

Kraków 2024.07.03

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Michała Jureczki zatytułowanej „Numerical Analysis and Simulations of Mechanical Contact Problems”

Recenzja została przygotowana na zlecenie prof. dr hab. inż. Macieja Ogorzałka Przewodniczącego Rady Dyscypliny Naukowej Informatyka Techniczna i Telekomunikacja Uniwersytetu Jagiellońskiego (pismo Nr 1199.5101.01.01.2024 z 30 kwietnia 2024) zgodnie z uchwałą Rady Dyscypliny Informatyka Techniczna i Telekomunikacja UJ z 21 września 2023.

Problem badawczy i przedstawione rozwiązania

Ogólna charakterystyka rozwiązywanych problemów i ich znaczenie praktyczne.

Rozważane w dysertacji problemy związane są ze zjawiskami mechanicznego kontaktu ciał fizycznych powiązane ze zjawiskami odkształcania oraz zniszczeń struktury tych ciał, jak również produkcji i wymiany ciepła towarzyszącego tym zjawiskom.

Analiza i prognozowanie tych zjawisk, oparte na ciągłych i dyskretnych modelach matematycznych oraz algorytmach i ich komputerowych implementacjach, posiadają kluczowe znaczenie w wielu dziedzinach badawczych takich jak mechanika konstrukcji, geofizyka a także biologia i medycyna. Pozwalają one w szczególności na przewidywanie zniszczeń różnego typu konstrukcji mechanicznych i budowlanych jak również urazów tkanek biologicznych w wyniku przeciążeń mechanicznych.

Wersja odwrotna tych modeli pozwala na tworzenie bezpiecznych konstrukcji, przeciwdziałanie katastrofom geotechnicznym i geologicznym oraz zabezpieczeń i ochrony osób pracujących w ekstremalnych warunkach.

Metodyka rozwiązania oraz zakres prezentowanych rozwiązań

Rozwiązania prezentowanych zadań oraz ich analiza składa się z kolejnych powiązanych ze sobą etapów. Dla ich realizacji rozwiązano następujące problemy cząstkowe:

1. Sformułowano definicję układu równań i inkluzji różniczkowych specyfikujących rodzaj fizyki, tj. prawa konstytutywne, związki bilansowe, warunki brzegowe, etc. Postać tych równań, zwana „silną”, nie specyfikuje rodzaju zasady wariacyjnej, jaka będzie dalej stosowana. Część tych związków ma postać równań różniczkowych cząstkowych, natomiast część inkluzji różniczkowych odpowiadających za wielowartościowe operatory kontaktu.

2. Opracowano sformułowanie wariacyjne osłabiające regularność funkcji składowych rozwiązania oraz parametrów. Na tym etapie definiowane są niezbędne przestrzenie funkcyjne dystrybucji regularnych. Z uwagi na wielowartościowe operatory warunków kontaktowych związki wariacyjne mają postać nierówności hemiwariacyjnych.
3. Kolejnym etapem jest transformacja nierówności hemiwariacyjnych do zadań minimalizacji funkcjonału. Na tym etapie, po przyjęciu dodatkowych mało ograniczających założeń możliwe było pozytywne zweryfikowanie warunków istnienia i jednoznaczności rozwiązań problemu.
4. Następnym etapem było zdefiniowanie odpowiedniej, wstępującej w sensie inkluzji rodziny skończenie wymiarowych podprzestrzeni przestrzeni rozwiązań. Podprzestrzenie te spełniają warunek wewnętrznej dobrej aproksymacji, tj. błąd aproksymacji dowolnego elementu przestrzeni rozwiązań maleje do zera przy zwiększaniu wymiaru przestrzeni aproksymującej.
5. Spełnienie warunku aproksymacji wewnętrznej dało możliwość łatwego uzyskania istnienia i jednoznaczności rozwiązania przybliżonego problemu dla każdej z podprzestrzeni należącej do rodziny aproksymującej.
6. Ważnym zadaniem algorytmicznym wynikającym z realizacji poprzedniego etapu było opracowanie algorytmu konstrukcji rodziny baz podprzestrzeni, o których mowa w punkcie poprzednim. Konstrukcja ta uwzględnia możliwość tworzenia kolejnych baz poprzez odpowiednią metodę adaptacji typu h (zmniejszenia średnic elementów siatki dekomponującej obszar rozwiązania). Zadaniu temu towarzyszyło opracowanie projektu software umożliwiającego jego implementację oraz wykonanie na architekturach wieloprocesorowych wykorzystujących GPU.
7. Kolejnym bardzo ważnym etapem było oszacowanie błędów aproksymacji oraz przybliżonego rozwiązania zadania minimalizacji funkcjonału. Prostymi wnioskami z tych oszacowań są twierdzenia o zbieżności opracowywanej metody. Należy zaznaczyć, że udowodniona zbieżność metody daje możliwość konstrukcji efektywnego warunku stopu typu Cauchy'ego tego algorytmu. Pozytywna weryfikacja zbieżności wynika z faktu, że stosowane przestrzenie rozwiązań są przestrzeniami Banacha, czyli metrykami zupełnymi.
8. W dalszym ciągu przyjęto odpowiednie algorytmy rozwiązywania zadań optymalizacji w dziedzinie skończenie wymiarowej znajdujących współrzędne rozwiązań przybliżonych.
9. Udowodnione twierdzenia o istnieniu i jednoznaczności rozwiązania problemu przybliżonego gwarantują jednomodalność problemów minimalizacji oraz spełnienie założeń niezbędnych dla zbieżności stosowanych metod minimalizacji. Gwarantują one tym samym poprawność warunku stopu typu Cauchy'ego oraz warunku częściowej poprawności dla implementowanych tutaj algorytmów.
10. Ostatnim etapem rozwiązania każdego z problemów była analiza symulacyjna prędkości zbiegania każdego z opracowanych algorytmów. Dla jej przeprowadzenia niezbędne było przygotowanie odpowiedniej aplikacji obejmującej implementacje algorytmów wymienionych powyżej, podłączenie odpowiednich bibliotek jak również przygotowanie danych oraz środowiska obliczeniowego.

Rozwiązania osiągnięte w poszczególnych grupach zagadnień oraz szczegółowy wkład autora

A. Abstrakcyjny problem statyczny

Przedmiotem analizy jest zachowanie ciała sprężystego w kontakcie z podłożem sztywnym. Badana jest penetracja ciała w podłoże, zmieniające tarcie. Oprócz prawa Coulomba wykorzystywane były inne prawa, w szczególności prawa uzależniające tarcie od przemieszczenia. W dalszym ciągu badań rozważano także inne typy podłoża.

Poszukiwane było pole przemieszczeń. Rozwiązano dokładny problem wariacyjny oznaczony jako P_{hvi} , przestrzeń rozwiązań dla przemieszczeń spełnia $u \in V \subset (H^1(\Omega))^3$ (por. [III]). Istnienie i jedność rozwiązania dokładnego gwarantuje Twierdzenie 7 [III], którego dowód oparty o Twierdzenie 2 [IV].

Problem słaby przybliżony P_{hvi}^h , polega na poszukiwaniu funkcji ze skończenie wymiarowej podprzestrzeni $V^h \subset V$. Tezy o zbieżności rozwiązań przybliżonych oraz oszacowaniu błędu zawiera Twierdzenie 8 [III].

W obliczeniach symulacyjnych zastosowano przestrzenie funkcji spline Lagrange'a oparte na regularnej dekompozycji obszaru na kostki (czworokąty w 2D). Jako strategię adaptacji tworzącą wstępujący ciąg podprzestrzeni zastosowano regularny remeshing typu h . Przeprowadzenie symulacji mających na celu empiryczną ocenę zbieżności błędu FEM jak również metod minimalizacji residuum w podprzestrzeni skończenie wymiarowej opisane są w pracy [III].

Twierdzenia o istnieniu rozwiązań dokładnych i przybliżonych, zbieżności oraz strategia rozwiązania numerycznego jak również przygotowanie danych, software i wyniki symulacji są wyłącznym dziełem doktoranta.

B. Referencyjny problem statyczny

Problem ten różni się od poprzedniego głównie ograniczoną ilością typów warunków brzegowych tarcia. Podobna jest konstrukcja sformułowania wariacyjnego, przestrzeni rozwiązań dokładnych i przybliżonych. Zastosowano identyczną strategię konstrukcji i adaptacji baz przestrzeni przybliżonych. Całość postępowania opisana jest w pracy [IV].

Istnienie rozwiązań dokładnego i przybliżonych wykazano w podobny sposób jak w przypadku A. Zbieżność metody przybliżonej gwarantuje Twierdzenie 3 [IV].

Przygotowano software i dane oraz przeprowadzono symulacje dla empirycznej oceny regresji błędu FEM jak również metod minimalizacji residuum w podprzestrzeni skończenie wymiarowej. Wykorzystano różne algorytmy minimalizacji: bezpośrednia, primal-dual active set, augmented Lagrangian.

Konstrukcja i adaptacja baz przestrzeni aproksymacyjnych, twierdzenie o zbieżności, software oraz plan i wyniki testów symulacyjnych stanowią wyłączny dorobek doktoranta.

C. Quasi-statyczny problem przemieszczania ze ścieraniem

Rozważane jest ciało pozostające w kontakcie z poruszającym się względem niego nieskończenie sztywnym, twardym podłożem. Ciało pokryte jest warstwą materiału, która może ulec zniszczeniu i może być penetrowana przez podłoże.

Poszukiwane funkcje to przemieszczenia $u \in V \subset (H^1(\Omega))^3$ oraz funkcja zniszczeń $w: \Gamma_C \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}_+$. Przyjęto prawa tarcia suchego Coulomba i warunki wynikające z prawa Archarda.

Warunki istnienia i jednoznaczności rozwiązań problemu słabego dokładnego P_w i przybliżonego P_w^h zostały pozytywnie zweryfikowane przez Twierdzenie 3 w pracy [I].

Podobnie jak uprzednio problem słaby przybliżony P_w^h bazuje na przestrzeni $V^h \subset V$. Zbieżność tych rozwiązań do dokładnego rozwiązania wariacyjnego gwarantuje Twierdzenie 6 [I].

W obliczeniach symulacyjnych typu zastosowano przestrzenie funkcji spline Lagrange'a opartych na regularnej dekompozycji obszaru na kostki (czworokąty w 2D) a jako procedurę adaptacji regularny remeshing typu h .

W dalszym ciągu przeprowadzono eksperymenty symulacyjne pokazujące szybkość zbiegania. Całość postępowania opisano w pracy [I].

Oprogramowanie, dane i symulacje prezentujące prędkość zbiegania stanowią w całości wynik doktoranta. Twierdzenie 6 [I] dotyczące zbieżności opracowane było również przy częściowym udziale doktoranta.

D. Quasi-statyczny problem przemieszczania ze zniszczeniem

Badane ciało pozostające w kontakcie ze sztywnym podłożem było podatne na uszkodzenia. Słaby problem wariacyjny P_d i przybliżony P_d^h polegają na poszukiwaniu przemieszczeń $u \in V$, $u_h \in V_h$ oraz funkcji zniszczenia $\xi: \Omega \rightarrow [0,1]$.

Twierdzenie 2.3 [II] gwarantuje istnienie i jednoznaczność rozwiązań obu problemów. Twierdzenie 3.3 [II] gwarantuje zbieżność rozwiązań skończenie wymiarowych do dokładnego rozwiązania wariacyjnego.

Do obliczeń numerycznych zastosowano podobną do poprzednich strategię tworzenia i adaptacji baz przestrzeni V_h .

Oprogramowanie, dane i symulacje prezentujące prędkość zbiegania stanowią w całości wynik doktoranta.

E. Dynamiczny problem z efektami termicznymi

Rozwiązany jest niestacjonarny problem lepkosprężysty P_t . Poszukiwane są pola przemieszczeń u oraz funkcja temperatury θ . Zostało wykazane istnienie i jednoznaczność rozwiązania wariacyjnego przy niskiej regularności po czasie (u, u', u'' są klasy L^2 po czasie), (por. Corollary 3 [V]).

Przy dodatkowym założeniu klasy regularności po czasie C^1 dla pola przemieszczeń i ciągłości dla temperatury, sformułowano i wykazano oszacowanie błędu schematu mieszanego Eulera-Galerkina ze stałym krokiem czasowym (por. Twierdzenie 4 [V]). W założeniach uwzględniono warunek uzależniający średnice elementów przestrzennych i kroku czasowego – częściowy wkład autora.

Aproksymacja FEM oraz strategia adaptacji siatki przestrzennej podobna jak w problemach poprzednich. W konstrukcji schematu FD/FEM uwzględniono zależność długości stałego kroku czasowego od średnicy elementów przestrzennych.

Strategia adaptacji w schemacie mieszanym, software, przygotowanie danych, plan i przeprowadzenie eksperymentów symulacyjnych pokazujących prędkość zbiegania stanowią w całości wynik doktoranta. Autor miał również częściowy wkład w opracowanie Twierdzenia 4 [V] o zbieżności schematu mieszanego.

Ocena wyników badań i wkładu autora

Zalety:

Największą zaletą jest kompleksowe przedstawienie algorytmiki rozwiązującej problemy forward (symulacji) procesów kontaktu mechanicznego ciał stałych. Pokazane są fizyczne i matematyczne podstawy budowy przedmiotowych algorytmów oraz ich analiza teoretyczna i symulacyjna. Prezentowana grupa algorytmów oparta jest na sformułowaniach wariacyjnych w postaci nierówności hemiwariacyjnych.

Analiza teoretyczna tych algorytmów obejmuje weryfikację warunków stopu oraz częściowej poprawności. Oparta jest ona na sformułowanych i udowodnionych twierdzeniach o istnieniu i jednoznaczności rozwiązań dokładnych i przybliżonych oraz twierdzeniach o oszacowaniu błędów dla ciągów aproksymujących wewnątrznie rozwiązania dokładne, oraz zbieżności metod minimalizacji funkcji na skończenie wymiarowych dziedzinach współrzędnych rozwiązań przybliżonych.

W obu przypadkach zbieżność zachodzi w przestrzeniach Banacha (metrykach zupełnych) do jedynej granicy. Warunek stopu w postaci warunku Cauchy'ego jest zatem zweryfikowany.

Podobnie, z twierdzeń egzystencjalnych oraz oszacowań błędów wynika, że każdy algorytm spełniający ich założenia jest częściowo poprawny, tj. każdy jego krok nie powoduje utraty możliwości uzyskania rozwiązania.

Wkład doktoranta w stworzenie powyższych kompleksowych rozwiązań jest znaczący, zarówno w części związanej z analizą formalną, natomiast całkowicie dominujący w zakresie analizy eksperymentalnej. Dokładny wykaz zrealizowanych zadań naukowych zawarty jest w poprzedniej części recenzji.

Mankamenty:

Bardziej szczegółowa analiza State-Of-the-Art dziedziny zawarta w początkowych sekcjach prac składających się na osiągnięcie zawężona jest do rozwiązań problemów kontaktowych wykorzystujących formalizm inkluzji różniczkowych i nierówności hemiwariacyjnych. Przykładem może być tutaj sekcja Introduction pracy [IV]. Odczuwalny jest brak szerszego spojrzenia na problematykę. Bardzo przydatny byłby zarys taksonomii tej grupy metod, szczególnie w ich części numerycznej oraz specyfikacja problemów otwartych, do których adresowane są wyniki doktoranta.

Analiza teoretyczna nie obejmuje kosztu obliczeniowego. Nie stanowi to jednak zbytniego uszczerbku w kompleksowym badaniu rozważanych procesów obliczeniowych. Poszczególne elementy proponowanej strategii posiadają zbadaną wielomianową złożoność obliczeniową rzędu 2 – 4 względem wymiaru przestrzeni V_h powiększonej o ilość kroków czasowych w przypadku zadań niestacjonarnych. Dokładne oszacowania zależą od szczegółów konstrukcji bazy V_h oraz konkretnego rozwiązywanego problemu granicznego (brzegowego lub brzegowo-początkowego). Pożądana byłaby jednak dyskusja kosztu obliczeniowego i dokładności proponowanego rozwiązania na tle innych metod.

Komentarze dotyczące kontynuacji badań:

Wydaje się, że jednym z głównych kierunków dalszych badań nad zaproponowaną algorytmiką powinno być zwiększenie efektywności obliczeniowej poprzez:

- a. Zastosowanie innych metod adaptacyjnych dla konstrukcji baz w przestrzeniach V_h , umożliwiających lokalny wzrost dokładności w zidentyfikowanych pod-obszarach. Większość tego typu strategii wymaga zdefiniowania lokalnego indykatora błędu, który można uzyskać z odpowiedniej analizy wzorów na globalne oszacowanie błędu przedstawionych w dysertacji. Należy zaznaczyć, że tego typu strategie i implementujący je software są skomplikowane a ich opracowanie jest pracochłonne.
- b. Analizę współbieżności operacji wynikających z przygotowanych strategii oraz przetwarzanie równoległe tych operacji w środowisku wieloprocesorowym. Polecić tu można model śladów Dikerta-Mazurkiewicza jako narzędzie analizy i weryfikacji wynikowego software.

Dorobek publikacyjny kandydata

Doktorant jest współautorem 8 publikacji w czasopismach z listy JCR. Siedem prac ma IF większy lub równy 2, w tym trzy $IF > 3.5$ a pozostała $IF = 1.2$. Procentowy udział doktoranta potwierdzony przez współautorów jest znaczący. Merytoryczny wkład w poszczególne pozycje został opisany w poprzednich sekcjach recenzji.

Opiniowany prezentował swoje wyniki naukowe na 8 międzynarodowych konferencjach naukowych, z których warto wymienić:

International Conference on Computational Contact Mechanics, Univ. of Salento, Lecce, Włochy, 2017, Referat; *Numerical treatment of contact problems with thermal effect*.

Contact Mechanics International Symposium, Univ. of Salento, Oropa, Włochy, 2018, Referat: *Error estimation and computational simulation of contact problem with wear*

Perpignan's Days of Applied Mathematics, Univ. of Perpignan Via Domitia, Perpignan, Francja, 2019, Referat: *Application of nonsmooth optimization in solving time dependent contact mechanical problems*

Analysis and Approximation of Variational and Hemivariational Inequalities, Univ. Jagielloński, Univ. of Perpignan, Univ. of Iowa, (online), 2021, Referat: *A Survey of Numerical Methods for Hemivariational Inequalities with Applications to Contact Mechanics*

Według bazy Web of Science index Hirsha mgr. Michała Jureczki wynosi $h = 4$. Podsumowując, dorobek publikacyjny mgr. Michała Jureczki na obecnym etapie rozwoju naukowego należy uznać za wzorowy.

Podsumowanie

Rozprawa doktorska mgr Michała Jureczki zawiera nowe, interesujące wyniki naukowe lokujące się w naukach obliczeniowych będących częścią dyscypliny Informatyka Techniczna i Telekomunikacja.

Biorąc pod uwagę pozytywne oceny zawarte w poprzednich punktach recenzji uważam, że rozprawa ta spełnia wymagania zdefiniowane przez Ustawę o stopniach naukowych i tytule naukowym z dnia 20 lipca 2018 r. (z późniejszymi zmianami) w szczególności wymagania sformułowane w Art. 187:

- Rozprawa zawiera oryginalne rozwiązanie problemu naukowego.
- Kandydat posiada niezbędną ogólną wiedzę teoretyczną w dyscyplinie Informatyka Techniczna i Telekomunikacja.
- Kandydat posiada umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej.

Wnioskuje o dopuszczenie ocenianej rozprawy do dalszych etapów postępowania o nadanie mgr Michałowi Jureczce stopnia doktora w dyscyplinie Informatyka Techniczna i Telekomunikacja.