

Oponentský posudek

habilitační práce Ing. Jiřího Mikyšky, Ph.D. :

„Matematické modelování transportu směsí v porézním prostředí“,
podané na Českém vysokém učení technickém v Praze, Fakultě jaderné a fyzikálně
inženýrské v oboru Aplikovaná matematika.

Předmětem předložené habilitační práce je transport směsí chemických látek v porézním prostředí. Navzdory tomu, že se jedná se o interdisciplinární problematiku spojující především dvě disciplíny klasické mechaniky, termodynamiky a mechaniky tekutin, tato problematika je to aktuální s množstvím aktuálních aplikací. Metodou výzkumu je matematické modelování. Práce je sepsána formou komentovaných článků v prestižních vědeckých časopisech, obsahuje celkem 154 stran, z toho na 87 stranách jsou kopie publikovaných článků a v závěru je uveden rozsáhlý seznam literatury. K tomu je nutné dodat, že články byly publikovány především v časopisech, pro obor, s relativně vysokým Impakt faktorem. Pětiletý průměrný IF článku Č1 a Č6 je 3.184, článku Č2 2.626 a článků Č3 a Č4 2.244.

V předmluvě práce autor stručně uvádí důvody pro volbu předmětu svého výzkumu a naznačuje možnosti aplikací, včetně vysoce aktuálních případů souvisejících se skleníkovým efektem. Podstata práce je popsána v kapitole 2. Nejprve je popsán konvenční transportní model sestávající se jednak z transportní rovnice, jednak z konstitučních vztahů pro vícefázové prostředí. V této branži je dobrým zvykem buď okrajové podmínky jen naznačit, nebo raději zcela zamlčet, čímž se autoři vyhnou problémům spojenými s těmito podmínkami. To není případ autora, a proto pro tento model zavádí fyzikálně korektní okrajové podmínky. Pro zavedený model autor navrhuje stabilitní schéma pro výpočet fázových rychlostí. Toto schéma, které je shrnuto v odstavci 2.2.8. Autor pokračuje dále ve svých příspěvcích k dané problematice. Původní formulace problému, který se řeší při předepsaném tlaku, teplotě a celkových molárních zlomcích jednotlivých komponent směsi, nahrazuje novou formulací s předepsaným objemem, teplotou a celkovým látkovým množstvím. Tato formulace je v aplikacích k podstatně lépe využitelná, naopak přináší některé problémy spojené s nejednoznačností. Proto autor např. zavádí novou termodynamickou funkci pro popis fázové rovnováhy, odvozuje podmínky pro tuto rovnováhu a kritérium pro fázovou stabilitu, včetně odpovídajícího numerického algoritmu.

V další části kapitoly 2 je popsána nová formulace lokální termodynamické rovnováhy v rámci kompozičního modelu a numerické řešení tohoto nového modelu, které je opět formálně shrnuto v odstavci 2.4.4. Následují odstavce, ve kterých autor demonstruje některé výsledky numerických simulací vybraných příspěvků autora. Na dvou příkladech je např. demonstrována výhoda metody vyššího řádu ve srovnání s výsledky metody prvního řádu. Na dalších uvedených třech příkladech je zase demonstrována výhoda nové formulace problému s předepsaným objemem, teplotou a celkovým látkovým množstvím oproti klasické formulaci, která předepisuje tlak, teplotu a celkové molární zlomky. Nakonec je uveden příklad, kdy konvenční metoda selhává a nekonvenční formulace dává uspokojivé výsledky.

Velice oceňuji vložení odstavce 2.6, kde autor uvádí souhrn svých vlastních příspěvků. Naopak poněkud méně mi je jasný důvod pro vložení dalšího odstavce 2.7 – Současný výzkum a mezinárodní spolupráce. Prvou část lze dozajista chápat jako součást závěru, ve které se autor zamýšlí nad dalším možným vývojem problematiky. Jsou zde dále zmíněny

spolupráce se zahraničními partnery, které přinesly podněty k autorově práci, jsou však zde uvedeny další kontakty, které se v práci nijak neobjevují.

Pro hodnocení habilitace jsou podstatné přiložené publikace. Jestliže v kapitole 2 jsou uvedeny problémy, které se v řešení tématu objevují a především popsány vlastní příspěvky autora, přiložené práce obsahují, kromě uvedeného popisu i důkazy. Vzhledem k tomu, že se jedná vesměs o příspěvky v recenzovaných časopisech, kde lze očekávat, že recenzenti jsou renomovaní odborníci v oboru, nedovolím si následnou jejich recenzi.

Z hlediska aplikované matematiky nemám k práci připomínek. Z hlediska aplikací si dovolím následující. S rozvojem výpočetní techniky se totiž numerické modelování začalo vyvíjet v nejrůznějších oborech lidské činnosti a to i v oborech, ve kterých by chybné výsledky mohly způsobit fatální následky. A právě v rámci těchto oborů si uživatelé začali klást otázky o důvěryhodnosti výsledků „řešičů“. Proto s počátkem nového tisíciletí se začínají rozvíjet objektivní metody pro ověření výsledků matematických modelů, jejichž cílem je kvantifikace přesnosti matematického modelu v rámci jeho použitelnosti. Prvým krokem je tzv. vědecké zhodnocení, což v práci lze implicitně nalézt. Verifikaci, tj. ověření numerických metod, může odpovídat odstavec 2.5. Chybí však část, která je označována jako validace, tj. odhad přesnosti výsledků ve srovnání s experimenty a část této procedury, kterou autoři této disciplíny označují jako odhad využitelnosti. Proto v rámci obhajoby se dovolím zeptat, zda byla, alespoň pro některé případy provedena porovnání s experimentálními daty nebo alespoň s odpovídajícími empirickými výsledky a zda byl proveden např. odhad podmínek, kdy metody mohou být prakticky využity.

Z hlediska formálního je habilitační práce sestavena systematicky, pečlivě vybavena obrázky a explicitně obsahuje výčet příspěvků autora. Původní publikace uvedené jakožto příloha jsou výsledkem více autorů. Pro jednoduchost předpokládám, že pořadí autorů koresponduje s příspěvkem autora. Předpokládám zároveň, že příspěvek autora v publikacích s doktorandem (i když autor je uveden na druhém místě) spočívá mimo jiné v námětu, navržených metodách apod. a tedy není zanedbatelný. Doporučuji, aby se k této otázce autor vyjádřil při obhajobě. Uvedené připomínky považuji za připomínky formální a nikterak tím nesnižuje vynikající úroveň práce. Předložená habilitační práce prokazuje, že autor je předním odborníkem v oboru a že má předpoklady pro předávání svých rozsáhlých poznatků a zkušeností studentům a doktorandům.

Závěr

Předložená habilitační práce shrnuje východiska, metodiku a aplikace z oboru transportu směsí chemických látek, především v porézním prostředí. Výsledky uvedené v práci jsou přínosem jak pro rozvoj oboru, tak pro výuku. Na základě předložené práce mohu konstatovat, že navrhovatel systematicky rozvíjí samostatnou vědecko-výzkumnou činnost a dosáhl originálních výsledků významných pro obor. Výsledky práce vesměs publikoval v zahraničních časopisech s odezvou ve vědecké komunitě. Z uvedených důvodů **doporučuji přijetí habilitační práce Ing. Jiřího Mikyšky, Ph.D. k habilitačnímu řízení k udělení vědecko-pedagogického titulu docent.**

V Praze, dne 21. ledna 2015

prof. RNDr. Zbyněk Jaňour, DrSc
Ústav termomechaniky AV ČR, v.v.i.
Dolejškova 5
182 00 PRAHA 8