

**doc. Ing. Jiří MIKYŠKA, Ph.D.**  
katedra matematiky  
fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská  
ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE  
Trojanova 13  
120 00 PRAHA 2

Tel.: (420-) 224 358 553  
E-mail: jiri.mikyska@jfifi.cvut.cz

### **Posudek školitele doktorské disertační práce Ing. Tomáše Smejkal: "Phase Equilibrium Computation and Compositional Simulation"**

Disertační práce Ing. Tomáše Smejkal se zabývá výpočetními metodami rovnovážné termodynamiky směsí a aplikací těchto postupů při modelování vícefázového kompozičního proudění v porézním prostředí.

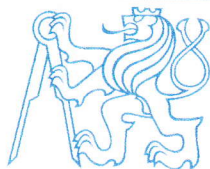
Práce je členěna do 6 kapitol. Úvodní kapitola má přehledový charakter. Autor zde vymezuje cíle práce, uvádí přehled dostupné literatury a seznamuje čtenáře s použitým značením.

Druhá kapitola je přehledem rovnovážné termodynamiky. Autor nejprve uvádí matematickou formulaci principů rovnovážné termodynamiky (nutné podmínky termodynamické rovnováhy) a definuje standardní termodynamické potenciály, které umožňují formulovat variační principy termodynamiky směsí za různých omezujících podmínek. Dále jsou zde zformulovány používané stavové rovnice (Pengova-Robinsonova a tzv. CPA rovnice popisující asociující směsi) a další užitečné termodynamické vztahy. Nakonec jsou odvozeny tvary hustot Helmholtzovy volné energie, vnitřní energie a entropie pro směsi popsané Pengovou-Robinsonovou stavovou rovnicí.

Třetí kapitola je věnována problému testování stability směsi více chemických komponent. Tato kapitola je poměrně rozsáhlá, což je dáno především množstvím autorových příspěvků v této problematice. Autor nejprve uvádí jednotnou formulaci problému testování stability vícesložkové směsi a ukazuje, že tato obecná formulace zahrnuje jako své speciální případy formulace v proměnných PTN, VTN, UVN, případně i další. Dále zde autor uvádí přehled výpočetních metod pro testování stability směsi, jmenovitě metodu SSI (subsequent substitution iteration) a modifikovanou Newtonovu metodu. Dále je zde představen algoritmus řešení soustav lineárních algebraických rovnic pocházejících z linearizace problému VTN-stability Newtonovou metodou. Dalšími autorovými příspěvky v této části jsou metoda testování fázové stability ve formulaci VTN založená na globální metodě větví a mezí (branch and bound) a různé heuristické metody. Všechny tyto metody jsou testovány a na vhodných příkladech jsou ilustrovány jejich vlastnosti.

Čtvrtá kapitola je věnována problému výpočtu rovnovážného stavu vícesložkové směsi za různých omezujících podmínek. Podobně jako v předchozí kapitole autor odvozuje jednotnou matematickou formulaci problému fázové rovnováhy a ukazuje, že tato jednotná formulace zahrnuje jako své speciální případy i formulace při předepsaném tlaku, teplotě a složení (PTN-formulace), při předepsaném objemu, teplotě a látkových množstvích jednotlivých komponent (VTN-formulace), nebo při předepsané vnitřní energii, objemu a látkových množstvích jednotlivých komponent (UVN-formulace). Dále autor prezentuje srovnání těchto tří formulací, které je možné právě díky jednotnému rámci této obecné formulace. Na základě této formulace autor navrhuje numerický algoritmus pro řešení fázové rovnováhy založený na modifikované Newtonově metodě. V kombinaci s metodami pro testování fázové stability tak odvozuje algoritmus výpočtu fázové rovnováhy v systému, u kterého





neznáme apriorně počet fází. Ilustrační příklady zahrnují výpočty v UVN formulaci, která je původním příspěvkem autora, i v ostatních formulacích.

V páté kapitole autor formuluje model transportu komponent vícesložkové směsi v porézním prostředí s využitím alternativních formulací problému fázové stability a fázové rovnováhy v proměnných VTN. Tento model je pak diskretizován s použitím smíšené hybridní metody konečných prvků pro diskretizaci tlakové rovnice a metody konečných objemů pro diskretizaci transportních rovnic. Linearizace je provedena metodou iterated-IMPEC (iterated implicit pressure explicit concentration). Na příkladech je experimentálně ověřena konvergence numerického schématu a na dalších příkladech jsou ukázány možnosti tohoto přístupu.

Práce je zakončena závěrem a několika dodatky, které shrnují použitá data a odvození některých vztahů.

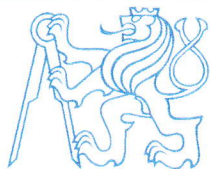
Hodnocení práce:

Jak již bylo uvedeno výše, práce je poměrně rozsáhlá, protože obsahuje řadu původních výsledků autora. Prvním příspěvkem jsou obecné formulace problému stability i problému fázové rovnováhy vícesložkové směsi, které umožňují porovnat jednotlivé formulace a navrhnout jednotný postup řešení všech těchto dílčích problémů s využitím modifikované Newtonovy metody a modifikovaného Choleskyho rozkladu, který zajišťuje konvergenci k alespoň lokálnímu minimu příslušného termodynamického potenciálu. Toto není případ metody SSI (subsequent substitution iteration), která se běžně vyskytuje v literatuře.

Dalším autorovým příspěvkem je metoda pro řešení soustav lineárních algebraických rovnic pocházejících z linearizace problému VTN-stability pomocí Newtonovy metody. Struktura hessiánu totiž umožňuje efektivní řešení výsledné soustavy pomocí opakované aplikace Shermanovy-Morrisonovy formule. Numerické experimenty prezentované v práci ukazují, že metoda se vyplatí pro směsi s 10 a více komponentami.

Všechny tyto metody však zaručují jen konvergenci k lokálnímu extrému, nikoliv ke globálnímu. V praxi se tento problém většinou řeší opakovaným výpočtem s více počátečními aproximacemi s tím, že stav je považován za stabilní, pokud pro žádnou počáteční aproximaci algoritmus nezjistí opak. Tímto postupem jsme schopni dokázat nestabilitu směsi, nemůžeme ale s jistotou potvrdit její stabilitu. Pro zaručení správnosti výsledku je třeba použít metod globální optimalizace. Metoda pro testování stability ve formulaci VTN založená na metodě větví a mezí, která tuto záruku dává, je původním příspěvkem autora. Tento postup je však výpočetně náročný, proto dále autor testoval různé heuristické přístupy a poskytuje tak porovnání různých přístupů (deterministických i heuristických) k řešení téhož problému.

Pro úplnost poznamenejme, že vyšetřování stability směsi, resp. vyšetřování rovnovážného stavu směsi při předepsaném tlaku, teplotě a chemickém složení směsi (tzv. PTN formulace) je klasická učebnicová úloha chemické termodynamiky. Kritérium PTN-stability zformuloval již Gibbs kolem roku 1875. Účinné výpočetní algoritmy pro testování PTN stability se objevují od roku 1981 v souvislosti s pracemi Michelsena a dalších. Pro aplikace v proudění směsí se však zdá přirozenější vyšetřovat stabilitu směsi při předepsaném objemu, teplotě a látkových množstvích jednotlivých komponent (tzv. VTN-formulace), případně při předepsané vnitřní energii, objemu a látkových množstvích jednotlivých komponent (tzv. UVN-formulace). Takovéto alternativní formulace



problému stability vícesložkové směsi však nebyly doposud v literatuře dostatečně popsány. Vyšetřování VTN-stability se objevuje v literatuře až od roku 2012 v souvislosti s prací naší skupiny, formulace UVN-stability a návrh prvního účinného algoritmu pro její testování je původním příspěvkem doktoranda. Ten byl také prvním, kdo použil testování stability v proměnných UVN při výpočtu fázové rovnováhy v UVN formulaci, čímž se vyřešilo několik problémů zmiňovaných v literatuře. Metoda iterated-IMPEC, použitá v páté kapitole se v literatuře objevuje až v roce 2020 v souvislosti s jednofázovým kompozičním prouděním. Autorovým příspěvkem je tedy rozšíření této metody na případ vícefázového kompozičního proudění.

S Ing. Tomášem Smejkaem na tématu spolupracuji již od jeho bakalářské práce od roku 2014. V průběhu doktorského studia doktorand navštívil spolupracující organizace - Reservoir Engineering Research Institute v Palo Alto v Kalifornii (1 týdenní pobyt) a Colorado School of Mines v Golden, Colorado (1 týdenní pobyt). Výsledky své práce autor publikoval v literatuře ve formě 6 článků v impaktovaných časopisech, 1 článku v konferenčním sborníku, další publikace je v recenzním řízení. Web of Science zaznamenává v současné době 35 citací těchto prací (26 bez autocitací). Cíl práce byl tedy jednoznačně naplněn.

Disertační práce tedy splňuje podmínky samostatné tvůrčí vědecké práce, obsahuje původní a autorem již publikované výsledky vlastní vědecké práce a je v souladu s požadavky příslušných zákonných ustanovení a zkušebního a studijního řádu ČVUT v Praze.

Z výše uvedených důvodů tedy doporučuji přijmout předloženou doktorskou disertační práci k obhajobě.

V Praze, dne 21. července 2021

doc. Ing. Jiří Mikyška, Ph.D.