

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 | Kvadraturní 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 | Adamsovy formule | 119 |
| 5.3.2 | Problém startovacích hodnot | 120 |
| 5.4 | Integrace podél obloku | 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 michaného reaktoru – systém s rozdílnými časovými konstantami | 131 |
| 5.8 | Výpočet vicesložkové 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 stěbely | 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. Víceznáčná řešení | 164 |
| 6.7 | Trubkový reaktor s pístovým tokem a recyklem | 168 |
| 6.8 | Příklady | 168 |
| 7 | NUMERICKÉ ŘEŠENÍ INTEGRÁLNÍCH A INTEGRODIFERENCIÁLNÍCH ROVNIC | 170 |
| 6 7.1 | Lineární integrální rovnice | 170 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 7.2 | Nelineární integrální rovnice | 172 |
| 7.3 | Integrodiferenciální 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 | Extrapoláčnické 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 přímeek | 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 | Bodové 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 přímeek 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 ROZHŘANÍM | 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 |