

OBSAH

	Úvod	9
A	OBECNÁ ČÁST	11
1	Výpočetní metody a počítače	11
1.1	Obecné vývojové trendy výpočetních metod	11
1.2	Kam vedou některé základní operace na počítači a jakých se dopouštíme chyb	12
1.2.1	Numerické derivování, integrování a interpolace	13
1.2.2	Řešení soustav lineárních rovnic	15
1.2.3	Řešení nelineárních rovnic a soustav	16
1.2.4	Numerické řešení obyčejných diferenciálních rovnic	16
1.2.5	Numerické řešení parciálních diferenciálních rovnic	17
1.2.6	Stanovení konstant empirické křivky	17
1.3	Zpětný vliv existence počítačů	17
1.4	Stručný přehled hardware	18
1.4.1	Vývoj spolupráce v rámci RVHP	20
1.4.2	Počítače JSEP — přehled	21
1.5	Programovací jazyky a software	22
1.5.1	Historie	22
1.5.2	Současný stav	23
1.5.3	Problémy kolem software	24
2	Formulace problémů	28
2.1	Od fyzikální skutečnosti k programu na počítači	28
2.1.1	Fyzikální realita a její modely	28
2.1.2	Vývoj modelování	30
2.2	Přehled vztahů, které máme k dispozici	31
2.2.1	Inženýr musí umět zjednodušovat	31
2.2.2	... a také zobecňovat	33
2.2.3	S čím začít?	34
2.2.4	Souřadnicové a znaménkové problémy	35
2.2.5	Rychlostní rovnice	38
2.2.6	Látkové a entalpické bilance	40
2.2.7	Formulace problémů v diferenciálním tvaru	42
2.3	Převádění vztahů na bezrozměrný tvar	49
2.3.1	Bezrozměrné parametry	49
2.3.2	Vzorový příklad	49
2.3.3	Obecný postup	52

2.3.4	Odvození vztahů pro vyšší derivace bezrozměrných proměnných	53
2.3.5	Volba relativních jednotek míry a jednoznačnost převodu	54
3	Algoritmizace	55
3.1	Význam a důležitost algoritmizace	55
3.2	Pojem algoritmu	56
3.3	Vývojové diagramy	57
3.4	Základní příklady	57
3.5	Iterační algoritmy	64
3.5.1	Definice a příklad iteračního algoritmu	64
3.5.2	Vlastnosti iteračních procesů	65
3.5.3	Programování iteračního algoritmu, iterační chyba	71
3.5.4	Algoritmus pro rekurentní vzorec; šíření chyby u nestabilního výpočtu	74
3.6	Jak hodnotit algoritmus	78
3.7	Další příklady	80
3.7.1	Hledání cesty v konečném bludišti	80
3.7.2	Příklad dam na šachovnici a další příklady	81
B	SYSTÉMOVÁ ČÁST	87
4	Prvek ve stacionárním stavu	88
4.1	Přehled problematiky	88
4.2	Zjišťování průběhu funkce	88
4.3	Hledání kořenů nelineární rovnice	93
4.3.1	Separace kořenů	93
4.3.2	Metoda půlení intervalu a její modifikace	95
4.3.3	Metoda regula falsi	102
4.3.4	Metoda sečen	107
4.3.5	Metoda Newtonova	109
4.4	Aproximace dat a funkcí	117
4.4.1	Přehled problematiky	117
4.4.2	Aproximace polynomem na bodové řadě	119
4.4.3	Aproximace polynomem na intervalu	126
4.4.4	Aproximace ortogonálními polynomy	128
4.4.5	Aproximace exponenciálami	134
4.4.6	Minimalizace maximální odchylky (Čebyševova aproximace)	138
5	Prvek — systém o jednom stupni volnosti — závislý na čase	148
5.1	Zavedení definic k popisu chování systému	148
5.2	Dynamické systémy 1. řádu	149
5.3	Dynamické systémy 2. řádu	158
5.4	Numerická integrace	168
5.4.1	Obecně o postupu výpočtu a jeho přesnosti. Význam symbolu $O(h^n)$	168
5.4.2	Přehled některých „ekvidistantních“ vzorců a příklady	172
5.4.3	Rombergova integrace	176
5.4.4	Gaussova integrace	178
5.5	Numerické derivování.	183

5.6	Numerické řešení obyčejných diferenciálních rovnic	184
5.6.1	Pojmy a definice. Zásady řešení	184
5.6.2	Odvození základních formulí pro víceukrové metody	186
5.6.3	Přesnost výpočtu, jeho konvergence a stabilita	189
5.6.4	Přehled víceukrových metod	198
5.6.5	Skupina metod Rungových–Kuttových	204
5.6.6	Výpočetní problematika	208
5.7	Další příklady	214
6	Systémy stejných prvků	229
6.1	Konkrétní systémy, vedoucí na soustavy diferenčních rovnic	229
6.2	Diferenční rovnice a jejich řešení	230
6.2.1	Základní pojmy a definice	230
6.2.2	Řešení lineárních rovnic s konstantními koeficienty	232
6.3	Některé ukázky technologických výpočtů	239
6.3.1	Protiproudá extrakční soustava. Rovnovážný vztah lineární	239
6.3.2	Rektifikační kolona. Nelineární rovnovážná závislost tvaru $y = \alpha x / (1 + \alpha x - x)$	246
6.3.3	Stupňové systémy se složitějším vzájemným pohybem proudů	248
6.3.4	Poznámky k jiným než teoretickým modelům stupně	251
7	Systém různých prvků ve stacionárním stavu	253
7.1	Definice. Charakteristické příklady	253
7.2	Výpočetní problematika I: řešení soustavy lineárních rovnic	261
7.2.1	Metody řešení soustavy lineárních rovnic	261
7.2.2	Základní pojmy z maticového počtu, věta Frobeniova	261
7.2.3	Finitní metody řešení soustav lineárních rovnic	267
7.2.3.1	Gaussova eliminační metoda	269
7.2.3.2	Choleského eliminační metoda pro symetrickou matici	272
7.2.3.3	Finitní metody inverze matice	275
7.2.4	Iterační metody řešení rovnic	278
7.2.4.1	Postup jednoduchého číselného výpočtu	278
7.2.4.2	Obecné vlastnosti iteračního procesu	279
7.2.4.3	Iterační metody Ritzova a Gaussova–Seidelova	282
7.2.4.4	Rozbor iteračního procesu pomocí diferenčních rovnic	283
7.2.5	Podmíněnost matic	285
7.2.6	Stanovení vlastních čísel matice	287
7.3	Některé aplikace	292
7.4	Výpočetní problematika II: řešení soustav nelineárních rovnic	296
7.5	Dekompozice složitějších nelineárních soustav. Látková bilance chemického systému	303
8	Soustava prvků závislých na čase	310
8.1	Tématický přehled	310
8.2	Lineární soustavy obyčejných diferenciálních rovnic	310
8.2.1	Příklady z reakční kinetiky	310
8.2.2	Příklady z oblasti kmitů soustav o n stupních volnosti	317

8.2.3	Výpočet stupňové extrakce	324
8.3	Numerické řešení soustav nelineárních rovnic	326
8.3.1	Typické řešené příklady	326
9	Spojité systém ve stacionárním stavu	339
9.1	Systémy vedoucí na řešení okrajového problému	339
9.2	Typické příklady a formulace rovnic je popisujících	340
9.3	Výpočetní problematika I: jednorozměrné sítě	349
9.3.1	Obecná formulace úlohy	349
9.3.2	Diferenční metoda řešení okrajové úlohy	350
9.3.3	Richardsonova extrapolace	354
9.3.4	Řešení vzorového příkladu	355
9.4	Výpočetní problematika II: metody vážených reziduí	358
9.4.1	Obecná teorie metod	358
9.4.2	Kolokační metoda	359
9.4.3	Metoda nejmenších čtverců	360
9.4.4	Řešení vzorového příkladu	361
9.5	Přímé diferenční vyjádření spojitých systémů	367
9.5.1	Základní úvahy	367
9.5.2	Řešení vzorových příkladů	367
9.6	Výpočetní problematika III: vícerozměrné sítě	383
9.6.1	Parciální diferenciální rovnice a jejich řešení; definice	383
9.6.2	Základní typy okrajových podmínek a problémy spojené s vytvářením sítě	386
9.6.3	Praktické provedení diskretizace	388
9.6.4	Interpolace na okraji pole	392
9.6.5	Řešení soustavy rovnic	393
9.6.6	Ustálené vedení tepla v systému složitějšího tvaru	400
10	Spojité systém proměnný v čase	407
10.1	Přehled kapitoly	407
10.2	Typické případy a formulace rovnic je popisujících	407
10.3	Výpočetní problematika I: sítě pro parabolické diferenciální rovnice	410
10.3.1	Formulace řešené rovnice	410
10.3.2	Základní diferenční schéma, jeho stabilita a konvergence	411
10.3.3	Další výpočetní schémata	415
10.3.4	Příklad řešení rovnice	416
10.4	Výpočetní problematika II: sítě pro hyperbolické rovnice	423
10.5	Výpočetní problematika III: metoda přímek	425
10.6	Přímé diferenční vyjádření spojitých vícerozměrných systémů	426
	Literatura	429
	Seznam častěji použitých symbolů a významů fyzikálně chemických veličin a jednotek	433
	Přehled základních matematických symbolů a označení	438
	Rejstřík	441