



Oponentský posudek PhD disertační práce

"Modelling of heterogeneous catalytic reactions in chemical reactors"

Vít Orava, Matematický ústav Karlovy Univerzity, MFF UK, Praha, 2018

Obecná charakteristika práce

Disertace se zabývá matematickým modelováním složitých chemicko-inženýrských transportně reakčních problémů. Konkrétně jde o heterogenně katalytický rozklad kyseliny mravenčí na vodík a kysličník uhličitý ve třífázovém fluidním loži (gas-liquid-solid) v tlakovém neizotermním reaktoru s fázovou přeměnou. Těžko bychom asi hledali složitější uspořádání. K řešení problému je třeba obsáhnout široké znalostní zázemí z různých oborů (reakční kinetika, termodynamika, vícefázová hydrodynamika, reaktorové inženýrství, aplikovaná matematika, numerika) a je to zadání spíše pro multidisciplinární tým odborníků, než pro jednoho studenta Matfyzu (já osobně bych se takovému úkolu raději vyhnul). Nemluvě o tom, že kromě teoretické práce (formulace modelů a jejich řešení) probíhaly také (fyzikální) experimenty na zahraničním pracovišti. Tedy téma disertace je dle mého názoru velmi náročné.

Struktura práce

Struktura práce je klasická, tedy vlastní text autora a nikoli krátký komentář k sadě publikací. Disertace je členěna do dvou částí, I a II. Díl-I obsahuje modelování založené na objemově zprůměrovaných rovnicích pro vícefázové soustavy (bulk), kdy se povrchové aspekty explicitně nerozlišují, protože to není výpočetně únosné. Jsou zde tyto kapitoly. 1-stručný úvod do úlohy, fyzikální stránka problému a reaktorové uspořádání. 2-pěkný přehled hydrodynamických sil působících na částice dispergované v tekutině, úvod do vícefázové hydrodynamiky. 3-bilanční rovnice, zákony zachování objemově vystředovaných veličin pro vícefázová kontinua v rámci Eulerovského ansatzu, obecně i konkretizovaná pro zadání práce. 4-numerické řešení modelu, simulace vícefázového toku, srovnání s experimentem. Dodatek-A, technická modelových strategií. Díl-II obsahuje modelování založené na rovnicích pro vícefázové vícesložkové soustavy, kdy povrchové jevy jsou explicitně rozlišeny (bulk + surface). Jsou zde tyto kapitoly. 5-úvodní gramotnost modelování aktivních povrchů. 6-bilance, rovnice a okrajové podmínky. 7-uzávěrové konstitutivní rovnice, které kotví abstraktní modely do reálného fyzikálního světa. Dodatek-B,C, technická modelových strategií. Seznam relevantní literatury. Práce je teoretického rázu a obsahuje mnoho složitých formulí a je místy vhodně odlehčena vitanými grafickými vstupy. Student již publikoval své výdobytky v mezinárodních časopisech.

Hodnocení práce

Aktuálnost.

Práci považuji za vysoce aktuální, protože vytváří most mezi abstraktním světem (teoretických géniů formulujících matematické modely a numerických mágů umějících tyto modely spočítat) a konkrétním světem (chemických inženýrů navrhujících reálná zařízení, kde proudí a reaguje vše, bez ohledu na teoremy o existenci a unicítě řešení NS v R^3 a jeho problémy s hladkostí a omezeností pro hodně velké Re a $t \rightarrow \infty$). Student dokázal stát jednou nohou na oblacích matematiky a druhou nohou na pevné půdě laboratorního experimentu, aniž by ho to roztrhlo vejpůl.

Metody.

V práci použité metody jsou plně adekvátní a odrážejí současný stav poznatků o modelování vícefáze.

Postupy.

Způsoby řešení problému jsou rovněž adekvátní, založené na literární rešerši, diskuzi možných přístupů, volbě těch vhodných + proveditelných, které dávají výsledky interpretovatelné a porovnatelné s experimenty.

Výsledky.

Za nejdůležitější považuji výsledek, že student v zásadě vyřešil velmi složitou úlohu. Sám se toho musel hodně naučit (neznám studijní plány Matfyzu, ale předpokládám, že vícefáze není standardní předmět) a tyto vědomosti ponechal ve své práci svým následníkům. Vyrostl kvalitní člověk a vytvořil cenné know-how.

Nové poznatky.

Nestudoval jsem detailně všechny vztahy a rovnice v práci uvedené, většina z nich není nová, jsou to dnes známé zákony zachování (bilance, symetrie) pro vícefázové a vícesložkové soustavy. Student je zvládl a použil obecné principy na řešení konkrétního problému, který mu byl přidělen. Tato metodologie se dá použít i na další úlohy. Kromě globálního popisu reaktoru (hlavní téma disertace), student aktivně provedl velkou sadu drobnějších numerických prací zaměřených na různé dílčí aspekty vícefáze, které jsou jaksí nesměle a pouze ilustrativně vloženy do různých kapitol. Vyzdvihuji zejm. studie jevu 'přidané hmoty' (added mass), který dle mé zkušenosti nepatří do běžného fyzikálního kurikula.

Rozvoj oboru.

Pokud je oborem aplikovaná matematika a matematické modelování složitých fyzikálních, chemických a popř. i biologických soustav, tak práce k jeho rozvoji přispívá tím, že poskytuje sadu teoretických nástrojů, kterými se dá konkrétní problém formálně uchopit a numericky zpracovat.

Aplikační potenciál.

Práce má zcela jasný aplikační potenciál. Uvedené modely mohou popisovat konkrétní praktické situace, včetně velmi složitých, které se vyskytují v různých reálných technologiích.

Formální zpracování.

Odpovídá teoretickému rázu práce, kde je mnoho složitých rovnic a formulí vložených do textu, myslím, že je to dobře uděláno.

Klady.

Velké množství kvalitní a technicky náročné práce při odvozování matematických modelů založených na porozumění složitých teoretických úvah.

Zápory.

Nenašel jsem významné stinné stránky. Nemám ani závažné dotazy či výrazně kritické připomínky. Drobnosti typu 'surface sensity' na str. 2 a 94 (App. A1.2) neuvádím.

Závěr

Předložená disertace prokazuje vědeckou kvalifikaci autora, který je (dle názoru oponenta) hoděn titulu PhD. Podle studijního a zkušebního řádu doktorského studijního programu prohlašuji, že jsem práci prostudoval a dospěl k závěru, že autor prokázal své předpoklady ke tvořivé vědecké práci.

Disertační práci doporučuji k obhajobě.

Marek Růžička
Oddělení vícefázových reaktorů
Ústav chemických procesů AV ČR, Praha 6

Praha, 21 srpen 2018