Oponentský posudek na disertační práci

Ing. Pavla Exnera

nazvanou:

Rozšířené metody konečných prvků pro aproximaci singularit

Předložená disertační práce je věnována numerickému řešení úloh proudění v porézním prostředí, v nichž se vyskytují singularity související s transmisními podmínkami mezi diferenciálními rovnicemi popisujícími proudění v oblastech různé dimenze. Úlohy tohoto typu mají velký význam pro efektivní modelování proudění podzemní vody v horninách s respektováním vlivu vrtů a studní nebo prasklin, které mohou v takovém porézním materiálu tvořit síť mezopórů. Pro řešení takových úloh jsou v disertaci rozpracovány metody a algoritmy, které byly implementovány a testovány ve výpočtovém systému Flow123d. Hlavní pozornost je věnována tzv. metodě rozšířených konečných prvků v kontextu numerické integrace pro obohacení aproximace tlaku a především rychlostního pole modelu Darcyho proudění s respektováním singularit v okolí nadploch nebo bodových množin. Další cíle práce se týkají datových struktur, které souvisejí s nekompatibilními sítěmi konečných prvků vznikajícími při diskretizaci rovnic na oblastech různé dimenze, jež se vzájemně protínají.

Obsah práce Práce sestává z pěti hlavních částí a čítá více než 140 stran včetně seznamu 76 položek použité literatury. Kapitola 2. představuje problém proudění na oblastech různých dimenzí a jsou zde zavedeny transmisní podmínky propojující tlaková a rychlostní pole. Ve 3. kapitole jsou stručně představeny varianty rozšířené metody konečných prvků (XFEM) a způsob obohacení aproximačních bází s ohledem na různé formy nespojitosti veličin na rozhraních mezi oblastmi různých dimenzí, které se vztahují. V kontextu řešené problematiky se takové nespojitosti týkají tlakového pole. Proto je celá kapitola 4 vyhrazena XFEM aproximaci tlaku slabé formulace úlohy, pro níž je dokázána existence a jednoznačnost řešení. Jsou zavedeny aproximace v okolí singularit čtyřmi různými způsoby, autor se věnuje konvergenci řešení s ohledem na numerickou integraci a volbu některých parametrů, například vlivu poloměru nosiče obohacující funkce nebo polohy singularity vůči uzlům sítě. Na numerických testech porovnává efektivitu zmíněných aproximací. Jako nejlepší vychází metoda SGFEM, která díky ortogonalizaci také nejméně zhoršuje číslo podmíněnosti matice výsledné soustavy algebraických rovnic, což je zřejmou výhodou oproti jiným XFEM metodám. V kapitole 5. se autor zabývá smíšenými a hybridními formulacemi úloh se singularitami. Pro diskretizované úlohy je využito nekonformní aproximace, konkrétně Raviart-Thomasových prvků RT0. Neznámými jsou kromě rychlostních a tlakových polí v uzlech diskretizace i multiplikátory, které vyjadřují stopy tlakových polí na hranách sousedních elementů, a na rozhraní mezi tzv. vrtem (studnou) a vodonosnou vrstvou. Jsou navržena rozšířeni aproximací rychlostních polí, pro něž je ověřeno splnění inf-sup podmínky. Kromě teoretických otázek hybridní smíšené formulace jako úlohy sedlového bodu kapitola obsahuje rozsáhlou část numerických testů pro různé kombinace dimenzí podčástí, zdrojových funkcí a počtu podoblastí, či vzájemně se ovlivňujících singularit. Poslední, 6. kapitola je zaměřena na problematiku výpočtu na nesdružených, nekompatibilních sítích. Jsou navrženy algoritmy výpočtu průniku simplexových elementů různých dimenzí pomocí Plückerových souřadnic. Dobré zvládnutí takových geometrických operací podmiňuje efektivitu simulací a omezuje nároky na přípravu dat uživatelem.

Hodnocení práce a její přínos Problematika proudění podzemních vod je aktuální a v souvislosti ekologickými a energetickými problémy bude matematického modelování rozličných souvisejících procesů nabývat na významu. Práce Ing. Exnera představuje velmi hodnotný, ucelený příspěvek k metodice počítačového modelování určité speciální třídy úloh, jednotlivé výsledky lze ovšem ve značné míře přenést i na jiné podobné problémy, jako je například problematika proudění v živých tkáních. Samotný výpočtový model proudění tvoří bázi pro modelování dalších procesů, které jsou advekcí tekutiny v roli transportního média ovlivněny. Kombinace výpočtu na oblastech s různou dimenzí a využití přístupu rozšířených konečných prvků jsou nesporným přínosem této práce. Podařilo se navrhnou funkční rozšiřující bázi pro tlakové a rychlostní pole, autor se zabýval aspekty numerické integrace a konvergence numerických řešení ve vztahu k volbě některých parametrů aproximací. Stranou nezůstaly ani převážně technické, avšak velmi důležité záležitosti implementace výpočetních schemat, která kladou nemalé nároky na programování. Práce má logické členění, každá kapitola je na svém konci opatřena souhrnem dosažených výsledků a upozorňuje na některé otevřené otázky, které jsou inspirací pro navazující výzkum a usnadňují tak další využití této disertační práce. Kromě odborných kvalit, jež autor v textu prokazuje, také po formální stránce, jazykové i grafické, je práce zcela nadprůměrná, drobné nedostatky se vyskytují zcela omezeně. V některých pasážích by text zasloužil doplnit obšírnějším komentářem, popř. grafickým schematem a důsledněji využívat odkazy na zavedené pojmy a označení.

Připomínky a dotazy.

1. Autor by ve své obhajobě měl jasněji vymezit svůj osobní podíl na původních teoretických výsledcích, které jsou předmětem disertační práce.

2. Práci by prospělo více odkazů pro připomenutí dříve zavedených označení, či definic, např. ve vztahu (3.10) na (3.6)-(3.8), na definici Ω_C při použití na konci textu, na str. 81,82.

3. Str. 24, tučné $\boldsymbol{\nu}_m(t)$, str. 28: nemá být $g_w = \langle g \rangle_w + \{g\}_w$? V (4.30) N_α, nebo $N_{d\alpha}$?

4. Vztah (3.2) je nejasný po stránce "partition of unity" a role $L(\boldsymbol{x})$. Je správný vztah $\phi_\alpha(x) = N_\alpha(x)s(x)\left(\sum_\beta N_\beta(x)\right)^p$ s exponentem $p = 1$, nebo $p = -1$? Proč v rozkladu jedničky nejsou zohledněny obě části aproximace, tedy část regulární a rozšiřující?

5. Na str. 44: tvrzení $V_{2h}^{reg} \not\subset V$ je s ohledem na aproximaci hranice? Argument tzv. nulových průměrů se týká V_0, nikoliv V. (?)

6. V úloze 4.3.1 na str. 51 není definována oblast Ω_2. Co se rozumí pojmem analytické řešení? Nejedná se spíš o řešení konstruované? (Pro dostatečně regulární funkce se dosazením do rovnic vypočtou funkce vystupující v roli vnějších zdrojů nebo tlaků na hranici.)

7. Str. 60, 62. Proč se jako měřítko chyby nepoužívá spíš chyba relativní?

8. Str. 63. V sekci 4.4.3 není dostatečně vysvětleno odvození neočíslovaného vztahu před rovnicí (4.64), který zřejmě vychází z pojmů kapitoly 4.2.1. (absence odkazů, komentáře k umístění elementu, schema, komentář k výpočtu projekce ...). Není definována úloha pro p_h (pro nezměněnou bilineární formu a, nebo jinou $a_h \approx a$?) V důsledku také není zřejmé, z čeho vychází vztah (4.67).

9. Na str. 78: Ačkoliv zřejmě $\|\boldsymbol{v}\|_W \geq \|\boldsymbol{v}\|_V$ pro $\boldsymbol{v} \in W$, není zcela jasné, jak nerovnost (5.41) přímo vyplývá z (5.25), jestliže $W \subset V$. Proto také není zřejmá poslední nerovnost v (5.42). Není také konsistentní používání označení $\boldsymbol{v}_h$ a $\boldsymbol{v}$ v (5.42).

10. Str. 79: jaké jsou ve skutečnosti implementovány funkce z Λ_h^{enr} dle definice (5.46)? Není také jasné, jak plyne (5.47a) přímo z (5.1a)-(5.1c). V (5.47) nejsou explicitně deklarovány množiny pro $(\boldsymbol{u}, \lambda, \lambda_w)$, pak až v definici Problému 5.2.4.

11. Str. 81: v (5.52) chybí odkaz na definici $\boldsymbol{r}_w$ a r_w (je $r_w = |\boldsymbol{r}_w|$?). Patrně chyba v $(5.52)_1$, jestliže platí (5.54).

12. Str. 90: Patrn2 chyba v (5.94). Chybí odkaz na zavedení oblasti Ω_C^w. V sekci 5.4.1 by bylo vhodné uvést ilustrační obrázek, či schema.

13. Str. 92: V první rovnosti v (5.101) se zřejmě předpokládá lineární parametrizace na celé oblasti Ω_1^w včetně ekvidistantní diskretizace intervalu na elementy T_1^k, obr. 5.4. (?)

14. Kapitola 5.6.1: Jak je definováno referenční řešení $\boldsymbol{u}$ pro výpočet chyb v Tab. 5.4 a všech dalších, které se týkají konvergence SGFEM?

15. Str. 116-117: v kroku 8 není zřejmá okolnost $w_i < \epsilon$, $\forall i$, jestliže w_i jsou barycentrické souřadnice obecně splňující $\sum_i w_i = 1 > \epsilon$.

16. V poslední době se objevují snahy umožnit výpočty na překrývajících se sítích, takže se částečně redukuje pracnost přípravy dat, t.j. sítě pro řešení úloh. Souvisí nějak takové nové přístupy s algoritmy průniku elementů, které jsou popsány v kapitole 6 této práce? (viz např. *L. Zhang, K.J. Bathe, Overlapping finite elements for a new paradigm of solution, Computers & Structures, Volume 187, 2017, Pages 64-76.*)

Celkové hodnocení a doporučení. Disertační práce Ing. Pavla Exnera je velmi kvalitní nejen po stránce obsahové, přináší zcela nové výsledky, které doktorand spolu se svým školitelem již publikoval v časopisech s impakt faktorem. Text psaný dobrou Angličtinou je stylisticky zdařilý a také grafické zpracování práce odpovídá požadavkům kladeným na disertaci. Její celkové zpracování ukazuje, že se doktorand tématu věnoval s vysokým nasazením. Dobře využil odborné zázemí školícího pracoviště i příležitosti stáže na renomovaném zahraničním pracovišti specializovaném na rozšířené metody konečných prvků. Autor prokázal nejen matematickou erudici, jíž téma nepochybně vyžaduje, ale také patřičné programátorské dovednosti při implementaci nového numerického modelu a příslušných algoritmů v otevřeném výpočtovém systému Flow123d. Tento počin je takřka hmatatelným výsledkem práce, který přispěje v dalšímu výzkumu i mimo domácí pracoviště a umožní také řešení praktických problémů s celospolečenským dopadem. Cíle vytčené v disertační práci byly splněny a její vědecký přínos a přínos pro rozvoj vědního oboru jsou zcela nepochybné. Autorova publikační činnost jasně prokazuje, že se zapojil do odborné komunity a nabyté vědomosti dokáže dále rozvíjet a aktivně samostatně používat k získání nových výsledků. Proto **vřele doporučuji, aby Ing. Pavlu Exnerovi byl na základě obhajoby udělen titul doktor.**

V Plzni 17.5.2019

Prof. Dr. Ing. Eduard Rohan, DSc.
Katedra mechaniky
Západočeská univerzita v Plzni

Extended finite element methods for approximation of singularities

Pavel Exner

Review of the thesis - Alessio Fumagalli

The main contribution of this thesis can be divided in two parts: 1) the presentation and well posedness analysis of mathematical models that represent the interaction between wells (represented as one dimensional domains) and aquifers (represented as higher dimensional domains, 2d or 3d). 2) The numerical discretization of the proposed models with advanced techniques, in the general class of enriched methods.

The mixed-dimensional nature of the proposed approach avoids to represent with bidimensional (or tridimensional) elements the wells, strategy too computational demanding even for small problems. In the case of a bidimensional aquifer the intersection between a well is a point (2d-0d coupling), while in the three dimensional case the intersection is the full well (3d-1d coupling). However, the actual mathematical formulation of the problem in this setting is itself highly challenges since a two-codimensional trace operator should be required. This is a very tricky problem and requires weighted Sobolev spaces which complicates the analysis.

The smart solution adopted in the thesis is to consider an extended well lateral surface Γ_w^m which represent the interaction between the aquifer and the well. This surface is thus only one-codimensional and the trace operators are more natural to define. The coupling condition between the aquifer and the well is based on a Robin-type conditions, where quantities of the aquifer are averaged on each well lateral surface Γ_w^m. This conceptual model has been used also in other contexts, like fractured porous media, giving reliable and accurate results.

The mathematical model is written in two different forms: primal formulation (where only the pressure is involved) and mixed or dual formulation (where both the Darcy velocity and pressure are the unknowns). I found the presentation very clear and detailed, in my opinion in the mixed formulation the space V of (5.3) should be modified as follow

$$V^{new} = \{\boldsymbol{v} \in H(\mathrm{div}, \Omega) : \mathrm{tr}\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n} \in L^2(\Gamma_w)\}$$

with tr the trace operator. The reason is that the trace of $H(\mathrm{div}, \Omega)$ on Γ_w is only $H^{-1/2}(\Gamma_w)$ and thus the definition of the average operator $\langle\cdot\rangle_w$ is not valid. Moreover, for example (5.7) and the following requires that the test function $\boldsymbol{v}$ has a higher regularity at Γ_w to make these integral valid. It has to belong to

$$V^* = \{\boldsymbol{v} \in H(\mathrm{div}, \Omega) : \mathrm{tr}\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n} \in H_{00}^{1/2}(\Gamma_w)\}$$

which is even smaller than the proposed V^{new}. The spaces becomes also different for the trial and test functions, a situation that generally we would avoid. This definition of V^{new} requires also to consider a new norm to make it complete, namely

$$\|\boldsymbol{v}\|^2_{V^{new}} = \|\boldsymbol{v}\|^2_{H(\mathrm{div}, \Omega)} + \|\mathrm{tr}\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n}\|^2_{L^2(\Gamma_w)}$$

The discussion on well posedness should be modified accordingly, but I don't see major problems. You can see further discussions in [3, 1, 2]. Note that when the hybridization is applied, if the problem is already state in its weak formulation, V^{new} is not needed since $\Lambda(\mathcal{F})$ in (5.44) already consider the "trace" in L^2.

The second main contribution is related to the numerical discretization of these models. To increase the accuracy of the proposed approach, the author considers the class of the enriched methods where additional functions are added to represent the singular behaviour of the solution at the wells. Moreover, the approach allows the grids of the wells to be independent with respect to the underlying grid of the aquifer, thus substantially increasing the flexibility of the overall framework. Important applications, not touched by the thesis but suggested as possible future works, are multiple scenario analysis and parameter sensitivity. Finally, the approach is not tided up to a specific numerical scheme (e.g. linear Lagrangean finite elements) but it is general enough to be applicable to several schemes already available in the literature. I found this choice highly appropriate.

A general introduction of these enriched schemes is given with a detailed description on the choices and drawbacks of each method. Differences between the methods are related to the enrichment zone and the actual contribution added to the system. From the more classic extended finite element method to the more advanced stable generalized finite element method. In the first case the extended function is added to the finite element expansion, while in the latter only the part that is not already represented by the underline finite element approximation is considered as enrichment. An adaptive quadrature rule is presented to enhance the accuracy of the computed integrals involving the enriched elements. Related to this the author introduces an estimation with several test cases on how big the interaction region of the enriched function should be taken. Again here the discussion is of high quality, I will certainly give it to read to my collaborators.

The thesis concludes with an innovative algorithm to compute intersection between elements on different dimensions, by means of the Plüker coordinates. A rather technical and exhaustive presentation is given for all the relevant cases connected with the well-aquifer problem previously discussed. Figures and code snippets are very useful to understand all the procedure. In the benchmarks performed this method proved to be competitive with the ones already available, in particular when the "edge reuse" option is considered. I found this part extremely useful and detailed which will help future readers to implement and use the proposed approach.

Further developments are fairly straightforward. This thesis is certainly a report on a work in progress. The results already obtained are very encouraging. Further developments towards real problems are, for example, extensions to multiphase flow and coupling with one-codimensional models (fractures).

This dissertation makes very significant contributions in mathematical modeling as well as in numerical methods in an area with growing importance as increasing computing capabilities allow for more sophisticated modeling. It is excellent full spectrum innovative work which will have a continuation with the inclusion of more complicated models arising. Further the PhD preparation includes heavy implementation work and results in significant numerical experimentations proving the validity of the approach. The bibliography is very thorough. The technical quality of the dissertation is high. It is well written and easy to read, and shows Exner's mastery of his field of research.

Therefore, I find that this dissertation meets very high standards and should be defended for a PhD degree.

Torino, Italy, April 29, 2019