

Oponentský posudek doktorské disertační práce

Autor práce: Ing. Václav Štumbauer

Název práce: Modelling, parameter estimation, optimization and control of transport and reaction processes in bioreactors

Zpracovatel posudku: doc. dr. rer. nat. ing. Jan Valdman

Předložená práce je věnována modelování fotobioreaktorů a jejich výpočetních simulací. Autor se pohybuje na pomezí fyzikálního/biofyzikálního popisu procesů, diskretizace uvažovaných modelů a následných numerických simulací na počítači. K popisu modelu používá časově závislé diferenciální rovnice, podle potřeby obyčejné nebo parciální a k urychlení numerických simulací počítá na grafické kartě na platformě CUDA.

Práce je založena na čtyřech žurnálových publikacích, na kterých autor spolupracoval se školitelem Š. Papáčkem (JČU) a se spoluautory D. Štysem, J. Jablonským (oba také JČU), C. Matonohou (ÚI AV ČR), K. Peterou (ČVUT) a B. Rehákem (ÚTIA AV ČR). První tři publikace byly již podle SCOPUSu vydány, dvě z nich v časopise Mathematical and Computer Modelling a jedna v časopise Mathematics and Computers in Simulations. U dvou publikací zveřejněných v Mathematical and Computer Modelling je uveden v seznamu publikací různý impakt faktor, jednou s hodnotou $IF=2.22$ a podruhé s hodnotou $IF=2.84$. To bych doporučoval dovysvětlit. Čtvrtá publikace, přestože je podle seznamu publikací teprve ve stavu zaslání, již vyšla jako

Chapter, ISCS 2014: Interdisciplinary Symposium on Complex Systems, Volume 14 of the series Emergence, Complexity and Computation pp 277-286 (vydáno v 2015).

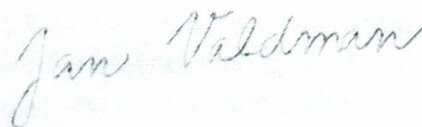
Pro úplnost je třeba dodat, že časopis Mathematical and Computer Modelling skončil svoji činnost v roce 2014. Výběrem časopisů směřuje profilování autora disertace více do oblasti aplikované matematiky než do biofyziky, která je studijním oborem autora. Myslím si, že prezentovaná problematika je aplikačně velmi zajímavá a autoři článků mohli mít vyšší ambice a své výsledky prezentovat ve specializovaných fyzikálních časopisech, které jsou obecně také více citované.

Samotná práce působí solidním dojmem, oceňuji také úvod do problematiky, který je pro další čtení užitečný. Jako 'výpočtář' shledávám velmi zajímavou aplikaci Lattice Boltzmanovy metody (LBM) a jako inovativní považuji vlastní implementaci v paralelní architektuře CUDA, k práci je dokonce přiložen výpis softwarových kódů. Zde se nabízí praktická otázka. Lze přiložený kód také někde stáhnout a spustit nebo jsou kódy přiloženy jenom pro zajímavost? Kritikou obsahu práce buď také fakt, že disertace obsahuje sice řadu

grafů - časových závislostí, ale nenašel jsem ani jeden obrázek, který by demonstroval prostorové rozložení alespoň jedné veličiny počítané parciální diferenciální rovnice, například rychlosti. Takový obrázek by měl velkou výpovědní hodnotu a jednoduše by mohl nahradit obrázek na titulní stránce disertace, který obecně popisuje metodu LBM.

Až na drobné výtky uvedené výše je práce napsána přehledně a působí vyzrálé. Bude přínosem pro čtenáře, kteří se s problematikou teprve seznamují a také pro odborníky, kteří se chtějí seznámit s konkrétními výstupy autora. Celkově hodnotím práci za zdařenou a doporučuji udělení vědeckého titulu PhD. v oboru Biofyzika na Přírodovědecké fakultě Jihočeské univerzity v Českých Budějovicích.

Ve Vídni, dne 22. 11. 2016.



doc. dr. rer. nāt. ing. Jan Valdman
docent aplikované matematiky
PřF, Ústav matematiky a biomatematiky
Jihočeská Univerzita v Českých Budějovicích
Braníšovská 1645/31a
České Budějovice

Oponentský posudek disertační práce
Modeling, parameter estimation, optimization and
control of transport and reaction processes in
bioreactors

ing. Václava Štumbauera

Předložená práce se skládá ze stručného úvodu a ze čtyř článků věnovaných modelování fotobioreaktorů pro kultivaci mikrořas a predikci a optimalizaci jejich produkce. První tři články vyšly před několika lety v časopisech s impaktním faktorem, čtvrtý je zatím v recenzním řízení. V úvodní části práce jsou krátce představeny mikrořasy a jejich kultivační systémy. Dosažené výsledky v člancích byly prezentovány výhradně na Couette-Taylorově fotobioreaktoru a na plochém panelovém fotobioreaktoru. Dále je představen cíl práce, jímž je predikce, optimalizace a řízení růstu mikrořas s ohledem na geometrii a velikost kultivačního zařízení, mechanismus a intenzitu míchání a osvětlení a případně další relevantní faktory. K dosažení tohoto cíle je třeba vhodně propojit transportní procesy s biologickými procesy. Místo řešení Navier-Stokesových rovnic je k simulaci proudění využita Lattice Boltzmannova metoda, jež umožňuje relativně snadnou paralelizaci. V souvislosti s Lattice Boltzmannovou metodou je pojednáno také o okrajových podmínkách, o zahrnutí multifázového a multikomponentního proudění a o diskretizaci. Následně je stručně popsáno modelování biologických procesů založené na tzv. fotosyntetické továrně. Na závěr první kapitoly jsou diskutovány různé možnosti zjednodušení modelů a výpočetní náročnost včetně možnosti využití grafických karet.

Druhá kapitola se skládá ze čtyř vložených článků. První článek pojednává o návrhu distribuovaného parametrického modelu růstu mikrořas využívajícího eulerovský přístup a metodu konečných diferencí. Tento model umožňuje rozšíření parametrického modelu fotosyntetické továrny o oblasti s heterogenně distribuovanými parametry. Druhý článek se věnuje porovnání dvou různých přístupů k modelování distribuovaného parametrického růstu mikrořas. První eulerovský přístup je založen na metodě konečných diferencí a druhý lagrangeovský přístup je založen na náhodné procházce. Druhý z uvedených algoritmů byl implementován paralelně na grafické kartě, což přineslo podstatné zkrácení výpočetního času. Ve třetím článku byla prokázána využitelnost Lattice Boltzmannovy metody založené na modelu fotosyntetické továrny pro případ Couette-Taylorova fotobioreaktoru. Správnost metody a volby okrajových podmínek byla ověřena porovnáním s analytickým řešením ve speciálním případě konstantního ozáření. Tento algorit-

mus byl rovněž implementován paralelně na grafické kartě. Poslední článek se zabývá optimalizací růstu mikrořas. Zahrnuje formulaci optimalizační úlohy, která integruje dohromady všechny relevantní faktory (růst mikrořas, hydrodynamiku a distribuci světla) a umožňuje jejich optimalizaci.

Předložená práce vzbuzuje následující námět k diskusi:

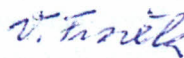
V kapitole 1.4 je představeno několik přístupů k modelování fotobioreaktorů. Nicméně některé z uvedených odkazů jsou relativně staršího data. Bylo by proto vhodné uvést získané výsledky do kontextu novějších prací například:

Olivieri, G., Salatino, P. and Marzocchella, A.: Advances in photobioreactors for intensive microalgal production: configurations, operating strategies and applications. *J. Chem. Technol. Biotechnol.*, 89: 178–195 (2014),

Bitog, J. P., Lee, I. B., Lee, C. G., Kim, K. S., Hwang, H. S., Hong, S. W., Seo, I. H., Kwon, K. S. and Mostafa E.: Application of computational fluid dynamics for modeling and designing photobioreactors for microalgae production: a review. *Comput Electron Agric* 76: 131–147 (2011).

Závěr: Jak je patrné z předložené práce, doktorand se tématem systematicky zabývá a dosáhl řady vlastních výsledků, které přispívají k rozšíření znalostí v oblasti modelování fotobioreaktorů a optimalizace jejich produkce. Většina z nich již byla publikována v časopisech s impaktním faktorem. Je rovněž autorem velké části softwaru využitého v článcích. Domnívám se, že doktorand prokázal schopnost samostatné vědecké práce i schopnost pracovat ve vědeckém týmu. Na základě posouzení disertační práce si dovoluji navrhnout, aby tato práce byla přijata k obhajobě a aby po jejím úspěšném průběhu byl ing. Václavu Štumbauerovi v souladu s platnou legislativou udělen titul Ph.D..

V Liberci 30. 11. 2016



doc. RNDr. Václav Finěk, Ph.D.

Oponentský posudek doktorské disertační práce

Autor práce: Ing. Václav Štumbauer

Název práce: Modelling, parameter estimation, optimization and control of transport and reaction processes in bioreactors

Zpracovatel posudku: doc. dr. rer. nat. ing. Jan Valdman

Předložená práce je věnována modelování fotobioreaktorů a jejich výpočetních simulací. Autor se pohybuje na pomezí fyzikálního/biofyzikálního popisu procesů, diskretizace uvažovaných modelů a následných numerických simulací na počítači. K popisu modelu používá časově závislé diferenciální rovnice, podle potřeby obyčejné nebo parciální a k urychlení numerických simulací počítá na grafické kartě na platformě CUDA.

Práce je založena na čtyřech žurnálových publikacích, na kterých autor spolupracoval se školitelem Š. Papáčkem (JČU) a se spoluautory D. Štysem, J. Jablonským (oba také JČU), C. Matonohou (ÚI AV ČR), K. Peterou (ČVUT) a B. Rehákem (ÚTIA AV ČR). První tři publikace byly již podle SCOPUSu vydány, dvě z nich v časopise Mathematical and Computer Modelling a jedna v časopise Mathematics and Computers in Simulations. U dvou publikací zveřejněných v Mathematical and Computer Modelling je uveden v seznamu publikací různý impakt faktor, jednou s hodnotou $IF=2.22$ a podruhé s hodnotou $IF=2.84$. To bych doporučoval dovysvětlit. Čtvrtá publikace, přestože je podle seznamu publikací teprve ve stavu zaslání, již vyšla jako

Chapter, ISCS 2014: Interdisciplinary Symposium on Complex Systems, Volume 14 of the series Emergence, Complexity and Computation pp 277-286 (vydáno v 2015).

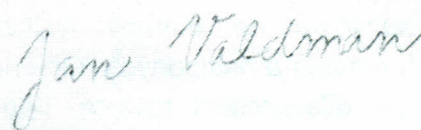
Pro úplnost je třeba dodat, že časopis Mathematical and Computer Modelling skončil svoji činnost v roce 2014. Výběrem časopisů směřuje profilování autora disertace více do oblasti aplikované matematiky než do biofyziky, která je studijním oborem autora. Myslím si, že prezentovaná problematika je aplikačně velmi zajímavá a autoři článků mohli mít vyšší ambice a své výsledky prezentovat ve specializovaných fyzikálních časopisech, které jsou obecně také více citované.

Samotná práce působí solidním dojmem, oceňuji také úvod do problematiky, který je pro další čtení užitečný. Jako 'výpočtář' shledávám velmi zajímavou aplikaci Lattice Boltzmanovy metody (LBM) a jako inovativní považuji vlastní implementaci v paralelní architektuře CUDA, k práci je dokonce přiložen výpis softwarových kódů. Zde se nabízí praktická otázka. Lze přiložený kód také někde stáhnout a spustit nebo jsou kódy přiloženy jenom pro zajímavost? Kritikou obsahu práce bud' také fakt, že disertace obsahuje sice řadu

grafů - časových závislostí, ale nenašel jsem ani jeden obrázek, který by demonstroval prostorové rozložení alespoň jedné veličiny počítané parciální diferenciální rovnice, například rychlosti. Takový obrázek by měl velkou výpovědní hodnotu a jednoduše by mohl nahradit obrázek na titulní stránce disertace, který obecně popisuje metodu LBM.

Až na drobné výtky uvedené výše je práce napsána přehledně a působí vyvrále. Bude přínosem pro čtenáře, kteří se s problematikou teprve seznamují a také pro odborníky, kteří se chtějí seznámit s konkrétními výstupy autora. Celkově hodnotím práci za zdařenou a doporučuji udělení vědeckého titulu PhD. v oboru Biofyzika na Přírodovědecké fakultě Jihočeské univerzity v Českých Budějovicích.

Ve Vídni, dne 22. 11. 2016.



doc. dr. rer. nat. ing. Jan Valdman
docent aplikované matematiky
PřF, Ústav matematiky a biomatematiky
Jihočeská Univerzita v Českých Budějovicích
Branišovská 1645/31a
České Budějovice