

# Oponentský posudek diplomové práce

## Vít Orava: Modeling, Analysis and Computation of heterogeneous catalysis in microchannels

Tato práce sestává ze čtyř kapitol. V první kapitole autor odvozuje matematický model. Ve druhé a třetí kapitole se zabývá matematickou analýzou tohoto modelu — ve druhé kapitole dokazuje existenci mild řešení pomocí semigrupového přístupu, ve třetí kapitole existenci slabého řešení Galerkinovou metodou. Čtvrtá kapitola je věnována numerickému řešení odvozených rovnic.

K 1. kapitole mám jen pár drobných připomínek (viz níže). 2. kapitola obsahuje mnoho tvrzení, která neplatí a mnoho tvrzení, která by zasloužila podrobnější zdůvodnění (viz konkrétní připomínky níže). Navíc (vzhledem k chybám v kapitole a v appendixu) se zdá, že autor tyto podrobnosti nemá rozmyšleny (a citace neuvádí). Nutno dodat, že téma 2. kapitoly je velice obtížné a jeho řádné zpracování (spolu s dalšími třemi kapitolami) by přesahovalo možnosti diplomové práce.

Třetí kapitolu lze považovat za matematický text s jasnými argumenty (až na problémy s definicí oblasti, viz níže). Bohužel, tato část obsahuje několik významných (i když opravitelných) chyb v odhadech.

Čtvrtá kapitola se zabývá numerickým přístupem. Obsahuje popis implicitní Eulerovy metody, Newtonova algoritmu a up-wind schématu, vše velice obecně. Není zde vysvětleno, jak se tyto metody použijí v tomto konkrétním případě, popis algoritmu se omezuje na jednu větu (str. 51, „The program implementation . . .“), značení a napsání časově diskretizovaných rovnic bez rovnítek (a zřejmě ve dvou verzích, z nichž jedna měla být smazána). Následují výsledky v podobě obrázků bez jasného komentáře a tabulek, ve kterých jsou hodnoty, o kterých nikde není řečeno, co znamenají (jestli některou z hledaných veličin, či relativní chybu).

V celé práci je nadprůměrné množství překlepů, jazyková úroveň je také spíše horší. Oba tyto faktory dále snižují srozumitelnost práce.

**Shrnutí:** Práce obsahuje velké množství chyb v každé z následujících tří kategorií: 1. Nejasně formulované předpoklady vět a definic, takže není jasné, s čím pracujeme, v jaké situaci se nacházíme. 2. Faktické chyby — nerovnosti a implikace, které neplatí. 3. Chyby z nepozornosti/nedodělanost práce — rovnice, které měly být smazány, rovnice bez rovnítek, nesprávné odkazy, . . . **Z tohoto důvodu si myslím, že předložená práce nesplňuje nároky kladené na diplomovou práci.**

### Konkrétní připomínky:

- v kapitolách 1 a 3 není pořádně řečeno, pro jakou oblast se daný postup provádí, formulace jsou buď vágní (viz str. 10 nahoře), nebo jsou předpoklady neúplné (viz začátek sekce 3.1 a Note 3.1 na str. 35). Abychom měli Laplace-Beltrami operátor (dále LB) na  $\Sigma \subset \partial\Omega$ , měla by  $\Sigma$  být hladká varieta. Jinde se však tvrdí, že  $\Sigma$  sestává z částí přímek a LB operátor je pak obyčejný 2D Laplacián. K tomu by ale bylo potřeba, aby se  $\Sigma$  skládala z částí rovin (nikoli přímek) a ani pak není jasné, co s hranami. Naopak, pokud  $\Sigma$  hrany neobsahuje, je zaoblená a je potřeba mít LB operátor.

- není pořádně řečeno, co je  $\mathbf{v}$ . Většinou se píše  $\mathbf{v} \in \mathbf{V}$ , ale definice  $\mathbf{V}$  je nejasná (viz str. 18 dole). Tato definice navíc nevylučuje např.  $\mathbf{v} \equiv 0$ , což způsobuje problémy v celé druhé kapitole (operátor  $B$  s uvedeným definičním oborem není uzavřený, jak se tvrdí). Není přesně řečeno, co je  $\mathbf{v}^{in}$ .

#### Kapitola 1:

- v odvození se objevují nová písmenka, aniž by bylo řečeno, co znamenají ( $R_i$ ,  $R_i^{SO}$ ,  $V$ ,  $J_i^{tot}$ ).

- str. 10, poznámka pod čarou č. 5: Asi by mělo být „perpendicular to  $\partial\Sigma$ “.

- **str. 11**, dole: tvrdí se, že  $\int_{\Sigma} f = \int_{\Sigma} g$  implikuje  $f = g$ , což není pravda.

- str. 18: v (1.10c) chybí  $\geq 0$

#### Kapitola 2:

- těžké věci jsou prezentovány bez řádného zdůvodnění: s L-B operátorem je zacházeno, jako by to byl obyčejný Laplace (žádné citace), principy maxima pro neumannovy okrajové podmínky bez řádné citace.

- str. 24: druhá rovnost v (\*) zřejmě neplatí a ani následující výpočty nejsou v pořádku (derivace  $s'$  může neexistovat na velké množině)

- str. 24, dole: nesmyslná definice T-akretivity a následné tvrzení, které není jasné odkud plyne

- str. 29: tvrdí se, že Laplacián je uzavřený, aniž by bylo cokoli řečeno o definičním oboru.

- str. 31: tvrdí se, že  $B$  je uzavřený, ale není to pravda (s uvedeným definičním oborem). Dále není jasné, proč je  $D(B_0^*) = D(B_0)$ , proč je  $B$  akretivní na  $L^1$  a jak vypadá integrovatelná majoranta pro integrály uprostřed strany.

Appendix:

- je nekonzistentní v následujícím smyslu: Obsahuje 3 definice akretivního operátoru, aniž by bylo řečeno, že (zda) jsou ekvivalentní. Obsahuje tvrzení, která obsahují pojmy, které nejsou nikde definovány (dissipativní v Browderově smyslu,  $D_a(A)$ ). Obsahuje pojmy, které nejsou potřeba (podmínka (L1)). V některých definicích a větách se píše, že  $A$  je single-valued a v jiných ne, protože se to předpokládá automaticky, v některých chybí předpoklad linearity operátoru (protože jsou převzatá z knihy, kde se jiné operátory nevyskytují). Pojmy se používají dříve, než jsou definovány.

- některá tvrzení a definice jsou převzaté doslova, což způsobuje problémy popsané v předchozím odstavci, jiná jsou přeformulovaná a obsahují chyby:

– definice 6.3 v sobě obsahuje asi 3 věty a pojmy definované níže v appendixu

– formule (\*) na str. 68 nemá smysl, správně má být (\*\*).

– definice a poznámky k funkci Sgn

Kapitola 3:

- není řečeno, co je  $\Omega$ ,  $\Sigma$  a  $\Gamma_{in,out}$ , což způsobuje problémy s definicí operátorů na  $\Sigma$ .

- v úvodu se tvrdí, že se dokáže řešení pro systém (3.1) a pak za těch a těch podmínek řešení (1.8). Ve skutečnosti se ale dokáže řešení pro systém (3.7) a pak za silnějších podmínek než jsou uvedeny řešení (3.1) a zároveň (1.8).

- str. 36: Není pravda, že systém (3.1a) lze přepsat uvedeným způsobem. Až Note 3.2 vysvětluje, že se jedná o jiný systém, o kterém se až zpětně ukáže, že je ekvivalentní s původním. V tomto smyslu je definice řešení systému (3.1) na str. 37 poněkud zavádějící, protože se ve skutečnosti jedná o řešení systému (3.7) a nepožaduje se, aby řešení splňovalo tu vlastnost ( $\theta \in [0, 1]$ ,  $c \geq 0$ ), která garantuje ekvivalenci obou systémů. Možná je to ale jen překlep v definici, protože ve Větě 3.4 se dokazuje existence slabého řešení systému (3.7), které definované není.

- **str. 39:** v odhadech nad (3.14) by měla být  $\|c_i^m\|_{W^{1,2}}$  namísto  $L^2$  normy. Tím se odhad trochu zkomplikuje, ale lze celkem snadno opravit

- str. 40: v nerovnosti připravené na Gronwalla chybí derivace (překlep)

- str. 44: ve (3.27) chybí pravá strana, ve výrazech (3.28) chybí limity, ve (3.29) chybí  $+$  a  $[\cdot]$  (asi překlapy)

- **str. 44:** poslední odhady jsou špatně, někde musí být  $L^\infty$  norma.

- **str. 45**, dole: chybí  $(c_i(T), \varphi(T))$ , není řečeno, jaké jsou  $\varphi, \psi$
- str. 46: překlepy - v dlouhé rovnosti zmizela pravá strana původní rovnice, v řádku nad ní má být asi  $\theta_i^- < 0$
- str. 48: první řádek matematické formule měl zřejmě být vymazán, ve druhém řádku je navíc  $\Sigma$
- **str. 48**: v první nerovnosti ve formuli nad (3.36) by se zřejmě měla objevit i norma  $\|c_i^-\|_{W^{1,2}(\Omega)}$ . Jak se dostane formule (3.36)?

#### Kapitola 4:

- str. 49, první odstavec: Jak existence mild řešení na množině s hladkou hranicí numericky verifikuje numerické metody použité ve 4. kapitole?
- str. 51: rovnice neobsahují rovnítka a není jasné, jak se k nim dospělo. Také není jasné, jaký je význam  $\theta, d\theta, c, dc$ . Algoritmus by měl být lépe popsán.
- str. 53: není jasné, proč platí princip maxima pro tuto rovnici (neurčitý odkaz na Evansovu knihu o PDR)
- str. 54: Věta o validaci výsledku je nesrozumitelná.
- str. 57, 59: Co znamenají procenta v tabulce?
- str. 58, 62: má se odkazovat na Větu 3.5 nikoli na Větu (3.4)
- str. 61: nejasný popis obrázku - co je nahoře?
- str. 62: souvětí „both methods satisfy range condition for setting 1, i.e. for used settings both methods keep values in ...“ mluví v první větě o prvním nastavení, zatímco ve druhé o obou nastaveních.

V Praze dne 11. září 2013,

RNDr. Tomáš Bárta, Ph.D.