



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@jfji.cvut.cz

**Posudek školitele diplomové práce Bc. Martina Jexe
"Optimalizace algoritmu větví a mezí s aplikací na testování fázové stability
vícesložkových směsí"**

V předkládané práci se autor zabývá řešením problému testování stability vícesložkových směsí. Jedná se téma kombinující poznatky z termodynamiky směsí a globální optimalizace, které nachází uplatnění při výpočtech fázových rovnováh směsí v mnoha oblastech chemického inženýrství, ale i při studiu transportu směsí látek v hlubinných rezervoárech, například při hlubinném ukládání CO_2 .

V úvodu práce autor formuluje základní stavovou rovnici a některé termodynamické vztahy, zejména odpovídající tvar hustoty Helmholtzovy energie, chemické potenciály a konečně formuluje globální kritérium stability založené na tzv. TPD funkci. To vede v závěru první kapitoly k formulaci úlohy nelineárního programování, jejímž řešením se práce zabývá.

Protože fyzikálně relevantní řešení představuje pouze takový stav, který odpovídá *globálnímu* minimu funkce TPD, je třeba k řešení úlohy použít metod globální optimalizace. Ve druhé kapitole autor popisuje metodu větví a mezí, která na rozdíl od v praxi běžně používaných metod nelineárního programování umožňuje najít skutečné globální minimum funkce. Tato metoda vyžaduje konstrukci dolních odhadů účelové funkce, které jsou zároveň konvexní. Tyto odhady jsou zkonstruovány s využitím konvexně-konkávního rozkladu obecně nekonvexní funkce TPD. Dále je popsán algoritmus dělení simplexu pomocí bisekcí a je zformulován výchozí algoritmus.

Ve třetí kapitole je tento algoritmus dále vylepšován s využitím dalších podmínek odvozených z nutných podmínek pro lokální extrém tak, aby bylo možno pokud možno co nejdříve detekovat neperspektivní podoblasti, v nichž se nemůže nacházet globální extrém. Pro formulaci dodatečných kritérií se používají konvexně-konkávní rozklad tlaku z Pengovy-Robinsonovy stavové rovnice a konvexně-konkávní rozklady chemických potenciálů. Korektní odvození a zdůvodnění těchto odhadů je původní přínos autora. V práci jsou odvozeny i optimální hodnoty ladících parametrů výsledného odhadu.

Ve čtvrté kapitole autor testuje navržené algoritmy na několika příkladech dvousložkových směsí a diskutuje výpočetní náročnost jednotlivých variant algoritmu. Je vidět, že zatímco odhady založené na konvexní relaxaci sice snižují počet iterací, ale nezlepšují celkový výpočetní čas, hrubší odhady získané pomocí tečné nadroviny dokážou v mnoha případech významně zrychlit výpočet. I s těmito vylepšeními platí, že zatímco detekce nestabilní směsi je obvykle rychlá, potvrzení stabilního stavu je výpočetně náročné.

V závěru práce student shrnuje dosažené výsledky a své zkušenosti získané testováním tohoto nového modelu.



Břehová 7 115 19 Praha 1

Student se práci průběžně velmi intenzivně věnoval, pracoval z velké míry samostatně, pravidelně se zúčastňoval konzultací, samostatně nastudoval doporučenou literaturu. Autor samostatně odvodil konvexně-konkávní rozklady příslušných funkcí a využil je ke konstrukci příslušných relaxací. Přitom našel chybu v dříve publikovaném článku. Práce tedy obsahuje opravu odhadů, které již byly publikovány v literatuře. Dále student implementoval a testoval popsané metody. Společně jsme diskutovali korektní formulaci úlohy a detaily odvození konvexně-konkávních rozkladů chemických potenciálů.

Vzhledem k výše uvedenému jednoznačně navrhuji hodnotit tuto diplomovou práci známkou **A-
výborně a doporučuji ji k obhajobě inženýrského titulu.**

V Praze, dne 11. května 2021

doc. Ing. Jiří Mikyška, Ph.D.