

Oponentský posudek na disertační práci Ing. Larisy Očeretné

The lattice gas cellular automata approach for fluid flows in porous media.

Předložená disertační práce se zabývá počítačovou simulací proudění kapaliny a plynů. Existuje několik různých přístupů pro modelování proudění plynů a kapalin pomocí počítače. Disertantka se zaměřila na modelování pomocí buněčných automatů. Tento přístup je velmi populární především v oblasti fyziky a přírodních věd už od šedesátých let minulého století. Vzhledem k tomu, že průtok kapalin textilními materiály je jev, který se objevuje v řadě technologických procesů, je toto téma aktuální a velmi potřebné.

Práce je rozdělena do dvou částí: 120 stran hlavního textu rozděleného do šesti kapitol a část obsahující 19 příloh, tvořící druhou polovinu práce. Celkově má práce 236 stran.

První dvě kapitoly v hlavní části autorka věnuje přehledu metod, používaných v oblasti počítačové simulace proudění kapalných a plyných médií, speciálně potom buněčným automatům. Třetí, čtvrtá a pátá kapitola se věnuje modelu FHP – LGCA (což je zkratka pro *Hardy, de Pazzis, Pomeau – Lattice Gas Cellular Automata*). Autorka zde popisuje základní algoritmus modelu FHP-1, využití tohoto buněčného automatu pro modelování Brownova pohybu a pro proudění vazké nestlačitelné kapaliny v trubici (Poiseuille flow).

Ačkoli v názvu práce a v deklarovaných cílech je simulace proudění kapaliny v porézním prostředí, je této problematice věnováno pouze 10 stran v kapitole 6 hlavní části disertace. To je dle mého názoru velmi málo a je to škoda, vzhledem k množství práce, kterou tomuto problému disertantka věnovala. Na tak malém prostoru bohužel není popsán způsob modelování vlákněného porézního filtru, dokonce není dle mého názoru ani dostatečně vysvětlen pojem poréznosti (poresity) a jeho vliv na průchod kapaliny filtrem. Chybí mi zde popis simulace různých porézních struktur, jak je uvedeno v abstraktu na začátku práce. Je zde pouze naznačen model náhodného rozmístění pevných částic v cestě laminárního proudění. Zároveň není dostatečně zřejmý vlastní přínos disertantky.

Druhou polovinu předložené práce tvoří 19 příloh, obsahujících doplňující informace k textu, grafické výstupy a části kódu simulačního programu psaného v jazyce C++.

Práce je psána v angličtině. Nejsem rodilý mluvčí v tomto jazyce a proto se nebudu vyjadřovat ke stylistice a k jazykové stránce. Nicméně text obsahuje řadu chybně zapsaných slov. Nejčastější chyby jsou ve jménu Claude-Louise Naviera (v textu je opakovaně uváděn jako Nevier), ve slově verification (v textu varification) a channel (v textu cannel) a další. Kdyby se objevovaly ojediněle, jednalo by se o překlepy, ale tyto chyby se objevují opakovaně v celých kapitolách. Práce by si byla bývala zasloužila pečlivé přečtení před konečným tiskem. Po formální stránce bych práci vytkl také nepěknou úpravu matematických výrazů (často hraničící s nesrozumitelností). Zde mám na mysli především nesrozumitelné používání tučných a netučných symbolů (viz např. v řádku 8 na str. 27, řádek 9. na str. 29, vzorec 32 na str. 77, ...), nedůsledné používání symbolu pro střední hodnotu (str. 78 nahoře), nerozlišování symbolu derivace (d) a proměnné d (vzorce 38 a 39) a další.

Mám výhrady i k seznamu literatury, který je zcela chaotický. Neodpovídá žádné normě (což považuji za nejmenší prohřešek), je neuspořádaný a velmi těžko se v něm hledá. Počet vlastních publikací je poměrně rozsáhlý co do počtu (15), nicméně nejsem si jist, zda lze písemné práce ke zkouškám z předmětů (3×) považovat za publikace.

K vlastní obhajobě jsem vybral několik otázek, na něž jsem v práci nenašel odpověď:

- Prosím o vysvětlení věty „Due to non-linearity the system loses memory – ie. a record of its initial conditions.“ ze strany 20.
- Použité modely jsou deklarovány jako nedeterministické. Přesto ve výsledných tabulkách a grafech postrádám jakoukoli informaci o variabilitě. Jedná se například o obr. 35, tabulky 3, 4, obr. 40,41, 42, 43, 47, 48.
- V práci mi chybí podrobnější popis kolizních pravidel částice-pevný bod v případě porézního prostředí. Omezení pouze na *bounce-back reflection* se mi zdá být příliš zjednodušující. Jak tato pravidla mohou ovlivnit způsob průchodu částic filtrem, popisovaný např. na obrázku 49?
- Prosím o zhodnocení vlastního přínosu disertantky, který mi z práce není zřejmý.

Celkové shrnutí: Práce na mne působí jako dobrá rešeršní studie využití celulárních automatů pro simulaci proudění kapaliny. Práce obsahuje řadu formálních (a tedy zbytečných) chyb. Vlastní téma – proudění kapaliny v porézním prostředí – je zpracováno velmi stručně a je mu věnován poměrně malý prostor. Přesto práci doporučuji k obhajobě. Pokud disertantka uspokojivě odpoví položené otázky, především týkající se vlastního přínosu ke studované problematice, a obhájí tak zákonné požadavky kladené na disertační práci, doporučuji práci přijmout a disertantce udělit titul Ph.D.

V Praze, dne 27.4.2013



Prof. RNDr. Gejza Dohnal, CSc.
Ústav technické matematiky, Fakulta strojní
České vysoké učení technické v Praze

doc. Ing. Václav Dvořák, Ph.D.
V Horkách 242/7
460 07, Liberec

Posudek disertační práce, doktorandka Ing. Larysa Ocheretna

The lattice gas cellular automata approach for fluid flows in porous media

(Buněčný automat s rysy mřížkového plynu pro řešení proudění tekutiny v porézním médiu)

Rešerše

Předložená disertační práce je poměrně obsáhlá, textová část o 112 stranách je doplněna dalšími 123 stranami příloh.

Cílem předložené disertační práce bylo vyvinout vhodný model pro simulaci transportu tekutiny porézními strukturami, včetně nanomateriálů, ve kterých se velikost pórů řádově blíží délce volné dráhy molekuly a proudění tak ztrácí své kontinuální vlastnosti. Téma předkládané disertační práce je bezesporu velice aktuální. Řešení uvedené problematiky je žádoucí pro úspěšné řešení nových úkolů vyplývajících ze současného výzkumu nanomateriálů. Právě výpočtové metody, které by dokázaly věrně popsat chování tekutiny při proudění v nanomateriálech nebo při styku s povrchy s nanosenými nanočásticemi, mohou výrazně přispět k prohloubení našich poznatků o dané problematice a dát vodítko k dalším aplikacím.

Hodnocení

Práce je vypracována pečlivě, její členění je přehledné, jednotlivé kapitoly na sebe logicky navazují, čtenář má možnost postupně sledovat postup prací a v textu se neztrácí. Oponent oceňuje vysokou grafickou úroveň práce. Práce je psána anglicky a je poměrně dobře srozumitelná.

Úvodní, rešeršní část práce je dobře strukturována, popisy jednotlivých numerických modelů jsou názorné a text disertace dobře poslouží každému k základnímu seznámení s numerickými metodami nejen v mechanice tekutin. Práce je proto vhodná i jako studijní materiál pro další doktorandy.

Rovněž postup v praktické části práce je správný. Disertantka podrobně popisuje vlastní výpočtový kód, který je rovněž uveden jako příloha práce. Program následně testuje na dvou problémech. Brownově pohybu a Poiseuillově proudění. V obou případech je konstatována velice dobrá shoda s teoretickou předpovědí a pozorováními. Následně je vytvořený kód použit pro simulování dvourozměrného proudění porézní strukturou, která má představovat skládaný filtr. Jsou zkoumány případy různých úhlů porézní struktury o různé pórovitosti. Rovněž zde jsou dosažené výsledky v souladu s očekáváním.

Oponent tak považuje cíle předložené disertační práce za splněné. Za hlavní přínos disertační práce lze považovat získání výpočtového nástroje, který je bezesporu použitelný k simulování proudění tekutiny porézními strukturami. K práci mám jen několik formálních připomínek a několik dotazů.

Formální připomínky

- 1) Text práce v anglickém jazyce se velice dobře čte. Bohužel se doktorandka nevyvarovala chyb v pravopisu, které by měl běžný textový editor odhalit a které při čtení ruší. Z poměrně častého opakování chyb navíc vyplývá, že je má doktorandka zažitě (např. „cannel“ místo

správně „channel”, „Technical university of Liberec“ místo správně „Technical University of Liberec“, „of cause” místo „of course”, „varification” místo „verification” a další.

- 2) Oponent se rád nechá poučit o významu termínu „Two nodes, **spoiled** with a channel are considered to be neighbour nodes.“
- 3) V textu je rovněž mnohokrát zkomoleno jméno „Navier“ na „Nevier“. Rušivé je to o to více, že se jedná o práci zaměřenou na modelování proudění tekutiny.
- 4) Oproti zvyklostem nejsou u seznamu symbolů jednotlivých veličin uvedeny jejich jednotky.

Uvedené připomínky nijak nesnižují jinak vynikající úroveň předkládané práce, nicméně před dalším šířením disertace by je oponent důrazně doporučil odstranit.

Dotazy

Pro potřeby obhajoby bych si dovilil požádat doktorandku, aby odpověděla na následující dotazy a připomínky:

- 1) Na základě jaké úvahy byla jako okrajová podmínka použita stěna s vlastností „bounce-back reflection, i.e. no slip boundary condition“, kdy se částice vrací do původního směru.
- 2) Na konci kapitoly 4 (str. 85), která se zabývá ověřením výpočtového modelu na Brownově pohybu, autorka uvádí, že srovnávací test byl úspěšný a bylo dosaženo shody. Na základě čeho je učiněno toto prohlášení? Z textu a diagramu na obr. 35, kde je vyneseno lineární trend, toto není zcela zřejmé.
- 3) Z obrázku 45 není jednoznačné, jak je definována tloušťka porézní vrstvy ($d = 90$ l.u.). Zda je měřena ve směru x nebo kolmo na materiál. Z obrázků S-1 až S-3 se zdá, že tloušťka porézní vrstvy roste s úhlem této vrstvy. Je to způsobeno rozdílným měřítkem ve svislém a vodorovném směru?

Rovněž tyto uvedené dotazy nijak nesnižují úroveň předkládané práce. Spíše upozorňují na místa, která mohou být čtenáři nejasná a dle názoru oponenta si zaslouží podrobnější vysvětlení.

Závěr

Cílem předložené disertační práce bylo vyvinout vhodný model pro simulaci transportu tekutiny porézními strukturami, včetně nanomateriálů, ve kterých se velikost pórů řádově blíží délce volné dráhy molekuly a proudění tak ztrácí své kontinuální vlastnosti.

Tohoto úkolu se autorka zhostila se ctí. Přínosem je názornost práce podpořená velkým množstvím příloh vhodně ilustrujících dosažené výsledky. Disertantka prokázala schopnost samostatné vědecké práce. Předložená disertační práce vyhovuje podmínkám stanoveným pro doktorandské studium, uvedené připomínky její kvalitu nesnižují. Vytyčené cíle disertační práce považuji za splněné a práci doporučuji k obhajobě.

V Liberci dne 29. dubna 2013.



Václav Dvořák