Matematický software

Obyčejné diferenciální rovnice

RNDr. Zbyšek Posel, Ph.D.

Katedra informatiky, PŘF UJEP

Analytické řešení obyčejných diferenciálních rovnic

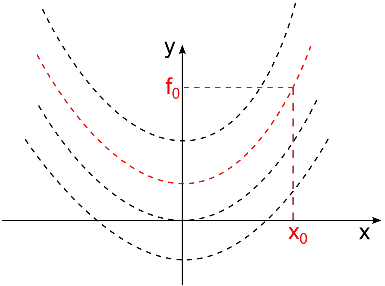
Obyčejná diferenciální rovnice udává vztah mezi funkcí a jejími derivacemi ve tvaru:

$$F(x, f(x), f'(x), f''(x), ...) = 0$$

Řešením je každá funkce $g(x)$ vyhovující výše uvedené rovnici. Volbou počátečních podmínek $[x_0, f_0 = f(x_0)]$ vybíráme z množiny funkcí $g(x)$ jednu konkrétní.

- Analytické metody řešení ODE prvního řádu.
  - Separace proměnných

$$\begin{aligned} y' &= x \\ \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} &= x \\ \mathrm{d}y &= x\mathrm{d}x \\ \int \mathrm{d}y &= \int x\mathrm{d}x \\ y &= \frac{x^2}{2} + C \end{aligned}$$



Více lze o řešení obyčejných diferenciálních rovnic nalézt v [1] nebo v [2].

Analytické řešení obyčejných diferenciálních rovnic

- Homogenní rovnice.

$$y' = f\left(\frac{y}{x}\right) \quad (x \neq 0)$$

- (Homogenní) Lineární rovnice.

$$\begin{aligned} y' + a(x)y &= 0 \\ y &= Ce^{-\int a(x)\mathrm{d}x} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} y' + a(x)y &= b(x) \\ y &= C(x)e^{-\int a(x)\mathrm{d}x} \\ y &= e^{-\int a(x)\mathrm{d}x} \cdot \int b(x)e^{\int a(x)\mathrm{d}x} \end{aligned}$$

- Bernoulliova rovnice

$$y' + a(x)y = b(x)y^n$$

Použití diferenciálních rovnic

Pomocí obyčejné diferenciální rovnice nebo soustavy rovnic popisujeme děje, které se mění v čase.

$$\frac{\mathrm{d}F(t)}{\mathrm{d}t} \neq 0$$

Použití diferenciálních rovnic

Pomocí obyčejné diferenciální rovnice nebo soustavy rovnic popisujeme děje, které se mění v čase.

$$\frac{\mathrm{d}F(t)}{\mathrm{d}t} \neq 0$$

Matematický software

- Využít matematických funkcí softwaru pro řešení problémů z oblasti matematiky a numerické matematiky.
- Funkce softwaru nezávislé na verzi.

Použití diferenciálních rovnic

Pomocí obyčejné diferenciální rovnice nebo soustavy rovnic popisujeme děje, které se mění v čase.

$$\frac{\mathrm{d}F(t)}{\mathrm{d}t} \neq 0$$

Matematický software

- Využít matematických funkcí softwaru pro řešení problémů z oblasti matematiky a numerické matematiky.
- Funkce softwaru nezávislé na verzi.

Počítačové zpracování signálu

- Využití transformací pro analýzu jednoduchých signálů, jejich korelací apod.

Použití diferenciálních rovnic

Pomocí obyčejné diferenciální rovnice nebo soustavy rovnic popisujeme děje, které se mění v čase.

$$\frac{\mathrm{d}F(t)}{\mathrm{d}t} \neq 0$$

Matematický software

- Využít matematických funkcí softwaru pro řešení problémů z oblasti matematiky a numerické matematiky.
- Funkce softwaru nezávislé na verzi.

Počítačové zpracování signálu

- Využití transformací pro analýzu jednoduchých signálů, jejich korelací apod.

Úvod do strojového učení

- Praktická analýza dat pomocí existujících frameworků. jako jsou tensorFlow, Scikit-learn, Keras apod.

Příklady

- Fyzikální soustavy (pohybová rovnice)

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} &= v\\ \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} &= -\omega x - \beta\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} - F_0\sin(\Omega t)\end{aligned}$$

- Biologické modely

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}S(t)}{\mathrm{d}t} &= -\beta S(t)I(t)\\ \frac{\mathrm{d}I(t)}{\mathrm{d}t} &= \beta S(t)I(t) - \gamma R(t)\\ \frac{\mathrm{d}R(t)}{\mathrm{d}t} &= \gamma R(t)\end{aligned}$$

- Finanční modely

$$\mathrm{d}r(t) = \alpha r(t)\mathrm{d}t + \beta r(t)\mathrm{d}W(t)$$

Numerické metody řešení

- Numerické metody pro řešení ODE

$$y^{i+1} = F(x^i, y^i, y^{i-1}, ..., y^{i-k})$$

  - Jednokrokové metody (Euler, Runge-Kutta, Verlet, Leap-Frog)

$$y^{i+1} = y^i + hf(x^i, y^i)$$

  - Vícekrokové metody (Prediktor-korektor, Prediktor-modifikátor-korektor, Adams-Bashforth)

$$y^{i+1} = y^i + \frac{3}{2}hf(x^i, y^i) - \frac{1}{2}hf(x^{i-1}, y^{i-1})$$

Více lze o numerických metodách nalézt např. v [3] nebo v [4].

Eulerova metoda

$$y' = x; \quad y(x_0) = 2, x_0 = 0$$

- Analytické řešení rovnice je

$$y(t) = \frac{x^2}{2} + C, \quad y(0) = \frac{0}{2} + C \to C = 2$$

- Místo derivace budeme využívat diferenci

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \Rightarrow \frac{\Delta}{\Delta t}$$
$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = x \Rightarrow \frac{\Delta y}{\Delta x} = x$$

- Dle vztahu $\Delta y = y(x + \Delta x) - y(x)$ přepíšeme rovnici do tvaru jednokrokové metody a upravíme

$$\begin{aligned} \Delta y &= x\Delta x \\ y(x + \Delta x) - y(x) &= x\Delta x \\ y(x + \Delta x) &= y(x) + x\Delta x \end{aligned}$$

Eulerova metoda

$$y' = x; \quad y(x_0) = 2, x_0 = 0$$

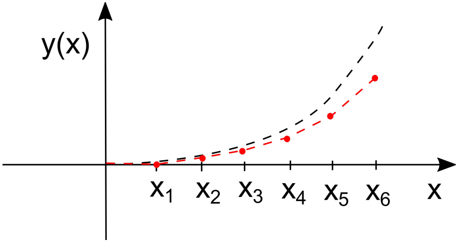
- Obecné schéma jednokrokové iterační metody

$$y^{i+1} = y^i + hf(x^i, y^i)$$

- Úprava naší rovnice do iterační podoby

$$\begin{aligned} y(x + \Delta x) =& y(x) + x\Delta x \\ y^{i+1} =& y^i + hx^i; \quad y^0 = 2 \end{aligned}$$

Přesnost odhadu numerické metody



- Odhad - - nesouhlasí s přesným řešením - -.
- Chyba metody
  - Krok h je příliš velký.
  - Jednokroková metoda odhaduje $y^{i+1} = F(y^i)$ pouze.
- Zaokrouhlovací chyba $h \to 0$.

Řešení rovnic

Vyřešte rovnici

$$y' = x; \quad y(x_0) = 2, x_0 = 0$$

pomocí

- symbolické matematiky,
- vybrané numerické metody (jednokrokové),
- vybrané vestavěné funkce softwaru (např. `integrate`).

Porovnejte jednotlivá řešení z hlediska implementace, rychlosti a přesnosti řešení.

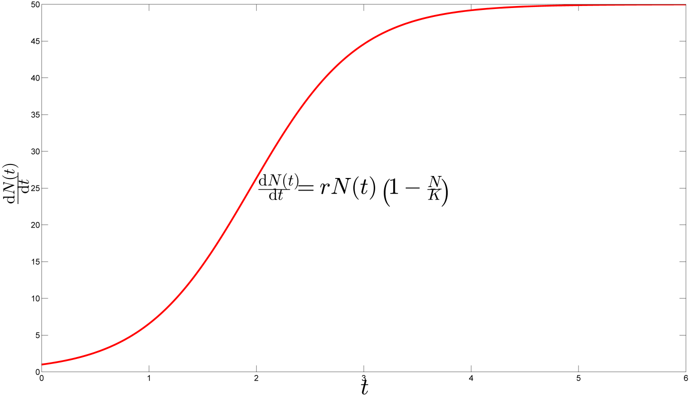
Řešení Verhulstova populačního modelu

Vyřešte následující diferenciální rovnici pomocí symbolické a numerické matematiky.

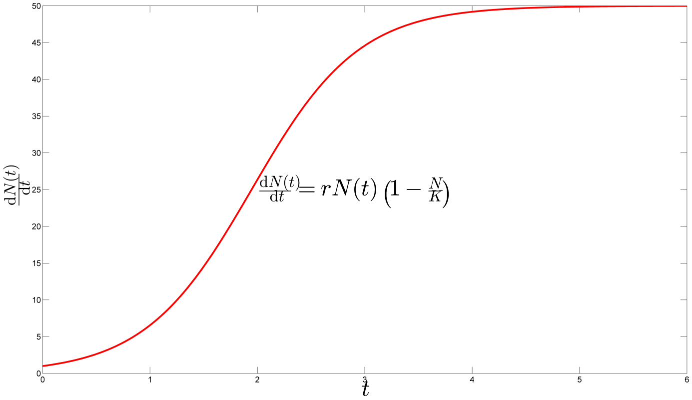
$$\frac{\mathrm{d}N(t)}{\mathrm{d}t} = rN(t)\left(1 - \frac{N(t)}{K}\right)$$

kde $r = 2$ a $K = 50$ jsou konstanty. Uvažujte počáteční podmínku $N(0) = 1$

Řešení Verhulstova populačního modelu

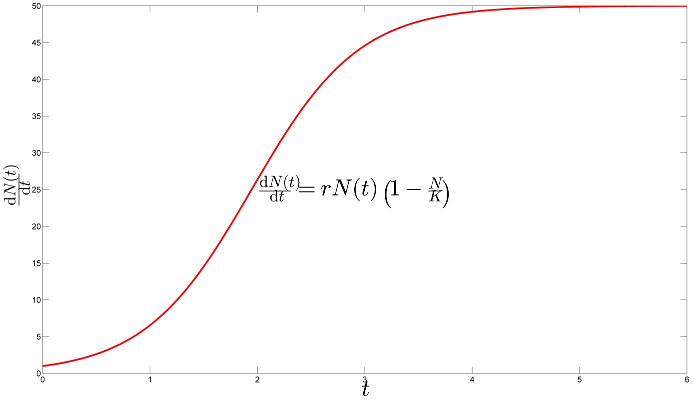


Řešení Verhulstova populačního modelu



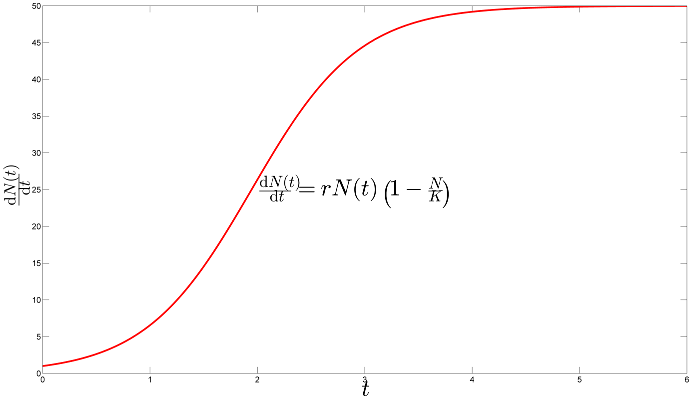
- Verhulstův model růstu populace (1838)

Řešení Verhulstova populačního modelu



- Verhulstův model růstu populace (1838)
- *r* - Specifická míra růstu populace.

Řešení Verhulstova populačního modelu



- Verhulstův model růstu populace (1838)
- r - Specifická míra růstu populace.
- K - Kapacita prostředí. Horní hranice populace.

Řešení soustavy rovnic - nucené kmitání

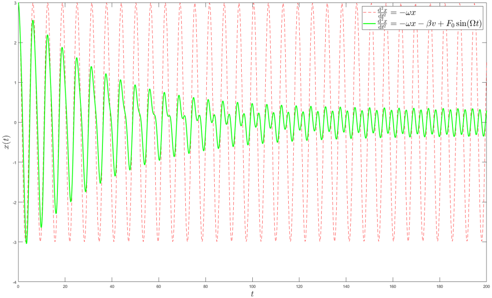
Vyřešte následující soustavu diferenciální rovnici pomocí symbolické a numerické matematiky.

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} &= v \\
\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} &= -\omega x - \beta \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} - F_0 \sin(\Omega t)
\end{aligned}
$$

kde $\omega = 1$, $\beta = 0.05$, $F_0 = 2.0$ a $\Omega = 0.63$.
Uvažujte počáteční podmínky jsou $x = 3.0$, $v = 0.0$.

Řešení soustavy rovnic - nucené kmitání

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} &= v \\
\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} &= -\omega x - \beta \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} - F_0 \sin(\Omega t)
\end{aligned}
$$



Postupně zkuste měnit parametry $\omega = 1$, β, F_0 a Ω a porovnejte jejich vliv na stabilitu řešení.

Vizualizace řešení - vektorové pole

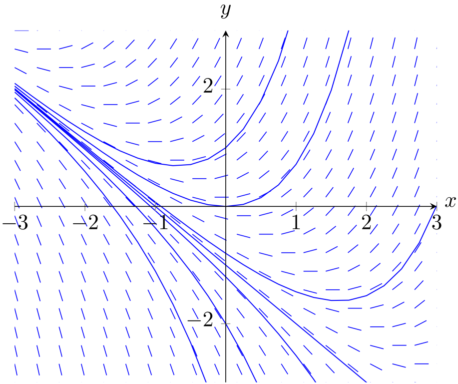
Zobrazte jednotlivá řešení následujících rovnic pomocí vektorového pole.

$$
\begin{aligned}
y' =& x + y \\
y' =& -\frac{x}{y} \\
y' =& \frac{y^2}{x}
\end{aligned}
$$

- Zvolte řešení (x, y) v rozsahu $(-5, 5)$.
- Pro řešení rovnic zvolte numerickou nebo symbolickou matematiku.
- Vyznačte řešení, které vyhovuje Vámi vybraným počátečním podmínkám.

Zobrazte jednotlivá řešení následujících rovnic pomocí vektorového pole.

$$y' = x + y$$



Stiff rovnice a jejich soustavy

- 1952 - Klasické numerické metody selhávají při popisu určitých chemických reakcí. Rychle reagující komponenta dosáhla rovnováhy daleko dříve než zbytek systému, který se mění velice pomalu.
- 1963 - Důvodem selhání řešení je špatná stabilita klasických metod pro tyto typy úloh.
- Neexistuje žádná ucelená definice stiff systému. Obecně jde o systém, kde se řešení mění velice pomalu, ale v okolí, kde nás řešení zajímá dochází k velice rychlému ustavení rovnováhy.
- Detekce „tuhosti" systému pomocí vlastních čísel Jacobiho matice

Stiff rovnice a jejich soustavy

Definice tuhosti soustavy

Soustava obyčejných diferenciálních rovnic je tuhá, jestliže všechny vlastní čísla λ_j matice J mají zápornou reálnou část a koeficient tuhosti S je velký. Matice J je Jakobián soustavy ODR. Po seřazení vlastních čísel, tak aby platilo

$$|R_e(\lambda_1)| \leq |R_e(\lambda_2)| \leq ... \leq |R_e(\lambda_n)|$$

dostaneme $\lambda_{min} = \lambda_1$ a $\lambda_{max} = \lambda_n$.Koeficient tuhosti je poté dán vztahem

$$S = \frac{|R_e(\lambda_{max})|}{|R_e(\lambda_{min})|}$$

Jakobián soustavy ODR

Mějme soustavu n ODR definovaných jako

$$y_j' = f_j(y_1, y_2, .., y_n, x_1, x_2, ..., x_n); \quad j = 1, 2, ..., n; \quad y = y(x)$$

Jakobián soustavy rovnice je poté definován jako matice parciálních derivací

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & ... & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & ... & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ ... & ... & ... \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & ... & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Stiff rovnice a jejich soustavy - výpočet tuhosti soustavy

Mějme soustavu ODR prvního řádu

$$\begin{aligned} y' &= -10y + z \\ z' &= y - 10z \end{aligned}$$

Jakobiho matice J této soustavy vypadá následovně

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial y}(-10y + z) & \frac{\partial}{\partial z}(-10y + z) \\ \frac{\partial}{\partial y}(y - 10z) & \frac{\partial}{\partial z}(y - 10z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -10 & 1 \\ 1 & -10 \end{pmatrix}$$

Vyřešením rovnice $\mathbf{J} \cdot \mathbf{x} = \lambda \cdot \mathbf{x}$ dostaneme vlastní čísla Jakobiho matice J.

Stiff rovnice a jejich soustavy - výpočet tuhosti soustavy

Vlastní čísla matice J najdeme pomocí v7po4tu determinantu rovnice

$$\begin{aligned} \det(\mathbf{J} - \lambda \cdot \mathbf{E}) &= \det \left[\begin{pmatrix} -10 & 1 \\ 1 & -10 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] = \\ &= \det \left[\begin{pmatrix} -10 - \lambda & 1 \\ 1 & -10 - \lambda \end{pmatrix} \right] = \\ &= \lambda^2 + 20\lambda + 99 \end{aligned}$$

Vyřešením této kvadratické rovnice dostaneme $\lambda_1 = \lambda_{min} = -9$, $\lambda_2 = \lambda_{max} = -11$. Koeficient tuhosti nabývá hodnoty

$$S = \frac{|R_e(\lambda_{max})|}{|R_e(\lambda_{min})|} = \frac{11}{9} \approx 1.2$$

Ačkoli nabývají obě vlastní čísla záporných hodnot, tak je koeficient tuhosti malý a tato soustava není klasifikována jako tuhá.

Stiff rovnice a jejich soustavy - výpočet tuhosti soustavy

Soustavu

$$\begin{aligned} y' &= -10y + z \\ z' &= y - 10z \end{aligned}$$

modifikuje následovně

$$\begin{aligned} y' &= -100y - 0.01z \\ z' &= y - 0.0001z \end{aligned}$$

a spočítáme koeficient tuhosti stejným způsobem

$$S = \frac{99.999}{0.0011} = \approx 9 \cdot 10^4$$

Tato soustava je charakterizována velikou tuhostí a je potřeba zvolit adekvátní metodu nebo (v některých případech dostačující) adekvátně malý integrační krok.

Stiff rovnice a jejich soustavy - numerické metody

Stiff soustavy vyžadují modifikace stávajících numerických metod, většinou do tvaru implicitních schémat. Mezi používané metody patří

- **Implicitní** a semiimplicitní **Eulerova metoda**,
- Rosenbrockovy metody (semiimplicitní tvar metod Rungeho-Kutty),
- Bulirsch-Stoerovy metody nebo tzv GBS metody,
- vícekrokové Gearovy metody.

Stiff rovnice a jejich soustavy - Implicitní Eulerova metoda

Mějme funkci $f(x, y)$, kde $y = y(x)$, definovanou na intervalu $\langle a, b\rangle$, který ekvidistantně rozdělíme na subintervaly s délkou h. Poté bude vztah pro explicitní a implicitní Eulerovu metodu vypadat následovně.

Explicitní a implicitní Eulerova metoda

Taylorův rozvoj pro funkci $f(x+h, y(x+h))$

$$f(x+h, y(x+h)) = f(x, y(x)) + f'(x, y(x))h + .. + O(h^2)$$

Explicitní vyjádření Eulerovy metody:

$$f'(x, y(x)) = \frac{f(x+h, y(x+h)) - f(x, y(x))}{h} + O(h^2)$$

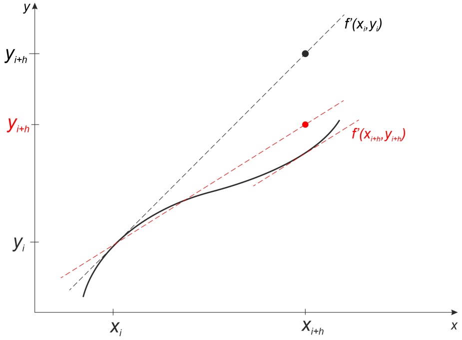
Implicitní vyjádření Eulerovy metody:

$$f'(x+h, y(x+h)) = \frac{f(x+h, y(x+h)) - f(x, y(x))}{h} + O(h^2)$$

Stiff rovnice a jejich soustavy - Implicitní Eulerova metoda

$$f'(x, y(x)) = \frac{f(x+h, y(x+h)) - f(x, y(x))}{h} + O(h^2)$$

$$\color{red}{f'(x+h, y(x+h))} = \frac{f(x+h, y(x+h)) - f(x, y(x))}{h} + O(h^2)$$



Stiff rovnice a jejich soustavy - Cvičení

U následující rovnice nejdříve odvoďte a poté aplikujte implicitní i explicitní Eulerovu metodu. Postupně změňte krok h a sledujte přesnost a stabilitu obou metod, např. pomocí globální chyby. Počáteční podmínka je $y(0) = y_0 = 0$.

$$y' = -100y + 100$$

U následující soustavy rovnic nejdříve vypočítejte její koeficient tuhosti a poté pomocí implicitní a explicitní Eulerovy metody soustavu vyřešte. Počáteční podmínky jsou $y(0) = y_0 = 0$ a $z(0) = z_0 = 0$.

$$\begin{aligned} y' &= 998y + 1998z \\ z' &= -999y - 1999z \end{aligned}$$

Literatura I

Jura Charvát Bruno Budínský.
Matematika II.
Vydavatelství ČVUT, 2002.

Karel Rektorys a kol.
Přehled užité matematiky II.
SNTL, 1988.

Miroslav Vicher.
Numerická matematika.
Ediční středisko PF UJEP, 2003.

William H. Press; Saul A. Teukolsky; William T. Vetterling; Brian P. Flannery.
Numerical Recipes in C - The art of scientific computing.
Cambridge university press, 2002.

Mathworks: makers of matlab and simulink.
`www.mathworks.com/help/`.
Online [2017-20-12].

Literatura II

Adrian B. Biran.
What should every engineer know about Matlab and Simulink.
CRC Press, 2010.