

# Obsah

1	ÚVOD . . . . .	13
2	BIFURKAČNÍ JEVY V NELINEÁRNÍCH DYNAMICKÝCH SYSTÉMECH . . . . .	26
2.1	Základní pojmy . . . . .	26
2.1.1	Fázový prostor. Vektorové pole. Fázový tok . . . . .	26
2.2	Strukturální stabilita. Bifurkace . . . . .	33
2.2.1	Poznámky ke kvalitativní teorii diferenciálních rovnic . . . . .	33
2.2.2	Definice strukturální stability . . . . .	34
2.2.3	Perturbace strukturálně nestabilních vektorových polí . . . . .	35
2.2.4	Reziduální množiny. Generické vlastnosti . . . . .	37
2.3	Bifurkace rovnovážných stavů . . . . .	37
2.3.1	Strukturální stabilita soustav v okolí rovnovážných stavů. Grobmanova-Hartmanova věta . . . . .	37
2.3.2	Věta o invariantních varietách. Redukce na centrální varietu . . . . .	40
2.3.3	Použití věty o centrální varietě k vyšetřování stability rovnovážných stavů . . . . .	44
2.3.4	Parametrická rozvinutí vektorových polí . . . . .	52
2.4	Bifurkace periodických řešení . . . . .	61
2.4.1	Diskrétní dynamické systémy . . . . .	62
2.4.2	Asymptotická a orbitální stabilita trajektorií . . . . .	68
2.4.3	Poincaréhovo zobrazení . . . . .	69
2.4.4	Strukturální stabilita toku v okolí uzavřené trajektorie . . . . .	72
2.4.5	Parametrické systémy difeomorfismů . . . . .	72
2.4.6	Jiný přístup k bifurkacím periodických řešení . . . . .	80
2.4.7	Závěrečné poznámky k paragrafům 2.3 a 2.4 . . . . .	87
2.5	Ljapunovovy exponenty. Invariantní množiny . . . . .	90
2.5.1	Základní vlastnosti Ljapunovových exponentů . . . . .	90
2.5.2	Invariantní množiny . . . . .	93
2.5.3	Vznik chaotických množin. Homoklinické trajektorie a body . . . . .	94
2.5.4	Feigenbaumův jev . . . . .	98
2.6	Parciální diferenciální rovnice . . . . .	100
2.6.1	Nekonečně rozměrný fázový prostor . . . . .	100
2.6.2	Dynamické systémy. Semitoky . . . . .	102
2.6.3	Stacionární řešení. Stabilita . . . . .	102
2.6.4	Komplexní (Hopfova) bifurkace pro parciální diferenciální rovnice . . . . .	104
2.6.5	Poincaréhovo zobrazení pro parciální diferenciální rovnice . . . . .	105

	Literatura . . . . .	105
3	VĚTVENÍ ROVNOVÁŽNÝCH STAVŮ V DIAGRAMU ŘEŠENÍ . . . . .	107
3.1	Diagram řešení . . . . .	107
3.2	Větvení v bifurkačních bodech, jednorozměrný případ . . . . .	113
3.3	Větvení v bifurkačních bodech, vícerozměrný případ . . . . .	117
3.4	Určení směru Hopfovy bifurkace . . . . .	124
	Literatura . . . . .	136
4	MATEMATICKÉ MODELY . . . . .	137
4.1	Konstrukce matematických modelů . . . . .	137
4.1.1	Bilanční vztahy . . . . .	138
4.1.2	Model míchaného průtočného reaktoru . . . . .	139
4.1.2.1	Zjednodušený model stacionárního chování . . . . .	141
4.1.2.2	Zjednodušené modely nestacionárního chování . . . . .	142
4.1.2.3	Převedení modelu do bezrozměrného tvaru . . . . .	143
4.1.2.4	Analýza počtu stacionárních stavů . . . . .	144
4.1.2.5	Diagram řešení „konverze – Damköhlerovo kritérium“ . . . . .	146
4.1.2.6	Stabilita stacionárního stavu . . . . .	148
4.2	Problémy se soustředěnými parametry . . . . .	152
4.2.1	<i>Problém 1</i> – Míchaný průtočný reaktor s neizotermickou reakcí a recyklem . . . . .	152
4.2.2	<i>Problém 2</i> – Kaskáda dvou míchaných průtočných neizotermických reaktorů s recyklem . . . . .	154
4.2.3	<i>Problém 3</i> – Míchaný průtočný reaktor s autokatalytickou soustavou reakcí – Noyesův-Fieldův model . . . . .	155
4.2.4	<i>Problém 4</i> – SH model, metabolismus thiolů . . . . .	157
4.2.5	<i>Problém 5</i> – Model anaerobního vyhívání . . . . .	158
4.2.6	<i>Problém 6</i> – Zjednodušený model anaerobního vyhívání . . . . .	161
4.2.7	<i>Problém 7</i> – Reaktor s modelovou reakcí „Bruselátor“ . . . . .	162
4.2.8	<i>Problém 8</i> – Kaskáda reaktorů se vzájemnou výměnou hmoty a reakcí „Bruselátor“ . . . . .	163
4.2.9	<i>Problém 9</i> – Systém „Bruselátor“ s časově proměnným vstupem . . . . .	165
4.2.10	<i>Problém 10</i> – Lorenzův model – Aproximace Navierových-Stokesových rovnic pro Bénárdovu konvekci . . . . .	165
4.3	Problémy s rozloženými parametry . . . . .	168
4.3.1	Reakčně difúzní problémy . . . . .	168
4.3.1.1	<i>Problém 11</i> – Reakčně difúzní systém – „Bruselátor“ . . . . .	172
4.3.1.2	<i>Problém 12</i> – Reakčně difúzní systém – SH kinetika . . . . .	172
4.3.1.3	<i>Problém 13</i> – Reakčně difúzní systém – Meinhardtův model . . . . .	172
4.3.2	<i>Problém 14</i> – Trubkový neizotermický reaktor s axiálním promícháváním . . . . .	173
4.3.3	<i>Problém 15</i> – Trubkový nediabatický reaktor s axiálním promícháváním – dvofázový model . . . . .	175
4.3.4	<i>Problém 16</i> – Neizotermický model vnitřní difúze v částici porézního katalyzátoru . . . . .	177
4.3.5	<i>Problém 17</i> – Navierovy-Stokesovy rovnice pro tok mezi dvěma nekonečnými sousými rotujícími disky . . . . .	180
	Literatura . . . . .	183
5	NUMERICKÉ METODY A ALGORITMY PRO ANALÝZU NELINEÁRNÍCH SYSTÉMŮ SE SOUSTŘEDĚNÝMI PARAMETRY . . . . .	185
5.1	Stacionární řešení . . . . .	186

5.2	Závislost stacionárních řešení na parametru – diagram řešení . . . . .	190
5.2.1	Mapování parametru . . . . .	191
5.2.2	Metoda derivace podle parametru . . . . .	194
5.2.3	Kontinuační algoritmus prediktor–korektor . . . . .	201
5.3	Stabilita stacionárních řešení . . . . .	203
5.3.1	Charakteristický polynom . . . . .	205
5.3.2	Routhovo-Hurwitzovo kritérium . . . . .	206
5.3.3	Linova-Bairstowova metoda . . . . .	207
5.3.4	Nelineární systém – první Ljapunovova metoda . . . . .	209
5.4	Větvící body stacionárních řešení – reálná bifurkace . . . . .	210
5.4.1	Určování limitních a bifurkačních bodů . . . . .	210
5.4.2	Kontinuace z bifurkačního bodu . . . . .	214
5.4.3	Vznik izol v diagramu řešení . . . . .	220
5.5	Komplexní (Hopfova) bifurkace . . . . .	225
5.5.1	Analytické postupy . . . . .	226
5.5.2	Dekompoziční metody . . . . .	228
5.5.3	Přímé iterační metody . . . . .	230
5.6	Bifurkační diagram . . . . .	235
5.7	Metody simulace dynamických systémů . . . . .	241
5.7.1	Jednokrokové metody . . . . .	242
5.7.1.1	Metody Taylorova rozvoje . . . . .	242
5.7.1.2	Rungeovy-Kuttovy metody . . . . .	242
5.7.1.3	Aposteriorní odhad chyby aproximace . . . . .	244
5.7.1.4	Automatická regulace kroku $h$ . . . . .	245
5.7.1.5	Chyby aproximace a zaokrouhlovací chyby . . . . .	246
5.7.2	Vícekových metody . . . . .	247
5.7.3	Metody pro integraci stiff systémů . . . . .	248
5.7.4	Některé speciální metody . . . . .	251
5.7.4.1	Integrace podle oblouku . . . . .	251
5.7.4.2	Integrace fázových trajektorií autonomního systému . . . . .	252
5.7.4.3	Systémy diferenciálních a algebraických rovnic . . . . .	252
5.7.4.4	Integrace diferenciálních rovnic se zpožděním . . . . .	253
5.8	Výpočet periodických řešení v autonomním případě . . . . .	254
5.8.1	Diferenční metody řešení . . . . .	255
5.8.2	Metoda střelby . . . . .	256
5.8.3	Stabilita periodických řešení . . . . .	258
5.8.4	Kontinuace periodických řešení . . . . .	258
5.8.5	Bifurkace periodických řešení . . . . .	266
5.9	Chaotické atraktory . . . . .	270
5.9.1	Výpočet Ljapunovových exponentů . . . . .	271
5.9.2	Poincarèovo zobrazení . . . . .	277
5.9.3	Výkonová spektra . . . . .	281
5.10	Kvazistacionární chování dynamického modelu . . . . .	282
5.10.1	Typické případy evolučních diagramů . . . . .	284
5.10.2	Příklady evolučních diagramů v systémech se soustředěnými parametry . . . . .	286
5.11	Výpočet a analýza periodických řešení v neautonomních případech . . . . .	289

5.12	Úlohy . . . . .	298
	Literatura . . . . .	305
6	<b>NUMERICKÉ METODY A ALGORITMY PRO ANALÝZU SYSTÉMŮ S ROZLO- ŽENÝMI PARAMETRY . . . . .</b>	<b>307</b>
6.1	Stacionární řešení – Metody řešení nelineárních okrajových úloh . . . . .	308
6.1.1	Diferenční metody . . . . .	309
6.1.2	Metoda střelby . . . . .	315
6.1.3	Metoda vícenásobné střelby . . . . .	323
6.2	Závislost stacionárních řešení na parametru . . . . .	324
6.2.1	Metoda derivace podle parametru . . . . .	325
6.2.2	Metoda derivace podle okrajové podmínky . . . . .	328
6.2.3	Kontinuuační algoritmus typu prediktor–korektor . . . . .	330
6.2.3.1	Algoritmus založený na diferencních metodách . . . . .	331
6.2.3.2	Algoritmus založený na metodě střelby . . . . .	332
6.2.4	Metoda mapování parametru . . . . .	338
6.3	Určování větvících bodů . . . . .	341
6.3.1	Primární bifurkace . . . . .	341
6.3.2	Vyčíslení bodů reálných bifurkací . . . . .	344
6.3.2.1	Diferenční metody . . . . .	344
6.3.2.2	Metoda střelby . . . . .	346
6.3.3	Vyčíslení bodů komplexních (Hopfových) bifurkací . . . . .	348
6.3.3.1	Metoda přímk – transformace na systém se soustředěnými parametry . . . . .	349
6.3.3.2	Přímá iterační metoda . . . . .	349
6.4	Metody dynamické simulace parabolických rovnic . . . . .	353
6.4.1	Náhrada nelineárních členů . . . . .	356
6.4.2	Automatická regulace časového kroku . . . . .	356
6.4.3	Automatická regulace kroku $h$ . . . . .	358
6.4.4	Adaptivní neekvidistantní síť . . . . .	359
6.4.5	Metoda přímk . . . . .	360
6.5	Periodická řešení v systémech s rozloženými parametry . . . . .	363
6.5.1	Výpočet a kontinuity periodických řešení . . . . .	363
6.5.1.1	Metoda přímk . . . . .	365
6.5.1.2	Diferenční metoda . . . . .	366
6.5.2	Řešení vlnového charakteru . . . . .	368
6.5.2.1	Vlna typu excitabilního pulsu . . . . .	368
6.5.2.2	Vlna typu fronty . . . . .	370
6.6	Kvazistacionární chování systémů s rozloženými parametry . . . . .	371
6.7	Úlohy . . . . .	373
	Literatura . . . . .	374
7	<b>KONSTRUKCE MODELŮ A IDENTIFIKACE PARAMETRŮ . . . . .</b>	<b>376</b>
7.1	Vyhodnocování parametrů modelů . . . . .	377
7.1.1	Metoda nejmenších čtverců . . . . .	378
7.1.1.1	Metoda vážených nejmenších čtverců . . . . .	379
7.1.1.2	Násobná lineární regrese . . . . .	380

7.1.1.3	Linearizace nelineárních modelů . . . . .	382
7.1.2	Metody maximální věrohodnosti . . . . .	383
7.1.2.1	Normální rozdělení . . . . .	384
7.1.3	Metody založené na Bayesově větě . . . . .	386
7.2	Strategie tvorby modelů . . . . .	386
7.2.1	Návrh experimentálních podmínek pro zpřesnění parametrů . . . . .	388
7.2.2	Kritéria pro diskriminaci mezi modely . . . . .	390
7.2.3	Příklad z kinetiky heterogenně katalytických reakcí . . . . .	392
7.3	Vyhodnocení parametrů v dynamických modelech . . . . .	396
7.3.1	Diferencování dat . . . . .	396
7.3.2	Integrace rovnic . . . . .	398
7.3.3	Integrace dat . . . . .	398
7.3.4	Standardní tvar dynamického modelu . . . . .	399
7.3.5	Výpočet účelové funkce . . . . .	400
7.3.6	Příklad vyhodnocení parametrů dynamického modelu . . . . .	401
7.4	Metody hledání extrémů účelové funkce . . . . .	403
7.4.1	Metody nelineárního programování . . . . .	404
7.4.2	Gradientní metoda . . . . .	405
7.4.3	Gaussova-Newtonova metoda . . . . .	406
7.4.4	Newtonova metoda . . . . .	407
	Literatura . . . . .	408
	Seznam symbolů . . . . .	410
	Rejstřík . . . . .	412