



**Oponentský posudek disertační práce „Numerická analýza dialýzy s chemickou reakcí“
Ing. Vojtěcha Štěpánka.**

Disertační práce je věnována modelování dialýzy s chemickou reakcí. Práce je systematicky zpracovaná a jsou v ní popsány teoretické základy popisu dialýzy v řadě relevantních režimů, včetně souvislosti popisu absorpce a dialýzy s chemickou reakcí. Hlavní důraz je kladen na porovnání numerického řešení modelu dialýzy s nevratnou rychlou reakcí druhého řádu a dostupných přibližných řešení pro analogické uspořádání absorpce.

Text je členěn podle zvyklostí a napsán odborným jazykem prakticky bez překlepů (žádné jsem nenalezl), literární zdroje jsou citovány odpovídajícím způsobem. Odborná úroveň práce odpovídá současným doporučením používaným pro popis dialýzy (např. J.G. Wijmans, Journal of Membrane Science 237 (2004) 39–50).

Jako určitou slabinu práce vnímám spíše malý důraz na přímou aplikaci vyvinutých postupů na popis experimentálních dat. Vlastnosti modelů jsou však studovány s relevantními hodnotami parametrů volenými na základě dřívějších studií. Podle mého názoru disertační práce Ing. Štěpánka přispívá k rozvoji poznání v daném oboru.

Z výše uvedených důvodů doporučuji disertační práci Ing. Štěpánka k obhajobě.

Níže je uveden seznam dotazů, které jsou spíše námětem k diskusi a nesnižují kvalitu práce.

V Praze dne 10. 9. 2020

[Redacted signature block]

Dotazy k práci:

1) V oddílu 2.1.5 jsou diskutována uspořádání dialýzy popsaná v dostupné literatuře. Oddíl je zakončen větou „Vhodným nastavením parametrů procesu lze dosáhnout toho, že první efekt převáží, a tím i ke zvýšení účinnosti dialyzéru ve srovnání s prostým jednochodým uspořádáním v obou komorách.“ Podle mého názoru by bylo vhodné komentovat blíže, která z uspořádání lze považovat za nejvhodnější – bez nutnosti, aby čtenář tento konkrétní závěr musel dohledávat v literatuře.

2) V oddílu 4 je popsáno řešení diferenciálních rovnic popisujících absorpci a dialýzu s chemickými reakcemi. Postupy jsou popsány přehledně, jsou uvedeny diskretizační formule a diskutována jejich vhodnost ve vztahu k řešené úloze (výpočet reakčního faktoru a koncentračních profilů). Prosím o komentář, zda by některé výpočty bylo možné provést také s pomocí knihoven pro řešení diferenciálních rovnic dostupných v řadě počítačových algebraických systémů. Čtením práce jsem nabyl dojmu, uvedené metody byly programovány od základních početních operací.

3) V práci jsou uvažovány konstantní (střední) parametry modelů, tj. difuzního koeficientu a rozdělovacího koeficientu roztok – materiál membrány, což odpovídá běžné praxi. Například pro rozpouštění vody v kationtově výměnné membrány z polymeru Nafion je však známo, koncentrace vody rozpuštěné v polymeru závisí dosti nelineárně na aktivitě vody v okolní fázi a mění se po realizaci iontové výměny; tj. rozdělovací koeficient Ψ pro vodu je koncentračně závislý a závisí dále na protiontech vázaných na sulfoskupiny v membráně, viz např. N.H. Jalani, R. Datta, Journal of Membrane Science 264 (2005) 167–175.

Jsou navržené postupy přesného numerického řešení dialýzy použitelné také pro řešení úloh s nekonstantními parametry? Mohl by autor komentovat potenciální přínosy a úskalí vývoje modelu zahrnujícího koncentrační závislosti rozdělovacích koeficientů složek?

4) Na straně 51 je uvedeno, že „difuzní koeficient s rostoucí teplotou **zpravidla** roste“. Bylo by možné komentovat, zda existuje možnost, že difuzní koeficient při vzrůstu teploty klesne?