

## Posudek disertační práce

Uchazeč: Ing. Marek Ciklamini

Název disertační práce: **Hybrid Modeling of Mechanical Digital Twin by Finite Element Method and Graph Neural Networks**

Studijní program: Řízení strojů a procesů

Školitel: prof. Ing. Tomáš Vyhlídal, Ph.D.

Školitel specialista: Ing. Matouš Cejnek, Ph.D.

Oponent: Doc. Ing. Tomáš Mareš, Ph.D.

Předložená disertační práce se zaměřuje na hybridní modelování mechanických digitálních dvojčat (MDT) s využitím metody konečných prvků (FEM) a grafových neuronových sítí (GNN).

### Aktuálnost tématu disertační práce

Téma disertační práce je vysoce aktuální a relevantní pro oblast strojírenství a digitálních technologií. MDT představuje vhodný nástroj pro optimalizaci a predikci chování mechanických systémů a hybridní modelování s využitím FEM a GNN efektivní přístup k jejich implementaci.

### Dosažení v disertaci stanoveného cíle

Překlad a interpretace cílů disertační práce formulovaných v kapitole 2.2 je podle mého názoru následující:

1. Navrhnout metodiku pro tvorbu digitálního dvojčete mechanického systému kombinací metody konečných prvků a grafových neuronových sítí.
2. Navrhnout postup, jak extrahovat informace z FE modelu reprezentujícího mechanický systém tak, aby bylo zajištěno, že grafy potřebné k trénování konkrétního regresoru jsou správně definovány.
3. Navrhnout optimální způsob tréninku regresorů pro provádění regresních úloh na uzlech grafů odrážejících fyzikální model. A navrhnout způsob výběru vhodných MKP dat pro vytvoření trénovací datové sady.
4. Navrhnout, jak diagnostikovat celkový model digitálního dvojčete, aby se zabránilo falešným předpovědím systému založeného na regresoru GNN. Digitální dvojčete by mělo poskytovat data, která budou potenciálně shromažďována ze senzorů během běžného fyzického provozu.

Celkovým cílem disertační práce je tedy navrhnout a ověřit hybridní modelovací přístup

pro MDT s využitím MKP a GNN.

Autor tohoto cíle dosáhl. Ve své práci navrhl hybridní modelovací architekturu, implementoval ji a otestoval její efektivitu a přesnost na číselných příkladech.

### **Úroveň rozboru současného stavu v disertaci řešené problematiky**

Autor provedl ucelený rozbor současného stavu v oblasti MDT, MKP a GNN. Prezentuje relevantní koncepty, metody a techniky z těchto oblastí a hodnotí jejich výhody a nevýhody.

### **Teoretický přínos disertační práce**

Disertační práce představuje teoretický přínos v oblasti hybridního modelování MDT. Autor navrhuje hybridní modelovací přístup, který kombinuje MKP a GNN a umožňuje dosáhnout přesných a spolehlivých predikcí chování mechanických systémů.

### **Praktický přínos disertační práce**

Disertační práce má i praktický přínos. Navrhovaný hybridní modelovací přístup může být aplikován v praxi pro modelování a simulaci mechanických systémů v různých oblastech strojírenství.

Význam práce spatřuji také v poskytnutí inspirace odborníkům na analýzu mechanických systémů k využití svých dat k vytvoření datově řízeného digitálního dvojčete.

### **Vhodnost použitých metod řešení**

Autor zvolil vhodné metody pro využití MKP dat k vytvoření, učení a testování různých regresorů i pro porovnání přesnosti řešení a efektivity učení navržených modelů.

### **Způsob, jak byly použité metody aplikovány**

Autor aplikoval zvolené metody standardním způsobem. Numerické příklady demonstrují efektivitu a přesnost navrhovaného hybridního modelovacího přístupu.

### **Zda doktorand prokázal odpovídající znalosti v daném oboru**

Ing. Marek Ciklamini prokázal znalosti v oblasti strojírenství, digitálních technologií, modelování a simulace. Jeho práce svědčí o jeho teoretickém a praktickém rozhledu a o jeho schopnosti řešit technické problémy.

### **Formální úroveň práce**

Disertační práce formálně není na vysoké úrovni. Práce vzbuzuje dojem narychlo napsaného textu bez důkladného zpětného pročtení. Text je místy obtížně srozumitelný. Je však logicky strukturovaný, gramaticky správný a práce je jako celek pěkně graficky provedená. Autor používá odbornou terminologii správně. Reference a citace jsou uvedeny v souladu se zvyklostmi.

Práce obsahuje řadu nepřesností, překlepů a obtížně srozumitelných pasáží, například:

- Strana 18 obsahuje termín „principle of most minor action“, který je značně neobvyklý. Doporučoval bych používání tradičního „principle of least action“.

- Na stránce 25 se zdá, že předposlední odstavec je nedokončený. Patrně typografická chyba.
- Na str. 10 jsou použity zkratky DDI a DDA, které nejsou v práci uvedeny a jejich použití v kontextu DT není jasné. Pravděpodobně jde o záměnu se zkratkami DTI a DTA, které jsou vysvětleny na straně 8.
- Na straně 31: “similarity” místo “similiarity”
- Několikrát se opakující “Poission” místo správného “Poisson”
- Časté psaní “We” uprostřed věty.
- Odstavec 3.1 na straně 36: “In this technique [FEM], the physical system is divided into small elements, and a set of partial differential equations is derived to describe the behaviour of each element. These equations are then discretized and solved numerically using the FEM...” Tento popis metody konečných prvků považují za velmi nepřesný.
- Na straně 37 je použit termín „Poisson’s constant“. Autor má zjevně na mysli termín „Poisson’s Ratio“. Termín „Poisson’s constant“ je běžně používán pro poměr tepelné kapacity při konstantním tlaku k tepelné kapacitě při konstantním objemu.
- Ve větě uvedené ke konci strany 38 (“The quantity  $\sigma \hat{n}$  is known as the traction or stress tensor on the boundary and is often prescribed as a boundary condition.) jsou dvě nepřesnosti: “ $\sigma \hat{n}$ ” by mělo být “ $\sigma \cdot n$ ” a místo “stress tensor” má být “stress vector”.
- Strana 38: “a test vector function  $v$  belonging to  $V$ , where  $V$  is a vector-valued test function space”. Zde by mělo být zmíněno, že jde o prostor funkcí deformace, které splňují deformační okrajovou podmínku. To souvisí i s následující poznámkou a s autorovým komentářem na počátku strany 39 v souvislosti se vztahem (3.11).
- Strana 39: “Suppose the gradient is expressed of  $v$  as a sum of its parts”. Pravděpodobně zde došlo k prohození pořadí slov.
- Strana 40: “The deviatoric tensor is the basis for deriving other stress values, such as the maximal principle stress, shear stress, and hydrostatic stress.” Hlavní napětí ani hydrostatické napětí nelze vyjádřit z deviatoru napětí. V deviatoru napětí z jeho definice chybí informace o hydrostatickém napětí.
- Strana 42, vztah (3.18) se zde objevuje jaksí bez souvislosti. Jaký je význam  $L_0$  a zda je  $L_0$  symetrická matice v textu řečeno není.
- Na straně 51 se píše, že Laplaceova matice je Hermitovská matice. Vzhledem k tomu, že Laplaceova matice obsahuje jen celá čísla, tak by bylo jistě vhodnější říci, že je symetrická.
- Strana 53, 54: Rozdíl mezi  $X_{IN}$ ,  $X_0$ ,  $X$  a  $[X]$  není vysvětlen.
- (3.29) vs. (3.27) and (3.29)

$$H_1 = \hat{D}^{-1/2} \cdot \hat{A} \cdot \hat{D}^{-1/2} \cdot \mathbf{X} \cdot \mathbf{W}_0 + \mathbf{b}_0$$

$$Y_{IDS}^{\hat{}} = \mathbf{W} \cdot \mathbf{X}_{IN} + \mathbf{b}$$

$$H_1 = \sigma \left( \mathbf{W}_0^T \cdot \mathbf{X} + \mathbf{b}_0 \right)$$

Jaký je rozdíl mezi  $X$  a  $X_{in}$ . Jde o vektor nebo matici? Podobně  $W$  a  $W_0$ , jde v obou případech o matice? Pokud je  $b_0$  vektor, co znamená  $XW_0 + b_0$ ? Opět zde narážíme na údaje, které jsou v práci citovány bez jakéhokoliv vysvětlení.

- Podobně nerozumím vztahům (3.30) a (3.31).
- Strana 61: Co znamená  $\hat{y}_i$ ,  $\bar{y}_i$  a  $y_i$  není definováno.
- Strana 61: Má ve vztahu

- Mean Absolute Error (MAE):

$$\mathcal{L}_{\text{MAE}}(y, \hat{y}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \text{abs}(\hat{y}_i - y_i)^2$$

být skutečně druhá mocnina? Tento vztah, pokud si odpustíme zbytečnou absolutní hodnotu, je obvykle nazýván „Mean Squared Error (MSE)“.

- Strana 61:

Root Mean Squared Error (RMSE):

$$\mathcal{L}_{\text{RMS}}(y, \hat{y}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sqrt{(\hat{y}_i - y_i)^2}$$

Zde bych čekal odmocninu z celého výrazu pro MSE

- Strana 61: Není následující vztah vždy roven jedné?

- R-Squared ( $R^2$ ):

$$\mathcal{L}_{R^2}(y, \hat{y}) = \frac{\sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^N (\bar{y}_i - \hat{y}_i)^2}$$

- Také nerozumím, proč se v některých vztazích na straně 61 sčítá od 1 do N a v jiných od 0 do (N-1)
- Vztah (3.33) na straně 62

$$\mathcal{L}_{\text{RMAXSE}}(y, \hat{y}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sqrt{\max(\hat{y}_i - y_i)^2}$$

také obsahuje tiskovou chybu. Takto napsaný vztah dává stejnou hodnotu jako vztah na straně 61 pojmenovaný (RMSE) nebo jakou by dával vztah (MAE), pokud by byl napsán správně.

- Na straně 68 je opět zmíněn „Poissonův zákon“, neobvyklý výraz v dané souvislosti, a mohu jen hádat, co tím autor myslí.
- Význam zkratk DI a DP na straně 71 není v práci objasněn. Je to „Domain Information“ a „Digital Prototype“?
- Na straně 79, 82 a 83 v popisu obrázku 5.7, 5.9 a 5.10 má být „Maximal Principal Stress distribution at last frame.“ Bez komentáře ponechávám vhodnost použití této charakteristiky napjatosti.
- „Beam 2D“ na straně 81. Bez udání použitého typu prvku, jen dvou prvků po tloušťce nosníku a vzhledem k uvedení výsledků ve formě „Maximálního hlavního napětí“ těžko soudit na správnost provedené analýzy. Nicméně, ve středu průřezu by mělo být nulové normálové napětí a po celé délce nosníku konstantní smykové napětí a v důsledku toho bych očekával stejnou hodnotu maximálního hlavního napětí ve středu průřezu po celé délce nosníku.
- „Beam 3D“ na straně 81 je (alespoň dle obrázku) modelovaný jen jednou řadou prvků navíc bez uvedení jejich typu. Z hlediska mechanické analýzy je to jistě nedostatečné, z hlediska účelu, kterým je testování postupu sestavení digitálního dvojčete, to asi není důležité. Výsledné konstantní napětí po tloušťce ohýbaného nosníku by se v práci strojního inženýra však objevit nemělo.
- Informace z tabulky 5.1 na straně 84 podávají sice jistou informaci o použitých elementech, není však dostatečná. Quad4 nebo Quad8? Tet4 nebo Tet10? Navíc použití Quad (quadrilateral) elementu pro 3D analýzu nedává žádný smysl.
- Vzhledem k nedostatku informací o provedené mechanické analýze v případě „Fibonacciho pružiny“ a „Half Airplane“ nelze výsledky analýzy komentovat. Z podstaty předložené práce však faktická mechanická analýza není předmětem studie. Je zde jen jako vstup do testování a ověření metodiky vytvoření datové řízeného digitálního dvojčete a jako takovou ji nebudu dále komentovat.
- Strana 82, na konci prvního odstavce je uvedena citace [?].

- Strana 84, v tabulce 5.1 má maximální síla v posledním sloupci jako jednotku uvedeny MPa. Předpokládám, že má být [N].
- Počet simulačních kroků ve stejné tabulce je uveden jako 500. Pro statickou analýzu 2D a 3D nosníků bych předpokládal jeden simulační krok. Bez jasného popisu řešeného problému a provedené analýzy nelze samozřejmě soudit na typ úlohy, ale ze souvislostí předpokládám, že se jedná o materiálově i geometricky lineární statický problém. Je také možné, že jsem přehlédl souvislosti - vzhledem ke stylu předloženého textu je to samozřejmě možné.
- Tabulka 5.2 na straně 85 postrádá vysvětlení použitých symbolů. Jako taková je čtenáři velmi obtížně srozumitelná. Z toho mála, co jsem o ní pochopil, mě zarazilo, že na druhém řádku a ve čtvrtém sloupci není číslo 1524.
- Nadpis paragrafu 6.2 by měl být "Ground Truth Evaluation of Digital Twins. (Ve slově Digital v práci chybí "a").
- Odstavec 6.2 (6.2.1): Opět je mnoho zahaleno mlhou. Z obrázků a značné dávky domněnek člověk dochází k názoru, že dosažená shoda je úžasná. Co představuje obrázek nazvaný input netuším.
- Na straně 95 odkazy na obrázky nesedí. Z nějakého důvodu na obrázku 6.10 je jiný rozsah hodnot nežli na obrázcích předešlých - pravděpodobně jsou zde výsledky prezentovány na jiné sadě vstupních dat.
- Porovnávat absolutní chyby není vždy úplně vhodné. Zavedení relativní chyby může být však také zavádějící. Vždy je dobré použít obojí a doplnit vhodným vysvětlením.
- Strana 102, "od" má být "of".
- Grafy na obrázcích 6.51 a 6.52 by si zasloužily podrobnější popis a vysvětlení. Nemyslím, že by tyto informace byly dostatečně doplněny tabulkami Tab.D.2 a Tab.D.3.
- Na straně 120 nahoře jsou záhadná čísla „8š8“ a „0.0005š0.0003“. Možná „0.0005±0.0003“ by dávalo smysl. Na stejné straně však údaj „4±5“ jako hodnota „an average RMAXSE“ smysl postrádá.

Občasná tisková chyba nebo přehlédnutí je pochopitelné. Jejich množství v této práci je však takové, že čtenář nabývá dojmu nepatřičného chvatu.

## Dotazy

1. Co znamená termín Poisson boundary“ na straně 35?
2. Mohl by disertant vysvětlit význam následující věty? "The primary keys are mathematical tools in the form of Poisson's and Boundary condition problems."
3. Jaká je souvislost mezi vztahy (3.19) a (3.20)? (3.20) asi nelze vyjádřit jako  $u = -L^{-1} * f$ . Fakt je ten, že vůbec nerozumím zápisu  $Lu=f$ , kde L je Laplaceova matice.
4. Kde je v práci uveden „pseudo-algoritmus 4“ zmiňovaný na straně 52 na konci odstavce 3.5?
5. Tabulka 6.1 na straně 89: Odchylka má podle obrázku 6.1 jednotku MPa, která není v tabulce uvedena. Zajímavější však je porovnání s absolutní hodnotou porovnávané veličiny. Jaká je hodnota  $y_i$  pro uvedenou hodnotu  $\max(Y_i - y_i)$ ?
6. Paragraf 6.1 by si zasloužil podrobnější popis analyzovaných dat. Demonstruje se zde statistika dat (odchylky RMAXSE). Mohl by disertant vysvětlit, jak byly tyto soubory dat získány?
7. Prosim o přesné vysvětlení významu grafu na pravé straně obrázku 6.19. Veličina e je chyba, rozptyl (variance), nebo směrodatná odchylka (standard deviation)?
8. Pro Fibonacciho spirálu a „Plane“ MLR regrese vůbec nefunguje. Zatímco pro nosníky fungovala výborně, jak si to vysvětlujete?
9. Strana 110, Trénink: Zajímalo by mě, na jakých datech probíhal trénink. A na jakých datech byla testována „chyba“?

10. V souvislosti s kapitolou „6.6 Results Discussion“: Ukázal se nějaký přínos/význam modelovat GNN na základě sítě kopírující MKP model?
11. Strana 123, kapitola 7 „Conclusion“: Co znamená „DTHMFG“ a „DTFMG“?

### **Závěrečné zhodnocení disertace**

Text disertační práce je napsán tak, že posoudit skutečně odvedenou práci a výsledky provedeného vědeckého zkoumání jen na základě studia předloženého textu je velice obtížné. Lze však konstatovat, že předložená doktorská práce vyhovuje formálně kladeným požadavkům, a proto ji doporučuji k další obhajobě. V případě důkladného a uspokojivého zodpovězení otázek a úspěšné obhajoby doporučuji udělit Ing. Markovi Ciklaminovi titul doktor, ve zkratce Ph.D.

V Praze dne 29.IV.2024

Doc. Ing. Tomáš Mareš, Ph.D.