Posudek vedoucího na diplomovou práci Víta Oravy
Modeling, Analysis and Computation of heterogeneous catalysis in microchannels

Předložená diplomová práce vznikala nejdříve na Univerzitě v Darmstadtu pod vedením profesora Botheho, který také téma navrhl, a poté na MFF UK v Praze. Téma je aktuální, zajímavé a to jak z pohledu aplikací, tak z pohledu modelování a vede z pohledu teorii parciálních diferenciálních rovnic na nestandardní úlohu. Celkovým pojetím diplomová práce zasahuje do odlišných oblastí - od mechaniky směsí přes analýzu relevantní nelineární úlohy popsané systémem evolučních parciálních diferenciálních rovnic v oblasti i na hranici až po počítačové simulace.

V první kapitole se autor soustředí na popis problému (geometrie, rovnice) a motivuje strukturu nestandardních evolučních rovnic na částech hranice, kde dochází k chemickým reakcím - absorbci. Výsledný systém parciálních diferenciálních rovnic tak tvoří šest rovnic. Tři rovnice jsou uvažovány na časoprostorovém válci, kde oblast, ve které proudí předepsanou (danou) stacionární rychlostí nestlačitelná tekutina, je buď pouhý kanál nebo kanál, ve kterém jsou umístněny pevné čtyřstěny, které zvyšují účinnost chemických procesů na hranici, a tak celkovou katalýzu. Tyto lineární objemové rovnice pro *nezáporné* koncentrace zúčastněných látek jsou doplněny o *nelineární* okrajové podmínky. Navíc každé objemové rovnici odpovídá příslušná *nelineární* rovnice, uvažovaná na chemicky aktivních částech hranice. Tyto rovnice popisují vývoj koncentrace, které jsou z fyzikálních důvodů nejen *nezáporné*, ale také *menší nebo rovné jedné*. Tato omezení nejsou a priori v modelu zachycena.

Pro tuto nestandardní úlohu, kombinující rovnice v d a $(d-1)$ dimenzích (v objemu a obecně na plochách) si autor sám rozmyslel vhodnou diskretizovaci a tuto konečně-rozměrnou diskretizaci pak úspěšně naimplementoval v softwaru FreeFem+. Protože se nepodařilo zajistit ověřený testovací případ ani experimentální data, tuto sekci vnímám spíše jako ilustrativní.

Těžiště práce spočívá v matematické analýze úloh s kvadratickými nelinearitami. V kapitole dvě je pomocí teorie nelineárních semigrup studován systém modifikovaný: omezení na koncentrace je v nelinearitách zajištěno vhodným ořezáním. Krom těchto modifikací je problém zjednodušen geometricky a je studován v anuloidu, což umožňuje studovat úlohu ve třídě periodických funkcí. Je ukázána existence a jednoznačnost tzv. mild řešení, přičemž řešení jsou hledána ve třídě L^1-integrovatelných funkcí. Řešitelnost původního problému technikou semigrup provedena není. Na této části pracoval Vít Orava pod vedením prof Botheho, jak během pobytu v Darmstadtu, tak i na podzim 2012.

Třetí, z pohledu celkového vývoje diplomové práce závěrečná kapitola se zabývá nejdříve analýzou modifikované úlohy v geometrii, ve které jsou prováděny počítačové simulace. Je dokázána globální existence slabého řešení Galerkinovou metodou. Poté následuje dle mého mínění nejcennější část práce, kdy pomocí slabého principu minima/maxima pro tento modifikovaný *systém* ukázána nezápornost všech koncentrací a omezenost θ_1 a θ_2 shora jednotkou (bez omezení na velikost koeficientů úlohy) a za podmínky $\kappa_3 \geq \kappa^{re}$ je dokázáno, že podmínka $\theta_3 \leq 1$ také platí. Tedy nalezené řešení modifikované úlohy řeší i úlohy původní. Jedná se o původní výsledek.

Bohužel, Vít Orava na poslední chvíli do této části zanesl rozklad $c_i = c_{in} + c^h$, který sice úspěšně využil v konstrukci slabého řešení, avšak v této části je zbytečný. Tak autor zanesl do tvrzení Theorem 3.5 obrovské množství zbytečných chyb; důkaz je takřka nesrozumitelný. Například, k důkazu Theorem 3.5:

- Část 4 je zcela chybně, navíc se znovu dokazuje Část 1.
- Vztahy na str. 47 - $\partial_t \theta_i = \partial_t (\theta_i - 1)^+$, ... - neplatí.
- Chybí důkaz, že $\theta_i \geq 0$.

Chybné zdůvodnění konvergence dole na str. 44 se nemělo v diplomové práci objevit.

Vít Orava by měl během prezentace u obhajoby vysvětlit (v časovém limitu své prezentace), proč $c_i \geq 0$, $1 \geq \theta_i \geq 0$ a kde se přesně podmínka $\kappa_3 \geq \kappa^{re}$ objeví.

Diplomovou práci Víta Oravy doporučuji k obhajobě.

V Praze, 10. září, 2013 — Prof. RNDr. Josef Málek, DSc., CSc.