Matematika pro chemické inženýry

Drahoslava Janovská

1. Základy vektorového počtu. Algebra operátoru nabla. Greenova a Gaussova-Ostrogradského věta.

EVROPSKÁ UNIE
Evropské strukturální a investiční fondy
Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY

Povinná látka. Bude v písemkách a bude se zkoušet při ústní zkoušce (žádné označení)

★ Příklady k procvičení - dobrovolné

★ Pro studenty, kteří chtějí vědět víc. Tato látka se nebude přednášet, nebude v písemkách, nebude se zkoušet.

Obsah

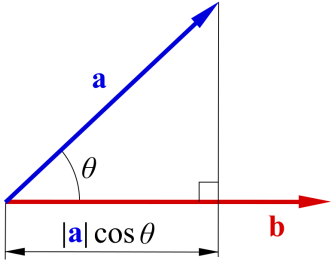
Skalární součin

Vektorový prostor $(V, +, \cdot)$ ... Množina V, na které jsou definovány dvě dvě operace, a to sčítání $(+)$ a násobení reálným číslem $(\cdot)$, které splňují 8 axiomů (komutativita, asociativita, distributivita, nulový a opačný prvek vzhledem ke sčítání a jednotkový prvek vzhledem k násobení reálným číslem).

Skalární součin: $a = (a_1, a_2, \ldots, a_n) \in \mathbb{R}^n$, $b = (b_1, b_2, \ldots, b_n) \in \mathbb{R}^n$,

$$\Longrightarrow \quad a \cdot b = \sum_{i=1}^{n} a_i b_i \,,$$

v $\mathbb{R}^2$



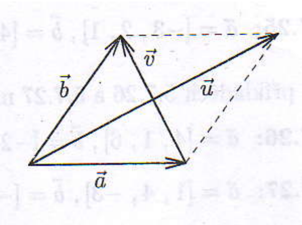
$||a|| \cdot \cos\theta$ ... kolmý průmět vektoru a do směru vektoru b,

$$a \cdot b = ||b|| \cdot ||a|| \cdot \cos\theta$$

Vlastnosti skalárního součinu

$$
\begin{aligned}
a\cdot b &= b\cdot a\\
a\cdot(b+c) &= a\cdot b+c\cdot d\\
(\alpha\, a)\cdot(\beta\, b) &= (\alpha\,\beta)\, a\cdot b\\
a\cdot b=0 &\iff a=0 \;\vee\; b=0 \;\vee\; \underbrace{a\perp b}_{\cos\frac{\pi}{2}=0}
\end{aligned}
$$

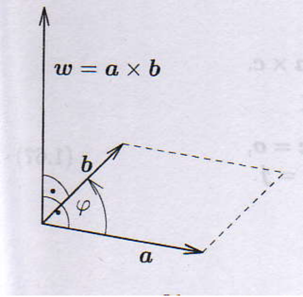
Příklad Dokažte, že úhlopříčky v kosočtverci jsou k sobě kolmé.



Dvě sousední strany v kosočtverci lze považovat za dva vektory a, b. Vektory a, b jsou lineárně nezávislé a $||a|| = ||b|| \neq 0$. Jestliže i úhlopříčkyv kosočtverci uvažujeme jako vektory u a v, je $u = a+b$, $u \neq 0$, $v = b-a$, $v \neq 0$. Potom $u\cdot v = (a+b)\cdot(b-a) = -||a||^2 + ||b||^2 = 0$, a tedy vektory u a v jsou k sobě kolmé.

Vektorový součin

Vektorový součin jen pro vektory v $\mathbb{R}^3$, t.j. $a \in \mathbb{R}^3$, $b \in \mathbb{R}^3$. Necht $\vec{i} = (1,0,0)$, $\vec{j} = (0,1,0)$, $\vec{k} = (0,0,1)$ jsou jednotkové vektory ve směru souřadnicových os.



$$w = a \times b = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix} =$$

$$= \vec{i} \cdot \begin{vmatrix} a_2 & a_3 \\ b_2 & b_3 \end{vmatrix} - \vec{j} \cdot \begin{vmatrix} a_1 & a_3 \\ b_1 & b_3 \end{vmatrix} + \vec{k} \cdot \begin{vmatrix} a_1 & a_2 \\ b_1 & b_2 \end{vmatrix} =$$

$$= (a_2 b_3 - a_3 b_2, -a_1 b_3 + a_3 b_1, a_1 b_2 - a_2 b_1) \in \mathbb{R}^3.$$

Plocha rovnoběžníka (φ je menší z úhlů, které vektory svírají)

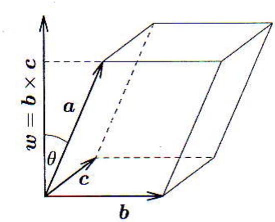
$$|a \times b| = ||a|| \cdot ||b|| \cdot \sin \varphi .$$

Vlastnosti vektorového součinu

$$
\begin{aligned}
a \times b &= -b \times a \\
a \times b = 0 &\iff a = 0 \vee b = 0 \vee a \parallel b \\
a \times (b + c) &= a \times b + a \times c \\
(\alpha a) \times b &= \alpha(a \times b) \\
a \times b &= ||a|| \cdot ||b|| \cdot \sin\alpha \cdot n, \quad \text{where } \alpha \in \langle 0, \pi \rangle
\end{aligned}
$$

$n \ldots$ jednotkový normálový vektor = jednotkový vektor kolmý k rovině určené vektory a, b.

Poznámka



Smíšený součin

$$a \cdot (b \times c)\,.$$

$V = |a \cdot (b \times c)| \ \ldots$ objem rovnoběžnostěnu určeného vektory a, b, c

Derivace ve směru

Necht $f = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ je funkce n proměnných, bod $X_0 \in D(f)$, $\vec{a} = (a_1, a_2, \ldots, a_n) \in \mathbb{R}^n$ je jednotkový vektor, $||\vec{a}|| = 1$. Potom limitu

$$\lim_{t \to 0} \frac{f(X_0 + ta) - f(X_0)}{t},$$

pokud existuje, nazýváme derivací funkce f v bodě X_0 ve směru vektoru $\vec{a}$ a značíme ji $D_a f(X_0)$.

Poznámka Derivace f ve směru vektoru $\vec{a}$ popisuje rychlost stoupání nebo klesání hodnot funkce f ve směru tohoto vektoru.

Cvičení: Pro funkci dvou proměnných je parciální derivace $\frac{\partial f}{\partial x}$ derivací ve směru vektoru $\vec{e}_1 = (1, 0)$ a parciální derivace $\frac{\partial f}{\partial y}$ derivací ve směru vektoru $\vec{e}_2 = (0, 1)$. Dokažte.

Gradient

Necht $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, $f(X)$ je funkce n proměnných, $X_0 \in D(f)$. Vektor prvních parciálních derivací funkce f vyčíslených v bodě X_0 nazýváme gradientem funkce f v bodě X_0,

$$\mathrm{grad} f(X_0) = \left(\frac{\partial f(x_1, \dots, x_n)}{\partial x_1}, \frac{\partial f(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_n} \right)\Big|_{X_0},$$

Gradient funkce f v bodě X_0 označujeme také $\nabla f(X_0)$, kde

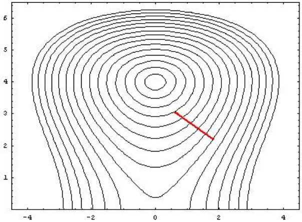
∇ je diferenciální operátor ”nabla”.

Věta Nechť f je diferencovatelná v bodě X_0, vektor $\vec{a} \in \mathbb{R}^n$ je jednotkový: $||\vec{a}|| = 1$. Pak

$$D_a f(X_0) = \underbrace{\nabla f(X_0) \cdot \vec{a}}_{\text{skalární součin}} = ||\nabla f(X_0)|| \cdot ||\vec{a}|| \cdot \cos\varphi \,. \qquad (1)$$

Z rovnice (1) je vidět, že $D_a f(X_0)$ bude největší pro $\varphi = 0$, tedy $\vec{a}$ bude jednotkový vektor příslušný gradientu: $\vec{a} := \dfrac{\nabla f(X_0)}{||\nabla f(X_0)||}$, tj. gradient je vektor, který "ukazuje" ve směru největšího růstu funkčních hodnot.

Poznámka Pro $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ je gradient vždy kolmý na vrstevnice.



★

Příklad Vypočtěte derivaci funkce $f(x,y) = x^2y - xy^2$ ve směru vektoru a v bodě $(1,2)$; a je jednotkový vektor příslušný vektoru $v = (3,4)$.

Řešení $||v|| = 5 \;\Rightarrow\; a = \dfrac{1}{5}(3,4)$, f je spojitá, spojitě diferencovatelná,

$$\nabla f(x,y) = \operatorname{grad} f(x,y) = \left(\frac{\partial f}{\partial x}(x,y), \frac{\partial f}{\partial y}(x,y)\right) = (2xy - y^2, x^2 - 2xy)\,,$$

$$D_a f(1,2) = \nabla f(1,2) \cdot a = (0,-3) \cdot \frac{1}{5}(3,4) = -\frac{12}{5}\,.$$

Příklad Vypočtěte derivaci funkce f ve směru vektoru $a = (1,0)$ v bodě $(1,0)$, $f(x,y) = x\sqrt{y}$.

Řešení f je spojitá, není v bodě $(1,0)$ spojitě diferencovatelná, tedy počítám podle definice.

$$D_a f(1,0) = \lim_{t\to 0} \frac{f(x+ta) - f(x)}{t} = \lim_{t\to 0} \frac{f(1+t,0) - f(1,0)}{t} = 0\,.$$

Příklad $f(x,y,z) = x^2 + x\ln z - y^3$. Vypočtěte $\nabla f(1,2,\mathrm{e})$.

Řešení:

$$\nabla f(x,y,z) = (2x + \ln z, -3y^2, \frac{x}{z}), \quad \nabla f(1,2,\mathrm{e}) = (3,-12,\frac{1}{\mathrm{e}})\,.$$

Poznámka: Obecně, je-li

- $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $x = (x_1, \dots, x_n)$, pak

$$\nabla f(x) = \mathrm{grad} f(x) = \left(\frac{\partial f(x_1, \dots, x_n)}{\partial x_1}, \frac{\partial f(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_n} \right).$$

- $F : R^2 \to R^2$, pak

$$F(x,y) = \begin{bmatrix} F_1(x,y) \\ F_2(x,y) \end{bmatrix} \Rightarrow \nabla F(x,y) = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1(x,y)}{\partial x} & \frac{\partial F_1(x,y)}{\partial y} \\ \frac{\partial F_2(x,y)}{\partial x} & \frac{\partial F_2(x,y)}{\partial y} \end{bmatrix}.$$

  Poslední 2×2 matice je Jacobiova matice v bodě (x, y).

- $F : R^2 \to R^3$, pak

$$F(x,y) = \begin{bmatrix} F_1(x,y) \\ F_2(x,y) \\ F_3(x,y) \end{bmatrix} \Rightarrow \nabla F(x,y) = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1(x,y)}{\partial x} & \frac{\partial F_1(x,y)}{\partial y} \\ \frac{\partial F_2(x,y)}{\partial x} & \frac{\partial F_2(x,y)}{\partial y} \\ \frac{\partial F_3(x,y)}{\partial x} & \frac{\partial F_3(x,y)}{\partial y} \end{bmatrix}.$$

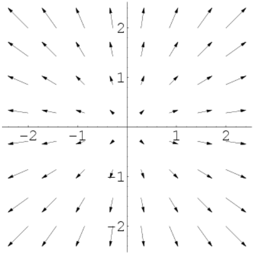
  Jacobiova matice je v tomto případě 3×2.

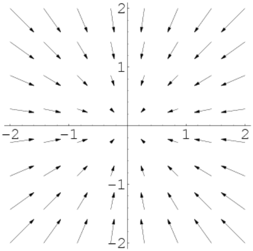
Divergence

Divergence a rotace jsou vektorové operátory, jejichž vlastnosti jsou odvozeny z pozorování chování vektorového pole kapaliny nebo plynu.

Divergenci vektorového pole si lze představit tak, že vektorové pole F udílí rychlost toku tekutiny. Jak se rychlost toku zvyšuje, tekutina expanduje pryč z počátku. V tomto případě je divergence vektorového pole kladná (obr. vlevo), $\mathrm{div}\, F > 0$.

Jestliže vektorové pole představuje tekutinu, která teče tak, že se stlačuje do počátku, divergence tohoto vektorového pole je záporná $\mathrm{div}\, F < 0$, dochází ke kompresi tekutiny (obr. vpravo).





$F := F(x, y)$ ... dvoudimenzionální vektorové pole rychlosti
$F := F(x, y, z)$ ... vektorové pole rychlosti v třídimenzionálním prostoru

Divergence vektorového pole měří expanzi nebo kompresi vektorového pole v daném bodě, neudává, ve kterém směru se expanze nebo komprese děje
$\Longrightarrow$ divergence je skalár

$$F : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}^3, \quad F = (F_1, F_2, F_3), \quad \mathrm{div}\, F = \frac{\partial F_1}{\partial x} + \frac{\partial F_2}{\partial y} + \frac{\partial F_3}{\partial z}$$

Notace:

$$\nabla \ \dots \ \text{operátor nabla} \ \dots \quad \nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right).$$

Pak divergence je skalární součin vektorů ∇ a F,

$$\nabla \cdot F = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot (F_1, F_2, F_3) = \frac{\partial}{\partial x} F_1 + \frac{\partial}{\partial y} F_2 + \frac{\partial}{\partial z} F_3$$

★ Příklady

Příklad 1. $F(x,y,z) = (-y, xy, z) \implies \operatorname{div} F = 0 + x + 1 = x + 1$

Příklad 2. $F(x,y,z) = (x,y,z) \implies \operatorname{div} F = 1 + 1 + 1 = 3 \ldots$ kladná konstanta. V tomto případě nezávisí divergence na volbě bodu (x,y,z). Tekutina expanduje.

Příklad 3. Vypočtěme divergenci vektorového pole

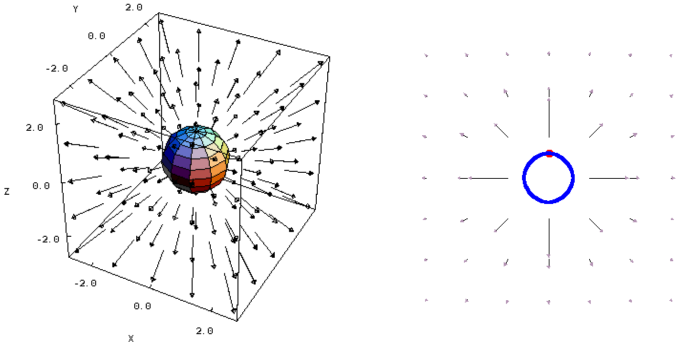
$$F(x,y,z) = \frac{(x,y,z)}{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}}, \qquad (x,y,z) \neq (0,0,0).$$

Řešení $\operatorname{div} F(x,y,z) =$

$$= \frac{\partial}{x}\frac{x}{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}} + \frac{\partial}{y}\frac{y}{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}} + \frac{\partial}{z}\frac{z}{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}}$$
$$= \frac{(x^2+y^2+z^2) - 3x^2}{(x^2+y^2+z^2)^{5/2}} + \frac{(x^2+y^2+z^2) - 3y^2}{(x^2+y^2+z^2)^{5/2}} + \frac{(x^2+y^2+z^2) - 3z^2}{(x^2+y^2+z^2)^{5/2}}$$
$$= \frac{3(x^2+y^2+z^2) - 3(x^2+y^2+z^2)}{(x^2+y^2+z^2)^{5/2}} = 0$$

Tedy pokud nejsme v počátku, není tok ani expandující ani kontrahující, $\operatorname{div} F = 0$.

Ponořme do tekutiny kuličku upevněnou v počátku a uvažujme vektorové pole z Příkladu 2. Tekutina proudí pryč od kuličky. Protože má vektorové pole kladnou divergenci všude, bude tok vektorového pole pryč od kuličky, i když kuličku posuneme z počátku.
Vlevo na obr. je třídimenzionální vektorové pole z Příkladu 2, vpravo je dvoudimenzionální vektorové pole z Příkladu 4.



★ Závislost na dimenzi

Příklad 4. Dvoudimensionální verze vektorového pole z Příkladu 3.

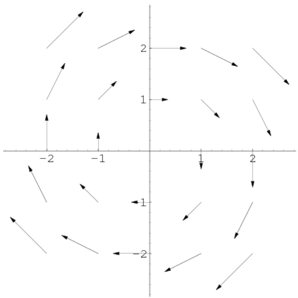
$$F(x,y) = \frac{(x,y)}{(x^2+y^2)^{3/2}}, \qquad (x,y) \neq (0,0)$$

$$\begin{aligned}
\operatorname{div} F(x,y) &= \frac{\partial}{x}\,\frac{x}{(x^2+y^2)^{3/2}} + \frac{\partial}{y}\,\frac{y}{(x^2+y^2)^{3/2}} \\
&= \frac{(x^2+y^2)-3x^2}{(x^2+y^2)^{5/2}} + \frac{(x^2+y^2)-3y^2}{(x^2+y^2)^{5/2}} \\
&= \frac{2(x^2+y^2)-3(x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^{5/2}} = \frac{-1}{(x^2+y^2)^{3/2}} < 0
\end{aligned}$$

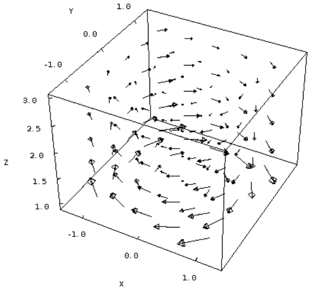
Všude kromě počátku je $\operatorname{div} F(x,y) < 0$. Tekutina se stlačuje, i když proudí "ven". V důsledku proudění tekutiny, vložíme-li kruh do proudící tekutiny, proudí tekutina do kruhu rychleji, než z kruhu.

Rotace

Představa vektorového operátoru rotace vychází z myšlenky, jak může kapalina nebo plyn rotovat (cirkulovat).



Rotace 2d vektorového pole



Rotace vektorového pole ve 3d

F ... vektorové pole, které reprezentuje tok tekutiny

Vložme do tekutiny malou kuličku a upevněme její střed $\implies$ kulička se může otáčet v libovolném směru kolem svého středu, ale nemůže se hýbat. Tato rotace měří rotaci $\operatorname{rot} F$ vektorového pole F v bodě ve středu (malé) kuličky ... mikroskopická rotace (cirkulace) vektorového pole F. Rotace je vektor, $\operatorname{rot} F \in \mathbb{R}^3$, který směřuje podél osy rotace a jeho orientaci určíme podle pravidla pravé ruky.

$$\operatorname{rot} \mathbf{F} = \nabla \times \mathbf{F} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right) \times (F_1, F_2, F_3) =$$

$$= \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ F_1 & F_2 & F_3 \end{vmatrix} = \mathbf{i} \begin{vmatrix} \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ F_2 & F_3 \end{vmatrix} - \mathbf{j} \begin{vmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial z} \\ F_1 & F_3 \end{vmatrix} + \mathbf{k} \begin{vmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \\ F_1 & F_2 \end{vmatrix} =$$

$$\left(\frac{\partial F_3}{\partial y} - \frac{\partial F_2}{\partial z}\right)\mathbf{i} - \left(\frac{\partial F_3}{\partial x} - \frac{\partial F_1}{\partial z}\right)\mathbf{j} + \left(\frac{\partial F_2}{\partial x} - \frac{\partial F_1}{\partial y}\right)\mathbf{k},$$

kde $\mathbf{i} = (1,0,0), \mathbf{j} = (0,1,0), \mathbf{k} = (0,0,1)$ jsou jednotkové vektory ve směru souřadnicových os.

★ Příklady

Příklad $F(x,y,z) = (-y, xy, z)$. Vypočtěte $\operatorname{rot} F$.

$$\operatorname{rot} F = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \dfrac{\partial}{\partial x} & \dfrac{\partial}{\partial y} & \dfrac{\partial}{\partial z} \\ -y & xy & y \end{vmatrix} = \mathbf{i}(0-0) - \mathbf{j}(0-0) + \mathbf{k}(y+1) = (0, 0, y+1)\,.$$

Příklad $F(x,y,z) = (y, x^2, -z)$. Vypočtěte $\operatorname{rot} F$.

$$\operatorname{rot} F = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \dfrac{\partial}{\partial x} & \dfrac{\partial}{\partial y} & \dfrac{\partial}{\partial z} \\ y & x^2 & -z \end{vmatrix} = \mathbf{i}(0-0) - \mathbf{j}(0-0) + \mathbf{k}(2x-1) = (0, 0, 2x-1)\,.$$

Notace:

$$\operatorname{rot} F \equiv \operatorname{curl} F = \nabla \times F\,, \quad F = (F_1, F_2, F_3) \in \mathbb{R}^3, \quad \operatorname{rot} F \in \mathbb{R}^3$$

Makroskopická rotace

Mikroskopická rotace – kulička vhozená do tekutiny, střed kuličky upevníme, takže kulička se může otáčet ve všech směrech kolem svého středu, ale nemůže se hýbat

Makroskopická rotace – uvolníme střed kuličky a kulička se začne otáčet v kruzích nesená tokem tekutiny. Nelze ji jednoduše spočítat jako $\mathrm{rot} F$.

Příklad $F(x, y, z) = (-y, x, 0) \quad \ldots$ rotace kolem osy z. V tomto případě si můžeme makroskopickou rotaci představit jako rotaci (volné) kuličky v tekutině v rovině $z = 0$. Pozor!!! Tato makroskopická rotace není $\mathrm{rot} F$ vektorového pole F. Abychom mohli měřit $\mathrm{rot} F$, musíme upevnit střed kuličky. Vypočtěte si, že $\mathrm{rot}\, F = (0, 0, 2)$.

Příklad $F(x, y, z) = \dfrac{(-y, x, 0)}{x^2 + y^2}, \qquad (x, y) \neq (0.0).$

Rozlišíme 2 případy: Podél kružnic $x^2 + y^2 = konstanta \Longrightarrow$ dostaneme předchozí příklad, tedy makroskopickou rotaci kolem osy z.

Pro obecný bod, který neleží na ose z dostaneme $\mathrm{rot}\, F = (0, 0, 0)$. Ověřte.

Greenova věta

$\mathcal{C}$ . . . orientovaná,jednoduchá **uzavřená** křivka $\Longrightarrow$

křivkový integrál $\displaystyle\int_{\mathcal{C}} F \mathrm{d}s$ reprezentuje rotaci F "kolem"křivky $\mathcal{C}$.

Např. je-li F rychlostní pole toku vody, tento integrál ukazuje, jak

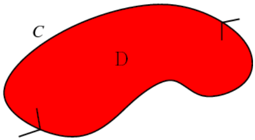
velkou tendenci má voda cirkulovat podél cesty ve směru orientace $\mathcal{C}$.

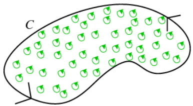
Greenova věta . . . převádí výpočet

křivkového integrálu přes uzavřenou křivku $\mathcal{C}$ na dvojný integrál přes vnitřek $\mathcal{C}$

Ale co budeme integrovat přes vnitřek $\mathcal{C}$, aby byl výsledek stejný, jako kdybychom integrovali po uzavřené křivce $\mathcal{C}$?

Greenova věta udává vztah mezi makroskopickou rotací podél uzavřené křivky $\mathcal{C}$ a součtem mikroskopických rotací uvnitř $\mathcal{C}$.





Makroskopická cirkulace vektorového pole F podél $\mathcal{C}$

Součet mikroskopických cirkulací vektorového pole F uvnitř $\mathcal{C}$

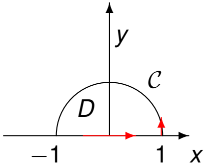
$$\int_{\mathcal{C}} F \,\mathrm{d}s = \iint_D \underbrace{\text{mikroskopická cirkulace } F}_{\mathrm{rot} F \cdot \mathbf{k}} \,\mathrm{d}A$$

D ... oblast "uvnitř"uzavřené křivky $\mathcal{C}$,
$\mathbf{k}$ ... jednotkový vektor ve směru osy z,
$\mathrm{rot}\, F \cdot \mathbf{k}$ ... $z-$ová složka operátoru $\mathrm{rot}\, F$

Greenova věta Nechť $\mathcal{C}$ je kladně orientovaná jednoduchá uzavřená křivka, D je oblast "uvnitř" uzavřené křivky $\mathcal{C}$. Pak

$$\int_{\mathcal{C}} F\,\mathrm{d}s = \iint_D (\mathrm{rot}\,F)\cdot\mathbf{k}\,\mathrm{d}A = \iint_D \left(\frac{\partial F_2}{\partial x} - \frac{\partial F_1}{\partial y}\right)\mathrm{d}A\,.$$

Příklad Vypočtěte $\int_{\mathcal{C}} y^2\mathrm{d}x + 3xy\mathrm{d}y$, kde $\mathcal{C}$ je kladně orientovaná hranice horního půlkruhu D.



$$F(x,y) = (y^2, 3xy)$$

Pomocí dvojného integrálu: integrand

$$\frac{\partial F_2}{\partial x} - \frac{\partial F_1}{\partial y} = 3y - 2y = y$$

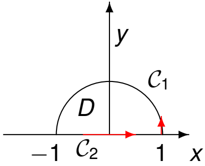
oblast D: $-1 \le x \le 1, \quad 0 \le y \le \sqrt{1-x^2}$

$$\int_{\mathcal{C}} y^2 \mathrm{d}x + 3xy\mathrm{d}y = \iint_D (\mathrm{rot}\, F)\cdot \mathbf{k}\,\mathrm{d}A = \iint_D y\mathrm{d}A =$$

$$= \int_{-1}^{1}\left(\int_0^{\sqrt{1-x^2}} y\mathrm{d}y\right)\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1}(1-x^2)\mathrm{d}x = \frac{2}{3}\,.$$

Jiný způsob výpočtu: křivkový integrál:

$\mathcal{I} = \int_{\mathcal{C}} y^2\mathrm{d}x + 3xy\mathrm{d}y\,,\quad \mathcal{C}$ je kladně orientovaná hranice horního půlkruhu D.



Parametrizace $\mathcal{C}_1$: $r = 1,\ t \in \langle 0, \pi\rangle$,
$x = \cos t,\ y = \sin t\,,\quad \mathrm{d}x = -\sin t\mathrm{d}t,\ \mathrm{d}y = \cos t\mathrm{d}t$

Parametrizace $\mathcal{C}_2$: $t \in \langle -1, 1\rangle$,
$x = t,\ y = 0\,,\quad \mathrm{d}x = \mathrm{d}t,\ \mathrm{d}y = 0$

$$\mathcal{I} = \int_{\mathcal{C}_1} y^2 \mathrm{d}x + 3xy\mathrm{d}y + \int_{\mathcal{C}_2} y^2 \mathrm{d}x + 3xy\mathrm{d}y = \int_0^{\pi} (-\sin^3 t + 3\cos t \sin t)\mathrm{d}t + \int_{-1}^{1} 0\mathrm{d}t =$$

$$= \int_0^{\pi} \sin t\,(-\sin^2 t + 3\cos t)\mathrm{d}t = -\int_0^{\pi} \sin t(1-\cos^3 t)\mathrm{d}t + 3\int_0^{\pi} \sin t \cos t\mathrm{d}t$$

$$-\int \sin t\,(1-\cos^2 t)\mathrm{d}t = \left| \begin{array}{rcl} \cos t & = & u \\ -\sin t\mathrm{d}t & = & \mathrm{d}u \end{array} \right| = \int (1-u^2)\mathrm{d}u = 1 - \frac{1}{3}\cos^3 t$$

$$\int \sin t \cos t\mathrm{d}t = \left| \begin{array}{rcl} \cos t & = & u \\ -\sin t\mathrm{d}t & = & \mathrm{d}u \end{array} \right| = -\int u\mathrm{d}u = -\frac{1}{2}\cos^2 t$$

$$\mathcal{I} = \left[1 - \frac{1}{3}\cos^3 t\right]_0^{\pi} - \frac{1}{2}\left[\cos^2 t\right]_0^{\pi} = \frac{2}{3}\,.$$

Cvičení Vypočtěte pomocí Greenovy věty (křivku nakreslete)

$$\int_{\mathcal{C}} (\sqrt{x} - y)\,\mathrm{d}x + \left(\frac{1}{1+y^2} + x\right)\,\mathrm{d}y\,,$$

kde křivka $\mathcal{C}$ je sjednocení části paraboly $y^2 = x$ mezi body $A = (0;0)$ a $B = (1;1)$ a úsečky AB. Křivka je probíhaná v kladném smyslu.

Poznámka Nezávislost křivkového integrálu na cestě:
Nechť $F = (F_1, F_2, F_3)$ je vektorové pole na j.s. oblasti $G \subset \mathbb{R}^3$, $\mathcal{C}$ uzavřená křivka. Pak křivkový integrál vektorového pole
$\int_{\mathcal{C}} F \mathrm{d}s$ nezávisí na integrační cestě (tedy F je potenciální na G)

$$\Longleftrightarrow$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial y} = \frac{\partial F_2}{\partial x}, \quad \frac{\partial F_1}{\partial z} = \frac{\partial F_3}{\partial x}, \quad \frac{\partial F_2}{\partial z} = \frac{\partial F_3}{\partial y},$$

$$\Longleftrightarrow$$

$$\mathrm{rot}\, F = 0 \,.$$

Poznámka Integrální definice divergence – integrálem se v tomto případě myslí plošný integrál, nebudeme se tím zatím zabývat.

Poznámka Chemická interpretace divergence:
$\mathrm{div}\, v(P)$, kde vektorové pole v je gradientem koncentrace, představuje množství chemické látky, které v okolí bodu P přibude difúzí nebo vznikne chemickou reakcí ($\mathrm{div}\, v(P) < 0$) a nebo z okolí bodu P zmizí ($\mathrm{div}\, v(P) > 0$).

Definice Bod P, ve kterém je $\mathrm{div}\, v(P) > 0$ (expanze) se nazývá zdrojem nebo zřídlem vektorového pole v. Bod P, ve kterém $\mathrm{div}\, v(P) < 0$ (komprese) se nazývá propadem .

Poznámka Vektorové pole v na oblasti G se nazývá nezřídlové neboli solenoidální, jestliže

$$\mathrm{div}\, v(P) = 0 \quad \forall P \in G,$$

t.j. žádný bod G není ani zřídlem, ani propadem.

Poznámka Je-li $v(x, y, z)$ rychlostní pole v tekutině, pak se podmínka

$$\mathrm{div}\, v = 0$$

nazývá v hydrodynamice rovnicí kontinuity nestlačitelné tekutiny.

Definice Vektorové pole $v(x, y, z)$, pro které platí

$$\mathrm{rot}\, v(x, y, z) = 0,$$

se nazývá nevírové.

Kdy aplikovat Greenovu větu?

Greenova věta nám umožňuje spočítat křivkový integrál vektorového pole jako dvojný integrál:

$$\int_C F\mathrm{d}s = \iint_D \left(\frac{\partial F_2}{\partial x} - \frac{\partial F_1}{\partial y}\right) \mathrm{d}x\mathrm{d}y\,,$$

kde $D \subset \mathbb{R}^2$, $C = \partial D$ je kladně orientovaná uzavřená křivka.

Jiný zápis: $F(x,y) = (P(x,y), Q(x,y))$, $P : D \longrightarrow \mathbb{R}$, $Q : D \longrightarrow \mathbb{R}$, ∂D je uzavřená křivka,

$$\int_{\partial D} P\mathrm{d}x + Q\mathrm{d}y = \iint_D \left(\frac{\partial Q}{\partial x} - \frac{\partial P}{\partial y}\right) \mathrm{d}x\mathrm{d}y\,.$$

Poznámka: Je-li vektorové pole F potencionální, ∂D kladně orientovaná uzavřená křivka, pak

$$\int_{\partial D} F\mathrm{d}s = 0\,.$$

Diferenciální operace 2. řádu

Diferenciální operace 2. řádu jsou výsledkem dvojnásobné aplikace operátoru nabla ∇ na skalární nebo vektorové pole.

Necht $f(x, y, z)$ je skalární pole třídy $C^2(G)$, t.j. funkce $f : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}$, $f \in C^2(G)$, $\quad a(x, y, z)$ je vektorové pole třídy $C^2(G)$.

- $\mathrm{div}\ \mathrm{grad}\ f$

$$\mathrm{div}\ \mathrm{grad}\ f = \nabla \cdot \nabla f = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)\left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial z}{\partial z}\right) = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}$$

Položme

$$\triangle f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}$$

$\triangle$ ... Laplaceův diferenciální operátor, Laplacián

Někdy se používá označení

$$\triangle = \underbrace{\nabla \cdot \nabla} = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

skalární součin operátoru nabla se sebou samým.

Poznámka Laplaceova a Poissonova rovmice

$$\triangle u = g \ \text{ na } \Omega \subset \mathbb{R}^2, \quad u = u_0 \ \text{ na } \Gamma = \partial\Omega, \ \ldots$$

... parciální diferenciální rovnice 2. řádu eliptického typu

$$g = 0 \qquad \text{Laplaceova rovnice}$$

$$g \neq 0 \qquad \text{Poissonova rovnice}$$

funkce splňující
$\triangle u = 0$ harmonické funkce

- div rot a

$$\operatorname{div}\operatorname{rot} a = \nabla \cdot (\nabla \times a) = \nabla \cdot \left(\frac{\partial a_3}{\partial y} - \frac{\partial a_2}{\partial z}, \frac{\partial a_1}{\partial z} - \frac{\partial a_3}{\partial x}, \frac{\partial a_2}{\partial x} - \frac{\partial a_1}{\partial y} \right) =$$

$$\frac{\partial^2 a_3}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 a_2}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 a_1}{\partial y \partial z} - \frac{\partial^2 a_3}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 a_2}{\partial x \partial z} - \frac{\partial^2 a_1}{\partial y \partial z} = 0$$

$$\Longrightarrow \qquad \operatorname{div}\operatorname{rot} a = 0\,.$$

Cvičení Upravte rot (rot a).

- rot grad f, $\quad f \in C^2(G)$

$$\text{rot grad } f = \nabla \times \nabla f = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial f}{\partial x} & \frac{\partial f}{\partial y} & \frac{\partial f}{\partial z} \end{vmatrix} =$$

$$\mathbf{i}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial z} - \frac{\partial^2 f}{\partial z \partial y}\right) - \mathbf{j}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial z} - \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial z}\right) + \mathbf{k}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial z} - \frac{\partial^2 f}{\partial z \partial y}\right) = 0.$$

Tedy

$$\text{rot grad } f = 0\,.$$

Poznámka Kdybychom uvažovali $(\nabla \times \nabla) f \ldots$

$$\nabla \times \nabla = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix} = 0, \quad \text{a tedy} \quad (\nabla \times \nabla) f = 0 \cdot f = 0$$

Gaussova–Ostrogradského věta

Věta Gaussova–Ostrogradského, divergenční
Necht $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ je omezená oblast s Lipschitzovskou hranicí Γ, $u \in H^1(\Omega)$. Pak

$$\int_\Omega \frac{\partial u}{\partial x_i} \mathrm{d}x = \int_\Gamma u \, n_i \mathrm{d}S \,, \quad i = 1, 2,$$

kde $n = (n_1, n_2)$ je jednotková vnější normála ke Γ.

Věta říká, že dvojný integrál přes Ω (= vnitřek $\mathcal{C}$) je roven křivkovému integrálu přes hranici Γ oblasti Ω, kde $\Gamma = \mathcal{C}$ je uzavřená křivka kladně orientovaná.

Položme ve větě $u := v \cdot w$. Dostaneme

$$\int_\Omega \left(\frac{\partial v}{\partial x_i} w + \frac{\partial w}{\partial x_i} v \right) \mathrm{d}x = \int_\Gamma v \cdot w \cdot n_i \mathrm{d}S \,, \quad i = 1, 2, \quad v, w \in C^1(\Omega), \; \Omega \subset \mathbb{R}^2 \,.$$

1. Greenova formule

$$\int_\Omega \frac{\partial v}{\partial x_i} w \mathrm{d}x = \int_\Gamma v \cdot w \cdot n_i \, \mathrm{d}S - \int_\Omega \frac{\partial w}{\partial x_i} v \mathrm{d}x \,, \quad i = 1, 2, \quad v, w \in C^1(\Omega), \; \Omega \subset \mathbb{R}^2 \,.$$

Rozepišme 1. Greenovu formuli do složek:

$$\int_\Omega \frac{\partial v}{\partial x_1} w \mathrm{d}x = \int_\Gamma v \cdot w \cdot n_1 \, \mathrm{d}S - \int_\Omega \frac{\partial w}{\partial x_1} v \mathrm{d}x \quad (2)$$

$$\int_\Omega \frac{\partial v}{\partial x_2} w \mathrm{d}x = \int_\Gamma v \cdot w \cdot n_2 \, \mathrm{d}S - \int_\Omega \frac{\partial w}{\partial x_2} v \mathrm{d}x \quad (3)$$

Nyní v rovnici (2) dosadíme $w := \dfrac{\partial w}{\partial x_1}$ a v rovnici (3) dosadíme $w := \dfrac{\partial w}{\partial x_2}$. Tedy

$$\int_\Omega \frac{\partial v}{\partial x_1} \frac{\partial w}{\partial x_1} \mathrm{d}x = \int_\Gamma v \cdot \frac{\partial w}{\partial x_1} \cdot n_1 \, \mathrm{d}S - \int_\Omega \frac{\partial^2 w}{\partial x_1^2} v \mathrm{d}x \quad (4)$$

$$\int_\Omega \frac{\partial v}{\partial x_2} \frac{\partial w}{\partial x_2} \mathrm{d}x = \int_\Gamma v \cdot \frac{\partial w}{\partial x_2} \cdot n_2 \, \mathrm{d}S - \int_\Omega \frac{\partial^2 w}{\partial x_2^2} v \mathrm{d}x \quad (5)$$

Rovnice (4) a (5) sečteme:

$$\int_\Omega \left(\frac{\partial v}{\partial x_1} \frac{\partial w}{\partial x_1} + \frac{\partial v}{\partial x_2} \frac{\partial w}{\partial x_2} \right) \mathrm{d}x =$$

$$\int_\Gamma v \cdot \left(\frac{\partial w}{\partial x_1} \cdot n_1 + \frac{\partial w}{\partial x_2} \cdot n_2 \right) \mathrm{d}S - \int_\Omega \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial x_2^2} \right) v \mathrm{d}x,$$

tedy

$$\int_\Omega \operatorname{grad} v \cdot \operatorname{grad} w \mathrm{d}x = \int_\Gamma v \operatorname{grad} w \cdot n \mathrm{d}S - \int_\Omega \triangle w \cdot v \mathrm{d}x$$

neboli

$$\int_\Omega \nabla v \, \nabla w \mathrm{d}x = \int_\Gamma v \, \frac{\partial w}{\partial n} \mathrm{d}S - \int_\Omega \triangle w \; v \mathrm{d}x \, .$$

2. Greenova formule

$$-\int_\Omega \triangle w \; v \mathrm{d}x = -\int_\Gamma v \, \frac{\partial w}{\partial n} \mathrm{d}S + \int_\Omega \nabla v \, \nabla w \mathrm{d}x$$

★ Gaussova-Greenova-Ostrogradského věta

Definice (zobecněná plocha) Řekneme, že $S \subset \mathbb{R}^n (n \geq 2)$ je zobecněná $(n-1)$–plocha, pokud S je konečným sjednocením hladkých $(n-1)$–ploch, $(n-2)$–ploch, ..., 2–ploch, hladkých křivek a bodů.

Věta (Gaussova-Greenova-Ostrogradského) Nechť Ω je omezená souvislá otevřená množina v $\mathbb{R}^n$, $n \geq 2$, její hranice $\partial\Omega$ je zobecněná $(n-1)$–plocha. Nechť všechny integrované (skalární či vektorové) funkce jsou (pro jednoduchost) spojité spolu se všemi potřebnými derivacemi na $\overline{\Omega}$. Symbolem $\vec{\nu}$ označujeme jednotkový vektor vnější normály k Ω v bodech $\partial\Omega$, ve kterých existuje.

Pro $f : \overline{\Omega} \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, resp. $\vec{T} : \overline{\Omega} \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ platí

- Gaussova-Greenova-Ostrogradského věta pro $k \in \{1, \ldots, n\}$:

$$\int_\Omega \frac{\partial f}{\partial x_k} \mathrm{d}x = \int_{\partial\Omega} f \nu_k \mathrm{d}S.$$

- Věta o divergenci:

$$\int_\Omega \operatorname{div} \vec{T} \mathrm{d}x = \int_{\partial\Omega} \vec{T} \cdot \vec{\nu} \mathrm{d}S.$$

Reakčně-difúzní rovnice

Příklad: Bilance chemické složky v systému s reakcí a transportem. Necht $V \subset \mathbb{R}^3$ je uzavřená oblast, plocha S její hranice. Předpokládejme, že rozložení částic složky v každém bodě $x = (x_1, x_2, x_3) \in V$ a v každém čase $t \in (0, \infty)$ lze popsat pomocí koncentrace $c = c(x, t)$. Zaveďme dále intenzitu toku látky $J = J(x, t)$ v bodě x a v čase t. Tento vektor představuje směr a množství látky, které projde jednotkovou plochou za jednotku času. Podle zákona zachování hmoty je změna látkového množství ve V rovna úhrnému toku látkového množství plochou S plus látkové množství, které ve V vznikne:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V c(x,t)\,\mathrm{d}V = -\int_S J\cdot\mathrm{d}S + \int_V f\,\mathrm{d}V\,, \tag{6}$$

kde $f(c, x, t)$ reprezentuje zdroj (vznik či zánik chemickou reakci). Aplikujeme Gaussovu-Ostrogradského větu na integrál $\int_S J\cdot\mathrm{d}S$ a za předpokladu, že $c(x, t)$ je spojitá, dostaneme

$$\int_V \left[\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla\cdot J - f\right]\mathrm{d}V = 0\,.$$

Protože toto platí pro libovolné V, musí být integrand nulový a zákon zachování pro c má tvar

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot J = f(c, x, t)\,. \tag{7}$$

Tato rovnice platí pro obecný transport, at už difúzí nebo konvekcí (prouděním) nebo jejich kombinací.
Je-li naším procesem klasická difúze, kdy předpokládáme, že difúzní tok $J(x, t)$ směřuje z oblasti s velkou koncentrací látky $c(x, t)$ do oblasti s malou koncentrací této látky, pak intezita toku je dána prvním Fickovým zákonem,

$$J = -D\nabla c \tag{8}$$

a rovnice (7) má tvar

$$\frac{\partial c}{\partial t} = f + \nabla \cdot (D\nabla c)\,, \tag{9}$$

kde difuzivita D může být funkcí x a c a f funkcí c, x a t.

Poznámka: V rovnici (8) lze také uvažovat difúzi a konvekci

$$J = -D\nabla c + vc\,,$$

kde v je rychlost tekutiny unášející složku systémem (tj. přes plochu S uzavírající objem V).
Zobecníme-li dále reakčně-difúzni rovnici (9) pro m reagujících chemických látek, zavedeme vektor koncentrací

$$u(x,t) = (u_1(x,t), \dots, u_m(x,t)),$$

přičemž každá složka difunduje s vlastním difúzním koeficientem D_i, a zdroj je vektor f, jehož složky představuji úhrnnou reakční rychlost každé chemické látky. Pak má rovnice (9) tvar

$$\frac{\partial u}{\partial t} = f + \nabla \cdot (D\nabla u)\,,$$

kde D je matice difúzních koeficientů (obvykle diagonální) a $\nabla \cdot D\nabla u$ je vektor.

Literatura k dalšímu studiu

- Brand L. : Vector Analysis. Dover Publications, Inc., 2006.
- Davis H. F.: Introduction to Vector Analysis, 7 Revised Edition. William C. Brown, 1995.
- Havelka T.: Reakčně difúzní modely a jejich aplikace. Diplomová práce, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita Brno, Ústav matematiky a statistiky, 2017.
- Klíč A., Dubcová M.: Základy tenzorového počtu s aplikacemi, VŠCHT Praha, 1998.
- Spiegel M, Lipschutz S., Spellman D.: Vector Analysis. McGraw-Hill Education, 2 edition, 2009.
- Nagy J., Taufer J.: Integrální počet funkcí více proměnných, ČVUT Praha, 1999.