

OBSAH

	PŘEDMLUVA	11
1	METODY MATEMATICKÉHO MODELOVÁNÍ INŽENÝRSKÝCH PROBLÉMŮ	13
2	NUMERICKÉ ALGORITMY LINEÁRNÍ ALGEBRY	21
2.1	Finitní metody řešení soustav lineárních rovnic	21
2.1.1	Nečtvercové systémy	22
2.1.2	Stabilita matic	23
2.1.3	Gaussova eliminace	26
2.1.4	Výpočet inverzní matice	30
2.1.5	Systémy s tridiagonální maticí	31
2.2	Charakteristický polynom — vlastní čísla matic	32
2.3	Iterační a relaxační metody řešení soustav lineárních rovnic	36
2.3.1	Metoda postupných aproximací	37
2.3.2	Gaussova-Seidelova metoda	38
2.3.3	Relaxační metody	39
2.4	Výpočet hmotnostních bilancí	41
2.5	Výpočet separačních zařízení	42
2.6	Příklady	43
3	NUMERICKÉ ŘEŠENÍ NELINEÁRNÍCH ROVNIC	45
3.1	Řešení rovnic o jedné neznámé	45
3.1.1	Metoda půlení intervalu a metoda sečen	47
3.1.2	Newtonova metoda	49
3.1.3	Čebyševovy iterační metody	50
3.1.4	Metoda tečných hyperbol	51
3.1.5	Metoda postupné zpětné interpolace	54
3.2	Řešení soustav nelineárních rovnic	56
3.2.1	Newtonova metoda	57
3.2.2	Metoda tečných hyperbol	59
3.2.3	Zobecněná metoda sečen — Warnerovo schéma	61
3.2.4	Gradientní metoda	64
3.2.5	Metody vneseného parametru	65
3.2.6	Velké systémy se speciální strukturou	69
3.3	Řešení algebraických rovnic	71
3.3.1	Výpočet kořenů algebraické rovnice	73
3.3.1.1	Linova iterace	73
3.3.1.2	Linova-Bairstowova metoda	74
3.4	Výpočet bodu varu směsi daného složení	76
3.5	Výpočet koncentračních a teplotních polí v rektifikační koloně	78
3.6	Výpočet složitých chemických rovnováh	80
3.7	Výpočet stacionárních stavů v systému míchaných reaktorů	81
3.8	Příklady	82
4	INTERPOLOVÁNÍ, NUMERICKÉ DERIVOVÁNÍ A INTEGROVÁNÍ	90
4.1	Formulace úlohy interpolování	90

4.2	Lagrangeův interpolační polynom	91
4.2.1	Aitkenovo interpolační schéma	92
4.2.2	Metoda neurčitých koeficientů	93
4.3	Diferenční formule	93
4.3.1	Diferenční formule z ekvidistantních uzlů	94
4.3.2	Metoda neurčitých koeficientů	94
4.3.3	Richardsonova extrapolace	97
4.4	Kvadratické formule	98
4.4.1	Ekvidistantní uzly — Newtonovy–Cotesovy vzorce	98
4.4.2	Metoda neurčitých koeficientů	100
4.4.3	Kubaturní formule	101
4.5	Interpolování v závislosti efektivního faktoru na Thieleho modulu v úloze neizotermické vnitřní difúze	102
4.6	Výpočet diferenciální destilace	103
4.7	Příklady	104
5	NUMERICKÉ ŘEŠENÍ OBYČEJNÝCH DIFERENCIÁLNÍCH ROVNIC — POČÁTEČNÍ ÚLOHA	108
5.1	Eulerova metoda a metody Taylorova rozvoje	109
5.2	Rungovy–Kuttovy metody	112
5.3	Víceřádkové metody	117
5.3.1	Adamovy formule	119
5.3.2	Problém startovacích hodnot	120
5.4	Integrace podél oblouku	121
5.5	Numerické metody pro systémy „stiff“	123
5.5.1	Implicitní jednokrokové metody	125
5.5.2	Explicitní metoda 2. řádu	127
5.6	Výpočet teplotních a koncentračních polí v trubkových neizotermických reaktorech	130
5.7	Dynamické chování míchaného reaktoru — systém s rozdílnými časovými konstantami	131
5.8	Výpočet vícesložkové vsádkové destilace	133
5.9	Příklady	135
6	OKRAJOVÁ ÚLOHA PRO OBYČEJNÉ DIFERENCIÁLNÍ ROVNICE	140
6.1	Okrajová úloha pro lineární rovnice	140
6.1.1	Konstrukce diferenční analogie	141
6.1.2	Převedení na počáteční úlohu	145
6.1.3	Nelineární okrajové podmínky	148
6.2	Okrajová úloha pro nelineární rovnice	149
6.2.1	Diferenční metody řešení	149
6.2.2	Kvazilinearizace	152
6.2.3	Metody převedení na počáteční úlohu — metody střelby	154
6.2.3.1	Problém 1. řádu	156
6.2.3.2	Problém vyššího řádu	157
6.3	Řešení adiabatického trubkového reaktoru s podélným promícháváním	159
6.4	Izotermická a neizotermická vnitřní difúze v zrně katalyzátoru	161
6.5	Axiální sdílení hmoty a tepla v trubkovém reaktoru	162
6.6	Neadiabatický trubkový reaktor s podélným promícháváním. Víceznačná řešení	164
6.7	Trubkový reaktor s pístovým tokem a recyklem	168
6.8	Příklady	168
7	NUMERICKÉ ŘEŠENÍ INTEGRÁLNÍCH A INTEGRODIFERENCIÁLNÍCH ROVNIC	170
7.1	Lineární integrální rovnice	170

7.2	Nelineární integrální rovnice	172
7.3	Integro-diferenciální rovnice	173
7.4	Trubkový reaktor a sdílení tepla radiací	175
7.5	Příklady	177
8	NUMERICKÉ ŘEŠENÍ PARCIÁLNÍCH DIFERENCIÁLNÍCH ROVNIC PARABOLICKÉHO TYPU	178
8.1	Kanonický tvar rovnic druhého řádu s dvěma nezávisle proměnnými	178
8.2	Numerické řešení parabolických rovnic s dvěma nezávisle proměnnými	180
8.2.1	Metody sítí pro lineární úlohy	181
8.2.1.1	Jednoduchá explicitní formule	181
8.2.1.2	Stabilita diferenčního schématu	184
8.2.1.3	Konvergence numerického řešení	188
8.2.1.4	Jednoduchá implicitní formule	189
8.2.1.5	Srovnání explicitních a implicitních metod. Střídavě explicitní a implicitní metoda	192
8.2.1.6	Sférické a cylindrické souřadnice. Vliv členů nižšího řádu na stabilitu	194
8.2.1.7	Víceokrové metody	197
8.2.1.8	Náhrada okrajových podmínek	200
8.2.1.9	Metody zvýšené přesnosti	203
8.2.1.10	Systémy lineárních parabolických rovnic	209
8.2.2	Metody sítí pro nelineární úlohy	210
8.2.2.1	Jednoduchá explicitní metoda	211
8.2.2.2	Metoda jednoduché linearizace	212
8.2.2.3	Extrapolací techniky	213
8.2.2.4	Techniky „predictor–corrector“	213
8.2.2.5	Newtonova metoda	214
8.2.2.6	Metody zvýšené přesnosti	215
8.2.2.7	Automatická regulace časového kroku	216
8.2.3	Metoda přímek	217
8.3	Numerické řešení parabolických rovnic s třemi nezávisle proměnnými	220
8.4	Neizotermická vnitřní difúze v částici porézního katalyzátoru. Problematika adaptivní sítě	225
8.5	Nestacionární popis izotermického trubkového reaktoru s podélným promícháváním	228
8.6	Neizotermicky–neadiabatický trubkový reaktor s podélným promícháváním	231
8.7	Sdílení hmoty a tepla v trubkovém neizotermicky–neadiabatickém reaktoru s radiálním profilem teploty a koncentrace	232
8.8	Nestacionární vnitřní difúze ve čtvercové desce katalyzátoru	233
8.9	Příklady	235
9	NUMERICKÉ ŘEŠENÍ ELIPTICKÝCH PARCIÁLNÍCH ROVNIC	241
9.1	Lineární eliptické rovnice ve dvou dimenzích	241
9.1.1	Metody řešení systémů diferenčních rovnic	243
9.1.1.1	Bodově iterační metody	243
9.1.1.2	Blokově iterační metody	245
9.1.2	Náhrada okrajových podmínek	246
9.1.3	Přesnější náhrady	248
9.2	Nelineární eliptické rovnice ve dvou dimenzích	250
9.2.1	Metoda postupných aproximací	250
9.2.2	Newtonova metoda	251
9.2.3	Postupné zjemňování sítě	253
9.3	Vedení tepla ve čtvercové desce	253
9.4	Stacionární vnitřní difúze v kulové částici katalyzátoru	255
9.5	Metoda přímek pro trubkový reaktor s axiálním i radiálním promícháváním	259
9.6	Příklady	260

10	NUMERICKÉ ŘEŠENÍ HYPERBOLICKÝCH ROVNIC	262
10.1	Metoda charakteristik pro hyperbolickou rovnici druhého řádu	262
10.2	Metoda charakteristik pro systém hyperbolických rovnic prvního řádu	266
10.3	Diferenční metody pro hyperbolické rovnice druhého řádu	269
10.4	Diferenční metody pro hyperbolické rovnice prvního řádu	271
10.5	Dynamické chování trubkového reaktoru s recyklem	273
10.6	Stacionární chování reaktoru s křížovou výměnou tepla	275
10.7	Příklady	276
11	NUMERICKÉ ŘEŠENÍ ÚLOH S POHYBLIVÝM A NEZNÁMÝM ROZHRANÍM	277
11.1	Úlohy s pohyblivým rozhraním	277
11.2	Numerické řešení úloh s pohyblivým rozhraním	279
11.2.1	Explicitní diferenční metoda	279
11.2.2	Implicitní diferenční metoda	280
11.2.3	Metoda přímek	281
11.2.4	Řešení složitějších úloh s pohyblivým rozhraním	281
11.3	Úlohy s neznámým rozhraním. Prosakování vody porézní přepážkou	282
11.4	Příklady	286
12	NUMERICKÉ METODY ŘEŠENÍ PROBLÉMŮ MULTIPLICIT A PARAMETRICKÉ STUDIE	287
12.1	Dynamické systémy se soustředěnými a rozloženými parametry	287
12.2	Výpočet stacionárních řešení dynamických systémů	289
12.3	Závislost stacionárních řešení na parametru	290
12.4	Výpočet větvicích bodů, reálné bifurkace	294
12.5	Bifurkační diagram	299
12.6	Parametrická studie neizotermicky-neadiabatického trubkového reaktoru	300
12.7	Příklady	304
13	METODY VYŠETŘOVÁNÍ DYNAMIKY A STABILITY CHEMICKOINŽENÝRSKÝCH MODELŮ	307
13.1	Stabilita stacionárních stavů dynamických systémů	307
13.2	Výpočet bodů komplexní bifurkace, vznik periodických režimů	309
13.3	Úplný bifurkační diagram	312
13.4	Parametrická studie kaskády dvou průtočných míchaných reaktorů s recyklem	313
13.5	Příklady	318
14	VYHODNOCOVÁNÍ EXPERIMENTÁLNÍCH DAT	320
14.1	Výběr účelové funkce	320
14.2	Lineární regrese	324
14.3	Linearizovaná regrese	326
14.4	Kvazilinearizovaná regrese	327
14.5	Vyhodnocování modelu pro oxidaci CO s adsorpční kinetikou. Diferenciální data	328
14.6	Nelineární regrese. Gaussova–Newtonova metoda	331
14.7	Jednoduché formule s jedním nelineárním parametrem	333
14.8	Vyhodnocování parametrů v obyčejných diferenciálních rovnicích. Integrální data	334
14.9	Vyhodnocování parametrů v parciálních diferenciálních rovnicích. Vyhodnocování parametrů v jednorozměrném disperzním modelu	335
14.9.1	Model procesu a okrajové podmínky	336
14.9.2	Numerická metoda řešení a diskuse výsledků	338
14.10	Příklady	340
15	LITERATURA	344
15.1	Učebnice numerické matematiky	344
8 15.2	Monografie věnované matematickému modelování a výpočetním metodám	346

15.3	Speciální literatura k jednotlivým kapitolám	346
15.4	Přehled matematických časopisů orientovaných numericky a aplikovaně.	351
15.5	Přehled inženýrských, fyzikálních a chemickoinženýrských časopisů orientovaných na matematické modelování	351
	Rejstřík	353

