

Pokročilé metody pro matematické modelování dvoufázového proudění a transportu v porézním prostředí

Předložená habilitační práce se zabývá analytickými a numerickými metodami pro řešení matematického modelu dvoufázového filtračního proudění, modelu dvoufázového kompozitního proudění s přestupem hmoty a také modelu elektro-chemické interakce v porézním prostředí lithiového-inotového elektrického článku. Pro numerické řešení je použita smíšená hybridní metoda konečných prvků pro řešení příslušné soustavy parciálních diferenciálních rovnic popisujících dvoufázové kompoziční proudění v porézním prostředí. Ing. Radek Fučík hledá taková numerická schémata, aby bylo možno řešit i tzv. degenerující úlohy. Témata, kterými se habilitační práce zabývá, rozhodně patří mezi aktuální problémy současné numerické matematiky.

Disertace je založena na 2 kapitolách v monografiích (jedna z nich je uveřejněna v prestižní publikaci Handbook of Chemical Mass Transport in Enviromenment) a 6 článcích uveřejněných v renomovaných mezinárodních časopisech Adv. in Water Resources, Computer Phys. Comm., Groundwater, J. Comput. Phys., Internat. J. Heat and Mass Transfer a Math. Problems in Engrg., které jsou součástí habilitační práce a které Ing. Fučík napsal se dvěma až sedmi spoluautory.

V americké databázi Mathematical Reviews je evidováno 15 článků Ing. Fučíka, na něž se uvádí 39 citací. Evropská databáze eviduje 13 článků a 41 citací.

Na začátku habilitační práce je podrobný padesátistránkový úvod do vyšetřované problematiky. Nejprve se uvádí obecné schéma procesu matematického modelování fyzikálních jevů řešených analytickými či numerickými metodami a jejich zpětná vazba na srovnání s realitou.

Druhá kapitola je věnována matematickému modelování proudění, transportu a přestupu veličin v porézním prostředí. Definuje se pojem porozita, pomocí nějž se zavádí termín saturace. Dále se předkládá řídicí rovnice proudění a rozmanité empirické modely pro kapilární tlak či relativní propustnost. V závěru kapitoly se uvádí řídicí parciální diferenciální rovnice pro transport lithiových iontů v elektrolytu s přirozenými okrajovými podmínkami a rovnice pro výpočet elektrického potenciálu.

Třetí kapitola se zabývá přesným řešením dvoufázového proudění v obecné dimenzi d s danými počátečními a okrajovými podmínkami. Vychází se z rovnice kontinuity. Přesné řešení se hledá jak v kartézských, tak i sférických souřadnicích. Vyšetřovaná diferenciální rovnice se převádí na integrální rovnici,

kteřá se řeší iteračně pomocí numerické aproximace integrálů. Dosažené výsledky pro $d=1, 2, 3, \dots$ se předkládají ve formě matematických vět.

Čtvrtá kapitola pojednává o numerickém řešení úlohy dvoufázového proudění v porézním prostředí s transportem rozpuštěných látek metodou smíšených hybridních konečných prvků. Je popsán příslušný numerický řešič, který byl navržen autorem. Dále je prezentována formulace obecné úlohy, její diskretizace v libovolné dimenzi a příslušný výpočetní algoritmus.

V páté kapitole se Ing. Fučík zabývá integrálním řešením elektrochemických interakcí v Li-Ion článku. Odvozuje se příslušná integrální rovnice a iterační schéma pro její řešení. V závěru kapitol 3, 4 a 5 se uvádí shrnutí autorova přínosu.

Poslední šestá kapitola je věnována shrnutí vědecko-pedagogického přínosu autora k dané problematice a stručnému přehledu autorových článků, které jsou součástí habilitační práce. Závěrečné podkapitoly jsou zaměřeny na vedení a spolupráci se studenty, na současný výzkum a mezinárodní spolupráci a také na výzkum budoucí.

Efektivita navrhovaných metod je ilustrována na řadě numerických testů, které jsou doplněny názornými grafy, tabulkami a obrázky. Sestavení příslušných programů si jistě vyžádalo obrovské úsilí a svědčí o výborné programátorské zručnosti ing. Fučíka.

Habilitační práce má 248 stránek. Je napsána velice srozumitelně, mimořádně pečlivě a dobře se čte. Nenalezl jsem v ní téměř žádné překlepy.

Velice bych uvítal, kdyby Ing. Fučík mohl během obhajoby habilitační práce zodpovědět následující dva dotazy:

- a) *Bylo by obtížné odvodit nějaké apriorní či aposteriorní odhady diskretizační chyby navrhované metody konečných prvků pomocí standardních postupů užívaných na eliptické problémy?*
- b) *Stručně uvést podíl autora na článcích J. Comput. Phys. a Groundwater. Jakými konkrétními výsledky přispěl ke vzniku těchto prací?*

Ing. Fučík jednoznačně prokázal, že je vyhraněnou vědeckou osobností. Má vynikající přehled o existující literatuře a jeho práce má skutečně vynikající vědeckou úroveň.

Na základě výše uvedených skutečností vřele doporučuji, aby Ing. Radek Fučík, PhD., byl připuštěn k obhajobě své habilitační práce a byl mu udělen titul doc.

V Praze dne 14. července 2021

prof. RNDr. Michal Křížek, DrSc.
Matematický ústav AV ČR
Žitná 25
115 67 Praha 1
tel. 222 090 712