

Oponentský posudek disertační práce

Autor disertační práce:	Ing. Tomáš Smejkal ČVUT v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Katedra matematiky
Název disertační práce:	Výpočet fázové rovnováhy a kompoziční simulace
Studijní program:	Aplikace přírodních věd
Studijní obor:	Matematické inženýrství
Školitel:	doc. Ing. Jiří Mikyška, Ph.D.
Oponent:	Ing. Jan Hrubý, CSc., Ústav termomechaniky AV ČR

A. Věcný obsah disertační práce a originální přínos autora

Práce je věnována problematice zkoumání stability termodynamického systému tvořeného více složkami a výpočtu fázových rovnováh při různých zadáních nezávislých proměnných. Soustředí se zejména na matematické aspekty těchto problémů, algoritmizaci a testování vytvořených výpočetních programů zejména z hlediska rychlosti výpočtu. Termodynamický model je vytvořen na bázi kubických stavových rovnic, pro vodu byl použit model rozšířený o asociaci molekul.

Práce obsahuje v kapitole 2. poměrně obsáhlé a originálně pojaté odvození termodynamických vztahů, které jsou v dalších kapitolách využívány. Odvození je provedeno na základě postulátů uvedených na začátku kapitoly a pokračuje formou logických a matematických implikací. Jsou např. odvozeny podmínky fázové rovnováhy a jsou definovány termodynamické potenciály. Ačkoli tato kapitola nepřináší originální výsledky, je zjevný autorův přínos ve zpracování této látky matematickým způsobem vhodným pro využití v dalších kapitolách.

V kapitole 3. je studován problém fázové stability, tedy otázka, zda je systém stabilní (ve smyslu minimální hodnoty termodynamického potenciálu odpovídajícího daným omezujícím podmínkám) jako jednofázový, nebo se rozpadne na několik fází ve vzájemné rovnováze. Tento problém je formalizován tak, že je zavedena funkce TPD (Tangent Plane Distance) a problém je převeden na optimalizační úlohu. Jsou uvažovány případy se zadanými proměnnými a) tlak (P), teplota (T), molární množství (N), b) objem, teplota, molární množství a c) vnitřní energie (U), objem a molární množství. V literatuře lze téměř výlučně najít publikace pro úlohu PTN, ačkoli pro výpočty spojené s prouděním tekutin je relevantní specifikace UVN, případně NVT, pokud je teplota proudícího média známa. Specifikace UVN je obsahem originální publikace autora (Smejkal a Mikyška, 2017). Pro tyto (a případně další) specifikace je vyvinuta jednotná matematická formulace, která je dalším originálním přínosem autora (časopisecká publikace Smejkal a Mikyška, 2018). Dále jsou uvedeny a testovány metody numerického řešení: SSI - Successive Substitution Iteration, modifikovaná Newtonova-Raphsonova metoda, globální minimalizační metoda

založená na přístupu Branch and Bound, heuristické metody. Numerický algoritmus pro přístup Branch and Bound byl publikován autorem a školitelem (Smejkal and Mikyška 2020) a v této dizertaci je uvedena opravená algoritmicke. Pro správnou a efektivní implementaci těchto metod jsou detailně rozpracovány některé matematické podproblémy (např. modifikovaný Choleského rozklad). Značná část kapitoly je potom věnována numerickému řešení vybraných úloh, kde je uvedena kompletní specifikace úlohy a statistiky provedených výpočtů umožňující porovnání výkonu různých metod. Je studována také závislost na počtu komponent systému – některé algoritmy se ukazují být výhodné spíše pro velký počet komponent či naopak.

V kapitole 4. jsou studovány metody výpočtu fázových rovnováh. Jsou uvažovány opět specifikace PTN, VTN a UVN, pro které je zavedena jednotná formulace podle již zmíněné publikace autora a školitele. Pozornost je věnována mj. konstrukci kritérií pro ukončení iteračního výpočtu. Fázové rovnováhy jsou řešeny pomocí modifikované Newtonovy-Raphsonovy metody, je provedeno porovnání s výsledky výpočetního programu jiného pracoviště. Ve speciálních případech je pozorována velmi pomalá konvergence při specifikaci PTN.

V 5. kapitole jsou vyvinuté metody pro testování stability a výpočet fázové rovnováhy aplikovány v modelu proudění porézním médiem. Jsou definovány bilanční rovnice, rozšířený Darcyho model a okrajové a počáteční podmínky. Podrobně je dále rozebrána diskretizace úlohy pro numerické řešení. To je provedeno na čtvercové doméně v postupně zjemňující se síti. Dvoufázová oblast se objevuje uvnitř řešené domény a postupně se pohybuje. Tyto numerické výpočty proudění ve složitých systémech prokazují efektivitu vyvinutých metod a programů.

V 6. kapitole je podán souhrn práce a jejích originálních přínosů.

B. Formální aspekty práce

Práce je po formální stránce vzorovým dílem. Je psána velmi dobrou odbornou angličtinou, citace jsou uváděny úplně a správně, výsledky jsou bohatě dokumentovány ilustracemi a tabulkami. Jednotlivé kapitoly na sebe dobře navazují. Užitečný je také přehled použitého značení.

C. Drobné poznámky

- V práci se někdy používají termíny „initial mole fraction“, „initial pressure“, „initial temperature“ na místech, kde bych čekal termín „given mole fraction“ nebo „total mole fraction“, „daný tlak“, „daná teplota“.
- Práce je zaměřena výlučně na hledání stabilního stavu termodynamického systému, kterému odpovídá globální minimum odpovídajícího potenciálu. Fyzikálně se realizují i stavy metastabilní s menším počtem fází, odpovídající lokálnímu minimu relevantního potenciálu.

D. Otázka k obhajobě

- Tato otázka se týká potřebné přesnosti výpočtu. Použité stavové rovnice (Pengova-Robinsonova rovnice) jsou značně nepřesné – např. rozdíly vypočtených a experimentálních hustot dosahující 5% jsou běžné. I experimentální data mají nejistoty řekněme v řádu desetin procent. Ve srovnání s tím je požadovaná chyba výpočtů o mnoho řádů nižší, je to tedy o „přesné výpočty“

s nepřesnými čísly“, jak se někdy říká. Na druhou stranu vím z vlastní zkušenosti, že pokud se „nedoiterované“ numerické výpočty s významnou residuální chybou (byť podstatně menší než fyzikální nejistota) použijí jako součást dalších numerických výpočtů (zde proudění tekutiny), může to způsobit nestabilitu, protože takto generovaný kvazináhodný „šum“ drasticky kazí numerické derivace. Z toho hlediska je vysoká přesnost numerického výpočtu fázové rovnováhy opodstatněná. Vlastní otázka tedy spočívá v tom, zda vidíte nějakou cestu, jak tento problém řešit. Jednou cestou by bylo provést výpočet fázové rovnováhy s přesností jen o málo převyšující fyzikální přesnost, ale přesto určitým „konzistentním způsobem“ zaručujícím, že výsledky výpočtu pro nepatrně odlišné zadání budou také nepatrně odlišné. Druhou cestou by mohla být nějaká integrace numerického řešení úlohy fázové rovnováhy s numerickým řešením proudění, která by nepřesnost termodynamických výpočtů absorbovala bez fatálních následků. Máte k tomuto problému nějaké nápady či relevantní zkušenosti z provedených výpočtů?

E. Závěr

Podle mého úsudku je disertační práce předložená ing. Tomášem Smejkalem velmi kvalitní po obsahové i formální stránce. Seznam literatury obsahuje impozantní počet šesti článků, jejichž je ing. Tomáš Smejkal prvním autorem.

Závěrem konstatuji, že jsem práci prostudoval a doporučuji ji k obhajobě.

V Praze dne 20.12.2021

Jan Hrubý