Matematický software

Obyčejné diferenciální rovnice

RNDr. Zbyšek Posel, Ph.D.

Katedra informatiky

Aplikace ODE 1. řádu - přehled

Rovnice 1. řádu nacházejí uplatnění v celé škále aplikací od technických, přes biologické, až po ekonomické a sociální. Cílem těchto aplikací je vytvořit model, který bude věrně popisovat studovaný děj a predikovat jeho vývoj v čase za různých podmínek. Cílem je získat výsledky rychleji a s menším úsilím, než které představuje reálný experiment, který časo nelze ani smysluplně provést.

Níže jsou uvedeny některé oblasti, kde se lze s aplikacemi ODE setkat.

- Fyzikální (Ochlazování tělesa)
- Chemické (Chemická kinetika)
- Biologické (Šíření nemocí)
- Ekonomické (Spotřeba domácností)

Fyzikální model - Ochlazování tělesa

Těleso o teplotě T_t je umístěno do prostředí s teplotou $T_p < T_t$. Těleso a místnost tvoří uzavřený systém a dle termodynamiky dochází k výměně tepla mezi tělesem a místností do té doby, až $T_t = T_p = T_{eq}$, kde T_{eq} je rovnovážná teplota celé soustavy. U tělesa bude docházet k úbytku teploty a u místnosti k nárůstu.

- Newtonovův zákon pro ochlazování tělesa:

$$\frac{\mathrm{d}T_t}{\mathrm{d}t} = -B(T_t - T_p)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(T_t - T_p) = -B(T_t^0 - T_p)$$

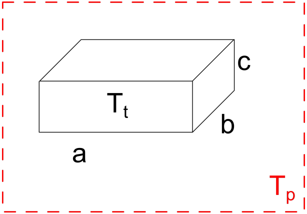
$$T_t(t) = T_p + (T_t^0 - T_p)e^{-kt}$$

- T_t^0 je počáteční teplota tělesa před chladnutím
- $B = \frac{hA}{C}$ obsahuje h - koeficient přenosu tepla, A - plochu tělesa a C - celkovou tepelnou kapacitu.
- Cílem je zjistit, jaká bude teplota tělesa po čase t.

Fyzikální model - Ochlazování tělesa

Za jak dlouho se ochladí kovové těleso z počáteční teploty $T_t^0 = 120^\circ$C na konečnou teplotu $T_f = 30^\circ$C jestliže je těleso obklopeno vzduchem s $T_p = 20^\circ$C? Ohřev okolního vzduchu neuvažujeme.

- Rozměry tělesa:
  - $a = 0.1\ m,\ b = 0.05\ m,\ c = 0.01\ m.$
  - $A = 0.013\ m^2.$
  - $V = 5 \cdot 10^{-5}\ m^3.$
- Koeficient přestupu tepla $h = 0.85\ W/(m^2 K).$
- Tepelná kapacita $C = 0.175\ J/K.$
- Určíme konstantu $B = \frac{hA}{C} = 0.06\ s^1.$



Chemický model - chemická kinetika

Chemická kinetika popisuje rychlost chemické reakce komponent a popisuje závislost rychlosti reakce na parametrech a podmínkách, při kterých probíhá. Jde na příklad o počet molekul n, které se reakce účastní, objem ve kterém, se reakce odehrává V nebo čas t po který reakce probíhá.

Rychlost reakce v se dá vyjádřit jako změna počtu molů látky Δn v objemu V za čas t.

$$v = \frac{|\Delta n|}{V \Delta t} \to \lim_{\Delta t \to 0} \frac{|\Delta n|}{V \Delta t} = \left| \frac{\mathrm{d}n}{V \mathrm{d}t} \right|$$

Pokud je $V = konst$ lze rovnici přepsat do tvaru

$$\frac{\mathrm{d}n}{V \mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}t} \to \frac{\mathrm{d}n}{V} = \mathrm{d}c$$

kde c je koncentrace látky v čase t.

Chemický model - monomolekulární reakce

V případě, že se reakce účastní pouze jeden typ molekuly (typ A), lze rychlost chemické reakce a vývoj koncentrace látky c_A popsat následujícím způsobem

$$
\begin{aligned}
v = -\frac{\mathrm{d}c_A}{\mathrm{d}t} &= kc_A \\
-\frac{\mathrm{d}c_A}{\mathrm{d}t} &= kc_A \rightarrow -\frac{\mathrm{d}c_A}{c_A} = k\mathrm{d}t \\
-\ln c_A + c_0 &= kt \rightarrow c = \ln c_{A_0} \\
\ln \frac{c_{A_0}}{c_A} &= kt \\
c_A &= c_{A_0} e^{-kt}
\end{aligned}
$$

kde k je konstanta určující míru reakce c_{A_0} je výchozí koncentrace před započetím reakce.

Chemický model - bimolekulární reakce

V případě, že se reakce účastní dva typy molekuly (typ A), lze rychlost chemické reakce a vývoj koncentrace látky c_A popsat následujícím způsobem

$$
\begin{aligned}
v = -\frac{\mathrm{d}c_A}{\mathrm{d}t} &= kc_A^2 \\
-\frac{\mathrm{d}c_A}{c_A^2} &= k\mathrm{d}t \to -\int_{c_{A_0}}^{c_A} \frac{\mathrm{d}c_A}{c_A^2} = \int_0^t k\mathrm{d}t \\
\left[\frac{1}{c_A}\right]_{c_{A_0}}^{c_A} &= kt \\
c_A &= \frac{c_{A_0}}{(1 + c_{A_0} kt)}
\end{aligned}
$$

kde k je konstanta určující míru reakce c_{A_0} je výchozí koncentrace před započetím reakce.

Biologický model - šíření nemoci

modely popisují vývoj nemoci, např. HIV, AIDS, SARS, Ebola aj., v závislosti na vlivu různých parametrů. Mezi nejčastěji uvažované parametry patří

- infekčnost nemoci,
- míra kontaktů,
- dynamika populace (narození, úmrtnost),
- vliv vakcinace,
- vliv karantény,
- vliv migrace,
- ...

Komplexnější modely obsahují sadu více než deseti rovnic, každá s jedním nebo více parametry.

Biologický model - šíření nemoci s konstantní infekčností

- Počet nemocných jedinců D roste s konstantní mírou infekce a,
- každá infikovaná osoba má konstantní pravděpodobnost b, že se vyléčí.

Změnu počtu nakažených osob lze popsat rovnicí

$$\frac{\mathrm{d}D}{\mathrm{d}t} = a - bD$$

která má analytické řešení

$$D(t) = \frac{1}{b}\left(a - e^{-b(C+t)}\right)$$

kde $C = -\ln(a - bD(0))/b$ je integrační konstanta. Model má dále rovnovážné řešení ve tvaru

$$\frac{\mathrm{d}D}{\mathrm{d}t} = 0 \to D_0 = \frac{a}{b}$$

Ekonomický model - Spotřeba domácností

Model má za cíl popsat vývoj spotřeby domácností v závislosti na míře růstu k a času, po který k růstu dochází. Růst je ovlivněn zejména výdaji na

- dlouhodobou spotřebu (spotřebiče, nábytek atd.),
- krátkodobou spotřebu (potraviny, oblečení atd.),
- služby (nájem atd.)

Mějme celkovou spotřebu domácností C, která roste v konstantní míře 3 %, tj. $k = 0.03$, poté následující rovnice popisuje vývoj spotřeby v čase C'.

$$\begin{aligned} \frac{C'}{C} &= k \\ \frac{\mathrm{d}C}{C} &= k\mathrm{d}t \\ \ln|C| &= kt \\ {\color{red}C} &{\color{red}= c \cdot e^{kt}} \end{aligned}$$

kde konstanta c udává míru růstu.

Obyčejné diferenciální rovnice vyšších řádů

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

$$F\left(x, f(x), f'(x), f''(x), ...\right) = 0$$

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.

Pro nalezené řešení u rovnic vyšších řádů se využívají například přístupy založené na

- nalezení substituce derivace (metoda parametru),
- snížení řádu diferenciální rovnice,
- nalezení charakteristické rovnice,
- variaci konstant.

Více lze o řešení obyčejných diferenciálních rovnic nalézt v [**?**] nebo v [**?**].

Obyčejné diferenciální rovnice vyšších řádů

- Lineární rovnice řádu n.

$$y^{(n)} + a_{n-1}(x)y^{(n-1)} + \dots + a_0(x)y = f(x, y)$$

  - Wronského determinant

- Nehomogenní Lineární rovnice.

$$y^{(n)} + a_{n-1}(x)y^{(n-1)} + \dots + a_0(x)y = 0$$

  - Variace konstant

- Homogenní Lineární rovnice s konstantními koeficienty

$$y^{(n)} + a_{n-1}y^{(n-1)} + \dots + a_0y = f(x, y)$$

  - Charakteristická rovnice

Speciální rovnice

- Besselova rovnice.

$$P_0(x)y'' + P_1(x)y' + P_2(x)y = 0)$$

  - kde $P_0(x), P_1(x) a P_2(x)$ jsou spojité funkce. Řešení pomocí lineární transformace.

- Gaussova rovnice

$$x(1-x)y'' + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)x]\, y' - \alpha\beta\gamma = 0$$

  - řešení je ve tvaru hyperbolické řady.

- Legenderrova rovnice

$$(1-x^2)y'' - 2xy' + n(n+1) = 0$$

  - kde n je celé nezáporné číslo. Řešení je ve tvaru Legenderrova polynomu stupně n.

Metody řešení ODE 2. řádu - linearizace

Mějme Obyčejnou diferenciální rovnici 2. řádu ve tvaru

$$y'' = f(x)$$

kde u $f(x)$ předpokládáme spojitost, a to včetně derivací funkce až do řádu 2 a závislost $y = y(x)$.
Chceme-li získat řešení ve tvaru $y =$ .. můžeme postupovat tak, že obě strany rovnice dvakrát integrujeme a dostaneme tvar

$$\int\int y'' \mathrm{d}y\mathrm{d}y = \int\int f(x)\mathrm{d}x\mathrm{d}x$$

Řešení dostaneme v následujícím tvaru, kde provedeme substituci.

$$y = \int\int f(x)\mathrm{d}x\mathrm{d}x \to z(x) = \int f(x)\mathrm{d}x$$

Metody řešení ODE 2. řádu - linearizace

Pomocí substituce získáme sadu dvou rovnic, která obsahuje derivace funkcí $y(x)$ a $z(x)$ o řád nižší, než v původní rovnici, tedy provedeme linearizaci

$$y = \int z(x)\mathrm{d}x \to y' = z(x)$$
$$z = \int f(x)\mathrm{d}x \to z' = f(x)$$

Výsledkem jsou dvě rovnice prvního řádu, které lze již řešit "známými" metodami.

Tento proces se nazývá linearizace a jeho cílem je snížit řád derivace tím, že provedeme substituci. Cílem procesu je snížit řád derivace tak, aby bylo možno řešit vzniklou soustavu rovnic pomocí známých metod. Nevýhodou procesu je navyšování počtu rovnic, které musí být řešeny.

Metody řešení ODE 2. řádu - linearizace

Proveďte linearizaci u následující rovnice a zjistěte analytické řešení $y(x)$.

$$y'' = \ln x$$

$$y = \int \int \ln x \mathrm{d}x \mathrm{d}x$$

pomocí následující substituce $z(x) = \int \ln(x)\mathrm{d}x$ získáme sadu dvou diferenciálních rovnic prvního řádu, kterou již umíme vyřešit.

$$z(x) = \int \ln(x)\mathrm{d}x = x \ln x - x + C_1$$

$$y = \int \left[x \ln x - x\right] \mathrm{d}x$$

$$y = \frac{x^2}{2}\left(\ln x - \frac{3}{2}\right) + C_2$$

Počáteční podmínky $y(x_0) = y_0, z(x_0) = z_0$ a x_0 můžeme volit tak, abychom obě integrační konstanty vynulovali.

Metody řešení ODE 2. řádu - cvičení

Porovnejte přesná řešení předchozího příkladu s numerickým odhadem, například pomocí explicitní a implicitní Eulerovy metody.

Soustava rovnic má tvar

$$
\begin{aligned}
y' &= z(x) \\
z' &= \ln x
\end{aligned}
$$

a přesná řešení mají pro jednotlivé rovnice tvar

$$
\begin{aligned}
y(x) &= \frac{x^2}{2}\left(\ln x - \frac{3}{2}\right) \\
z(x) &= x \ln x - x + c
\end{aligned}
$$

Literatura I