

Posudek vedoucího disertační práce.

Autor práce: **Mgr. Vít Orava**

Název práce: **Modelling of heterogeneous catalytic reactions in chemical reactors.**

Předložená práce se zabývá různými aspekty modelování heterogenních katalytických reakcí v chemických reaktorech. První část práce byla motivována účastí studenta na projektu HyForm, zaměřeného na vývoj a optimalizaci chemického reaktoru pro rozklad kyseliny mravenčí na vodík. V této části je odvozen model popisující daný termodynamický systém a pomocí softwaru Comsol je vyřešeno několik úloh které vedly na návrh určitých úprav reaktoru, které by mohly zvýšit jeho účinnost.

Druhá část práce se zabývá velice podrobným odvozením modelu směsí pro reakce s katalytickými plochami. Zde prezentované systematické odvození bilančních a konstitutivních vztahů pro reagující povrchy je užitečný a zdaleka netriviální počín.

Vít Orava se po celou dobu doktorského studia věnovala tématu ve veliké šíři. Hlavně díky účasti na projektu HyForm byl postupný vývoj práce ovlivněn interakcí se skupinou provádějící experimenty. A díky tomu se práce více zaměřila na korektní odvození komplexních modelů a zbylo méně času na jejich numerické řešení, což ovšem nijak nesnižuje užitečnost a velice dobrou úroveň práce.

Zde by mne z pohledu výpočtáře zajímal současný názor studenta, zda pro rozumné a praktické simulování odvozených modelů jsou k dispozici adekvátní numerické nástroje?

Práce je velice dobře napsána, obsahuje známé i původní výsledky, a hlavně dává kompletní pohled na odvození modelů různé složitosti pro daný problém. Student také ideálně propojil experimentální data, modelování a do určité míry i numerické výpočty a to vše pro značně složitý problém. Výsledky jednotlivých částí pak byly v průběhu studia publikovány v odborných impaktovaných časopisech (2 publikované, 1 v recenzním řízení).

Práci doporučuji k obhájení jako práci disertační.

V Praze, 9.9.2018

RNDr. Jaroslav Hron, PhD.  
Charles University,  
Faculty of Mathematics and Physics  
Mathematical Institute