

## Posudek oponenta disertační práce

**Název práce:** Numerická analýza dialýzy s chemickou reakcí

**Autor práce:** Ing. Vojtěch Štěpánek

**Oponent:** doc. Ing. Petr Doleček, CSc.

**Pracoviště oponenta:** Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická,  
Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 573, 532 10 Pardubice,  
Česká republika

Difuzní dialýza patří mezi membránové procesy, které jsou jednoduché svým provedením a poměrně nenáročné na zařízení. Současně je však ve svém základním uspořádání poměrně pomalým procesem, s nízkou intenzitou transportu látek přes membránu.

Jednou z možností, jak zvýšit převod transportovaných složek přes membránu, je chemická reakce s převáděnou složkou ve stripovacím roztoku, popř. i v samotné membráně.

Důsledkem snížení koncentrace převáděné složky ve stripovacím roztoku je zvýšení hnací síly transportu.

Předložená disertační práce je teoretického charakteru. Autor se věnuje matematickému modelování procesu difuzní dialýzy doprovázenému chemickou reakcí. Vychází přitom z analogie s procesem absorpce s chemickou reakcí.

V rešeršní části autor popisuje základní pojmy z membránové dialýzy a popis transportu hmoty přes membránu. Na to navazuje úvodem do matematického modelování kontinuálních difuzních dialyzérů.

Dále se autor věnuje analogickému procesu absorpce s chemickou reakcí, přičemž rozebírá případy okamžité reakce, rychlé reakce s nadbytkem reaktivní složky a rychlé reakce obecně. Uvádí řadu publikovaných výsledků pro reakce druhého řádu, popř. pseudoprvního řádu, pro reakce nevratné i vratné.

Přístupy použité u absorpce jsou využity při modelování dialýzy s chemickou reakcí. Zde mimo jiné autor uvádí vlastní publikovaný postup analytického řešení koncentračního profilu transportované složky při lineárním profilu druhé reaktivní složky.

V praktické části si autor vytkl několik cílů.

Za prvé to bylo porovnání výsledků publikovaných přibližných řešení pro reakční faktor absorpce s nevratnou chemickou reakcí druhého řádu s jeho výsledky velmi přesných numerických simulací pro velký počet kombinací parametrů za účelem ocenění přesnosti

přibližných řešení. Vyhodnocení simulací ukázalo, že maximální relativní chyba všech studovaných přibližných řešení není větší než 10%. Autor dále navrhl modifikaci jednoho z publikovaných řešení, jehož maximální odchylka od numerických simulací je 2,2% a jde tedy o nejpřesnější přibližné řešení doposud publikované.

Druhým cílem bylo provedení numerické analýzy problému membránové dialýzy doprovázené rychlou nevratnou reakcí druhého řádu. Na základě rozsáhlého souboru výsledků simulací bylo odvozeno několik přibližných analytických řešení.

Posledním cílem bylo modelování protiproudého dialyzéru s chemickou reakcí ve stripovacím roztoku a určení vlivu několika procesních a fyzikálních parametrů na účinek dialyzéru.

Matematické modely byly vesměs ve formě obyčejných diferenciálních rovnic 2. řádu nebo soustavy rovnic 1. řádu, nelineárních z důvodu chemické reakce druhého řádu. Pro jejich numerické řešení byla použita u absorpce metoda střelby, u dialýzy potom metoda sítí.

Matematický model kontinuálního dialyzéru byl řešen metodou střelby.

Z práce je zřejmé, že autor odvedl velký kus práce při odvozování matematických modelů, tvorbě vlastních programů v jazyce Object Pascal pro jejich numerické řešení a vyhodnocení výsledků numerických simulací.

Práce je ve všech částech přehledně uspořádána a je formou i jazykově na vysoké úrovni. K práci mám jen několik, většinou formálních připomínek, které však nijak nesnižují její hodnotu.

str. 48, Obr. 2.6: Protože graf je zjevně v logaritmických souřadnicích, nemůže osa Hattova kritéria začínat na nule.

str. 58: Autor tvrdí, že Airyho funkce neexistují v exaktním tvaru. Výrazy (86), (87) jsou však exaktním vyjádřením těchto funkcí. Autor zřejmě měl na mysli, že je nelze vyjádřit v uzavřeném tvaru jen pomocí tzv. elementárních funkcí.

str. 59, odst. za rovnicí (94): v textu „analytické řešení pro koncentrační profil složky B“ má být zřejmě „složky A“.

str. 68: Specializovaný zápis metody Runge-Kutta byl veden snahou o urychlení výpočtu? Bylo by zajímavé slyšet u obhajoby, jak časově náročné výpočty byly.

str. 78, odst. pod rovnicí (148): Autor tvrdí, že lze soustavu (139)-(148) považovat za dvě samostatné soustavy rovnic pro složku A a B. Tyto rovnice jsou však provázány členy se součiny koncentrací, což je ostatně důvodem, proč je soustava řešena iteračně.

str. 91, odst. dole: Uvádí se tvrzení o nelineárních členech v podobě součinu bezrozměrných koncentrací složek A a B. Domnívám se, že v této části práce nebyly zavedeny bezrozměrné veličiny.

str. 110, odst. dole: V první větě tohoto odstavce zřejmě místo „intenzita objemového toku“ má být „intenzita látkového toku“.

Cíl disertační práce byl splněn. Práce je na vysoké úrovni a je cenným příspěvkem k dané problematice.

Proto **doporučuji** disertační práci k obhajobě.

V Pardubicích, 7. září 2020

doc. Ing. Petr Doleček, CSc.