

Posudek oponenta disertační práce

Modelling of heterogeneous catalytic reactions in chemical reactors

Autor práce: Mgr. Vít Orava

Autor posudku (oponent): RNDr. Michal Pavelka, Ph.D.

Disertační práce se skládá ze dvou částí. V první části se autor zabývá modelováním chemického reaktoru pro rozklad kyseliny mravenčí na vodík. Využívá hluboké znalosti fyzikální chemie, teorie vícefázových směsí a CFD prostředí Comsol pro numerické řešení vzniklých rovnic. Autorovi se podařilo vytvořit realistický model daného chemického reaktoru.

Ve druhé části, kterou tvoří preprint článku, jehož je Mgr. Orava spoluautorem, je odvozena nová teorie směsí obsahující aktivní povrchy. Teorie je formulována na úrovni popisu klasické nerovnovážné termodynamiky (CIT) a podařilo se například odvodit Maxwell-Stefanovy konstitutivní vztahy včetně termodifuze. Následuje odvození bilančních rovnic pro povrchové veličiny včetně povrchové bilance entropie. Na základě povrchové produkce entropie je pak navrženo několik možných konstitutivních vztahů pro neurčené toky na povrchu. Jedna z možností (model B) je navíc kompatibilní s podmínkami pro skok plynoucími z bilančních rovnic, a má potenciál stát se významným příspěvkem k nerovnovážné termodynamice.

Jako přednosti práce vidím komplexnost použité argumentace. Autor se věnuje

- chemicko-inženýrským tématům jako modelování hydrodynamických efektů, Henryho a Raoultův zákon, azeotropa a zákon působících hmot,
- praktickým výpočetním problémům při numerické implementaci
- i teoretické problematice nerovnovážné termodynamiky směsí včetně povrchů.

Všechny tyto oblasti jsou navíc dotaženy do uspokojivých závěrů.

Jako nedostatky práce vidím překlepy, odstranitelné chyby a některé nejasné formulace. Například systematické používání obráceného znaménka u tlaku v Cauchyho tenzoru v první části působí problematicky. Více níže v otázkách pro obhajobu.

První část práce, zabývající se chemickým reaktorem pro vývoj vodíku, je vědecky aktuální hlavně díky potenciálu využití ve vodíkovém hospodářství (vodíkové palivové články v automobilech i domácnostech). Druhá část práce, zabývající se nerovnovážnou termodynamikou povrchů, přispívá do právě probíhající diskuze ve vědecké komunitě.

Zvolené postupy a metody jsou v souladu se současnou praxí nebo jsou navrženy nové metody. První část práce by se dala použít v praxi pro návrh chemických reaktorů a je zajímavá pro širokou skupinu chemických inženýrů. Druhá část práce je víceméně teoretická, ale může výhledově vést také k aplikacím, např. díky zkoumání vlivu mechanických procesů na povrchové jevy.

Student dokázal ovládnout široké spektrum vědních disciplín, samostatně si doplnil potřebné znalosti a dokázal vyřešit velké množství problémů. Práce navíc obsahuje originální výsledky, které přispívají k aktuálním vědeckým tématům. Věřím proto, že Mgr. Orava má předpoklady pro samostatnou vědeckou činnost a práci **doporučuji k obhajobě**. Zároveň však navrhuji níže uvedené otázky pro obhajobu.

Otázky pro obhajobu:

1. Respektují finální rovnice pro chemický reaktor 3.59 druhý zákon termodynamiky, tj. je splněna podmínka kladné produkce entropie?
2. Některé konstitutivní relace ve druhé části nejsou invariantní vůči operaci časové inverze, tj. přehození rychlostí všech částic. Tato operace přehodí například rychlost na minus rychlost (rychlost je lichá vůči časové inverzi), ale nezmění teplotu, tlak, koncentraci ani energii (sudé veličiny). Navierův slip, tj. rovnice 7.122 se skládá z jednoho lichého členu a jednoho sudého (levá strana) a jednoho lichého (pravá). To tedy znamená, kdybychom převedli liché členy na jednu stranu a sudý člen na druhou, že levá strana není rovna pravé, protože se nechovají stejně vůči časové inverzi. Dala by se tato nekonzistence vysvětlit nebo pochopit v širším kontextu (např. Rozšířené nerovnovážné termodynamiky)?

.....
V Praze 29.8.2018

RNDr. Michal Pavelka, Ph.D.
Odborný asistent, Matematický ústav UK