



Ing. Miroslav Kolář
katedra matematiky
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská
ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
Trojanova 13
120 00 PRAHA 2

Posudek oponenta na bakalářskou práci studenta Leonida Samoilova

„Metoda štěpení operátoru pro řešení transportně-reakčních úloh“

Práce se zabývá studiem metody štěpení operátoru pro numerické řešení parciálních diferenciálních rovnic. Metoda je konkrétně použita pro řešení systému transportně-reakčních rovnic. Autor se zabýval především návrhem algoritmu pro automatickou volbu časového kroku, který následně implementoval v rámci existujícího software TRM 2D, který měl k dispozici.

První kapitola je věnována odvození matematického modelu reakčně-transportní úlohy a formulaci partikulárního problému pro reakci kalcitu s vodou nasycenou CO_2 . Autor ukazuje základní model tohoto procesu popsany chemickými reakcemi, ze kterých je pak odvozen systém parciálních diferenciálních rovnic řešený numericky v balíku TRM 2D.

Ve druhé kapitole se pak autor zabývá popisem metody štěpení operátoru a ukazuje některé její varianty. Popisuje použití metody pro případ obecné reakčně-transportní rovnice a její následnou diskretizaci pomocí metody konečných diferencí.

Třetí kapitola pak obsahuje základní popis kódu TRM 2D, jeho zprovoznění a autorův vlastní návrh algoritmu pro adaptivní volbu časového kroku. Kapitola pak končí autorovými vlastními výsledky ve formě konvergenčních testů.

Práce je napsaná relativně stručným a srozumitelným způsobem. Práce je psaná v angličtině a její jazyková úroveň je celkem dobrá, i když místy nepružná. Autor ve svém textu až příliš často sklouzává v úvodu odstavců k těžkopádným formulacím typu "It is important to do ...", "It is necessary to do ...", "It must be done ..."

Text v sekcích 1.1.1 a 1.1.2 je napsaný nesrozumitelně. Jako by se od konkrétního tvaru zákona zachování v integrálním tvaru přešlo k tomu samému, ale v obecnější formě. Chybí vysvětlení některých symbolů, popřípadě se vysvětlení objeví později, než by mělo. Rovnice (1.16) se odkazuje na rovnici (1.12), ale přitom by se měla odkazovat na rovnici (1.7).

V sekci 2.1.1 autor popisuje "populární" příklady metody štěpení operátoru. Proč jsou populární? Lze jejich popularitu nějak odzdrojovat? Metoda Strang splitting je podle mě špatně napsaná a neodpovídá rovnici (2.1). U metody Lie-Trotter splitting je špatně napsaná počáteční podmínka. Myslím si, že by zde mělo být $u_{sp}^n = U(t^n)$.

Dále bych vytkl, že ve třetí kapitole jsou převzaté obrázky popisující strukturu programu TRM 2D nečitelné. Obrázky jsou převzaté z reportu pro projekt TACR a autor si měl jejich čitelnost zkontrolovat.

V popisu testů implementovaného algoritmu je dle mě příliš vágně popsána metodika měření. Autor bere pro své testy v potaz relativní chyby různých numerických řešení, ale už nepíše, jak je pro případ soustavy pěti parciálních diferenciálních rovnic měří.

Závěrem bych vypsals několik stručných komentářů:

- str. 14 – $\nabla\Phi = \frac{\partial\Phi}{\partial x}, \frac{\partial\Phi}{\partial y}, \frac{\partial\Phi}{\partial z} \rightarrow \nabla\Phi = \left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}, \frac{\partial\Phi}{\partial y}, \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right)$
- str. 14, rovnice (1.6) – Darcyho rychlost je zde vektor
- str. 21, sekce 2.1 – Finite Difference Method vs Runge-Kutta method. Nejednotné psaní velkých písmen.
- str. 23, obrázek 2.1 – není z textu jasné, co se tím obrázkem chtělo říct
- str. 23, rovnice (2.7) – co se myslí termínem "appropriate method"? Jaký typ štěpení operátoru se tedy v práci (a v software TRM 2D) používá?
- str. 24 – Milan Hokr's university study book [4] je ve skutečnosti reference [5]
- str. 24 – "... it is important to represent special difference ..." raději "... it is important to introduce special difference ..."
- str. 34, – v pseudokódu je na 6. řádce chyba, myslím, že by tady měla být obrácená nerovnost

K obhajobě bych měl na autora následující otázky.

1. V práci není žádná vizualizace numerického řešení studovaného problému. Mohl by autor nějaké numerické výsledky ukázat?
2. Jakým způsobem došlo k návrhu algoritmu pro adaptivní volbu časového kroku tak, jak je v práci popsáná? Má autor srovnání i s případy jiných voleb kroků (jiné koeficienty než 0.5 a 1.1)?

Autor splnil všechny body ze svého zadání. Text práce ale působí, jaky by si ho po sobě nepřečetl. Některé pasáže v úvodní sekci nejsou napsány příliš dobře a v textu se často objevují nejasnosti, které nejsou vysvětlené nebo ozdrojované. Práci by jistě pomohla i prezentace numerického řešení konkrétního studovaného problému, což by i umožnilo udělat si lepší představu o složitosti tématu.

Práci navrhuji hodnotit známkou C (dobře) s možným zlepšením při obhajobě.

V Praze, dne 16.8. 2021

Ing. Miroslav Kolář, Ph.D.