

Posudek oponenta doktorské disertační práce

Autor: Ing. Vratislav Žabka
Název: Využití experimentů a modelování k posouzení míry vlivu dílčích procesů na transportně-reakční děj
Institute: Technická univerzita v Liberci, Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií
Studijní program: P3901 Aplikované vědy v inženýrství
Studijní obor: 3901V055 Aplikované vědy v 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 „Využití experimentů a modelování k posouzení míry vlivu dílčích procesů na transportně-reakční děj“ má rozsah 172 číslovaných stran. Do textu je zařazeno 99 obrázků, 15 tabulek a 19 scriptů (výpisů interpretovaných zdrojových kódů). Pro vypracování práce použil doktorand 50 literárních pramenů. Práce je doplněna seznamem dalších literárních zdrojů a souborem vlastních prací autora. Kromě toho obsahuje práce i 23 stran, které dále doplňují výsledky řešení disertačního tématu.

Z obsahového hlediska je práce rozdělena do šesti kapitol. V úvodní kapitole uvádí autor širší souvislosti řešeného problému a stručně charakterizuje obsah jednotlivých hlavních kapitol. Protože je charakteristika stručná a zároveň výstižná, neuvádím je zde ani v přehledu a odkazuji na příslušnou pasáž disertačního spisu. V závěru úvodu rozpracoval doktorand hlavní cíl disertační práce do sedmi dílčích cílů.

Při řešení autor postupoval logicky, na počátku práce se zamýšlí nad úlohou a postupem tvorby a vývoje modelu. Následně pak uvádí nezbytné matematické vztahy pro modelování transportních procesů, podstatu reakčního modelování aby se dostal k charakteristice jejich vzájemného propojení v transportně-reakčním modelování.

V další části disertační práce se doktorand při odvození transportně-reakčního modelu studovaného systému principiálně věnuje následujícím úlohám. Nejprve sestavuje transportní model pro zvolené experimentální podmínky a jeho experimentálně prověřuje jeho věrohodnost, následuje připojení reakční části systému, nejprve rovnovážné a poté postupně zapojuje a prověřuje jednotlivé procesy, u nichž hraje při vývoji parametrů systému významnou roli rychlost. Následně testuje citlivost modelů na jednotlivé parametry a všestranně hodnotí možnosti využití transportně-reakčních modelů pro simulaci reálných procesů.

Předností předkládané disertační práce je, že se autor nespokojil s tím, že sestaví model, který simuluje pokud možno přesně nějaký makroskopický vývoj a souhlasu je dosaženo tím, že se upravují některé parametry tak, aby bylo dosaženo co nejlepší shody bez ohledu na to, co dané parametry znamenají (jak bývá někdy zvykem). Velmi cenné je, že buduje svůj model od nejjednodušších základů a zároveň každou jeho část prověřuje experimentálně včetně nejzákladnějších principů za reálných a poměrně dobře definovaných podmínek.

Pro budování a testování modelu zvolil na první pohled jednoduchý karbonátový systém. Ten má několik výhod. Zároveň se v něm uplatňují procesy rozpouštění a srážení, tedy interakce mezi pevnou a kapalnou fází, důležitou roli hraje i interakce s plynnou fází. Zároveň jsou to v přírodních systémech nejdůležitější interakce, které

regulují pH přírodních vod. Jednotlivé dílčí reakce jsou poměrně dobře prostudované (nikoliv však vyřešené). Ze zvoleného přírodního materiálu však také vyplývají některé obtíže. A tím přecházím k připomínkám:

Str. 41, 1. odst.: Je uvedeno, že se u vápence s vysokým obsahem hořčíku může jednat o „vápence s příměsí dolomitu (tzv. dolomitický vápenec)“. Dolomitický vápenec je výhradně vápenec s převahou dolomitu v obsahu karbonátů. Je tedy rozdíl mezi tím, kdy je hornina tvořena kalcitem s vyšším či vysokým obsahem Mg a tím, kdy je hornina tvořena kalcitem CaCO_3 a dolomitem $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$.

Str. 42, 5. odst.: Autor uvádí: „Na obr. 1-3b je dále možné pozorovat, že nedochází k neustálému nárůstu hodnoty koncentrace CO_3^{2-} , ale postupně dojde k jejímu ustálení, které koresponduje se zvyšující se rychlostí snižování pH.“ Jedná se o rovnovážný model, takže z tvaru závislosti nevyplývá zvyšující se rychlost. Podstata je jiná.

Str. 43, 1. odst.: Autor uvádí: „Na obr. 1-3b odpovídá průsečík přibližně hodnotě fugacity $f_{\text{CO}_2} 10^{-5}$, což podle obr. 1-3a znamená hodnotu pH 6,38.“ pH 6,38 pro rovnováhu mezi $\text{CO}_2(\text{aq})$ a HCO_3^- bude platit nezávisle na fugacitě CO_2 , pH je dáno rovnovážnou konstantou.

Str. 50, 1. odst.: S připomínkou ke str. 41 souvisí následující otázka. Je uvedeno, že „byla použita vápencová hornina s obsahem přibližně 55 % CaCO_3 a 35 % MgCO_3 “. Byla použita hornina monominerální či polyminerální? Co tvořilo zbytek 10 hm. %? Je to důležité, protože od kombinace rozpouštění a srážení se odvíjí pozdější úvahy autora o rozdílech mezi chováním modelu a reálného systému.

Str. 79, 1. odst.: Autor uvádí: „V důsledku postupného rozpouštění vápence v koloně a následujícího zvyšování množství rozpuštěného vápníku v systému dochází ke snižování hodnoty pH na výstupu z kolony.“ Snižování hodnoty pH rozhodně není důsledkem zvyšování rozpuštěného množství vápníku, ale výsledkem interakcí karbonátových specií v roztoku.

Str. 81, 4. odst.: Autor uvádí: „Rychlost rozpouštění kalcitu byla v tomto případě nekonečně vysoká, neboť nebylo nastaveno rovnovážné rozpouštění.“ Bylo to právě naopak. Nekonečně vysoká rychlost rozpouštění kalcitu byla v tomto případě právě proto, že bylo nastaveno rovnovážné rozpouštění, které předpokládá okamžité ustavení rovnováhy.

Str. 97 a dále: Autor provádí a vyhodnocuje výsledky experimentů s různou navážkou vápence. Všechny výsledky jsou vynášeny vzhledem k navážce vápence. Mnohem informativnější by bylo vynášení vůči velikosti reakčního povrchu či celkové rychlosti. S tím souvisí i nalezení toho, co autor uvádí jako „hraniční stav množství vápence v závislosti na rychlosti průtoku kolonou“. Je to jednoduché – zvyšováním navážky se zvyšuje celková rychlost rozpouštění vápence, až je dosaženo rovnovážného stavu už v průběhu průchodu vody kolonou.

Str. 108 a dále: Jaké má autor vysvětlení pro skutečnost, že experimentální hodnoty pH v opakovaných experimentech v mikrokolonách se téměř nemění, zatímco modelové stoupají.

Str. 133 a dále: Doktorand diskutuje a prověřuje různé příčiny rozdílu mezi modelovým a experimentálním pH po dosažení rovnováhy mezi vápencem a vodným roztokem bez přístupu atmosférického oxidu uhličitého. Teoretického pH by bylo dosaženo pro fugacitu CO_2 , která je deset tisíckrát nižší, než je fugacita CO_2 v atmosféře. Je otázkou, zda je možné takového stavu dosáhnout bez speciální a nákladné přípravy experimentů. Doktorand dosáhl rovnovážného stavu, který odpovídá zhruba tisícinásobnému snížení fugacity CO_2 proti atmosféře, což považuji za velmi přiměřené.

Str. 147, tab. 5-2: Autor mísí složky a specie. Složka představuje celkovou koncentraci (či podle zvolených jednotek množství) daného prvku v systému, které je zadáváno v určité podobě, specie představuje konkrétní formu daného prvku v roztoku. Tedy pro daný případ jsou složkami Ca^{2+} , H^+ a HCO_3^- a speciemi jsou Ca^{2+} , H^+ , H_2O , OH^- , $\text{CO}_2(\text{aq})$, HCO_3^- , CO_3^{2-} , CaOH^+ atd.

Str. 165, 7. odst.: Autor píše: „Analýzy složení roztoku byly úmyslně zanedbány právě z důvodů snahy o minimální ovlivnění průběhu jednotlivých experimentů.“ Rozumím tomu, ale je to škoda. Alespoň na konci experimentů mohlo být provedeno stanovení vápníku a hořčíku, pomohlo by to rozhodnout některé otázky, jako je například kongruentní či nekongruentní rozpouštění atd.

Po formální stránce je disertační práce zpracována pečlivě, obsahuje jen malé množství překlepů, k plynulosti textu by v některých částech přispělo dělení slov. K přehlednosti grafů závislostí by velmi přispělo, kdyby byly modelový průběh a experimentální křivky vyneseny stejnou barvou.

Souhrnné hodnocení

Předkládaná disertační práce je velmi obsáhlá, z hlediska přehlednosti a snadné orientace bych upřednostnil klasičtější členění tj. principiálně úvod, současný stav řešené problematiky, metodika, výsledky diskuse a závěry. Na mnoha místech se prolínají údaje o dílčích parametrech experimentů s dílčími údaji o úpravě modelů. Kromě toho nás autor detailně provádí svými úvahami o tom, jak a proč provést určitý experiment či jeho modifikace. Některé informace jsou několikrát zbytečně opakovány na různých místech doktorského spisu. Jedním ze znaků vědeckého sdělení by měla být sevřenost, stručnost, výstižnost a jasné směřování od začátku ke konci. Při použitém způsobu se i zasvěcený čtenář v textu občas ztrácí.

Většina mých připomínek se týká „druhé poloviny“ problematiky tj. vápenců a jejich interakce s reálným prostředím. To je problematika natolik obsáhlá a složitá, že vyžaduje kromě znalostí nabytých studiem i dlouhodobé praktické zkušenosti a v další práci vyžaduje účast specialisty. Dnes už je pravděpodobně nemožné, aby jeden člověk zároveň zvládl principy tvorby modelů, algoritmizaci úloh a jejich konkrétní provedení a zároveň do detailu porozuměl průběhu reálných procesů. Doktorand pronikl do řešeného problému dostatečně hluboko na to, aby se se specialistou snadno domluvil, což bývá obvykle největší problém.

Na druhé straně velmi oceňuji rozsah a pečlivost provedených prací i hloubku, do jaké doktorand pronikl. Doktorand se pustil do velmi nesnadného úkolu. Transportně-reakční modelování se řeší už několik posledních desetiletí a dosavadní výsledky nejsou úplně uspokojivé. Myslím, že cesta, po které se doktorand pustil, tedy pečlivé experimentální prověřování každého jednotlivého kroku modelu, je nadějí, která by mohla transportně-reakční modelování přivést na novou, vyšší úroveň.

Výsledky doktoranda nejsou „korunovány“ odborným článkem v impaktivním časopise, přesto jsem přesvědčen, že odborné výstupy v podobě softwarových nástrojů, podíly na řešení grantových projektů a vystoupení na mezinárodních a domácích odborných konferencích dostatečně osvědčují odbornou úroveň doktoranda.

Závěr

Podle mého názoru doktorand prokázal, že je schopen samostatné vědecké práce a je schopen dosažené výsledky prezentovat odborné veřejnosti. Předkládaná disertační práce podle mého názoru splňuje požadavky na tyto práce kladené zákonem, proto ji doporučuji k obhajobě před stanovenou komisí a po úspěšném obhájení doporučuji udělení titulu Ph.D.

V Brně 27. 11. 2015



Doc. RNDr. Josef Zeman, CSc.

Oponentní posudek doktorské disertační práce

Autor: Ing. Vratislav Žabka

Název práce: Využití experimentů a modelování k posouzení míry vlivu dílčích procesů na transportně-reakční děj

Technická univerzita v Liberci

Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií

Studijní program: P3901- Aplikované vědy v inženýrství

Studijní obor: 3901V055

Oponent: doc. RNDr. Vladimír Onderka, CSc.

RWE Gas Storage, s.r.o., 602 00 Brno, Plynárenská 499/1

e-mail: vladimir.onderka@rwe.cz

Shrnutí práce:

Předložená práce má 172 stran textu a 4 přílohy, je rozdělena do 6 kapitol a je v ní citováno 50 literárních odkazů.

V úvodu autor seznamuje se zaměřením práce s přehledem jednotlivých kapitol a cíli řešení.

V kapitolách 2-5 jsou uvedeny jednotlivé typy modelů a experimentů (transportní, transportně reakční) a optimalizace výpočtů, kapitola 6 Závěry hodnotí výsledky řešení, využití modelů a nastiňuje další možný vývoj.

Hlavním cílem předložené disertační práce Ing. Vratislava Žabky je propojení zvolených experimentů s numerickými modely. Modely byly voleny tak, aby, dle autora, vycházely z reálných geochemických systémů a současně poskytovaly řešení kinetických jevů ve vazbě na transport v rámci karbonátového systému.

K předkládané práci mám tyto připomínky:

- formálně celá struktura práce působí poměrně nepřehledně. Např. popis jednotlivých modelů a experimentů bez významného strukturovaného členění prostupuje celou práci
- přestože téma práce spadá do Aplikovaných věd v inženýrství, domnívám se, že jak příprava modelů, tak experimentů nemá dostatečnou návaznost na reálné procesy v přírodě, popř. neobsahuje dostatečnou diskusi ohledně tvorby konceptu modelů a jejich zjednodušení, např. zahrnutí tlaku a teploty, popř. dalších veličin do experimentů a modelů
- totéž se týká výsledků. Postrádám diskusi ohledně vazby mezi výsledky experimentů a odladěných modelů a řešením konkrétních přírodních systémů

- autor již v úvodu zmiňuje, že postup stavby modelu by měl následovat za „dobře definovaným geochemickým systémem...“. Přesto již ve struktuře kapitoly 1 Modelování karbonátového systému (1.5) následuje až po kapitolách Postup výstavby konkrétního modelu, Modelování transportních procesů atd.

Při obhajobě práce bych se rád zeptal autora na následující:

- jaký je jeho osobní podíl na přípravě a provádění experimentů, v textu je zmiňováno pracoviště Masarykovy university?

- vzal autor do úvahy skutečnost, že v karbonátových systémech převládají puklinové systémy (na rozdíl od drti při experimentech) a zda autor počítal při transportu s možnostmi odchylek od Darcyho zákona?

- které proměnné by autor naopak doplnil do modelů transportu či reaktivního transportu tak, aby byly využitelné pro obecná řešení karbonátových systémů?

Pro celkové hodnocení práce je nutno zmínit skutečnost, že doktorand musel nastudovat řadu informací z oborů, které s problematikou proudění, transportu a reaktivního transportu v porézním a puklinovém prostředí souvisí, zejména v oblasti geochemie, analytické a fyzikální chemie.

Závěr:

V současnosti se již žádná vědní disciplína neobejde bez řešení s použitím numerických modelů. Protože však různé typy úloh vyžadují ověřovací experimenty a k nim odladěné numerické nástroje, je vhodné mít k dispozici porovnávací studie či práce postihující srovnání mezi jednotlivými simulačními nástroji a experiment a takto snižovat možné nejistoty ohledně věrohodnosti dosahovaných řešení. Aplikovaná geochemie a hydraulika, do níž předkládaná práce zasahuje, je toho příkladem.

Přes veškeré výhrady ať formální, tak věcné, musím ocenit doktoranda za schopnost přípravy a provádění experimentálních prací a návazné ladění numerických modelů na jejich výsledky. Jedná se o multidisciplinární úlohy zahrnující nutné znalosti geochemie, hydrogeologie, matematiky a programování. Při řešení jednotlivých dílčích experimentů a modelů prokázal, že je schopen hodnotné samostatné vědecké práce. Tuto skutečnost vysoce hodnotím.

Z výše uvedených důvodů jsem přesvědčen, že základní zadání předložené doktorské disertační práce bylo splněno.

Doktorskou práci Ing. Vratislava Žabky doporučuji k obhajobě a po jejím úspěšném obhájení doporučuji udělení titulu Ph.D.

Brno, 22.11.2015



doc. RNDr. Vladimír Onderka, CSc.