

Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích
Přírodovědecká fakulta

Matematické aspekty Van der Waalsovy rovnice

Diplomová práce

Bc. Jiří Hána

Vedoucí práce: RNDr. Ing. Jana Kalová, Ph.D.

České Budějovice, 2020

Bibliografické údaje

Hána J., 2020: Matematické aspekty Van der Waalsovy rovnice. [Mathematical aspects of Van der Waals equation. Mgr. Thesis, in Czech.] - p. 68, Faculty of Science, University of South Bohemia, České Budějovice, Czech Republic.

Anotace

The thesis deals with cubic equations and their application in physics. The first part clarifies some basic terms, which are then used in the following chapter, which is focused on solving the cubic equations using analytical and numerical methods. The third part of the thesis presents the Van der Waals equation, shows the possibilities of calculating the critical values of the pressure, the thermodynamic temperature and the molar volume, as well as the creation of a $p - v$ diagram using a computer. The last part of the thesis is focused on a teaching unit draft on the thesis topic using the concept of STEM. The last part also presents interesting curves on the thermodynamic surface and shows the advantages of the STEM approach.

Prohlášení

Prohlašuji, že svoji diplomovou práci jsem vypracoval samostatně pouze s použitím pramenů a literatury, uvedených v seznamu citované literatury.

Prohlašuji, že v souladu s § 47b zákona č. 111/1998 Sb. v platném znění souhlasím se zveřejněním své diplomové práce a to v nezkrácené podobě elektronickou cestou ve veřejně přístupné části databáze STAG provozované Jihočeskou univerzitou v Českých Budějovicích na jejích internetových stránkách, a to se zachováním mého autorského práva k odevzdanému textu této kvalifikační práce. Souhlasím dále s tím, aby toutéž elektronickou cestou byly v souladu s uvedeným ustanovením zákona č. 111/1998 Sb. zveřejněny posudky školitele a oponentů práce i záznam o průběhu a výsledku obhajoby kvalifikační práce. Rovněž souhlasím s porovnáním textu mé kvalifikační práce s databází kvalifikačních prací Theses.cz provozovanou Národním registrem vysokoškolských kvalifikačních prací a systémem na odhalování plagiátů.

V Českých Budějovicích dne 12. května 2020

.....

Bc. Jiří Hána

Poděkování

Rád bych poděkoval vedoucí mé diplomové práce RNDr. Ing. Janě Kalové, Ph.D. za čas, ochotu, náměty a odborné rady, které mi při psaní práce poskytla.

Obsah

Úvod	1
1 Některé základní pojmy	2
2 Rovnice třetího stupně	4
2.1 Analytické řešení kubické rovnice	4
2.2 Numerické metody	16
2.3 Další způsoby řešení	25
3 Van der Waalsova rovnice	29
3.1 Historie	29
3.2 Fyzikální aplikace	29
4 Použití ve výuce	47
4.1 První část přípravy učebního celku	47
4.2 Druhá část přípravy učebního celku	54
4.3 Třetí část přípravy učebního celku	54
Závěr	65
Literatura	66

Úvod

Tato práce se zabývá kubickými rovnicemi a jejich aplikací ve fyzice. Řešení kubických rovnic je mnohem obtížnější než řešení rovnic nižšího stupně. Práce nabízí řešení kubických rovnic ve speciálním tvaru, jako je například kubická binomická nebo kubická reciproká rovnice, ale i řešení obecných kubických rovnic za pomoci analytických metod a numerických metod. Práce obsahuje zdrojové kódy pro řešení kubických rovnic s využitím počítače pomocí metody půlení intervalu a Newtonovy metody pro řešení nelineárních rovnic a demonstruje výhody numerického řešení oproti řešení analytickému.

Van der Waalsova rovnice je rovnice třetího stupně a slouží k modelování stavového chování tekutin. Pomocí této rovnice můžeme určovat kritické hodnoty stavových veličin tlaku, termodynamické teploty a molárního objemu. Poslední část práce je zaměřena na tvorbu učebního celku na téma této práce za pomoci konceptu STEM (Science, Technology, Engineering, Mathematics) a ukazuje jeho výhody při použití ve výuce. Pedagog, který využije tento návrh ve výuce, naučí žáky řešit kubické rovnice za pomoci analytických a numerických metod včetně základů algoritmizace pro návrh kódu pro numerické řešení kubické rovnice. Nadále se žáci naučí aplikovat matematické znalosti ve fyzice, kde budou pracovat s Van der Waalsovou rovnicí, tedy rovnicí třetího stupně. Dále se seznámí s parametrickým řešením Van der Waalsovy rovnice a za pomoci této rovnice vytvoří $p - v$ diagram pro vodu. Na konci učebního celku se seznámí se zajímavými křivkami na termodynamické ploše a schématickým $p - v$ diagramem s různými fázemi vody s vyobrazenými zajímavými křivkami.

Text této práce byl vysázen pomocí systému X_YL^AT_EX.

1 Některé základní pojmy

Definice 1.1 (*reálná funkce jedné reálné proměnné a definiční obor*) Mějme množinu $A \subset \mathbb{R}$, $A \neq \emptyset$. Zobrazení f množiny A do množiny \mathbb{R} nazýváme *reálnou funkcí jedné reálné proměnné* (dále jen *funkcí jedné proměnné*). Množina A se nazývá *definiční obor* funkce f a značí se D_f .

Dle definice 1.1 je funkce zobrazení, které každému $x \in A$ přiřadí právě jedno $y \in \mathbb{R}$. Tuto skutečnost zapisujeme $y = f(x)$. [1]

Definice 1.2 (*obor hodnot funkce jedné reálné proměnné*) Množinu všech takových $y \in \mathbb{R}$, k nimž existuje $x \in D_f$ tak, že $y = f(x)$, nazýváme *obor hodnot* funkce f a značíme jej H_f . [1]

Definice 1.3 (*nezávisle a závisle proměnná*) Je-li $y = f(x)$, pak proměnnou x nazýváme *nezávislou proměnnou* a proměnnou y nazýváme *závislou proměnnou*. Grafem funkce je pak množina všech uspořádaných dvojic $[x, y] \in \mathbb{R}^2$ s vlastností $y = f(x)$. [2]

Definice 1.4 (*rovnice*) Necht jsou funkce $f(x)$ a $g(x)$ definované na nějaké množině $D \subset \mathbb{R}$. Pak nalezení všech $x \in D$, splňujících rovnost $f(x) = g(x)$, nazýváme *rovnici* o jedné neznámé x . Funkci $f(x)$ nazýváme *levou stranou rovnice*, funkci $g(x)$ nazýváme *pravou stranou rovnice*. [3]

Při řešení některých rovnic zjistíme, že nemají řešení v oboru reálných čísel. S tím se však nespokojíme a měli bychom se zamyslet, zda bychom našli řešení například rovnice $x^2 + 1 = 0$, která reálné řešení nemá. Budeme předpokládat, že existuje prvek i , pro který platí $i^2 = -1$. Obdobnou úvahou lze vyřešit i jiné rovnice a vždy dostaneme jako řešení výrazy ve tvaru $\mathbf{a} + \mathbf{b}i$, kde \mathbf{a} a \mathbf{b} jsou reálná čísla. Množinu čísel ve tvaru $\mathbf{a} + \mathbf{b}i$, kde \mathbf{a} je reálná část, \mathbf{b} je imaginární část a i je imaginární jednotka, budeme nazývat *komplexní čísla* a značit je \mathbb{C} .

Definice 1.5 (*kořen rovnice*) Kořenem rovnice nazýváme takové číslo $x \in \mathbb{C}$, pro které platí $h(x) = 0$. [3]

Věta 1.6 (*základní věta algebry*) Každý polynom s komplexními (speciálně reálnými) koeficienty stupně jedna a vyššího má v množině \mathbb{C} počet kořenů roven jeho stupni. [4]

Věta 1.7 (*kořenový činitel*) Jestliže je číslo $x_0 \in \mathbb{C}$ kořenem rovnice $h(x) = 0$, pak kořenovým činitelem je výraz $x - x_0$ a dělí $h(x)$ beze zbytku. [5]

Věta 1.8 (*komplexní kořeny kubické rovnice*) Jestliže je číslo $x_0 \in \mathbb{C}$ kořenem kubické rovnice $f(x) = 0$, pak i komplexně sdružené číslo $\overline{x_0}$ k číslu x_0 je kořenem této rovnice. [5]

Z věty 1.8 plyne, že kubická rovnice má buďto tři reálné kořeny nebo jeden reálný a dva komplexně sdružené kořeny.

Každou rovnici můžeme upravovat za pomoci ekvivaletních nebo důsledkových úprav. Ekvivaletní úpravy jsou takové úpravy, při kterých vznikají postupně nové rovnice, které mají s původní rovnicí stejné řešení a jsou k ní ekvivalentní. Tyto úpravy jsou:

- Vzájemná výměna stran rovnice,
- nahrazení libovolné strany rovnice výrazem, který se jí rovná v celém oboru řešení rovnice,
- přičtení téhož čísla nebo výrazu s neznámou, který je definován v celém oboru řešení rovnice, k oběma stranám rovnice,
- vynásobení obou stran rovnice týmž číslem nebo výrazem s neznámou, který je definován a různý od nuly (tj. nabývá jen nenulových hodnot) v celém oboru řešení rovnice,
- umocnění obou stran rovnice přirozeným mocnitelem, jsou-li obě strany rovnice nezáporné (tj. nabývají jen nezáporných hodnot) v celém oboru řešení rovnice,
- odmocnění obou stran rovnice přirozeným odmocnitelem, jestliže jsou obě strany rovnice nezáporné (tj. nabývají jen nezáporných hodnot) v celém oboru řešení rovnice,
- zlogaritmování obou stran rovnice při témž základu, jsou-li obě strany rovnice kladné (tj. nabývají jen kladných hodnot) v celém oboru řešení rovnice.

Důsledkové (též neekvivaletní) úpravy jsou takové úpravy, při kterých vznikají nové rovnice, jejichž řešení je také řešením původní rovnice. Obráceně to platit nemusí. Mezi důsledkové úpravy řadíme:

- Vynásobení obou stran rovnice týmž číslem nebo výrazem s neznámou, který je definován v celém oboru řešení rovnice,
- umocnění obou stran rovnice přirozeným mocnitelem.[6]

2 Rovnice třetího stupně

Definice 2.1 (*kubická rovnice*) Obecná kubická rovnice je rovnice ve tvaru

$$\alpha x^3 + \beta x^2 + \gamma x + \delta = 0, \text{ kde } \alpha \in \mathbb{R} \setminus \{0\}, \beta \in \mathbb{R}, \gamma \in \mathbb{R} \text{ a } \delta \in \mathbb{R}.$$

Poznámka 2.2 Stojí za povšimnutí, že pokud bychom v definici 2.1 připustili pro koeficient α hodnotu 0, respektive pro oba koeficienty α, β hodnotu 0, pak by se změnila kubická rovnice na rovnici kvadratickou, respektive lineární.

Podle definice 1.4 platí pro kubickou rovnici $f(x) = \alpha x^3 + \beta x^2 + \gamma x + \delta$ a $g(x) = 0$. Pokud bychom si tuto situaci graficky znázornili, jedná se o hledání průsečíků funkce $f(x)$ se souřadnicovou osou x .

Výraz $f(x)$ je polynom. Polynomem nazýváme vzorec ve tvaru

$$a_k x^k + a_{k-1} x^{k-1} + \dots + a_1 x + a_0,$$

kde a_k až a_0 jsou komplexní čísla a k je přirozené číslo. [5]

Řešit kubickou rovnici lze několika způsoby. Nejčastěji pro řešení kubických rovnic používáme analytické, numerické nebo případně grafické metody.

2.1 Analytické řešení kubické rovnice

Speciální typy kubických rovnic

Než začneme odvozovat různé metody pro řešení kubických rovnic, jejichž řešení může být časově i výpočetně náročné, pojďme se nejdříve zamyslet, zda bychom mohli některé typy kubických rovnic řešit efektivně, za použití pouze jednoduchých výpočtů a řešení rovnic nižších stupňů. Tabulka 2.1 uvádí všechny možné tvary kubické rovnice. Princip hledání různých tvarů kubické rovnice je v dosazování nulové hodnoty za různé koeficienty. Znak ♠ v tabulce 2.1 určuje definiční obor koeficientu $\mathbb{R} \setminus \{0\}$.

Tabulka 2.1: Přehled možných tvarů rovnice (2.1)

řádek	α	β	γ	δ	tvar rovnice
1	♠	♠	♠	♠	$\alpha x^3 + \beta x^2 + \gamma x + \delta = 0$
2	♠	♠	♠	0	$\alpha x^3 + \beta x^2 + \gamma x = 0$
3	♠	♠	0	♠	$\alpha x^3 + \beta x^2 + \delta = 0$
4	♠	♠	0	0	$\alpha x^3 + \beta x^2 = 0$
5	♠	0	♠	♠	$\alpha x^3 + \gamma x + \delta = 0$
6	♠	0	♠	0	$\alpha x^3 + \gamma x = 0$
7	♠	0	0	♠	$\alpha x^3 + \delta = 0$
8	♠	0	0	0	$\alpha x^3 = 0$

Vidíme, že kubická rovnice může mít v závislosti na koeficientech osm různých tvarů:

$$\alpha x^3 + \beta x^2 + \gamma x + \delta = 0, \quad (2.1)$$

$$\alpha x^3 + \beta x^2 + \gamma x = 0, \quad (2.2)$$

$$\alpha x^3 + \beta x^2 + \delta = 0, \quad (2.3)$$

$$\alpha x^3 + \beta x^2 = 0, \quad (2.4)$$

$$\alpha x^3 + \gamma x + \delta = 0, \quad (2.5)$$

$$\alpha x^3 + \gamma x = 0, \quad (2.6)$$

$$\alpha x^3 + \delta = 0, \quad (2.7)$$

$$\alpha x^3 = 0. \quad (2.8)$$

Rovnice (2.1), (2.3) a (2.5) budeme řešit pomocí Cardanova vzorce, Huddeho rezolventy, případně za pomoci Hornerova schématu. Rovnice (2.2), (2.4), (2.6), (2.7) a (2.8) lze řešit jednodušeji. Bude se jednat o vytýkání a řešení rovnic nižších stupňů, případně o řešení binomické rovnice.

Pojďme si nyní nastínit řešení rovnic (2.2) a (2.6). V obou případech na levé straně rovnice vytkneme x . Tím převedeme rovnice do součinnového tvaru, položíme jednotlivé činitele rovno nule a budeme řešit známými postupy už jen rovnice lineární a kvadratické. Jedním z kořenů obou rovnic je vždy číslo 0. Dalšími kořeny je dvojice reálných čísel nebo dvě komplexně sdružená komplexní čísla.

Rovnici (2.4) budeme řešit velmi podobným způsobem jako předchozí rovnice. Vytkneme na levé straně výraz x^2 a budeme opět řešit rovnici v součinnovém tvaru. Tím

získáme dvojnásobný kořen 0 a třetím kořenem je číslo $-\frac{b}{a}$.

Rovnice (2.7) je po vydělení obou stran koeficientem α binomická rovnice. Binomickou rovnicí nazýváme rovnici ve tvaru

$$x^n - z = 0, \quad (2.9)$$

kde x je neznámá, n je přirozené číslo větší než 1 a z je dané komplexní číslo. Binomickou rovnicí při řešení převádíme do tvaru

$$x^n - |z|(\cos \varphi + i \sin \varphi) = 0.$$

Podle věty 1.6 má binomická rovnice počet kořenů roven jejímu stupni n . Všechny kořeny jsou

$$x_k = \sqrt[n]{|z|} \left(\cos \frac{\varphi + 2k\pi}{n} + i \sin \frac{\varphi + 2k\pi}{n} \right), \quad k = 0, 1, 2, \dots, n-1.$$

Pro kořeny kubické binomické rovnice platí:

$$x_0 = \sqrt[3]{|z|} \left(\cos \frac{\varphi}{n} + i \sin \frac{\varphi}{n} \right), \quad (2.10)$$

$$x_1 = \sqrt[3]{|z|} \left(\cos \frac{\varphi + 2\pi}{n} + i \sin \frac{\varphi + 2\pi}{n} \right), \quad (2.11)$$

$$x_2 = \sqrt[3]{|z|} \left(\cos \frac{\varphi + 4\pi}{n} + i \sin \frac{\varphi + 4\pi}{n} \right). \quad (2.12)$$

Rovnice (2.8) má trojnásobný kořen 0.

Kubická reciproká rovnice

Kubická reciproká rovnice je rovnice lichého stupně, kterou můžeme dále rozdělit na rovnici prvního nebo druhého druhu. Kubická reciproká rovnice prvního druhu má tvar

$$\alpha x^3 + \beta x^2 + \beta x + \alpha = 0, \text{ kde } \alpha \in \mathbb{R} \text{ a } \beta \in \mathbb{R}. \quad (2.13)$$

Kubická reciproká rovnice druhého druhu má tvar

$$\alpha x^3 - \beta x^2 + \beta x - \alpha = 0, \text{ kde } \alpha \in \mathbb{R} \text{ a } \beta \in \mathbb{R}. \quad (2.14)$$

Každá reciproká rovnice lichého stupně, prvního druhu, má jeden z kořenů roven -1 . Rovnici (2.13) tedy vydělíme kořenovým činitelem $x + 1$ a získáme rovnici nižšího stupně, kterou lze jednoduše vyřešit. Tak získáme další dva zbývající kořeny. U kubické reciproké rovnice druhého druhu budeme postupovat obdobně s tím rozdílem, že budeme dělit kořenovým činitelem $x - 1$, protože jeden z kořenů rovnice (2.14) je vždy roven číslu 1.

Hornerovo schéma

Hornerovo schéma je algoritmus sloužící pro vyhodnocování hodnoty polynomu v určitém bodu, případně algoritmus pro dělení polynomu lineárním polynomem.

Definice 2.3 Pokud je x_0 kořenem polynomu na levé straně rovnice z definice 2.1 s koeficientem $\alpha = 1$, pak číslo x_0 dělí absolutní člen této kubické rovnice. [5]

Pojďme si nyní na konkrétním příkladu ukázat Hornerův algoritmus pro určení hodnoty polynomu v určitém bodu. Pokud zjistíme, že polynom na levé straně kubické rovnice má v testovaném bodu hodnotu nula, pak je testované číslo kořenem rovnice.

Zadání příkladu může znít následovně: V množině \mathbb{C} řešte $x^3 + 4x^2 + 9x + 10 = 0$. Protože komplexní kořeny jsou vždy komplexně sdružené, víme, že zadaná kubická rovnice bude mít alespoň jeden reálný kořen. Vyjdeme z definice 2.3 a budeme testovat hodnoty $\pm 1, \pm 2$ a ± 5 . Pojďme nejprve otestovat hodnotu -1 .

		①	②	③	④
		1	4	9	10
⑤	⑥	⑦	⑧	⑨	
-1	1	3	6	4	

Obrázek 2.1: Hornerovo schéma pro polynom $x^3 + 4x^2 + 9x + 10$ v bodě -1

Schéma na obrázku 2.1 nám představuje Hornerovo schéma pro polynom $x^3 + 4x^2 + 9x + 10$, jehož hodnotu chceme zjistit v bodu -1 . Schéma můžeme brát jako tabulku, jejíž jednotlivé buňky jsou označeny čísly ① - ⑨. Označení buněk čísly v kroužku je jen za účelem ilustrace algoritmu. Nejprve zapíšeme koeficienty α, β, γ a δ do první řádky tabulky zleva doprava. Je důležité dbát na pořadí členů tak, aby v buňce označené číslem ① byl koeficient u neznámé s nejvyšší mocninou a tak dále, až po absolutní člen v buňce ④.

Poznámka 2.4 Když budeme vyhodnocovat polynom $10x^6 + 3x^2 + 7 = 0$, pak první řádek tabulky bude mít sedm buněk a budeme do něj dosazovat zleva čísla 10, 0, 0, 0, 3, 0 a 7.

Pojďme dále pokračovat v řešení příkladu $x^3 + 4x^2 + 9x + 10 = 0$. Do buňky ⑤ zapíšeme číslo, které chceme testovat a do buňky ⑥ opíšeme hodnotu z buňky ①. Dále budeme pokračovat tak, že vynásobíme hodnoty v buňkách ⑤ a ⑥, výsledek přičteme k hodnotě v buňce ② a výsledné číslo zapíšeme do buňky ⑦. Další krok je velmi podobný kroku předchozímu. Vynásobíme čísla z buněk ⑤ a ⑦, tento výsledek přičteme k hodnotě v buňce ③ a výsledek zapíšeme do buňky ⑧. Dále vynásobíme hodnoty z buněk ⑤ a ⑧, výsledek přičteme k buňce ④ a výsledek zapíšeme do buňky ⑨. Číslo v buňce ⑨ je hodnota polynomu v bodě -1 , navíc je tato hodnota rovna zbytku po dělení polynomu $x^3 + 4x^2 + 9x + 10$ polynomem $x + 1$. Pokud v této buňce vyjde hodnota 0, pak bude testované číslo kořenem rovnice. Číslo -1 tedy není kořenem zadané rovnice. Zkusíme otestovat hodnotu -2 .

		①	②	③	④
		1	4	9	10
	⑤	⑥	⑦	⑧	⑨
-2		1	2	5	0

Obrázek 2.2: Hornerovo schéma pro polynom $x^3 + 4x^2 + 9x + 10$ v bodě -2

Na obrázku 2.2 vyšla v buňce ⑨ hodnota 0. Číslo -2 je tedy kořenem zadané rovnice. Zbývající dva kořeny najdeme snadno, protože čísla v buňkách ⑥, ⑦ a ⑧ jsou koeficienty kvadratického polynomu, jehož kořeny jsou zbývající hledané kořeny původní rovnice. Jedná se tedy o polynom $x^2 + 2x + 5$, jehož kořeny jsou $1 \pm 2i$. Původní rovnice $x^3 + 4x^2 + 9x + 10 = 0$ má nad množinou \mathbb{C} množinu kořenů $K = \{-2, 1 \pm 2i\}$.

Vièetovy vzorce

Věta 2.5 Jestliže $\alpha x^3 + \beta x^2 + \gamma x + \delta = 0$ je kubická rovnice podle definice 2.1, pak pro její kořeny x_1 , x_2 a x_3 platí:

$$x_1 + x_2 + x_3 = -\frac{\beta}{\alpha},$$

$$x_1x_2 + x_2x_3 + x_1x_3 = \frac{\gamma}{\alpha} ,$$

$$x_1x_2x_3 = -\frac{\delta}{\alpha}. \quad [7]$$

Důkaz. Budeme vycházet z rovnosti $\alpha x^3 + \beta x^2 + \gamma x + \delta = \alpha(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)$. Nejprve roznásobíme a upravíme pravou stranu rovnosti.

$$\alpha x^3 + \beta x^2 + \gamma x + \delta = \alpha(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)$$

$$\alpha x^3 + \beta x^2 + \gamma x + \delta = \alpha(x^3 - x^2x_1 - x^2x_2 - x^2x_3 + xx_1x_2 + xx_2x_3 + xx_1x_3 - x_1x_2x_3)$$

$$\alpha x^3 + \beta x^2 + \gamma x + \delta = \alpha x^3 + (-\alpha(x_1 + x_2 + x_3))x^2 + (\alpha(x_1x_2 + x_2x_3 + x_1x_3))x - \alpha x_1x_2x_3$$

Poté porovnáme koeficienty u kvadratických, lineárních a absolutních členů na levé a pravé straně rovnosti.

Porovnání koeficientů u kvadratických členů:

$$\beta = -\alpha(x_1 + x_2 + x_3)$$

$$x_1 + x_2 + x_3 = -\frac{\beta}{\alpha}$$

Porovnání koeficientů u lineárních členů:

$$\gamma = \alpha(x_1x_2 + x_2x_3 + x_1x_3)$$

$$x_1x_2 + x_2x_3 + x_1x_3 = \frac{\gamma}{\alpha}$$

Porovnání koeficientů u absolutních členů:

$$\delta = -\alpha x_1x_2x_3$$

$$x_1x_2x_3 = -\frac{\delta}{\alpha}$$

□

Vztahy mezi kořeny a koeficienty z věty 2.5 nazýváme Viětovými vztahy pro kubickou rovnici. Pro normovanou kubickou rovnici jsou tyto vztahy

$$x_1 + x_2 + x_3 = -\beta ,$$

$$x_1x_2 + x_2x_3 + x_1x_3 = \gamma ,$$

$$x_1x_2x_3 = -\delta ,$$

protože koeficient $\alpha = 1$.

Viètovy vzorce jsou jedním ze způsobů, jak najít kořeny kubické rovnice. Narozdíl od rovnice kvadratické jsou tyto vzorce složitější a jejich použití je pro hledání kořenů nepraktické.

Cardanův vzorec

Při řešení rovnice 3. stupně, neboli kubické rovnice, lze použít takzvaný *Cardanův vzorec*. Gerolamo Cardano (1501 - 1576) jej zveřejnil ve svém díle *Ars Magna*. Přesto, že Cardano tento vzorec zveřejnil ve své knize, autory vzorce jsou Niccolò Fontana Tartaglia a Scipione dal Ferro, žáci Cardana, kteří jej nezávisle na sobě objevili. [8]

Pro odvození Cardanova vzorce využijeme zdroje [9]. Budeme vycházet z definice kubické rovnice. Nejprve rovnici z definice 2.1 vydělíme koeficientem α . Tím získáme normovaný tvar obecné kubické rovnice:

$$x^3 + \frac{\beta}{\alpha}x^2 + \frac{\gamma}{\alpha}x + \frac{\delta}{\alpha} = 0 . \quad (2.15)$$

Dále zavedeme substituci $\iota = \frac{\beta}{\alpha}$, $\kappa = \frac{\gamma}{\alpha}$ a $\lambda = \frac{\delta}{\alpha}$. Touto substitucí se rovnice (2.15) zjednoduší na tvar

$$x^3 + \iota x^2 + \kappa x + \lambda = 0 . \quad (2.16)$$

V dalším kroku zavedeme substituci $x = y - \frac{\iota}{3}$ z toho důvodu, abychom odstranili kvadratický člen a provedeme další úpravy.

$$\begin{aligned} & \left(y - \frac{\iota}{3}\right)^3 + \iota \left(y - \frac{\iota}{3}\right)^2 + \kappa \left(y - \frac{\iota}{3}\right) + \lambda = 0 \\ y^3 - \frac{3\iota y^2}{3} + \frac{3\iota^2 y}{3^2} - \frac{\iota^3}{3^3} + \iota y^2 - \frac{2\iota^2 y}{3} + \frac{\iota^3}{3^2} + \kappa y - \frac{\kappa \iota}{3} + \lambda &= 0 \\ y^3 + \frac{\iota^2 y}{3} - \frac{\iota^3}{3^3} - \frac{2\iota^2 y}{3} + \frac{\iota^3}{3^2} + \kappa y - \frac{\kappa \iota}{3} + \lambda &= 0 \\ y^3 + \left(\frac{\iota^2}{3} - \frac{2\iota^2}{3} + \kappa\right) y + \frac{\iota^3}{3^2} - \frac{\iota^3}{3^3} - \frac{\iota \kappa}{3} + \lambda &= 0 \\ y^3 + \left(-\frac{\iota^2}{3} + \kappa\right) y + \frac{2\iota^3}{27} - \frac{\iota \kappa}{3} + \lambda &= 0 \end{aligned} \quad (2.17)$$

Nyní zavedeme další substitute v rovnici (2.17). Za koeficient u kvadratického členu bude substitute $\psi = -\frac{\iota^2}{3} + \kappa$ a za koeficient u lineárního členu zavedeme $\omega = \frac{2\iota^3}{27} - \frac{\iota\kappa}{3} + \lambda$. Tím získáme rovnici

$$y^3 + \psi y + \omega = 0 . \quad (2.18)$$

Rovnice (2.18) je tvar rovnice, ze které původně vznikl Cardanův vzorec. V tuto chvíli přichází zásadní myšlenka pro získání Cardanova vzorce. Budeme předpokládat, že existují dvě proměnné τ a v z reálného oboru, pro které platí

$$y = \sqrt[3]{\tau} + \sqrt[3]{v} \quad (2.19)$$

a tuto rovnici umocníme na třetí a provedeme další úpravy.

$$\begin{aligned} y^3 &= \tau + 3\sqrt[3]{\tau^2 v} + 3\sqrt[3]{\tau v^2} + v \\ y^3 &= \tau + v + 3\sqrt[3]{\tau v} (\sqrt[3]{\tau} + \sqrt[3]{v}) \\ y^3 - 3\sqrt[3]{\tau v} y - \tau - v &= 0 \end{aligned} \quad (2.20)$$

Je zřejmé, že pokud má platit rovnice (2.18), pak podle rovnice (2.20) musí pro ψ a ω platit:

$$\psi = -3\sqrt[3]{\tau v} , \quad (2.21)$$

$$\omega = -\tau - v . \quad (2.22)$$

Z rovnice (2.21) umocněné na třetí vyjádříme τv .

$$\begin{aligned} \psi^3 &= -27\tau v \\ \tau v &= -\frac{\psi^3}{27} \end{aligned} \quad (2.23)$$

Dále z rovnice (2.22) vyjádříme τ .

$$\tau = -v - \omega \quad (2.24)$$

Vztah (2.24) dosadíme do rovnosti (2.23). Tím získáme kvadratickou rovnici s neznámou v , kterou upravíme.

$$\begin{aligned} (-v - \omega) v &= -\frac{\psi^3}{27} \\ -v^2 - v\omega &= -\frac{\psi^3}{27} \end{aligned}$$

$$v^2 + \omega v - \frac{\psi^3}{27} = 0 \quad (2.25)$$

Z posledního tvaru kvadratické rovnice pro v snadno vypočítáme kořeny.

$$\begin{aligned} v_{1,2} &= \frac{-\omega \pm \sqrt{\omega^2 + \frac{4\psi^3}{27}}}{2} = \frac{-\omega \pm \sqrt{\frac{4\omega^2}{4} + \frac{4\psi^3}{27}}}{2} = \frac{-\omega \pm \sqrt{4\left(\frac{\omega^2}{4} + \frac{\psi^3}{27}\right)}}{2} = \\ &= \frac{-\omega \pm 2\sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 + \left(\frac{\psi}{3}\right)^3}}{2} = -\frac{\omega}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 + \left(\frac{\psi}{3}\right)^3} \end{aligned} \quad (2.26)$$

A τ vypočítáme dosazením kořenů kvadratické rovnice (2.25) do vztahu (2.24).

$$\begin{aligned} \tau &= -\left(-\frac{\omega}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 + \left(\frac{\psi}{3}\right)^3}\right) - \omega \\ \tau &= -\frac{\omega}{2} \mp \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 + \left(\frac{\psi}{3}\right)^3} \end{aligned} \quad (2.27)$$

Abychom odvodili Cardanův vzorec, dosadíme (2.26) a (2.27) do rovnice (2.19).

$$y = \sqrt[3]{-\frac{\omega}{2} \mp \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 + \left(\frac{\psi}{3}\right)^3}} + \sqrt[3]{-\frac{\omega}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 + \left(\frac{\psi}{3}\right)^3}} \quad (2.28)$$

Ve vzorci (2.28) máme dvě třetí odmocniny. V prvním sčítanci je před druhou odmocninou znak \mp a ve druhém sčítanci je před druhou odmocninou znak \pm . Zdánlivě dostáváme dvě hodnoty y . To ale není pravda, protože pokud bychom nejdříve počítali se znaménky $-$ v prvním sčítanci a $+$ ve druhém sčítanci a poté naopak, dostaneme stále stejnou hodnotu y .

Pro pokračování si zvolíme hodnotu

$$y = \sqrt[3]{-\frac{\omega}{2} + \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 + \left(\frac{\psi}{3}\right)^3}} + \sqrt[3]{-\frac{\omega}{2} - \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 + \left(\frac{\psi}{3}\right)^3}}$$

a vrátíme se k substituci $x = y - \frac{t}{3}$, do které už nyní stačí dosadit za y .

$$x = \sqrt[3]{-\frac{\omega}{2} + \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 + \left(\frac{\psi}{3}\right)^3}} + \sqrt[3]{-\frac{\omega}{2} - \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 + \left(\frac{\psi}{3}\right)^3}} - \frac{t}{3} \quad (2.29)$$

Vzorec (2.29), kde po vyjádření proměnných ι, ψ, ω pomocí koeficientů $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ dostaneme

$$\iota = \frac{\beta}{\alpha}, \quad \psi = \frac{\gamma}{\alpha} - \frac{\beta^2}{3\alpha^2}, \quad \omega = \frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2},$$

nazýváme *Cardanův vzorec kubické rovnice*. Pokud bychom chtěli dosadit zpět za proměnné ι, ψ a ω , získáme složitý a poměrně i nepřehledný výraz (2.30).

$$x = \sqrt[3]{-\frac{\frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2}}{2} + \sqrt{\left(\frac{\frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2}}{2}\right)^2 + \left(\frac{\frac{\gamma}{\alpha} - \frac{\beta^2}{3\alpha^2}}{3}\right)^3}} + \sqrt[3]{-\frac{\frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2}}{2} - \sqrt{\left(\frac{\frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2}}{2}\right)^2 + \left(\frac{\frac{\gamma}{\alpha} - \frac{\beta^2}{3\alpha^2}}{3}\right)^3}} - \frac{\beta}{\alpha} \quad (2.30)$$

Cardanův vzorec nám však poskytne pouze jeden z kořenů kubické rovnice. Podle věty 1.6 má však kubická rovnice v komplexním oboru tři kořeny.

Poznámka 2.6 Výraz

$$-\left(\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 + \left(\frac{\psi}{3}\right)^3\right)$$

nazveme *diskriminantem kubické rovnice* a budeme ho značit D_3 .

Diskuze řešení kubické rovnice pomocí Cardanova vzorce a Huddeho rezolventy, uvedené níže:

- $D_3 > 0$ Rovnice má tři různé reálné kořeny.
- $D_3 = 0$ Rovnice má jeden dvojnásobný, případně jeden trojnásobný kořen.
- $D_3 < 0$ Rovnice má jeden reálný a dva komplexně sdružené kořeny.

Případ, kdy je diskriminat kubické rovnice záporný, nelze řešit pomocí Cardanova vzorce. Cardano v době, kdy žil, ještě komplexní čísla neznal, pouze zmínil, že by stačilo vhodně definovat odmocninu záporného čísla. Holandský matematik Johannes Hudde (1628 - 1704) pracoval s číslu, kterým dnes říkáme komplexní a podařilo se mu najít řešení kubické rovnice, ze kterého získáme všechny kořeny v komplexním oboru. Velký pokrok v oblasti komplexních čísel učinil Leonhard Euler (1707 - 1783) o dvě století později, než žil Cardano. Komplexní čísla byla zavedena až na počátku 19. století. [10]

Pokud nastane případ, že diskriminant kubické rovnice je nezáporný, pak získáme

ze vzorce (2.29), respektive ze vzorce (2.30) jeden reálný kořen, ale každá kubická rovnice musí mít v oboru komplexních čísel právě tři kořeny. V tuto chvíli už víme, že se bude jednat o kořeny reálné. Získáme je tak, že původní rovnici vydělíme kořenovým činitelem se získaným kořenem. Tak dostaneme rovnici kvadratickou, kterou jednoduše vyřešíme. Tímto postupem získáme všechny kořeny kubické rovnice s nezáporným diskriminantem. Způsob, jak získat všechny tři kořeny, popisuje metoda řešení kubické rovnice pomocí Huddeho rezolventy.

Huddeho rezolventa

Jak jsme již zmiňovali v předchozí kapitole, řešení pomocí Huddeho rezolventy nám poskytne všechny kořeny kubické rovnice. Toto řešení, které dále odvodíme pochází ze 17. století. [8]

Pro odvození výpočtu kořenů kubické rovnice pomocí Huddeho rezolventy využijeme zdroje [11]. Budeme vycházet z rovnice (2.18). Na tento tvar lze převést každou obecnou kubickou rovnici postupem z předchozí kapitoly o Cardanově vzorci. Jde o normovanou kubickou rovnici bez kvadratického členu, kterou si napíšeme ve tvaru

$$z^3 + \psi z + \omega = 0 . \quad (2.31)$$

Zavedeme substituci $z = y - \frac{\psi}{3y}$ a rovnici upravíme.

$$\begin{aligned} \left(y - \frac{\psi}{3y}\right)^3 + \psi \left(y - \frac{\psi}{3y}\right) + \omega &= 0 \\ y^3 - \frac{3\psi y^2}{3y} + \frac{3\psi^2 y}{9y^2} - \frac{\psi^3}{27y^3} + \psi y - \frac{\psi^2}{3y} + \omega &= 0 \\ y^3 - \psi y + \frac{\psi^2}{3y} - \frac{\psi^3}{27y^3} + \psi y - \frac{\psi^2}{3y} + \omega &= 0 \\ y^3 + \frac{9\psi^2 y^2 - \psi^3 - 9\psi^2 y^2}{27y^3} + \omega &= 0 \\ y^3 - \frac{\psi^3}{27y^3} + \omega &= 0 \end{aligned} \quad (2.32)$$

Rovnici (2.32) vynásobíme y^3 . Dostaneme rovnici (2.33), kterou nazveme *Huddeho rezolventa*. Jedná se o rovnici šestého stupně, kterou je ovšem snadné vyřešit.

$$y^3 y^3 - \frac{\psi^3 y^3}{27y^3} + \omega y^3 = 0$$

$$\begin{aligned}
y^6 - \frac{\psi^3}{27} + \omega y^3 &= 0 \\
y^6 + \omega y^3 - \frac{\psi^3}{27} &= 0
\end{aligned} \tag{2.33}$$

Zavedeme substituci $y^3 = v$.

$$v^2 + \omega v - \frac{\psi^3}{27} = 0 \tag{2.34}$$

Nyní si můžeme všimnout, že rovnice (2.34) s neznámou v odpovídá rovnici (2.25). Její kořeny tedy jsou

$$v_1 = -\frac{\omega}{2} + \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 + \left(\frac{\psi}{3}\right)^3} \text{ a } v_2 = -\frac{\omega}{2} - \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 + \left(\frac{\psi}{3}\right)^3}. \tag{2.35}$$

Huddeho rezolventa pak bude mít kořeny:

$$\begin{aligned}
y_1 &= \sqrt[3]{v_1}, \\
y_2 &= \rho \sqrt[3]{v_1}, \\
y_3 &= \rho^2 \sqrt[3]{v_1}, \\
y_4 &= \sqrt[3]{v_2}, \\
y_5 &= \rho \sqrt[3]{v_2}, \\
y_6 &= \rho^2 \sqrt[3]{v_2},
\end{aligned}$$

kde $\rho = -\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2}i$ je komplexní $\sqrt[3]{1}$. Řešení rovnice (2.31) získáme ve tvaru:

$$\begin{aligned}
z_1 &= y_1 + y_4 = \sqrt[3]{v_1} + \sqrt[3]{v_2} \\
z_2 &= y_3 + y_5 = \rho^2 \sqrt[3]{v_1} + \rho \sqrt[3]{v_2} \\
z_3 &= y_2 + y_6 = \rho \sqrt[3]{v_1} + \rho^2 \sqrt[3]{v_2}
\end{aligned}$$

Kořeny z_1, z_2 a z_3 jsou kořeny rovnice (2.31), která odpovídá rovnici (2.18). Abychom tedy dostali kořeny původní rovnice, musíme se vrátit k substituci $x = z - \frac{\psi}{3}$. Když dosadíme, dostaneme kořeny rovnice (2.15) ve tvaru

$$\begin{aligned}
x_1 &= z_1 - \frac{\psi}{3}, \\
x_2 &= z_2 - \frac{\psi}{3}, \\
x_3 &= z_3 - \frac{\psi}{3}.
\end{aligned}$$

Při odvozování těchto kořenů jsme provedli několik substitucí, pokud tedy chceme vyjádřit kořeny x_1, x_2 a x_3 pouze pomocí koeficientů α, β, γ a δ , musíme postupně dosadit do jednotlivých substitucí a kořeny budou mít tvar

$$x_1 = \sqrt[3]{-\frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2} + \sqrt{\left(\frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2}\right)^2 + \left(\frac{\gamma}{\alpha} - \frac{\beta^2}{3\alpha^2}\right)^3}} + \sqrt[3]{-\frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2} - \sqrt{\left(\frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2}\right)^2 + \left(\frac{\gamma}{\alpha} - \frac{\beta^2}{3\alpha^2}\right)^3}} - \frac{\beta}{3\alpha}, \quad (2.36)$$

$$x_2 = \rho^2 \sqrt[3]{-\frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2} + \sqrt{\left(\frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2}\right)^2 + \left(\frac{\gamma}{\alpha} - \frac{\beta^2}{3\alpha^2}\right)^3}} + \rho^3 \sqrt[3]{-\frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2} - \sqrt{\left(\frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2}\right)^2 + \left(\frac{\gamma}{\alpha} - \frac{\beta^2}{3\alpha^2}\right)^3}} - \frac{\beta}{3\alpha}, \quad (2.37)$$

$$x_3 = \rho^3 \sqrt[3]{-\frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2} + \sqrt{\left(\frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2}\right)^2 + \left(\frac{\gamma}{\alpha} - \frac{\beta^2}{3\alpha^2}\right)^3}} + \rho^2 \sqrt[3]{-\frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2} - \sqrt{\left(\frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2}\right)^2 + \left(\frac{\gamma}{\alpha} - \frac{\beta^2}{3\alpha^2}\right)^3}} - \frac{\beta}{3\alpha}. \quad (2.38)$$

2.2 Numerické metody

Numerická matematika se zabývá řešením problémů pro konkrétní číselné hodnoty. Numerická metoda je základním pojmem numerické matematiky. Pomocí numerické metody se hledá vhodné numerické řešení zadaného problému. Užívá se obvykle pro nalezení řešení, když je analytický postup komplikovaný nebo nemožný.

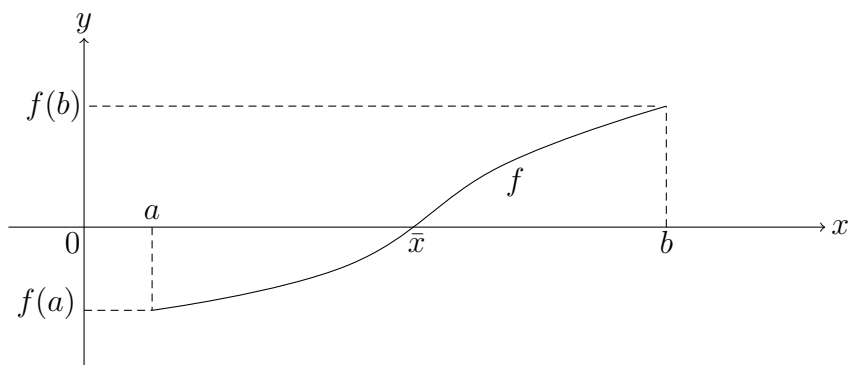
Dále uvedeme numerické metody pro zjištění kořenů kubické rovnice, které patří z hlediska numerické matematiky do oblasti hledání kořenů nelineárních rovnic. Pro numerické metody je typické používání většího počtu rutinních výpočtů a je vhodné je provádět na počítači pomocí matematického softwaru. V této práci budeme používat především programové prostředí MATLAB, které je vhodné pro vědeckotechnické výpočty. [12]

Metoda půlení intervalu

Nejznámější a nejjednodušší metodou je metoda půlení intervalu, neboli bisekce. Tato metoda je založena na větě 2.7.

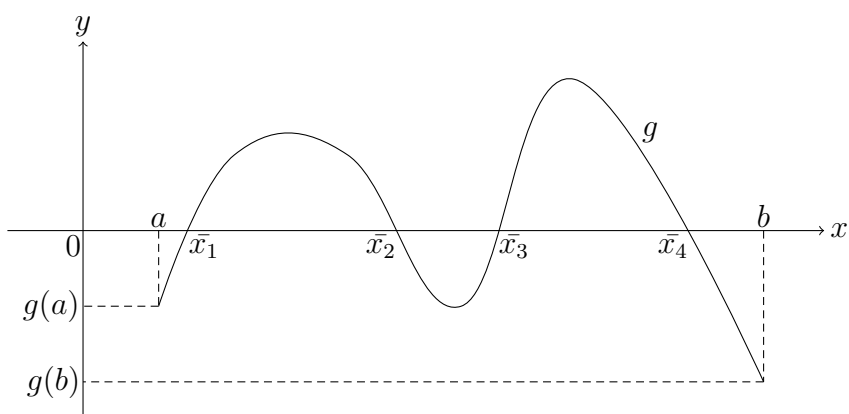
Věta 2.7 Mějme spojitou funkci f na intervalu $\langle a, b \rangle \subset \mathbb{R}$. Jestliže platí $f(a) \cdot f(b) \leq 0$, pak má rovnice $f(x) = 0$ na intervalu $\langle a, b \rangle$ alespoň jeden kořen. [13]

Na obrázku 2.3 je jedna z funkcí, pro kterou platí podle věty 2.7 podmínka $f(a) \cdot f(b) < 0$. Kořen je označen \bar{x} .



Obrázek 2.3: Příklad funkce f s vlastností $f(a) \cdot f(b) < 0$

Tato věta nám zaručuje, že na daném uzavřeném intervalu existuje kořen, ale nezaručuje, že kořen bude pouze jeden. Pro použití numerické metody je velmi důležité, aby kořen byl na daném intervalu právě jeden. Pokud by byl na intervalu $\langle a, b \rangle \subset \mathbb{R}$ počet kořenů sudý, pak by podmínka nebyla splněna. Ukázka je na obrázku 2.4. Vidíme, že funkce g má na intervalu $\langle a, b \rangle$ čtyři kořeny, ale platí, že $g(a) \cdot g(b) > 0$.



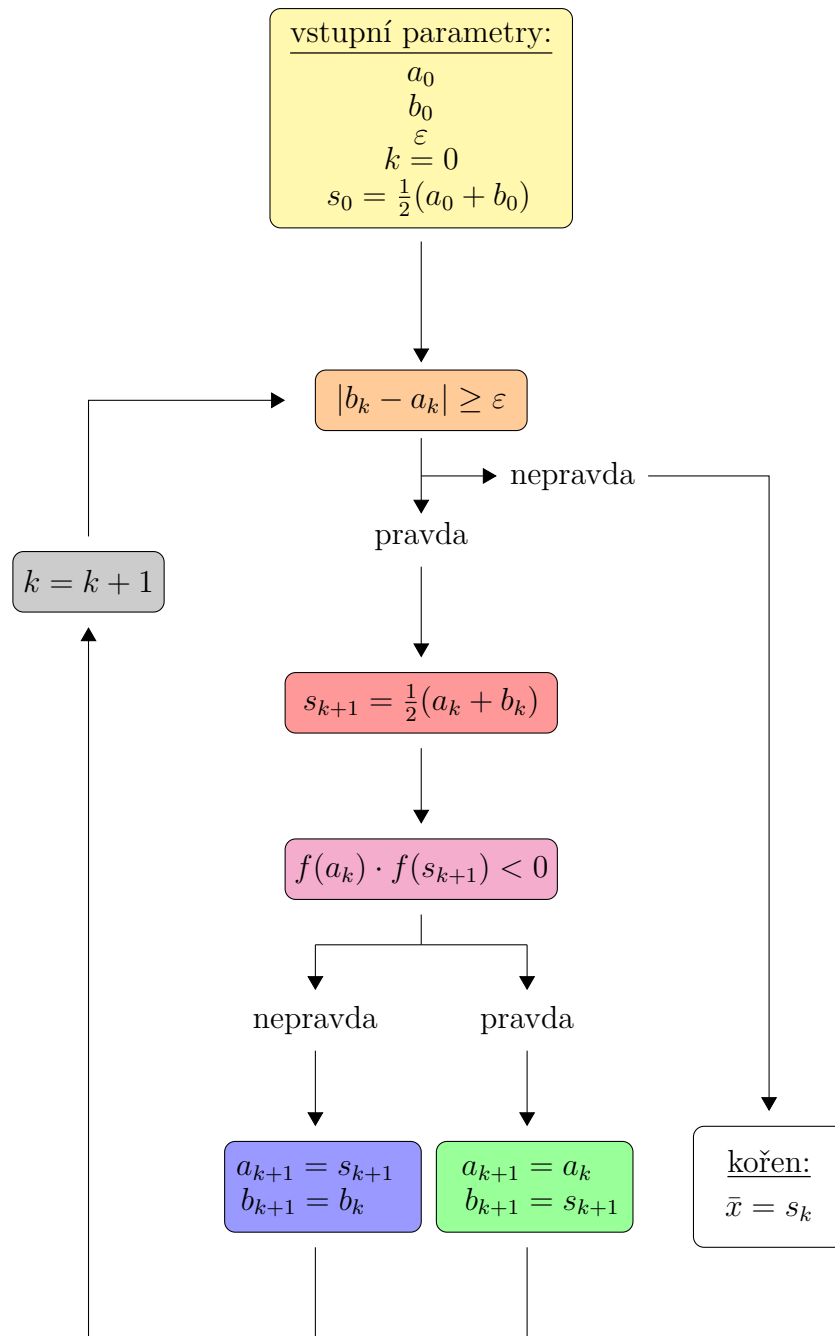
Obrázek 2.4: Funkce g se čtyřmi kořeny bez vlastnosti $g(a) \cdot g(b) < 0$

Pro pokračování budeme předpokládat, že na intervalu $\langle a, b \rangle$ leží právě jeden kořen a platí věta 2.7.

Metoda půlení intervalu je založena na konstrukci posloupnosti do sebe vnořených podintervalů

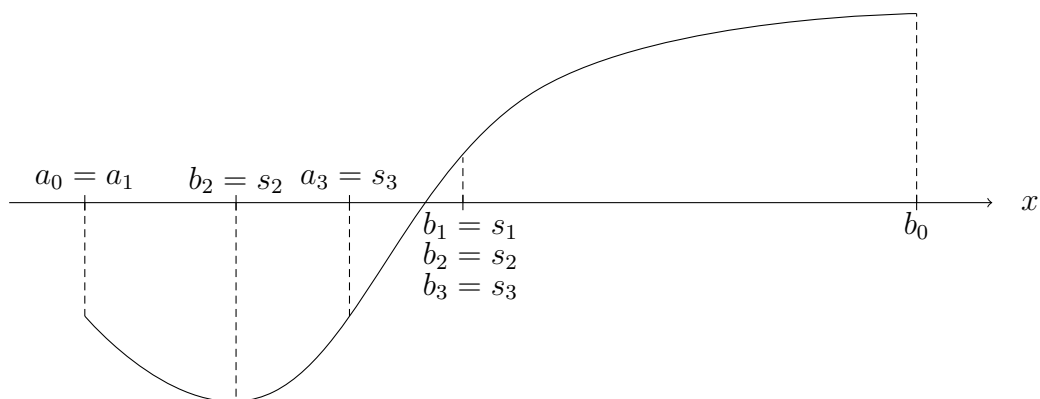
$$\langle a_0, b_0 \rangle \supset \langle a_1, b_1 \rangle \supset \dots \supset \langle a_k, b_k \rangle \supset \langle a_{k+1}, b_{k+1} \rangle \supset \dots$$

takových, že $f(a_k) \cdot f(b_k) < 0$ pro všechny $k \in \{0, 1, 2, 3, \dots\}$. Jestliže je $\langle a_k, b_k \rangle$ interval s vlastností $f(a_k) \cdot f(b_k) < 0$, pak interval $\langle a_{k+1}, b_{k+1} \rangle$ získáme podle diagramu na obrázku 2.5, který představuje algoritmus této metody.



Obrázek 2.5: Diagram metody bisekce

Princip této metody ještě ukážeme na obrázku 2.6, na kterém je patrné, že při každém kroku dochází v intervalu, kde se nachází kořen, k jeho zmenšení na polovinu intervalu původního. To je důvod, proč se tato metoda nazývá *metoda půlení intervalu (bisekce)*.



Obrázek 2.6: Princip metody půlení intervalu

Zdrojový kód 2.1: Metoda bisekce v programu MATLAB

```

1 f = @(x) x^3-4*x^2+5*x+6;
2 a=-2; %vychozi leva hranice intervalu <a,b>
3 b=1; %vychozi prava hranice intervalu <a,b>
4 presnost=0.01; %presnost epsilon
5 while abs((b-a))>presnost
6 x=(a+b)/2;
7     if f(x)==0;
8         disp(num2str(x));
9         return
10    elseif f(a)*f(x)<0;
11        b=x;
12    elseif (f(x)*f(b))<0;
13        a=x;
14    end
15 end
16 disp(num2str(x));

```

Pojďme si nyní zdrojový kód 2.1 objasnit. Na řádku 1 nejprve napíšeme rovnici, kterou chceme řešit. Tato rovnice nemusí být pro tuto metodu nutně polynomická, může se jednat o rovnici obsahující logaritmy, goniometrické funkce a podobně. V této práci se však zabýváme především řešením kubické rovnice a proto budeme právě tuto rovnici uvádět jako příklad ve zdrojovém kódu. Do řádku 1 nezadááme celou rovnici. Rovnici před zadáním nejprve upravíme do tvaru $f(x) = 0$ a zapíšeme výraz $f(x)$. V tomto konkrétním případě budeme řešit rovnici $x^3 + 4x^2 + 5x + 6 = 0$.

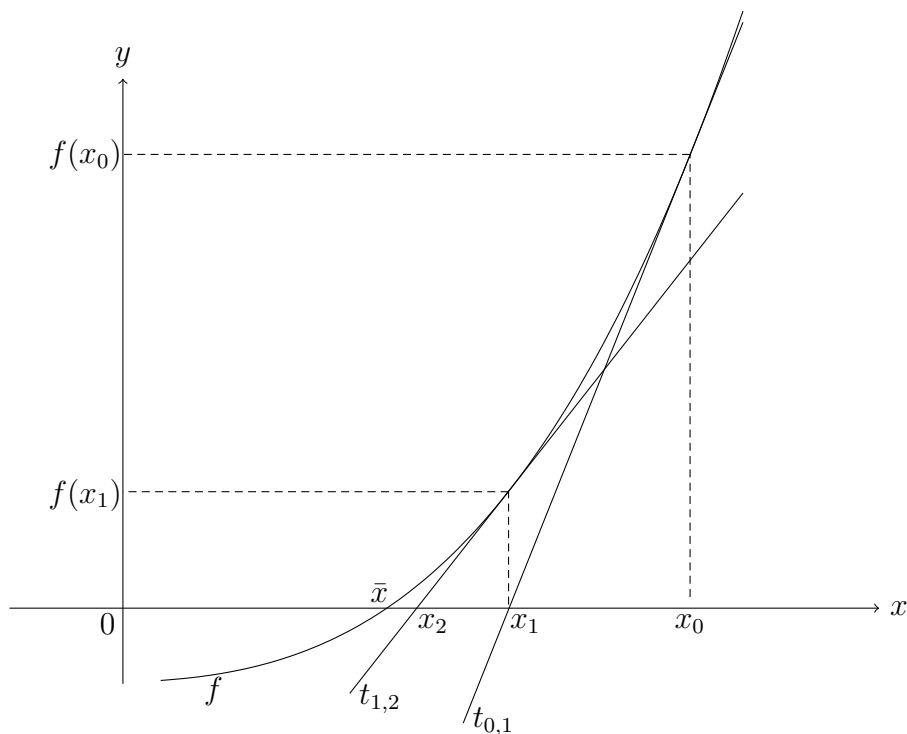
Na řádcích 2 a 3 určujeme, v jakém intervalu hledáme kořen rovnice. V tomto konkrétním případě hledáme kořen v intervalu $\langle -2, 1 \rangle$. Předpokládáme, že je právě jeden a platí věta 2.7. Řádek 4 slouží k určení přesnosti výpočtu. Jedná se o proměnnou ε z obrázku 2.5. V tomto konkrétním případě chceme aproximaci kořenu s přesností na dvě desetinná místa. Řádky 5 až 15 obsahují `while` cyklus. Tento cyklus se bude provádět do té doby, dokud bude splněna podmínka, uvedená na řádku 5. Pro metodu bisekce tato podmínka zní tak, že cyklus se má provádět, dokud absolutní hodnota rozdílu mezi intervalu bude větší než přesnost. Cyklus skončí, až tato podmínka nebude splněna. Na diagramu metody bisekce (obrázek 2.5) je tato podmínka v oranžovém rámečku. Dále je nutné určit střed intervalu, ten vypočítáme jako aritmetický průměr mezi intervalu, ve zdrojovém kódu řádek 6. Za řádkem 6 začíná na sedmém řádku `if-else` konstrukce. Na řádku 7 neprve otestujeme, jestli jsme výpočtem středu intervalu získali kořen. Zjišťujeme tedy, jestli se hodnota funkce definované na prvním řádku nebude v bodě vypočteném na šestém řádku rovnat nule. Pokud rovnost nastane, příkazem na osmém řádku se zobrazí kořen a příkazem `return` na desátém řádku se ukončí procházení `if-else` konstrukce i cyklus `while`. Zjišťování pravdivosti podmínek na řádcích 10 a 12 odpovídá na obrázku 2.5 růžovému rámečku. Neboli zjišťujeme, v jakém podintervalu se po rozpůlení původního intervalu nachází kořen. Řádky 11 a 13 určují meze nového intervalu, se kterým budeme dále v cyklu pracovat. Ve chvíli, kdy není splněna podmínka na řádku 5, se cyklus ukončí a příkazem na posledním řádku se vypíše hodnota hledaného kořenu s požadovanou přesností.

Newtonova metoda pro nelineární rovnice

Tato metoda, pojmenovaná po Isaacu Newtonovi, je pravděpodobně nejznámější metodou pro hledání kořenu nelineární rovnice. Někdy bývá nazývána také metodou tečen. Její geometrická interpretace je na obrázku 2.7. Pokud chceme tuto metodu použít, nejprve si zvolíme odhad kořenu x_0 . Poté sestrojíme ke grafu $f(x)$ tečnu v bodě $[x_0, f(x_0)]$ a tečnu pojmenujeme $t_{0,1}$. Dále najdeme průsečík tečny $t_{0,1}$ se souřadnicovou osou x a pojmenujeme ho x_1 . Bod x_1 považujeme za nový odhad kořenu a postup opakujeme. Sestrojíme v bodě $[x_1, f(x_1)]$ tečnu, kterou pojmenujeme $t_{1,2}$ a průsečík této tečny s osou x označíme x_2 . Takto bychom stále pokračovali, dokud bychom nezískali odhad kořenu x_k . Algoritmus se zastaví, až bude splněno určené kritérium. U této metody se používá nejčastěji kritérium $|x_{k+1} - x_k| < \varepsilon$. Další možností, jak zastavit výpočet metody, je přesně definovat počet iterací. Zdrojový kód 2.2 prezentuje Newtonovu metodu ukočenou počtem kroků implementovanou v programu MATLAB. Zdrojový kód 2.3 je ukázkou implementace této metody

s podmínkou $|x_{k+1} - x_k| < \varepsilon$.

Pokud hledáme kořen na intervalu $\langle a, b \rangle$, pak funkce f musí být na intervalu (a, b) diferencovatelná. Pro počáteční odhad kořenu musí platit $x_0 \in (a, b)$.



Obrázek 2.7: Princip Newtonovy metody

Abychom mohli Newtonovu metodu zadat do počítače, musíme si předpřipravít výraz pro výpočet průsečíku tečny se souřadnicovou osou x . Budeme vycházet z následujícího vztahu pro zjištění rovnice tečny funkce $f(x)$ v bodě x_0 . Tečný bod bude mít souřadnice $[x_0, f(x_0)]$.

$$y - y_0 = f'(x_0)(x - x_0) \quad (2.39)$$

Dosazením tečného bodu $[x_0, f(x_0)]$ do rovnice (2.39) dostaneme vztah

$$y - f(x_0) = f'(x_0)(x - x_0) . \quad (2.40)$$

Výraz (2.40) nebudeme upravovat a dosadíme do něj bod $[x_1, 0]$, který je průsečíkem tečny $t_{0,1}$ se souřadnicovou osou x . Tím získáme vztah pro průsečík x_1 vyjádřený pomocí x_0 , funkční hodnoty funkce f v bodě x_0 a derivace funkce f v bodě x_0 .

$$0 - f(x_0) = f'(x_0)(x_1 - x_0)$$

$$\begin{aligned}
-f(x_0) &= x_1 f'(x_0) - x_0 f'(x_0) \\
x_1 &= \frac{-f(x_0) + x_0 f'(x_0)}{f'(x_0)} \\
x_1 &= x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}
\end{aligned} \tag{2.41}$$

Pokud bychom zopakovali tento postup pro hledání vztahu pro průsečík x_2 , který bychom chtěli vyjádřit pomocí x_1 , funkční hodnoty funkce f v bodě x_1 a derivace funkce f v bodě x_1 , získáme vztah

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}.$$

Obecně platí

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \text{ kde } k \in \{0, 1, 2, 3, \dots\} . \tag{2.42}$$

Právě vztahu (2.42) využijeme při implementování Newtonovy metody v programu MATLAB.

Zdrojový kód 2.2: Newtonova metoda ukončená počtem kroků v programu MATLAB

```

1 f = @(x) 2*x^3 - 20*x^2 + 74*x - 156 ; %leva strana
2 derivace_f = @(x) 6*x^2 - 40*x + 74; %derivace levé strany
3 pocet_kroku=2000; %pocet kroku
4 odhad_korenu=10; %pocatecni odhad korenu
5 x=zeros(pocet_kroku+1,1); %pole aproximaci korenu
6 x(1)=odhad_korenu; %prvni prvek pole aproximaci korenu
7 for k=1:pocet_kroku %zacatek cyklu s iteracni formulí
8     x(k+1)=x(k)-(f(x(k))/derivace_f(x(k)));
9 end
10 disp(x(end)); %zobrazení posledního prvku pole korenu

```

Nyní si zdrojový kód 2.2 vysvětlíme. Na prvním řádku zadáme levou stranu kubické rovnice z definice 2.1. Na druhém řádku je derivace levé strany podle neznámé x . Řádek 3 určuje počet kroků, který má algoritmus vykonat. Graficky se podle obrázku 2.7 jedná o počet tečen a průsečíků se souřadnicovou osou x , které chceme sestrojít. Newtonova metoda ještě před zahájením výpočtu potřebuje počáteční aproximaci kořenu, kterou určíme na řádku 4. Dále si na řádku 5 vytvoříme pole o velikosti počtu kroků, které chceme vykonat, zvětšené o jedničku, protože toto pole bude

obsahovat jednotlivé aproximace kořenu rovnice včetně naší počáteční aproximace kořenu. Na první pozici pole, které jsme nazvali x , přiřadíme naší počáteční aproximaci kořenu. To provedeme konstrukcí, kterou obsahuje šestý řádek. Řádky 7 až 9 obsahují `for` cyklus, který vyhodnocuje výraz (2.42) a výsledky postupně zapisuje do pole x . Poslední řádek algoritmu zobrazí poslední prvek pole, který je aproximací kořenu v závislosti na zadaném počtu kroků.

Zdrojový kód 2.3: Newtonova metoda ukončená podmínkou v programu MATLAB

```

1 format long
2 f = @(x) 2*x^3 - 20*x^2 + 74*x - 156 ; %leva strana
3 derivace_f = @(x) 6*x^2 - 40*x + 74; %derivace leve strany
4 pocatecni_aproximace=10; %pocatecni odhad kořenu
5 x=zeros(); %pole aproximaci kořenu
6 x(1)=pocatecni_aproximace; %první aproximace kořenu
7 presnost=0.0001; %hodnota epsilon
8 k=1;
9 maximalni_pocet_iteraci = 10000000;
10 max_iter=0;
11 while 1>0
12     x(k+1)=x(k)-(f(x(k))/derivace_f(x(k)));
13     if(abs((x(k+1)-x(k))))<presnost)
14         break
15     end
16     k=k+1;
17     if(max_iter > maximalni_pocet_iteraci)
18         break
19     end
20     max_iter=max_iter+1;
21 end
22 disp(x(end)); %zobrazení posledního prvku pole kořenu

```

Zdrojový kód 2.3 je z části podobný kódu 2.2. Opět zadáváme levou stranu rovnice z definice 2.1, její derivaci a počáteční aproximaci kořenu. Pole aproximací kořenu nazvané x nyní nedefinujeme přesnou délkou, protože nevíme, kolik kroků budeme potřebovat pro splnění podmínky $|x_{k+1} - x_k| < \varepsilon$. Na řádku 7 zadáváme požadovanou přesnost kořenu a na řádku 8 definujeme proměnnou k a přiřadíme jí hodnotu 1. Právě tuto proměnnou budeme potřebovat inkrementovat v následujícím `while` cyklu, abychom mohli zapisovat a přistupovat na správné pozice v poli aproximací

kořenů. Proměnná `maximalni_pocet_iteraci` určuje, jaký je maximální možný počet iterací. Další proměnná na řádku níže je pomocná proměnná, která se bude postupně inkrementovat a ukončí cyklus, kdyby došlo například k jeho nekonečnému opakování vlivem nějaké chyby. Cyklus `while` začínající na jedenáctém řádku je nekonečný cyklus, protože vždy platí, že $1 > 0$, ukončovaný příkazem `break`, ve vnořené `if` podmínce. Na dvanáctém řádku je iterační formule pro aproximaci kořenu, která postupně plní odhady kořenů pole `x`. V této verzi Newtonovy metody, která je ukončována podmínkou, je nejdůležitější `if` konstrukce začínající na třináctém řádku, která vyhodnocuje, zda už je rozdíl posledních dvou odhadů kořenů menší než požadovaná hodnota ε . Pokud je tato podmínka vyhodnocena pravdivě, pak se cyklus příkazem `break` ukončí a jako nejlepší aproximace kořenu se vypíše poslední prvek pole `x`. Pokud je podmínka vyhodnocena nepravdivě, tak se o číslo 1 inkrementuje hodnota `k`, dojde ke kontrole, zda se nepřekročil námi určený maximální počet iterací tohoto cyklu, která je implementována na řádcích 17 až 20 a cyklus `while` začíná další iteraci znovu.

2.3 Další způsoby řešení

Pokud chceme velmi rychle vyřešit kubickou rovnici, například pro nějakou další aplikaci, je možné využít velké množství předpřipravených řešení. Mezi uživatelsky nejprůběžnější zajisté patří GeoGebra a WolframAlpha.

GeoGebra

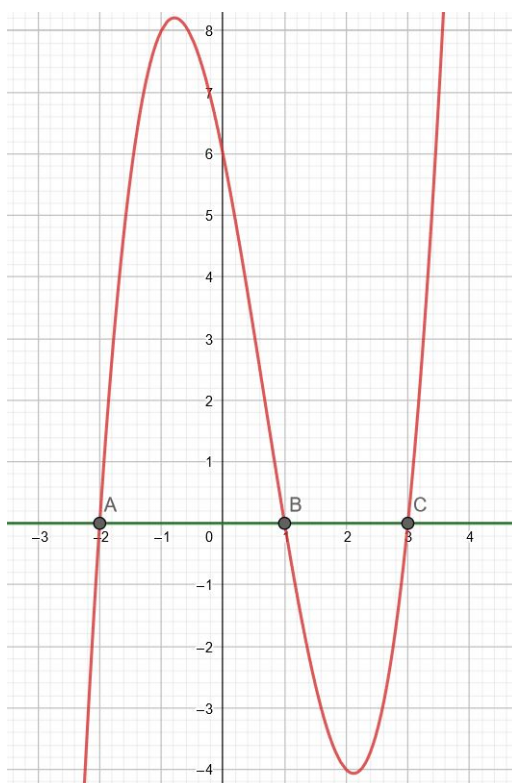
GeoGebra je počítačový program, dostupný offline i ve webových prohlížečích, pro interaktivní geometrii, algebru, statistiku i analýzu. V předešlých kapitolách jsme již zmínili, co znamená graficky řešit rovnici. Připomeňme, že pokud máme rovnici ve tvaru $f(x) = 0$, pak řešením této rovnice je průsečík, respektive průsečíky, má-li rovnice více řešení, grafu funkce f se souřadnicovou osou x .

Nyní si ukážeme, jak řešit kubickou rovnici v GeoGebře. Budeme řešit rovnici $x^3 - 2x^2 - 5x + 6 = 0$. Neprve tedy vykreslíme funkci $f(x) = x^3 - 2x^2 - 5x + 6$. Dále vykreslíme funkci $g(x) = 0$, to je konstantní lineární funkce, která je totožná se souřadnicovou osou x . Na obrázku 2.8 vidíme vstupní data.

●	$f(x) = x^3 - 2x^2 - 5x + 6$
●	$g(x) = 0$

Obrázek 2.8: Vstupní data pro řešení rovnice $x^3 - 2x^2 - 5x + 6 = 0$ [14]

Na obrázku 2.9 vidíme červeně vykreslenou funkci f a zeleně vykreslenou funkci g , kde jsme si pomocí funkce **Nový bod** označili jednotlivé průsečíky těchto dvou funkcí a x -ové souřadnice vzniklých průsečíků na obrázku 2.10 jsou hledané kořeny zadané rovnice. Rovnice má tedy množinu kořenů $K = \{-2, 1, 3\}$.



Obrázek 2.9: Vykreslené funkce f a g v programu GeoGebra [14]

●	A = Prusecik(f, g, 1) → (-2, 0)
●	B = Prusecik(f, g, 2) → (1, 0)
●	C = Prusecik(f, g, 3) → (3, 0)

Obrázek 2.10: Souřadnice průsečíků funkcí f a g [14]

Existují však kubické rovnice s komplexními kořeny, u kterých při výše uvedené ilustraci problému v GeoGebře najdeme pouze jeden reálný kořen. To nám však stačí, protože po získání tohoto kořenu můžeme využít Hornerovo schéma. Jak již z textu o Hornerovu schématu víme, tak po dosazení kořenu nám ve druhé řádce tabulky vyjdou koeficienty polynomu nižšího stupně, jehož kořeny jsou zbývající hledané kořeny kubické rovnice. GeoGebra však není nejrychlejší nástroj pro hledání kořenů, velmi dobře ale slouží například ve výuce pro ilustraci různých matematických problémů.

WolframAlpha

Krátce se také zmíníme o službě WolframAlpha, která je založena na výpočetním softwaru Wolfram Mathematica. Jedná se o službu dostupnou online na webu, která odpovídá uživatelům v různých oblastech (matematika, chemie, materiály, finance, jazyky,...) na jejich dotazy. Tuto službu je vhodné využít, pokud potřebujeme znát rychle výsledky například kubické rovnice pro další aplikaci.

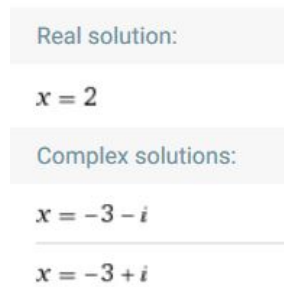
Budeme řešit v množině komplexních čísel rovnici $x^3 + 4x^2 - 2x - 20 = 0$. Stačí tedy zadat do pole pro dotaz tuto rovnici a stisknout klávesu **enter**. Zadání rovnice je na obrázku 2.11.



Obrázek 2.11: Zadání rovnice do služby WolframAlpha [15]

Během několika sekund získáme na výstupu několik informací, například jiné tvary

rovnice, graf levé strany rovnice a dalé kořeny rovnice, jako je tomu na obrázku 2.12.



```
Real solution:  
x = 2  
Complex solutions:  
x = -3 - i  
x = -3 + i
```

Obrázek 2.12: Kořeny rovnice ze služby WolframAlpha [15]

Rovnice $x^3 + 4x^2 - 2x - 20 = 0$ má v komplexním oboru množinu kořenů $K = \{-3 \pm i, 2\}$.

Služba WolframAlpha tedy slouží spíše pro studijní účely jako kontrola výsledků výpočtů nebo pro průběžné výpočty při řešení problémů, kde potřebujeme znát rychle výsledky pro další postup.

3 Van der Waalsova rovnice

Příkladem použití kubické rovnice je Van der Waalsova rovnice. Chování tekutin lze popsat takzvanou stavovou rovnicí, která udává vazbu mezi tlakem, teplotou a objemem tekutiny. Pokud ve Van der Waalsově rovnici zafixujeme tlak a teplotu, získáme pro objem kubickou rovnici, kterou lze řešit metodami uvedenými v kapitole 2. Van der Waalsova rovnice je tedy příkladem aplikace matematických metod při řešení fyzikálních problémů. Platí to i naopak. Zkoumání Van der Waalsovy rovnice může obohatit pohled na zkoumání kubických rovnic v matematice.

3.1 Historie

Johannes Diderik van der Waals byl nizozemský fyzik žijící v letech 1837 – 1923. Na základě svých experimentů objasnil přechod z plynného do kapalného skupenství. Zformuloval takzvanou Van der Waalsovou rovnici platnou pro kapaliny i plyny, která vyjadřovala tuto změnu skupenství. Rovnice měla platnost pro kapaliny stejného složení.

Van der Waals se snažil objasnit problém spojitosti plynného a kapalného stavu látek. Objevil vztah mezi objemem, tlakem a teplotou plynů a kapalin. Dokázal také, že existují síly, které působí na úrovni molekul, jejichž důsledkem je bránění oddělení molekul a vnitřní tlak v kapalinách. Zmíněné síly se nazývají Van der Waalsovy síly. Díky experimentům se mu podařilo objasnit přechod z plynného do kapalného skupenství. Zformuloval Van der Waalsovou rovnici, která popisuje tuto změnu skupenství. Rovnice je platná pro kapaliny stejného složení. V roce 1910 obdržel Nobelovu cenu za fyziku za práci na stavové rovnici plynů a tekutin.

Van der Waalsova rovnice je pro popis reálných tekutin v současnosti již zastaralá. Má však teoretický význam a slouží jako první příklad pro popis fázového přechodu kapalina - pára. [16, 17]

3.2 Fyzikální aplikace

Než přejdeme k fyzikální aplikaci Van der Waalsovy rovnice, je nutné si popsat několik fyzikálních veličin a vztahy mezi nimi. Jedná se o měrný objem, měrnou hustotu, molární objem, látkovou hustotu a objem. Další fyzikální veličiny si popíšeme až po zavedení Van der Waalsovy rovnice.

Měrný objem V_m je podíl objemu systému V a hmotnosti systému m . Měrná hustota

ϱ je převrácená hodnota měrného objemu, platí:

$$V_m = \frac{V}{m} \quad [\text{kg}^{-1} \cdot \text{m}^3] \quad ,$$

$$\varrho = \frac{m}{V} = \frac{1}{V_m} \quad [\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}] \quad .$$

Molární objem v zavedeme jako podíl objemu systému V a látkového množství v systému n . Látková hustota ρ je převrácená hodnota molárního objemu. Vztahy jsou tedy:

$$v = \frac{V}{n} \quad [\text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}] \quad , \quad (3.1)$$

$$\rho = \frac{n}{V} = \frac{1}{v} \quad [\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}] \quad . \quad (3.2)$$

Především vztahu (3.1) využijeme při převádění Van der Waalsovy rovnice do tvaru, který je vhodnější pro využití v praxi. Vztah

$$v = \frac{M_m}{\varrho} \quad , \quad (3.3)$$

kde M_m je molární hmotnost v kilogramech na mol, může být užitečný ve chvíli, kdy potřebujeme převádět mezi měrnou hustotou a molárním objem. [18]

Stavová rovnice ideálního plynu je rovnice ve tvaru

$$pV = nRT \quad . \quad (3.4)$$

Ideální plyn je plyn, který je dokonale stlačitelný a má nulové vnitřní tření, tedy i nulovou viskozitu. Model dokonalého plynu také předpokládá, že jednotlivé molekuly jsou bodové částice bez objemu a jediné silové působení nastává při pružných srážkách. U reálných plynů však dochází i k dalšímu silovému působení a navíc nemůžeme zanedbávat objem molekul. Van der Waals se úspěšně pokusil zpřesnit rovnici (3.4) zavedením dvou korekčních faktorů. Nyní stejným postupem jako van der Waals odvodíme stavovou rovnici pro reálné plyny.

Nejprve si stavovou rovnici pro ideální plyn vyjádříme pomocí molárního objemu. Ze vztahu (3.2) si vyjádříme objem V a dosadíme do rovnice (3.4).

$$V = vn \quad \xrightarrow{\quad} \quad pV = nRT$$

Tímto dosazením získáme rovnici

$$pv = RT . \quad (3.5)$$

Dále vyjdeme z představy, že jeden mol plynu má konečný objem, který nazveme *vyloučení objem* a označíme ho b . Pro stlačování jednoho molu molekul plynu máme k dispozici měrný objem zmenšený o vyloučený objem. Po této úvaze získáme rovnici ve tvaru

$$p(v - b) = RT \quad (3.6)$$

Existence přitažlivých sil mezi molekulami způsobuje, že jsou molekuly k sobě přitahovány a snižuje se rychlost jejich nárazu na stěny nádoby. Na stěnu nádoby tedy působí menší tlak a van der Waals analýzou sil působících mezi molekulami zjistil, že snížení tlaku je nepřímo úměrné druhé mocnině molárního objemu a závisí na konstantě a . Další úpravou rovnice (3.6) po této úvaze získáme rovnici (3.7), která je Van der Waalsovou rovnicí pro reálnou kapalinu i plyn.

$$\left(p + \frac{a}{v^2}\right)(v - b) = RT \quad (3.7)$$

Za pomoci ekvivalentních úprav lze tuto rovnici převést na tvar

$$p = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v^2} , \quad (3.8)$$

ve kterém se s ní také můžeme setkat. Členy $\frac{a}{v^2}$ a b jsou takzvané Van der Waalsovy korekce. [19] Nyní si v tabulce 3.1 uděláme přehled použitých konstant a veličin ze vztahů (3.1) - (3.8).

Tabulka 3.1: Přehled konstant a veličin ze vztahů (3.1) - (3.8)

značka	jednotka	popis
a	$\text{kg} \cdot \text{m}^5 \cdot \text{mol}^{-2} \cdot \text{s}^{-2}$	konstanta rozdílná pro každou látku
b	$\text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	konstanta rozdílná pro každou látku
m	kg	hmotnost
p	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}$	tlak
ρ	$\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$	látková hustota
R	$\text{J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$	molární plynová konstanta = $8,314 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$
T	K	termodynamická teplota
n	mol^{-1}	látkové množství
v	$\text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	molární objem
V	m^3	objem

V následující tabulce 3.2 si uvedeme pro příklad tabulkové hodnoty konstant a a b pro vybrané látky, které jsou získány z experimentálních dat o stavovém chování látky. Hodnoty a a b můžeme určovat i výpočty z kritických hodnot stavových veličin a tyto hodnoty se poté mohou od experimentálních hodnot lišit. [20]

Tabulka 3.2: Přehled vybraných hodnot a a b

látko	a	b
benzen	1,824	0,0001154
dusík	0,141	0,0000391
kyslík	0,138	0,0000318
oxid uhličitý	0,364	0,0000426
voda	0,554	0,0000305
vodík	0,025	0,0000266

Poznámka 3.1 Pokud bychom do rovnice (3.7), případně do rovnice (3.8) dosadili $a = b = 0$, získali bychom zpět stavovou rovnici ideálního plynu (3.5).

Pro konkrétní proměnné Van der Waalsovy rovnice budeme dále zobrazovat $p - v$ diagram. Pojdme si tedy nejprve Van der Waalsovou rovnici převést pro tuto aplikaci do vhodnějšího tvaru.

Nejprve levou stranu rovnice (3.7) roznásobíme, tím získáme tvar

$$pv^3 - bpv^2 - RTv^2 + av - ab = 0$$

a tento tvar už jen pouhým vytykáním upravíme na rovnici (3.9).

$$pv^3 + (-bp - RT)v^2 + av - ab = 0 \quad (3.9)$$

Podle definice 2.1 se jedná o kubickou rovnici s neznámou v a koeficienty $\alpha = p$, $\beta = -bp - RT$, $\gamma = a$ a $\delta = -ab$.

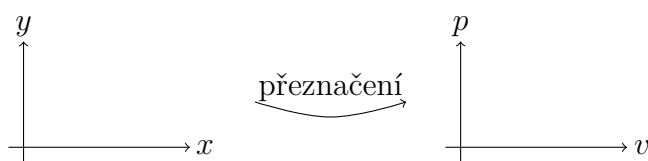
V tuto chvíli již máme připraveny veškeré potřebné vztahy pro tvorbu $p - v$ diagramu. Dále se budeme zabývat izotermickým dějem. Nejprve v krátkosti pro ideální plyn a poté pro Van der Waalsův plyn (reálný plyn).

Izotermický děj je takový děj, při kterém hodnota teploty T termodynamické soustavy zůstává konstantní.

Tuto skutečnost popisuje u ideálního plynu takzvaný Boyleův-Mariottův zákon a podle tohoto zákona pro rovnici (3.5) platí

$$pv = \text{konst} , \quad (3.10)$$

kde konstantní pravá strana této rovnice je rovna výrazu RT . Dále je nutné přeznačit osy v kartézské soustavě souřadnic, jako na obrázku 3.1.



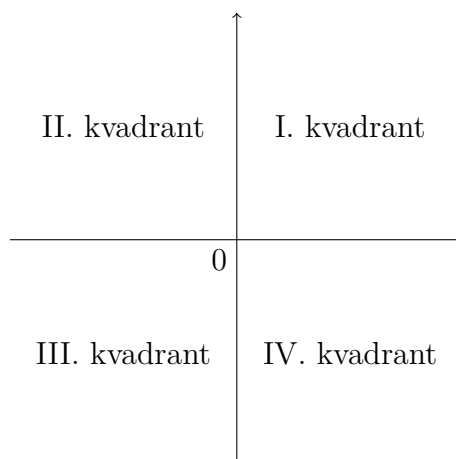
Obrázek 3.1: Přeznačení kartézského systému souřadnic pro $p - v$ diagram

Dále zavedeme funkci $f_{\text{ideal}}(v)$. Pro zavedení funkce $f_{\text{ideal}}(v)$ využijeme rovnici (3.5), kterou vydělíme proměnnou v a funkci $f_{\text{ideal}}(v)$ definujeme takto:

$$f_{\text{ideal}}(v) = p = \frac{RT}{v} .$$

Graf funkce $f_{\text{ideal}}(v)$ budeme zobrazovat pouze v prvním a čtvrtém kvadrantu, protože hodnota molárního objemu nemůže být z fyzikálního hlediska záporná. Kvad-

ranty obvykle číslujeme tak, jako je tomu na obrázku 3.2.



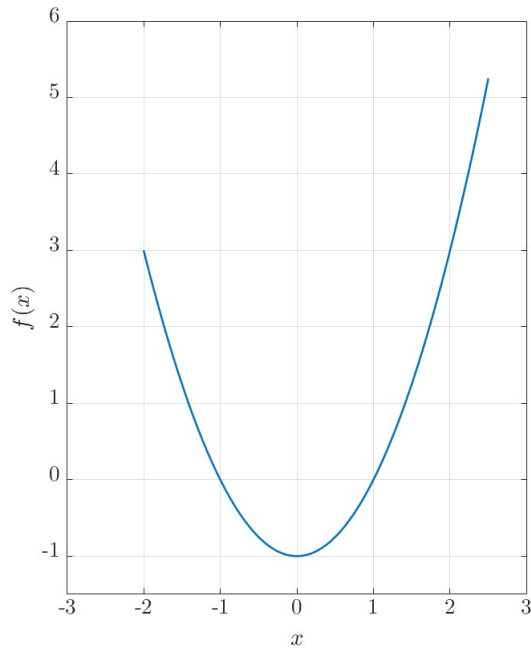
Obrázek 3.2: Rozdělení na kvadranty

Přeznačenou kartézskou soustavu souřadnic spolu s grafem funkce $f_{\text{ideal}}(v)$ budeme nazývat $p - v$ diagram. Graf funkce $f_{\text{ideal}}(v)$ budeme nazývat izoterma. Ještě než se budeme věnovat reálnému plynu, nakreslíme si $p - v$ diagram ideálního plynu pro několik různých hodnot termodynamické teploty T . Pro nakreslení diagramu využijeme software MATLAB. Vysvětlíme si princip tvorby grafů v MATLABu a zdrojový kód pro tvorbu $p - v$ diagramu. Kromě MATLABu budeme také v některých případech u reálného plynu využívat systém Wolfram Mathematica.

Nyní uděláme malou odbočku a vysvětlíme si na funkci $f(x) = x^2 - 1$, jak nakreslit její graf v MATLABu. Nejprve si musíme zvolit definiční obor funkce $f(x)$, na kterém chceme nakreslit její graf. Jedná se vždy o takový interval, který je vhodný pro další aplikaci. Pro příklad zvolíme $x \in \langle -2; 2,5 \rangle$. Pro nakreslení grafu budeme potřebovat jednotlivé body, které leží na grafu funkce. Tyto body budou mít tvar $[x, f(x)]$ a zvolíme si vhodné rozdělení intervalu. Pro kvalitní nakreslení takového grafu stačí rozdělení intervalu po jedné setině, avšak čím jemnější zvolíme dělení, tím přesnější graf získáme. Získané body poté v MATLABu pomocí příkazu `plot` spojíme a tak získáme graf funkce $f(x) = y = x^2 - 1$. Zdrojový kód 3.1 nám vygeneruje graf funkce na obrázku 3.3.

Zdrojový kód 3.1: Kód pro nakreslení grafu funkce $f(x) = x^2 - 1$

```
1 x = [-2 : 0.01 : 2.5] ;  
2 y = x.^2 - 1 ;  
3 plot(x, y) ;
```



Obrázek 3.3: Graf $f(x) = x^2 - 1$ nakreslený v MATLABu s grafickými úpravami

Nyní si zdrojový kód 3.1 vysvětlíme. Na prvním řádku je pole obsahující tři čísla oddělené dvojtečkami. První číslo je dolní hranice intervalu, další číslo je hodnota, která se bude přičítat k předešlému číslu, dokud se nedosáhne posledního čísla 2,5, tedy horní hranice intervalu. Na pole můžeme nahlížet jako na vektor, který když zapíšeme do řádky, bude obsahovat čísla $(-2; -1,99; -1,98; \dots; 2,49; 2,5)$. Na dalším řádku si vypočítáme příslušné funkční hodnoty $f(x)$. Protože x není číslo, ale pole čísel, je nutné k němu vytvořit příslušné pole funkčních hodnot y , toho docílíme nejlépe tak, že v zápisu funkce doplníme před znak umocňování \wedge tečku. Tímto postupem jsme získali dvě pole čísel x a y , která obsahují na příslušných pozicích bod a jeho funkční hodnotu. Posledním krokem vykreslíme pomocí příkazu `plot(x,y)` graf funkce $f(x)$. Dodejme ještě, že není nutné pojmenovat pole vždy x a y , funkce `plot` má dva argumenty, přičemž první argument bude sada souřadnic příslušící vodorovné ose a druhý argument bude sada souřadnic příslušící svislé ose. Dále je nutné znát případné body či intervaly, které nepatří do definičního oboru funkce, protože se může stát, že při rozdělení intervalu bude naše pole x takové body obsahovat a graf funkce by byl nesprávně nakreslen. Jako příklad můžeme uvést funkci $y = \frac{1}{x^2}$, která není definovaná pro $x = 0$, avšak když zvolíme rozdělení tak, že pole x bude číslo 0 obsahovat, MATLAB graf vykreslí spojitě. Každý graf je navíc ještě možné graficky zpracovat v prostředí softwaru MATLAB, jedná se například o změnu barev, nastavení měřítek os a podobně.

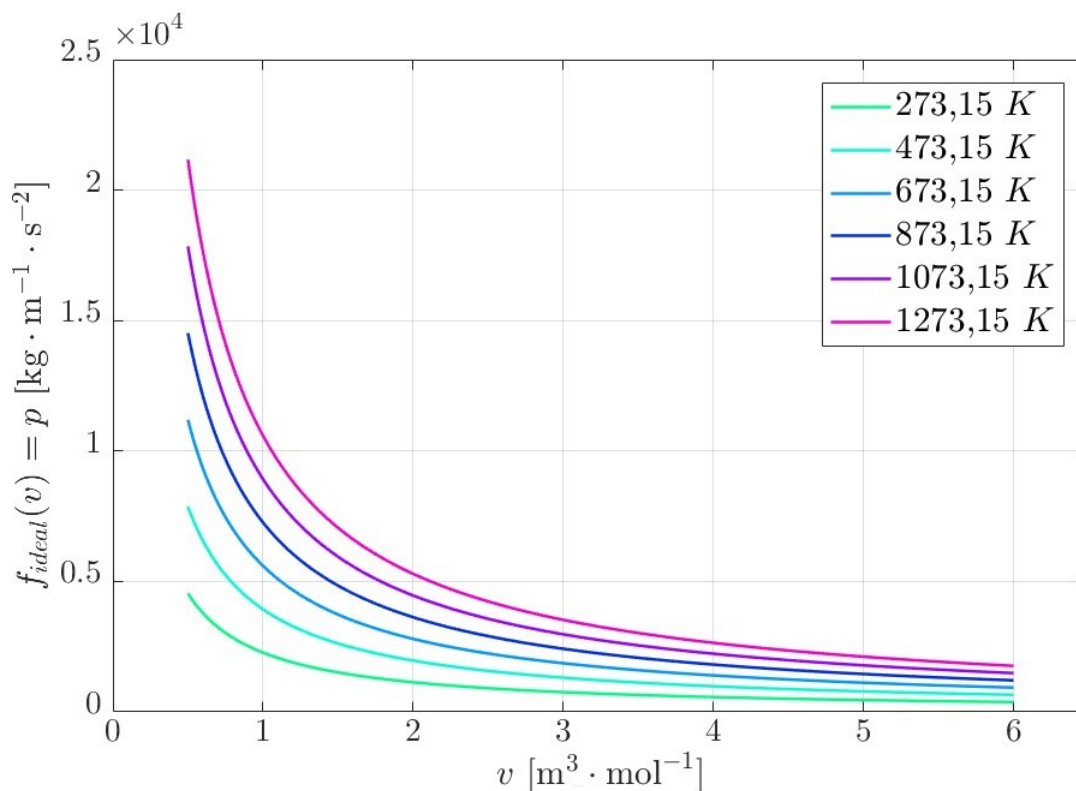
Již víme, jak můžeme kreslit v MATLABu grafy funkcí a pojďme se vrátit zpět k problematice stavové rovnice a Van der Waalsovy rovnice.

Pojďme si dále pomocí kódu 3.2 nakreslit $p - v$ diagram. Zdrojový kód nyní není třeba vysvětlovat, protože se skládá z již vysvětlených příkazů. Dodáme jen, že příkazy `hold on` a `hold off` slouží pro vykreslování jednotlivých grafů do jednoho obrázku, které jsou do své konečné podoby upraveny přímo v MATLABu. Izotermy budeme zobrazovat pro hodnoty $T = 273,15 \text{ K}$, $T = 473,15 \text{ K}$, $T = 673,15 \text{ K}$, $T = 873,15 \text{ K}$, $T = 1073,15 \text{ K}$ a $T = 1273,15 \text{ K}$. Pro tento příklad jsme zvolili pro v interval $\langle 0,5; 6 \rangle$.

Zdrojový kód 3.2: Kód pro vytvoření $p - v$ diagramu na obrázku 3.4

```
1 v=[0.5:0.01:6];
2 for T=273.15:200:1273.15
3     p=(8.314*T)./v;
4     plot(v,p);
5     hold on;
6 end
7 hold off;
```

Jednotlivé izotermy na $p - v$ diagramu na obrázku 3.4 jsou z matematického hlediska grafy funkce nepřímé úměrnosti, neboť ve funkci $f_{\text{ideal}} = \frac{RT}{v}$ pro každý její graf známe hodnoty R i T . Pro hodnoty v , které se blíží k nule, dostáváme vysoké hodnoty tlaku a proto byla pro názornost vybrána dolní hranice intervalu pro molární objem 0,5.



Obrázek 3.4: $p - v$ diagram pro ideální plyn

Pojďme se věnovat reálnému plynu. S využitím vztahu (3.8) zavedeme dvě nové funkce $f_{\text{real}}(v)$ a $f_{\text{real2}}(v, T)$. První uvedená funkce je reálná funkce jedné reálné proměnné a druhá uvedená funkce je reálná funkce dvou reálných proměnných. Tyto funkce zavedeme takto:

$$f_{\text{real}}(v) = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v^2},$$

$$f_{\text{real2}}(v, T) = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v^2}.$$

Přeznačenou kartézskou soustavu souřadnic spolu s grafem funkce $f_{\text{real}}(v)$ budeme nazývat $p - v$ diagram. Graf funkce $f_{\text{real}}(v)$ budeme nazývat izoterma. Graf funkce $f_{\text{real2}}(v, T)$ je v trojrozměrném prostoru určitým způsobem zakřivená plocha. Tuto zmíněnou plochu budeme nazývat termodynamickou plochou. Může se zdát, že funkce $f_{\text{real}}(v)$ by měla být také reálná funkce dvou reálných proměnných, avšak při kreslení izotermy je vždy zadána konkrétní hodnota termodynamické teploty T .

U komentáře tabulky 3.2 jsme zmínili, že hodnoty a a b můžeme určit dvěma způsoby. Buďto využijeme tabulkových hodnot nebo si hodnoty vypočítáme sami z kritických hodnot stavových veličin. Stavové veličiny nabývají kritických hodnot v kri-

tickém bodě. V tomto bodě splývají vlastnosti kapaliny a plynu. Kritická teplota je nejvyšší možná teplota, při které ještě může existovat látka v kapalném stavu. Na termodynamické ploše na $p - v - T$ diagramu má takový bod souřadnice p_c, T_c a v_c . Jedná se tedy o kritický molární objem, kritickou termodynamickou teplotu a kritický tlak. Pouze v kritickém bodě platí

$$f_{\text{real2}}(v_c, T_c) = p_c \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial f_{\text{real2}}(v, T)}{\partial v}(v_c, T_c) = 0 \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial^2 f_{\text{real2}}(v, T)}{\partial v^2}(v_c, T_c) = 0 \quad (3.13)$$

Rovnice (3.11)-(3.13) nazveme podmínkami pro kritický bod. Právě z těchto rovnic vypočítáme hodnoty a a b . Vidíme, že máme soustavu tří rovnic pro dvě neznámé. Z podmínek pro kritický bod plyne

$$f_{\text{real2}}(v_c, T_c) = \frac{RT_c}{v_c - b} - \frac{a}{v_c^2} = p_c, \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial f_{\text{real2}}(v, T)}{\partial v}(v_c, T_c) = -\frac{RT_c}{(v_c - b)^2} + \frac{2a}{v_c^3} = 0, \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial^2 f_{\text{real2}}(v, T)}{\partial v^2}(v_c, T_c) = \frac{2RT_c}{(v_c - b)^3} - \frac{6a}{v_c^4} = 0. \quad (3.16)$$

Ze vztahů (3.14) - (3.16) platí

$$\frac{RT_c}{v_c - b} - \frac{a}{v_c^2} = p_c, \quad (3.17)$$

$$\frac{RT_c}{(v_c - b)^2} = \frac{2a}{v_c^3}, \quad (3.18)$$

$$\frac{RT_c}{(v_c - b)^3} = \frac{3a}{v_c^4}. \quad (3.19)$$

Hodnotu b zjistíme tak, že rovnici (3.18) vydělíme rovnicí (3.19).

$$\begin{aligned} \frac{\frac{RT_c}{(v_c - b)^2}}{\frac{RT_c}{(v_c - b)^3}} &= \frac{\frac{2a}{v_c^3}}{\frac{3a}{v_c^4}} \\ \frac{RT_c}{(v_c - b)^2} \cdot \frac{(v_c - b)^3}{RT_c} &= \frac{v_c^3}{2a} \cdot \frac{3a}{v_c^4} \\ v - b &= \frac{2}{3}v \\ b &= \frac{v_c}{3} \end{aligned} \quad (3.20)$$

A dále budeme v rovnici (3.18) substituovat vztah (3.20).

$$b = \frac{v_c}{3} \qquad \frac{RT_c}{(v_c - b)^2} = \frac{2a}{v_c^3}$$


$$\begin{aligned} \frac{RT_c}{\left(v_c - \frac{v_c}{3}\right)^2} &= \frac{2a}{v_c^3} \\ \frac{RT}{\frac{4v_c^2}{9}} &= \frac{2a}{v_c^3} \\ a &= \frac{9RT_c v_c}{8} \end{aligned} \quad (3.21)$$

Vztahy (3.20) a (3.21) nám vyjadřují vypočtené hodnoty Van de Waalsových koeficientů a a b na základě kritických hodnot stavových veličin. Stojí za povšimnutí, že v tomto případě nám stačí znát pouze kritickou hodnotu termodynamické teploty T_c a kritickou hodnotu molárního objemu v_c , znalost hodnoty kritického tlaku p_c není pro tuto metodu výpočtu zapotřebí. Pokud bychom šli opačnou cestou, tedy z hodnot a a b bychom chtěli vypočítat kritické hodnoty stavových veličin p_c, T_c a v_c , pak ze vztahu (3.20) plyne

$$v_c = 3b . \quad (3.22)$$

Do rovnice (3.21) dosadíme za v_c výraz $3b$ a vyjádříme T_c . Tak získáme pro T_c vztah

$$T_c = \frac{8a}{27bR} . \quad (3.23)$$

Tlak vyjádříme pomocí Van der Waalsových koeficientů tak, že dosadíme T_c a v_c vyjádřené pomocí a a b do rovnice (3.8). Tím získáme rovnost

$$p_c = \frac{a}{27b^2} . \quad (3.24)$$

Toto byl první způsob, jak lze nalézt vztahy mezi kritickými hodnotami stavových veličin a hodnotami Van der Waalsových koeficientů a a b . Ukážeme si, že nalézt vztahy mezi kritickými hodnotami stavových veličin a hodnotami Van der Waalsových koeficientů jde i bez použití derivace. [21]

Z algebraického hlediska platí, že všechny řešení kubické rovnice (3.9) v kritickém bodě splývají, tedy, že zmíněná rovnice má jeden trojnásobný kořen a můžeme ji přepsat do tvaru

$$(v - v_c)^3 = 0 \quad (3.25)$$

a poté levou stranu rovnice upravit

$$v^3 - 3v^2v_c + 3vv_c^2 - v_c^3 = 0 . \quad (3.26)$$

Rovnici (3.9) převedeme na normovaný tvar, budeme dělit koeficientem p

$$v^3 + \left(-b - \frac{RT}{p}\right)v^2 + \frac{a}{p}v - \frac{ab}{p} = 0 \quad (3.27)$$

a porovnáme v rovnicích (3.26) a (3.27) koeficienty u kvadratického, lineárního a absolutního členu. Tak získáme vztahy

$$\begin{aligned} -b - \frac{RT}{p} &= -3v_c , \\ \frac{a}{p} &= 3v_c^2 , \\ -\frac{ab}{p} &= -v_c^3 , \end{aligned}$$

kde v kritickém bodě platí $p = p_c$, $T = T_c$ a $v = v_c$. Po dosazení kritických hodnot a úpravách získáme vztahy

$$b + \frac{RT_c}{p_c} = 3v_c , \quad (3.28)$$

$$\frac{a}{p_c} = 3v_c^2 , \quad (3.29)$$

$$\frac{ab}{p_c} = v_c^3 . \quad (3.30)$$

Když vydělíme rovnicí (3.29) rovnicí (3.30), dostaneme pro b vztah

$$b = \frac{v_c}{3} , \quad (3.31)$$

ze kterého úpravou vyjádříme

$$v_c = 3b . \quad (3.32)$$

Dosazením (3.32) do (3.29) získáme pro kritickou hodnotu tlaku rovnost

$$p_c = \frac{a}{27b^2} . \quad (3.33)$$

Kritickou hodnotu tlaku a molárního objemu, vyjádřenou pomocí Van der Waalsových koeficientů a a b , dosadíme do rovnice (3.28) a vyjádříme T_c , tedy

$$T_c = \frac{8a}{27bR} . \quad (3.34)$$

Nakonec využijeme vztahu (3.31), který dosadíme do rovnosti pro kritickou termodynamickou teplotu (3.34) a vyjádříme koeficient

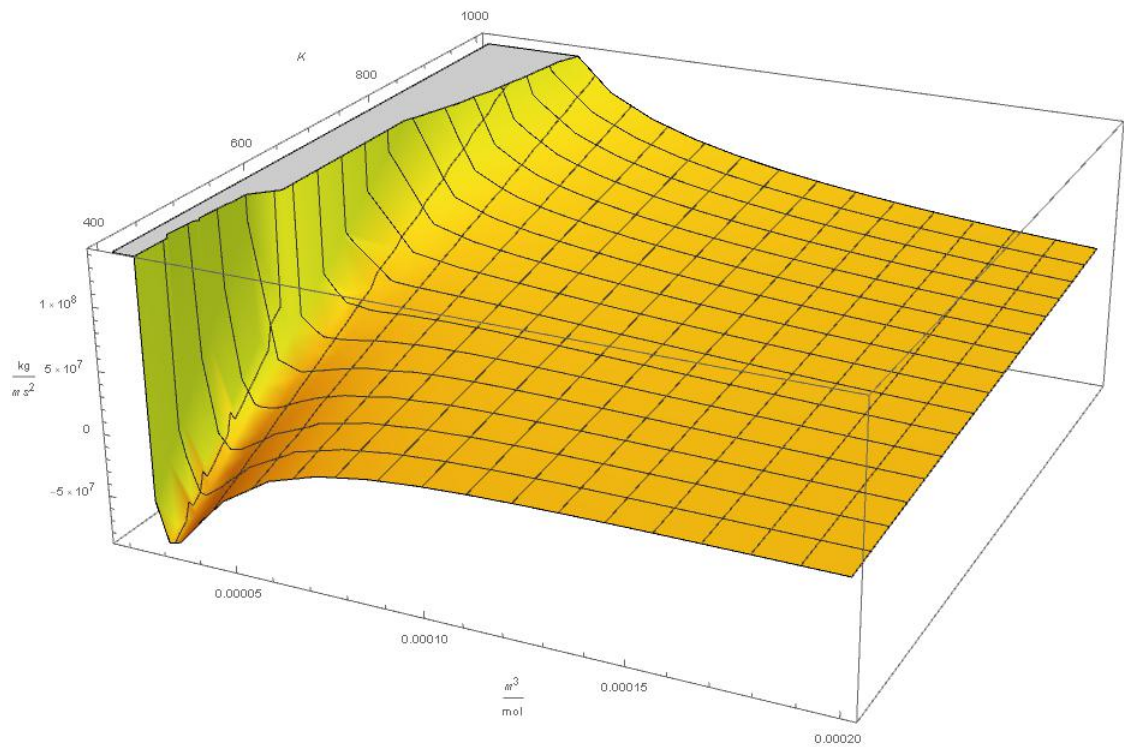
$$a = \frac{9RT_c v_c}{8} . \quad (3.35)$$

Porovnáním rovnic 3.21 a 3.35 pro koeficient a , 3.20 a 3.31 pro koeficient b , 3.24 a 3.33 pro kritický tlak p_c , 3.23 a 3.34 pro kritickou termodynamickou teplotu T_c a 3.22 a 3.32 pro kritický molární objem v_c vidíme, že jsme oběma metodami dospěli ke stejným vztahům mezi kritickými hodnotami stavových veličin a Van der Waalsovými koeficienty. [22]

Pojďme nyní pracovat s konkrétní látkou, vybereme si vodu. Nejprve z tabulkových hodnot pro kritické hodnoty stavových veličin určíme hodnoty Van der Waalsových koeficientů a a b . Pro vodu platí $T_c = 647,15 \text{ K}$ a $v_c = 0,00005459175 \text{ m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$. Z těchto hodnot stanovíme $a = 0,33044$ a $b = 0,00001819725$. Nyní máme vše, abychom mohli nakreslit izotermy pro vodu.

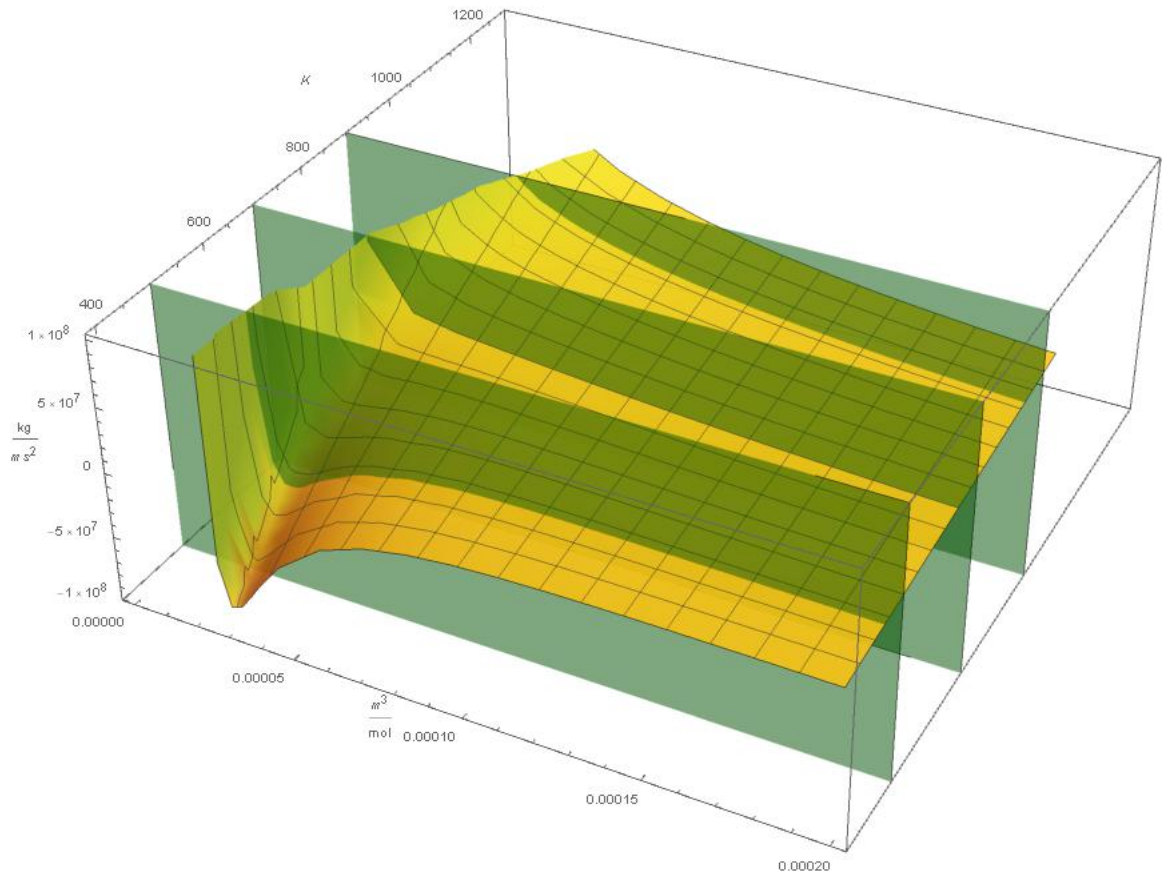
Poznámka 3.2 Při výpočtu hodnot a a b se tyto hodnoty mohou lišit od experimentálně stanovených dat uvedených v tabulce 3.2.

Grafem funkce $f_{\text{real2}}(v, T)$ je termodynamická plocha, která je zobrazena oranžovo-zeleně na obrázku 3.5.



Obrázek 3.5: Termodynamická plocha vytvořená pomocí funkce $f_{\text{real2}}(v, T)$

Když budeme dělat řezy rovinami pro jednotlivé hodnoty T s termodynamickou plochou, množiny bodů, společné pro oba objekty, nazveme izotermy. Tato situace je zobrazena na obrázku 3.6.



Obrázek 3.6: Termodynamická plocha s jednotlivými řezy

Izotermy budou určeny funkcí $f_{\text{real}}(v)$, kde v předpisu funkce budeme měnit pro jednotlivé izotermy hodnotu termodynamické teploty T . Pro nakreslení izoterm budeme používat software Wolfram Mathematica. Pro vytvoření $p - v$ diagramu pro vodu využijeme kódu 3.3. Ještě, než si kód vysvětlíme, dodejme, že Wolfram Mathematica obvykle nečísluje řádky. V následujícím kódu je číslování řádků přidáno jen kvůli lepší orientaci při jeho vysvětlení.

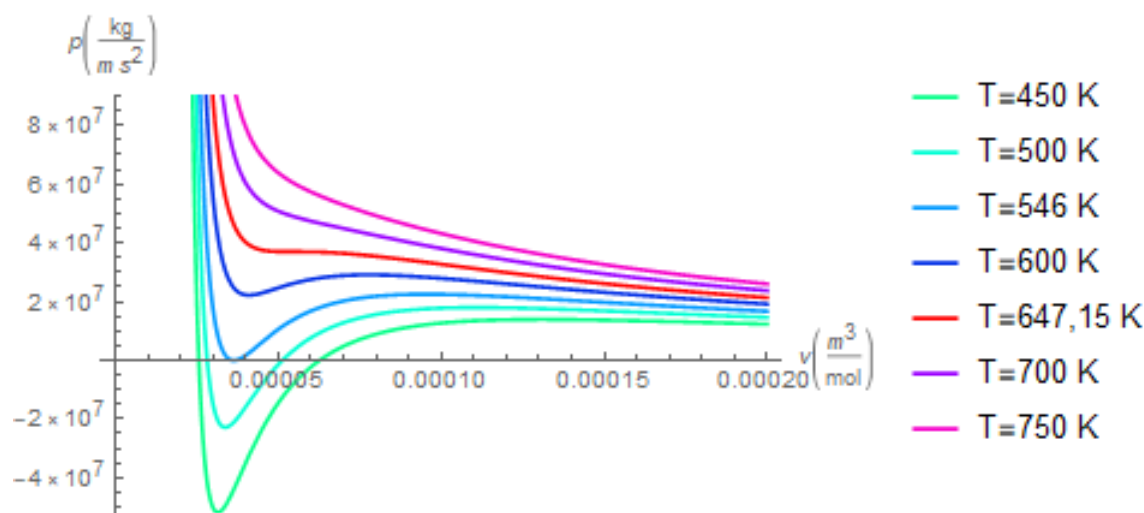
Zdrojový kód 3.3: Kód pro vytvoření $p - v$ diagramu na obrázku 3.7

```

1 a = 0.33044
2 b = 0.00001819725
3
4 frealA[v_] := (8.314*450)/(v - b) - (a/(v^2))
5 frealB[v_] := (8.314*500)/(v - b) - (a/(v^2))
6 frealC[v_] := (8.314*546)/(v - b) - (a/(v^2))
7 frealD[v_] := (8.314*600)/(v - b) - (a/(v^2))
8 frealE[v_] := (8.314*647.15)/(v - b) - (a/(v^2))
9 frealF[v_] := (8.314*700)/(v - b) - (a/(v^2))
10 frealG[v_] := (8.314*750)/(v - b) - (a/(v^2))
11
12 dolnimezv := 0.000019
13 hornimezv := 0.0002
14
15 Plot[
16 {frealA[v], frealB[v], frealC[v], frealD[v],
17 frealE[v], frealF[v], frealG[v]},
18 {v, dolnimezv, hornimezv},
19 PlotStyle ->
20 {RGBColor[0, 1, 0.53], RGBColor[0, 1, 0.83],
21 RGBColor[0, 0.6, 1], RGBColor[1, 0, 0],
22 RGBColor[0, 0.18, 0.9], RGBColor[0.61, 0, 1],
23 RGBColor[0.96, 0, 0.79]},
24 PlotLegends ->
25 {"T=450 K", "T=500 K", "T=546 K", "T=600 K", "T=647,15 K",
26 "T=700 K", "T=750 K"},
27 PlotRange -> {-53000000, 90000000}, AxesOrigin -> {0, 0}]

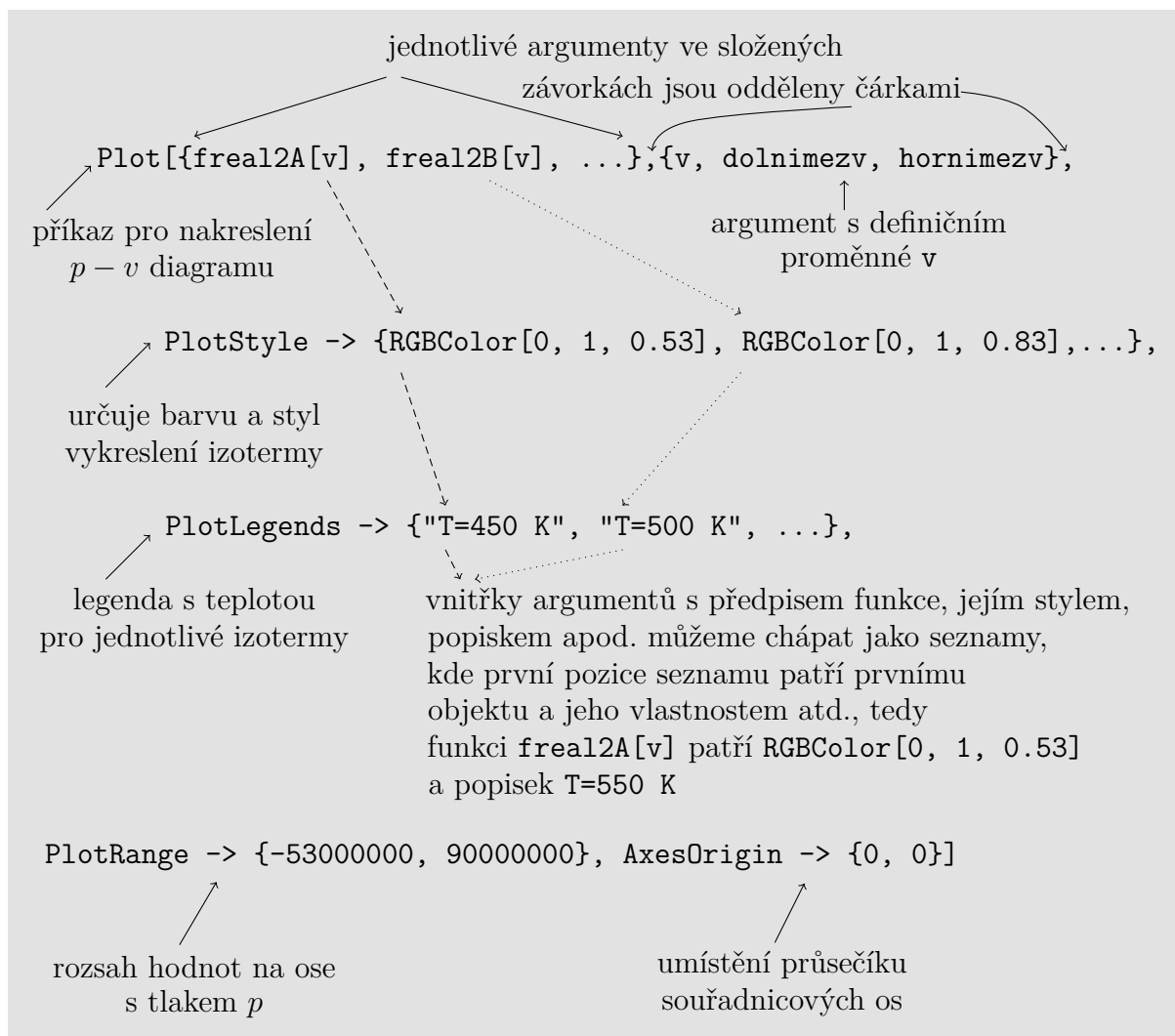
```

Spuštěním kódu získáme $p - v$ diagram pro vodu na obrázku 3.7. Wolfram Mathematica používá programovací jazyk Wolfram, který se, jak si vysvětlíme, liší ve své syntaxi od klasických programovacích jazyků.



Obrázek 3.7: $p - v$ diagram pro vodu

Nyní si vysvětlíme zdrojový kód 3.3. Na prvních dvou řádcích definujeme hodnotu Van der Waalsových koeficientů a a b . Řádky 4 až 10 obsahují předpisy funkcí, pomocí kterých budeme vykreslovat jednotlivé izotermy. V těchto definicích se mění jen hodnota termodynamické teploty T . Izotermy budeme vykreslovat pro hodnoty 450 K, 550 K, 546 K, 600 K, 647,15 K, 700 K a 750 K. Připomeňme, že hodnota 647,15 K je kritická termodynamická teplota vody T_c . Na řádcích 12 a 13 určujeme dolní a horní hranici definičního oboru v . V tomto případě platí $v \in \langle 0,000019, 0,0002 \rangle$. Příkaz `Plot` začínající na řádku 15 má několik argumentů a slouží pro vykreslení $p - v$ diagramu s izotermami, které jsou určeny funkcemi na řádcích 4 až 10. Příkaz `Plot` s jeho argumenty je vysvětlen na obrázku 3.8



Obrázek 3.8: Vysvětlení struktury jazyka Wolfram pro tvorbu $p - v$ diagramu

V kapitole 4, která bude věnována přípravě učebního celku na téma této práce, se budeme rovnici (3.9) a možností, jak s ní více pracovat, věnovat blíže.

4 Použití ve výuce

V této kapitole se budeme věnovat přípravě učebního celku na téma Matematické aspekty Van der Waalsovy rovnice s využitím přístupu STEM a jeho výhod. Koncept STEM je novodobý vzdělávací koncept, který vznikl v 90. letech 20. století ve Spojených státech amerických. STEM je zkratka pro obory **S**cience (přírodní vědy), **T**echnology (technika), **E**ngineering (technologie), **M**athematics (matematika). Koncept klade důraz na jejich propojení a blízkost při řešení problému. [23]

Tato příprava učebního celku je vhodná pro většinu středních škol v České republice, kde ji lze využít při různých příležitostech, jako jsou zejména projektové dny, ale samozřejmě ji lze využít i v běžné výuce. Tato část práce obsahuje náměty na výuku na maximálně 9 až 10 vyučovacích hodin, ale každý, kdo tuto práci využije si může vybrat jen určité části, kterým se bude se svými žáky věnovat. Minimální čas věnovaný pochopení této kapitoly v závislosti na zvolených příkladech a teorii by neměl být kratší než 4 až 5 vyučovacích hodin.

4.1 První část přípravy učebního celku

Tato část je plánována na 3 vyučovací hodiny a věnuje se především seznámení žáků s řešením kubických rovnic za pomoci analytických metod.

Pojďme si pro začátek vyřešit rovnici (4.1) v komplexním oboru. Jako první budeme řešit rovnici

$$2x^3 + 54 = 0 . \quad (4.1)$$

Rovnici (4.1) převedeme za použití ekvivalentní úpravy na normovaný tvar tak, že obě strany rovnice vydělíme číslem 2. Tak získáme rovnici

$$x^3 + 27 = 0 , \quad (4.2)$$

kterou přepíšeme do tvaru

$$x^3 - (-27) = 0 . \quad (4.3)$$

Rovnice (4.3) je kubická binomická rovnice, která odpovídá rovnici (2.9) a platí $n = 3$, $z = -27$. V tuto chvíli potřebujeme pro zjištění kořenů převést číslo $z = -27$ do goniometrického tvaru. Využijeme vztahů

$$|z| = \sqrt{(\operatorname{Re}[z])^2 + (\operatorname{Im}[z])^2} , \quad \cos \varphi = \frac{\operatorname{Re}[z]}{|z|} , \quad \sin \varphi = \frac{\operatorname{Im}[z]}{|z|} ,$$

kde $\operatorname{Re}[z]$ je reálná část a $\operatorname{Im}[z]$ je imaginární část čísla z . Platí $\operatorname{Re}[z] = -27$ a $\operatorname{Im}[z] = 0$. Po dosazení získáme goniometrický tvar komplexního čísla $z = 27(\cos \pi + i \sin \pi)$. Tedy $|z| = 27$ a $\varphi = \pi$. Nyní stačí dosadit zjištěné hodnoty do vztahů (2.10) - (2.12). Tak získáme pro zadanou rovnici kořeny

$$\begin{aligned}x_0 &= 3 \left(\cos \frac{\pi}{3} + i \sin \frac{\pi}{3} \right) = \frac{3}{2} + \frac{3\sqrt{3}}{2}i , \\x_1 &= 3 (\cos \pi + i \sin \pi) = -3 , \\x_2 &= 3 \left(\cos \frac{5\pi}{3} + i \sin \frac{5\pi}{3} \right) = \frac{3}{2} - \frac{3\sqrt{3}}{2}i .\end{aligned}$$

Nyní si ověříme správnost našeho řešení. K tomu využijeme službu WolframAlpha. Využití počítače je v tomto případě vhodné zejména z toho důvodu, že se žáci naučí zadávat matematické výrazy do počítače v požadovaném formátu. Přesto, že se může zdát, že zadání matematického výrazu je jednoduché, žákům často dělá obtíže a tato neznalost je může omezovat. Vstupní informace, které předáváme službě WolframAlpha nejsou v takzvaném WYSIWYG formátu, tedy ve formátu, kdy uživatel přímo upravuje matematický výraz v jeho finální podobě. Zkratka WYSIWYG pochází z počátečních písmen anglické věty: *What you see is what you get*. Volný překlad do českého jazyka je: *Co vidíme, to dostaneme*.

Kontrola správnosti našich výsledků bude v tomto případě spočívat v převedení levé strany rovnice na součinnový tvar

$$\left(x - \frac{3}{2} - \frac{3\sqrt{3}}{2}i \right) \left(x - \frac{3}{2} + \frac{3\sqrt{3}}{2}i \right) (x + 3) , \quad (4.4)$$

a zadání výrazu (4.4) do služby WolframAlpha. Pokud jsou naše vypočítané kořeny správné, získáme zpět výraz $x^3 + 27$. Abychom mohli výraz (4.4) použít, musíme ho přepsat do následujícího tvaru

$$(x - (3/2) - (3*\sqrt{3}/2)*i) (x - (3/2) + (3*\sqrt{3}/2)*i) (x + 3)$$

a po jeho zadání spustit výpočet. WolframAlpha nabídne několik různých výpočtů s tímto výrazem, včetně jeho různých forem, které najdeme v části *Alternate forms*. V této části vidíme mezi ostatními různými formami tohoto výrazu i výraz $x^3 + 27$, který jsme chtěli získat. Naše výsledky jsou tedy správné.

Již základní znalost práce s libovolným matematickým softwarem může umožnit žákům vymýšlet si a řešit různé matematické i jiné problémy a efektivně zjišťovat

a ověřovat výsledky jejich práce.

Dále si dejme za úkol zjistit řešení kubické reciproké rovnice prvního druhu v závislosti na parametrech α a β a vytvořit program, který vypočítá kořeny této rovnice. Připomeňme, že kubická reciproká rovnice prvního druhu je rovnice ve tvaru

$$\alpha x^3 + \beta x^2 + \beta x + \alpha = 0, \text{ kde } \alpha \in \mathbb{R} \text{ a } \beta \in \mathbb{R},$$

o které víme, že jedním z jejích kořenů je číslo -1 . Vydělíme tedy výraz na levé straně rovnice (2.13) kořenovým činitelem $x + 1$:

$$(\alpha x^3 + \beta x^2 + \beta x + \alpha) : (x + 1) = \alpha x^2 + (\beta - \alpha)x + \alpha.$$

Výsledkem toho dělení je výraz $\alpha x^2 + (\beta - \alpha)x + \alpha$, jehož kořeny jsou zbylé dva hledané kořeny původní rovnice (2.13). Dále tedy budeme řešit rovnici

$$\alpha x^2 + (\beta - \alpha)x + \alpha = 0 \tag{4.5}$$

v závislosti na parametrech α a β . Jedná se o rovnici kvadratickou, jejíž diskriminant je

$$D = (-(\beta - \alpha))^2 - 4\alpha^2 = \beta^2 - 2\alpha\beta - 3\alpha^2. \tag{4.6}$$

Provedme nyní diskuzi řešení rovnice (4.5). Pro kladnou hodnotu diskriminantu má rovnice dvě reálná řešení ve tvaru

$$x_{1,2} = \frac{\alpha - \beta \pm \sqrt{\beta^2 - 2\alpha\beta - 3\alpha^2}}{2\alpha}. \tag{4.7}$$

Pro $D = 0$ má rovnice jeden dvojnásobný kořen

$$x_{1,2} = \frac{\alpha - \beta}{2\alpha}. \tag{4.8}$$

Je-li diskriminant kvadratické rovnice záporný, pak jsou zbývající kořeny komplexně sdružená čísla ve tvaru

$$x_{1,2} = \frac{\alpha - \beta \pm i\sqrt{|\beta^2 - 2\alpha\beta - 3\alpha^2|}}{2\alpha}. \tag{4.9}$$

Program 4.1 pro vypočítání kořenů kubické reciproké rovnice v komplexním oboru je napsán v softwaru MATLAB.

Zdrojový kód 4.1: Výpočet kořenů kubické reciproké rovnice v MATLABu

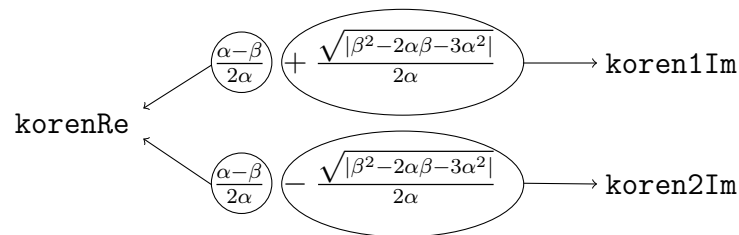
```

1 format long;
2 a=10;
3 b=3;
4 D=b^2+2*a*b-3*a^2;
5 if D>=0
6     odmocninaD=sqrt(b^2-2*a*b-3*a^2);
7     koren1=(a-b+odmocninaD)/(2*a);
8     koren2=(a-b-odmocninaD)/(2*a);
9     zobraz = ['Rovnice ma koreny ', num2str(koren1), ', ',
               ', num2str(koren2), ' a -1.'];
10 else
11     odmocninaAbsD=sqrt(abs(b^2-2*a*b-3*a^2));
12     korenRe=(a-b)/(2*a);
13     koren1Im=odmocninaAbsD/(2*a);
14     koren2Im=-odmocninaAbsD/(2*a);
15     znamenko1='+';
16     znamenko2='+';
17     if koren1Im <0
18         znamenko1='';
19     end
20     if koren2Im <0
21         znamenko2='';
22     end
23 zobraz = ['Rovnice ma koreny ', num2str(korenRe), ', ', num2str
            (znamenko1), ', ', num2str(koren1Im), 'i, ', num2str(korenRe),
            ', ', num2str(znamenko2), ', ', num2str(koren2Im), 'i a -1.'];
24 end
25 disp(zobraz)

```

Protože většina struktur použitých v tomto kódu byla vysvětlena výše v této práci, zaměříme se při vysvětlení kódu 4.1 hlavně na postup při řešení zadaného problému. V kódu platí $\alpha = a$ a $\beta = b$. Po zadání hodnot na druhém a třetím řádku program vypočte hodnotu diskriminantu (4.6) a na základě této hodnoty program ověřuje hodnotu D na řádku 5 a větví výpočet a vypsání všech kořenů pro $D \geq 0$ na řádky 6 - 9 a pro $D < 0$ na řádky 11 - 23. Při psaní vzorců vidíme, že žáci musí umět psát matematické vzorce na jeden řádek bez možnosti využití WYSIWYG stejně,

jako tomu bylo u předchozího příkladu, při ověřování správnosti výsledků ve službě WolframAlpha. Na řádce 6 se vypočte hodnota odmocniny z diskriminantu a na řádcích 7 a 8 se zjišťuje dosazením známých hodnot hodnota kořenů. Tyto dva řádky odpovídají kořenům (4.7), případně (4.8), protože psaní speciální části pro $D = 0$ bylo zbytečné prodlužování délky psaného kódu. Proměnná `zobraz` obsahuje řetězec, pomocí kterého vypíšeme všechny nalezené kořeny a také pro reciproku rovnici lichého stupně, prvního druhu, známý kořen -1 . Pro správné zobrazení čísel v řetězci musíme převést všechna čísla funkcí `num2str()` na text. Pro zápornou hodnotu diskriminantu D je situace zajímavější, neboť kromě výpočtu chceme kořeny i vypsat ve správném formátu a v tuto chvíli může nastat problém se správností zobrazení znamének. Pojdme se ale nejdříve zaměřit na výpočet komplexních kořenů. Kořeny (4.9) rozdělíme na jejich reálnou a imaginární část a vypustíme práci s imaginární jednotkou i , kterou přidáme až na konec při vypisování nalezených kořenů. Rozdělení kořenů na reálnou a imaginární část je na obrázku (4.1), včetně přiřazení do jednotlivých proměnných.



Obrázek 4.1: Přiřazení hodnot do proměnných

Na řádce 11 vypočteme odmocninu z absolutní hodnoty diskriminantu, kterou dále využijeme při určování hodnot imaginárních částí kořenů na následujících dvou řádcích kódu. Při vypisání komplexních kořenů v řetězci `zobraz` je důležité správně vypsat znaménka. Proto jsme vytvořili proměnné `znamenko1` pro imaginární část prvního kořenu a `znamenko2` pro imaginární část druhého kořenu, které vypisujeme před jejich komplexní část. Pokud by komplexní část byla záporná, na řádcích 17 až 22 nastavíme příslušnou proměnnou jako prázdnou a imaginární část se tak vypíše s minusovým znaménkem. V řetězci `zobraz` složíme všechny zjištěné hodnoty, jako je uvedeno a tak nám vznikne kód pro řešení kubické reciproké rovnice, prvního druhu, v množině komplexních čísel. Výsledek vypíšeme příkazem `disp(zobraz)` na posledním řádce.

Samozřejmě, že by i tento kód šel zkrátit vypočtením pouze hodnot `koren1Re` a `koren1Im` s následným správným poskládáním se znaménky do řetězce `zobraz`, ale v kódu byl záměr ukázat i práci se znaménky při vypisování komplexních kořenů,

kteřá vede ke správné a jednoduché interpretaci výsledků při řešení složitějších úloh. Zmíněné zkrácení kódu může být námětem na další programování, včetně vytvoření obdobného kódu pro kubickou reciprokou rovnici druhého druhu.

Poznámka 4.1 Při převzetí kódu z této práce a jeho následném spuštění je nutné mít řetězce na řádcích 9 a 23 na jednom řádku, jinak program skončí s chybou.

Nyní přejdeme na další úlohu. S využitím Hornerova schématu budeme chtít vydělit polynom $x^3 - 6x^2 + 11x - 6$ polynomem $x - 5$.

Polynom $x - 5$ je lineární a Hornerovo schéma tedy můžeme použít. Výpočet je na obrázku 4.2.

		①	②	③	④
		1	-6	11	-6
	⑤	⑥	⑦	⑧	⑨
5		1	-1	6	24

Obrázek 4.2: Hornerovo schéma pro polynom $x^3 - 6x^2 + 11x - 6$ v bodě 5

V buňkách ⑥, ⑦ a ⑧ jsou koeficienty kvadratického polynomu a v buňce ⑨ je zbytek po uvedeném dělení, výsledek tedy je

$$(x^3 - 6x^2 + 11x - 6) : (x - 5) = x^2 - x + 6 + \frac{24}{x - 5}. \quad (4.10)$$

Vidíme, že ve srovnání s klasickým dělením polynomu polynomem, je využití Hornerova schématu při dělení polynomu lineárním polynomem efektivnější. Dále můžeme v hodině využít příklady z textu výše, kde Hornerovo schéma vysvětlujeme.

Jako poslední úkol před prací s numerickými metodami vyřešíme rovnici $5x^3 - 40x^2 + 105x - 100 = 0$ v komplexním oboru pomocí Cardanova vzorce uvedeného v kapitole 2.1.

V kapitole 2.1 se nám podařilo vyjádřit analyticky jeden kořen obecné kubické rovnice (2.1) ve tvaru (2.30). Využijeme tedy vhodného softwaru pro zadání vzorce a necháme si vypočítat kořen kubické rovnice. Poprvé v této práci budeme pracovat se softwarem Maple, který podporuje WYSIWYG zadání dat. Maple je software

pracující se symboly a slouží pro výpočty a vyhodnocování výrazů. Celý výpočet je uveden na obrázku 4.3. Nejprve určíme hodnoty proměných $\alpha = 5$, $\beta = -40$, $\gamma = 105$ a $\delta = -100$. V definici proměnné γ jsme v Maplu použili speciální slovo `local`, protože v Maplu je γ pevně definovaná konstanta pro fyzikální výpočty. Proměnná x na obrázku obsahuje Cardanův vzorec. Po tomto zadání už stačí spustit výpočet.

$$\begin{aligned}
 \alpha &:= 5 && 5 \\
 \beta &:= -40 && -40 \\
 \text{local } \gamma &:= 105 && 105 \\
 \delta &:= -100 && -100 \\
 \\
 x &= \sqrt[3]{-\frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2}} + \sqrt[3]{\left(\frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2}\right)^2 + \left(\frac{\gamma}{\alpha} - \frac{\beta^2}{3\alpha^2}\right)^3} \\
 &+ \sqrt[3]{-\frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2}} - \sqrt[3]{\left(\frac{2\beta^3}{27\alpha^3} + \frac{\delta}{\alpha} - \frac{\beta\gamma}{3\alpha^2}\right)^2 + \left(\frac{\gamma}{\alpha} - \frac{\beta^2}{3\alpha^2}\right)^3} - \frac{\beta}{\alpha} \\
 &&& x = 4
 \end{aligned}$$

Obrázek 4.3: Zadání Cardanova vzorce do Maplu a zjištění hodnoty kořenu x

Výsledkem je číslo $x = 4$. Tak jsme zatím získali pouze jediný kořen. Využijeme tedy Hornerova schématu a budeme dělit polynom $5x^3 - 40x^2 + 105x - 100$ kořenovým činitelem $x - 4$.

		①	②	③	④
		5	-40	105	-100
	⑤	⑥	⑦	⑧	⑨
4		5	-20	25	0

Obrázek 4.4: Hornerovo schéma pro polynom $5x^3 - 40x^2 + 105x - 100$ v bodě 4

V buňce ⑨ na obrázku 4.4 vyšla hodnota 0. Tak jsme si ověřili, že číslo 4 je skutečně kořenem řešené rovnice a navíc jsme získali koeficienty kvadratického polynomu $5x^2 - 20x + 25$, jehož kořeny jsou zbývající kořeny původní kubické rovnice. Vyřešením rovnice $5x^2 - 20x + 25 = 0$ získáme kořeny $x_{1,2} = 2 \pm i$. Tak jsme vyřešili v komplexním oboru rovnici $5x^3 - 40x^2 + 105x - 100 = 0$, pro jejíž kořeny platí $x_{1,2} = 2 \pm i$ a $x_3 = 4$.

Zmíněnými metodami bychom mohli hledat i kořeny Van der Waalovy rovnice, protože platí $\alpha = p$, $\beta = -bp - RT$, $\gamma = a$ a $\delta = -ab$.

4.2 Druhá část přípravy učebního celku

Tato část je také plánována na 3 vyučovací hodiny a její náplní je vytvoření funkčního kódu pro numerické řešení nelineárních rovnic.

V této části by měli být žáci seznámeni se základy algoritmizace a s metodami řešení nelineárních rovnic uvedené v kapitole 2.2. Metoda půlení intervalu a Newtonova metoda pro hledání kořenů nelineárních rovnic, naprogramované výše v MATLABu (zdrojový kód 2.1, zdrojový kód 2.2 a zdrojový kód 2.3), slouží jako vhodné příklady pro osvojení základních principů algoritmizace a dobře poslouží pro 3. část přípravy učebního celku, kde budeme numerické metody využívat. V této části je také vhodné žáky naučit kreslit grafy funkcí pomocí zdrojových kódů uvedených v kapitole 3.2, které jim nabídnou srovnání programů MATLAB a Wolfram Mathematica v oblasti zobrazování grafů funkcí. Každý žák tak má možnost si vybrat, jaký software bude přednostně využívat.

Koncept STEM využívá právě výhod, které nám technika a technologie přinášejí a umožňuje efektivně řešit reálné problémy, ke kterým se nyní v následující části přípravy učebního celku dostáváme.

4.3 Třetí část přípravy učebního celku

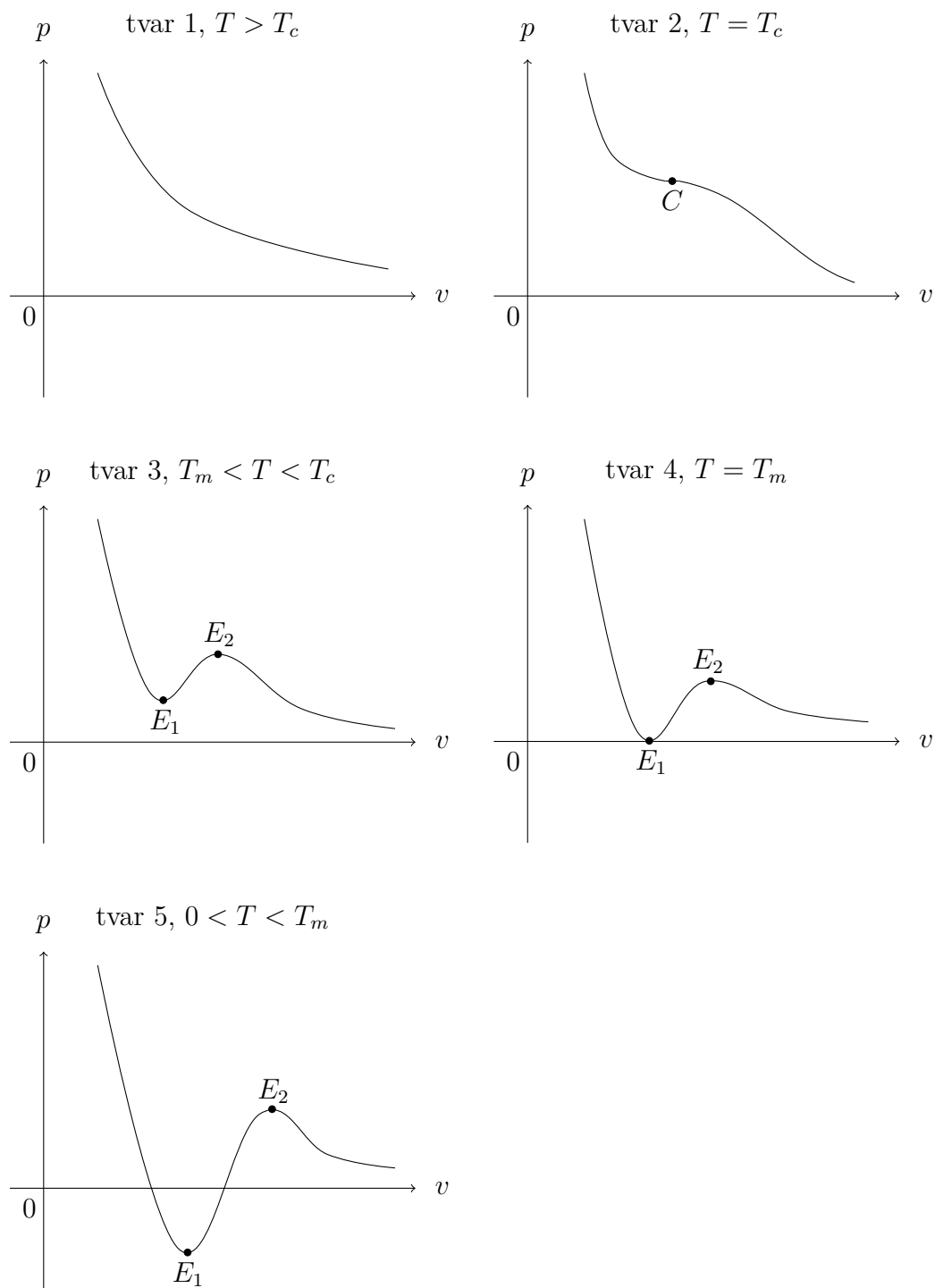
V této kapitole, která je plánována na maximálně 4 vyučovací hodiny se žáci seznámí s parametrickým a numerickým řešením Van der Waalovy rovnice, bude ukázána jedna ze zajímavých křivek a popsán $p-v$ diagram pro vodu. Na začátku je důležité seznámení s teorií a s odvozením Van der Waalovy rovnice v kapitole 3.

Prvním úkolem bude nalezení parametrického řešení rovnice (3.9) v závislosti na pa-

parametrech p a T tak, abychom získali kladnou hodnotu, respektive kladné hodnoty molárního objemu v . Záporné či komplexní kořeny pro molární objem v tedy nebudeme uvádět. Připomeňme, že rovnice (3.9) je rovnice ve tvaru

$$pv^3 + (-bp - RT)v^2 + av - ab = 0 .$$

Z teorie i z obrázku 3.7 víme, že izoterma může mít několik různých tvarů zobrazených na obrázku 4.5.



Obrázek 4.5: Možné tvary izoterm v $p - v$ diagramu v závislosti na teplotě T

Izoterma ve tvaru 1 je izoterma pro termodynamickou teplotu větší, než je kritická termodynamická teplota vody $T_c = 647,15$ K a je svým tvarem podobná izotermám pro ideální plyn. Tvar 2 je tvar izotermy pro kritickou termodynamickou teplotu T_c . Bod C je kritický bod. Pro termodynamickou teplotu $T_m < T < T_c$ má izoterma tvar 3. Pro termodynamickou teplotu $T = T_m$, kde T_m je termodynamická teplota

pro izotermu, která má lokální minimum na ose v (bod E_1), má izoterma tvar 4. Pro termodynamické teploty v rozmezí $0 < T < T_m$ má izoterma tvar 5. Pro body E_1 a E_2 platí u všech tvarů izoterm $E_1 [v_{1E}, f_{\text{real}}(v_{1E})]$ a $E_2 [v_{2E}, f_{\text{real}}(v_{2E})]$, kde $v_{1E} < v_{2E}$. Hodnota v_{1E} je lokální minimum a v_{2E} je lokální maximum. Tyto hodnoty nalezneme pomocí metod matematické analýzy pro zjišťování extrémů funkcí nebo je můžeme zjistit jako průsečík spinodály s izotermou. O spinodále a tomto postupu se zmíníme níže v textu.

Pojďme si nyní zjistit, jaký bude tlak p pro velmi vysoké hodnoty molárního objemu a termodynamickou teplotu T_m . Zkusme tedy vypočítat

$$\lim_{v \rightarrow \infty} \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v^2} .$$

Kromě proměnné v známe všechny hodnoty všech proměnných. Limitu můžeme vyřešit úvahou. V obou zlomcích dělíme velmi vysokým číslem, proto pro hodnoty v blížící se nekonečnu budou oba zlomky nabývat velmi malých hodnot. Výsledek uvedené limity je 0. Důsledkem toho víme, že se všechny izotermy budou pro velmi vysoké hodnoty v blížit k nulovému tlaku bez závislosti na termodynamické teplotě.

Položme si dále otázku, jaká je minimální hodnota termodynamické teploty, abychom vždy dostali kladnou nebo nulovou hodnotu tlaku p pro izotermu ve tvaru 4. Dosažením $p = 0$ do rovnice (3.9) získáme rovnici ve tvaru

$$RTv^2 - av + ab = 0 . \quad (4.11)$$

V bodě E_1 , pro izotermu ve tvaru 4, platí pro kořeny rovnice (4.11) $v_1 = v_2$. Jedná se o rovnici kvadratickou, proto její diskriminant musí být roven nule. Toho využijeme pro zjištění hodnoty T_m .

$$\begin{aligned} D &= (-a)^2 - 4abRT_m = 0 \\ 4abRT_m &= a^2 \\ T_m &= \frac{a^2}{4abR} \\ T_m &= 546 \text{ K} \end{aligned}$$

Nyní známe teplotu T_m a můžeme provést diskuzi počtu kořenů tak, aby platilo, že kořeny pro v jsou kladná reálná čísla. V diskuzi řešení uvedeném v tabulce 4.1 volíme jen taková p a T , aby řešením pro v byla kladná reálná čísla s různou násobností.

Tabulka 4.1: Diskuze řešení rovnice 3.9

termodynamická teplota	tlak	kořeny rovnice (3.9)
$T > T_c$	$p > 0$	jeden kořen s násobností 1
$T = T_c$	$p > 0$	jeden kořen s násobností 1
$T_m < T < T_c$	$0 < p < f_{\text{real}}(v_{1E})$	jeden kořen s násobností 1
	$p = f_{\text{real}}(v_{1E})$	tři kořeny s násobností 1 a 2
	$f_{\text{real}}(v_{1E}) < p < f_{\text{real}}(v_{2E})$	tři různé kořeny
	$p = f_{\text{real}}(v_{2E})$	tři kořeny s násobností 1 a 2
	$p > f_{\text{real}}(v_{2E})$	jeden kořen s násobností 1
$T = T_m$	$p = 0$	dva různé kořeny
	$0 < p < f_{\text{real}}(v_{2E})$	tři různé kořeny
	$p = f_{\text{real}}(v_{2E})$	tři kořeny s násobností 1 a 2
	$p > f_{\text{real}}(v_{2E})$	jeden kořen s násobností 1
$0 < T < T_m$	$p = f_{\text{real}}(v_{1E})$	jeden kořen s násobností 2
	$f_{\text{real}}(v_{1E}) < p < 0$	dva různé kořeny
	$p = 0$	dva různé kořeny
	$0 < p < f_{\text{real}}(v_{2E})$	tři různé kořeny
	$p = f_{\text{real}}(v_{2E})$	tři kořeny s násobností 1 a 2
	$p > f_{\text{real}}(v_{2E})$	jeden kořen s násobností 1

Nyní přejdeme na další příklad, jehož znění je následující:

Zjistěte molární objem v a látkovou hustotu ρ vody při teplotě $T = 450$ K a tlaku $p = 7$ MPa.

K výpočtu využijeme rovnici (3.9) do které dosadíme všechny známé hodnoty a čísla spolu vynásobíme, tak dostaneme rovnici

$$7000000v^3 - 3868,68075v^2 + 0.33044v - 0,0000060130993 = 0 . \quad (4.12)$$

Dále zavedeme pomocnou funkci $g(v) = 7000000v^3 - 3868,68075v^2 + 0.33044v - 0,0000060130993$. Vidíme, že máme v rovnici (4.12) koeficienty s několika desetinnými místy. V tomto případě bude vhodnější použít numerické metody místo metod

analytických. Použití numerických metod je ve fyzice časté a lepší, než použití metod analytických. V mnoha případech se také může stát, že budeme potřebovat řešit rovnici, kterou analyticky vyřešit nelze a pak je využití numerických metod jediným možným řešením. Pro vyřešení rovnice (4.12) použijeme metodu bisekce. Podle věty 2.7 platí, že kořen bude ležet mezi takovými hodnotami, jejichž funkční hodnoty mají opačná znaménka. Pojďme si tedy sestavit tabulku 4.2, ve které si vypíšeme znaménka několika funkčních hodnot.

Tabulka 4.2: Hodnoty funkce $g(v)$ pro vybraná v

hodnota v	znaménko $g(v)$
0,00002	–
0,00003	+
0,00004	+
0,00005	+
0,00006	+
0,00007	+
0,00008	–
0,00009	–
⋮	⋮
0,00043	–
0,00044	–
0,00045	–
0,00046	+

Kořeny budeme hledat v intervalech $\langle 0,00002; 0,00003 \rangle$, $\langle 0,00007; 0,00008 \rangle$ a $\langle 0,00045; 0,00046 \rangle$. Zdrojový kód 2.1 upravíme na kód 4.2.

Zdrojový kód 4.2: Upravená metoda bisekce pro hledání prvního kořenu

```

1 format long
2 p=7000000; %tlak
3 R=8.314; %molární plynová konstanta
4 T=450; %termodynamická teplota
5 k_a=0.33044; %vdw koeficient a
6 k_b=0.00001819725; %vdw koeficient b
7 f = @(x) p*x^3+(-k_b*p-R*T)*x^2+k_a*x-k_a*k_b;
8 a=0.00002; % vychozi leva hranice intervalu <a,b>
9 b=0.00003; % vychozi prava hranice intervalu <a,b>
10 presnost =0.00000001; % presnost epsilon
11 while abs ((b-a))>presnost
12     x=(a+b)/2;
13     if f(x)==0;
14         disp( num2str (x));
15     return
16     elseif f(a)*f(x)<0;
17         b=x;
18     elseif (f(x)*f(b))<0;
19         a=x;
20     end
21 end
22 disp (num2str(x));

```

Po jeho spuštění získáme první kořen $2,5413 \cdot 10^{-5}$. Změnou hranic intervalů získáme další kořeny $7,4717 \cdot 10^{-5}$ a $4,5255 \cdot 10^{-4}$.

Při zadaném tlaku a termodynamické teplotě jsme pro molární objem získali tři hodnoty

$$v_1 = 0,000025413 \text{ m}^3 \cdot \text{mol}^{-1} ,$$

$$v_2 = 0,000074717 \text{ m}^3 \cdot \text{mol}^{-1} ,$$

$$v_3 = 0,00045255 \text{ m}^3 \cdot \text{mol}^{-1} ,$$

kterým odpovídá látková hustota

$$\rho_1 = 39350 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3} ,$$

$$\rho_2 = 13384 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3} ,$$

$$\rho_3 = 2210 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3} .$$

Tento příklad dobře demonstuje přístup STEM, protože se nám podařilo poměrně rychle se základními znalostmi programování najít všechny tři kořeny kubické rovnice (4.12).

Na konci této kapitoly je vhodné popsat i zajímavé křivky, které se nacházejí na termodynamické ploše. Tyto křivky budeme potřebovat i pro závěrečné popsání $p - v$ diagramu.

Ještě než uvedeme první zajímavou křivku, je nutné se žáky nakreslit $p - v$ diagram pomocí kódu 3.3 a tento kód jim také vysvětlit.

První křivka, kterou popíšeme, je spinodála. Spinodála představuje hranici termodynamické stability, do které může existovat metastabilní stav látky, tedy takový stav, než kterému odpovídají vnější podmínky. Zároveň na spinodále leží lokální minima a maxima izoterm, které protíná. Tyto body jsme výše označili jako body E_1 a E_2 . Pro spinodálu platí vztah

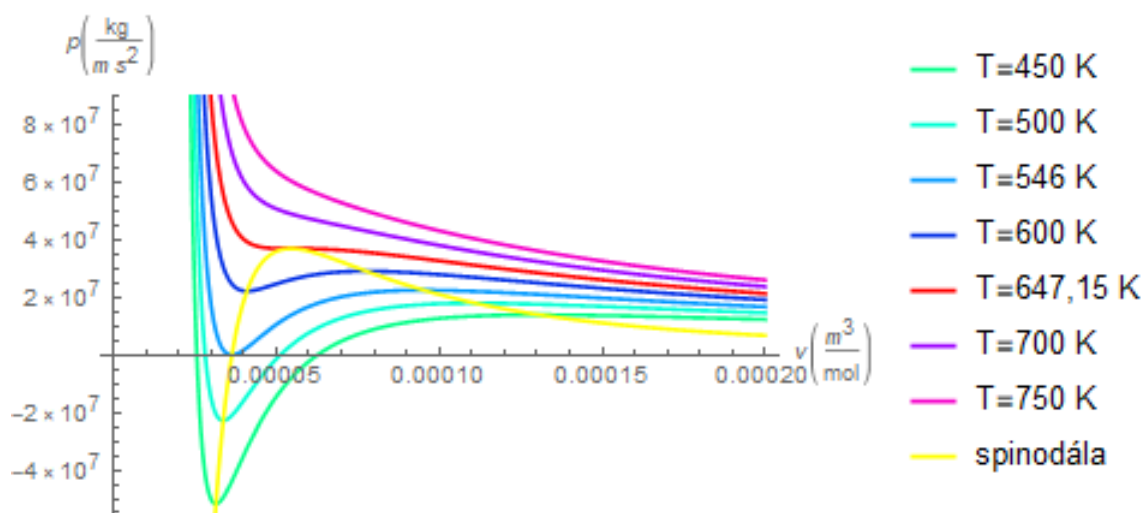
$$p = \frac{a}{v^2} \left(1 - \frac{2b}{v} \right) , \quad (4.13)$$

ve kterém všechny proměnné byly již popsány výše. [24, 22]

Dále zavedeme funkci

$$s(v) = \frac{a}{v^2} \left(1 - \frac{2b}{v} \right)$$

a můžeme jít spinodálu nakreslit do $p - v$ diagramu.



Obrázek 4.6: $p - v$ diagram se spinodálou

Na obrázku 4.6 je patrné, že spinodála skutečně prochází lokálními extrémami izoterm a dále kritickým bodem. Obrázek je nakreslen pomocí softwaru Wolfram Mathematica. Zdrojový kód pro vytvoření tohoto diagramu nebudeme uvádět, protože ve zdrojovém kódu 3.3 stačí jen doplnit definici další funkce a definovat její barvu a popisek.

Spinodála nám také umožní vypočítat souřadnice bodů E_1 a E_2 a to tak, že dáme do rovnosti pravé strany rovnic (3.8) a (4.13) a po úpravě získáme výraz tvaru

$$RTv^3 - 2av^2 + 4abv - 2ab^2 = 0 . \quad (4.14)$$

Rovnice (4.14) je kubická rovnice pro v . My však potřebujeme pouze dva kořeny této rovnice pro zjištění lokálního minima a maxima na izotermě. Dodejme, že tato rovnice jde řešit metodami uvedenými výše. Pro $0 < T < T_c$ zjistíme body E_1 a E_2 tak, že zjištěné kořeny dosadíme do rovnice (3.8) nebo (4.13) a podle zjištěné hodnoty určíme, který bod je lokálním minimem a maximem. Důležité je vědět, že pokud si kořeny rovnice srovnáme podle velikosti od nejmenšího, pak pokud nastane situace, že nejmenší kořen je lokální maximum, tak jsme našli ve smyslu této úlohy neplatný kořen rovnice (4.14) a lokální minimum na izotermě je ve druhém nejmenším kořenu a lokální maximum je v největším kořenu rovnice (4.14).

Jako druhou zajímavou křivku zmíníme takzvanou mezní křivku. Mezní křivka je hranice mezi fázemi, kdy pro danou hodnotu tlaku a termodynamické teploty může existovat látka ve dvou odlišných fázích, například v kapalně a plynné o molárních objemech v_1 a v_2 . Pro odvození mezní křivky použijeme takzvané Maxwellovo pra-

vidlo, vyplývající z podmínky rovnosti chemických potenciálů na mezní křivce. V termodynamické rovnováze je nezbytnou podmínkou pro stabilitu fakt, že tlak nestoupá s objemem. Tento základní požadavek na konzistenci je u Van der Waalovy rovnice porušen a Maxwellovo pravidlo slouží k napravení tohoto nedostatku. Více o této problematice můžeme nalézt v [25] nebo [26].

Pro mezní křivku dostaneme vztah

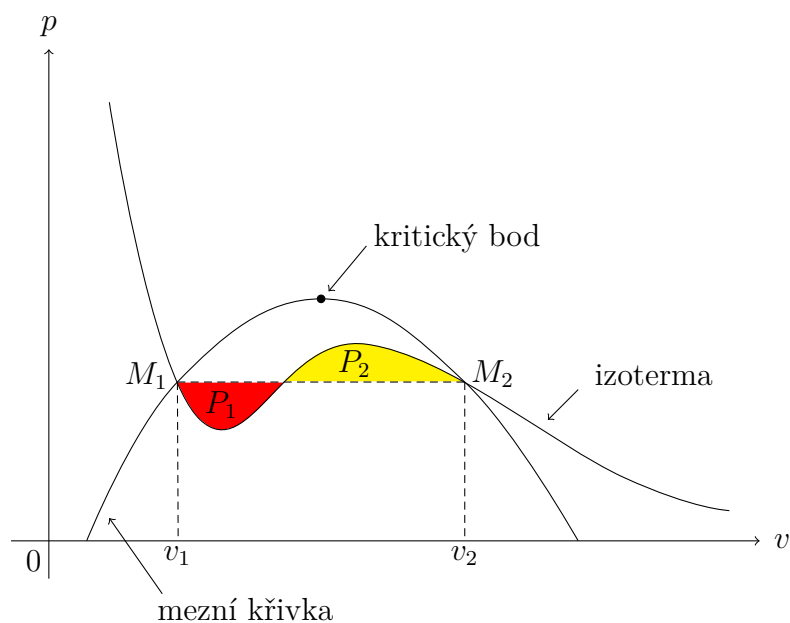
$$RT \ln \left(\frac{v_2 - b}{v_1 - b} \right) + \frac{2a(v_1 - v_2)}{v_1 v_2} = \frac{RTb(v_1 - v_2)}{(v_1 - b)(v_2 - b)} \quad (4.15)$$

a na mezi sytosti musí platit rovnost

$$\frac{RT}{v_1 - b} - \frac{a}{v_1^2} = \frac{RT}{v_2 - b} - \frac{a}{v_2^2} . \quad (4.16)$$

Z rovností (4.15) a (4.16) poté vypočítáme pro termodynamickou teplotu T molární objem v_1 a v_2 . [24, 27]

Zobrazme si mezní křivku a demonstřujeme význam Maxwellova pravidla pro izoterma v $p - v$ diagramu na obrázku (4.7).

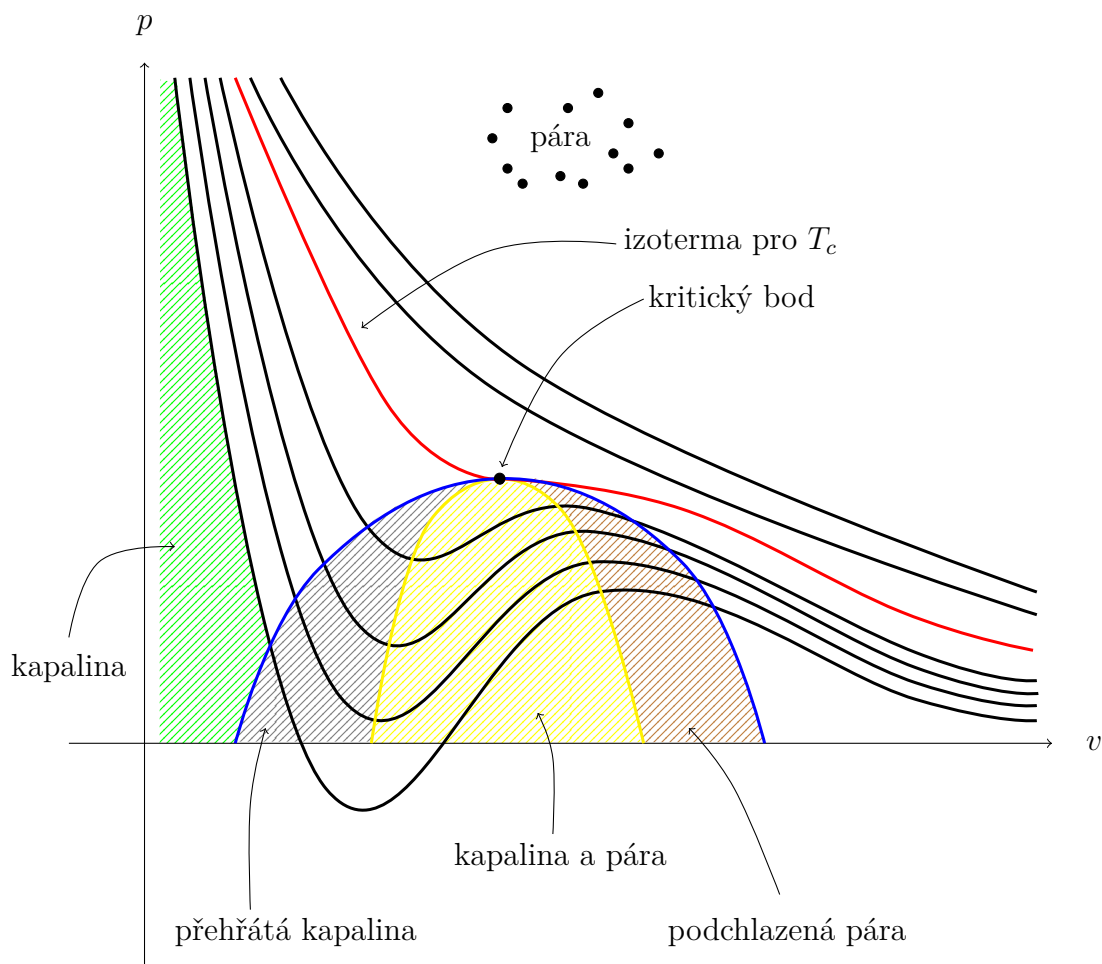


Obrázek 4.7: Demontrace Maxwellova pravidla

Úsečka spojující body $M_1 [v_1, f_{\text{real}}(v_1)]$ a $M_2 [v_2, f_{\text{real}}(v_2)]$, kde v_1 a v_2 jsou hodnoty vypočítané pomocí rovnic (4.15) a (4.16), je rovnoběžná se souřadnicovou osou v . Plocha P_1 vyznačená červeně a plocha P_2 vyznačená žlutě na obrázku 4.7 mají stejný

obsah.

Na závěr tohoto učebního celku je vhodné nakreslit $p - v$ diagram pro vodu se zajímavými křivkami a popsat jednotlivé fáze. [22]



Obrázek 4.8: Schématický $p - v$ diagram s popsáním fází

Na obrázku 4.8 je žlutě vykreslená křivka spinodála. Modře vykreslená křivka je mezní křivka. Tímto obrázkem končí 4.8 návrh učebního celku na téma Matematické aspekty Van der Waalsovy rovnice.

Závěr

Tato práce ukazuje, že řešení kubických rovnic nemusí být v dnešní době složité, jako se může zdát. Na středních školách se obvykle matematika, fyzika a informatika učí odděleně a není kladen důraz na jejich propojení a výhody tohoto propojení. Návrh učebního celku na téma Matematické aspekty Van der Waalsovy rovnice za použití konceptu STEM například ukazuje, že některé speciální kubické rovnice lze řešit efektivně a řešení lze se základní znalostí programování rychle algoritmizovat a také jsme ukázali, že pomocí vhodného použití numerické metody dokážeme pro obecnou kubickou rovnici najít všechna reálná řešení. Počítače nám nabízejí obrovskou výhodu v přesnosti kreslení grafů funkcí, která vede k lepšímu pochopení probíraného tématu, jako je například problematika $p - v$ diagramu a tvarů izoterm pro různou hodnotu termodynamické teploty T .

Součástí práce měla být také reflexe vytvořená na základě vyzkoušení návrhu učebního celku Matematické aspekty Van der Waalsovy rovnice v reálné výuce. To však nebylo možné z důvodu uzavření škol kvůli pandemii SARS-CoV-2. Vyzkoušení ve výuce tak proběhne jakmile to bude možné.

Námětem na další práci může být prohloubení problematiky Maxwellova pravidla a tvorby grafů nebo další metody řešení nelineárních rovnic, než které byly uvedeny v této práci.

Tuto práci může při přípravě učebního celku využít každý pedagog, který bude chtít propojit matematiku, fyziku, počítačové technologie a další přírodní vědy.

Literatura

- [1] KUBEN, Jaromír a Petra ŠARMANOVÁ. *Diferenciální počet funkcí jedné proměnné*. Ostrava: VŠB - Technická univerzita, 2006. ISBN 80-248-1192-8.
- [2] CIZLEROVÁ, Michaela, Marek ZAHRADNÍČEK, Alena ZAHRADNÍČKOVÁ, Magda KRÁLOVÁ, Milan NAVRÁTIL, Rita VÉMOLOVÁ a Běla VOBECKÁ. *Matematika pro střední školy - Funkce I*. Brno: Didaktis, c2014. ISBN 978-807-3582-142.
- [3] CIZLEROVÁ, Michaela, Marek ZAHRADNÍČEK, Alena ZAHRADNÍČKOVÁ, Magda KRÁLOVÁ, Milan NAVRÁTIL, Rita VÉMOLOVÁ a Běla VOBECKÁ. *Matematika pro střední školy - Výrazy, rovnice a nerovnice*. Brno: Didaktis, c2014. ISBN 978-807-3582-142.
- [4] FINE, Benjamin a Gerhard ROSENBERGER. *The Fundamental Theorem of Algebra*. ISBN 9781461273431.
- [5] OLŠÁK, Petr. *Úvod do algebry, zejména lineární*. Praha: FEL ČVUT v Praze, 2007. ISBN 9788001037751.
- [6] POLÁK, Josef. *Přehled středoškolské matematiky*. 10. vydání. Praha: Prometheus, 2015. ISBN 978-80-7196-458-2.
- [7] GRIGORIEVA, Ellina. *Methods of Solving Nonstandard Problems*. 2015. ISBN 9783319198866.
- [8] LIVIO, Mario. *Neřešitelná rovnice: matematika a jazyk symetrií*. Praha: Argo, 2008. Zip (Argo: Dokořán): Dokořán. ISBN 978-80-7363-150-5.
- [9] TIGNOL, J.P. *Galois' Theory of Algebraic Equations*. World Scientific, 2001. ISBN 9789810245412.
- [10] Komplexní číslo. In: *Wikipedia: the free encyclopedia*. [online] San Francisco (CA): Wikimedia Foundation [cit. 2020-05-08]. Dostupné z: https://cs.wikipedia.org/wiki/Komplexn%C3%AD_%C4%8D%C3%ADslo.
- [11] KVASZ, Ladislav. *Patterns of change: linguistic innovations in the development of classical mathematics*. Basel: Birkhäuser, c2008. Science networks. ISBN 9783764388393.
- [12] Numerická metoda. In: *Wikipedia: the free encyclopedia*. [online] San Francisco (CA): Wikimedia Foundation [cit. 2020-05-08]. Dostupné z: https://cs.wikipedia.org/wiki/Numerick%C3%A1_metoda.

- [13] VONDRÁK, V., POSPÍŠIL, L. *Numerické metody I*. 1. vyd. Ostrava: VŠB–Technická univerzita Ostrava, 2011. ISBN 80-248-2449-9.
- [14] GeoGebra, 2020. *Classic - Geogebra*. [online] [cit. 2020-05-01]. Dostupné z: <<https://www.geogebra.org/classic#spreadsheet>>.
- [15] Wolfram|Alpha, 2020. *Wolfram Alpha, 2020* [online] [cit. 2020-29-04]. Dostupné z: https://www.wolframalpha.com/input/?i=x%5E3%2B4*x%5E2+-2*x+-20%3D0.
- [16] KRAUS, Ivo. *Fyzika v kulturních dějinách Evropy*. Praha: České vysoké učení technické v Praze, 2009. ISBN 9788001043240.
- [17] SODOMKA, Lubomír a Magdalena SODOMKOVÁ. *Nobelovy ceny za fyziku 1901-1997*. Praha: Set Out, 1997. Historica (Set Out). ISBN 80-902-0585-2.
- [18] MIKULČÁK, Jiří. *Matematické, fyzikální a chemické tabulky pro střední školy*. 4. vyd. Praha: Prometheus, 2007. Pomocné knihy pro žáky (Prometheus). ISBN 978-80-7196-345-5.
- [19] NOVÁK, Josef. *Fyzikální chemie: bakalářský a magisterský kurz*. Praha: Vydavatelství VŠCHT, 2008. ISBN 978-80-7080-675-3.
- [20] WEAST, Robert, ASTLE, Melvin, ed. *Handbook of Chemistry and Physics A Ready-Reference Book of Chemical and Physical Data*. 63rd ed. FL: CRC Press, 1982. ISBN 9780849304637.
- [21] EBERHART, J. G. *The many faces of van der Waals's equation of state*. *Journal of Chemical Education*. American Chemical Society, 1989, (11), 906-909.
- [22] SVIRIN, Alex. *Van der Waals equation* [online]. 2019 [cit. 2020-05-07]. Dostupné z: <https://www.math24.net/van-der-waals-equation/>
- [23] Koncept STEM. *Národní ústav pro vzdělávání* [online]. 2019 [cit. 2020-05-06]. Dostupné z: <http://www.nuv.cz/p-kap/koncept-stem>
- [24] J. Kalová, R. Mareš, *Několik poznámek k Van der Waalsově rovnici*, *Littera Scripta*, 2011, roč. 4, č. 1.
- [25] DESERNO, Markus. *Van der Waals equation, Maxwell construction and Legendre transforms*. [online]. 4.3.2013 [cit. 2020-05-17]. Dostupné z: <https://www.cmu.edu/biolphys/deserno/pdf/van-der-Waals-and-Maxwell.pdf>

- [26] Maxwell construction. In: *Wikipedia: the free encyclopedia* [online]. San Francisco (CA): Wikimedia Foundation [cit. 2020-05-17]. Dostupné z: https://en.wikipedia.org/wiki/Maxwell_construction
- [27] MAREŠ, Radim. *Kapitoly z termomechaniky*. Plzeň: Západočeská univerzita, c2009. ISBN 9788070437063.

Obrázky byly vytvořeny pomocí programů GeoGebra 5.0, Maple 2015, MATLAB 2018b, Wolfram Mathematica a \LaTeX ového balíčku TiKZ. Není-li uvedeno jinak, mají všechny obrázky zdroj *vlastní*.