici a puklinách“. Tato kapitola uvádí čtenáře do problematiky multi-dimenzionálního modelu tím, že studuje proudění v oblasti s jednou poruchou. Porucha je nejprve modelována jako podoblast malé tloušťky, následně jako úloha v oblasti nižší dimenze (projekce poruchy), která je propojená s prouděním v matici podmínkou Robinova typu.

V úvodní části je základní multidimenzionální přístup popsán pro úlohu proudění s advekcí. V příloženém článku (Březina, Stebel, 2016) je pak uvažováno Darcyho proudění a formulace úlohy v tlaku, nikoliv smíšená formulace. Tímto, a souvisejícími odhady chyby modelu v závislosti na tloušťce poruchy, tento článek navazuje, ale hlavně doplňuje výsledky uvedené v článku (Martin, Jaffré, Roberts, 2005), který je brán v dané oblasti jako klíčový.

Kapitola 3 „Numerické metody pro realizaci Darcyho proudění na konformní multidimenzionální síti se smíšenou diskretizací“ rozvíjí metodu kompatibilní multidimenzionální sítě zavedenou v předchozí kapitole na případ hierarchie puklin (poruch) a použití smíšené a hybridní-smíšené metody konečných prvků. V příloženém článku (Březina, Burda, 2018) je vytvořen modelový příklad a popsáno jeho analytické řešení ve formě řad. Toto řešení pak slouží k testování algoritmů. Cenný je článek (Šístek, Březina, Sousedík, 2015), ve kterém je popsáno použití hybridní-smíšené metody konečných prvků k přechodu od sedlobodových soustav k Schurově doplňku se symetrickou a pozitivně definitní maticí a použití metody rozkladu oblasti (BDDC) k paralelizaci výpočtů. Vzhledem k tomu, že 3D modelování proudění ve složitějších situacích je typicky velmi výpočetně náročné, je paralelizace cestou k snižování výpočetních časů. V článku je ukázána efektivní paralelizace s využitím stovek procesorů.

Kapitola 4 „Numerické metody pro realizaci multidimenzionálního modelu Darcyho proudění s nekonformní multidimenzionální sítí“ uvažuje nekompatibilitu sítí pro matici a poruchy. Tato nekompatibilita zjednoduší použité sítě, ale vyžaduje speciální ošetření s použitím operátorů stop a rekonstrukce. Hlavní pozornost je věnována nekompatibilitě mezi 3D a 2D sítěmi, resp. 2D a 1D sítěmi. Je navrženo a testováno několik variant nekonformního propojení s použitím nebo bez použití propojovacího (mortar) prostoru. Je také ukázána možnost nežádoucích (locking) efektů. Pro realizaci numerických metod je potřeba určit průsečíky nekonformních sítí. Rychlý algoritmus k definici průsečíků pro simplicialní prvky je popsán v příloženém článku (Březina, Exner, 2017) společně s ukázkami aplikací algoritmu v modelové a reálné situaci. Tento článek patří k původním výsledkům práce.

V kapitole 5 „Numerické metody pro realizaci modelu nesaturovaného proudění se smíšenou formulací“ se autor věnuje proudění v nesaturovaném prostředí a předkládá dva výsledky pro model popsáný Richardsovou rovnicí. Především ukazuje, že při diskretizaci časově závislé úlohy proudění zpětnou Eulerovou metodou vznikají nefyzikální oscilace řešení. Tento

jev vysvětluje ztrátou monotonicity matice časového kroku v případě velkého poměru  $h/\Delta t$ , kde  $h$  a  $\Delta t$  jsou parametry prostorové a časové diskretizace a udává podmínku postačující pro zachování monotonicity. Jednou z pomocných opatření je pak vhodná diagonalizace (lumping) matice hmotnosti. Toto opatření funguje i pro standardní MKP diskretizaci. Bylo by zajímavé zabývat se otázkou stability dále, protože monotónnost nemusí být nutnou podmínkou stability.

Další výsledek se týká konstrukce modelu s dvojitým kontinuem charakterizujícím proudění v matici a v preferenčních cestách (poruchách). V tomto případě jde o úlohu s dvojitým kontinuem a o jiný přístup zahrnutí proudění v poruchách, než je explicitní uvažování (nejvýznamnějších) poruch. Pro tento model s prouděním popsáním Richardsovou rovnicí v obou kontinuech a podmínkou přechodu (typu Gerke, van Genuchten) mezi kontinui, jsou popsány a srovnány přístupy sekvenčního a plného propojení. Upozorním jen na vícenásobné použití Pickard místo správného Picard.

### 3. Přínos habilitační práce

Habilitační práce má jasnou a přehlednou strukturu, je psána pečlivě, dobrou angličtinou. Každá z kapitol přináší jednak úvodní text, jednak obsahuje vybrané publikace habilitanta, které se k tématu kapitoly vztahují. Jednotlivé kapitoly se věnují různým, ale souvisejícím tématům, každá kapitola přináší nové výsledky.

V práci je zmíněno využití výsledků práce při tvorbě software Flow123, viz odkaz na webovou stránku <http://flow123d.github.io> Podle mínění oponenta jde o důležitou skutečnost, která ukazuje přímou aplikaci výsledků při tvorbě nástroje využitého pro výpočty podpořené projekty i zakázkami. Tvorba software také vytvořila prostor pro pedagogickou činnost zapojením studentů magisterského i doktorského studia i pro pokračování dalšího výzkumu v problematice numerických metod pro úlohy proudění v geologickém prostředí.

### 4. Náměty k diskusi

Habilitační práce popisuje jednotlivé vědecké výsledky, je však škoda, že není více popsáno provázání s tvorbou software pro praktické aplikace i možné budoucí záměry výzkumu a rozvoje tohoto software.

### 5. Závěrečné zhodnocení

Habilitační práce se týká aktuální problematiky proudění v porézním prostředí s poruchami. Autor zde dokumentuje svou schopnost cíleně zaměřené vědecké práce, ale především přináší řadu nových výsledků, které se týkají studia jevů vznikajících při numerické realizaci

modelů proudění. Tyto výsledky autor zároveň využívá pro vývoj software Flow123, jehož vývoj na Technické univerzitě v Liberci koordinuje.

Práci plně doporučuji jako podklad pro udělení akademické hodnosti docent.

V Ostravě dne 12.9. 2018

Prof. Ing. Naďa Rapantová, CSc.

Fakulta stavební, VŠB-TU Ostrava