Transzportfolyamatok modelljei
Segédlet és tanulási útmutató

Tóth János

2011. december 22.

1. A transzportegyenlet és speciális esetei

A félév folyamán az alábbi egyenlet számos speciális esetével és alkalmazásaival fogunk foglalkozni:

$$\boxed{\text{vált. seb.}} = \boxed{\text{diff.}} + \boxed{\text{konv.}} + \boxed{\text{reakció}} + \boxed{\text{kibocs.}}, \tag{1}$$

amely egyenlet valamely fizikai mennyiség, leggyakrabban tömeg időbeli megváltozását úgy írja le, hogy figyelembe veszi az anyag diffúzióját, (konvektív) transzportját, valamint azokat a forrásokat és nyelőket, amelyek még hozzájárulnak az anyag mennyiségének megváltozásához (és amelyek oka leggyakrabban vagy kémiai reakció, vagy kémiai reakcióval modellezhető jelenség pl. ki- és beáramlás), végül pedig a fizikai mennyiség értékétől független (esetleg időtől és tértől függő) kibocsátást (emissziót).[1]

Így tehát foglalkozunk a

$$\boxed{\text{vált. seb.}} = \boxed{\text{diff.}} \tag{2}$$

diffúziós egyenlettel a 4.3.2 szakaszban,

$$\boxed{\text{vált. seb.}} = \boxed{\text{konv.}} \tag{3}$$

(szűkebb értelemben vett) **transzportegyenlet**tel, a 4.2 szakaszban,

$$\boxed{\text{vált. seb.}} = \boxed{\text{reakció}} \tag{4}$$

kinetikai differenciálegyenlettel, a 3.9 szakaszban, és a

$$\boxed{\text{vált. seb.}} = \boxed{\text{emisszió}}, \tag{5}$$

emissziós egyenlettel a 3.1.1 szakaszban, de épp fordított sorrendben! Ennek oka az, hogy a matematikai szempontból egyszerűbb egyenletek felől akarunk

[1] Az elnyelődés általában függ az anyagmennyiségtől, leggyakrabban elsőrendű reakcióval írható le.

haladni a bonyolultabbak felé, annál is inkább, mert az egyszerűbbeknél megtanulandó módszereket általában föl is használjuk a bonyolultabbak tárgyalásánál.

Külön figyelmet érdemelnek a **stacionárius folyamat**ok, azaz azok, amelyeknél a változási sebesség nulla. Ezzel a specializálással jutunk például a

$$0 = \boxed{\text{diff.}} \tag{6}$$

Laplace-egyenlethez (4.3.1 szakasz) és a

$$0 = \boxed{\text{diff.}} + \boxed{\text{emisszió}} \tag{7}$$

Poisson-egyenlethez (4.3.1 szakasz), a

$$0 = \boxed{\text{konv.}} \tag{8}$$

stacionárius transzportegyenlethez, és a kinetikai egyenlet stacionárius pontjaira vonatkozó

$$0 = \boxed{\text{reakció}} \tag{9}$$

egyenlethez.

Sem az (1) egyenlet, sem a fenti felsorolás nem tekinthető teljesnek és pontosnak sem matematikai sem fizikai szempontból. (A fizikai levezetéseket illetően egyébként is a rokon tantárgyakra utalunk.) Megemlíthettük volna még például a reakciódiffúzió-rendszerek stacionárius pontjaira vonatkozó

$$0 = \boxed{\text{diff.}} + \boxed{\text{reakció}} \tag{10}$$

egyenletet is (amely például a mintázatképződést leíró Turing-féle instabilitásnál játszik szerepet), illetve nyilván számos (például mechanikai, illetve hullám-) jelenséget nem tudnánk leírni a gyorsulás figyelembevétele nélkül. Ezért időnként (például a 4.3.3 szakaszban) kilépünk a fenti keretből, első tájékozódásul, mintegy térkép gyanánt az mégis hasznosnak látszik.

2. A transzportegyenlet konkrét alakja

Valójában szinte sosem egyetlen anyagfajtával van dolgunk, hanem többel, és anyagfajtákon kívül megjelenhetnek egyéb mennyiségek is, például a belső energia vagy a hőmérséklet. Általában feltételezzük, hogy a vizsgált rendszer térfogata és nyomása (gyakran hőmérséklete is) állandó. Ebben az elegendően általános esetben a fenti (1) verbális egyenlet az alábbi formális, matematikai mennyiségek közti egyenletként konkretizálható:

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_m(t,\mathbf{x})}{\partial t} &= \nabla(\mathbf{D}_m(t,\mathbf{x})\nabla c_m(t,\mathbf{x})) - \nabla(\mathbf{v}(t,\mathbf{x})c_m(t,\mathbf{x})) \\ &+ f_m(\mathbf{c}(t,\mathbf{x})) + g_m(t,\mathbf{x}) \quad (m = 1,2,\ldots,M),\end{aligned} \tag{11}$$

ahol

1. az $M \in \mathbb{N}$ természetes szám az anyagfajták száma,
2. az $N \in \mathbb{N}$ természetes szám a vizsgált térrész dimenziója (alkalmazásokban általában 1,2 vagy 3),
3. $(t, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{1+N}$ idő- és térkoordináta,
4. a c_m függvény az m-edik anyagfajta mennyisége (vagy koncentrációja, esetleg sűrűsége),
5. a (mátrixértékű) $\mathbf{D}_m$ függvény az m-edik anyagfajta diffúziós együtthatója,
6. a (vektorértékű) $\mathbf{v}$ függvény az anyag áramlási sebessége,
7. az f_m függvény az m-edik anyagfajta képződési (:=keletkezési-fogyási) sebessége,
8. a g_m függvény az m-edik anyagfajta emissziója.

3. Közönséges differenciálegyenletek: Ismétlés, kiegészítések

A forrástag vizsgálata érdekében a (3) egyenlet

$$\boxed{\text{vált. seb.}} = \boxed{\text{reakció}}, \tag{12}$$

speciális alakja helyett valamivel általánosabban az

$$\dot{\mathbf{c}}(t, \mathbf{x}) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{c}(t, \mathbf{x})) \tag{13}$$

közönséges differenciálegyenlettel kell foglalkozunk.

Vizsgálatainkat az alábbi 3.9. szakaszban majd specializáljuk a kinetikai differenciálegyenletek esetére.

3.1. Megoldási módszerek néhány egyszerű típusra

[Tóth és Simon, 2005, 3.1–3.6., 4.2. és 5.3. szakasz].

3.1.1. Közvetlenül integrálható egyenletek

Az **emisszió** leírásához a közvetlenül integrálható egyenletek megoldására van szükségünk.

1. Gyakorló feladat Egy gázmotor emissziója:

$$g_{\mathrm{CO}}(t, \mathbf{x}_0) = 2333.3 \frac{\mathrm{mg}}{s} \quad g_{\mathrm{NO}_x}(t, \mathbf{x}_0) = 3250 \frac{\mathrm{mg}}{s}.$$

Egy óra alatt mennyi bocsát ki a két anyagból a motor? És ha az emisszió sűrűségét adjuk meg, tehát például:

$$g_{\mathrm{CO}_2}(t, \mathbf{x}_0) = 123\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{km}}$$

akkor tudunk válaszolni arra, hogy Budapest és Szeged között egy adott térrészben mekkora a kibocsátott anyag összmennyisége. (A két város távolságát vegyük 170 km-nek.)

Az emissziót általában az

$$\frac{\partial c_m(t, \mathbf{x})}{\partial t} = g_m(t, \mathbf{x}) \quad (m = 1, 2, \ldots, M),$$

egyenlet írja le, ahol az egyenlet vonatkozhat a tömeg vagy a sűrűség időbeli megváltozására. Ebben az egyenletben a helyet jelentő $\mathbf{x}$ vektor paraméterként szerepel, ami azt jelenti, hogy ennek tetszőleges értéke mellett meg kell oldanunk az egyenletet, tehát valóban közönséges differenciálegyenlettel van dolgunk, mégpedig

$$\dot{c}_m(t) = g_m(t) \quad (m = 1, 2, \ldots, M),$$

alakú, közvetlenül integrálható rendszerrel. Tipikus esetben az emisszió időben változik, tehát nem egyszerű szorzás adja az eredményt, mint a fenti triviális feladatoknál, hanem az emisszió sebességének integrálja. Hasonlóan, a távolság szerinti sűrűség is jellemzően függ a helytől (nem mindegy, hogy felfelé, lefelé vagy sík terepen haladunk.)

Más, számunkra érdekes feladatok leírására is használunk közvetlenül integrálható egyenleteket.

2. Gyakorló feladat Egy hógolyó olvad, a térfogatcsökkenés sebessége mindig a felszínnel arányos. Ha 10 órakor a térfogata 500 cm^3, 11 órakor pedig 250 cm^3, hány órakor olvad el teljesen?

3. Gyakorló feladat Berepül a szobába két hógolyó, az egyik sugara a másikénak kétszerese. Olvadásuknál a térfogatcsökkenés sebessége arányos a felszínnel. Mekkora lesz a nagyobb hógolyó sugara akkor, amikor a kisebbik teljesen elolvad?

3.1.2. Autonóm egyenletek

A legegyszerűbb példa a baktériumok szaporodására, a radioaktív bomlásra, illetve az elsőrendű reakcióra fölírt egyenlet. Szintén autonóm egyenlet az $\dot{x}(t) = \sqrt{|x(t)|}$ egyenlet, amelyet az egyértelműség fogalmának bevezetésével kapcsolatban vizsgáltunk.

Ilyenre visszavezethető a homogén egyenlet.

3.1.3. Szétválasztható változójú egyenletek

Be- és kifolyás, reakcióval és anélkül.

3.1.4. Lineáris egyenletek

Alapvető tulajdonságok, kapcsolat az előzőkhöz, két megoldási módszer. Ilyenre visszavezethető a Bernoulli-egyenlet.

3.1.5. Egzakt differenciálegyenletek

Hányados jobboldalú egyenlet, egzakt egyenlet. Integráló tényező.

3.2. Definíciók, egzisztencia- és unicitástételek

[Tóth és Simon, 2005, 2.4–2.5. szakasz].

4. Gyakorló feladat Melyik operátor homogén, additív, lineáris az alábbiak közül? (y elegendően sokszor differenciálható függvények teréből vétetik, ν valós paraméter.)

1. $y \mapsto yy'' + \nu y'^2$,
2. $y \mapsto y(0) + y'$,
3. $y \mapsto \int_0 y \sin$.

5. Gyakorló feladat Összehúzás-e az $M \ni x \mapsto x^2$ leképezés,

1. ha $M = [-\frac{1}{3}, \frac{1}{3}]$;
2. ha $M = [-1, 1]$? Fix pontja(i)?

6. Gyakorló feladat Összehúzás-e az $[\frac{1}{2}, 1] \ni x \mapsto \frac{1}{1+x}$ leképezés? Fix pontja(i)?

7. Gyakorló feladat Összehúzás-e az $\mathbb{R}^2 \ni (x, y) \mapsto (x, -y)$ leképezés? Fix pontja(i)?

8. Gyakorló feladat Összehúzás-e az $\mathbb{R}^2 \ni (x, y) \mapsto (x, y^2)$ leképezés? Fix pontja(i)?

1. Házi feladat A Picard–Lindelöf-tétel [Tóth és Simon, 2005, 44. oldal] alapján becsüljük meg az $y'(x) = 2xy(x)^2$ differenciálegyenletre vonatkozó kezdetiérték-feladat teljes megoldásának értelmezési tartományát,

1. ha $y(1) = 2$ és $\Omega :=]0, 2[\times]1, 3[$;
2. ha $y(0) = 1$ és $\Omega :=] - \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}[\times]0, 2[$.

3.3. Implicit egyenletek

Ezek legtöbbször nem szerepelnek (most sem), nincsenek leírva a könyvünkben, van, amihez jól jönnek, ezért írtam le.

Könnyű megadni olyan implicit egyenletet, amelyiknek nincsen (valós értékű) megoldása: [Tóth és Simon, 2005, 32. oldal, (2.19)].

1. Tétel Legyen $N \in \mathbb{N}; \Omega \subset \mathbb{R}^{2N+1}$ összefüggő nyílt halmaz, és tegyük fel, hogy $\mathbf{f} \in \mathcal{C}(\Omega, \mathbb{R}^N)$ utolsó két változójában teljesíti a Lipschitz-feltételt, azaz

$$\begin{gathered} \exists L_1, L_2 \in \mathbb{R}^+ \forall (t, \mathbf{p}_1, \mathbf{q}_1), (t, \mathbf{p}_2, \mathbf{q}_2) \in \Omega \\ |\mathbf{f}(t, \mathbf{p}_1, \mathbf{q}_1) - \mathbf{f}(t, \mathbf{p}_2, \mathbf{q}_2)| \leq L_1|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2| + L_2|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2|. \end{gathered} \tag{14}$$

Legyen $(\tau, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) \in \Omega, \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{R}_{\mathbf{f}}$, továbbá tegyük fel, hogy $\boldsymbol{\eta} = \mathbf{f}(\tau, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta})$, és

$$\exists M, c \in \mathbb{R}^+ \forall (t, \mathbf{p}, \mathbf{q}) \in \Omega \quad |\mathbf{f}(t, \mathbf{p}, \mathbf{q})| \leq M \quad |\mathbf{f}(t, \mathbf{p}, \mathbf{q}) - \mathbf{y}_0| \leq c.$$

Tegyük fel még, hogy $\{(t, \mathbf{p}, \mathbf{q}) \in \mathbb{R}^{2N+1}; |t-\tau| \leq a, |\mathbf{x}-\boldsymbol{\xi}| \leq b, |\mathbf{y}-\boldsymbol{\eta}| \leq c\} \subset \Omega$, és hogy $\frac{1-L_2}{L_1} > \frac{b}{M}, L_2 < 1$. Akkor az

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t)) \quad \mathbf{x}(\tau) = \boldsymbol{\xi}$$

kezdetiérték-problémának létezik egyetlen megoldása, amely folytosan differenciálható a $]\tau - h, \tau + h[$ intervallumban, ahol $h := \min\{a, \frac{b}{M}\}$.

Alapvető állítások, megoldási módszerek, példák a variációszámítási részből is.

3.4. Nemlineáris rendszerek megoldási módszerei

Verifikálás, első integrál (v. ö. egyváltozós autonóm egyenletek), jelentése, független első integrálok, trajektória, megoldás, koordinátafüggvények, átviteli elv és kiküszöbölés. Integrálható kombinációk:=első integrálok.

Jó lesz majd elsőrendű PDEkre, kinetikai diffegyenletekre stb.

Újdonság, sok feladattal. Ide bele, amit Amesből lehet.

3.5. Megoldás hatványsorokkal

3.6. Peremérték-feladatok megoldási módszerei

[Tóth és Simon, 2005, 5.4–5.7. szakasz].

Az eddigiekben a közönséges differenciálegyenletek megoldását igyekeztünk előállítani szimbolikusan és pontosan avagy numerikusan, de közelítőleg. Az alábbiakban fölvesszük azt a fonalat, amit a szélsőértékhelyek, inflexiós pontok, irányvonalak, nullavonalak, iránymező vizsgálata jelentett, vagyis a megoldások előállítása nélkül próbálunk valamit mondani a megoldások tulajdonságairól, azaz a **kvalitatív elmélet** néhány fejezetét tanulmányozzuk.

3.7. A stabilitáselmélet elemei

Stac pontok. [Tóth és Simon, 2005, 7.1–7.4. szakasz].

3.8. Autonóm egyenletek, dinamikai rendszerek

[Tóth és Simon, 2005, 8.1–8.4. szakasz].

9. Gyakorló feladat Az A városból a B városba két egymást nem metsző út vezet. Tudjuk, hogy a két gépkocsi, amelyek egy $2l$-nél rövidebb kötéllel vannak összekötve, és amelyek a két külön böző úton indulnak el A-ból B-be, képesek útjukon végigmenni anélkül, hogy elszakítanák a kötelet. Képes-e két kör alakú, l sugarú szénásszekér elkerülni egymást, ha a szekerek középpontjai a két úton haladnak, egymással szemben?

10. Gyakorló feladat Mutassák meg, hogy ha egy autonóm közönséges differenciálegyenlet megoldásának argumentumát tetszőleges számmal eltoljuk, ismét megoldást kapunk.

3.9. Kinetikai differenciálegyenletekről

[Érdi, Tóth, 1989, Farkas H. és mtsai, 1992] Ebben a részben az (1) egyenlet alábbi speciális alakjával foglalkozunk:

$$\boxed{\text{vált. seb.}} = \boxed{\text{reakció}}, \tag{15}$$

amit a következőképpen szokás közelebbről specifikálni.

Stac. pontok, itt különösen jó a Gröbner-bázis. Példa elsőrendűre, másodrendű triviálisra és nemtriviálisra.

Félig stacionárius, 41. kötet, így hülyeség, pontosabban Heineken, Tyihonov, QSSA, Turányi.

2. Házi feladat Az $A + B \underset{k}{\overset{2k}{\rightleftharpoons}} 2A$ kémiai reakcióban határozzuk meg a két anyagfajta egyensúlyi koncentrációját, feltéve, hogy a kezdeti koncentrációk $[A](0) = 0.1, [B](0) = 0.2$. Mit mondhatunk a koncentrációk időbeli lefutásáról és hosszútávú viselkedéséről?

3. Házi feladat [Ames, 1968, 9. oldal] (Ames, W. F.: *Nonlinear ordinary differential equations in transport processes,* Academic Press, New York and London, 1968; 9. oldal

> the equations for the constant volume gas phase pyrolysis of toluene are
>
> $$A_1 \xrightarrow{k_1} A_2 + A_3 \quad A_3 + A_1 \xrightarrow{k_2} A_2 + A_4 \quad A_3 + A_1 \xrightarrow{k_3} A_5 + A_6$$
> $$A_6 + A_1 \xrightarrow{k_4} A_2 + A_7 \quad 2A_2 \xrightarrow{k_5} A_3$$

Mi az egyes formális anyagfajták kémiai jelentése a fenti mechanizmusban? Írja föl a reakció kinetikai differenciálegyenletét. Keressen tipikus körülményeket és azokhoz tartozó sebességi együtthatókat. Hasznos lehet:

Benson, S.: *Foundations of chemical kinetics,* McGraw-Hill, New York, 1960. [Benson, 1960].

4. Házi feladat Mensutkin mérései szerint (idézi [Schwetlick, 1978, 38–39. oldal]) ecetsavanhidrid és izobutil-alkohol benzololdatban az alábbiak szerint reagál:

$$(\mathrm{CH_3CO})_2 + i{-}\mathrm{C_4H_9OH} \xrightarrow{k} \mathrm{CH_3COOC_4H_9} + \mathrm{CH_3COOH}.$$

A kezdeti koncentrációk: $[\mathrm{CH_3CO})_2](0) = 0.304$ mól, $[i{-}\mathrm{C_4H_9OH}](0) = 0.304$ mól. Tömeghatás típusú kinetikát feltételezve határozzuk meg a sebességi együtthatót az alábbi táblázatban található koncentráció-idő párok felhasználásával:

t idő (s)	$[\mathrm{CH_3COOH}](t)$ (mól/l)
600	0.086
1200	0.138
1800	0.167
2400	0.189
3600	0.216
7200	0.250
10800	0.267
14400	0.274

Milyen becslést adhatunk az aktiválási energia értékére, ha tudjuk, hogy a méréseket 373 K fokon végezték?

5. Házi feladat Pickles és Hinshelwood mérései szerint (idézi [Schwetlick, 1978, 89. oldal]) a hőmérséklet a piridin és a metiljodid benzonitrilben végbemenő reakciójának sebességi együtthatójára az alábbi táblázatban megadott módon hat:

T hőmérséklet (K)	$10^5 k(T)$ (1/(mól s))
273.0	3.59
298.0	30.4
312.9	91.8
333.0	340
353.0	1120

Feltételezve az

$$k(T) = Ae^{-\frac{E}{RT}}$$

Arrhenius-képlet helyességét becsüljük meg az A **preexponenciális tényező**t és az E **aktiválási energiá**t.

6. Házi feladat Királis anyagok átalakulásának egy egyszerű, Franktól származó modellje:

$$A \xrightarrow{\frac{1}{2}k_1} R, \quad A \xrightarrow{\frac{1}{2}k_1} S, \quad A + R \xrightarrow{k_2} 2R, \quad A + S \xrightarrow{k_2} 2S. \tag{16}$$

Írjuk föl, és oldjuk meg a fenti reakció indukált kinetikai differenciálegyenletét. Mutassuk meg, hogy a teljes megoldás értelmezve van az egész számegyenesen. Bizonyítsuk be, hogy az $ee(t) := \frac{r(t)-s(t)}{r(t)+s(t)}$ összefüggéssel értelmezett **enantiomer felesleg** határértéke $t \to +\infty$ esetén kisebb, mint kiinduláskor.

7. Házi feladat Két enzim és egy szubsztrát, illetve két szubsztrát és egy enzim esetén milyen modellt írnánk föl az anyagfajták időbeli változására?

8. Házi feladat Elsőrendű bomlási folyamatot mértünk 0.2 percenként, és az alábbi idő-koncentráció párokat kaptuk:

Időpont (perc)	Koncentráció
0.2	1.002
0.4	0.500
0.6	0.249
0.8	0.124
1.0	0.061

Meg tudnák-e becsülni a sebességi állandót?

9. Házi feladat Mekkora lesz az $\mathcal{A} \longrightarrow \mathcal{B} \longrightarrow \mathcal{C}$ reakcióban a $\mathcal{C}$ anyag keletkezésének sebessége abban az időpontban, amikor a $\mathcal{B}$ anyag koncentrációja a maximumát veszi fel?

10. Házi feladat Az etil-acetát elszappanosítási reakciója nátronlúggal a következő reakcióegyenlet szerint zajlik:

$$\mathrm{CH_3COO - C_2H_5 + NaOH \longrightarrow CH_3COONa + C_2H_5OH}.$$

Ha az etil-acetát kezdeti koncentrációja $a = 0.02$ tömegszázalék, a nátriumhidroxidé $b = 0.004$ tömegszázalék, és azt tapasztaljuk, hogy az etil-acetát koncentrációja 25 perc múlva 10%-kal csökken, akkor mennyi idő alatt csökken a koncentráció 15%-kal? (A reakciósebesség a tapasztalat szerint arányos a reakcióban lévő anyagok aktuális időpontbeli koncentrációinak szorzatával.)

Továbbiakat innen: [Pilling és Seakins, 1995, Schubert, 1976, Schwetlick, 1978]. A reakciókinetika mérési módszereiről magyar nyelven: [Jacimirszkij, 1966].

11. Házi feladat Kinek a kávéja melegebb

12. Házi feladat Hógolyó

13. Házi feladat Ki lesz vizesebb, aki áll, vagy aki megy?
http://www.google.es/search?hl=es&q=rain+walk+run&btnG=Buscar+con+Google&meta=&aq=f&oq=

14. Házi feladat (Ames, W. F.: *Nonlinear ordinary differential equations in transport processes,* Academic Press, New York and London, 1968; 5. oldal) [Ames, 1968, 5. oldal]

> As an illustration of this concept we consider an example which occurs in a boundary layer problem in aeronautics. The equation describing the process of fluid separation from an airfoil surface is
>
> $$y(\eta)y''(\eta) + \nu y'(\eta)^2 = 0$$
>
> where $\nu := \frac{1-\mu}{\mu}$.

Mi ez a folyamat? Mi a változók és a paraméterek jelentése és tipikus értéke? Van olyan ν érték, amelyikre egyszerűen meg tudnánk oldani?

4. Parciális differenciálegyenletek

[Tóth és Simon, 2005, 9.1–9.4. szakasz].

4.1.

4.2. Elsőrendű egyenletek

Itt a fő célunk a (**??**) egyenlet és a nála kicsit általánosabbak megoldása. Ehhez föl fogjuk használni a nemlineáris közönséges differenciálegyenlet-rendszerek megoldásában szerzett tapasztalatainkat.

15. Házi feladat Határozzuk meg az általános megoldást: $y\frac{\partial z(x,y)}{\partial x} + x\frac{\partial z(x,y)}{\partial y} = x - y.$

16. Házi feladat Határozzuk meg az adott feltételt kielégítő megoldást: $y^2\frac{\partial z(x,y)}{\partial x} + xy\frac{\partial z(x,y)}{\partial y} = x, \quad z(0,y) = y^2.$

4.3. Másodrendű lineáris egyenletek

4.3.1. A Laplace-egyenlet és a Poisson-egyenlet

17. Házi feladat Mutassák meg, hogy ha a Laplace-egyenlet megoldásának argumentumát tetszőleges vektorral eltoljuk, ismét megoldást kapunk.

18. Házi feladat Keressük meg a Laplace-egyenlet harmadfokúpolinom-alakú megoldásait.

19. Házi feladat Írják föl részletesen a Poisson-egyenlet numerikus megoldásánál szereplő mátrixot abban az esetben, amikor $N = 2, M = 3$.

20. Házi feladat Bizonyítsák be, hogy a Poisson-egyenlet numerikus megoldásánál szereplő mátrix invertálható.

4.3.2. A hővezetési vagy diffúziós egyenlet

[Carslaw and Jaeger, 1959] alapján olyan példa, amelyik nem véges, nem teljes tér. Vagy: Evans?

4.3.3. A hullámegyenlet

****

MARADÉK FELADATOK

1. Ismeretes, hogy az ß elektromos áramerősség és az E elektromotoros erő között abban az áramkörben, ahol egy R nagyságú ohmikus ellenállás és egy L önindukciójú tekercs van, a következő összefüggés áll fenn: $E(t) = R\text{ß}(t) + L\text{ß}'(t)$. Legyen speciálisan $E(t) = E_0$. Határozzuk meg az áramerősség értékét minden $t \in \mathbb{R}$ időpontban és $t \to +\infty$ esetén.

2. A tartályban 100 liter vízben oldva 10 kg só van. A tartályba folyamatosan vizet vezetnek be, percenként 5 litert, ez elkeveredik az oldattal. A keverék ugyanilyen sebességgel folyik ki. Mennyi só marad a tartályban egy óra múlva? És ha percenként 3 liter folyik ki? (Tegyük fel, hogy ehhez elegendően nagy a tartály.)

3. A 200 m^3 térfogatú szobában 0.15% szén-dioxid gáz van. A ventillátor percenként 20 m^3 friss levegőt fúj be, amelyben csak 0.04% szén-dioxid van. (A friss levegő a bentivel azonnal elkeveredik, és ugyanannyi levegő ki is áramlik a szobából.) Mennyi idő múlva csökken a szoba levegőjében lévő szén-dioxid mennyisége a harmadára?

4. A rakéta mozgásegyenlete (Ciolkovszkij) $\dot{\mu}u + \dot{m}a = F$, ahol a kiáramló gáz áramerőssége $\mu = -dm/dt$, relatív sebessége $u(t)$.

   $V(t) = u \times \ln(m_0/m(t))$, (Ciolkovszkij-egyenlet) gravitációval: $V(t) = u \times ln(m_0/(m_0 - mt)) - gt$

   Autóra termény esik, illetve eső.

5. A radioaktív anyag eredeti mennyiségének 50%-a elbomlott 30 nap alatt. (Felezési ideje tehát 30 nap. Ha ez reális érték, akkor melyik anyagé?) Mennyi idő múlva marad meg az eredeti mennyiség 10%-a?

6. Mondjon legalább három példát az $\dot{x} = kx \quad x(0) = x_0$ kezdetiérték-probléma alkalmazására. Adja meg a független és a függő változó és a k paraméter jelentését, k előjelét és mértékegységét.

7. Kicsit varálni kellene a könyvhöz képest.

   Legyen a $t \in \mathbb{R}^+$ időpontban a vérben a glükóz koncentrációja $c(t)$ mg/ml, és tegyük fel, hogy a glükózt intravénásan adagoljuk, percenként 0.1 mg sebességgel, és legyen 5 l a vér térfogata. A glükóz – koncentrációjával arányos sebességgel (elsőrendű bomlási reakcióban) – más anyagokká alakul át. Írjuk föl a glükózkoncentráció időbeli alakulását jellemző differenciálegyenletet, majd megoldásának vizsgálata útján adjuk meg a koncentráció stacionárius (azaz hosszú idő után megközelített) értékét.

8. Az 50 $\frac{\text{km}}{\text{h}}$ sebességgel haladó autó 40 m-re van a szakadéktól. Mekkora állandó lassulással kell fékeznie, hogy idejében meg tudjon állni?

9. A kemencéből kivett kenyér hőmérséklete 30 perc alatt a kezdeti 120°C-ról 60°C-ra csökken. A levegő hőmérséklete 30°C. A hűlés kezdetétől számítva mennyi idő alatt csökken a kenyér hőmérséklete 40°C-ra? Newton törvénye szerint egy test lehűlési sebessége egyenesen arányos a környezet és a test hőmérsékletének különbségével. Mennyi idő alatt közelíti meg a kenyér hőmérséklete az állandósult (egyensúlyi) értéket 1°C-os eltéréssel?

10. Egy RC-körben (amely tehát egy sorbakapcsolt ellenállásból és kondenzátoból áll) kikapcsoljuk az áramforrást. A kikapcsolás utáni pillanatban a rendszerben I_0 erősségű áram folyik. Határozzuk meg a $t \mapsto I(t)$ áramerősséget mint a kikapcsolás óta eltelt t idő függvényét.

11. Határozza meg az $x' = x^3 \quad x(0) = x_0$ kezdetiérték-probléma teljes megoldásának értelmezési tartományát, ha x_0 tetszőleges pozitív szám. Mi az eredmény fizikai/kémiai jelentése? És ha $x_0 \leq 0$?

12. Határozza meg az $x' = x(1 - x) \quad x(0) = x_0$ kezdetiérték-probléma teljes megoldását azokban az esetekben, amikor $x_0 < 1$, $x_0 = 1$, és amikor $x_0 > 1$. Mi az eredmény fizikai/kémiai/biológiai jelentése?

13. A tartályban 100 l, 10 kg sót tartalmazó oldat van. Percenként befolyik 10 l víz, a keverék ugyanilyen sebességgel átfolyik egy másik, 100 l-es tartályba, amely kezdetben tiszta vízzel volt megtöltve. A túlcsorduló folyadék a második tartályból elfolyik. Mikor lesz a második tartályban a legtöbb só? Mivel lesz egyenlő ekkor a mennyisége?

14. Legyen egy populációban a megfertőzhető (szuszceptibilis, de egészséges) egyedek száma a t időpontban $x(t)$, a fertőzött (és egyben fertőző, röviden beteg) egyének száma $y(t)$. A betegek számának időbeli változását az $y'(t) = bx(t)y(t)$ differenciálegyenlet jól leírja. (Miért hihető ez?) Tegyük fel, hogy kezdetben egyetlen egyed beteg, és hogy a betegek és egészségesek számának összege állandó. Határozzuk meg a betegek számát az idő függvényeként. Milyen módon lehetne/kellene realisztikusabbá tenni a modellt?

15. Izsák-JN-Varga Zoltánból virágnövekedés.

****

21. Házi feladat

5. Fizikai állandók

Jel	Név	Érték	SI egység
R	univerzális gázállandó	8314.41	$\frac{J}{kmol\ K}$

6. Apróságok Ames könyvéből

Oldal		
2	inviscid	having no viscosity
4	quagmire	a soft wet area of low-lying land that sinks underfoot
6	But reject it we must.	
11	potpourri	a jar of mixed flower petals and spices used as perfume
12	trite	repeated too often; overfamiliar through overuse
18	sludge	the precipitate produced by sewage treatment

7. Szempontok az olvasmány feldolgozásához

7.1. Mit lehet megtudni az írásmű formai elemzéséből?

A következő szempontokat lehet megvizsgálni.

1. Megjelenés helye, folyóirat színvonala (impaktfaktor és SJR `http://www.` `.scimagojr.com`)
2. Szerzők munkahelye
3. Terjedelem (pl. összefoglaló cikkről van szó, vagy új tudományos eredményeket tartalmazóról), ábrák és hivatkozások száma
4. Elektronikus melléklet megléte és tartalma (adatok, matematikai levezetések) (teljesíti-e a reprodukálhatóság alapvető követelményét)
5. Köszönetnyilvánítás címzettje, támogatások forrása (dohánygyár és rákkutatás...)

7.2. Melyek azok a kérdések, amelyeket senki nem fog megúszni?

1. Egyetlen mondatban ismertesse a dolgozat célját.
2. Milyen kísérleti, elméleti és matematikai módszereket használ az iromány?
3. Milyen korábbi vagy mostani tantárgyakhoz kapcsolódik a téma?
4. A kitűzött célt eléri?

5. Hogyan lehetne, kellene folytatni ezt a munkát?

6. Talált-e az olvasmányhoz kapcsolódó további érdekességeket a hálón (wikipedia, `demonstrations.wolfram.com`) vagy másutt?

7. Beleakadt-e olyan forrásra, amely közérdekű? (Másoknak is hasznos segédeszköz, arra kellene az előadást alapozni stb.)

Kezdő olvasók számára nem rossz ötlet a cikk szó szerinti lefordítása, de ezt úgy érdemes kezdeni, hogy előbb legalább egyszer szótározás nélkül az egész cikket elolvassuk, hogy képünk legyen az egészről.

Végül pedig: elegendő számú jelentkező esetén csinálhatunk **minikonferenciát** a pótlási héten, ahol a szóbeli vizsga helyett a jelentkezők 15 perces számítógépes prezentációval támogatott előadásban ismertetik az olvasmányukat. Erre emilben lehet jelentkezni, mondjuk november elsejéig.

További bölcsességek találhatók például itt: [Csermely és mtsai, 1999].

8. Kérdések a vizsga írásbeli, beugró részéhez

1. Mit mond ki a Cauchy–Peano-tétel?
2. Mit mond ki a Picard–Lindelöf-tétel?
3. Mutasson példát autonóm differenciálegyenletre.
4. Mutasson példát nemautonóm differenciálegyenletre.
5. Mutasson példát autonóm differenciálegyenletrendszerre.
6. Mutasson példát nemautonóm differenciálegyenletrendszerre.
7. Mutasson példát közvetlenül integrálható differenciálegyenletre.
8. Mutasson példát közvetlenül integrálható differenciálegyenletrendszerre.
9. Mutasson példát szétválasztható változójú differenciálegyenletrendszerre.
10. Milyen elégséges feltételeket ismer kezdetiérték-problémák megoldásának létezésére?
11. Milyen elégséges feltételeket ismer kezdetiérték-problémák megoldásának egyértelműségére?
12. Mutasson példát lineáris regresszióra.
13. Mutasson példát paraméterekben lineáris, változókban nemlineáris függvényre.
14. Mutasson példát paraméterekben nemlineáris, változókban lineáris függvényre.
15. Mutasson példát súlyozott lineáris regresszióra.
16. Mutasson példát többváltozós súlyozott lineáris regresszióra.
17. Mutasson példát többváltozós lineáris regresszióra.
18. Mutasson példát linearizálható regresszióra.
19. Mutasson példát nem linearizálható regresszióra.
20. Mutasson példát paraméterbecslésre implicite adott függvénnyel.
21. Mutasson példát lineáris differenciálegyenletre.
22. Mutasson példát homogén lineáris differenciálegyenletre.
23. Mutasson példát elsőrendű lineáris differenciálegyenletre.
24. Mutasson példát állandó együtthatós lineáris differenciálegyenletre.

25. Mutasson példát állandó együtthatós lineáris homogén differenciálegyenletre.
26. Mutasson példát lineáris inhomogén differenciálegyenletre.
27. Mutasson példát lineáris homogén differenciálegyenletre.
28. Mutasson példát állandó együtthatós lineáris inhomogén differenciálegyenletre.
29. Mutasson példát állandó együtthatós lineáris homogén differenciálegyenletrendszerre.
30. Mutasson példát Bernoulli-egyenletre.
31. Mutasson példát egzakt differenciálegyenletre.
32. Mutasson példát nemkonvex síkbeli halmazra.
33. Mutasson példát nem csillagszerű síkbeli halmazra.
34. Mutasson példát nem nyílt síkbeli halmazra.
35. Mutasson példát nem összefüggő nyílt halmazra a számegyenesen.
36. Mit nevezünk általános megoldásnak?
37. Mutasson példát stabilis, de nem aszimptotikusan stabilis egyensúlyi helyzetre.
38. Milyen típusú egyensúlyi helyzet az origó, ha a 2×2-es együttható mátrix sajátértékei 2 és 3? Készítsen vázlatos rajzot.
39. Milyen típusú egyensúlyi helyzet az origó, ha a 2×2-es együttható mátrix sajátértékei -2 és -3? Készítsen vázlatos rajzot.
40. Milyen típusú egyensúlyi helyzet az origó, ha a 2×2-es együttható mátrix sajátértékei 2 és -3? Készítsen vázlatos rajzot.
41. Milyen típusú egyensúlyi helyzet az origó, ha a 2×2-es együttható mátrix sajátértékei $2 + i$ és $2 - i$? Készítsen vázlatos rajzot.
42. Milyen típusú egyensúlyi helyzet az origó, ha a 2×2-es együttható mátrix sajátértékei $-2 + i$ és $-2 - i$? Készítsen vázlatos rajzot.
43. Milyen típusú egyensúlyi helyzet az origó, ha a 2×2-es együttható mátrix sajátértékei $+2i$ és $-2i$? Készítsen vázlatos rajzot.
44. Mutasson példát elsőrendű kvázilineáris, de nem lineáris parciális differenciálegyenletre.
45. Mutasson példát elliptikus parciális differenciálegyenletre.

46. Mutasson példát parabolikus parciális differenciálegyenletre.

47. Mutasson példát hiperbolikus parciális differenciálegyenletre.

48. Mutasson példát alaprendszerre.

49. Mutasson példát alapmegoldásra.

50. Mutasson példát alapfüggvényre.

51. Mit nevezünk az f és g függvény kompozíciójának?

52. Mit nevezünk az f és g függvény konvolúciójának?

53. Mi a Fourier-módszer lényege?

54. Írja föl a $x\frac{\partial u(x,y)}{\partial x} + \sin(y)\frac{\partial u(x,y)}{\partial y} = 0$ parciális differenciálegyenlet karakterisztikus egyenletét.

55. Írja föl a $\cos(x)\frac{\partial u(x,y)}{\partial x} + \ln(y)\frac{\partial u(x,y)}{\partial y} = 0$ parciális differenciálegyenlet karakterisztikus egyenletét.

56. Írja föl a $x/2\frac{\partial u(x,y)}{\partial x} + \sin(y^2)\frac{\partial u(x,y)}{\partial y} = 0$ parciális differenciálegyenlet karakterisztikus egyenletét?

57. Írja föl a $(x+y)\frac{\partial u(x,y)}{\partial x} + \cos(y-x)\frac{\partial u(x,y)}{\partial y} = 0$ parciális differenciálegyenlet karakterisztikus egyenletét.

58. Írja föl a $(x-y)\frac{\partial u(x,y)}{\partial x} + \sin(xy)\frac{\partial u(x,y)}{\partial y} = 0$ parciális differenciálegyenlet karakterisztikus egyenletét.

59. Írja föl a $x\frac{\partial u(x,y)}{\partial x} + \sin(y/x)\frac{\partial u(x,y)}{\partial y} = 0$ parciális differenciálegyenlet karakterisztikus egyenletét.

60. Mi annak a szükséges és elégséges feltétele, hogy a $\psi : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ folytonosan differenciálható függvény az $x'(t) = f(x(t))$ autonóm egyenlet első integrálja legyen?

61. Mi lehet az első integrál jelentése?

Hivatkozások

[Ames, 1968] Ames, W. F.: *Nonlinear ordinary differential equations in transport processes,* Academic Press, New York and London, 1968.

[Benson, 1960] Benson, S.: *Foundations of chemical kinetics,* McGraw-Hill, New York, 1960.

[Carslaw and Jaeger, 1959] Carslaw, H.S., and J.C. Jaeger: *The conduction of heat in solids,* Clarendon Press, Oxford, 1959, 2nd ed.

[Csermely és mtsai, 1999] Csermely P., Gergely P., Koltay T., Tóth J.: *Kutatás és közlés a természettudományokban*, Osiris, Budapest, 1999.

[Erdey-Grúz, 1971] Erdey-Grúz T.: *Transzportfolyamatok vizes oldatokban*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1971.

[Érdi, Tóth, 1989] Érdi, P.; Tóth, J.: *Mathematical models of chemical reactions. Theory and applications of deterministic and stochastic models,* Princeton University Press, Princeton, NJ, 1989.

[Farkas H. és mtsai, 1992] Farkas H.; Györgyi L.; Póta Gy.; Tóth J.: Az egzotikus kinetikai rendszerek matematikájának alapjai, In: *Nemlineáris dinamika és egzotikus kinetikai jelenségek kémiai rendszerekben,* Egyetemi jegyzet (Kézirat), (Debrecen, Budapest, Gödöllő) (Bazsa Gy. szerk.), 1992, pp. 13–116.

[Jacimirszkij, 1966] Jacimirszkij K. B.: *A kémiai analízis kinetikus módszerei,* Akadémiai Kiadó, Budapest, 1966.

[Járai, 2007] Járai A.: *Modern alkalmazott analízis,* TYPOTEX Kiadó, Budapest, 2007.

[Ladics, 2005] Ladics, T.: The analysis of the splitting error for advection-reaction problems in air pollution models, *Időjárás. Quarterly Journal of the Hungarian Meteorological Service.* **109** (3) (2005), 173–188.

[Pilling és Seakins, 1995] Pilling, M. J.; Seakins, P. W.: *Reakciókinetika,* Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 1995.

[Póta, 2006] Póta, G.: *Mathematical problems for chemistry students,* Elsevier, 2006.

[Schwetlick, 1978] Schwetlick, K.: *Reakciómechanizmusok kinetikai vizsgálata,* Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1978.

[Tóth és Simon, 2005] Tóth J., Simon L. P.: *Differenciálegyenletek. Bevezetés az elméletbe és az alkalmazásokba,* TYPOTEX Könyvkiadó, Budapest, 2005.

[Turányi, 2010] Turányi T.: *Reakciómechanizmusok vizsgálata számítógéppel,* Akadémiai Kiadó,Budapest, 2010 (megjelenőben).

[Schubert, 1976] Schubert A.: *Homogén reakciók kinetikája,* Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1976.

[Zlatev, 1995] Zlatev, Z.: *Computer treatment of large air pollution models,* Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston, London, 1995.