

Hodnocení vedoucího bakalářské práce

Autor/Autorka	Veronika Herianová
Název práce	Dynamické vlastnosti modelů systémů chemických reakcí
Studijní obor	Matematika a její aplikace
Vedoucí práce	RNDr. Jonáš Volek, Ph.D.

Splnění cílů práce:

- nadstandardně velmi dobře splněny s výhradami nebyly splněny

Odborný přínos práce:

- nové výsledky netradiční postupy zpracování výsledků z různých zdrojů shrnutí výsledků z různých zdrojů bez přínosu

Matematická (odborná) úroveň:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Věcné chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu přiměřený počet méně podstatné, větší množství podstatnější, větší množství závažné

Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Přístup autora k řešení práce, spolupráce s vedoucím práce:

- samostatná práce s výbornou komunikací pečlivá práce, drobné zásahy vedoucího pečlivá práce, podstatnější zásahy horší komunikace špatný přístup k práci

Slovní hodnocení a dotazy:

viz přílohu

Práci doporučuji – ~~nedoporučuji~~ uznat jako kvalifikační (nehodící se škrtněte).

Navrhuji hodnocení známkou:

velmi dobře

Datum, jméno a podpis:

3. 6. 2024

.....
RNDr. Jonáš Volek, Ph.D.
KMA FAV ZČU v Plzni

POSUDEK VEDOUcíHO BP

Dynamické vlastnosti modelů systémů chemických reakcí

Veronika Herianová

Bakalářská práce Veroniky Herianové se věnuje matematickým modelům chemických reakcí, tzv. reakční kinetice. Hlavními úkoly bylo seznámit se se základními druhy reakcí a popisem jejich dynamiky pomocí diferenciálních rovnic. Dále prozkoumat základní atributy a principy v těchto modelech přítomné a jejich zásadní důsledky pro kvalitativní chování jejich řešení. Tyto úkoly práce bezesporu naplňuje. V ideálním případě bylo také zadáním analyzovat některý zajímavý model, ve kterém se vyskytují zajímavé dynamické fenomény. Tento úkol považuji také za splněný (zejména v kapitolách 2.1 a 3), ovšem s výhradou, že očekávání byla poněkud širší.

Bakalářská práce se dělí na tři kapitoly a závěr. V úvodní kapitole autorka představuje základní druhy chemických reakcí a odvození příslušného dynamického systému popisujícího vývoj molárních koncentrací v čase. Ve druhé kapitole autorka podrobně zkoumá základní vlastnosti řešení (existenci, jednoznačnost, invarianci prvního ortantu) a roli tzv. stechiometrických tříd kompatibility, jejichž existence je důsledkem zákona zachování hmotnosti. Tyto třídy determinují další vlastnosti řešení (omezenost, maximální interval existence, monotonií a stabilitu u reakcí dvou látek atd.). Je nutno uvést, že se zde jedná o známé výsledky, které si ale autorka odvozuje vlastním přístupem, ve vlastní notaci a struktuře, zejména s ohledem na pochopení role zákona zachování. Přestože se jedná o výsledky známé, jsem přesvědčen, že zahrnutí těchto pasáží jde k dobru této práce a jsou její kvalitní součástí. Velmi kladně poté hodnotím sekci 2.1, kde autorka originálně na velmi pěkných příkladech a ilustracích porovnává základní druhy reakcí, zejména s ohledem na zmíněné stechiometrické třídy.

V kapitole 3 jsou studovány bifurkace v modelech uzavřených (platnost zákona zachování) reakcí dvou látek. Je zkoumána sedlo-uzlová bifurkace vzhledem ke zvolené stechiometrické třídě, kde se vyskytuje zajímavá verze hysterezního efektu. Dále vidličková bifurkace vzhledem k rychlostní konstantě reakce. A konečně velmi zajímavá dvouparametrická hrotová bifurkace. Oceňuji zde velmi pečlivou analýzu rovnovážných stavů a jejich stability, kde autorka často kvůli komplikovanosti výpočtů musí některé problémy řešit i za pomoci symbolických výpočtů pomocí softwaru. Bohužel je nutné zde zmínit, že některé pasáže by zasloužily ještě důkladnější analýzu a hlavně čistější a strukturovanější komentář.

Závěr práce vedle stručného shrnutí jejího obsahu popisuje možné další směry, kudy by se autorka mohla vydat při další analýze. Musím uvést, že jako vedoucího práce mě zde mrzí (a s autorkou jsme o tom často diskutovali), že se alespoň jeden zmíněný směr do práce nepovedlo zahrnout (jak uvádím i výše).

Spolupráce s Veronikou Herianovou nebyla vždy jednoduchá, ale vždy se nakonec jednalo o (alespoň mírný) posun pozitivním směrem. Velmi kladně hodnotím její pracovitost, spolehlivost a pečlivost. Také její práce na pěkných obrázkových ilustracích by měla být jistě zmíněna. V negativním smyslu musím zmínit, že u autorky velmi chybí zápal pro nějaký vlastní problém, což se projevilo právě absencí dalších zajímavých dynamických efektů v dalších modelech a také nutností podstatnějších zásahů z mé strany.

Z á v ě r :

Dle výše uvedeného uzavírám, že práce Veroniky Herianové splňuje požadavky kladené na bakalářské práce a **doporučuji** ji k obhajobě. Navrhuji její hodnocení stupněm

v e l m i d o b ř e .

V Plzni 3. června 2024

.....
RNDr. Jonáš Volek, Ph.D.

*Katedra matematiky
FAV ZČU v Plzni*