# Posudek na doktorskou dizertační práci Phase Equilibrium Computation and Compositional Simulation

Ing. Tomáše Smejkala

Autor se zabývá výpočty fázové rovnováhy vícesložkových směsí a numerickým testováním jejich fázové stability. Tato problematika rozhodně patří mezi aktuální problémy současné aplikované a výpočtové matematiky. Dizertační práce je založena na šesti článcích, jejichž prvním autorem je vždy Ing. Tomáš Smejkal, i když všichni ostatní spoluautoři jsou abecedně před ním. Odtud plyne, že dizertant má největší podíl na vzniku těchto článků. Pět z nich bylo publikováno v mezinárodních časopisech (Fluid Phase Equilibria a Discrete and Continuous Dynamical Systems) a zbývající šestý článek je uveřejněn ve sborníku konference Computational Science – ICCS 2021, který vyšel v nakladatelství Springer. Přitom zásadní článek o testování fázové stability publikovaný v roce 2021 v časopise Discrete and Continuous Dynamical Systems je evidován jak americkou databází Mathematical Reviews, tak i evropskou databází Zentralblatt fuer Mathematik.

Doktorská dizertační práce je rozdělena do šesti kapitol za nimiž následují dva dodatky. V úvodní kapitole jsou vytyčeny hlavní cíle dizertace, současný stav výzkumu (State of the Art), je podán stručný přehled dosažených výsledků, je zavedeno základní značení a je nastíněn výhled do budoucnosti. Kapitoly 2–5 se zabývají rovnovážnou termodynamikou, testováním fázové stability, výpočtem fázové rovnováhy a jejím použitím na vícesložkové tekutiny. Všechna matematická tvrzení uváděná v dizertaci jsou pečlivě zformulována do pomocných lemmat a vět. Efektivita navržených algoritmů je dobře ilustrována celou řadou konkrétních numerických příkladů. Poslední šestá kapitola je věnována závěrům.

Dizertační práce má 197 stránek. Je napsána vskutku brilantní angličtinou, velice srozumitelně, mimořádně pečlivě a dobře se čte. Sazba textu i matematických výrazů je výborná. Z práce je patrné, že autor zvolil adekvátní prostředky k dosažení vytčeného cíle (včetně softwarových nástrojů). Nenalezl jsem v ní žádné překlepy. Mám jen několik drobných nepodstatných připomínek. Např. ve vztahu (2.111) jsou hranaté závorky zbytečné, anglické uvozovky na str. 89 je třeba psát takto: ‘classic’, ‘update’, schází tečka za vztahy (2.13), (2.184), (2.195) atd.

Velice bych uvítal, kdyby Ing. Tomáš Smejkal mohl během obhajoby zodpovědět následující tři dotazy:

a) Jak velký vliv má zastavovací kritérium pro modifikovanou Newtonovu-Raphsonovu iterační metodu ze str. 51–55 pro různé volby $\varepsilon$?

b) Jak se postupuje v algoritmu (3.133)–(3.136) ze str. 66, když 2 nebo více hran simplexu má stejnou délku?

c) Stručně charakterizovat podíl dizertanta na článku z Discrete Contin. Dyn. Syst. 2021, 1161–1180. Jakými konkrétními výsledky přispěl ke vzniku této práce a čím přispěli zbývající dva spoluautoři?

Ing. Smejkal jednoznačně prokázal, že je vyhraněnou vědeckou osobností. Má vynikající přehled o existující literatuře ve studovaném oboru a jeho doktorská dizertační práce má skutečně vynikající vědeckou úroveň. Za nejcennější výsledky považuji kapitolu 3 obsahující velké množství matematických vět a kapitolu 5 z řadou přesvědčivých 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. Tomáše Smejkala.

*Závěr:*

**Na základě výše uvedených skutečností vřele doporučuji, aby Ing. Tomáš Smejkal byl připuštěn k obhajobě své doktorské dizertační práce a byla mu udělena vědecká hodnost Ph.D.**

V Praze 21. října 2021

Prof. RNDr. Michal Křížek, DrSc.
Matematický ústav
Akademie věd ČR, Žitná 25
115 67 Praha 1
e-mail: krizek@math.cas.cz
tel.: 222 090 712