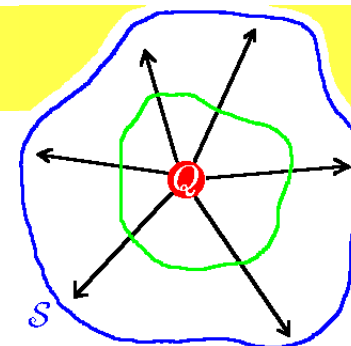


# Motivace: Poissonova rovnice

L/15  
at-pdr

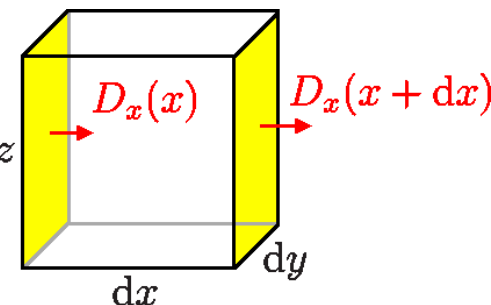
Zachovává se počet el. indukčních čar:

$$Q = \oint_S \vec{D} \cdot d\vec{s}, \quad \vec{D} = \epsilon \vec{E}$$



Integrál spočítáme přes povrch krychličky  $dx \times dy \times dz$ :

$$dQ = dV\rho = \oint_S \vec{D} \cdot d\vec{s} = dydz[D_x(x+dx) - D_x(x)] + dx dz[D_y(y+dy) - D_y(y)] + dx dy[D_z(z+dz) - D_z(z)]$$



$$= dx dy dz \left( \frac{\partial D_x}{\partial x} + \frac{\partial D_y}{\partial y} + \frac{\partial D_z}{\partial z} \right) = -dV\epsilon \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right)$$

kde  $\rho = dq/dV$  je hustota náboje a permitivita je konstantní.

**Laplaceův operátor:**

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \equiv \nabla^2 \equiv \Delta$$

symbol  $\Delta$  nebudeme používat, aby se nepletl s  $\Delta\phi = \phi^{\text{vpravo}} - \phi^{\text{vlevo}}$

**Poissonova rovnice:**

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\epsilon}$$

nebo v jedné dimenzi

$$\frac{d^2 \phi}{dx^2} = -\frac{\rho}{\epsilon}$$

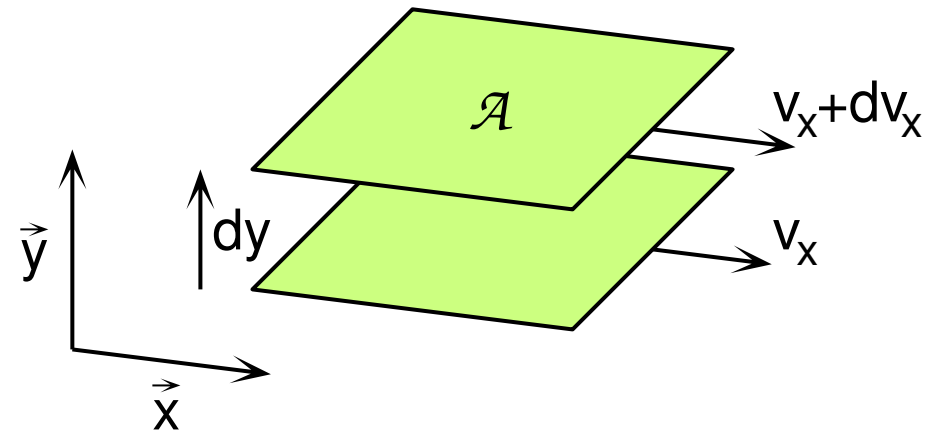
## Viskozita

smyková síla  $f = -\eta \mathcal{A} \frac{dv_x}{dy}$

●  $\mathcal{A} =$  plocha

●  $\frac{dv_x}{dy} =$  gradient tečné rychlosti

●  $\eta =$  dynamická viskozita,  $[\eta] = \text{Pa s}$



**Laminární proudění** v trubici  $\parallel \hat{z}$ , rozdíl tlaků  $= \Delta p$ . Síla na hranolek  $dx \times dy \times z$  je součtem smykových sil způsobeným gradienty rychlosti:

$$f_z = -\eta z dy \left[ \frac{v_z(x + dx, y) - v_z(x, y)}{dx} - \frac{v_z(x, y) - v_z(x - dx, y)}{dx} \right]$$

$$-\eta z dx \left[ + \frac{v_z(x, y + dy) - v_z(x, y)}{dy} - \frac{v_z(x, y) - v_z(x, y - dy)}{dy} \right]$$

$$\eta \nabla^2 v = -\frac{f_z}{z dx dy} = -\frac{\Delta p}{z}$$

**První Fickův zákon:** Tok  $\vec{J}_i$  látky  $i$  (jednotky:  $\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$ )

$$\vec{J}_i = -D_i \vec{\nabla} c_i$$

je úměrný **gradientu koncentrace**

$$\vec{\nabla} c_i = \text{grad } c_i = \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) c_i = \left( \frac{\partial c_i}{\partial x}, \frac{\partial c_i}{\partial y}, \frac{\partial c_i}{\partial z} \right)$$

$D_i$  = koeficient difuze (difuzivita) látky  $i$ , jednotky:  $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$

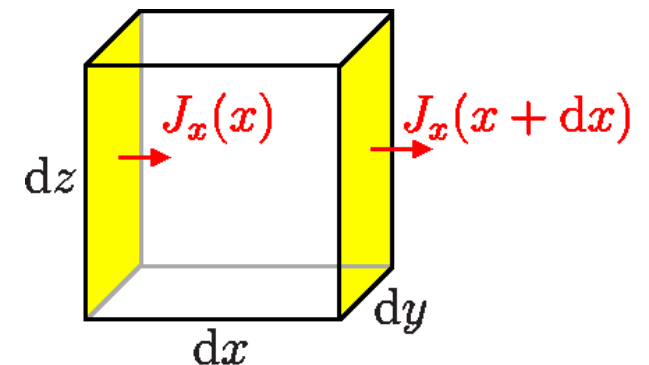
**Druhý Fickův zákon:**

Nestacionární jev (koncentrace se mění s časem)

– za  $dt$  do objemu  $dV = dx dy dz$  přiteče:

$$\sum_{x,y,z} [J_x(x) - J_x(x + dx)] dy dz = -dV \vec{\nabla} \cdot \vec{J}$$

$$\vec{J} = -D \vec{\nabla} c \Rightarrow \frac{\partial c_i}{\partial t} = D_i \nabla^2 c_i$$



Pro hmotnostní koncentraci (v  $\text{kg m}^{-3}$ ) vyjde tok v  $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$

... a stejně pro teplo, proto se této rovnici říká **rovnice pro vedení tepla**

**Stacionární případ:**  $\partial c_i / \partial t$  dáno na okrajích, nezávisí na čase

Mechanický model:  $\dots \boxed{m} \text{---} \boxed{m} \text{---} \boxed{m} \text{---} \boxed{m} \dots$

Výchylka =  $y_i$ , vzdálenost závaží =  $\Delta x$ .

Síla působící na hmotnost  $m$  v bodě  $i$ :

$$F_i = (y_{i+1} - y_i)K + (y_{i-1} - y_i)K = (y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1})K \approx \Delta x^2 \frac{\partial^2 y_i}{\partial x^2} K$$

Newtonova pohyb. rov.:  $F_i = m \frac{\partial^2 y_i}{\partial t^2} \Rightarrow$  **vlnová rovnice**  $\Delta x^2 \frac{\partial^2 y_i}{\partial x^2} K = m \frac{\partial^2 y_i}{\partial t^2}$

**Dodatek: kolik je tuhost pružiny  $K$  pro plyn?**

Odečteme sílu v klidu ( $\boxed{m} \text{---} \boxed{m} = \Delta x$ ) a při výchylce ( $\Delta x + dy$ ) na plochu  $\mathcal{A}$ : (NB:  $p(x)$  je funkce výchylky)

$$f_i = \mathcal{A}[p(\Delta x + dy) - p(\Delta x)] = \mathcal{A} \frac{\partial p}{\partial y} dy = \mathcal{A} \frac{\partial p}{\partial V} \frac{\partial V}{\partial y} dy \stackrel{!}{=} K dy$$

kde

$$pV^\kappa = \text{konst} \Rightarrow \frac{\partial p}{\partial V} = -\frac{\kappa p}{V}, \quad V = \mathcal{A}(\Delta x + dy) \Rightarrow \frac{\partial V}{\partial y} = \mathcal{A} \Rightarrow K = \frac{\mathcal{A} \kappa p}{\Delta x}$$

Dále  $m = \rho V = \frac{pM}{RT} \Delta x \mathcal{A}$ , dohromady:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \frac{\kappa RT}{M} = \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} \Rightarrow v_{\text{zvuk}} = \sqrt{\frac{\kappa RT}{M}}, \quad y = y(x \pm v_{\text{zvuk}} t)$$

## Časová Schödingerova rovnice

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right) \psi$$

**Dirichletovy:** hodnoty na hranici oblasti / D-dimensionální nadploše

**Neumannovy:** derivace (v normálovém směru)

**Cauchyovy:** obojí

Příklady:

$$\frac{\partial f(x, y)}{\partial x} = 1, \quad f(0, y) = \sin(y), \quad \Rightarrow \quad f(x, y) = \sin(y) + x$$

$$\frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = D \nabla^2 T(x, y, t), \quad T(x, y, 0) = \begin{cases} 1 & \text{pro } x^2 + y^2 < 1 \\ 0 & \text{pro } x^2 + y^2 > 1 \end{cases}$$

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2}, \quad T(x, 0) = \begin{cases} 1 & \text{pro } x \in (0, 1) \\ 0 & \text{pro } x \notin (0, 1) \end{cases}, \quad \left. \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right|_{x=\pm 1} = 0$$

Divný příklad:

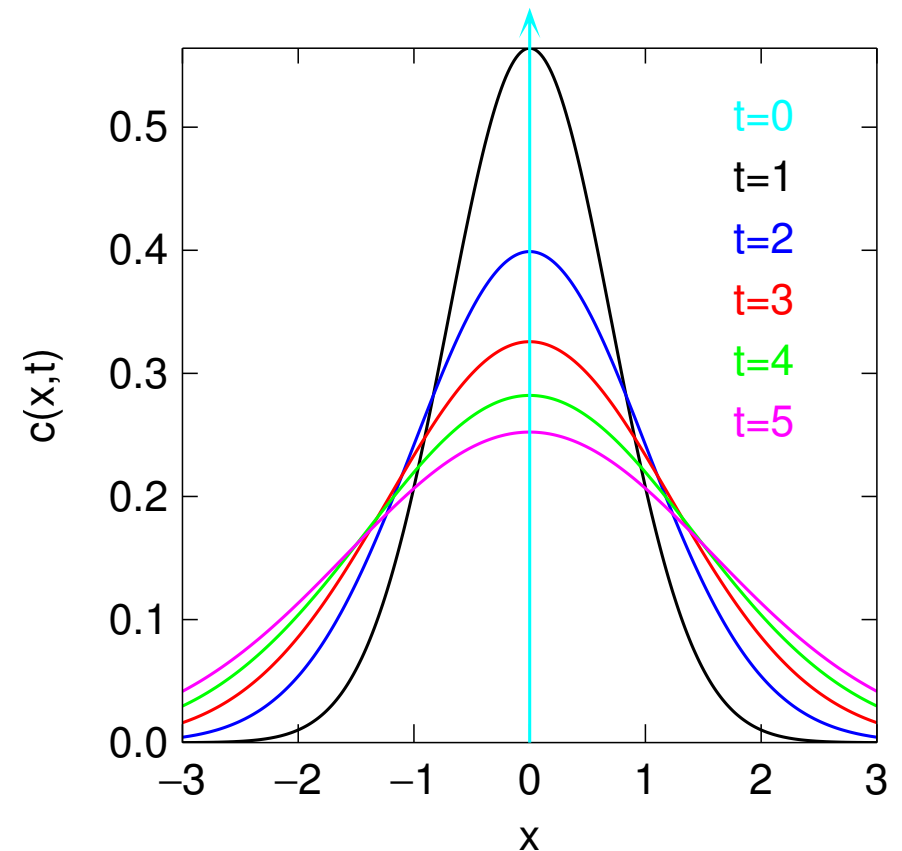
$$\frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial x^2}, \quad y = 1 \text{ na přímce } x = t$$

Druhý Fickův zákon:  $\frac{\partial c}{\partial t} = D \nabla^2 c$

Snadno se ověří, že řešení je:

$$1D: \quad c_g(x, t) = (4\pi Dt)^{-1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

$$3D: \quad c_g(\vec{r}, t) = (4\pi Dt)^{-3/2} \exp\left(-\frac{r^2}{4Dt}\right)$$



**Platí**  $\int c(x, t) dx = 1$  (žádná částice se neztratí).

Dodefinuji  $\delta(x) = c(x, 0)$  ve smyslu limity (Diracova delta funkce).

Interpretace: jednotkový impuls. Alternativní přístup: teorie distribucí.

Platí (pro slušně vychovanou funkci f):

$$\int \delta(x - a) f(x) dx = \int \delta(a - x) f(x) dx = f(a)$$

## Metoda konvoluce resp. Greenovy funkce

$c_g(x, t)$  výše řeší časový vývoj jednotkového impulsu, tj. počáteční podmínku  $c_g(x, 0) = \delta(x)$ . Mám-li na začátku  $c_0(x) = c(x, 0)$ :

$$c(x, 0) = \int c_g(x - x', 0) c_0(x') dx' \Rightarrow c(x, t) = \int c_g(x - x', t) c_0(x') dx'$$

**Cvičení:**  $c_0(x) = 1$  pro  $|x| < 1/2$ ,  $c_0(x) = 0$  jinde;  $D = 1$ .

$$c(x, t) = \int c_g(x - x', t) c_0(x', 0) dx' = \int_{-1/2}^{1/2} c_g(x - x', t) dx'$$

Problém: Greenova funkce v jiných okrajových podmínkách



Pole náboje  $Q$  je (ve 3D)

$$\frac{Q}{4\pi\epsilon r}$$

tedy pole hustoty náboje  $\rho(\vec{r})$  je:

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}' - \vec{r}|} d\vec{r}'$$

**Cvičení:** ukažte, že  $\nabla^2(1/r) = 0$  pro  $r \neq 0$  (nejlépe Maple)

Coca-Colu ve válci (výška sloupce 10 cm) opatrně převrstvíme čistou vodou (10 cm). Za jak dlouho bude koncentrace u hladiny rovna polovině koncentrace u dna? Konvekci neuvažujte.  $D_{\text{sacharoza}}(25^\circ\text{C}) = 5.2 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ .

4 měsíce ↴

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad c(x, 0) = \begin{cases} c_0 & x < L/2 \\ 0 & x > L/2 \end{cases} \quad \frac{\partial c}{\partial x}|_{x=0,L} = 0$$

Trknutí: Kdyby platilo  $c(x, 0) = \cos\left(\frac{\pi}{L}x\right)$ , bylo by to jednoduché:

$$c(x, t) = \cos\left(\frac{\pi}{L}x\right) \exp\left[-\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 Dt\right]$$

Obecně: Nechť  $c_k(x)$  je vlastním vektorem rovnice  $\frac{\partial^2 c_k}{\partial x^2} = \lambda_k c_k$ , pak

$$c_k(x, t) = c_k(x) \exp[D\lambda_k t]$$

řeší původní rovnici. Zde

$$c_k(x, 0) = \cos\left[\frac{(2k+1)\pi x}{L}\right], \quad \lambda_k = -\left[\frac{(2k+1)\pi}{L}\right]^2$$

Zbývá najít rozvoj počáteční podmínky  $c(x, 0)$  do  $c_k$  – zde Fourierova řada

Mějme funkci  $f(x)$  periodickou s periodou  $L$ . Platí (ve smyslu, který ještě upřesním)

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left[ a_n \cos\left(\frac{2\pi n x}{L}\right) + b_n \sin\left(\frac{2\pi n x}{L}\right) \right]$$

kde

$$a_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \cos\left(\frac{2\pi n x}{L}\right) dx, \quad b_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \sin\left(\frac{2\pi n x}{L}\right) dx$$

Je-li  $f$  integrovatelná s kvadrátem, konverguje řada (bodově) skoro všude.  
Je-li  $f$  diferencovatelná, konverguje všude.

Norma rozdílu  $f_n - f$  konverguje k 0 ( $f_n =$  částečný součet)

- báze  $\{1, \cos(2\pi x/L), \sin(2\pi x/L), \dots\}$  je úplná (v prostoru funkcí integrovatelných s kvadrátem na  $[0, L)$ )
- $a_n, b_n$ : znásobte řadu kterýmkoliv prvkem báze s aplikujte  $\int_0^L dx$

## Fourierova metoda: difuze II

Použijeme  $\{1, \cos(\pi x/L), \cos(3\pi x/L), \dots\}$ , které vyhovují počáteční podmíce a symetrii.

$$c(x, 0) = c_0 \left\{ \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) - \frac{2}{3\pi} \cos\left(\frac{3\pi x}{L}\right) + \dots \right\}$$

Pro jednotlivé členy (módy) řešíme rovnici a sečteme.

$$c(x, t) = \frac{c_0}{2} + \frac{2c_0}{\pi} \left[ \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \exp\left(-\frac{\pi^2}{L^2}Dt\right) - \frac{1}{3} \cos\left(\frac{3\pi x}{L}\right) \exp\left(-\frac{3^2\pi^2}{L^2}Dt\right) + \frac{1}{5} \cos\left(\frac{5\pi x}{L}\right) \exp\left(-\frac{5^2\pi^2}{L^2}Dt\right) \dots \right]$$

Pozn. Animace byla řešena numericky.

Jaký je průtok kapaliny o viskozitě  $\eta$  trubicí průřezu  $L \times L$  a délce  $z$ , je-li na koncích tlakový rozdíl  $\Delta p$ ? (= stacionární tok tepla rovnoměrně zahřívanou deskou, která je ukotvena v ledu na okrajích)

$$\nabla^2 v = -\frac{\Delta p}{z\eta} = -\alpha \quad v(\text{okraj}) = 0$$

- $v = u + v_0$ ,  $u_0 = \alpha x(L-x)/2 \Rightarrow \nabla^2 u = 0$  (ale změni se okrajové podmínky)
- rozvineme okrajové podmínky do Fourierovy řady

$$u(x, 0) = u(x, L) = u_0 = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \sin\left(\frac{\pi(2k+1)x}{L}\right)$$

- řešení hledáme ve tvaru  $u = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \sin\left(\frac{\pi(2k+1)x}{L}\right) w_k(y)$

- $\Rightarrow w_k(y) = \left[ \exp\left(\frac{\pi(2k+1)y}{L}\right) + \exp\left(\frac{\pi(2k+1)(L-y)}{L}\right) \right] / \left[ e^{\pi(2k+1)} + 1 \right]$

- $\Rightarrow$  průtok  $I = 0.0351 \frac{A^2 \Delta p}{z\eta}$ ,  $A = L^2$ ; kruhový průřez  $A$ :  $I = 0.0398 \frac{A^2 \Delta p}{z\eta}$

# Fourierova transformace

přímá:  $FT[f](k) \equiv \hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{ikx} dx$       zpětná:  $f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(k)e^{-ikx} dk$

Důkaz: stačí pro funkci  $\delta(x) = \lim_{\sigma \rightarrow 0} \exp(-x^2/2\sigma^2)/\sqrt{2\pi}$  – viz Maple.

Užitečné: Gaussova funkce  $\rightarrow$  Gaussova funkce

$$\hat{\delta}(k) = 1, \quad \text{ve smyslu distribuce: } \delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x')} dx'$$

FT převádí derivaci na dělení (pro  $f(\pm\infty) = 0$ ), násobení sin či cos na posun frekvence:

$$\hat{f}' = \frac{i}{k} \hat{f}, \quad FT[e^{ik'x} f(x)](k) = \hat{f}(k + k')$$

Pozn.: Podobně se chová Laplaceova transformace ( $s$  je komplexní číslo)

$$\tilde{f}(s) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-sx} dx$$

Ize využít pro řešení soustavy lin.dif. rovnic (el. obvody, kinetika)

FT konvoluce vede na násobení obrazů

$$c(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c_g(x - x', t) c_0(x') dx' \Rightarrow \hat{c}(k, t) = \hat{c}_g(k, t) \hat{c}_0(k)$$

**Cvičení:** Opět rovnice difuze pro  $c_0(x) = 1$  pro  $|x| < 1/2$ ,  $c_0(x) = 0$  jinde;  $D = 1$  – viz Maple.

## Numerický výpočet

Převádíme na **diskrétní FT**:

$$X_k = \sum_{n=0}^{N-1} x_n e^{\pm i 2\pi k n / N}$$

kterou počítáme algoritmem „rychlá Fourierova transformace“ (FFT), jenž je řádu  $\mathcal{O}(N \log N)$ , pokud je  $N$  součinem malých prvočísel (typicky  $2^k$ ).