Posudek oponenta na disertační práci

Lukáš Zedek: Modelování transportně-chemických procesů

Doktorand se v disertaci komplexně zabývá úlohou reakčního transportu. Vychází z reakčního transportu kontaminantů podzemní vodou a navrhuje nové deterministické matematické modely a způsoby jejich numerického řešení. Použité postupy implementuje na počítači, aplikuje je na modelování vybraných přírodních jevů a výstupy svých modelů porovnává s výsledky získanými pomocí komerčního softwaru. Jde o aktuální problematiku, která nachází přímé uplatnění v technické praxi.

Práce má úvod, čtyři kapitoly a přílohy. První kapitola formuluje cíle disertace. V druhé kapitole doktorand prezentuje používané matematické a numerické modely úlohy reakčního transportu a dostupný software.

Třetí kapitola je těžištěm práce. Autor uvádí pro několik praktických úloh formulaci matematického modelu popř. modelů, modely řeší numericky a srovnává výsledky simulace získané různými algoritmy. V řadě případů navrhuje autor nové matematické nebo numerické modely. Poukázal bych například na model rozpouštění kalcitu, kde doktorand používá popis pomocí soustavy diferenciálních a algebraických rovnic (a odpovídající numerický řešič), a sám pak úlohu formuluje jako soustavu obyčejných diferenciálních rovnic a tu úspěšně řeší včetně analýzy získaných numerických výsledků. Úlohy a jim odpovídající řešení autor již převážně prezentoval na vědeckých konferencích a publikoval.

Ve čtvrté kapitole disertant shrnuje výsledky práce a poukazuje i na možnosti, jak modelování reakčního transportu dál rozvíjet. Přílohy obsahují použité programy (skripty).

Doktorand získal přehled o rozsáhlé problematice modelování transportně-chemických procesů a jejich modelování. Tyto poznatky použil při přípravě disertace. Výsledky najdou uplatnění při řešení aktuálních transportních úloh. Jde o modelování transportu včetně radioaktivních rozpadů (kde je uvažováno i paralelní řešení úlohy), modelování rovnovážné sorpce, paralelních chemických reakcí a reakčního transportu.

Důležitou součástí disertace jsou ověřovací numerické experimenty, které autor naprogramoval a jejichž výsledky získané pomocí různého numerického softwaru porovnal. Bere v úvahu i obtížnost měření reálných dat, bez nichž nelze výpočty provést. Zejména si cením toho, že doktorand přistupuje k použití softwaru zodpovědně. Je si nesporně vědom

toho, že každý softwarový balík má své slabiny, takže pro výsledky platí: Důvěřuj, ale prověřuj.

Autor ne vždy uvádí časy potřebné pro výpočet nebo jsou uvedeny bez časové jednotky (např. tab. 3.6). Čas výpočtu a rychlost použitého procesoru jsou samozřejmě důležité pro posouzení účelnosti a účinnosti použitých numerických postupů a odpovídajícího softwaru. Doporučuji, aby se disertant k tomuto tématu vyjádřil při obhajobě.

Disertace je napsána přesně, pečlivě a přehledně a je doplněna řadou obrázků a grafů. Je škoda, že práce není napsána anglicky, i když některé publikace, které jsou její součástí, anglicky vyšly. Pro další anglické publikování obhajovaných výsledků přibude autorovi práce s překládáním. Drobné formální gramatické chyby nebo překlepy neubírají práci na srozumitelnosti.

Na základě předložené disertační práce jsem přesvědčen, že doktorand Ing. Lukáš Zedek prokázal předpoklady pro samostatnou vědeckou práci, a doporučuji jeho disertační práci k obhajobě pro získání akademického titulu Ph.D.

Praha 1. listopadu 2014

Karel Segeth

prof. RNDr. Karel Segeth, CSc.

Posudek oponenta doktorské disertační práce

Autor:	**Ing. Lukáš Zedek**
Název:	**Modelování transportně-chemických procesů**
Instituce:	Technická univerzita v Liberci, Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií Studijní program: P3901 Aplikované vědy v inženýrství Studijní obor: 3901V025 Přírodovědné inženýrství
Oponent:	**doc. RNDr. Josef Zeman, CSc.** Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta, Ústav geologických věd Kotlářská 2, 611 37 Brno e-mail: jzeman@sci.muni.cz, tel.: 549 498 295

Předkládaná doktorská disertační práce „Modelování transportně-chemických procesů" má rozsah 107 číslovaných stran, do textu je zařazeno 30 obrázků a 8 tabulek. Pro vypracování práce použil doktorand 46 literárních pramenů.

Z obsahového hlediska je práce rozdělena na dvě hlavní kapitoly. Po *Úvodu*, ve kterém autor seznamuje čtenáře s náplní jednotlivých kapitol disertace, následuje první kapitola s názvem *Cíle dizertační práce*. V ní autor stručně a jasně formuluje pět hlavních cílů dizertační práce a v následujících odstavcích uvádí, jaký zvolil principiální přístup jejich naplnění.

V první ze dvou hlavních kapitol, která je označena jako *Současný stav problematiky*, přesněji definuje řešenou problematiku, tedy „reakční transport" a přístup k zefektivnění postupů jeho simulace. Dále se pak systematicky zabývá kategorizací chemických reakcí a známými postupy matematické formulace problému. Uvedený přehled dává dobrou představu o stávajících postupech řešení a simulace transportně reakčních procesů.

Ve druhé hlavní kapitole, označené jako *Příklady vlastních modelů reakčního transportu*, autor postupně uvádí řešení jednotlivých typů příkladů stále složitějších úloh reakčního transportu. Propojení programů Flow123D a Semchem bylo prověřeno na oxidaci tetrachlorethylenu manganistanem, pokračuje simulací radioaktivních rozpadů, rovnovážné sorpce, paralelních chemických reakcí a nakonec prezentací PDE modelu reakčního transportu.

Vlastní disertační práce je uzavřena stručným přehledem přínosu práce. Významným teoretickým výsledkem práce je návrh originálního matematického popisu problému reakčního transportu. Uvedená formulace umožňuje zahrnout popis rovnovážných a nekonečně rychlých chemických reakcí do obyčejných diferenciálních rovnic. Práce je doplněna přehledem použité literatury, skripty v programu Octave, použitými k simulaci rozpouštění kalcitu. Závěr práce tvoří poměrně obsáhlý přehled publikačních a dalších aktivit doktoranda.

V doktorské práci jsem se věnoval především formulaci problémů a jejich reálné intepretaci. Odborností nejsem specialistou na numerické řešení obyčejných a parciálních diferenciálních rovnic, i když chápu, o co se jedná a jak se uvedené úlohy řeší.

K práci mám následující poznámky a připomínky:

- Práce má poněkud neobvyklý titul s označením „transportně-chemických procesů". Obvykle se užívá označení „transportně-reakční", kterého se autor dále v práci také přidržuje. To ale bude pravděpodobně souviset s původním zadáním práce, obsahově jsou však oba pojmy srovnatelné.
- str. 20 a dále, 2.2.1 Terminologie a značení: Autor používá poněkud nestandardní terminologie, která ztěžuje orientaci v řešené problematice. Obvykle se značí jako složky (v práci komponenty) chemické prvky, ze kterých se systém skládá (je jimi možné kompletně popsat chemické složení systému). Složky mohou být v systému přítomny v různé podobě (formě), ty se pak označují specie. V práci se rozlišuje rozpuštěná komponentní specie, komponentní specie sorbentu, mobilní komplex – sloučenina několika rozpuštěných komponentních specií, sorbované specie, specie vzniklé srážecí reakcí ve vodě přítomných komponentních specií, mobilní komplex, sraženina, sorbovaná látka, komponenta sorbentu, komponentní specie sorbentu, chemikálie, chemická látka, látka, složka, imobilní komponentní specie, sorbované specie, specie sorbentu, povrchově komplexované specie. Autor se sice odkazuje na literaturu Yeah a Tripathi (1989), ale od té doby už uběhl značný čas a standardně se užívá přehlednějšího, jednoduššího a především jednoznačnějšího značení.
- str. 70, 3. odstavec: Je třeba používat standardní označení rovnic, není tedy možné použít formulace „... volba rozdělení reakcí na 2 rovnováhy a 1 kinetiku ...", ale použít označení „... jednu kineticky řízenou reakci ..." nebo podobně.
- str. 88, odkaz [36]: Je paradoxem, že odkaz na programový kód z domácí autorské dílny Flow123D přivede čtenáře k výsledku „Not Found", zatímco ostatní internetové odkazy fungují.

K práci mám následující otázky:

- str. 26, 2. odst.: Proč jsou látky E a F zaváděny do rovnic pro rovnovážnou konstantu, když v reakci vůbec nevystupují.
- str. 30 a dále: Při postupech řešení mluví autor o primárních a sekundárních proměnných, neuvádí však, co je možné zvolit za primární proměnné, a jak se primární a sekundární proměnné liší. Prosím autora, aby osvětlil.
- Str. 78: Podle mého názoru představují počáteční a okrajové podmínky v představeném modelu nerovnovážné systémy (není dodržena elektroneutralita roztoků). Prosím, aby autor prezentoval, jak dospěl k hodnotám uvedeným v textu.

Při hodnocení předložené doktorské disertační práce je třeba vzít v úvahu několik faktorů. Především vyžaduje modelování transportně reakčních procesů na jedné straně dobrou znalost numerické matematiky a na druhé straně do geochemie reálných systémů. Obě dvě oblasti jsou obtížné. Přes dlouhodobé úsilí (několik desítek let) se dosud nepodařilo uspokojivě simulaci transportně-reakčních systémů vyřešit, přestože v oddělených disciplínách tj. samostatném transportu a samostatném reakčním modelování už jsou výsledky nadějné. Co znamená uspokojivě? Znamená to, že se alespoň principiálně chování modelového systému blíží reálnému chování systému studovaného. Příčin tohoto nesouladu je mnoho a jejich rozbor vychází daleko za rámec tohoto posudku. Proto velmi oceňuji, že se doktorand vydal na tuto obtížnou a nejistou cestu. Zde musím konstatovat, že si vedl velmi dobře a do problematiky pronikl hlouběji, než na tomto stupni studia obvyklé. O tom svědčí také poměrně obsáhlé publikační a další různorodé aktivity autora, které zde nebudu dále rozvádět, protože jsou v disertaci dostatečně podrobně uvedeny.

Závěr

Podle mého názoru doktorand splnil cíle disertační práce a prokázal, že je schopen samostatné a tvůrčí vědecké práce. O tom svědčí i jeho početný podíl na řešení vědeckých a výzkumných projektů. Zároveň s výsledky své práce seznamuje formou publikací a vystoupení na konferencích odbornou veřejnost. Podle mého názoru odpovídá předložená doktorská práce nárokům kladeným na doktorské práce. Jsem přesvědčen, že předložený

spis splňuje všechny požadavky kladené na doktorské disertační práce. Doktorskou práci Ing. Lukáše Zedka doporučuji k obhajobě před stanovenou komisí a po úspěšném obhájení doporučuji udělení titulu Ph.D.

V Brně 30. 10. 2014

Doc. RNDr. Josef Zeman, CSc.