

2. Sbírka aplikačních příkladů

Parciální diferenciální rovnice

Příklad 2.1 Nestacionární sdílení hmoty v porézním katalyzátoru ve tvaru kuličky, ve kterém probíhá reakce 1. řádu, je popsáno rovnicí

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \frac{\partial u}{\partial x} - \phi^2 u \quad (1)$$

s počáteční podmínkou

$$u(x, 0) = 0, \quad x \in \langle 0, 1 \rangle \quad (2)$$

a okrajovými podmínkami

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = 0 \quad (3)$$

$$u(1, t) = 1. \quad (4)$$

Řešte pro hodnotu parametru $\phi^2 = 4$.

Poznámka: Pro hodnoty $x \rightarrow 0$ je nutno rovnici (1) upravit, aby se v ní nevyskytovaly neurčité výrazy.

Vzhledem k tomu, že

$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{x} \frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$, lze pro $x = 0$, přepsat rovnici (1) na

$$\frac{\partial u}{\partial t} = 3 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \phi^2 u. \quad (5)$$

Příklad 2.2 Axiální disperze hmoty probíhající za izotermních podmínek, která je doprovázená reakcí 1. řádu, je popsána parabolickou lineární rovnicí

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial u}{\partial x} + Da(1 - u) \quad (6)$$

s okrajovými podmínkami

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = Pe u(0, t) \quad (7)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(1, t) = 0. \quad (8)$$

a počáteční podmínkou

$$u(x, 0) = 0, \quad x \in \langle 0, 1 \rangle. \quad (9)$$

Pecletovo číslo Pe a Damköhlerovo číslo Da jsou parametry úlohy. Řešte tento vztah pro

a) $Pe = 10$ a $Da = 0,03$,

b) $Pe = 200$ a $Da = 0,03$.

V případě za b) musíte použít podstatně hustší síť uzlových bodů, chcete-li získat řešení srovnatelné přesnosti. K výpočtu použijte diferenčního schematu Crank–Nicolsonové.

Příklad 2.3 Vnitřní difuze v částici katalyzátoru tvaru desky doprovázená izotermní reakcí 2. řádu je popsána parabolickou rovnicí (y je koncentrace)

$$\frac{\partial y}{\partial t} = \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - \delta y^2 \quad (10)$$

s okrajovými podmínkami

$$y(0, t) = 1 \quad (11)$$

$$y(1, t) = 1. \quad (12)$$

odpovídající nekonečnému koeficientu přestupu hmoty do okolí. Počáteční podmínkou uvažujeme následující

$$y(x, 0) = 0, \quad x \in (0, 1). \quad (13)$$

Vypočítejte řešení pro $\delta = 1; 0,5$ a $h = 0,2; 0,1; 0,05$. Řešte explicitní metodou.

Pomocí linearizace odvoďte metodu typu Crank–Nicolsonové. Řešte pro $\delta = 1; 0,5$ a $h = 0,2; 0,1; 0,05$ a kroky $k = 0,05; 0,02; 0,01; 0,005$.

Srovnajte výsledky s explicitní metodou.

Příklad 2.4 Nestacionární popis izotermního trubkového reaktoru s podélným promícháváním, v němž probíhá reakce $A + A \rightarrow 2B$, je tvaru

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial u}{\partial x} - Da u^2. \quad (14)$$

Zde Pe je Pecletovo číslo a Da je Damköhlerovo číslo, x je bezrozměrná axiální souřadnice, t je bezrozměrný čas a u bezrozměrná koncentrace. Okrajové podmínky jsou dány rovnicemi

$$p = u(0, t) - \frac{1}{Pe} \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) \quad (15)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(X, t) = 0, \quad (16)$$

kde X je celková bezrozměrná délka reaktoru a p představuje koncentraci látky A před vstupem do reaktoru. Počáteční podmínku můžeme zapsat

$$u(x, 0) = \varphi(x), \quad x \in \langle 0, X \rangle. \quad (17)$$

Uvedenou úlohu řešte metodou Crank–Nicolsonové na intervalu $\langle 0, X \rangle$ pro hodnoty parametrů: $p = 0,07$; $h = 0,5$; $Pe = 2$; $Da = 1$; $X = 48$; $\varphi = 0$.

Příklad 2.5 Nestacionární vnitřní difuze v katalyzátoru ve tvaru desky za izotermních podmínek, která je doprovázená reakcí 2. řádu, probíhající se změnou počtu molů, je popsána parabolickou rovnicí

$$\frac{\partial y}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{1}{1 + \sigma y} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right] - \phi^2 y^2 \quad (18)$$

s okrajovými podmínkami

$$\frac{\partial y}{\partial \xi}(0, \tau) = 0 \quad (19)$$

$$y(1, \tau) = 1 \quad (20)$$

a počáteční podmínkou

$$y(\xi, 0) = 0, \quad \xi \in \langle 0, 1 \rangle. \quad (21)$$

Řešte rovnici

a) quasilinearizací za použití schematu Crank–Nicolsonové ,

b) explicitním schematem.

Řešte konkrétně pro hodnoty: $\sigma = -0,5$; $\phi^2 = 1,0$; $4,0$.