VŠCHT v Praze

Fakulta chemicko-inženýrská
Ústav matematiky

Zimní semestr 2017/2018

Domácí úlohy k Matematice pro chemické inženýry

14. září 2017

Pravidla pro vypracování

- Odevzdávat domácí cvičení je možné buď na papíře na hodinách nebo kdykoliv elektronicky mailem.
- Vhodný formát vypracování zavisí na zadání úlohy. Algoritmy preferujeme elektronicky, analytická řešení mohou být na papíře, ale za elektronickou formu budeme rádi.
- Odevzdání alespoň devíti domácích úloh (jedna úloha odpovídá jednomu nadpisu druhé úrovně) je podmínkou nutnou k udělení zápočtu. Faktická správnost odevzdaného je potom podmínkou postačující. Z každé ze šesti hlavních sekcí musí být odevzdána alespoň jedna úloha.
- Alespoň čtyři úlohy je nutné odevzdat do konce sedmého týdne semestru. Alespoň osm úloh do konce týdne čtrnáctého. Poslední úlohu je třeba odevzdat alespoň týden před písemnou částí zkoušky. Za každý započatý týden zpoždění v odevzdávání úloh Vám bude strženo 10 bodů z písemné části zkoušky.
- Na libovolnou Vámi odevzdanou úlohu můžete být dotázáni. V případě, že nebudete schopni adekvátně obhájit svůj způsob vypracování, úloha Vám bude škrtnuta.
- Když se někde neřešitelně zaseknete, je možné (a doporučované) si domluvit konzultaci.

1 Lineární algebra

1.1 Gaussova eliminace s pivotáží

Napište algoritmus v MATLABu tak, aby provedení kódu

```
n  = 5;
CC = 0;DD = 0;

for kk = 1:1e4

 A = round(5*rand(n));
 b = round(5*rand(n,1));

 A = A - diag(diag(A));

 %rank check
 if rank(A)~=n;DD=DD+1;end;

 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

 %%YOUR CODE HERE%%%%%%%%%%

 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

 % solution check
 xM = A\b;

 if round(1e3*xM)~= round(1e3*xYours);CC=CC+1;end;

end

% number of fails
disp(CC-DD);
```

vrátilo hodnotu < 100. K řešení soustavy použijte LU rozklad.

1.2 Stechiometrická matice

Uvažujme od okolí izolovaný systém, neboli systém, kde T, p, V jsou konstantní. Dynamika uvažovaného systému je popsána rovnicemi,

$$\begin{aligned} B_1 &\underset{k_1'}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} B_2 \\ B_2 &\underset{k_2'}{\overset{k_2}{\rightleftharpoons}} B_3 \\ B_3 &\underset{k_3'}{\overset{k_3}{\rightleftharpoons}} B_1. \end{aligned}$$

Systém je tzv. detailně vybilancovaný neboli

$$\frac{k_1}{k_1'} = \frac{k_2}{k_2'} = \frac{k_3}{k_3'} = 1.$$

Rychlost všech reakcí je řízena mocninnou kinetikou, takže

$$r_j(x) = k_j \prod_{i=1}^{n_S} x_i^{\nu_{ij}^L}, \quad j = 1, \dots, n_R,$$

kde n_S je počet reagujících látek, n_R je počet reakcí, r_j je $j-$tá složka sloupcového vektoru reakčních rychlostí r, x_i je koncentrace $i-$té složky a ν_{ij}^L je stechiometrický koeficient spotřeby $i-$té složky v $j-$té reakci.
Pro takto definovaný systém napište stechiometrickou matici ν a zjistěte počet lineárně nezávislých reakcí. Dále pak sestavte popis dynamiky tohoto systému ve formě

$$x' = f(x), \quad x_i' = \frac{\mathrm{d}\, x_i}{\mathrm{d}\, t}, \, i = 1, \dots, n_S, \quad f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n, \quad f = \nu r,$$

Vypočtěte Jacobiho matici zobrazení f a určete vlastní čísla této matice jestliže

$$k_1 = k_1' = k_0, \, k_2 = k_2' = 2k_0, \, k_3 = k_3' = 3k_0.$$

1.3 Vlastní čísla matice

Dokažte že,

1. pro $n = 2$ je
$$\det(A - \lambda E) = 0 \iff \lambda^2 - \mathrm{Tr} A \lambda + \det A = 0$$

2. a pro $n = 3$ je
$$\det(A - \lambda E) = 0 \iff \lambda^3 - \mathrm{Tr} A \lambda^2 + (M_{11} + M_{22} + M_{33})\lambda - \det A = 0.$$

1.4 Singulární rozklad matice

Nalezněte (ručně) singulární rozklad matice A ve tvaru $A = USV^{\mathrm{T}}$ pro matici

$$A = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 1 & 2 \\ 2 & -4 \end{bmatrix}.$$

Ověřte své řešení v programu MATLAB. Můžete použít vestavěné funkce MATLABu.

Poznámka. *Z důvodu přehlednosti normalizujte vlastní vektory matic AA^{T} a $A^{\mathrm{T}}A$ až při sestavování matic U a V.*

1.5 Řešení normálních rovnic

Nalezněte (ručně) řešení ve smyslu nejmenších čtverců soustavy $Ax = b$ pro

$$A = \begin{bmatrix} 3 & -4 & -1 \\ 4 & 3 & -2 \\ 1 & 4 & 2 \\ -4 & -3 & 1 \end{bmatrix}, \qquad b = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \\ -3 \end{bmatrix}$$

Ověřte své řešení v programu MATLAB. Z vestavěných funkcí je možné použít funkce pro transpozici matice a pro násobení matic. Algoritmus na řešení soustavy lineárních rovnic je nutné napsat vlastní.

1.6 Nelineární regrese

Pro opakovanou extrakci kyseliny (A) z organické fáze (C) do čisté vody (B) lze odvodit vztah pro výpočet relativního hmotnostního zlomku kyseliny ve vodě v i-tém extrakčním stupni

$$U_{\mathrm{A},i} = W_{\mathrm{A,F}} \frac{m_{\mathrm{C}}^i K_{\mathrm{A}}^{i-1}}{(m_{\mathrm{C}} K_{\mathrm{A}} + m_{\mathrm{B}})^i} \,.$$

Při 12ti násobné opakované extrakci vzorku čisté organické fáze, $m_{\mathrm{C}} = 100\,\mathrm{g}$, obsahující neznámé množství kyseliny 100 g čisté vody, $m_{\mathrm{B}} = 100\,\mathrm{g}$, byly stanoveny následující relativní hmotnostní zlomky kyseliny v extraktech:

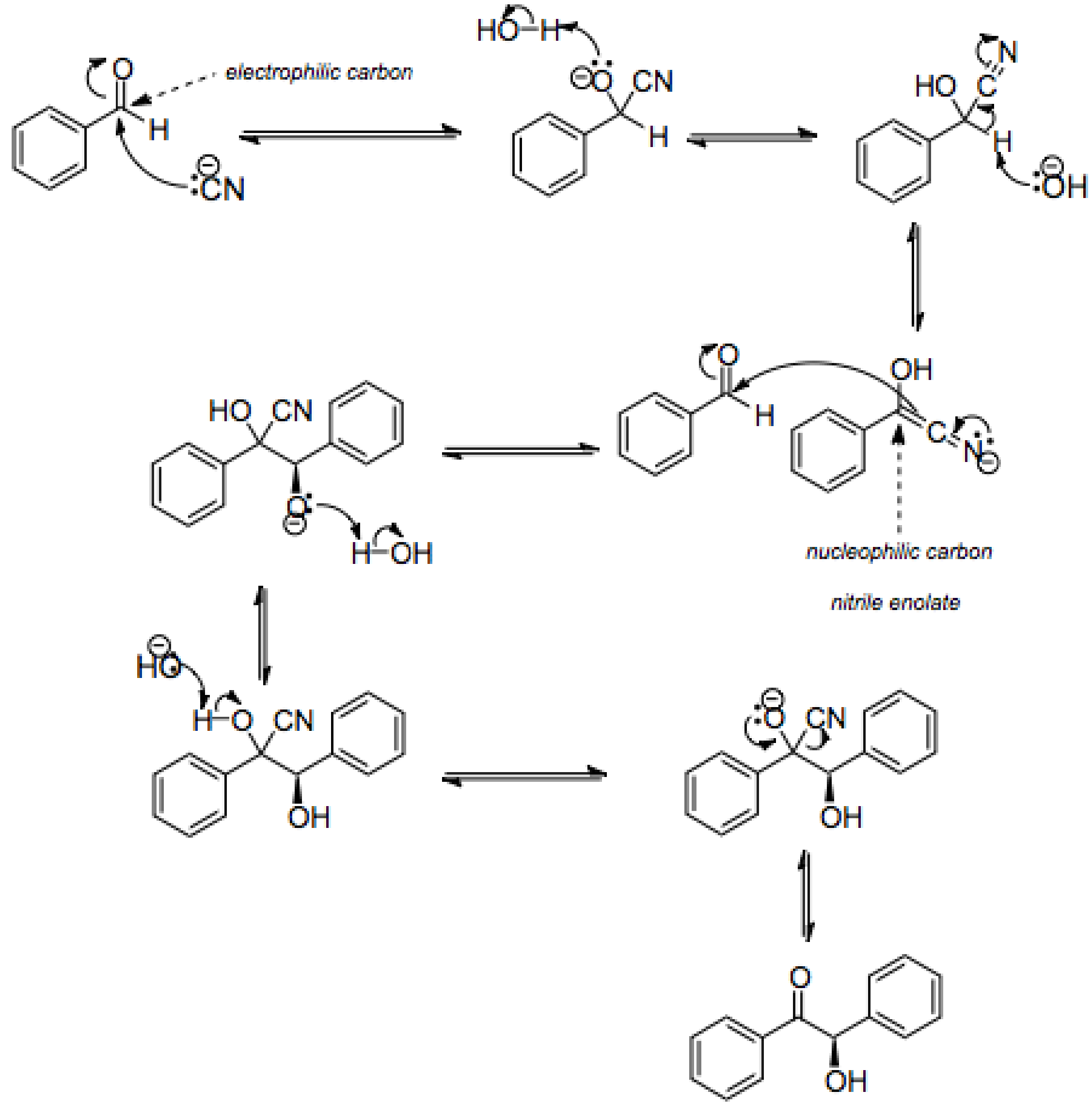
i	1	2	3	6	9	12
$U_{\mathrm{A,i}}$	0.002230	0.002100	0.001840	0.001130	0.000706	0.000526

Z naměřených dat vyhodnoťte metodou nejmenších čtverců hodnotu rozdělovací konstanty K_A a relativní hmotnostní zlomek kyseliny ve vzorku organické fáze $W_{\mathrm{A,F}}$.

Poznámka. *Výpočet si můžete usnadnit linearizací zadaného vztahu.*

1.7 Benzoinová kondenzace

Uvažujte následující mechanismus reakce,



Obrázek 1: Reakční mechanismus Benzoinové kondenzace.

1. Identifikujte všechny různé reaktanty a označte je po pořadě velkými písmeny latinské abecedy $(A, B, C, \dots)$.
2. Zapište reakční schéma

   Příklad. *Pro první krok bude platit,* $A + B \underset{k_1'}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} C + D$.
3. Pro získaný systém zapište stechiometrickou matici, ν, a zjistěte maximální počet lineárně nezávislých reakcí.
4. S využitím MATLABu nalezněte singulární rozklad matice ν a identifikujte nejdůležitější reakci mechanismu.

2 Implicitně zadané funkce

2.1 Dosazení do PDR

Dokažte, že funkce $z = f(x, y)$ definovaná implicitně rovnicí,

$$F\left(\frac{y}{x}, \frac{z}{y}\right) = 0, \quad F \in C^1(\mathbb{R}^2)$$

vyhovuje parciální diferenciální rovnici

$$x\frac{\partial z}{\partial x} + y\frac{\partial z}{\partial y} = z\,.$$

2.2 Určení rovnice tečné roviny

Určete rovnici tečné roviny elispoidu,

$$\frac{x^2}{12} + \frac{y^2}{27} + \frac{z^2}{3} - 1 = 0$$

v bodě $A = (2,\, 3,\, 1)^{\mathrm{T}}$.

Poznámka. *Vyjděte z předpokladu, že na okolí bodu A je rovnicí elipsoidu implicitně definována funkce $z = f(x, y)$.*

2.3 Výpočet parciální derivace implicitně zadané funkce

Rovnicemi

$$uz - 2\mathrm{e}^{vz} = 0, \quad u = x^2 + y^2, \quad v^2 - xy\ln v - 1 = 0$$

je dáno z jako složená funkce proměnných x, y (prostřednictvím funkcí u, v). Určete $\partial z/\partial x$ v bodě $x = 0$, $y = \mathrm{e}$ (zbývající hodnoty jsou určeny výše uvedenými rovnicemi jednoznačně).

2.4 Obecný případ věty o implicitní funkci

Mějme y_1 a y_2 zadány implicitně rovnicemi,

$$x_1\mathrm{e}^{y_2} + y_1\ln x_2 - \mathrm{e} = 0, \quad x_1y_1 + x_2\mathrm{e}^{y_2} - (2 + \mathrm{e}) = 0$$

Vypočtěte $\partial y_1/\partial x_1$ a $\partial y_2/\partial x_1$ v bodě $x_1 = 1$, $x_2 = 1$, $y_1 = 2$, $y_2 = 1$.

2.5 Výpočet Darcyho třecího faktoru

Jedním ze způsobů výpočtu Darcyho třecího faktoru, f, v hrubostěnné trubce je Colebrook–White-ova rovnice,

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = 1{,}74 - 2\log\left(\frac{\varepsilon}{3{,}71D} + \frac{18{,}7}{\mathrm{Re}\sqrt{f}}\right),$$

kde ε je hrubost trubky, D je vnitřní průměr trubky a Re je Reynoldsovo číslo problému. Uvažujme trubku o vnitřním průměru 10 cm a hrubosti vnitřní stěny 100 μm. Definuje výše uvedená rovnice na okolí bodu $(\mathrm{Re}^*; f^*) = (4998; 0{,}0376)$ implicitně funkci $f = f(\mathrm{Re})$? Jestli ano, jaká je rychlost změny Darcyho třecího faktoru v tomto bodě? Počítejte s přesností 10^{-3}.

3 Řešení DR, počáteční a okrajová úloha

3.1 Ustálená difuze s reakcí 1. řádu v kulové částici

Koncentrační profil látky a je pro případ ustálené difuze s reakcí 1. řádu probíhající v kulové částici zadán rovnicí,

$$\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}\lambda^2} + \frac{2}{\lambda}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}\lambda} - \phi^2\varphi = 0,$$

kde $\lambda = r/R$, ϕ je Thieleho modul vyjadřující pro danou geometrii poměr rychlosti reakce a intenzity difuze. Koncentrace látky a, C_a, je zbezrozměrněna pomocí koncentrace na povrchu studované částice, neboli $\varphi = C_a/C_a(R)$.
Definice studovaného problému je doplněna zadáním okrajových podmínek,

$$\begin{aligned} \lambda &= 1: \quad \varphi = 1 \\ \lambda &= 0: \quad \varphi = K \in \mathbb{R}^+. \end{aligned}$$

První podmínka plyne přímo ze zbezrozměrnění koncetrace. Druhá podmínka říká, že v centru částice koncentrace nediverguje a zaručuje fyzikální smysl nalezeného řešení.

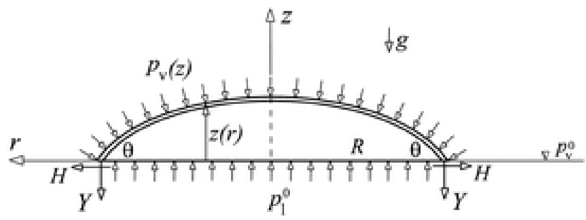
1. Nalezněte obecné řešení rovnice popisující difuzi látky v částici kulového katalyzátoru.
2. Nalezněte partikulární řešení (analytické) této rovnice vyhovující zadaným okrajovým podmínkám.
3. Nalezněte partikulární řešení (numerické) této rovnice vyhovující zadaným okrajovým podmínkám.
   (a) Řešení hledejte metodou střelby.
   (b) Jako vnější řešic (řešení soustavy nelineárních rovnic) použijte (naprogramujte) Newtonovu metodu.
   (c) Jako vnitřní řešič (řešení soustavy obyčejných diferenciálních rovnic) použijte (naprogramujte) libovolnou metodu prediktor-korektor.

3.2 Vliv tlaku a mezifázového napětí na tvar fázového rozhraní mezi dvěma tekutinami

Jestliže ve směru tečném k mezifázovému rohranní dvou tekutin nepůsobí žádné další síly, je zde výrazný vliv mezifázového napětí. Variace tvaru hladiny se projeví na změně objemu a plohy. Mezifázové rozhranní se ustálí do stavu minimální vnitřní volné energie, která je pro případ konstatní teploty a vzájemně nemísitelných fází definována vztahem,

$$U_f = \int -\Delta p \,\mathrm{d}V + \int \gamma \,\mathrm{d}A$$

Samotným hledáním minima U_f se zabývat nebudeme. Jedná o úlohu variačního počtu a podobné úlohy jsou mimo rozsah tohoto předmětu. Pro nás důležitým faktem je, že řešením Eulerovy rovnice variačního počtu obdržíme diferenciální rovnici druhého řádu. Budeme se zabývat dvěma různými případy vzniklými aplikací rozdílných okrajových podmínek.



Obrázek 2: Náčrt symetrické kapky o poloměru R. Na obrázku je schematicky nastíněn původ konstanty určující tvar kapky, $\Delta p/\gamma$.

Pro případ, že z okrajové podmínky plyne existence indiferentního směru y (podél osy y nedochází k žádným změnám tvaru fázového rozhraní, tento příklad odpovídá tenkému, uniformě širokému a osově symetrickému proužku kapaliny na horizontálním substrátu) dostaneme rovnici ve tvaru,

$$\frac{h''}{(1+h'^2)^{3/2}} = \frac{\Delta p}{\gamma}, \quad h = h(x),$$

kde $h = h(x)$ je funkce definující tloušťku vrstvy kapaliny (či jedné z tekutin), Δp je rozdíl tlaků mezi vnitřky jednotlivých fází a γ je mezifázové napětí.
Výraz na pravé straně uvažujeme konstatní. Na straně levé potom je převrácená hodnota poloměru zakřivení fázového rozhraní.
V případě, že indiferentní směr y nalézt nelze, ale z okrajových podmínek plyne cylindrická symetrie v ose z (výšková souřadnice fázového rozhranní), je užitečné problém převést do polárních souřadnic a řešení Eulerovy rovnice variačního počtu získáme ve tvaru

$$\frac{h''}{(1+h'^2)^{3/2}} + \frac{1}{h\,(1+h'^2)^{1/2}} = \frac{\Delta p}{\gamma}, \quad h = h(r)\,.$$

Zlomky na levé straně jsou převrácené hodnoty poloměrů křivosti podél dvou hlavních os osově souměrné plochy fázového rozhranní tvořené otáčením křivky $h(r)$ okolo osy z.
V obou případech hledáme řešení odpovídající počáteční podmínce,

$$\begin{aligned} x = 1 \quad &\vee \quad r = 0: \qquad h' = 0 \\ x = W \quad &\vee \quad r = R: \qquad h = 0, \end{aligned}$$

kde W je šířka proužku a R je poloměr kapky.

1. Nalezněte analytické partikulární řešení okrajové úlohy pro případ proužku kapaliny. Diferenciální rovnici řešte metodou snížení řádu a následně serapací proměnných.

2. Převeďte druhou z výše uvedených diferenciálních rovnic druhého řádu na soustavu dvou rovnic prvního řádu.

3. Nalezněte numerické řešení okrajové úlohy pro případ kapky. Využijte soustavu rovnic odvozenou v předchozím bodě a vhodně upravené okrajové podmínky. Volte hodnoty parametrů, $R = 1\,\mathrm{mm}$, $\gamma = 70\,\mathrm{mN/m}$ and $\Delta p = 60\,\mathrm{Pa}$. K řešení můžete použít libovolný software (Maple, Mathematica, MATLAB), včetně jejich vestavěných funkcí. Diskutujte kroky nutné k vyřešení problému.

4. Pro parametry $R = W = 1\,\mathrm{mm}$, $\gamma = 70\,\mathrm{mN/m}$ and $\Delta p = 60\,\mathrm{Pa}$ porovnejte tvar fázového rozhraní proužku kapaliny a kapky.

5. Zbezrozměrněte druhou uvedenou diferenciální rovnici zavedením nových proměnných, $\lambda = r/R$ a $\varphi = h\Delta p/(2\gamma)$. Nalezněte numerické řešení zbezrozměrněného problému (s vhodně upravenou okrajovou podmínkou). Převeďte problém do původních proměnných a porovnejte získané řešení s výsledky získanými v předchozích bodech zadání. Diskutujte výhody a nevýhody zbezrozměrnění problému.

3.3 Vzlínání kapaliny kapilárou

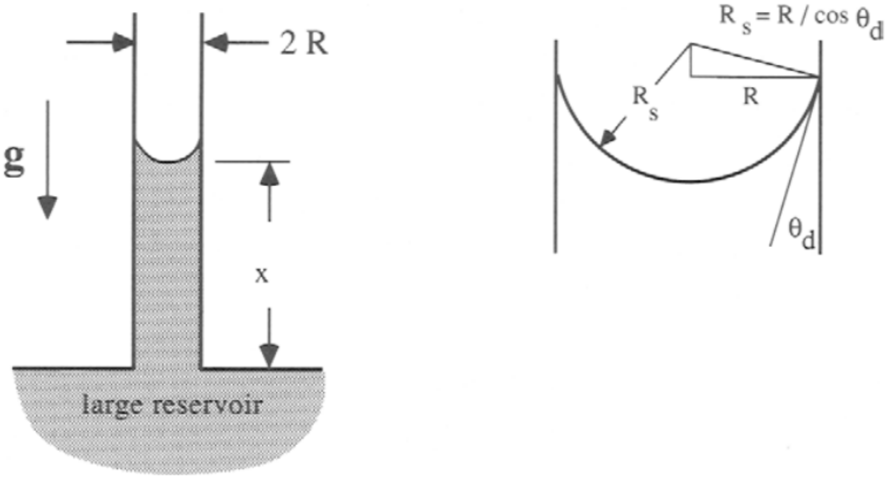
Střední rychlost pohybu kapaliny při vzlínání nekonečně dlouhou, tenkou, vertikální kapilárou lze pro předpoklad velmi pomaléhou (Poussieillova) toku, Newtonovské kapaliny a možnosti použití Young-Laplaceovy rovnice pro popis tvaru fázového rozhraní kapalina-plyn zapsat ve tvaru,

$$U = \frac{R^2 \Delta p}{8\mu x},$$

kde R je poloměr kapiláry, x je výška hladiny v kapiláře ($x = 0$ je hladina kapaliny v kontaktu s kapilárou), μ je viskozita kapaliny a Δp hnací síla vzlínání zapsaná ve formě tlakového rozdílu,

$$\Delta p = \frac{2\gamma}{R}\cos\theta_D - \rho g x,$$

kde γ je koeficient povrchového napětí kapaliny, ρ je hustota kapaliny, g je gravitační zrychlení a θ_D je dynamický kontaktní úhel mezi kapalinou a stěnou kapiláry. Hnací silou vzlínání jsou tedy povrchové interakce fázových rozhraní kapalina-plyn a kapalina kapilára. Naopak proti vzlínání působí gravitace. Grafické zobrazení situace je k dispozici na Obrázku 3.



Obrázek 3: Náčrt souřadného systému a základní značení pro vzlínání kapaliny kapilárou.

Jelikož rychlost pohybu kapaliny kapilárou můžeme také zapsat jako $\mathrm{d}x/\mathrm{d}t$, získáme z předchozího diferenciální rovnici,

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \frac{\gamma R \cos\theta_D}{4\mu x} - \frac{\rho g R^2}{8\mu}$$

a se zanedbáním vlivu gravitace potom předchozí vztah můžeme zjednodušit na

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \frac{\gamma R \cos\theta_D}{4\mu x}$$

1. Nalezněte obecné řešení rovnice pro případ se zanedbatelným vlivem gravitace ve tvaru $x = x(t)$. Nalezněte partikulární řešení pro případ $x(0) = x_0 = 0$.

2. Nalezněte obecné řešení rovnice pro případ se uvažovaným vlivem gravitace ve tvaru $t = t(x)$. Nalezněte partikulární řešení pro případ $t(0) = t_0 = 0$.

3. Volte $\rho = 1000\,\mathrm{kg/m^3}$, $\gamma = 70\,\mathrm{mN/m}$, $\theta_D = 0.05$, $R = 10^{-4}\,\mathrm{m}$, $g = 10\,\mathrm{ms^{-2}}$, $\mu = 1\,\mathrm{mPa\,s}$. Vykreslete nalezenou závislost $x = x(t)$. Do jaké výšky je kapalina schopná vyvzlínat za nekonečně dlouhou dobu?

4. Porovnejte analytické řešení pro případ konstantního dynamického kontaktního úhlu a uvažovaným vlivem gravitace s řešením numerickým pro případ závislosti dynamického kontaktního úhlu na rychlosti vzlínání ve tvaru,

$$\cos\theta_D = \cos\theta_C - 2(1 + \cos\theta_C)\left(\frac{\mu}{\gamma}\frac{\mathrm{d}\,x}{\mathrm{d}\,t}\right)^{\frac{1}{2}}$$

Porovnání proveďte graficky. Vykreslete do jednoho grafu analytické a numerické řešení a do druhého potom relativní odchylku obou řešení ve tvaru,

$$\Delta_R = \frac{|x_A - x_N|}{|x_N|} \cdot 100 \quad [\%]$$

Rovnovážný kontaktní úhel, θ_C, uvažujte roven 0 (případ dokonale smáčivé kapaliny).

Počáteční dynamický kontaktní úhel volte $\theta_D^{(0)} = 0.05$.

4 Úvod do kvalitativní teorie SODR a fázové portréty soustav linerárních a nelineárních DR

4.1 Fázový tok SODR

4.1.1 Rovnovážný stav soustavy

Věta. *Je-li x_0 rovnovážným stavem soustavy $x' = \vec{v}(x)$, pak konstantní zobrazení $\varphi_{x_0} : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$ definované vztahem*

$$\varphi_{x_0} = x_0, \qquad \forall t \in \mathbb{R},$$

je řešení této soustavy mající jednobodovou trajektorii $\gamma_{x_0} = \{x_0\}$

Dokažte předchozí větu.

4.1.2 Tok SODR – lineární

Nalezněte tok SODR $x' = Ax$ pro

$$(i) \quad A = \begin{bmatrix} -4 & 1 \\ -5 & 2 \end{bmatrix} \qquad (ii) \quad A = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \qquad (iii) \quad A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

4.1.3 Kořeny polynomu – charakteristická rovnice

Uvažujme polynom $n-$tého stupně, $P_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n$, s kořeny $P_n(x) = 0 \iff x \in \{\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n\}$.

Lemma.

$$\alpha_i \neq 0,\ i = 1, 2, \ldots, n \iff a_0 \neq 0.$$

Dokažte předchozí lemma.

4.1.4 Kanonické tvary lineárních soustav – příklad

Věta. *Budiž A reálná čtvercová matice řádu 2. Pak existuje regulární matice S (v závislosti na vlastních číslech λ_1, λ_2 matice A) taková, že matice $B = S^{-1}AS$ má jeden ze čtyř následujících tvarů:*

(i) $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$, $\lambda_1 \neq \lambda_2$

$$B = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix},$$

(ii) $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_0 \in \mathbb{R}$

$$B = \begin{bmatrix} \lambda_0 & 0 \\ 0 & \lambda_0 \end{bmatrix},$$

(iii) $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_0 \in \mathbb{R}$

$$B = \begin{bmatrix} \lambda_0 & 1 \\ 0 & \lambda_0 \end{bmatrix},$$

(iv) $\lambda_{1,2} = a \pm ib$, $a, b \in \mathbb{R}$, $b \neq 0$

$$B = \begin{bmatrix} a & -b \\ b & a \end{bmatrix}.$$

Dokažte případ *(iii)* předchozí věty. Jako nápověda může posloužit důkaz případů *(i)* a *(ii)*, který plyne přímo z definice vlastního čísla a vlastního vektoru matice. Důkaz případu *(iv)* je poněkud komplikovanější a je ponechán jako dobrovolný.

4.2 CSTR s neizotermní reakcí a recyklem

Případ míchaného průtočného reaktoru s neizotermní reakcí $A \to P$ a recyklem můžeme za předpokladu dokonale promíchavané směsi, dostatečné kapacity chladícího média, konstantního objemu reaktoru V, objemového průtoku F_0, vstupní koncentrace c_{A0}, vstupní teploty T_0, součinitele prostupu tepla U, teplosměnné plochy S, tepelné kapacity na jednotku objemu, C_P a reakčního tepla ΔH_r popsat pomocí látkové a entalpické bilance ve tvaru

$$\begin{aligned} V\frac{\mathrm{d}\,c_A}{\mathrm{d}\,t'} &= F\,(c_{Av} - c_A)) - r(c_A, T)V \\ VC_P\frac{\mathrm{d}\,T}{\mathrm{d}\,t'} &= FC_P\,(T_v - T) + r(c_A, T)(-\Delta H_r)V - US(T - T_c), \end{aligned}$$

kde F je objemový průtok na výstupu reaktoru (před odečtení průtoku recyklem, průtok recyklem $= F - F_0$), c_{Av} a T_v jsou koncentrace látky A, respektive teplota směsi na výstupu z reaktoru a T_c je teplota chladícího média.
Zbezrozměrněním problému (Holodniok, M.; Klíč, A.; Kubíček, M.; Marek, M. *Metody analýzy nelinerárních dynamických modelů*, 1st ed.; Academia: Praha, 1986.) převedeme výše uvedené rovnice na

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\,x}{\mathrm{d}\,t} &= -\Lambda x + Da(1-x)\exp\left(\frac{\theta}{1+\theta/\gamma}\right) \\ \frac{\mathrm{d}\,\theta}{\mathrm{d}\,t} &= -\Lambda\theta + DaB(1-x)\exp\left(\frac{\theta}{1+\theta/\gamma}\right) - \beta(\theta - \theta_c), \end{aligned}$$

kde x je konverze látky A, θ je bezrozměrná teplota, Λ je poměr zpětného toku, F_0/F, t je bezrozměrný čas, Da je takzvané Damköhlerovo kritérium a odpovídá bezrozměrné době zdržení, B je parametr vývoje tepla, β parametr odvodu tepla a γ je aktivační energie reakce $A \to P$.
Pro hodnoty parametrů $Da = 1$, $\gamma = 20$, $B = 10$, $\Lambda = 1$, $\theta_c = -5$, $\beta = 0.6$

1. Nalezněte pomocí Newtonovy metody jeden rovnovážný stav (x_s, θ_s) výše uvedené soustavy. Jako počáteční nástřel použijte hodnoty $x^{(0)} = 1$, $\theta^{(0)} = 4.3$. V případě, že budete problém řešit ručně, proveďte alespoň dvě iterace Newtonovy metody. V případě, že budete problém řešit programem, použijte analyticky odvozenou Jacobiho matici.

2. Klasifikujte nalezený rovnovážný stav.

3. Načrtněte fázový portrét soustavy v okolí (x_s, θ_s). Porovnejte svůj výsledek s výsledkem získaným z programu PPLANE8.

4.3 Degenerovaný problém

Uvažujme soustavu ve tvaru

$$\begin{aligned} x' &= z - x - xy^2 \\ y' &= x + xy^2 - y \\ z' &= y - z \end{aligned}$$

Fyzikálně tato soustava odpovídá zjednodušení problému dvou od okolního světa izolovaných, spojených ideálně míchaných vsádkových reaktorů. V prvním reaktoru probíhá autokatalytická reakce substrátu, A, na produkt, B. Produkt, B ale degraduje na C, ze kterého je v dalším reaktoru regenerován zpět substrát, A. Reakční schéma lze zapsat ve tvaru,

$$\begin{aligned} A + AB_2 &\xrightarrow{k_1} B \\ B &\xrightarrow{k_2} C \\ C &\xrightarrow{k_3} A \end{aligned}$$

Problém, ač hypotetický a velmi zjednodušený je zajímavý tím, že pro vhodně volené k_1, k_2, k_3 vykazuje oscilační chování.

1. Nalezněte rovnovážné stavy této soustavy, $x_s = (x_s, y_s, z_s)$. Načrtněte množinu rovnovážných stavů této soustavy do roviny $x - z$.
2. Zkonstruujte linearizaci soustavy v okolí nalezených rovnovážných stavů. Zapište matici linearizované soustavy, J_{x_s}.
3. Zapište charakteristický polynom matice J_{x_s}.
4. Vyberte si jeden konkrétné rovnovážný stav a rozhodněte, zda bude stabilní.

4.4 Řešení soustav lineárních obyčejných diferenciálních rovnic

Nalezněte obecná řešení soustav ve tvaru $x' = Ax$ pro

$$(i)\quad A = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \qquad (ii)\quad A = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 5 & 1 \end{bmatrix} \qquad (iii)\quad A = \begin{bmatrix} -2 & 5 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}$$

$$(iv)\quad A = \begin{bmatrix} 0 & -2 & 2 \\ 2 & -2 & 1 \\ -1 & 1 & 2 \end{bmatrix} (v)\quad A = \begin{bmatrix} -3 & -1 & -1 \\ 0 & 2 & -2 \\ -2 & -1 & 3 \end{bmatrix} (vi)\quad A = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & -2 \end{bmatrix}$$

$$(vii)\quad A = \begin{bmatrix} 0 & 2 & -1 \\ -3 & 1 & 1 \\ -1 & 2 & 2 \end{bmatrix} (viii)\quad A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 3 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} (ix)\quad A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ -1 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

Poznámka. *V případě hledání kořenů polynomů 3. stupně můžete použít buď příslušný vzorec nebo Hornerovo schéma (jeden z kořenů je vždy „uhádnutelný“).*

Poznámka. *Případy s maticí A typu 2×2 řešte všechny. Z případů s maticí A typu 3×3 si vyberte alespoň 3.*

Poznámka. *V případě, že tuto úlohu odevzdáváte společně s úlohou 4.5, zpracujte všechny podbody* $[(i) - (ix)]$.

Nalezněte rovnovážný stav daných soustav. Pro případ matice A typu 2×2 tento rovnovážný stav klasifikujte a načrtněte fázový portrét soustavy. V případě matice A typu 3×3 určete stabilitu nalezeného rovnovážného stavu.

4.5 Kanonické tvary lineárních soustav

Převeďte soustavy uvedené v 4.4 na jejich kanonický tvar.

1. Nalezněte vlastní čísla a vlastní vektory matice A.
2. Sestavte matici S nutnou pro transformaci souřadnic $B = S^{-1}AS$
3. Určete inverzi matice S.
4. Na jednom příkladu rozepište transformaci $B = S^{-1}AS$ včetně postupu maticového násobení.

Poznámka. *V případě hledání kořenů polynomů 3. stupně můžete použít buď příslušný vzorec nebo Hornerovo schéma (jeden z kořenů je vždy „uhádnutelný“).*

Poznámka. *Případy s maticí A typu* 2×2 *řešte všechny. Z případů s maticí A typu* 3×3 *si vyberte alespoň 3.*

Poznámka. *V případě, že tuto úlohu odevzdáváte společně s úlohou 4.4, zpracujte všechny podbody* $[(i) - (ix)]$.

4.6 Nelineární soustavy

Načrtněte fázový portrét soustav ve tvaru $x' = \vec{v}(x)$, $x = (x_1, x_2)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^2$ pro

$$(i)\ \vec{v}(x) = \begin{bmatrix} x_1(x_2 - 1) \\ x_2(x_1 - 1) \end{bmatrix} \quad (ii) \quad \vec{v}(x) = \begin{bmatrix} x_2^2 + x_1 - x_2 - 1 \\ x_1 - 1 \end{bmatrix}$$

$$(iii) \quad \vec{v}(x) = \begin{bmatrix} \sin x_2 \\ \cos x_1 \end{bmatrix} \quad (iv) \quad \vec{v}(x) = \begin{bmatrix} x_1^2 - 2x_1x_2 + x_2^2 \\ x_1x_2 - 1 \end{bmatrix}$$

Svá řešení ověřte pomocí programu PPLANE8.

Poznámka. *Z úlohy vyřešte body (i) a (ii). Z bodů (iii) a (iv) si vyberte alespoň jeden.*

5 Základy vektorové analýzy, křivky a plochy a plošný integrál

5.1 Gauss-Ostrogradského věta a plošný integrál vektorového pole

5.1.1 Odvezení rovnice pro ustálenou pro difuzi s reakcí 1. řádu v kulové částici katalyzátoru

1. Zapište bilanci látky A v obecném kontrolním objemu Ω.

   Tok přes hranici kontrolního objemu může probíhat buď difuzí nebo konvekcí.

   $$\vec{j} = -D\nabla c_A + \vec{v}c_a$$

   Reakce je prvního řádu a tedy $r = -kc_A$.

   Poznámka. *Jako návod použijte postup odvození rovnice kontinuity prováděné na cvičeních.*

   $$ACC = (IN - OUT) + SOURCE$$

   ACC je akumulace, neboli časová změna v kontrolním objemu. $(IN - OUT)$ je tok přes hranici kontrolního objemu (nezapomeňte na znaménko kvůli vnější normále). $SOURCE$ je zdrojový člen složky A. Zánik látky A reakcí v infinitezimálním objemu $\mathrm{d}V$ vyjádřete jako $r\mathrm{d}V$. Pro celý kontrolní objem je třeba integrovat přes Ω.

2. Zjednodušte výslednou parciální diferenciální rovnici pro případ,

   - Konstantního kontrolního objemu.
   - Zanedbatelné konvekce, $\vec{v} \approx \vec{0}$.
   - Ustáleného stavu, $\partial c_A/\partial t = 0$.

3. Zapište výslednou rovnici pro konkrétní případ kulové částice. V tomto případě je výhodné problém zapsat ve sférických souřadnicích, ρ, θ, γ. Konkrétní tvar operátoru ∇^2 je,

   $$\nabla^2 c_A(\rho,\theta,\gamma) = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial c_A}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial c_A}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 c_A}{\partial\gamma^2}$$

   a je užitečné si uvědomit, že vzhledem k symetrii je $\partial c_A/\partial\theta = \partial c_A/\partial\gamma = 0$.

4. *Bonus:* Zkuste zavést stejné bezrozměrné souřadnice jako v Úloze 3.1 a převést výslednou rovnici na tvar z této úlohy. Jak je potom vyjádřen Thieleho modul?

5.1.2 Výpočet plošného integrálu vektorového pole

Vypočtěte tok vektorového pole $\vec{F} = (2,-1,1)$ kuželovou plochou $z = 2\sqrt{x^2+y^2}$, $0 \le z \le 4$, která je orientována tak, že její normálové vektory svírají s kladným směrem osy z tupý úhel.

5.2 ∇ algebra a plošný integrál skalárního pole

5.2.1 ∇ algebra

Ukažte, že

$$\nabla \cdot \nabla \vec{v} \equiv \nabla^2 \vec{v} = \nabla(\nabla \cdot \vec{v}) - \nabla \times (\nabla \times \vec{v}), \quad \vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$$

5.2.2 Výpočet plošného integrálu skalárního pole

Vypočtěte $\iint_S x \, \mathrm{d}S$, kde S je horní polovina kulové plochy $z = \sqrt{1 - x^2 - y^2}$.

6 Fourierovy řady a PDR

6.1 Fourierův rozvoj

Určete Fourierovu řadu funkce f na intervalu I pro,

$$(i)\, f(x) = x^2, \quad I = \langle -\pi; \pi \rangle \quad (ii)\, f(x) = \begin{cases} 1 & : x < 0 \\ x & : x \geq 0 \end{cases} \quad I = \langle -1; 1 \rangle$$

$$(iii)\, f(x) = |x|, \quad I = \langle -\pi; \pi \rangle \quad (iv)\, f(x) = \mathrm{sgn}(x), \quad I = \langle -1; 1 \rangle$$

Vyberte si alespoň dva příklady. V případě (iv) určete druh konvergence.

6.2 PDR - Fourierova metoda

Nalezněme analytické řešení zbezrozměrněné rovnice neustáleného vedení tepla v tyči,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (x, t) \in \langle 0, 1 \rangle \times \langle 0, 1 \rangle,$$

s počáteční podmínkou

$$u(x, 0) = x^2, \; 0 < x < 1$$

a okrajovými podmínkami

$$u(0, t) = u(1, t) = 0, \; 0 < t < 1.$$

.