Posudek dizertační práce

Dizertační práce:	Předpodmínění lineárních soustav získaných diskretizací Navierových–Stokesových rovnic pomocí isogeometrické analýzy
Autorka:	Hana Horníková, FAV ZČU
Posuzovatel:	Martin Plešinger, FP TUL

Předkládaná dizertační práce se zabývá modelováním proudění nestlačitelné kapaliny. Specificky se autorka soustředí na fázi řešení soustav lineárních rovnic, které při modelování vznikají, resp. na volbu předpodmiňovače.

Pro uvedení do adekvátního kontextu musí práce čtenáře provést několika „slupkami" popisu modelování proudění. Práce tak jde výrazně do hloubky studovaného problému. V každé jednotlivé vrstvě je však výklad zároveň rozkročen dostatečně do šířky a čtenáře upozorňuje na řadu dalších možností, jiných cest jak pokračovat. To s sebou nese řadu výhod ale i obtíží, se kterými je potřeba se v textu vyrovnat.

Velkou výhodou hloubky tématu je přirozené strukturování textu, které čtenáře nenuceně vede k porozumění jádra řešeného problému. Práce tak sestává z několika kapitol, které více-či-méně odpovídají jednotlivým vrstvám: fyzikální popis řešeného problému v jazyce diferenciálních rovnic a obecná galerkinovská diskretizace úlohy (ve druhé kapitole), tzv. isogeometrická analýza spočívající v seznámení se spliny a jejich užitím pro diskretizaci úlohy, sestavení matic diskretizované úlohy (ve třetí kapitole), popis metod pro řešení vzniknuvších soustav lineárních rovnic (ve čtvrté kapitole), akcelerace těchto metod předpodmiňovacími technikami (v páté kapitole) a na závěr (v kapitole šesté) reálné numerické řešení skutečných (byť jen modelových) úloh. Práce tak vytváří perfektně funkční a dobře srozumitelný celek.

Drobnou nevýhodou je, že při snaze udržet rozumnou šíři popisu na všech úrovních může dojít k odvedení pozornosti čtenáře směrem od ústředního tématu (Je potřeba zavádět NURBSy, či detailně hovořit o řešení soustavy pomocí LU rozkladu? Atp.). Další nevýhodou čtenáře-oponenta pak také je, že poněkud dlouho čeká na vlastní autorský vědecký výsledek práce. Ani jedno nevnímám jako zásadní chybu nebo nedostatek, pouze na to upozorňuji.

Celkově na mě práce udělala velký dojem právě svou hloubkou a šírkou záběru zároveň. To je jistě hodnotou a přínosem samo o sobě. Autorka tím zároveň prokázala schopnost zorientovat se ve velkém množství poměrně různorodých konceptů, které jsou vzájemně provázány. Nejsem si jistý, zda samotný isogeometrický přístup k řešení Navierových–Stokesových rovnic je autorčinou inovací, nebo již byl publikovaný. Celký isogeometrický přístup se mi zdá být poměrně moderní. Necítím se však být v této oblasti odborníkem.

Nicméně jasný vědecký přínos je přítomen zejm. v poslední kapitole, ve vlastním porovnání jednotlivých předpodmiňovačů. Porovnání je provedeno na dvou v komunitě standardních benchmarkových úlohách (lid-driven cavity a backward-facing step) a jedné úloze se složitější a reálnější geometrií (vodní turbína); úlohy jsou přitom uvažovány ve dvou i třech dimenzích. Výpočet je testován na několika různě hrubých sítích a s různou hladkostí aproximace pomocí splinů. Výsledkem diskretizace je sedlobodová soustava, která je v práci řešena metodou GMRES. Testována je přitom celá řada předpomiňovačů vhodných pro danou matici a metodu. Speciální péče je přitom věnována studiu vlivu aproximace inverze matice hmotnosti.

Pečlivé porovnávání řady předpodmiňovačů v různých konfiguracích může působit jako poměrně nezáživná práce a prezentace takto získaných výsledků je obtížná. Už proto, že se na rozdíl od populárních a i laickému publiku snadno zprostředkovatelných úloh (typu problém čtyř barev) pohybujeme velmi hluboko v „králičí noře" úlohy proudění. Přínosnost této práce je nicméně evidentní a objektivně doložitelná i již realizovanou publikací těchto výsledků v (mezinárodním impaktovaném) časopise, viz [62][1].

Text obsahuje jen minimum přepleků a formálních nedostatků. Za největší z nich považuji opakované použití matice jménem M pro tři zcela odlišné ale stěžejní koncepty — značí se tak „snadno invertovatelná" část matice soustavy při štěpení (splitting) souvisejícím se stacionární iterační metodou ($A = M - N$, viz sekci 4.1.2), předpodmiňovač ($M \approx A$, resp. $M \approx A^{-1}$, viz kapitolu 5) a matice hmotnosti (zde s dolním indexem M_u, viz rovnici (2.56) a sekci 6.4). I když ve všech třech případech izolovaně tradiční volbě písmene rozumím, zde se všechny tři koncepty úzce potkávají, volil bych proto označení jiné.

Práce celkově, dle mého názoru, jednoznačně splňuje požadavky obvykle kladené na dizertační práci. Původní výsledky zde prezentované jsou nejen publikovatelné, ale dokonce již publikované (což je obvyklé), tedy prošly nezávislým recenzním řízením. V závěru tedy

předloženou práci **odporučuji k obhajobě**

a **doporučuji udělení titulu Ph.D.** paní **Haně Horníkové.**

K obhajobě samotné bych měl pak několik drobných dotazů, resp. komentářů:

1. V úvodu sekce 5.2 (str. 53 dole) se píše: „*(...) stationary iterative methods are often used as preconditioners for Krylov subspace methods (...) this does not mean that the application (...) is realized by an inner iterative process, which would lead to variable preconditioning mentioned in Section 5.1.3*". Můžete prosím rozvést proč by tomu tak bylo?

2. V sekci 5.3.2, podsekci *BFBt preconditioner* (str. 59 dole) se píše: „*(...) application of* $\widehat{S}_{PFBt}^{-1}$ *(...) requires solving two linear systems with the matrix* BB^T". V úplném závěru práce (str. 119) se pak píše, že: „*(...) all subsystems were solved with a direct solver*", z čehož jsem pochopil, že úplné imlementační detaily asi v práci nebyly řešeny. Nimcéně jsem zde chtěl podotknout, že (v závislosti na struktuře matice B, konkrétně její řídkosti; předpokládám, že má vždy lineárně nezávislé řádky) stačí jednou spočítat QR rozklad její transpozice $B^T = QR$. Tím dostatete Choleského faktorizaci výše zmíněné matice $BB^T = R^T R$.

[1] Číslování referencí je shodné s číslováním v dizertační práci.

3. Poslední dotaz se týká sekce 6.6.2, podsekce *Eigenvalues of the preconditioned matrix* (str. 107 dole). Zde se píše: „*(...) the spectrum (...) does not determine the convergence of GMRES*“. Můžete prosím toto tvrzení rozvést?

Martin Plešinger

Institute of Mathematics CAS, v.v.i.
Žitná 25, 115 67 Praha 1
Czech Republic

Posudek oponenta na dizertační práci
Hana Horníková: Preconditioning for linear systems arising from discretization of the Navier–Stokes equations using isogeometric analysis

Doktorandka se v dizertační práci zabývá numerickým řešením úlohy proudění nestlačitelné tekutiny. Tato úloha je popsána systémem Navierových-Stokesových rovnic doplněných o rovnici kontinuity. Pro diskretizaci úlohy je zvolen přístup izogeometrické analýzy, tedy jako bázové funkce jsou využity B-splajny. Tato diskretizace vede na významné zesložitění struktury soustavy rovnic, která je více zaplněná a má větší šířku pásu. Je známo, že vznikající soustavy rovnic je náročné řešit přímými metodami vzhledem k paměťové i časové náročnosti související s větší šířkou pásu. Je tedy zřejmé, že řešení reálných úloh se neobejde bez paralelních implementací iteračních metod, zejména ve třech dimenzích. Zvolené téma, tedy konstrukce vhodných předpodmínění takto vzniklých soustav je důležitý otevřený problém na této cestě, který je nezbytné vyřešit pro reálné nasazení izogeometrické analýzy na tyto náročné úlohy.

Těžištěm práce je porovnání celkem sedmi různých předpodmiňovačů vhodných pro řešení vznikajících soustav lineárních rovnic. Ačkoliv jsou tyto předpodmiňovače známé z literatury, jejich využití v kontextu izogeometrické analýzy je nové. Jedná se o předpodmiňovače *least-squares commutator (LSC)*, tři předpodmiňovače odvozené z metody *semi-implicit method for pressure linked equations (SIMPLE)*, konkrétně *SIMPLE*, *SIMPLER* a *MSIMPLER*, a metody *augmented Lagrangian (AL)* a *modified augmented Lagrangian (MAL)*. Oproti tezím dizertační práce doktorandka doplnila několik variant předpodmiňovače *pressure convection-diffusion (PCD)*, z nichž nejlepší konfiguraci zahrnula do porovnání. Tyto předpodmiňovače doktorandka nastudovala a implementovala do balíku pro izogeometrickou analýzu vyvinutém na jejím pracovišti a provedla s nimi velmi rozsáhlé experimentální testy, které se zaměřují na celkem tři úlohy proudění. Jedná se o dvě známé testovací úlohy proudění v kavitě a kolem zpětného schodu, a dále úlohu s reálnou geometrií proudění kolem lopatky oběžného kola Kaplanovy vodní turbíny. Všechny úlohy testovala ve dvou ale i ve třech prostorových dimenzích.

Práce je rozdělena do sedmi kapitol. První kapitola je přehledným úvodem do problematiky dizertační práce. Obsahuje rešerši dostupné literatury týkající se izogeometrické analýzy a iteračního řešení Navierových–Stokesových rovnic včetně vývoje vhodných předpodmiňovačů.

V druhé kapitole, věnované formulaci úlohy, autorka uvádí řešené diferenciální rovnice, které v práci využívá a odvozuje jejich slabou formulaci. Zaměřuje se na nestacionární a stacionární Navierovy–Stokesovy rovnice.

Ve třetí kapitole se autorka věnuje izogeometrické analýze a využití této diskretizace pro Poissonovu rovnici a soustavu Navierových–Stokesových rovnic.

Čtvrtá kapitola je věnována iteračnímu řešení soustav lineárních algebraických rovnic. Jsou popsány Krylovovské iterační metody s důrazem na metodu GMRES, která je dále využita v práci. Dále jsou připomenuty iterační metody pro řešení soustav sedlového typu, které vznikají právě diskretizací Navierových–Stokesových rovnic. Přestože v práci nejsou samostatně využity, staví se na nich v konstrukci blokových předpodmiňovačů.

Tel.: +420-222 090 711
Fax.: +420-222 090 701
E-mail: mathinst@math.cas.cz
www: http://math.cas.cz
Bank Connection: ČNB Praha
Account No: 69623011/0710
Company Identif. No: 67985840
Tax Identif. No: CZ67985840

Pátá kapitola, která je z teoretické části práce nejrozsáhlejší, se věnuje předpodmínění. Podrobně popisuje zejména předpodmiňovače pro Navierovy–Stokesovy rovnice využívající jejich blokovou strukturu. Díky využití jednotného značení jsou rozdíly mezi předpodmiňovači dobře objasněny. Autorka popisuje celkem sedm předpodmiňovačů. Tato kapitola je velmi dobře zpracovaná a považuji jí za nejzajímavější kapitolu práce. Tento společný popis je podle mého názoru v literatuře unikátní.

V šesté kapitole autorka uvádí výsledky rozsáhlých porovnání popsaných předpodmiňovačů. Oproti tezím dizertační práce byla experimentální část významně rozšířena. Volí dvě testovací úlohy (proudění v kavitě a v kanále se zpětným schodem) a jednu úlohu s reálnou geometrií (ikdyž s nereálně nízkou rychlostí) proudění kolem lopatky oběžného kola Kaplanovy turbíny. Všechny tři úlohy testovala ve dvou a třech dimenzích. Autorka posuzuje chování metody GMRES při třech jemnostech uniformě zjemněné sítě, sítě zjemněné kolem hranice vedoucí na anozotropní prvky a pro různá Reynoldsova čísla. Také se detailně zaměřuje na některé aspekty předpodmiňovačů, jako např. náhrada matice hmotnosti. Poukazuje tak na velmi zajímavé vlastnosti využití tzv. *mass lumping* namísto náhrady prostou diagonálou.

Závěry dizertační práce a náměty pro další výzkum jsou shrnuty v poslední, sedmé kapitole. Jako nejvhodnější se autorce jeví předpodmiňovač typu *pressure convection–diffusion* s vhodně nastavenými okrajovými podmínkami. Navazuje tak na soudobou literaturu z oblasti konečných prvků.

Doktorandka prokázala přehled jak o izogeometrické analýze a jejím využití pro Navierovy-Stokesovy rovnice, tak o iteračních metodách a jejich předpodmínění vhodném pro vzniklé soustavy rovnic.

Na práci oceňuji zejména detailní studium metod pro předpodmínění soustav rovnic vzniklých diskretizací Navierových–Stokesových rovnic včetně jejich implementace v C++.

Práce je nesporným přínosem k pochopení aktuálního tématu využitelnosti existujících předpodmiňovačů v novém kontextu izogeometrické analýzy. Celá práce je navíc motivována potřebou náročných simulací proudění v Kaplanově turbíně umožňujících optimalizaci tvaru lopatek popsaném B-splajny, což považuji za výborné využití možností izogeometrické analýzy. Řešení soustav vznikajících rovnic považuji v izogeometrické analýze za otevřený problém, jehož řešení může mít pro obor značný význam.

Původní přínos autorky vidím zejména ve společné formulaci, implementaci a velmi rozsáhlých testech konvergence předpodmiňovačů. Práce je velmi systematická a kapitoly dobře řazeny, takže se velmi dobře čte. Je napsána v anglickém jazyce na velmi vysoké úrovni, a je velmi pečlivě zpracována. Je doplněna velkým množstvím ilustrujících obrázků, přehledných tabulek a grafů, zejména relativní normy rezidua metody GMRES. V části výsledků jsou vybrány jen nejzajímavější výsledky, zatímco jejich kompletní přehled je uveden na konci práce.

Čtení práce jsem si užil a v několika směrech jsem si jím rozšířil znalosti. Zde bych vyzdvihl zejména souhrnný popis předpodmiňovačů, jejichž detailní pochopení a rozdíly jsou jinak jen težko získatelné z ostatní literatury.

Při čtení práce jsem narazil na naprosté minimum překlepů.

Doktorandka na základě své dizertační práce publikovala 3 články v odborných časopisech a další 3 články v recenzovaných sbornících (ačkoliv její řazení je jiné), z nichž dva byly v sérii LNCSE vydavatelství Springer. Považuji to za velmi dobrý výstup dizertační práce.

Na základě předložené dizertační práce jsem přesvědčen, že doktorandka Ing. Hana Horníková prokázala předpoklady pro samostatnou vědeckou práci. Téma práce a jeho zpracování jsou na vysoké úrovni. Jsem přesvědčen, že cílů dizertační práce bylo dosaženo, a předloženou práci proto **doporučuji k obhajobě**. Zároveň bych chtěl doktorandku požádat o zodpovězení doplňujících dotazů rovněž uvedených níže.

Dotazy:

1. Co může doktorandka říci o konvergenci Picardovy metody? Jaké je použité ukončovací kritérium a počet iterací alespoň pro některou úlohu a různá Reynoldsova čísla? Má volba předpodmiňovače vliv na konvergenci nelineárního řešiče?
2. Přestože se autorka rozhodla startovat lineární řešič z nulového startovacího vektoru z důvodu porovnatelnosti metod, mohla by popsat, jaký vliv má startování z řešení poslední linearizované úlohy?
3. V porovnání předpodmiňovačů autorka využívá ideální verze blokových řešičů, v nichž využívá řešení přímou metodou. Jak je v práci uvedeno, to může být stále zbytečně časově náročné, ikdyž se jedná o výrazně menší bloky než je celá soustava rovnic. Dá se předpokládat, že závěry práce budou platit i s využitím přibližných řešičů na blocích? Nebo předpokládáte, že se relativní výhodnost předpodmiňovačů může nějak zásadně změnit?
4. Velmi se mi líbily obrázky spekter předpodmíněných matic v komplexní rovině. Poskytují nějaký další vhled? Např. dá se pohledem na ně odhadnout konvergence GMRES a zdůvodnit, proč je některý předpodmiňovač lepší než jiný?

V Praze dne 31. 8. 2022

Ing. Jakub Šístek, Ph.D.
Matematický ústav AV ČR