

```
In[1]:= Get[FileNameJoin[{NotebookDirectory[], "DeStrelba.wl"}]]
```

Aplikační příklad I

Apl. příklad 1: Izotermní vnitřní difuze v porézním katalyzátoru je popsána diferenciální rovnicí

$$y'' + \frac{a}{x} y' = \phi y^n \text{ s okrajovou podmínkou } y'(0)=0 \text{ a } y(1)=1.$$

Parametr a charakterizuje tvar částice katalyzátoru $a=0$ pro desku, $a=1$ pro váleček, $a=2$ pro kuličku, n je řád reakce a ϕ Thieleho modul.

- Vyřešte tuto rovnici metodou střelby pro $n=0$, $a=1$ a $\phi=1$
- Vyřešte tuto rovnici metodou střelby pro $n=1$, $a=2$ a $\phi=1;2;4$
- Vyřešte tuto rovnici metodou střelby pro $n=1$, $a=0$ a $\phi=1;2;4$

a)

Protože v rovnici je dělení 0, zkusíme integrovat os 1.0 do 0.0. Mathematica dá správný výsledek, ale dává chybová hlášení. Chybových hlášení se zbavíme, když budeme integrovat od 1.0 do 0.000000000001. Dostaneme také dobrý výsledek. Výsledek můžeme zkontovalovat s přesným řešením. Korektnější způsob řešení najdeme níže.

$\phi=1$

Definice parametrů diferenciální rovnice

```
In[2]:= n = 0;
aa = 1;
phi = 1;
```

Definice pravé strany diferenciální rovnice

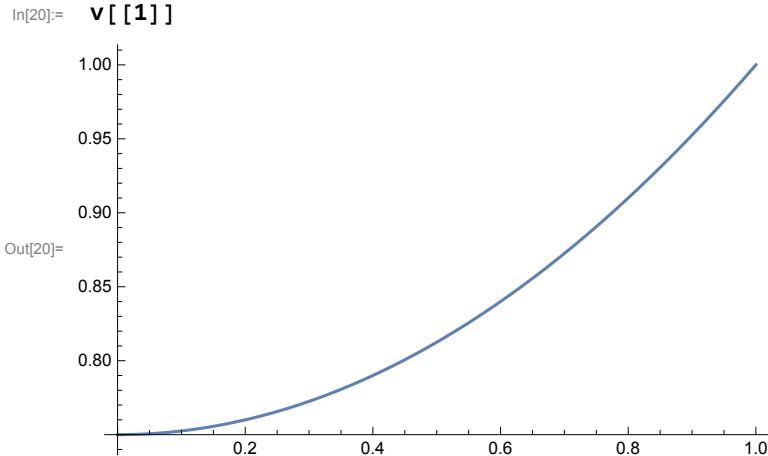
```
In[5]:= f[x_, y1_, y2_] = y2;
g[x_, y1_, y2_] = -aa/x * y2 + phi^2 y1^n;
```

Parametry programu Strelba1/Strelba2

```
In[7]:= a = 1;
b = 0.000000000001;
alpha1 = 1;
alpha2 = 0;
beta1 = 0;
beta2 = 1;
gamma1 = 1;
gamma2 = 0;
epsilon = 0.0000001;
zeta0 = 0.1;
m = 10;
Lx = Table[N[a + i (b - a) / m], {i, 0, m}]; (*Body ve kterých vyčíslím řešení *)
In[19]:= v = Strelba2[f, g, a, b, alpha1, alpha2, beta1, beta2, gamma1, gamma2, epsilon, zeta0, Lx];
```

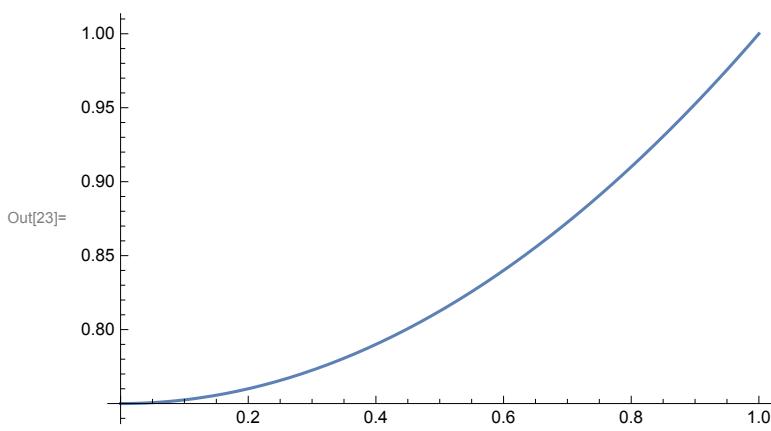
i	z	s
0	0.1	
1	0.5	0.4
2	0.5	8.32667×10^{-16}

Graf řešení $y_1(x)$

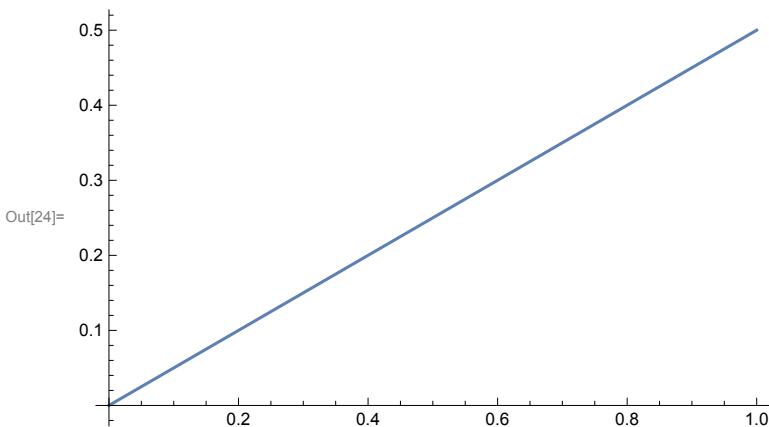


Přesné řešení

In[21]:= **y = .;**
In[22]:= **pres = DSolve[{y''[x] == -y'[x]/x + 1, y'[0] == 0, y[1] == 1}, y[x], x]**
Out[22]= $\left\{ \left\{ y[x] \rightarrow \frac{1}{4} (3 + x^2) \right\} \right\}$
In[23]:= **Plot[y[x] /. pres, {x, 0, 1}]**



Graf řešení $y_2(x)$

In[24]:= **v[[2]]**Tabulka řešení $y_1(x)$ In[25]:= **MatrixForm[v[[3]]]**

Out[25]//MatrixForm=

1.	1.
0.9	0.9525
0.8	0.91
0.7	0.8725
0.6	0.84
0.5	0.8125
0.4	0.79
0.3	0.7725
0.2	0.76
0.1	0.7525
9.99978×10^{-13}	0.75

Tabulka řešení $y_2(x)$ In[26]:= **MatrixForm[v[[4]]]**

Out[26]//MatrixForm=

1.	0.5
0.9	0.45
0.8	0.4
0.7	0.35
0.6	0.3
0.5	0.25
0.4	0.2
0.3	0.15
0.2	0.1
0.1	0.05
9.99978×10^{-13}	4.99989×10^{-13}

Jiná možnost řešení (korektnější), pravou stranu rovnice zadáme po částech. Pro $x=0$ dosadíme do prave strany hodnotu limity, jestliže $x>0$.

In[27]:= **n = 0;**
aa = 1;
phi = 1;

In[30]:= **f[x_, y1_, y2_] = y2;**
g[x_, y1_, y2_] = If[x == 0, 1 / (1 + aa) phi^2 y1^n, -aa / x * y2 + phi^2 y1^n];

```

In[32]:= f[x_, y1_, y2_] = y2
g[x_, y1_, y2_] = If[x == 0, 1/(1 + aa) φ² y1^n, -aa/x * y2 + φ² y1^n]

Out[32]= y2

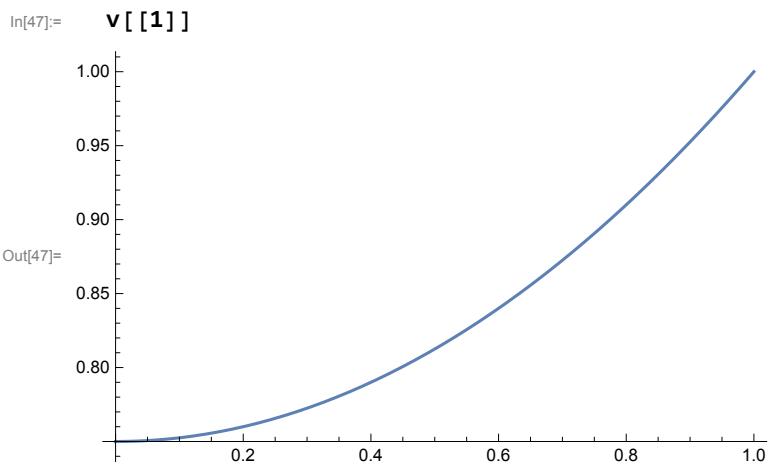
Out[33]= If[x == 0, φ² y1^n / (1 + aa), -aa y2 / x + φ² y1^n]

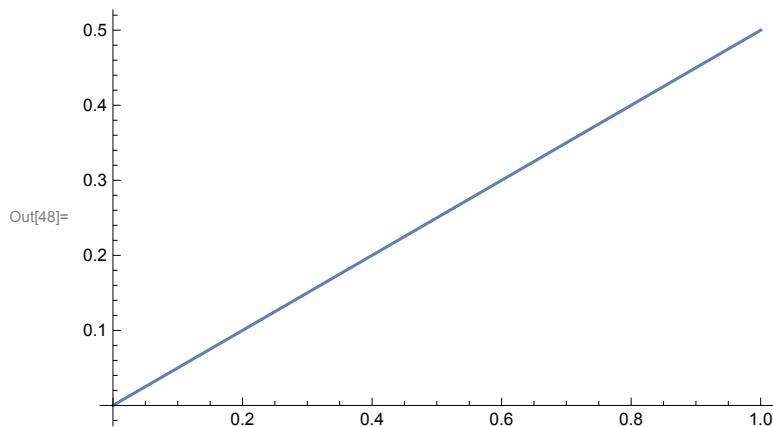
In[34]:= a = 0.0;
b = 1.0;
α1 = 0;
α2 = 1;
β1 = 1;
β2 = 0;
γ1 = 0;
γ2 = 1;
ε = 0.00000001;
z0 = 0.1;
m = 10;
Lx = Table[N[a + i (b - a) / m], {i, 0, m}];

In[46]:= v = Strelba2[f, g, a, b, α1, α2, β1, β2, γ1, γ2, ε, z0, Lx];

```

i	z	s
0	0.1	
1	0.75	0.65
2	0.75	2.22045×10^{-16}

Graf řešení $y_1(x)$ Graf řešení $y_2(x)$

In[48]:= **v[[2]]**Tabulka řešení $y_1(x)$ In[49]:= **MatrixForm[v[[3]]]**

Out[49]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} 0. & 0.75 \\ 0.1 & 0.7525 \\ 0.2 & 0.76 \\ 0.3 & 0.7725 \\ 0.4 & 0.79 \\ 0.5 & 0.8125 \\ 0.6 & 0.84 \\ 0.7 & 0.8725 \\ 0.8 & 0.91 \\ 0.9 & 0.9525 \\ 1. & 1. \end{pmatrix}$$

Tabulka řešení $y_2(x)$ In[50]:= **MatrixForm[v[[4]]]**

Out[50]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} 0. & 0. \\ 0.1 & 0.05 \\ 0.2 & 0.1 \\ 0.3 & 0.15 \\ 0.4 & 0.2 \\ 0.5 & 0.25 \\ 0.6 & 0.3 \\ 0.7 & 0.35 \\ 0.8 & 0.4 \\ 0.9 & 0.45 \\ 1. & 0.5 \end{pmatrix}$$

b)

ϕ=1

Definice parametrů diferenciální rovnice

```
In[51]:= n = 1;
aa = 2;
ϕ = 1;
```

Definice pravé strany diferenciální rovnice

```
In[54]:= f[x_, y1_, y2_] = y2;
g[x_, y1_, y2_] = If[x == 0, 1 / (1 + aa) φ² y1^n, -aa / x * y2 + φ² y1^n];
```

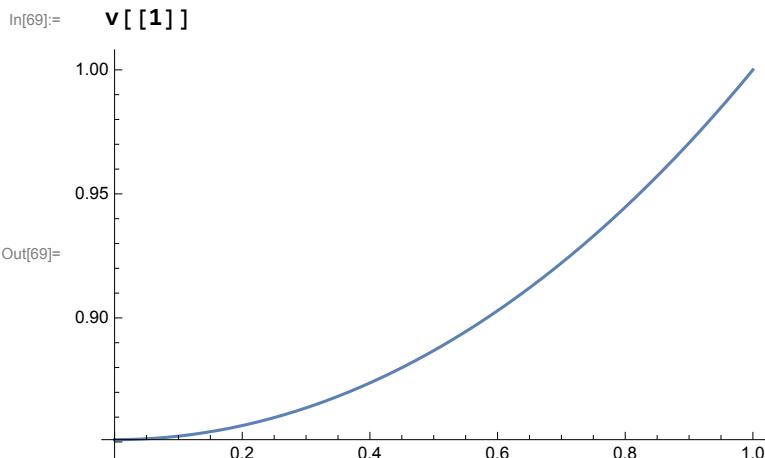
Parametry programu Strelba1/Strelba2

```
In[56]:= a = 0.0;
b = 1;
α1 = 0;
α2 = 1;
β1 = 1;
β2 = 0;
γ1 = 0;
γ2 = 1;
ε = 0.00000001;
z0 = 0.1;
m = 10;
Lx = Table[N[a + i (b - a) / m], {i, 0, m}];
```

```
In[68]:= v = Strelba2[f, g, a, b, α1, α2, β1, β2, γ1, γ2, ε, z0, Lx];
```

i	z	s
0	0.1	
1	0.850918	0.750918
2	0.850918	9.78548 × 10⁻⁹

Graf řešení $y_1(x)$



$\phi = 2$

Definice parametrů diferenciální rovnice

```
In[70]:= n = 1;
aa = 2;
φ = 2;
```

Definice parametrů diferenciální rovnice

```
In[73]:= f[x_, y1_, y2_] = y2;
g[x_, y1_, y2_] = If[x == 0, 1 / (1 + aa) φ² y1^n, -aa / x * y2 + φ² y1^n];
```

Parametry programu Strelba1/Strelba2

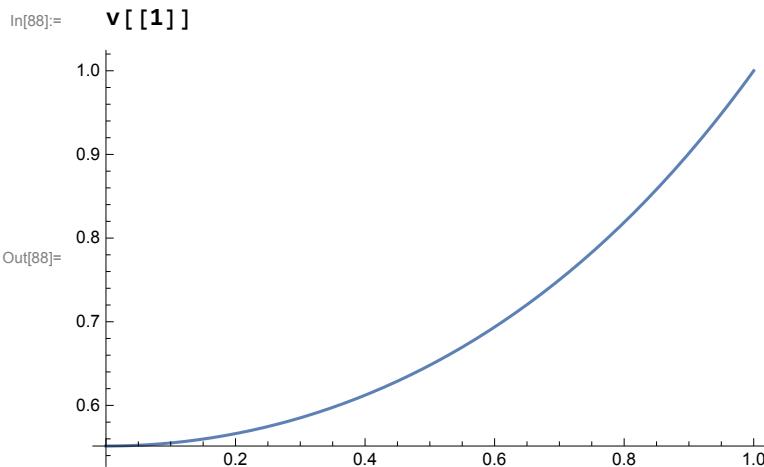
```
In[75]:= a = 0.0;
b = 1;
α1 = 0;
α2 = 1;
β1 = 1;
β2 = 0;
γ1 = 0;
γ2 = 1;
ε = 0.00000001;
z0 = 0.1;
m = 10;
Lx = Table[N[a + i (b - a) / m], {i, 0, m}];

In[87]:= v = Strelba2[f, g, a, b, α1, α2, β1, β2, γ1, γ2, ε, z0, Lx];


| i | z        | s                         |
|---|----------|---------------------------|
| 0 | 0.1      |                           |
| 1 | 0.551441 | 0.451441                  |
| 2 | 0.551441 | $2.64121 \times 10^{-8}$  |
| 3 | 0.551441 | $2.87548 \times 10^{-14}$ |


```

Graf řešení $y_1(x)$



ϕ = 4

Definice parametrů diferenciální rovnice

```
In[89]:= n = 1;
aa = 2;
ϕ = 4;
```

Definice parametrů diferenciální rovnice

```
In[92]:= f[x_, y1_, y2_] = y2
g[x_, y1_, y2_] = If[x == 0, 1/(1 + aa) ϕ^2 y1^n, -aa/x * y2 + ϕ^2 y1^n]
Out[92]= y2
```

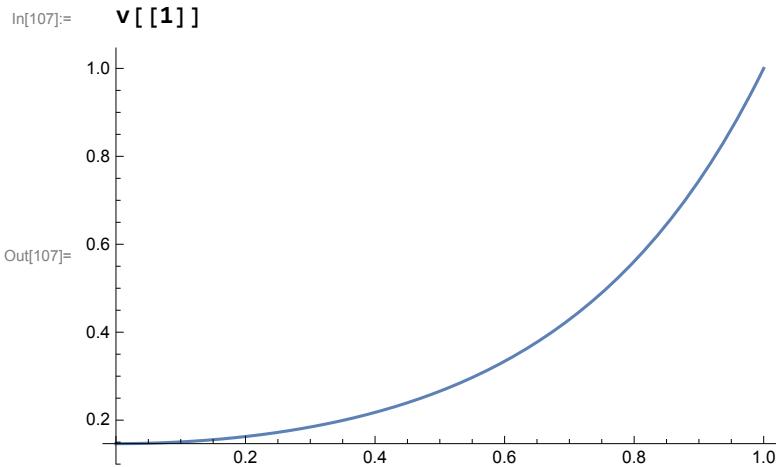
```
Out[93]= If[x == 0,  $\frac{\phi^2 y1^n}{1 + aa}$ ,  $-\frac{aa y2}{x} + \phi^2 y1^n]$ 
```

Parametry programu Strelba1/Strelba2

```
In[94]:= a = 0.0;
b = 1;
α1 = 0;
α2 = 1;
β1 = 1;
β2 = 0;
γ1 = 0;
γ2 = 1;
ε = 0.00000001;
z0 = 0.1;
m = 10;
Lx = Table[N[a + i (b - a) / m], {i, 0, m}];

In[106]:= v = Strelba2[f, g, a, b, α1, α2, β1, β2, γ1, γ2, ε, z0, Lx];
           i      z            s
           0      0.1
           1      0.146574       0.0465743
           2      0.146574       4.20437×10-11
```

Graf řešení $y_1(x)$



c)

ϕ=1

Definice parametrů diferenciální rovnice

```
In[108]:= n = 1;
aa = 0;
ϕ = 1;
```

Definice pravé strany diferenciální rovnice

```
In[111]:= f[x_, y1_, y2_] = y2;
g[x_, y1_, y2_] = If[x == 0, 1 / (1 + aa) ϕ^2 y1^n, -aa / x * y2 + ϕ^2 y1^n];
```

Parametry programu Strelba1/Strelba2

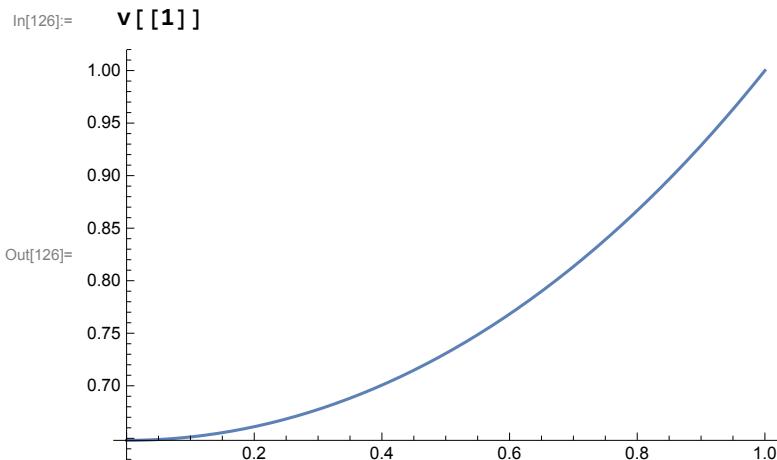
```
In[113]:= a = 0.0;
b = 1;
α1 = 0;
α2 = 1;
β1 = 1;
β2 = 0;
γ1 = 0;
γ2 = 1;
ε = 0.00000001;
z0 = 0.1;
m = 10;
Lx = Table[N[a + i (b - a) / m], {i, 0, m}];

In[125]:= v = Strelba2[f, g, a, b, α1, α2, β1, β2, γ1, γ2, ε, z0, Lx];


| i | z        | s                        |
|---|----------|--------------------------|
| 0 | 0.1      |                          |
| 1 | 0.648054 | 0.548054                 |
| 2 | 0.648054 | $3.21122 \times 10^{-9}$ |


```

Graf řešení $y_1(x)$



$$\phi = 2$$

Definice parametrů diferenciální rovnice

```
In[127]:= n = 1;
aa = 0;
ϕ = 2;
```

Definice parametrů diferenciální rovnice

```
In[130]:= f[x_, y1_, y2_] = y2;
g[x_, y1_, y2_] = If[x == 0, 1 / (1 + aa) ϕ^2 y1^n, -aa / x * y2 + ϕ^2 y1^n];
```

Parametry programu Strelba1/Strelba2

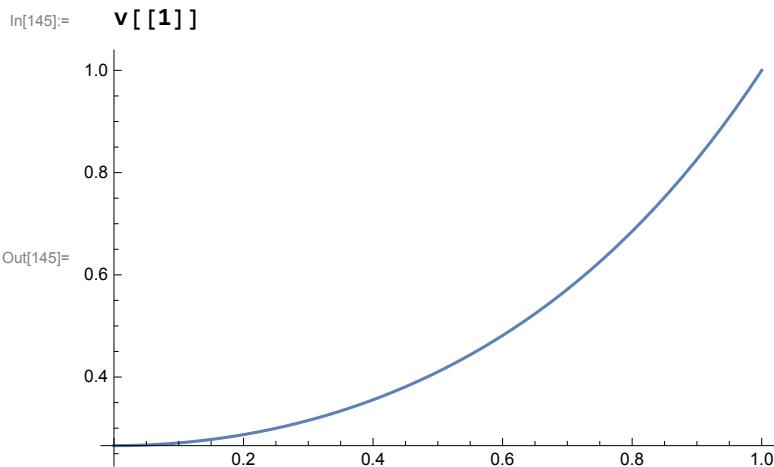
```
In[132]:= a = 0.0;
b = 1;
α1 = 0;
α2 = 1;
β1 = 1;
β2 = 0;
γ1 = 0;
γ2 = 1;
ε = 0.00000001;
z0 = 0.1;
m = 10;
Lx = Table[N[a + i (b - a) / m], {i, 0, m}];

In[144]:= v = Strelba2[f, g, a, b, α1, α2, β1, β2, γ1, γ2, ε, z0, Lx];


| i | z        | s                        |
|---|----------|--------------------------|
| 0 | 0.1      |                          |
| 1 | 0.265802 | 0.165802                 |
| 2 | 0.265802 | $2.07424 \times 10^{-9}$ |


```

Graf řešení $y_1(x)$



$\phi = 4$

Definice parametrů diferenciální rovnice

```
In[146]:= n = 1;
aa = 02;
ϕ = 4;
```

Definice parametrů diferenciální rovnice

```
In[149]:= f[x_, y1_, y2_] = y2
g[x_, y1_, y2_] = If[x == 0, 1/(1 + aa) ϕ^2 y1^n, -aa/x * y2 + ϕ^2 y1^n]
Out[149]= y2
```

```
Out[150]= If[x == 0,  $\frac{\phi^2 y1^n}{1 + aa}$ , - $\frac{aa y2}{x} + \phi^2 y1^n]$ 
```

Parametry programu Strelba1/Strelba2

```
In[151]:= a = 0.0;
b = 1;
α1 = 0;
α2 = 1;
β1 = 1;
β2 = 0;
γ1 = 0;
γ2 = 1;
ε = 0.00000001;
z₀ = 0.1;
m = 10;
Lx = Table[N[a + i (b - a) / m], {i, 0, m}];

In[163]:= v = Strelba2[f, g, a, b, α1, α2, β1, β2, γ1, γ2, ε, z₀, Lx];


| i | z        | s                         |
|---|----------|---------------------------|
| 0 | 0.1      |                           |
| 1 | 0.146574 | 0.0465743                 |
| 2 | 0.146574 | $4.20437 \times 10^{-11}$ |


```

Graf řešení $y_1(x)$

