OBYČEJNÉ DIFERENCIÁLNÍ ROVNICE

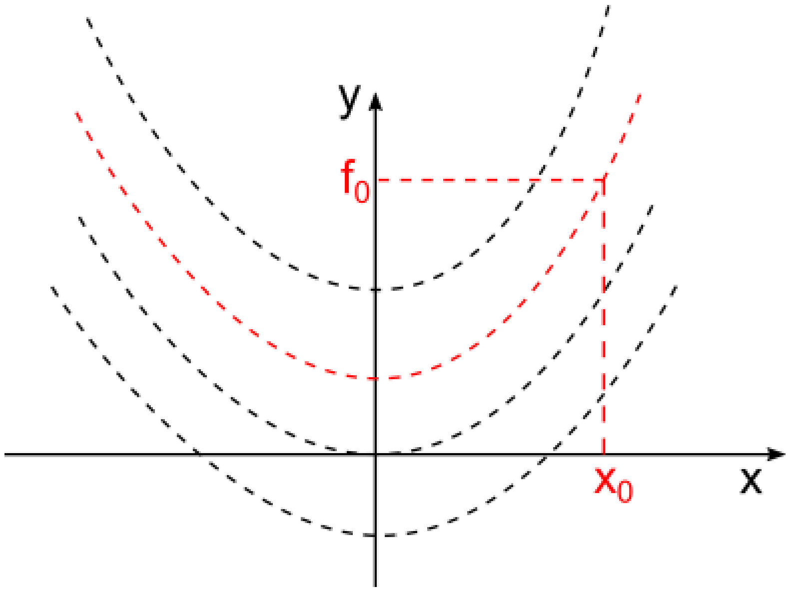
Obyčejné diferenciální rovnice

- Obyčejná diferenciální rovnice

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

- Řešení
  - každá funkce $g(x)$ vyhovující výše uvedené rovnici

- Počáteční podmínky $[x_0, f_0 = f(x_0)]$
  - určují hodnoty řešení nebo jeho derivací v určitém počátečním bodě
  - vybíráme z množiny funkcí $g(x)$ jednu konkrétní
- Okrajové podmínky
  - obvykle řešíme v omezených oblastech
  - hodnoty na okrajích intervalu, na kterém je rovnice definována
    - často u parciálních diferenciálních rovnic



- ODE 1. řádu

$$y' = f(x, y) \qquad\qquad y(x_0) = y_0$$

Typy řešení ODE

- **Obecné**
  - zahrnuje všechna možná řešení rovnice
  - obsahuje libovolnou integrační konstantu
- **Partikulární (částečné)**
  - jedno konkrétní řešení, které vyhovuje dané rovnici a určitým doplňujícím podmínkám
    - počátečním nebo okrajovým
  - získáme přiřazením číselné hodnoty každé integrační konstantě obecného řešení
- **Homogenní**
  - odpovídá homogenní části dané ODE
    - pro rovnici $L(y) = r(x)$ je homogenní rovnice $L(y) = 0$
  - může být nalezeno pomocí charakteristické rovnice
  - základ pro nalezení obecného řešení

pro rovnice 1. řádu

$$y' + a(x)y = 0$$

Obecné = homogenní + partikulární

- **Singulární (výjimečné)**
  - není zahrnuto v obecném řešení
  - pokud má ODR singularitu nebo singularitní bod
    - funkce nejsou hladké nebo jsou nedefinované
  - nemusí být fyzikálně relevantní

Analytické metody řešení

- Analytické metody řešení ODE prvního řádu
  - záleží na typu rovnice

- Separabilní rovnice

$$P_1(x)Q_1(y) + P_2(x)Q_2(y)\frac{dy}{dx} = 0$$

- Separace proměnných

$$y' = x$$

$$\frac{dy}{dx} = x$$

$$dy = x\,dx$$

$$\int dy = \int x\,dx$$

$$y = \frac{x^2}{2} + C$$

Analytické metody řešení

- Exaktní diferenciální rovnice
  - je možné ji vyjádřit jako derivaci určité funkce $F(x,y)$
    - např.

$$y' = x^2$$

$$M(x,y)\frac{dy}{dx} + N(x,y) = 0$$

$$\frac{\partial M}{\partial x} = \frac{\partial N}{\partial y}$$

  - řešení často separací proměnných

- Homogenní rovnice

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

  - řešení substitucí

$$u = y/x \qquad y = ux \qquad y' = u'x + u$$

  - po dosazení

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

  - řešení separací proměnných

Analytické metody řešení

- Lineární rovnice řádu n
  - obecně

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

- Lineární rovnice s konstantními koeficienty

$$\sum_{j=0}^{n} b_j \frac{d^j y}{dx^j} = r(x)$$

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

  - předpokládáme řešení ve tvaru

$$y = e^{\lambda x}$$

  - provedeme substituci a řešíme polynom v α
  - řešíme charakteristickou rovnici

Analytické metody řešení

- (Homogenní) lineární rovnice

$$y' + a(x)y = 0$$

  - řešíme vynásobením integračním faktorem $e^{-\int a(x)\,dx}$

$$y = C\,e^{-\int a(x)\,dx}$$

- Lineární rovnice s pravou stranou

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

$$y = C(x)\,e^{-\int a(x)\,dx}$$

$$y = e^{-\int a(x)\,dx} \int b(x)\,e^{\int a(x)\,dx}$$

  - často lineární rovnice s konstantními koeficienty, tj. $a(x) = a$

- Bernoulliova rovnice $y' + a(x)\,y = b(x)\,y^n$

substituce $u = y^{1-n}$ převede libovolnou Bernoulliho rovnici na lineární diferenciální rovnici

Použití diferenciálních rovnic

- Děje, které se mění v čase
  - pomocí obyčejné diferenciální rovnice nebo soustavy rovnic

$$\frac{dF(t)}{dt} \neq 0$$

- Příklady použití
  - matematický software
    - řešení problémů z oblasti matematiky a numerické matematiky
    - funkce softwaru nezávislé na verzi
  - počítačové zpracování signálu
    - využití transformací pro analýzu jednoduchých signálů, jejich korelací ap.
  - úvod do strojového učení
    - praktická analýza dat pomocí existujících frameworků
    - např. tensorFlow, Scikit-learn, Kerasd ap.

Použití diferenciálních rovnic

- Fyzikální soustavy (pohybová rovnice)

$$\frac{dx}{dt} = v \qquad \frac{dv}{dt} = a$$

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + b\frac{dx}{dt} + kx = F_0 \sin(\Omega t)$$

- Biologické modely

$$\frac{dS(t)}{dt} = -\beta S(t)I(t)$$
$$\frac{dI(t)}{dt} = \beta S(t)I(t) - \gamma R(t)$$
$$\frac{dR(t)}{dt} = \gamma R(t)$$

- Finanční modely

$$dr(t) = \alpha\, r(t)\, dt + \beta\, r(t)\, dW(t)$$

Numerické metody řešení

- Numerické metody pro řešení ODE
  - řešme rovnici 1. řádu (v explicitním tvaru)

$$y' = f\big(x, y(x)\big)$$

  - funkce $f(x, y)$ popisuje, jak se y mění v závislosti na x a na aktuální hodnotě y
- Cíl
  - nalézt funkci $y(x)$, která splňuje tento vztah
- Postup
  - iterace

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

  - obecný tvar iterace
    - vícekrokové metody řádu k
    - nové y může záviset na několika předchozích hodnotách

Numerické metody řešení

- Řešíme $y' = f(x, y(x))$
- Obecný tvar iterace

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

- Jednokrokové metody
  - řešení na základě hodnoty funkce a její derivace v jednom kroku
    - nezávisí na předchozích hodnotách kromě aktuální
  - založeno na Taylorově rozvoji (počítáme novou hodnotu řešení z derivace v bodě x_0)

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + h\, y'(x_0)$$

  - Euler, Runge-Kutta, Verlet, Leap-Frog

$$y^{i+1} = y^i + h\Phi(x^i, y^i)$$ např. $$y^{i+1} = y^i + hf(x^i, y^i)$$ (Euler)

- Vícekrokové metody
  - na základě hodnoty funkce a derivace v několika předchozích krocích
  - nejdříve počáteční hodnoty řešení pomocí jednokrokových metod
  - Prediktor-korektor, Prediktor-modifikátor-korektor, Adams-Bashforth

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

Eulerova metoda

- Místo derivace budeme využívat diferenci

$$\frac{d}{dt} \sim \frac{\Delta}{\Delta t}$$

- Uvažujme rovnici

$$y' = \frac{\Delta y}{\Delta x} = f\big(x, y(x)\big) \qquad \Delta y = \Delta x\, f\big(x, y(x)\big)$$

- Z definice diference

$$y' = \frac{y(x + \Delta x) - y(x)}{\Delta x}$$

$$y(x + \Delta x) - y(x) = y' \Delta x$$

dosadíme

$$y(x + \Delta x) = y(x) + \Delta x\, f\big(x, y(x)\big)$$

- Rovnice ve tvaru jednokrokové iterační metody

odpovídá obecnému schématu

$$\boxed{y^{i+1} = y^i + \Delta x\, f(x^i, y^i)}$$

$$y^{i+1} = y^i + h\, f\big(x^i, y^i\big)$$

Eulerova metoda – příklad

- Řešíme rovnici

$$y' = x \qquad y(x_0) = 2 \qquad x_0 = 0$$

- Analytické řešení rovnice je

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

- Rovnice má tvar

$$y' = f\big(x, y(x)\big) = x$$

- Dosadíme do definice diference

$$y' = \frac{y(x + \Delta x) - y(x)}{\Delta x}$$

$$y(x + \Delta x) - y(x) = y' \Delta x$$

$$y(x + \Delta x) = y(x) + x\, \Delta x$$

- Rovnice ve tvaru jednokrokové iterační metody

$$y^{i+1} = y^i + h\, x^i; \qquad y^0 = 2$$

Eulerova metoda – příklad

- Řešíme rovnici

$$y' = v = konst \qquad y(x_0) = y_0 \qquad x_0 = 0$$

$$\frac{dy}{dt} = v$$

- Analytické řešení rovnice je

$$y(t) = vx + C, \qquad y(0) = 0 + C \quad \rightarrow \quad C = y_0$$

$$y = vt + y_0$$

- Rovnice má tvar

$$y' = f\big(x, y(x)\big) = v$$

- Dosadíme do definice diference

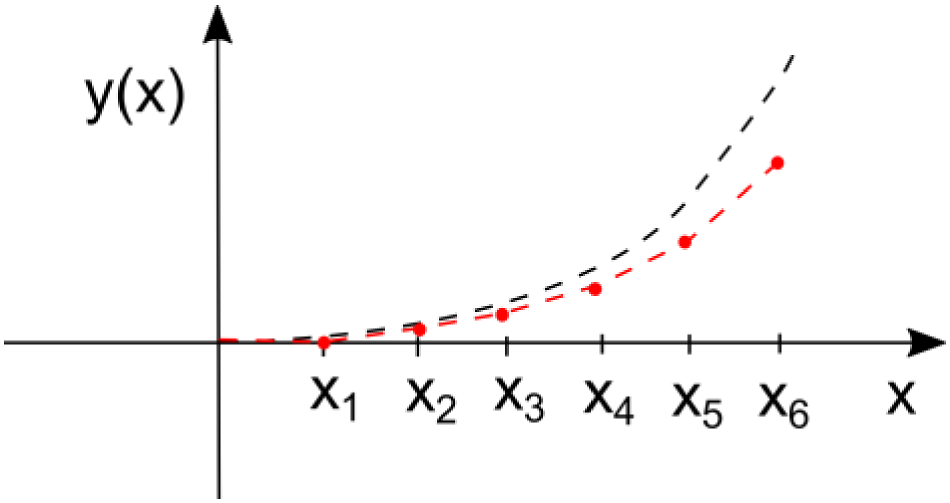
$$y' = \frac{y(x + \Delta x) - y(x)}{\Delta x}$$

$$y(x + \Delta x) - y(x) = y' \Delta x$$

$$y(x + \Delta x) = y(x) + v\, \Delta x$$

$$y = y + v\, dt$$

Přesnost odhadu numerické metody



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

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

- Explicitní a implicitní Eulerova metoda
- Taylorův rozvoj funkce $f\big(x+h, y(x+h)\big)$

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

- Explicitní Eulerova metoda
  - při výpočtu řešení v čase $t + \Delta t$ používá výpočet hodnoty derivace v bodě t

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

- Implicitní Eulerova metoda:
  - při výpočtu řešení v čase $t + \Delta t$ používá výpočet hodnoty derivace v bodě $t + \Delta t$

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

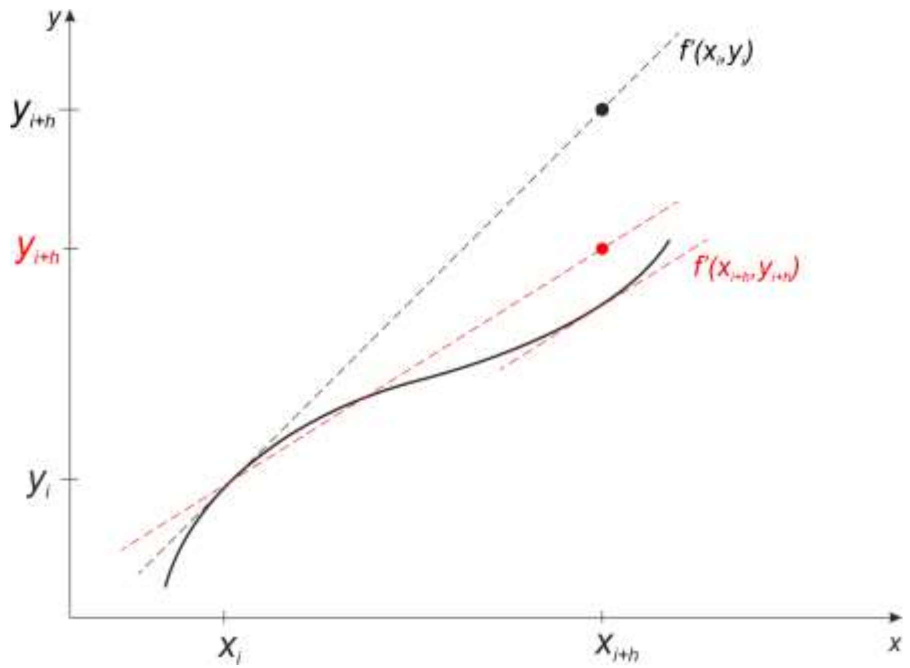
Implicitní Eulerova metoda

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

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

$$y^{i+1} = y^i + \Delta x\, f(x^i, y^i)$$

$$y^{i+1} = y^i + \Delta x\, f(x^{i+1}, y^{i+1})$$



- Výhody implicitní metody
  - numericky stabilnější, širší použití
  - výpočetně náročnější
    - vyžaduje řešení nelineárních rovnic v každém kroku

Runge-Kutta RK4

- Aproximace derivace v bodě pomocí váženého průměru více bodů
  - řešíme rovnici

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

  - Eulerova metoda:

    $$y^{i+1} = y^i + h\, f\left(x^i, y^i\right)$$

  - zpřesníme odhad
    - jako vážený průměr 4 odhadů k_1 až k_4

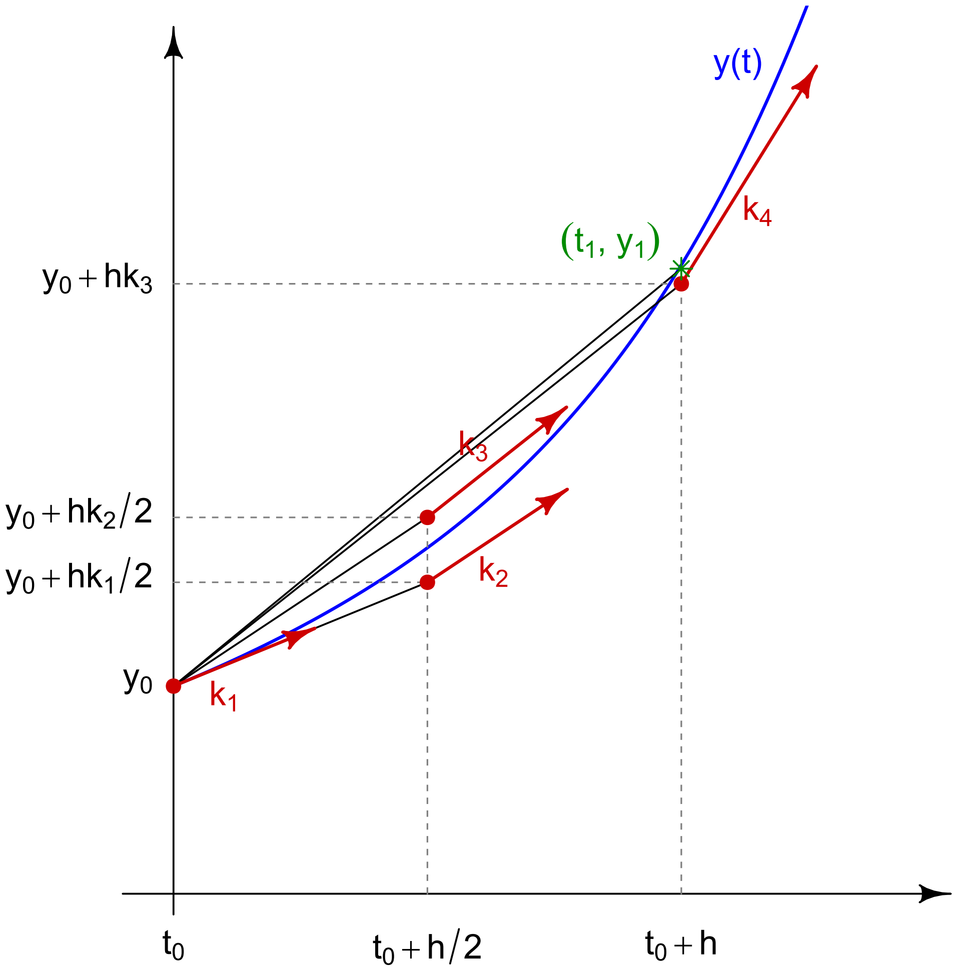
$$y^{i+1} = y^i + \frac{1}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right)$$

$$k_1 = h\, f\left(x^i, y^i\right)$$

$$k_2 = h\, f\left(x^i + \frac{h}{2},\ y^i + \frac{k_1}{2}\right)$$

$$k_3 = h\, f\left(x^i + \frac{h}{2},\ y^i + \frac{k_2}{2}\right)$$

$$k_4 = h\, f\left(x^i + h, y^i + k_3\right)$$



Leap-frog

- Leap-frog (velocity Verlet, symplektická metoda)

$$y^{i+1} = y^i + h\,f(x^i, y^i) \quad \Rightarrow \quad y^{i+1} = y^{i-1} + 2h\,f(x^i, y^i)$$

  - nejčastěji pro pohybovou rovnici

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = F(x)$$

  - diskrétní aproximace polohy pomocí skoků v čase
  - metoda 2. řádu, vyžaduje 2 kroky, které se střídají
    - krok polohy, krok rychlosti
  - krok polohy $(i + \frac{1}{2})$
    - poloha částice v čase $t + \frac{\Delta t}{2}$

$$x^{i+\frac{1}{2}} = x^i + \frac{1}{2}v^i\Delta t$$

  - krok rychlosti $(i + 1)$
    - rychlost částice v čase $t + \Delta t$

$$v^{i+1} = v^i + f\left(x^{i+\frac{1}{2}}\right)\Delta t$$

  - krok polohy $(i + 1)$

$$x^{i+1} = x^i + v^{i+1}\,\Delta t$$

Verlet

$$f(c+h) = f(c) + \frac{f'(c)}{1!}h + \ldots + \frac{f^{(n)}(c)}{n!}h^n$$

- Řešíme pohybovou rovnici

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = F(x)$$

- Standardní Verletův algoritmus – odvození
  - Taylor: $$x(t+\Delta t) = x(t) + \frac{1}{1!}\dot{x}(t)\,\Delta t + \frac{1}{2!}\ddot{x}(t)\,\Delta t^2$$
  - úpravy $$x(t+\Delta t) = x(t) + \Delta t\, v(t) + \frac{\Delta t^2}{2}a(t) \qquad (1)$$
    $$x(t-\Delta t) = x(t) - \Delta t\, v(t) + \frac{\Delta t^2}{2}a(t) \qquad (2)$$
  - součet (1)+(2) $$x(t+\Delta t) = 2x(t) - x(t-\Delta t) + a(t)\,\Delta t^2 \qquad x^{i+1} = 2x^i - x^{i-1} + a^i\,\Delta t^2$$
  - rychlost z rozdílu $$v(t) = \frac{x(t+\Delta t) - x(t-\Delta t)}{2\Delta t}$$
- Rychlostní Verletův algoritmus
  - použijeme (1)
  - rychlost jako $$v(t+\Delta t) = v(t) + \Delta t\,\frac{a(t) + a(t+\Delta t)}{2}$$

Řešení rovnic – cvičení

- Vyřešte rovnici

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

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

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

APLIKACE ODE 1. ŘÁDU

Aplikace ODE 1. řádu – přehled

- Uplatnění
  - celá škála aplikací od technických, přes biologické, až po ekonomické a sociální
- Cílem vytvoření modelu
  - bude věrně popisovat studovaný děj
  - bude predikovat jeho vývoj v čase za různých podmínek
- Výhody
  - výsledky rychleji a s menším úsilím
    - oproti reálnému experimentu
    - často nelze ani smysluplně provést
- Příklady
  - Fyzikální
    - ochlazování tělesa
  - Chemické
    - chemická kinetika
  - Biologické
    - šíření nemocí
  - Ekonomické
    - spotřeba domácností

Exponenciální pokles nebo růst

- Radioaktivní rozpad
  - $N(t)$ počet radioaktivních atomů v daném vzorku
  - λ konstanta rozpadu

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda\, N$$

- Jednoduchý elektrický obvod (RC)
  - Q náboj na kondenzátoru
  - I proud protékající obvodem

$$\frac{dI}{dt} = -\frac{1}{RC}\, I$$

$$V(t) = V_R(t) + V_C(t)$$
$$V_R(t) = RI = R\frac{dQ(t)}{dt}$$
$$V_C(t) = \frac{Q(t)}{C} \quad \Big| \; \frac{d}{dt}$$
$$0 = R\frac{dI(t)}{dt} + \frac{1}{C} I(t)$$

- Výtok kapaliny otvorem
  - V množství vody v nádobě
  - k konstanta úměrnosti
    - (jak rychle voda vytéká z otvoru)

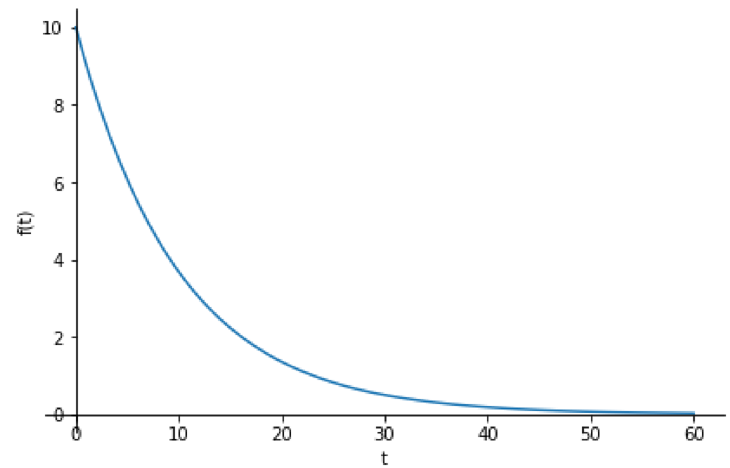
$$\frac{dV}{dt} = -k\, V$$

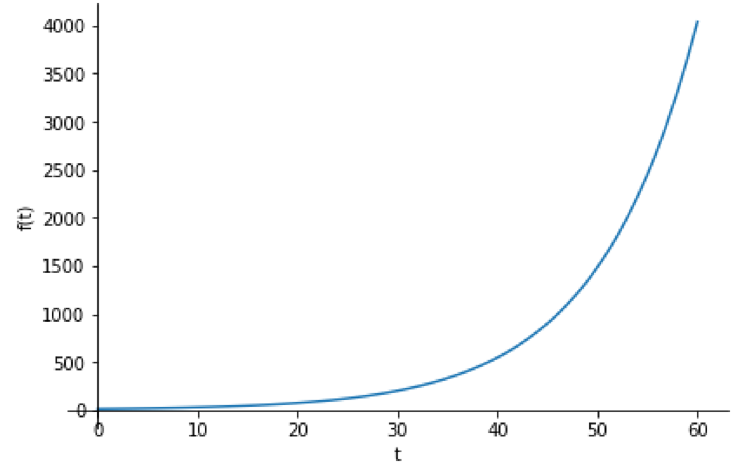
- Popis růstu populace
  - N počet jedinců populace
  - r koeficient růstu

$$\frac{dN}{dt} = r\, N$$

Exponenciální pokles nebo růst

- Řešme rovnici $$\frac{dN}{dt} = -k\,N$$
  - separujeme proměnné
    $$\frac{dN}{N} = -k\,dt$$
  - integrujeme
    $$\int \frac{dN}{N} = -\int k\,dt$$
    $$\ln|N| = -kt + C$$
  - počáteční podmínka: v čase $t = 0$ bylo $N = N_0$
    $$\ln|N| = C = \ln|N_0|$$
  - odtud
    $$\ln|N| = -kT + \ln|N_0|$$
    $$N = N_0 e^{-kt}$$





Ochlazování tělesa

- Těleso o teplotě T_t je umístěno do prostředí s teplotou $T_p < T_t$
  - docház k výměně tepla mezi tělesem a místností
  - do doby, až $T_t = T_p = T_{eq}$, kde T_{eq} je rovnovážná teplota soustavy
- Newtonovův zákon pro ochlazování tělesa:

$$\frac{dT_t}{dt} = -B\left(T_t - T_p\right) \qquad \frac{dT_t}{T_t - T_p} = -B\,dt$$

$$\ln\left|T_t - T_p\right| = -Bt + C \qquad T_t - T_p = C\,e^{-Bt}$$

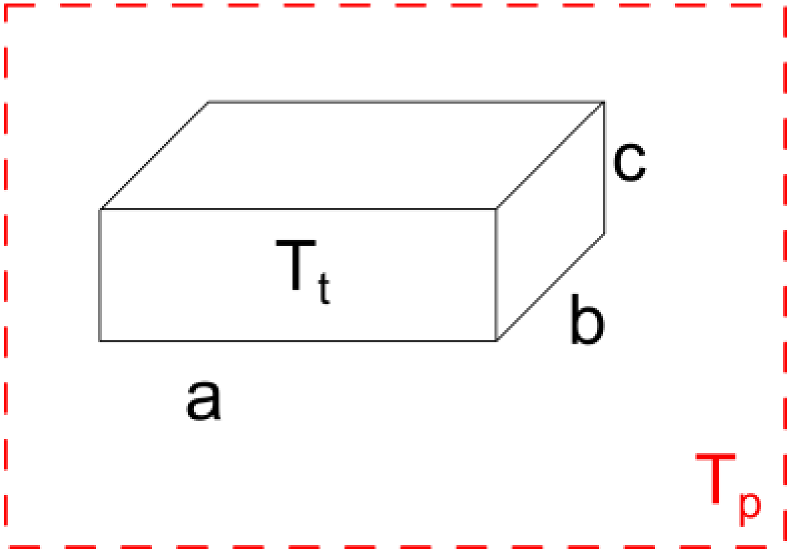
  - pro $t = 0$ vychází $T_t^0 - T_p = C$

$$T_t(t) = T_p + \left(T_t^0 - T_p\right)e^{-Bt}$$

  - T_t^0 je počáteční teplota tělesa před chladnutím
  - $B = \frac{h\,A}{C}$ obsahuje
    - h - koeficient přenosu tepla
    - A - plocha tělesa
    - C - celková tepelná kapacita
- Cílem je zjistit, jaká bude teplota tělesa po čase t

Ochlazování tělesa

- Za jak dlouho se ochladí kovové těleso z počáteční teploty $T_t^0 = 120°$C na konečnou teplotu $T_f = 30°$C, jestliže je těleso obklopeno vzduchem s $T_p = 20°$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 $h = 0.85\ W/(m^2K)$
- Tepelná kapacita $C = 0.175\ J/K$
- Určíme konstantu $B = \frac{hA}{C} = 0.06\ s^1$



Chemická kinetika

- Chemická kinetika popisuje
  - rychlost chemické reakce komponent
  - závislost rychlosti reakce na parametrech a podmínkách, při kterých probíhá
- Možné podmínky
  - n počet molekul, které se reakce účastní
  - V objem, ve kterém se reakce odehrává
  - t čas, po který reakce probíhá
- Rychlost reakce v se dá vyjádřit jako
  - změna počtu molů látky Δn v objemu V za čas t
  - změna koncentrace c za čas t

$$v = \frac{|\Delta n|}{V \Delta t} \qquad \rightarrow \qquad \lim_{\Delta t \to 0} \frac{|\Delta n|}{V \Delta t} = \left| \frac{dn}{V\,dt} \right|$$

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

$$\frac{dn}{V\,dt} = \frac{dc}{dt} \qquad \rightarrow \qquad \frac{dn}{V} = dc$$

Monomolekulární reakce

- Reakce se účastní pouze jeden typ molekuly (typ A)
  - rychlost chemické reakce a vývoj koncentrace látky c_A lze popsat:

$$v = -\frac{dc_A}{dt} = k\,c_A$$

$$-\frac{dc_A}{dt} = k\,c_A$$

$$-\frac{dc_A}{c_A} = k\,dt$$

$$-\ln c_A + C = kt \qquad C = \ln c_{A0}$$

$$\ln\frac{c_{A0}}{c_A} = kt$$

$$c_A = c_{A0}\,e^{-kt}$$

- c_A koncentrace látky
- k konstanta určující míru reakce
- c_{A0} výchozí koncentrace před započetím reakce

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

$$v = -\frac{dc_A}{dt} = k\, c_A^2$$

$$-\frac{dc_A}{c_A^2} = k\, dt$$

$$-\int_{c_{A0}}^{c_A} \frac{dc_A}{c_A^2} = \int_0^t k\, dt$$

$$\left[\frac{1}{c_A}\right]_{c_{A0}}^{c_A} = kt$$

$$c_A = \frac{c_{A0}}{1 + c_{A0}\, kt}$$

- c_A koncentrace látky
- k konstanta určující míru reakce
- c_{A0} výchozí koncentrace před započetím reakce

Šíření nemoci

- Modely vývoje nemoci v závislosti na vlivu různých parametrů
  - např. HIV, AIDS, SARS, Ebola aj.
- Nejčastěji uvažované parametry
  - 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

Šíření nemoci s konstantní infekčností

- Jednoduchý model
  - počet nemocných jedinců D
  - roste s konstantní mírou infekce a
  - každá infikovaná osoba má konstantní pravděpodobnost vyléčení b
- Změna počtu nakažených osob

$$\frac{dD}{dt} = a - bD$$

$$\frac{dD}{a - bD} = dt \qquad u = a - bD$$

$$-\frac{1}{b}\ln|a - bD| = t + C$$

- Analytické řešení

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

$$D(t) = \frac{a}{b} + K\, e^{-bt}$$

  - kde C je integrační konstanta (výpočet: dosadíme $t = 0$, $D(0) = D_0$)

- Model má dále rovnovážné řešení ve tvaru

$$\frac{dD}{dt} = 0 \qquad \rightarrow \qquad D_0 = \frac{a}{b}$$

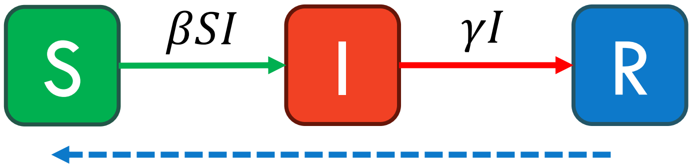
$(D = konst)$

Modely šíření nemocí

- S (Susceptible)
  - náchylní jedinci
- I (Infected)
  - nakažení jedinci
- R (Recovered)
  - uzdravení (imunní) jedinci
- D (Deceased)
  - zemřelí jedinci
- E (Exposed)
  - nakažení, ale ještě ne infekční

- SIR
  - vzniká imunita (např. spalničky, chřipka)
- SIS
  - bez dlouhodobé imunity (např. rýma)
- SIRD
  - nemoci s úmrtností (např. COVID-19)
- SEIR
  - nemoci s inkubační dobou (např. COVID-19, Ebola)
- SEIRD
  - SEIR s úmrtností
- SIRS
  - po čase imunita slábne, uzdravení jedinci se mohou znovu nakazit
- SIRV
  - očkovaná populace

SIR



- Susceptible – Infected – Recovered
  - populace uzavřená $\quad S + I + R = konst$
  - šíření kontaktem S-I (náchylný a nakažený)
- Změna počtu náchylných jedinců (S)
  - pravděpodobnost, že náchylný jedinec onemocní, závisí na:
    - frekvenci kontaktů mezi S a I
    - přenosové pravděpodobnosti β (jak snadno se nemoc šíří)

$$\frac{dS}{dt} = -\beta SI$$

čím více nakažených, tím rychleji klesá S

- Změna počtu nakažených jedinců (I)
  - roste přenosem infekce (přírůstek nakažených βSI)
  - zároveň klesá zotavováním

$$\frac{dI}{dt} = \beta SI - \gamma I$$

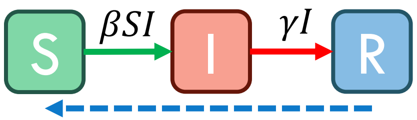
$\gamma = \frac{1}{T_{inf}}$ míra zotavení $\qquad T_{inf}$ průměrná doba infekce

- Změna počtu uzdravených jedinců (R)
  - přecházejí z I do R, závisí na počtu nakažených

$$\frac{dR}{dt} = \gamma I$$

SIS, SIRD

- SIR

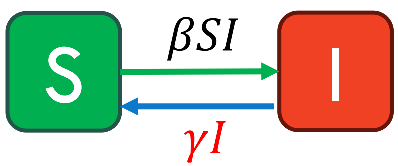


$$\frac{dS}{dt} = -\beta SI$$

$$\frac{dI}{dt} = \beta SI - \gamma I$$

$$\frac{dR}{dt} = \gamma I$$

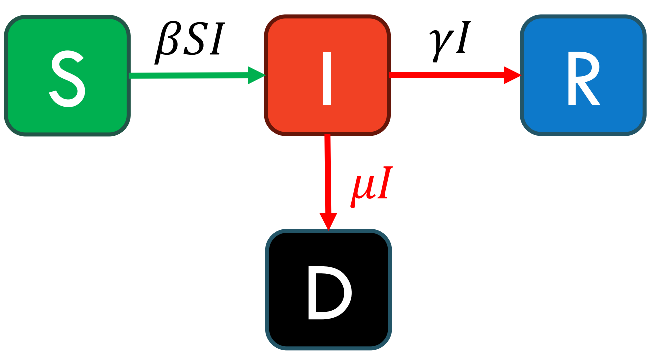
- SIS (Susceptible – Infected – Susceptible)
  - neexistuje imunitní skupina R, uzdravení se mohou znovu nakazit
  - uzdravení se dostanou rovnou do S



$$\frac{dS}{dt} = -\beta SI + \gamma I$$

$$\frac{dI}{dt} = \beta SI - \gamma I$$

- SIRD (Susceptible – Infected – Recovered – Deceased)
  - úmrtí snižuje počet nakažených



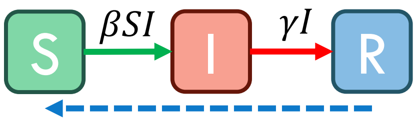
$$\frac{dS}{dt} = -\beta SI$$

$$\frac{dI}{dt} = \beta SI - \gamma I - \mu I$$

$$\frac{dR}{dt} = \gamma I \qquad \frac{dD}{dt} = \mu I$$

SEIR, SEIRD

- SIR



$$\frac{dS}{dt} = -\beta SI$$

$$\frac{dI}{dt} = \beta SI - \gamma I$$

$$\frac{dR}{dt} = \gamma I$$

- SEIR (Susceptible – Exposed – Infected – Recovered)
  - E: jedinci, kteří jsou nakažení, ale ještě nejsou infekční

$$\frac{dS}{dt} = -\beta SI$$

$$\frac{dE}{dt} = \beta SI - \sigma E$$

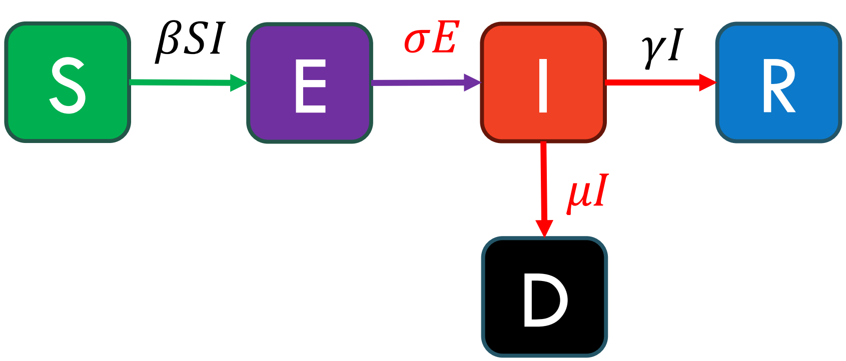
exponovaní vznikají kontaktem, klesají projevením se nemoci

$$\frac{dI}{dt} = \sigma E - \gamma I$$

nakažení vznikají z exponovaných

$$\frac{dR}{dt} = \gamma I$$

σ – rychlost přechodu z exponované fáze do infekční

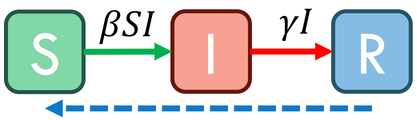


- SEIRD (SEIR – Deceased)
  - úmrtí snižuje počet nakažených
  - jinak vše stejné

$$\frac{dI}{dt} = \sigma E - \gamma I - \mu I \qquad \frac{dD}{dt} = \mu I$$

SIRV

- SIR



$$\frac{dS}{dt} = -\beta SI$$

$$\frac{dI}{dt} = \beta SI - \gamma I$$

$$\frac{dR}{dt} = \gamma I$$

- SIRV (Susceptible – Infected – Recovered – Vaccinated)

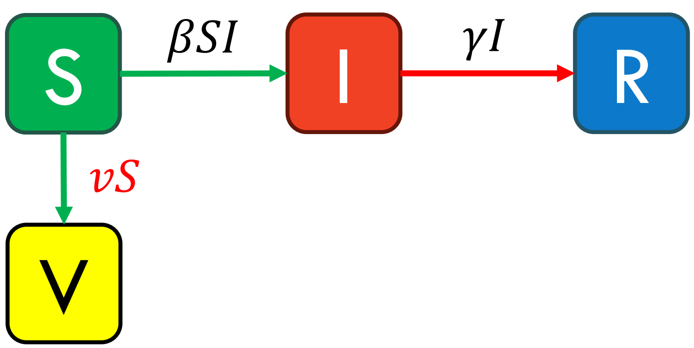
$$\frac{dS}{dt} = -\beta SI - vS$$

$$\frac{dI}{dt} = \beta SI - \gamma I$$

$$\frac{dR}{dt} = \gamma I$$

$$\frac{dV}{dt} = vS$$

v – míra očkování



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'.

$$\frac{C'}{C} = k$$

$$\frac{dC}{C} = k\ dt$$

$$\ln|C| = kt$$

$$C = c\ e^{-kt}$$

- kde konstanta c udává míru růstu

Řešení Verhulstova populačního modelu

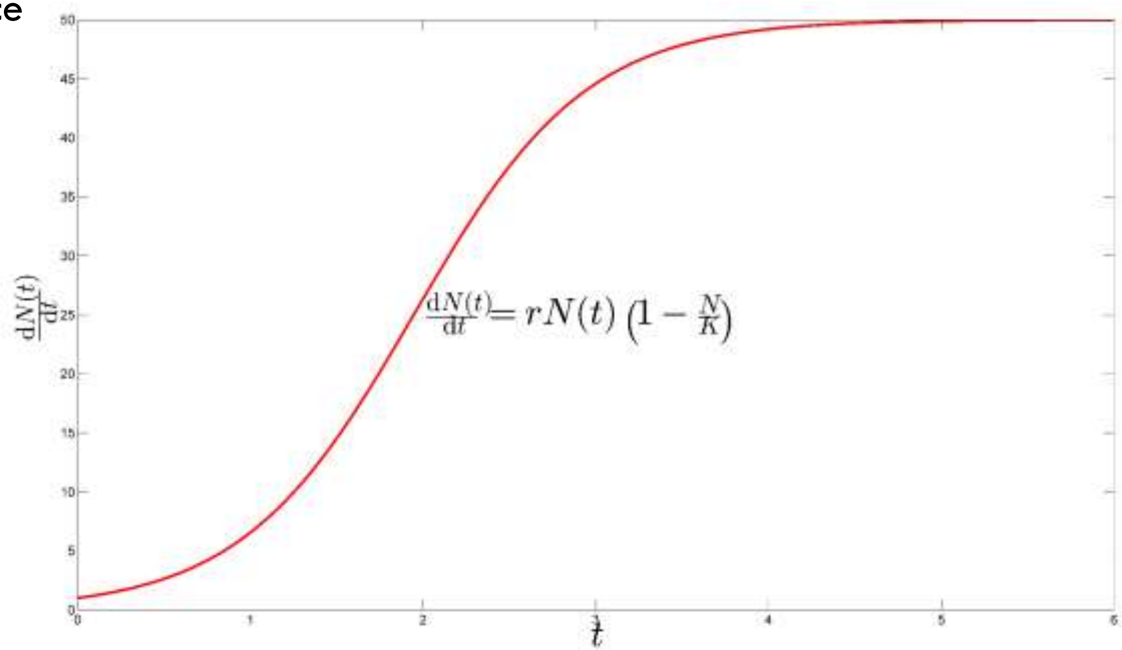
- Verhulstův model růstu populace (1838)
- Vyřešte následující diferenciální rovnici pomocí symbolické a numerické matematiky

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

- kde $r = 2$ a $K = 50$ jsou konstanty
  - r – specifická míra růstu populace
  - K – kapacita prostředí (horní hranice populace)

- Uvažujte počáteční podmínku

$$N(0) = 1$$



Vizualizace řešení – vektorové pole

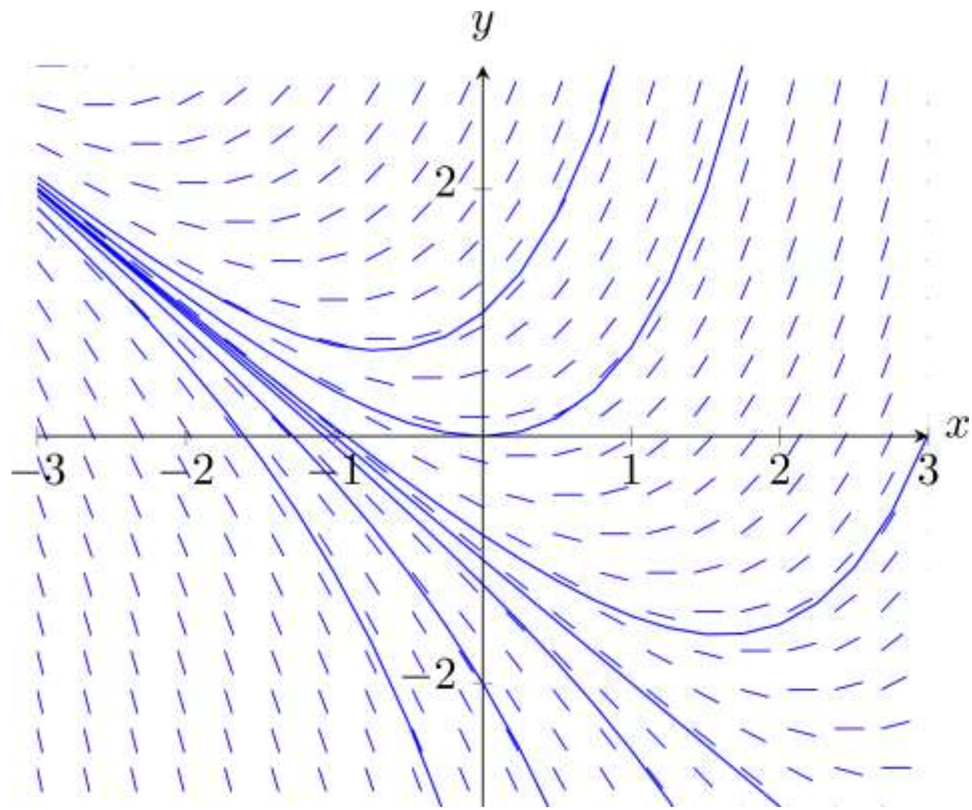
- Zobrazte jednotlivá řešení následujících rovnic pomocí vektorového pole.

$$y' = \quad x + y$$

$$y' = \quad -\frac{x}{y}$$

$$y' = \quad \frac{y^2}{x}$$

- Zvolte řešení (x, y) v rozsahu $(-5,5)$
- Použijte numerickou nebo symbolickou matematiku
- Vyznačte řešení, které vyhovuje vámi vybraným počátečním podmínkám



STIFF SOUSTAVY

Stiff rovnice a jejich soustavy

- Rovnice se silným tlumením

- 1952 – klasické numerické metody selhávají při popisu určitých chemických reakcí
  - rychle reagující komponenta dosáhla rovnováhy daleko dříve než zbytek systému
  - ten se mění velice pomalu
- 1963 – důvodem selhání řešení je špatná stabilita klasických metod pro tyto typy úloh

- Definice stiff systému
  - ucelená definice neexistuje
  - obecně 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

- Jacobiho matice a jakobián soustavy ODR
- Mějme soustavu n ODR definovaných jako

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

- Jacobiho matice soustavy rovnic je definována jako matice parciálních derivací

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

- Determinant této matice nazýváme jakobiánem

Stiff rovnice a jejich soustavy

- Definice tuhosti soustavy
- Soustava obyčejných diferenciálních rovnic je tuhá, jestliže všechna vlastní čísla λ_j matice $\boldsymbol{J}$ mají zápornou reálnou část a koeficient tuhosti S je velký
  - matice $\boldsymbol{J}$ je Jacobiho matice soustavy ODR
- Seřadíme vlastní čísla tak, aby platilo

$$|Re(\lambda_1)| \leq |Re(\lambda_2)| \leq \ \dots \ \leq |Re(\lambda_n)|$$

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

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

Stiff rovnice a jejich soustavy

- Mějme soustavu ODR prvního řádu

$$\begin{aligned} 3y' &= -10y + z \\ z' &= y - 10z \end{aligned}$$

- Jacobiho matice $\boldsymbol{J}$ této soustavy vypadá následovně

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

- Vyřešením rovnice $\boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{x} = \lambda \boldsymbol{x}$ dostaneme vlastní čísla Jacobiho matice $\boldsymbol{J}$

Stiff rovnice a jejich soustavy

- Vlastní čísla matice J najdeme pomocí výpočtu determinantu rovnice

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

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

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

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

Stiff rovnice a jejich soustavy

- Soustavu

$$\begin{array}{rcccc} 3y' & = & -10y & + & z \\ z' & = & y & - & 10z \end{array}$$

- modifikuje následovně

$$\begin{array}{rcccc} 3y' & = & -100y & - & 0.01z \\ z' & = & y & - & 0.0001z \end{array}$$

- a spočítáme koeficient tuhosti stejným způsobem

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

- Velká tuhost
  - potřeba zvolit adekvátní metodu
  - nebo adekvátně malý integrační krok
    - v některých případech dostačuje

Stiff rovnice a jejich soustavy

- Stiff soustavy vyžadují modifikace stávajících numerických metod
  - většinou do tvaru implicitních schémat
- Používané metody
  - **Implicitní** a semiimplicitní **Eulerova metoda**
  - Rosenbrockovy metody
    - semiimplicitní tvar metod Rungeho-Kutty
  - Bulirsch-Stoerovy metody
  - GBS metody,
  - vícekrokové Gearovy metody

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 $z(0) = z_0 = 0$.

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

OBYČEJNÉ DIFERENCIÁLNÍ ROVNICE VYŠŠÍCH ŘÁDŮ

Obyčejné diferenciální rovnice vyšších řádů

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

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

- 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

Obyčejné diferenciální rovnice vyšších řádů

- Lineární rovnice řádu n

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

  - Wronského determinant

- Homogenní lineární rovnice

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

  - variace konstant

- Lineární rovnice s konstantními koeficienty

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

  - 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 ve tvaru hyperbolické řady
- Legendreova rovnice

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

  - kde n je celé nezáporné číslo
  - řešení ve tvaru Legendreova polynomu stupně n

Metody řešení ODE 2. řádu – linearizace

- Mějme obyčejnou diferenciální rovnici 2. řádu ve tvaru

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

  - kde $y = y(x)$
  - u $f(x)$ předpokládáme spojitost
    - včetně derivací funkce až do řádu 2

- Můžeme obě strany rovnice dvakrát integrovat:

$$\iint y'' dy\, dy = \iint f(x) dx\, dx$$

  - dostáváme řešení ve tvaru

$$y = \iint f(x) dx\, dx$$

  - provedeme substituci

$$z(x) = \int f(x) dx$$

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

$$y = \int z(x)dx \quad \rightarrow \quad y' = z(x)$$

$$z = \int f(x)dx \quad \rightarrow \quad z' = f(x)$$

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

- Linearizace
  - cílem je snížit řád derivace tím, že provedeme substituci
  - aby bylo možno řešit vzniklou soustavu rovnic pomocí známých metod
  - nevýhodou je zvyšování počtu rovnic

Metody řešení ODE 2. řádu – linearizace

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

$$y'' = \ln x$$

$$y = \iint \ln x \, dx \, dx$$

- pomocí následující substituce $z(x) = \int \ln x \, dx$ získáme sadu dvou diferenciálních rovnic prvního řádu, kterou již umíme vyřešit

$$z(x) = \int \ln x \, dx = x \ln x - x + C_1$$

$$y = \int (x \ln x - x) \, dx$$

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

- Počáteční podmínky $y(x_0) = y_0, \quad z(x_0) = z_0$
- 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

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

Lineární harmonický oscilátor

- Pohybová rovnice

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + kx = 0$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0$$

  - řešíme charakteristickou rovnici

$$\lambda^2 + \omega^2 = 0$$

$$\lambda_1 = i\omega, \quad \lambda_2 = -i\omega$$

$$x(t) = c_1\, e^{\lambda_1 t} + c_2\, e^{\lambda_2 t} = c_1\, e^{i\omega t} + c_2\, e^{-i\omega t} = x_0 \cos\left(\omega t + \varphi\right)$$

Tlumený kmitavý pohyb

- Pohybová rovnice

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + b\frac{dx}{dt} + kx = 0$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} + 2\delta\frac{dx}{dt} + \omega^2 x = 0$$

- řešíme charakteristickou rovnici

$$\lambda^2 + 2\delta\lambda + \omega^2 = 0 \qquad \lambda_{1,2} = \frac{-2\delta \pm \sqrt{4\delta^2 - 4\omega^2}}{2} = -\delta \pm \sqrt{\delta^2 - \omega^2}$$

- a) $\delta^2 - \omega^2 > 0$

$$x(t) = c_1\, e^{\lambda_1 t} + c_2\, e^{\lambda_2 t} = c_1\, e^{\left(-\delta+\sqrt{\delta^2-\omega^2}\right)t} + c_2\, e^{\left(-\delta-\sqrt{\delta^2-\omega^2}\right)t}$$

- b) $\delta^2 - \omega^2 < 0$

$$x(t) = c_1\, e^{\lambda_1 t} + c_2\, e^{\lambda_2 t} = c_1\, e^{\left(-\delta+i\sqrt{\omega^2-\delta^2}\right)t} + c_2\, e^{\left(-\delta-i\sqrt{\omega^2-\delta^2}\right)t} =$$

$$x(t) = e^{-\delta t}\left(c_1\, e^{i\omega_b t} + c_2\, e^{-i\omega_b t}\right) = x_0 e^{-\delta t}\cos\left(\omega_b t + \varphi\right) \qquad \omega_b = \sqrt{\omega^2 - \delta^2}$$

Nucené kmitání

- Vyřešte následující diferenciální rovnici 2. řádu
  - příp. soustavu diferenciálních rovnic pomocí symbolické a numerické matematiky

$$\frac{dx}{dt} = v$$

$$\frac{dv}{dt} = -2\delta\frac{dx}{dt} - \omega^2 x + f_0 \sin(\Omega t)$$

$$\frac{dv}{dt} = a$$

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + b\frac{dx}{dt} + kx = F_0 \sin(\Omega t)$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} + 2\delta\frac{dx}{dt} + \omega^2 x = f_0 \sin(\Omega t)$$

  - kde $\omega = 1,\ 2\delta = 0.05,\ \ f_0 = 2,\ \ \ \Omega = 0.63$

- Uvažujte počáteční podmínky
  - $x = 3$
  - $v = 0$

- Postupně zkuste měnit parametry ω, β, F_0 a Ω a porovnejte jejich vliv na řešení