Modellering i naturvidenskab

Jon Sporring

Department of Computer Science
University of Copenhagen

24. oktober 2013

Differentialligninger

Definition

En *differentialligning* er en ligning, der indeholder mindst et led, der er den afledte af en funktion.

New Zealands dræberkaniner

Example

- På New Zealand (NZ) findes ingen rovdyr.
- Antag at $y(t)$ beskriver antal kaniner på NZ til tiden t.
- Antag at hver hun får 20 unge per år, og at halvdelen er hunner, så vil vækstraten for kaninpopulatinen per år er 10.
- Antag desuden at kaniner lever evig.
- Så er væksten i antal kaniner på NZ udtrykt ved differentialligningen
$$\frac{dy(t)}{dt} = 10y(t)$$
- Antag at vi starter med 2 kaniner, dvs, $y(t_0) = 2$.

Løsning af differentialligningen

Denne differentialligningen kan løses analytisk. Generelt,

$$\frac{dy(t)}{dt} = cy(t), \text{ eller } \frac{dy}{dt} = cy,$$

med $y > 0$. Vi separerer de variable, y og t på hver sin side af lighedstegnet,

$$\frac{1}{y}\,dy = c\,dt$$

og integrer begge sider:

$$\int \frac{1}{y}\,dy = \int c\,dt$$

Hvilket giver,

$$\ln y = ct + C,$$

For en ukendt konstant, C.

$$y = e^{\ln y} = e^{ct+C} = e^{ct}e^{C} = Ae^{ct}$$

For en anden ukendt konstant, $A = e^{C}$.

Løsning af differentialligningen (fortsat)

For

$$\frac{dy}{dt} = cy,$$

med $y > 0$, fand vi at løsningen har formen

$$y(t) = A \cdot e^{ct}.$$

Kender vi begyndelsespunktet, $y(0) = y_0$, får vi

$$y_0 = y(0) = Ae^0 = A,$$

og dermed,

$$y(t) = y_0 e^{ct}.$$

Example

I eksemplet fra NZ havde vi at $c = 10$ og $y_0 = 2$, altså at,

$$y_{\mathrm{NZ}}(t) = 2e^{10t}.$$

Løsning af vækst/henfaldsproblemer

Definition

Et hvilket som helst vækst/henfaldsproblem, hvor vækstraten c er proportionel med populationen y, kan beskrives ved en differentialligning

$$\frac{dy}{dt} = c \cdot y,$$

med løsning $y(t) = y_0 \cdot e^{c \cdot t}$.

Kaniner er et stor problem i New Zealand

Example

Video af mange kaniner

Seneste bekæmpelsestiltag: Biologisk krigsførsel. Antag at en virus afliver 1000 dyr om året. Nu er ligningen,

$$\frac{dy(t)}{dt} = 10y(t) - 1000$$

Ved variabelskift, $z(t) = y(t) - 100$ har vi,

$$\frac{dy(t)}{dt} = \frac{dz(t)}{dt} = 10z(t)$$
$$\Rightarrow z(t) = Ae^{10t} \Rightarrow y(t) = Ae^{10t} + 100;$$

Begyndelsesbetingelser:

$$y_0 = 2 \Rightarrow A = -98; \quad y_0 = 100 \Rightarrow A = 0; \quad y_0 = 1000 \Rightarrow A = 900;$$

En bakterie i vand (fortsat)

Definition

Den generelle form,

$$\frac{dv}{dt} = \alpha v + \beta$$

Løser ved variabel skift, $w = v + \beta/\alpha$, således at

$$\frac{dv}{dt} = \frac{dw}{dt} = \alpha w$$

og finder at $w(t) = Ae^{\alpha t} \Rightarrow v(t) = Ae^{\alpha t} - \beta/\alpha$.

Udrydelse kræver negativ vækst

Example

Hvis dyrene skal væk igen kræver det at rovdyr/virus/fælder fjerne flere end der kommer til, altså,

$$\frac{dy(t)}{dt} = ay(t) - by(t) = (a - b)y(t) = -cy(t)$$

for $b > a$. I så fald

$$\frac{dy(t)}{dt} = -cy(t) \Rightarrow y(t) = Ae^{-ct}$$

Igen $A = y(0)$, men nu $y(t) \to 0$ når $t \to \infty$.

En bakterie i vand

Example

En kugleformet bakterie med en radius på $r = 0.5\,\mu$m (10^{-6}m) vil mærke modstand fra vandet som en kraft $f_{\text{vand}} = -6\pi\eta r v$, hvor v er dets hastighed(-svektor) og $\eta = 10^{-3}\frac{\text{N s}}{m^2}$. Antag at dets masse er $M = 1$pg (10^{-12}g), og at dets tophastighed er 100 gange dets længde i sekundet. Hvilken kraft må den i så fald udøve?

Definition

$$\text{Newton II: } f = Ma; \quad a = \frac{dv}{dt}; \quad v = \frac{dp}{dt}$$

$$\text{Newton III: } F = \sum_i f_i$$

En bakterie i vand (fortsat)

Example

Vi antager bakterient udøver en ukendt kraft f, skriver $f_{\text{vand}} = -cv$, og indsætter i Newton III,

$$F = f - cv$$

og ved at indsætte i Newton II,

$$F = Ma = M\frac{dv}{dt} = f - cv \Rightarrow \frac{dv}{dt} = \frac{1}{M}(f - cv)$$

Den er altså på den generelle form,

$$\frac{dv}{dt} = \alpha v + \beta$$

med $\alpha = -c/M$ og $\beta = f/M$

En bakterie i vand (fortsat)

Example

Vi havde $\alpha = -c/M$ og $\beta = f/M$ og benytter $v(t) = Ae^{\alpha t} - \beta/\alpha$

$$\begin{aligned} v(t) &= Ae^{\alpha t} - \frac{\beta}{\alpha} \\ &= Ae^{-\frac{c}{M}t} + \frac{f}{c} \end{aligned}$$

hvor $M = 10^{-12}$g og $c = 9.4 \cdot 10^{-9}\frac{\text{N s}}{\text{m}}$. I grænsen,

$$\begin{aligned} \lim_{t\to\infty} v(t) &= \frac{100\mu\text{m}}{\text{s}} = \frac{f}{c} \\ \Rightarrow f &= \frac{100\mu\text{m}}{\text{s}} c = 9.4\,10^{-13}\text{N} \end{aligned}$$

Begrænset vækst

Example

Tilbage til kaninerne, antag at mængden føde er begrænset, således at der maksimalt kan eksisterer y_{max} kaniner. Dette kunne vi modellere ved,

$$\frac{dy}{dt} = cy(y_{\text{max}} - y)$$

for $c > 0$. Altså at væksten stopper når $y = y_{\text{max}}$. Vi separerer de variable,

$$\int c\,dt = \int \frac{1}{y(y_{\text{max}} - y)} dy = \int \left(\frac{A}{y} + \frac{B}{y_{\text{max}} - y} \right) dy$$

Ved at sætte på fælles brøkstreg må $1 = A(y_{\text{max}} - y) + By$, for all værdier af y, f.eks.

$$y = y_{\text{max}} \Rightarrow B = 1/y_{\text{max}}; \qquad y = 0 \Rightarrow A = 1/y_{\text{max}}$$

Begrænset vækst

Example

Vi søger integralet på højre og venstre side,

$$\int c\,dt = ct + C = \int \left(\frac{1/y_{\max}}{y} + \frac{1/y_{\max}}{y_{\max} - y} \right) dy$$

$$= \frac{1}{y_{\max}} \left(\ln y - \ln(y_{\max} - y) \right) = \frac{1}{y_{\max}} \ln \frac{y}{y_{\max} - y}$$

og derefter løser vi for y,

$$e^{y_{\max} ct + D} = \frac{y}{y_{\max} - y} \Rightarrow e^{y_{\max} ct + D}(y_{\max} - y) = y$$

$$\Rightarrow e^{y_{\max} ct + D} y_{\max} = y(1 + e^{y_{\max} ct + D}) \Rightarrow y = \frac{y_{\max}}{(e^{-y_{\max} ct - D} + 1)}$$

For begyndelsesbetingelse, $y_0 = y(0) = y_{\max}/(e^{-D} + 1)$, altså $e^{-D} = y_{\max}/y_0 - 1$.

Logistisk ligning

Definition

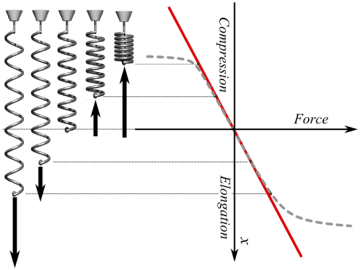
Den logistiske ligning,

$$\frac{dy}{dt} = cy(y_{\max} - y)$$

med begyndelsesbetingelse $y_0 = y(0)$, har løsning

$$y = \frac{y_{\max}}{1 + (y_{\max}/y_0 - 1)e^{-y_{\max}ct}}$$

Hookes lov



Definition

Hookes lov: Givet en fjeder, der er fastsat i den ene ende og bevæges langs akse x, hvor $x = 0$ er fjederens hviletilstand og $x >$ er udtrækningsretningen. Fjederen bliver ikke påvirket af andre kræfter. I det tilfælde er Hookes lov, $k > 0$,

$$\text{Hookes lov: } F = -kx(t).$$

Hooke's lov

Example

Antag,

$$-kx(t) = F = ma = m\frac{d^2x(t)}{dt}$$

hvor $k > 0$ er en konstant. Generelt gælder at,

$$cos''(ct) = -c^2 cos(ct), \quad sin''(ct) = -c^2 sin(ct)$$

Altså gætter vi på løsningen, $x(t) = a\cos(ct) + b\sin(ct)$, og finder

$$x''(t) = -ac^2\cos(ct) + -bc^2\sin(ct) = c^2x(t)$$

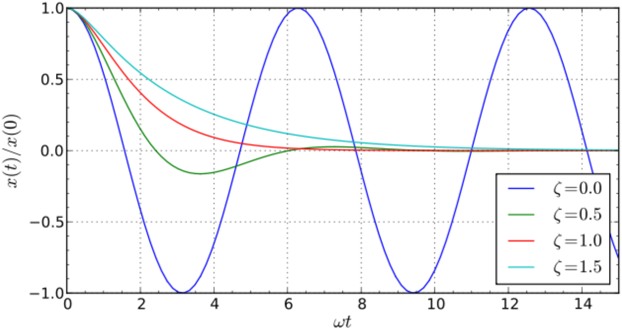
med $c^2 = -k/m$.
Demo: `http://en.wikipedia.org/wiki/File:Simple_harmonic_motion_animation.gif`

Dæmpet harmonisk oscillator

En dæmpet harmonisk oscillator finder man, ved at tilføje 'vandmodstand'

Definition

Dæmpet harmonisk oscillator: $F = -kx(t) - cv(t)$.



Differensligning = approks. af differentialligning

Definition

Differensligninger bruger små trin til at approksimere den afledte i stedet for en infinitesimal løsning (uendelig små trin).

Example

Differentialligningen

$$\frac{dk(t)}{dt} = 2k(t)$$

giver en differensligning

$$\begin{aligned} \frac{k(t+\Delta t) - k(t)}{\Delta t} &= 2k(t), \\ \Rightarrow \Delta k(t) = k(t+\Delta t) - k(t) &= 2k(t)\Delta t. \end{aligned}$$

Dvs.,

$$\underbrace{k(t+\Delta t)}_{ny\ population} = \underbrace{k(t)}_{gammel\ population} + \underbrace{2k(t)\Delta t}_{forandring\ i\ population}.$$

Differensligninger fra Taylorrækken

Theorem

Betragt funktionen $f(x)$, og antag at dens $(n+1)$ afledede $f^{(n+1)}(x)$ er kontinuerte for $x_L < x < x_R$. I så fald, for $x, x+k \in (x_L, x_r)$,

$$f(x+k) = \sum_{i=0}^{n} \frac{1}{i!} f^{(i)} k^i + R_{n+1}$$

hvor resten R er givet ved,

$$R_{n+1} = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) k^{n+1}$$

og $x < \xi < x+k$.

Taylorrækken: funktioner på polynomierform

Example

Hvis f.eks. $f(x) = ax^2 + bx + c$, så er,

$$f'(x) = 2ax + b, \qquad f''(x) = 2a, \qquad f^{(n)}(x) = 0, \quad n > 2.$$

Taylorrækken omskriver f fra variabel x til k, altså vi holder $x = x_0$ fast og varierer k,

$$\begin{aligned} f(x_0 + k) &= f(x_0) + f'(x_0)k + \frac{1}{2}f''(x_0)k^2 \\ &= (ax_0^2 + bx_0 + c) + (2ax_0 + b)k + \frac{1}{2}2ak^2 \end{aligned}$$

Hvis vi f.eks. udvikler omkring $x_0 = 0$, så

$$f(k) = c + bk + ak^2$$

Taylorrækken: Funktioner på polynomierform

Example

Fortsat fra forige slide,

$$f(x_0 + k) = (ax_0^2 + bx_0 + c) + (2ax_0 + b)k + \frac{1}{2}2ak^2.$$

Hvis vi istedet udvikler omkring $x_0 = 2$, så

$$f(k) = (4a + 2b + c) + (4a + b)k + ak^2,$$

hvilket svarer til koordinattransformationen $y = x + 2$,

$$\begin{aligned} f(y) &= ay^2 + by + c \\ &= a(x+2)^2 + b(x+2) + c \\ &= ax^2 + 4a + 4xa + bx + 2b + c, \\ &= ax^2 + (4a + b)x + 4a + 2b + c, \end{aligned}$$

Taylorrækken: Ordensanalyse forbinder differenser med afledede

Betragt Taylorækken,

$$f(x+k) = f(x) + f'(x)k + R_2.$$

Antag at $f'(x) \neq 0$, så er forholdet mellem R_2 og $f'(x)k$

$$\frac{R_2}{f'(x)k} = \frac{\frac{1}{2}f''(\xi)k^2}{f'(x)k} = \frac{\frac{1}{2}f''(\xi)k}{f'(x)} \leq \frac{\frac{1}{2}Fk}{f'(x)}$$

hvor $F = \max_\xi f''(\xi) < \infty$ er den største værdi i intervallet. Dvs. ved det n'te led dominerer de m'te, $m > n$, led vilkårligt meget ved passende lille k. Derfor,

Theorem

$$f'(x) = \lim_{k \to 0} \frac{f(x+k) - f(x)}{k}$$

Taylorrækken: Afledede har mange approximationer

Der er mange approximationer af f' fra Taylorrækken, f.eks.

$$\begin{aligned} f(x+k) &= f(x) + f'(x)k + R_2. \\ f(x-k) &= f(x) - f'(x)k + Q_2. \\ f(x+k) - f(x-k) &= 2f'(x)k + R_2 - Q_2. \end{aligned}$$

Giver anledning til,

$$\begin{aligned} f'_{\text{forward}}(x) &\simeq \frac{f(x+k)-f(x)}{k} \\ f'_{\text{backward}}(x) &\simeq \frac{f(x)-f(x-k)}{k} \\ f'_{\text{central}}(x) &\simeq \frac{f(x+k)-f(x-k)}{2k} \end{aligned}$$

Billedbehandling med varmeledning

Definition

Varmeledning kan udtrykkes ved ligningen,

$$\partial_t I(x,y,t) = c(\partial_{xx} I(x,y,t) + \partial_{yy} I(x,y,t))$$

$$\begin{aligned}
\partial_t I(x,y,t) &= c(\partial_{xx} I(x,y,t) + \partial_{yy} I(x,y,t)) \\
\partial_t I(x,y,t) &\simeq D_t(I(x,y,t)) = \frac{I(x,y,t+\Delta t) - I(x,y,t)}{\Delta t} \\
\partial_{xx} I(x,y,t) &\simeq D_{xx}(I(x,y,t)) \\
&= \frac{I(x+\Delta x,y,t) - 2I(x,y,t) + I(x-\Delta x,y,t)}{\Delta x^2} \\
\Rightarrow I(x,y,t+\Delta t) &\simeq I(x,y,t) + c\Delta t \left(D_{xx}(I(x,y,t)) + D_{yy}(I(x,y,t)) \right)
\end{aligned}$$

`noiseRemoval.m, ild.m`

Isotropisk men ikke-lineær diffusion

$$\partial_t I(x, y, t) = \nabla_{x,y} \cdot (c(x, y)\nabla_{x,y} I(x, y, t))$$

$$\nabla_{x,y} = \begin{bmatrix} \partial_x \\ \partial_y \end{bmatrix}$$

$$\nabla_{x,y} \cdot \nabla_{x,y} = \partial_x\partial_x + \partial_y\partial_y = \partial_{xx} + \partial_{yy}$$

$$\partial_t I = \nabla_{x,y} c \cdot \nabla_{x,y} I + c\nabla_{x,y} \cdot \nabla_{x,y} I$$

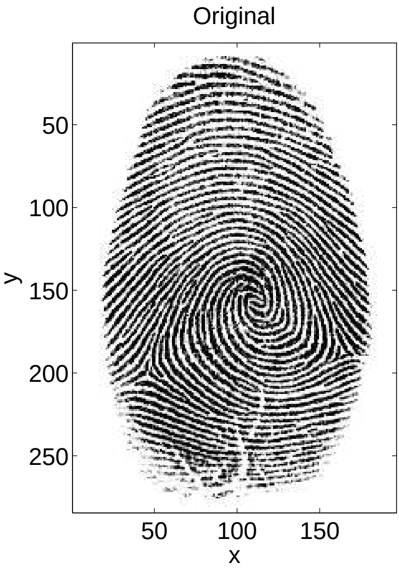
$$c = 1 - exp\left(\frac{-3.31488}{\left(\epsilon + \left(\|\nabla_{x,y} I\|/\lambda\right)^8\right)}\right)$$

[P. Perona and J Malik. "Scale-space and edge detection using anisotropic diffusion". Proceedings of IEEE Computer Society Workshop on Computer Vision, pp. 16–22]

[J. Weickert. "A Review of Nonlinear Diffusion Filtering". Scale-Space Theory in Computer Vision. Springer, LNCS 1252. pp. 1–28.]

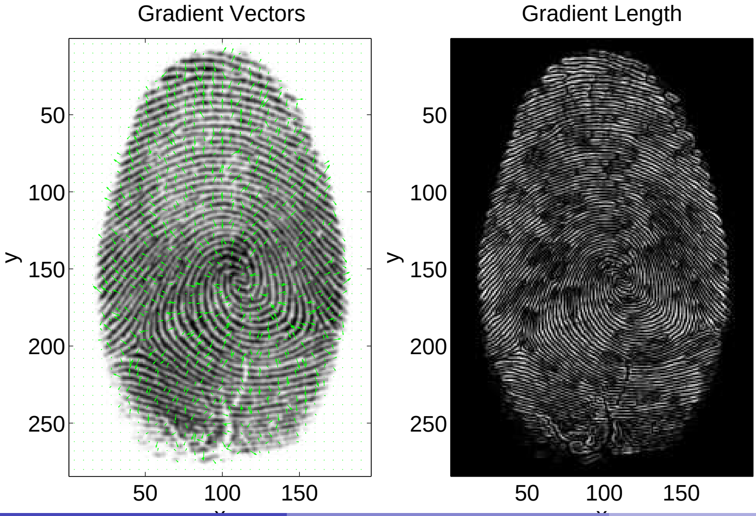
`noiseRemoval.m - ind.m`

Udglatning langs strukturer?



Gradienten peger med størst ændring

$$\nabla_{x.y} I(x,y) = \begin{bmatrix} \partial_x I(x,y) \\ \partial_y I(x,y) \end{bmatrix}$$



Structure Tensor er orientering og robust

Ikke-isotropisk, non-lineær udglatning:

$$\partial_t I(x,y,t) = \nabla_{x,y} \cdot (\mathbf{C} \nabla_{x,y} I(x,y,t))$$

[J. Weickert, Anisotropic diffusion in image processing, Teuber Verlag, Stuttgart, 1998.]

Struktur Tensor:

$$\mathbf{S} = g_{\sigma_2} \star \begin{bmatrix} (I_{x,\sigma_1})^2 & I_{x,\sigma_1} I_{y,\sigma_1} \\ I_{x,\sigma_1} I_{y,\sigma_1} & I_{y,\sigma_1}^2 \end{bmatrix}$$

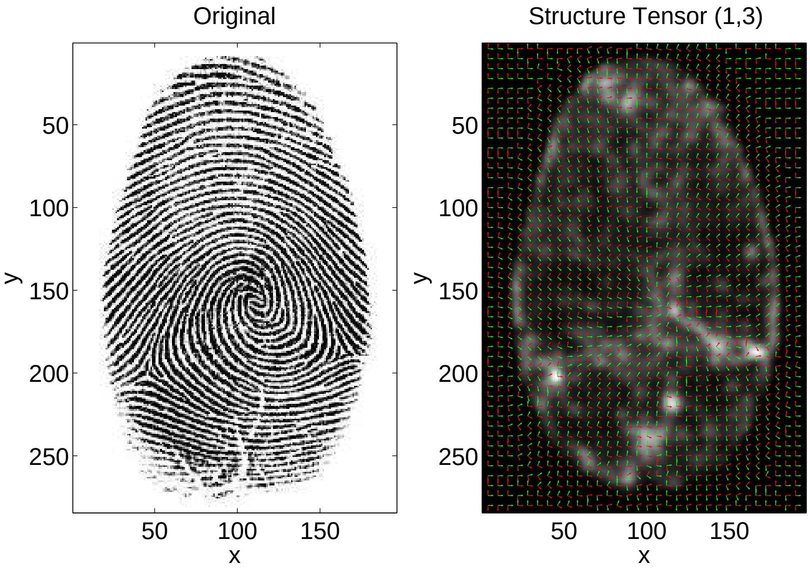
Eigenværdier og -vektorere (`structureTensor.mw`)

$$\mathbf{S}\vec{v} = \lambda \vec{v}$$

Antag $\lambda_1 \geq \lambda_2$:

$\lambda_1 = \lambda_2$	Flat område
$\lambda_1 \gg \lambda_2 = 0$	Lige kant
$\lambda_1 \geq \lambda_2 \gg 0$	Hjørne

Struktur Tensor



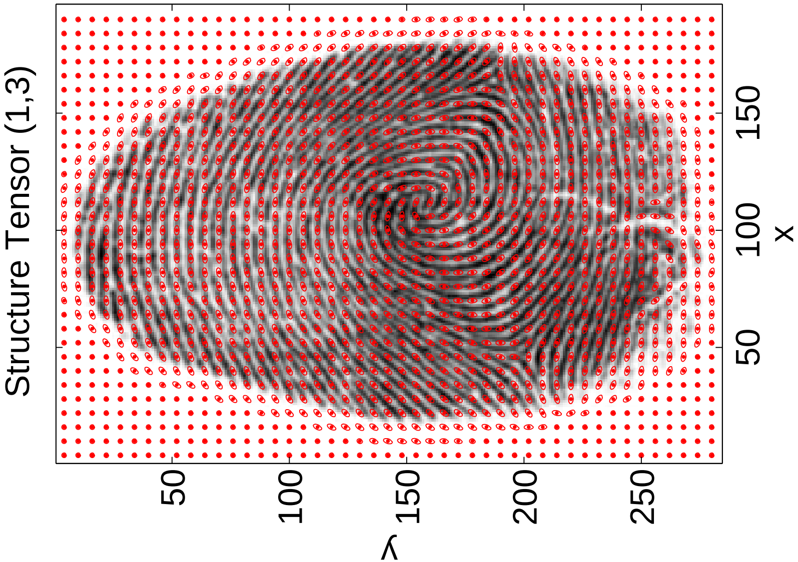
Coherence-Enhancing diffussion

$$\lambda_1^* = \alpha$$

$$\lambda_2^* = \alpha + \begin{cases} 0 & \text{hvis } \lambda_1 = \lambda_2 \\ (1-\alpha)\exp\left(\frac{-C}{(\lambda_1-\lambda_2)^2}\right) & \text{ellers} \end{cases}$$

$$\mathbf{C} = \mathbf{V} \begin{bmatrix} \lambda_1^* & 0 \\ 0 & \lambda_2^* \end{bmatrix} \mathbf{V}^T$$

Coherence-Enhancing diffussion



Coherence-Enhancing diffussion