

# POČÍTAČOVÁ CVIČENÍ

## ŠKOLA MATEMATICKÉHO MODELOVÁNÍ

### 2013

Petr Beremlijski, Marie Sadowská, Matyáš Theuer



evropský  
sociální  
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,  
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání  
pro konkurenceschopnost

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ



# POČÍTAČOVÁ CVIČENÍ

## ŠKOLA MATEMATICKÉHO MODELOVÁNÍ

Petr Beremlijski, Marie Sadowská, Matyáš Theuer



Katedra  
aplikované matematiky

Katedra aplikované matematiky  
Fakulta elektrotechniky a informatiky  
VŠB - Technická univerzita Ostrava  
2013

*Tato akce byla podpořena z prostředků projektu Matematika s radostí (registrační číslo CZ.1.07/1.1.00/26.0042). Jeho webová stránka je <http://msr.vsb.cz>.*



evropský  
sociální  
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,  
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání  
pro konkurenceschopnost

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Abychom se mohli věnovat numerickému řešení matematických úloh, potřebujeme vhodné prostředí, které nám to umožní. A tak jako fyzici či chemikové mají své laboratoře, mají i numeričtí matematici svou Maticovou laboratoř<sup>1</sup> - Matlab. Podrobně se tomuto pracovnímu prostředí a jeho příkazům věnuje přiložený Matlabovský slabikář [6] nebo také úvod textu [4]. My si v tomto textu uvedeme pouze stručný přehled matlabovských proměnných a příkazů, kterým se budeme věnovat.

### Prostředí

- *help, demos, intro, who, whos, clear, size, length*

### Proměnné

- Skaláry
- Vektory
- Matice

### Příkazy

- Skalární funkce - *sin, cos, tan, cot, exp, log, abs, sqrt, round*
- Vektorové funkce a generování vektorů - *max, min, sort*
- Maticové funkce a generování matic - *det, rand, ones, zeros, eye*
- Skalární operace - *+, -, \*, /, ^*
- Maticové a vektorové operace - *+, -, \*, ' (transponování), \ (A\v = x \Leftrightarrow Ax = v)*  
Operace „po prvcích“ - *.\*, .^, ./*
- 2D grafika (vykreslení grafů funkcí jedné proměnné) - *plot, hold on, hold off, figure*
- 3D grafika (vykreslení grafů funkcí dvou proměnných) - *meshgrid, mesh, contour, hold on, hold off, figure*
- Řídící příkazy - *if* (podmíněný příkaz), *for, while* (příkazy cyklu se známým počtem opakování a podmínkou na začátku)
- Relace a logické operace - *<, >, <=, >=, ==, ~=, &, |, ~*
- Skripty a funkce - *function*

---

<sup>1</sup>MATrix LABoratory

Vše si nyní vyzkoušíme při řešení následujících úloh.

**Úkol 1.1** Kolik členů harmonické řady<sup>2</sup> musíme nejméně sečíst, aby tento částečný součet řady měl hodnotu alespoň 10 (15, 20)?

**Úkol 1.2** Zkuste odhadnout s využitím Matlabu součet řady

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{1}{n} \cdot \frac{1}{n+1} \right).$$

**Úkol 1.3** Sestrojte grafy následujících funkcí:

- $f(x) := x^2$
- $f(x) := \sqrt{1-x^2}$
- $f(x) := x^2 \sin\left(\frac{1}{x^2}\right)$
- $f(x) := |x|$

**Úkol 1.4** Sestrojte grafy následujících funkcí:

- $f(x, y) := x^2 + y^2$
- $f(x, y) := \sqrt{x^2 + y^2}$
- $f(x, y) := (x^2 + y^2) \sin\left(\frac{1}{x^2 + y^2}\right)$
- $f(x, y) := \sqrt{|xy|}$

---

<sup>2</sup>Řadou (reálných čísel) rozumíme výraz  $a_1 + a_2 + \dots + a_n + \dots =: \sum_{n=1}^{\infty} a_n$ , kde pro každé  $n \in \mathbb{N}$  je  $a_n \in \mathbb{R}$ . Harmonickou nazýváme řadu  $\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n}$ .

V tomto cvičení se seznámíme s tzv. optimalizačními úlohami, ukážeme si jejich praktickou aplikaci a také jak je lze numericky řešit.

Optimalizační úlohy vznikají často při řešení praktických úloh. Matematicky jsou tyto úlohy obvykle formulovány jako problémy hledání extrémů cenové funkce, což je funkce  $f : D_f \rightarrow \mathbb{R}$  definovaná na množině  $D_f$  (tuto množinu nazýváme definiční obor funkce). Extrémy cenové funkce často hledáme na přípustné množině  $\Omega \subseteq D_f$ . Jelikož bod, v němž funkce  $f$  nabývá svého minima, je stejný jako bod, v němž funkce  $-f$  nabývá svého maxima, můžeme za obecnou úlohu optimalizace považovat problém najít  $\bar{x} \in \Omega$  tak, aby platilo

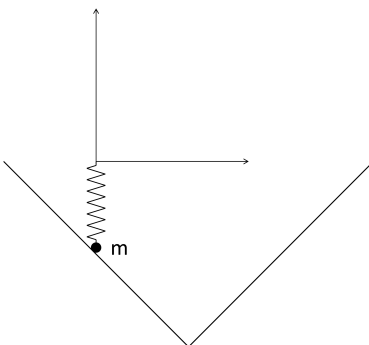
$$f(\bar{x}) \leq f(x), \quad x \in \Omega.^3 \quad (1)$$

Pokud je  $\Omega = D_f$ , mluvíme o optimalizaci bez omezení. Pokud pro  $\Omega$  platí  $\Omega \subseteq D_f$  a  $\Omega \neq D_f$ , mluvíme o optimalizaci s omezením.

Příkladem optimalizační úlohy bez omezení je například problém nalezení rovnovážné polohy kuličky hmotnosti  $m$  volně zavěšené na pružině. Příkladem optimalizační úlohy s omezením je problém nalezení rovnovážné polohy kuličky hmotnosti  $m$  zavěšené na pružině, která visí nad překážkou (pružina je uchycena v obou případech v bodě  $[0; 0]$ ). Tyto problémy můžeme vyjádřit jako minimalizaci funkce potenciální energie tohoto systému. V prvním případě je  $\Omega = \mathbb{R}^2$ , v druhém případě přípustná množina  $\Omega$  popisuje nepronikání kuličky do překážky. Tyto úlohy pak zapíšeme jako úlohu najít  $\bar{x} \in \Omega$  tak, aby platilo

$$f(\bar{x}) \leq f(x), \quad x \in \Omega, \quad (2)$$

kde  $f(x) = x_1^2 + x_2^2 + mx_2$  a  $\Omega = \mathbb{R}^2$  nebo  $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^2 : x_1 + x_2 + 1 \geq 0, -x_1 + x_2 + 3 \geq 0\}$  (pro druhou úlohu viz obrázek 1).



Obrázek 1: Rovnovážný stav kuličky na pružině

---

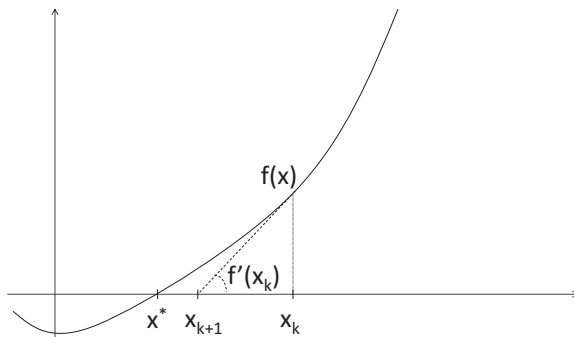
<sup>3</sup>Tuto úlohu můžeme zadat také takto: „Řešte úlohu  $\min f(x), x \in \Omega$ .“

Odkazy na obecně formulované optimalizační úlohy najdeme již ve starověku. Patří mezi ně i Didonina<sup>4</sup> úloha. Dido měla dostat pruh kůže z jednoho vola s tím, ať si vybere pozemek, který lze tímto pruhem omezit. Snaha získat co největší pozemek vede na problém najít spojitou křivku dané délky, která ohraničuje největší plochu.

Dále se budeme zabývat numerickým řešením optimalizačních úloh.

### Metody řešení úloh bez omezení

Pro úlohu (1) existuje řada přístupů, jak ji numericky řešit. Pro „pěkné“ funkce je velmi efektivní Newtonova metoda. K tomu si ale nejprve odvodíme iterační metodu pro hledání řešení rovnice. Tato metoda (nazývá se také Newtonova) je založena na využití derivace. Předpokládejme, že v  $k$ -tém kroce iterační metody máme bod aproximující řešení rovnice  $f(x) = 0$ . Tento bod označíme  $x_k$ . Dále předpokládejme, že známe funkční hodnotu funkce  $f$  v bodě  $x_k$  a derivaci funkce  $f$  v bodě  $x_k$ . Nyní chceme učinit  $k+1$ -ní krok metody a nalézt bod  $x_{k+1}$ , který „lépe“ aproximuje řešení rovnice  $f(x) = 0$ . Využitím vlastnosti derivace dostaneme z pravoúhlého trojúhelníku v obrázku 2 následující vztah



Obrázek 2: Newtonova metoda

$$f'(x_k) = \frac{f(x_k)}{x_k - x_{k+1}}. \quad (3)$$

Rovnici (3) snadno upravíme do tvaru

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}. \quad (4)$$

Tím dostáváme předpis, jehož opakovaným použitím dostáváme zpřesňující se aproximaci řešení  $x^*$  rovnice  $f(x) = 0$ . Pomocí tohoto předpisu získáme následující algoritmus pro

---

<sup>4</sup>Dle legendy byla Dido zakladatelka starověkého Kartága.



iterační řešení rovnice  $f(x) = 0$ .

**Algoritmus 2.1** (Newtonova metoda (pro řešení rovnice s jednou neznámou))

1.  $\varepsilon > 0$  (přesnost)  
 $x_0$  (počáteční bod iteračního procesu)  
 $k = 0$   
 $x_1 = x_0 - f(x_0)/f'(x_0)$
2. while  $|x_{k+1} - x_k| \geq \varepsilon$   
 $k = k + 1$   
 $x_{k+1} = x_k - f(x_k)/f'(x_k)$   
end
3.  $x_{k+1}$  aproximuje s danou přesností řešení rovnice  $f(x) = 0$

Nyní využijeme předpisu (4) pro hledání extrému funkce  $f$ . Protože pro funkce  $f$ , které mají v celém svém definičním oboru derivaci, platí, že extrémy této funkce jsou uvnitř definičního oboru v bodech splňujících  $f'(x) = 0$ , budeme numericky hledat řešení rovnice  $f'(x) = 0$ . Použitím předpisu (4) obdržíme

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}. \quad (5)$$

Pokud bude funkce  $f$  navíc konvexní v celém svém definičním oboru, pak uvedený postup nalezne minimum funkce. Vše shrneme do následujícího algoritmu.

**Algoritmus 2.2** (Newtonova metoda (pro minimalizaci funkce jedné proměnné))

1.  $\varepsilon > 0$  (přesnost)  
 $x_0$  (počáteční bod iteračního procesu)  
 $k = 0$   
 $x_1 = x_0 - f'(x_0)/f''(x_0)$
2. while  $|x_{k+1} - x_k| \geq \varepsilon$   
 $k = k + 1$   
 $x_{k+1} = x_k - f'(x_k)/f''(x_k)$   
end
3.  $x_{k+1}$  aproximuje s danou přesností minimum funkce  $f(x)$

Zobecněním předpisu (5) pro funkce více proměnných získáme metodu pro minimalizaci funkce více proměnných. Zobecněním první derivace je vektor všech prvních parciálních derivací, který nazýváme gradient a označujeme jej  $\nabla f(x)$ . Zobecněním druhé derivace je matice všech druhých parciálních derivací, kterou nazýváme Hessova matice nebo Hessián a značíme ji  $\nabla^2 f(x)$ . Absolutní hodnotu  $|x|$  zobecníme na normu  $\|x\|$  (norma je definována jako  $\|x\| \stackrel{\text{def.}}{=} \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2}$ ). Vše opět přepíšeme do algoritmu.

**Algoritmus 2.3** (Newtonova metoda (pro minimalizaci funkce více proměnných))

1.  $\varepsilon > 0$  (přesnost)  
 $x_0$  (počáteční bod iteračního procesu)  
 $k = 0$   
 $x_1 = x_0 - (\nabla^2 f(x_0))^{-1} \cdot \nabla f(x_0)$
2. while  $\|x_{k+1} - x_k\| \geq \varepsilon$   
 $k = k + 1$   
 $x_{k+1} = x_k - (\nabla^2 f(x_k))^{-1} \cdot \nabla f(x_k)$   
end
3.  $x_{k+1}$  aproximuje s danou přesností minimum funkce  $f(x)$

Poznamenejme, že  $(\nabla^2 f(x_k))^{-1}$  značí inverzní matici k matici  $\nabla^2 f(x_k)$ .

### Metody řešení úloh s omezeními

Velmi jednoduchá metoda převedení úlohy s omezením spočívá v zahrnutí nerovnostních podmínek obsažených v popisu přípustné množiny  $\Omega$  do cenové funkce tak, že k ní přičteme vhodný člen, který penalizuje porušení nerovnostních podmínek. Omezíme se zde na nejčastěji používanou metodu kvadratické penalty, která aproximuje řešení  $\hat{x}$  úlohy řešením  $\hat{x}_\rho$  úlohy

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f_\rho(x), \quad f_\rho(x) = f(x) + \frac{1}{2} \rho \|\alpha(x)\|^2, \quad \alpha(x) = \max\{g(x), 0\}^5, \quad (6)$$

kde  $\rho > 0$  je penalizační parametr a  $\|\alpha(x)\|^2$  je penalizační funkce.

Intuitivně je zřejmé, že když je penalizační parametr  $\rho$  velký, tak řešení  $\hat{x}_\rho$ , ve kterém je dosaženo minimum penalizované funkce  $f_\rho$ , nemůže být daleko od přípustné množiny. Dokonce platí, že kdyby  $\rho = \infty$ , pak by bylo minimum  $f_\rho$  řešením původní úlohy. Můžeme tedy očekávat, že pro dostatečně velké hodnoty penalizačního parametru  $\rho$  bude řešení  $\hat{x}$  úlohy blízko  $\hat{x}_\rho$ . Je zřejmé, že řešení penalizované úlohy je typicky blízko přípustné množiny, avšak nepatří do ní. Proto se naše penalizační metoda nazývá také metoda externí penalty.

**Úkol 2.1** Nalezněte rovnovážnou polohu kuličky hmotnosti  $m$  volně zavěšené na pružině (pružina je uchycena v bodě  $[0; 0]$ ), tj. najděte řešení následující minimalizační úlohy

$$\min x_1^2 + x_2^2 + mx_2, \quad x \in \mathbb{R}^2, \quad (7)$$

kde hmotnost  $m$  volte postupně jako  $m = 1$ ,  $m = 2$ ,  $m = 3$ ,  $m = 4$ ,  $m = 5$  a  $m = 10$ .

**Úkol 2.2** Nalezněte rovnovážnou polohu kuličky hmotnosti  $m$  zavěšené na pružině (pružina je uchycena v bodě  $[0; 0]$ ), která visí nad překážkou, tj. najděte řešení následující

---

<sup>5</sup>Předpokládáme, že množina  $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n : g(x) \leq 0\}$  a  $g$  je vektorová funkce.

minimalizační úlohy

$$\min x_1^2 + x_2^2 + mx_2, \quad x \in \Omega = \{x \in \mathbb{R}^2 : x_1 + x_2 + 1 \geq 0, -x_1 + x_2 + 3 \geq 0\}, \quad (8)$$

kde hmotnost  $m$  volte postupně jako  $m = 1, m = 2, m = 3, m = 4, m = 5$  a  $m = 10$ .

CVIČENÍ 3: TAK JE TO PADĚLEK NEBO TO NENÍ PADĚLEK ANEB  
JAK POZNAT STÁŘÍ NĚKTERÝCH „VERMEEROVÝCH“ OBRAZŮ?

---

V tomto cvičení se pokusíme vytvořit matematický model, který popisuje rozpad atomů radioaktivních prvků. Abychom mohli takovýto model sestavit, potřebujeme pracovat se speciálním typem rovnice - s tzv. diferenciální rovnicí. Podrobně se tomuto typu rovnic věnuje text [5]. Navíc musíme vědět, jak můžeme diferenciální rovnice numericky řešit. Tomu se budeme věnovat nyní.

Obyčejnou diferenciální rovnicí 1. řádu rozumíme rovnici tvaru

$$y'(t) = f(t, y(t)),$$

kde  $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$  je zadaná funkce. Řešením této rovnice na otevřeném intervalu  $(a, b)$  rozumíme každou funkci  $\bar{y}: (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$  ( $a < b$ ) takovou, že pro všechna  $t \in (a, b)$  platí

$$\bar{y}'(t) = f(t, \bar{y}(t)).$$

Například funkce  $\bar{y}(t) = t$ ,  $t \in (0, +\infty)$ , je řešením diferenciální rovnice  $y'(t) = \frac{y(t)}{t}$  na intervalu  $(0, +\infty)$ . Jiným řešením této rovnice na intervalu  $(0, +\infty)$  je například funkce  $\bar{y}(t) = 2t$ ,  $t \in (0, +\infty)$ , či  $\bar{y}(t) = 3t$ ,  $t \in (0, +\infty)$ . Není těžké ukázat, že každá funkce  $\bar{y}_k(t) = kt$ ,  $t \in (0, +\infty)$  ( $k \in \mathbb{R}$ ), je řešením diferenciální rovnice  $y'(t) = \frac{y(t)}{t}$  na intervalu  $(0, +\infty)$ . Naše úloha má nekonečně mnoho řešení. Zkusme navíc přidat k naší rovnici například podmínku  $y(1) = 2$ , tj. chceme nalézt funkci, která řeší naši rovnici a navíc její funkční hodnota v  $t = 1$  je rovna 2. Lze ukázat, že taková úloha má na  $(0, +\infty)$  pouze jediné řešení  $\bar{y}(t) = 2t$ .

Úlohu, která se skládá z hledání řešení obyčejné diferenciální rovnice 1. řádu, které má navíc splňovat tzv. počáteční podmínku  $y(t_0) = y_0$ , nazýváme Cauchyovou úlohou a zapisujeme ji obecně takto:

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)), \\ y(t_0) = y_0. \end{cases} \quad (9)$$

Pokud má funkce  $f(t, y(t))$  speciální tvar<sup>6</sup>, pak existují metody, jak analyticky řešit výše popsanou Cauchyovu úlohu. Často však analytické řešení nalézt nelze nebo by jeho nalezení bylo příliš náročné. V takovém případě se nabízí použití některé z numerických metod pro přibližné řešení diferenciálních rovnic 1. řádu s počáteční podmínkou. Podívejme se nyní na jednu z těchto metod – Eulerovu metodu<sup>7</sup>. O funkci  $f$  budeme dále předpokládat, že je v množině  $D = \{(t, y) \in \mathbb{R}^2 : t_0 \leq t\}$  spojitá a také jsou v  $D$  spojitě derivace této funkce podle proměnné  $y$ .

---

<sup>6</sup>Například  $f$  závisí lineárně na  $y$ , tj.  $f(t, y) = a(t)y + b(t)$ , kde  $a$  a  $b$  jsou reálné funkce.

<sup>7</sup>Publikoval ji významný švýcarský matematik a fyzik Leonhard Euler v roce 1768.

## Eulerova metoda

Eulerova metoda je nejjednodušší způsob numerického řešení Cauchyových úloh. Výstup Eulerovy metody nám aproximuje řešení Cauchyovy úlohy (9) na intervalu  $\langle t_0, t_N \rangle$ . Metoda využívá aproximace derivace<sup>8</sup> funkce  $y$  v bodě  $t$  pomocí tzv. difference  $y$  v tomto bodě

$$y'(t) \approx \frac{y(t+h) - y(t)}{h},$$

kde  $h$  je „malé“.

Po jednoduché úpravě dostaneme

$$y(t+h) \approx y(t) + hy'(t).$$

Použijeme-li (9), pak získáme vztah

$$y(t+h) \approx y(t) + hf(t, y(t)). \quad (10)$$

Dále zvolme „dostatečně malou“ pevnou velikost  $h$  a sestrojme posloupnost

$$t_0, t_1 \stackrel{\text{def.}}{=} t_0 + h, t_2 \stackrel{\text{def.}}{=} t_0 + 2h, \dots, t_N \stackrel{\text{def.}}{=} t_0 + Nh$$

Označme pomocí  $y_n$  aproximaci hodnoty přesného řešení  $y(t_n)$ . Z (10) dostaneme rekurzivní vztah

$$\boxed{\begin{aligned} y_0 &= y(t_0), \\ y_{n+1} &= y_n + hf(t_n, y_n), \quad n = 0, 1, \dots, N, \end{aligned}}$$

který použijeme pro numerické řešení Cauchyovy úlohy (9). Dá se ukázat, že chyba aproximace řešení pomocí Eulerovy metody v bodě  $t_1$  je přímo úměrná druhé mocnině velikosti kroku  $h$ . Chyba aproximace řešení v bodě  $t_N$  je přímo úměrná velikosti  $h$ .

Než se začneme zabývat tvorbou dalšího matematického modelu, vrátíme se v čase do doby krátce po konci druhé světové války. Těsně po válce zjistila nizozemská policie, že během války bylo prodáno několik Vermeerových<sup>9</sup> obrazů německému ministrovi letectví Hermannu Göringovi. Tuto transakci zprostředkoval Han van Meegeren. Na základě těchto zjištěných faktů byl 29.5.1945 van Meegeren zadržen a obviněn z kolaborace s nepřítelem. 12.7.1945 van Meegeren vydal prohlášení, že Göringovi nikdy žádný Vermeerův obraz neprodal. Naopak Göringa napálil, protože obrazy, které mu prodal, jsou podvrhy Vermeerových obrazů a sám je vytvořil.

A aby dokázal své tvrzení, začal jeden z „Vermeerových“ obrazů<sup>10</sup> napodobovat. Van Meegeren přizvaným znalcům předvedl způsob, jakým vytváří barvy, jak připravuje plátno,

---

<sup>8</sup>Pro jistotu zde připomínáme její definici  $y'(t) \stackrel{\text{def.}}{=} \lim_{h \rightarrow 0} \frac{y(t+h) - y(t)}{h}$ .

<sup>9</sup>Jan Vermeer (1632 - 1675) byl nizozemský malíř.

<sup>10</sup>„Ježíš mezi znalci Písma“

či jak zařídí, aby povrch malby vypadal jako u několik set let starého obrazu. Těsně před dokončením podvrhu Vermeerova obrazu se van Meegeren dozvěděl, že obvinění z kolaborace, bude nahrazeno obviněním z padělatelství, a tak odmítl tuto kopii dokončit. I tak ale většina přizvaných odborníků uznala, že obrazy prodané Göringovi jsou pravděpodobně falzum a van Meegeren byl 12.10.1947 odsouzen za padělatelství na rok do vězení, ve kterém 30.12.1947 na infarkt zemřel.

I přesto, že komise, která posuzovala pravost „Vermeerových“ obrazů uznala, že to jsou pravděpodobně podvrhy vytvořené van Meegerenem, zůstávali odborníci u některých obrazů, k jejichž autorství se také van Meegeren přihlásil, na pochybách. Zejména zpochybňování pravosti obrazu Emauzští učedníci, který zakoupilo muzeum v Rotterdamu za 170 000 dolarů, vyvolával velké spory. Proto se přistoupilo u tohoto obrazu v roce 1967 k metodě radioaktivního datování, která měla tyto pochyby rozhodnout.

Metoda radioaktivního datování využívá toho, že některé tzv. radioaktivní prvky jsou nestabilní a část jejich atomů se samovolně rozpadá na atomy jiných prvků. Experimenty bylo zjištěno, že rychlost rozpadu atomů radioaktivních prvků je přímo úměrná počtu těchto atomů. Pokud funkci udávající počet atomů radioaktivního prvku v čase  $t$  v gramu látky označíme jako  $N(t)$ , pak výše zmíněnou závislost můžeme popsat diferenciální rovnicí

$$N'(t) = -\lambda N(t), \quad (11)$$

kde  $\lambda$  je konstanta, která popisuje rychlost rozpadu atomů daného radioaktivního prvku. Tato konstanta je dána pro každý radioaktivní prvek tímto vztahem

$$\lambda = \frac{\ln 2}{\text{poločas rozpadu prvku v minutách}}.$$

Čas  $t$  v našem modelu budeme měřit v minutách a jednotka konstanty  $\lambda$  je v  $\text{min}^{-1}$ .

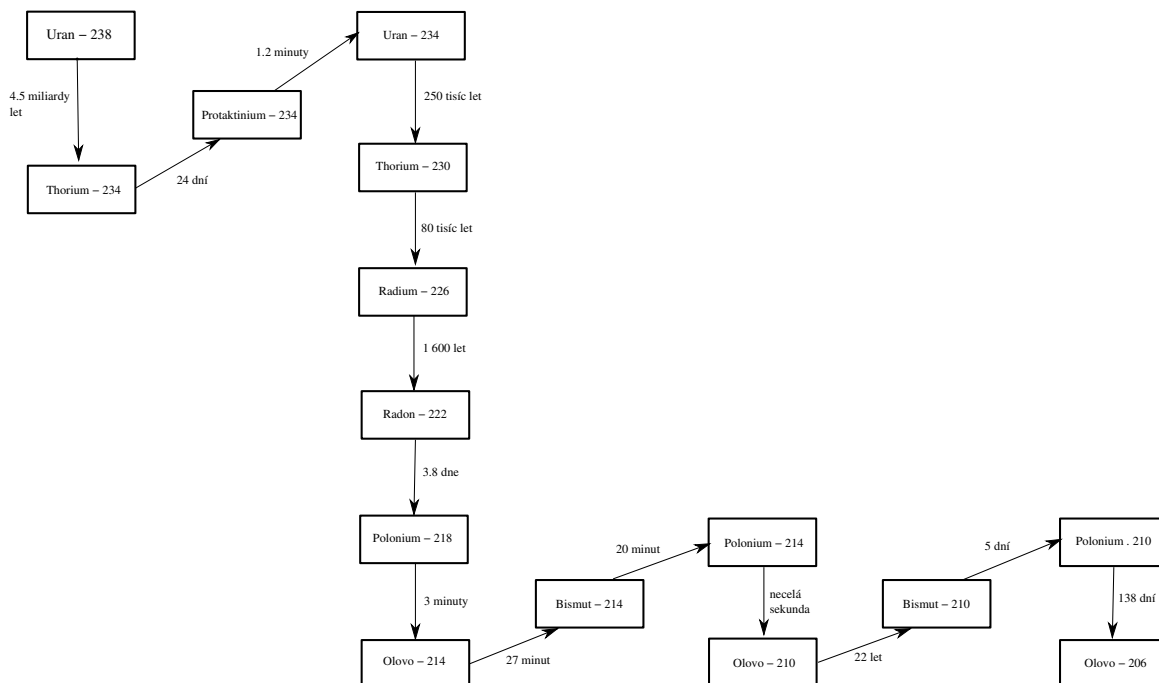
Metoda radioaktivního datování je založena na jednoduchém pozorování. Pokud bychom věděli, kolik atomů radioaktivního prvku měla látka v jednom svém gramu při svém vzniku (tzn. známe hodnotu  $N_0$ , pro kterou platí  $N(0) = N_0$ ), a znali bychom také aktuální počet těchto atomů v gramu látky, mohli bychom řešením úlohy

$$\begin{cases} N'(t) = -\lambda N(t), \\ N(0) = N_0. \end{cases} \quad (12)$$

zjistit, jak je tato látka stará.

Než se začneme zabývat datováním „Vermeerových“ obrazů, uvědomme si, že všechny horniny na Zemi obsahují malé množství radioaktivního uranu, který se rozpadá na atomy dalšího prvku. Tyto atomy se opět samovolně mění na další atomy atd. (viz obrázek 3).

Dále je známo, že olovnatá běloba používaná na malbách obsahuje oxid olovnatý, který obsahuje malé množství olova-210 a ještě menší množství radia-226. V okamžiku, kdy je barva obsahující oxid olovnatý vyrobena, začnou se atomy olova-210 velmi rychle rozpadat s poločasem rozpadu 22 let a množství olova-210 v této barvě klesá. Na druhé straně vzniká



Obrázek 3: Uranová rozpadová řada (časy u šipek udávají poločasy rozpadu jednotlivých radioaktivních prvků)

malé množství olova-210 rozpadem radia-226 (a prvků, které následují v rozpadové řadě za ním). Tento proces můžeme popsat následující diferenciální rovnicí

$$\begin{cases} N'(t) = -\lambda N(t) + r(t), \\ N(0) = N_0, \end{cases} \quad (13)$$

kde  $N(t)$  je funkce udávající počet atomů olova-210 v čase  $t$  v gramu látky,  $r(t)$  je funkce udávající počet atomů olova-210, které vzniknou v čase  $t$  v gramu oxidu olovnatého za minutu.

Protože poločas rozpadu radia-226 je 1600 let a metodu radioaktivního datování chceme použít pro rozpoznání stáří obrazů, které měly v roce 1967 přibližně buď 300 let nebo 20 let, můžeme funkci  $r(t)$  považovat za konstantní. Pak  $r(t) = r = \text{konst.}$  a rovnici (13) můžeme nahradit rovnicí

$$\begin{cases} N'(t) = -\lambda N(t) + r, \\ N(0) = N_0. \end{cases} \quad (14)$$

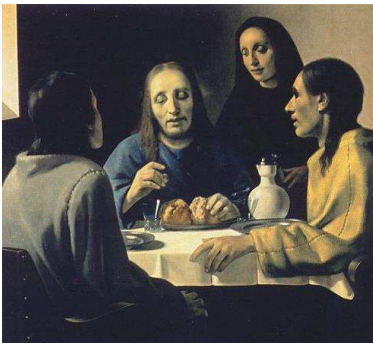
Mnohem více podrobností o metodě radioaktivního datování může čtenář nalézt v [1].

Také v případě rovnice (14) jsme schopni, pokud známe počet atomů olova-210 v gramu oxidu olovnatého v době výroby olovnaté běloby určit stáří obrazu, na kterém je tato barva použita. K řešení této rovnice můžeme opět použít Eulerovu metodu, se kterou jste se seznámili v minulém cvičení. V naší úloze počet atomů olova-210 v gramu oxidu olovnatého v době výroby barvy bohužel neznáme. I přesto jsme schopni rozlišit obraz jehož

stáří je 300 let od obrazu, který má 20 let. Je totiž známo, jaké bývají koncentrace radioaktivního olova-210 v rudách, ze kterých se vyrábí oxid olovnatý. Je naprosto nemožné, aby počet atomů olova-210 v gramu rudy, ze které se oxid olovnatý vyrobil přesáhl počet  $5 \cdot 10^{11}$ . Proto můžeme zjistit, pokud známe potřebné parametry, zda je možné, aby bylo stáří obrazu 300 let. V následujících úkolech použijte: 1 rok = 525 600 minut.

**Úkol 3.1** Určete, zda je možné, aby byl obraz Emauzští učedníci opravdu starý 300 let a byl tedy pravý, pokud bylo měřením zjištěno, že v čase  $t$  platí

$$N(t) = 1,42 \cdot 10^8, \quad r = 0,8.$$



Obrázek 4: Emauzští učedníci

**Úkol 3.2** Určete, zda je možné, aby byl obraz Krajčářka opravdu starý 300 let a byl tedy pravý, pokud bylo měřením zjištěno, že v čase  $t$  platí

$$N(t) = 0,25 \cdot 10^8, \quad r = 1,4.$$



Obrázek 5: Krajčářka



---

#### CVIČENÍ 4: MODELOVÁNÍ ZMĚNY KONCENTRACE LÉKŮ V KRVI

---

V tomto cvičení se pokusíme vytvořit matematický model, který popisuje, jakým způsobem se mění koncentrace léku v krvi v závislosti na čase. Nechť funkce  $C(t)$  udává okamžitou koncentraci látky (vhodného léku) v krvi v čase  $t$  (v  $\mu\text{g/ml}$ ). Lékařskými pokusy bylo zjištěno, že rychlost poklesu koncentrace této látky v krvi je přímo úměrný její samotné koncentraci, tj. platí:

$$C'(t) = -kC(t),$$

kde  $k > 0$  je konstanta<sup>11</sup>. Tato konstanta popisující úbytek dané látky je určena dvěma farmakokinetickými parametry, kterými jsou *clearance* (míra schopnosti organismu eliminovat látku) a *distribuční objem* (míra kapacity zdánlivého prostoru, který je v organismu pro tuto látku k dispozici). Clearance budeme dále značit  $Cl$  a jeho jednotky budou  $\text{ml/min}$ , distribuční objem označíme  $v_d$  a jeho jednotky budou  $l$ . Pokud zvolíme jako jednotku času hodiny, můžeme konstantu  $k$  popsat následující závislostí

$$k = \frac{Cl \cdot \frac{60}{1000}}{v_d}.$$

Dále pro jednoduchost předpokládejme, že látka je distribuována do krve intravenózní injekcí a rozšiřuje se do krve okamžitě. Předpokládejme, že tímto způsobem byla v čase  $t = 0$  dodána do krve takové množství látky, že její koncentrace v krvi měla hodnotu  $C_0$ . Tím jsme získali jednoduchý model, popisující hodnoty koncentrace látky v krvi po její intravenózní aplikaci:

$$\begin{cases} C'(t) = -kC(t), \\ C(0) = C_0. \end{cases} \quad (15)$$

U léčiv je dalším významným farmakokinetickým parametrem *účinná koncentrace*. Ta udává hodnotu koncentrace či interval hodnot koncentrací, při kterých látka působí prospěšně na organismus. Pokud známe hodnotu výše zmíněných farmakokinetických parametrů pro konkrétní léčivo, můžeme využít řešení úlohy (15) pro odpověď na otázku, jak často lék obsahující tuto látku pacientovi aplikovat pro zajištění úspěšné léčby. V následujících příkladech předpokládáme, že pacientem je průměrná osoba s tělesnou hmotností 70 kg. Hodnoty farmakokinetických parametrů pro léčiva z těchto příkladů byly převzaty z [3], kde se lze seznámit s oblastí farmakokinetiky daleko detailněji.

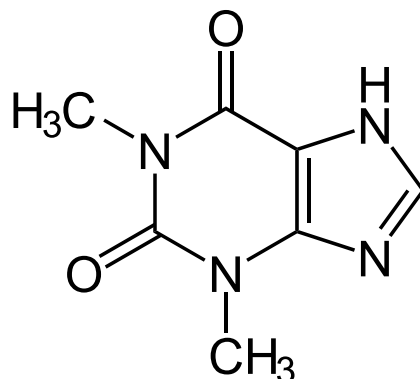
**Úkol 4.1** Pro léčbu nemocného s průduškovým astmatem se používá theofylin. Jeho farmakokinetické parametry jsou:

$$Cl = 48 \text{ (ml/min)}, \quad v_d = 35 \text{ (l)}, \quad \text{účinná koncentrace} = 10 - 20 \text{ (\mu g/ml)}.$$

Toto léčivo musíme pacientovi podávat v pravidelných časových intervalech tak, aby jeho koncentrace v krvi léčené osoby nepřesáhla horní mez účinné koncentrace a neklesla pod její

---

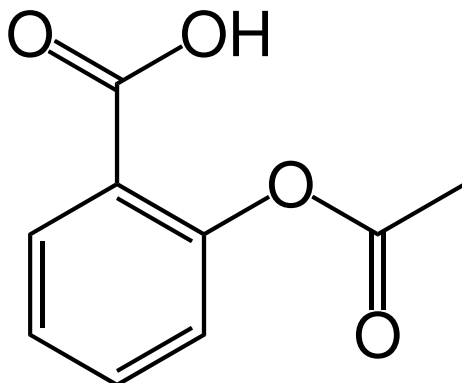
<sup>11</sup>Hodnota  $k$  závisí na léku a pacientovi.



Obrázek 6: Molekula theofylinu

dolní mez. Na začátku léčby byla aplikována zaváděcí dávka, která způsobila, že v čase  $t = 0$  byla koncentrace theofylinu v krvi  $C_0 = 20(\mu\text{g}/\text{ml})$ . Další dávky chceme aplikovat vzhledem k pohodlí pacienta tak, aby interval podávání léku byl co největší. Zjistěte po jakém čase (v hodinách) je nutné lék obsahující theofylin znovu podat pacientovi. Připomeňme, že aby byla léčba účinná, je třeba lék pacientovi podat dříve než koncentrace theofylinu klesne pod dolní mez účinné koncentrace.

**Úkol 4.2** Pro léčbu horečnatých stavů, bolesti hlavy, svalů či kloubů se používá kyselina acetylsalicylová<sup>12</sup>. Její farmakokinetické parametry jsou:



Obrázek 7: Molekula kyseliny acetylsalicylové

$$Cl = 650 (\text{ml}/\text{min}), \quad v_d = 11 (\text{l}), \quad \text{účinná koncentrace} = 150 - 300 (\mu\text{g}/\text{ml}).$$

Toto léčivo musíme pacientovi podávat v pravidelných časových intervalech tak, aby jeho koncentrace v krvi léčené osoby nepřesáhla horní mez účinné koncentrace a neklesla pod její dolní mez. Na začátku léčby byla aplikována zaváděcí dávka, která způsobila, že v čase  $t = 0$

<sup>12</sup>Je hlavní složkou léků jako je Aspirin, Acylpirin či Anopyrin.

byla koncentrace kyseliny acetylsalicylové v krvi  $C_0 = 300(\mu\text{g}/\text{ml})$ . Další dávky chceme aplikovat vzhledem k pohodlí pacienta tak, aby interval podávání léku byl co největší. Zjistěte po jakém čase (v hodinách) je nutné lék obsahující kyselinu acetylsalicylovou znovu podat pacientovi. Aby byla léčba účinná, je třeba lék pacientovi podat dříve než koncentrace kyseliny acetylsalicylové klesne pod dolní mez účinné koncentrace.

## Reference

- [1] M. Braun: *Differential Equations and Their Applications*. Springer Verlag (1993).
- [2] Z. Dostál, P. Beremlijski: *Metody optimalizace*. Text vytvořený při realizaci projektu „Matematika pro inženýry 21. století“, Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava (2012). (<http://mi21.vsb.cz/modul/metody-optimalizace>)
- [3] B.G. Katzung: *Základní a klinická farmakologie*. H & H (1994).
- [4] T. Kozubek, T. Brzobohatý, V. Hapla, M. Jarošová, A. Markopoulos : *Lineární algebra s Matlabem*. Text vytvořený při realizaci projektu „Matematika pro inženýry 21. století“, Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava (2012). (<http://mi21.vsb.cz/modul/linearni-algebra-s-matlabem>)
- [5] B. Krajc, P. Beremlijski: *Obyčejné diferenciální rovnice*. Text vytvořený při realizaci projektu „Matematika pro inženýry 21. století“, Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava (2012). (<http://mi21.vsb.cz/modul/obycejne-diferencialni-rovnice>)
- [6] K. Sigmon: *Matlab Primer*. University of Florida (1993).

**Definice A.1** Bud'  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  a  $x \in \mathbb{R}$ . Existuje-li

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h},$$

značíme ji  $f'(x)$  a nazýváme derivací funkce  $f$  v bodě  $x$ .

**Poznámka A.1** Většinou – a nejinak je to v tomto textu – se pod pojmem derivace rozumí konečná (tzv. vlastní) derivace.

**Věta A.1** Bud'  $f, g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  a  $x \in \mathbb{R}$ . Pak platí

- $(f \pm g)'(x) = f'(x) \pm g'(x)$ , má-li pravá strana rovnosti smysl,
- $(fg)'(x) = f'(x)g(x) + f(x)g'(x)$ , existují-li (vlastní) derivace  $f'(x)$  a  $g'(x)$ ,
- $\left(\frac{f}{g}\right)'(x) = \frac{f'(x)g(x) - f(x)g'(x)}{g^2(x)}$ , existují-li (vlastní) derivace  $f'(x)$  a  $g'(x)$  a je-li  $g(x) \neq 0$ .

**Pozorování A.1**

- $(c)' = 0$ ,  $c \in \mathbb{R}$  (konst.),  $x \in \mathbb{R}$ ,
- $(x^r)' = rx^{r-1}$ ,  $r \in \mathbb{R}$ ,  $x \in (0, +\infty)$ ,
- $(\sin x)' = \cos x$ ,  $x \in \mathbb{R}$ ,
- $(\cos x)' = -\sin x$ ,  $x \in \mathbb{R}$ ,
- $(\operatorname{tg} x)' = \frac{1}{\cos^2 x}$ ,  $x \in \mathbb{R} \setminus \left\{\frac{\pi}{2} + k\pi : k \in \mathbb{Z}\right\}$ ,
- $(\operatorname{cotg} x)' = -\frac{1}{\sin^2 x}$ ,  $x \in \mathbb{R} \setminus \{k\pi : k \in \mathbb{Z}\}$ ,
- $(e^x)' = e^x$ ,  $x \in \mathbb{R}$ ,
- $(\ln x)' = \frac{1}{x}$ ,  $x \in (0, +\infty)$ .

**Definice B.1** Bud'  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $x \in \mathbb{R}$  je vnitřní bod  $D_f$  a  $k \in \{1, 2, \dots, n\}$ . Má-li funkce  $g_k : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$  definovaná

$$g_k(t) := g(x_1, x_2, \dots, x_{k-1}, t, x_{k+1}, \dots, x_n)$$

vlastní derivaci v bodě  $x_k$ , nazýváme ji parciální derivací funkce  $f$  podle  $k$ -té proměnné v bodě  $x$  a značíme ji  $\frac{\partial f(x)}{\partial x_k}$  (tj.  $\frac{\partial f(x)}{\partial x_k} := g'_k(x_k)$ ).

**Poznámka B.1** Podobně můžeme definovat parciální derivace vyšších řádů.

**Definice B.2** Bud'  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  funkce, která má v bodě  $x$  spojitě všechny parciální derivace prvního řádu. Vektor

$$\nabla f(x) := \left( \frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \frac{\partial f(x)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \right)$$

nazýváme gradientem funkce  $f$  v bodě  $x$ .

**Definice B.3** Bud'  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  funkce, která má v bodě  $x$  spojitě všechny parciální derivace druhého řádu. Matici

$$\nabla^2 f(x) := \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}$$

nazýváme Hessiánem nebo Hessovou maticí funkce  $f$  v bodě  $x$ .

**Definice C.1** Necht' jsou dány prvky  $a_{11}, a_{12}, \dots, a_{mn}$  z dané množiny  $\mathcal{F}$ . Matice typu  $(m, n)$  (stručně  $m \times n$  matice) je obdélníková tabulka

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix},$$

kteřá má  $mn$  prvků  $a_{ij}$  uspořádaných do  $m$  řádků  $r_i^A$  a  $n$  sloupců  $s_j^A$ , takže

$$A = \begin{bmatrix} r_1^A \\ \vdots \\ r_m^A \end{bmatrix} = [s_1^A, \dots, s_n^A],$$

$$r_i^A = [a_{i1}, \dots, a_{in}], \quad s_j^A = \begin{bmatrix} a_{1j} \\ \vdots \\ a_{mj} \end{bmatrix}.$$

Stručně píšeme též  $A = [a_{ij}]$ .

**Definice C.2** Necht'  $A$  je čtvercová matice. Jestliže existuje matice  $B$  tak, že

$$AB = BA = I,$$

pak se matice  $B$  nazývá inverzní maticí k matici  $A$  a značí se  $A^{-1}$ . Čtvercová matice, ke které existuje inverzní matice, se nazývá regulární. V opačném případě takovou matici nazýváme singulární.

**Věta C.1** Ke každé regulární matici  $A$  existuje právě jedna inverzní matice.

**Definice D.1** Vektorovou funkcí  $n$  reálných proměnných o  $m$  složkách nazýváme každé zobrazení z  $\mathbb{R}^n$  do  $\mathbb{R}^m$ ,  $m, n \in \mathbb{N}$ . Vektorová funkce  $f = (f_1, \dots, f_m)$   $n$  reálných proměnných o  $m$  složkách je tedy předpis, který každému

$$x := (x_1, x_2, \dots, x_n) \in Df \subset \mathbb{R}^n$$

přiřadí jednoznačně hodnotu

$$f(x) := (f_1(x_1, x_2, \dots, x_n), f_2(x_1, x_2, \dots, x_n), \dots, f_m(x_1, x_2, \dots, x_n)) \in Hf \subset \mathbb{R}^m,$$

kde  $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ .

Množinu  $Df$  nazýváme definiční obor funkce  $f$  a množinu  $Hf$  nazýváme obor hodnot funkce  $f$ . Skutečnost, že  $f$  je vektorovou funkcí  $n$  reálných proměnných, zapisujeme symbolem

$$f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m.$$