

Matematika pro matematickou (pato)fyzologii

Michal Šitina

22. května 2022

Ústav patologické fyziologie
Lékařská fakulta
Masarykova univerzita Brno

Obsah

1	Stavební kameny matematiky	4
1.1	Množina	4
1.2	Zobrazení, funkce	4
1.3	Komplexní čísla	5
1.4	Umění zanedbat nepodstatné	6
2	Úvod do matematické analýzy	8
2.1	Funkce	8
2.1.1	Inverzní funkce	8
2.1.2	Transformace funkcí	8
2.2	Přehled základních funkcí	9
2.2.1	Polynomické funkce	9
2.2.2	Exponenciální a logaritmické funkce	12
2.2.3	Goniometrické funkce	12
2.3	Limita funkce	13
2.4	Derivace funkce	14
2.4.1	Intuitivní představa derivace	14
2.4.2	Exaktní definice derivace	15
2.4.3	Derivace elementárních funkcí	16
2.4.4	Derivace součtu, rozdílu, součinu a podílu	16
2.4.5	Derivace složených funkcí	16
2.4.6	Příklady výpočtu derivace funkcí	16
2.4.7	Derivace inverzních funkcí	17
2.4.8	Derivace vyššího řádu	17
2.4.9	Geometrický a fyzikální význam derivace	17
2.4.10	Vyšetřování průběhu funkce	18
2.4.11	Taylorovy řady	18
2.5	Funkce více proměnných	21
2.5.1	Představa funkce více proměnných	21
2.5.2	Parciální derivace	22
2.5.3	Vyšší a smíšené parciální derivace	24
2.5.4	Vyšetřování průběhu funkce více proměnných	25
2.6	Integrální počet	25
2.6.1	Idea integrálního počtu	25
2.6.2	Neurčitý integrál	25
2.6.3	Metody integrace	26
2.6.4	Určitý integrál	28
2.7	Obyčejné diferenciální rovnice	33
2.7.1	Idea diferenciálních rovnice	33
2.7.2	Základní pojmy	34
2.7.3	Metoda separace proměnných	34
2.7.4	Lineární diferenci rovnice prvního řádu, metoda variace konstant	35
2.7.5	Soustavy obyčejných diferenciálních rovnic prvního řádu	38
2.7.6	Lineární diferenciální rovnice druhého řádu	39

3	Poznámky k numerické matematice	44
3.1	Numerické řešení algebraických rovnic	44
3.1.1	Metoda půlení intervalů	44
3.1.2	Metoda prosté iterace	45
3.1.3	Newtonova metoda	46
3.2	Numerické řešení diferenciálních rovnic	48
3.2.1	Eulerova metoda	48
3.2.2	Metoda Rungeho a Kутty	50
3.3	Numerické řešení soustav diferenciálních rovnic	53
3.3.1	Eulerova metoda	53
3.3.2	Runge-Kuttova metoda	55
4	Poznámky k lineární algebře	58
4.1	Vektory a vektorové prostory	58
4.1.1	Operace s vektory	60
4.1.2	Lineární kombinace, lineární závislost a nezávislost vektorů	61
4.1.3	Báze a dimenze vektorového prostoru	61
4.2	Matice	61
4.2.1	Typy matic	62
4.2.2	Hodnost a determinant matic	62
4.2.3	Operace s maticemi	63
4.2.4	Geometrická interpretace násobení vektoru maticí	64
4.2.5	Příklady aplikací matic v biologii a medicíně	65
4.2.6	převedení z teorie grafů	65
4.2.7	popis sítí - metabolické, genové regulační	65
4.2.8	analýza vícerozměrných dat. Principal component analysis	65
4.2.9	klasické fyzikální uplatnění	65
4.2.10	analýza obrazu	65
4.3	Soustavy lineárních algebraických rovnic	65

1 Stavební kameny matematiky

V této úvodní kapitole stručně popíšeme některé základní matematické pojmy a představy, které se vyskytují ve všech speciálních oblastech matematiky, jako jsou např. matematická analýza, algebra, teorie pravděpodobnosti nebo numerická matematika. Učebnice vyšší matematiky jsou většinou psány systémem *Definice – Věta – Důkaz*. V našem kurzu budeme postupovat méně precizně, intuitivní cestou. Přesto je vhodné základním principům dobře rozumět.

Definice je přiřazení názvu jisté přesněji vymezené entitě. Sama o sobě neobsahuje žádnou novou informaci, žádný poznatek. Definice bývají často psány nepřesně jako implikace, tedy „Pokud platí to a ono, označujeme jej jako abc“. Vždy je ve skutečnosti rozuměna ekvivalence, tedy „Právě když platí to a ono, označujeme jej jako abc“.

Příklad definice: Reálná funkce jedné reálné proměnné je každé zobrazení z množiny \mathbb{R} do množiny \mathbb{R} . V tomto případě jsme entitě „zobrazení z množiny \mathbb{R} do množiny \mathbb{R} “ přiřadili název „reálná funkce jedné reálné proměnné“.

1.1 Množina

Množinou rozumíme souhrn jakýchkoli vzájemně odlišitelných elementů, prvků množiny, do jednoho celku. Představu množin prvně zformuloval německý matematik Georg Cantor¹. Založil oblast matematiky dnes označovanou jako Teorie množin. V originále definuje Cantor množinu takto:

Unter einer „Menge“ verstehen wir jede Zusammenfassung M von bestimmten wohlunterschiedenen Objekten m unserer Anschauung oder unseres Denkens (welche die „Elemente“ von M genannt werden) zu einem Ganzen.

Původní Cantorovu verzi označujeme jako Naivní teorii množin, jejíž nedostatky byly odhaleny na počátku 20. století a byla zprecizována v tzv. Axiomatické teorii množin, spojené se jmény Zermelo a Fraenkel. Teorie množin je absolutním základem matematiky, snad vše v matematice lze převést na operace s množinami.

1.2 Zobrazení, funkce

Často nás zajímá vztah dvou množin A a B , tedy souvislost mezi jednotlivými prvky. Taková souvislost se velmi obecně označuje jako *relace*. Každému prvku jedné množiny může být přiřazeno více prvků druhé množiny nebo nemusí být některému prvku přiřazen žádný prvek. Velmi speciální, ale nejdůležitější relace, kdy je každému prvku množiny A přiřazen právě jeden prvek množiny B , se označuje jako *zobrazení* nebo *funkce*. Funkce a zobrazení jsou obvykle vnímána jako synonyma. Pokud prvky množiny A označíme x a množiny B y , pak zápis

$$f : A \rightarrow B; x \rightarrow y$$

¹Georg Cantor, 1845-1918, německý matematik, založil Teorii množin

znamená zobrazení f z množiny A do množiny B , které každému $x \in A$ přiřazuje $y \in B$. Množinou A mohou být např. všichni občasně České republiky, množinou B reálná čísla ($B = \mathbb{R}$). Zobrazení „měření výšky“ zapíšeme jako

$$\text{měření výšky} : \text{občané } \check{C}R \rightarrow \mathbb{R}; \text{občan} \rightarrow \text{výška}$$

1.3 Komplexní čísla

Známe několik nekonečných množin čísel, např. přirozená čísla \mathbb{N} , celá čísla \mathbb{Z} , racionální čísla \mathbb{Q} nebo reálná čísla \mathbb{R} . Nad těmito množinami jsou definované jisté operace, t.j. co můžeme s čísly dělat. Přirozená čísla můžeme sčítat a násobit, přičemž výsledek je opět přirozené číslo, ale nemůžeme např. odečíst větší číslo od menšího. To můžeme provádět s celými čísly, ta ale např. nemůžeme libovolně dělit. K tomu už potřebujeme ještě větší množinu čísel, totiž racionální čísla, která jsou vyjádřitelná zlomkem. Racionální čísla jsou první nekonečnou množinou čísel, s nimiž můžeme provádět všechny běžné operace s čísly a výsledek je vždy racionální číslo. Jak už ale zjistili v antickém Řecku, některá čísla, např. $\sqrt{2}$, mezi racionální nepatří. Pokud racionální čísla obohatíme o tato tzv. iracionální čísla, dostaneme reálná čísla. Na okraj poznamenejme, že iracionálních čísel je mnohem více než čísel racionálních.

Kromě reálných čísel ale existuje ještě jedna (a už žádná další!!) nekonečná množina poněkud zvláštních čísel, označovaných jako **komplexní čísla**, s nimiž lze počítat jako s „normálními“ čísly. Neexistuje žádné reálné číslo, které umocněno na druhou dá -1 . Definujme si proto nějaké nové číslo i , které není reálné, řekněme mu imaginární, pro nějž platí $i^2 = -1$. Vezměně dvě reálná čísla $a, b \in \mathbb{R}$ a definujme nové číslo jako

$$z = a + bi$$

Množinu všech takových čísel označme jako komplexní čísla \mathbb{C} . Pokud s nimi budeme „normálně“ počítat, zjistíme, že vše bez problémů funguje. Dvě komplexní čísla vynásobíme např. takto

$$(3 + 2i) \cdot (4 - 3i) = 12 - 9i + 8i - 6i^2 = 12 - i - 6(-1) = 18 - i$$

Komplexní číslo obsahuje dvě „proměnné“ a a b , dá se proto zobrazit jako bod v plošném grafu, v tzv. Gaussově² rovině (obr. 1.1), kdy reálnou část a vynášíme na osu x a imaginární část b na osu y . Velikost neboli absolutní hodnota komplexního čísla $\|z\|$ je vzdálenost bodu od počátku, platí

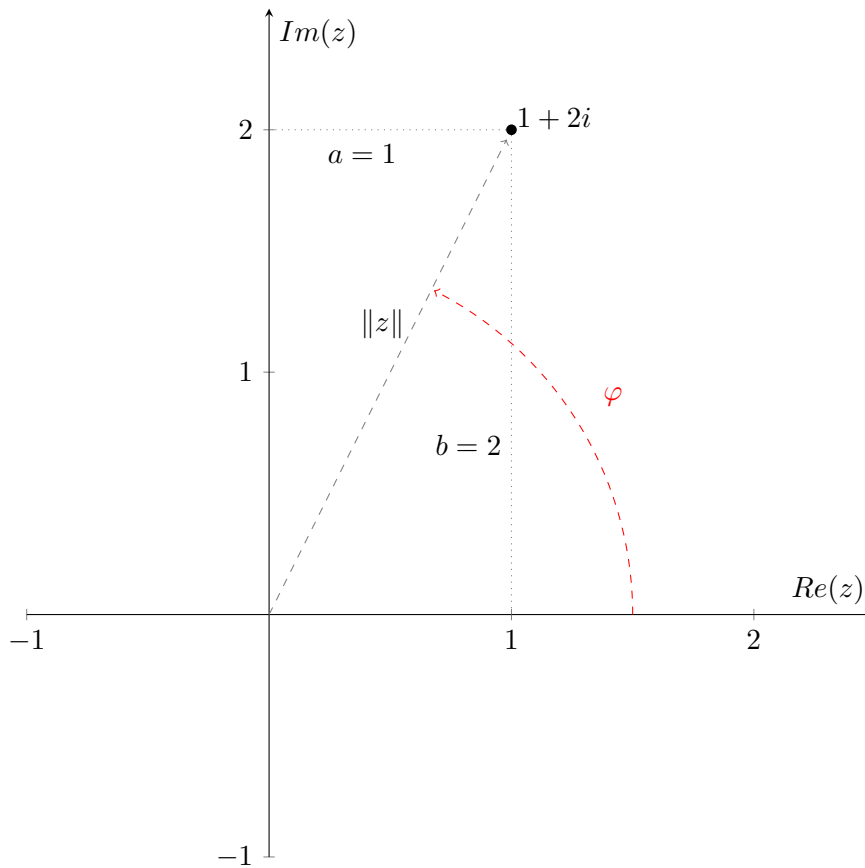
$$\|z\| = \sqrt{a^2 + b^2}$$

Spojnice bodu a počátku svírá s osou x úhel φ , označovaný jako fáze komplexního čísla. Platí proto $a = \|z\| \cdot \cos \varphi$ a $b = \|z\| \cdot \sin \varphi$. Komplexní číslo tedy můžete vyjádřit pomocí goniometrických funkcí jako

$$z = a + bi = \|z\| \cos \varphi + i\|z\| \sin \varphi = \|z\| (\cos \varphi + i \sin \varphi)$$

Absolutní hodnota $\|z\|$ bývá též označována jako amplituda komplexního čísla A .

²Carl Friedrich Gauss, 1777-1855, německý matematik a fyzik



Obrázek 1.1: Komplexní číslo v Gaussově rovině

1.4 Umění zanedbat nepodstatné

Umění rozpoznat a zanedbat nepodstatné je cenná dovednost v životě i v matematice. V matematice vhodné zanedbání vede ke zjednodušení výrazu bez podstatného nárůstu chyby výsledku. Zanedbat můžeme v součtu, je-li jeden ze sčítanců podstatně menší. V součinu pochopitelně zanedbávat nelze. Pokud tedy $d \ll x$, platí

$$x + d \approx x$$

Zanedbat můžeme zejména mocniny malých hodnot. Pokud totiž $d \approx 0$, pak

$$d \gg d^2 \gg d^3 \gg \dots$$

Ilustrujme si zanedbávání na následujícím příkladu. Chceme určit hodnotu výrazu

$$y = \frac{x}{(x+d)^2}$$

Nechť $d \ll x$, např. $x = 1$ a $d = 0,01$. Pak $y = \frac{1}{(1+0,01)^2} = 0,980296$. Pokud bychom zanedbali přímo d , bude $y = 1$, vznikne tedy chyba asi 2 %. Úpravou vztahu a zanedbáním druhé mocniny d^2 dostaneme

$$y = \frac{x}{(x+d)^2} = \frac{x}{x^2 + 2dx + d^2} \approx \frac{x}{x^2 + 2dx} = \frac{1}{x + 2d}$$

Po dosazení $y \approx \frac{1}{1+0,02} = 0,980392$. Chyba je zhruba 0,1 ‰, ale výraz je podstatně jednodušší. Pokud nás snad ještě obtěžuje součet ve jmenovateli, pak výraz rozšíříme a znovu zanedbáme

druhé mocniny.

$$y \approx \frac{1}{x+2d} = \frac{1}{x+2d} \cdot \frac{x-2d}{x-2d} = \frac{x-2d}{x^2-4d^2} \approx \frac{x-2d}{x^2}$$

Po dosazení $y \approx \frac{1-0,02}{1} = 0,98$. Nyní už nepotřebujeme kalkulačku, ale chyba je přesto stále pod 1 ‰.

2 Úvod do matematické analýzy

2.1 Funkce

Pojmy zobrazení a funkce jsou většinou chápány jako synonyma. V užším smyslu rozumíme pod **reálnou funkcí jedné reálné proměnné** zobrazení $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} : x \rightarrow y = f(x)$. Některé funkce jsou definované na podmnožině \mathbb{R} , např. logaritmická funkce na \mathbb{R}^+ . x a y se označují jako argument a hodnota (či obraz) funkce. Argument pochází z definičního oboru funkce \mathcal{D} , $x \in \mathcal{D}$, obraz z oboru hodnot \mathcal{H} , $y \in \mathcal{H}$. Ve výše uvedeném případě platí $\mathcal{D} = \mathcal{H} = \mathbb{R}$.

2.1.1 Inverzní funkce

Funkce f přiřazuje jistému x hodnotu y , $y = f(x)$. Mohla by nás však zajímat i opačná otázka, totiž kterému x byla přiřazena hodnota y . Hledáme tedy vlastně funkci, která dělá opak než funkce f . Označujeme ji jako **inverzní** a značíme f^{-1} . Platí

$$y = f(x) \Leftrightarrow x = f^{-1}(y)$$

Ne vždy lze inverzní funkci vytvořit. Pokud existuje více hodnot x , jimž funkce f přiřazuje stejné y , pak nemůžeme určit, které x by měla inverzní funkce přiřadit tomuto y . Pro invertabilitu tedy musí být funkce f prostá a navíc musí pokrývat celý obor hodnot, x a y tedy musí být vzájemně jednoznačné. Např. funkce $y = x^2$ není prostá v celém definičním oboru $\mathcal{D} = \mathbb{R}$. Pokud ji však omezíme na \mathbb{R}^+ , prostá již je a jí odpovídající inverzní funkce je $f^{-1}(x) = \sqrt{y}$. Poznamenejme, že je lhostejné, jakými písmeny označíme argument a obraz, určující pro funkci \sqrt{y} je $\sqrt{\quad}$. Protože je zvykem používat x pro argument a y pro obraz, píšeme $y = f^{-1}(x) = \sqrt{x}$. Pokud takto zakreslíme f i f^{-1} do společného grafu, jsou oba grafy symetrické podle osy $y = x$ (poněvadž jsme zaměnili x a y), viz obr. 2.4.

2.1.2 Transformace funkcí

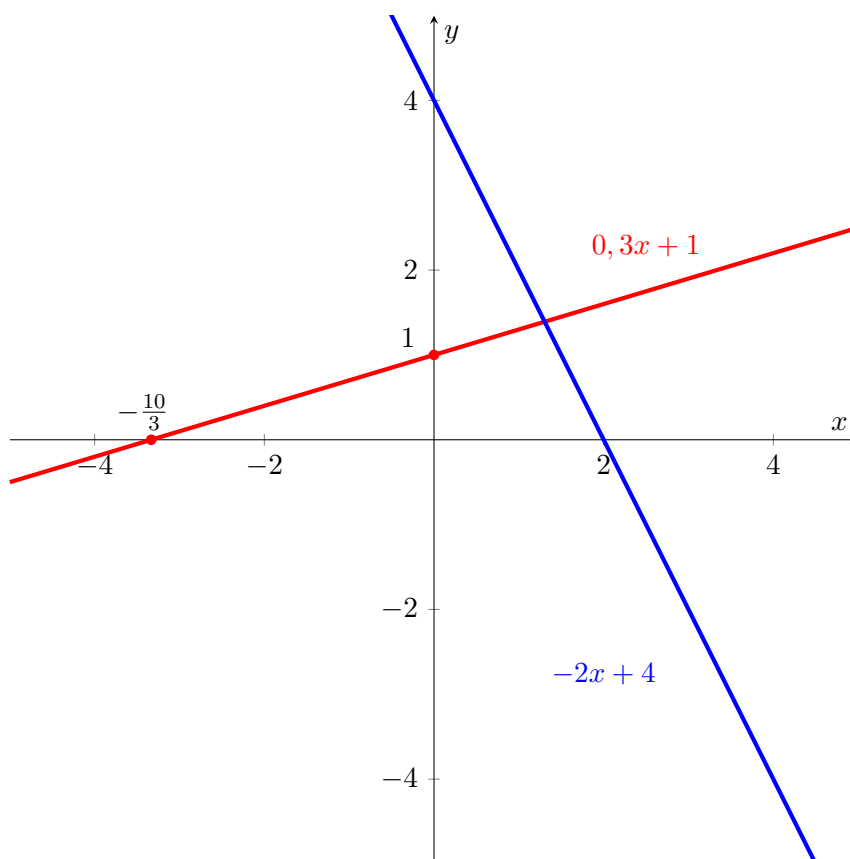
Drobnou úpravou funkce můžeme dosáhnout úpravy jejího „tvaru“, např. posunout na osách x a y nebo roztáhnout či zúžit. Mějme funkci $y = f(x)$. Novou, transformovanou funkci označme jako $g(x)$.

1. **Posunutí na ose y** o konstantu c nahoru dosáhneme přičtením c , $g(x) = f(x) + c$
2. **Posunutí na ose x** o konstantu c doleva dosáhneme přičtením c v argumentu funkce, $g(x) = f(x + c)$
3. **Zvětšení na ose y** k -krát dosáhneme vynásobením funkce konstantou k , $g(x) = kf(x)$
4. **Zkrácení na ose x** k -krát dosáhneme vynásobením argumentu funkce konstantou k , $g(x) = f(kx)$

Kombinací všech úprav získáme funkci

$$g(x) = af(bx + c) + d$$

která je oproti původní funkci f posunuta o d nahoru, a -krát roztažena na ose y , b -krát užší na ose x a posunuta na ose x o c/b doleva.



Obrázek 2.1: Lineární funkce

2.2 Přehled základních funkcí

Známe řadu tzv. elementární funkcí, z nichž jsou „sestaveny“ ostatní funkce. Existují však i funkce, které nelze takovou kombinací vyjádřit. Např. primitivní funkce (neurčitý integrál) ke Gaussově „zvonové“ funkci existuje, ale není vyjádřitelná pomocí elementárních funkcí. Jiné funkce, např. exponenciální nebo goniometrické, mohou být formálně definovány pomocí nekonečné řady mocninných funkcí. Dále je uveden přehled vybraných elementárních funkcí, s nimiž se běžně setkáváme.

2.2.1 Polynomické funkce

Nejjednodušší polynomickou funkcí je konstantní funkce $y = c$. Další v řadě je **lineární funkce** $y = ax + b$ (obr. 2.1). Funkce protíná osu y v hodnotě b , kdy platí $f(0) = a \cdot 0 + b = b$, a osu x v bodě $-b/a$, kdy platí $0 = ax + b$. a označujeme jako směrnici přímky, platí $a = \tan \varphi$, značí rychlost růstu přímky. Poznamenejme, že lineární funkce je prvního řádu, t.j. nejvyšší exponent u x je 1, a funkce protíná osu x v právě 1 bodě.

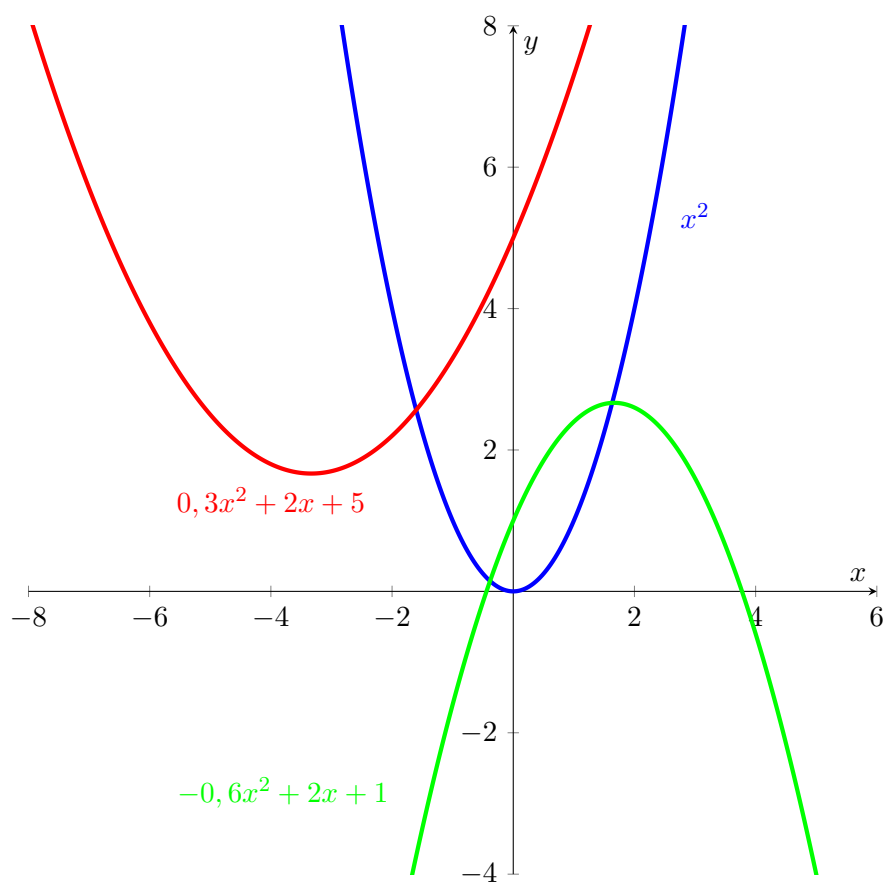
Kvadratická funkce $y = ax^2 + bx + c$ je druhého řádu a protíná osu x nejvýše ve 2 bodech, tzv. kořenech kvadratické rovnice

$$ax^2 + bx + c = 0$$

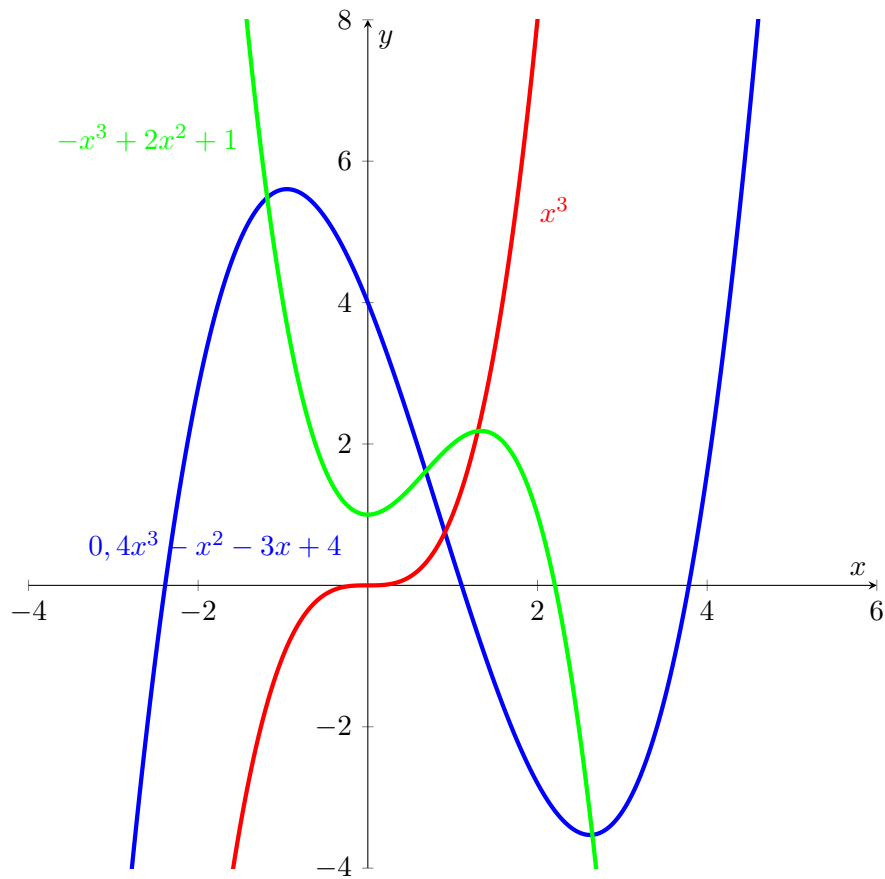
Jsou jimi

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

V oboru komplexních čísel má kvadratická rovnice vždy 2 řešení. Křivka kvadratické funkce se označuje jako parabola, několik parabol zobrazuje obr. 2.2.



Obrázek 2.2: Kvadratické funkce



Obrázek 2.3: Kubické funkce

Kubická funkce $y = ax^3 + bx^2 + cx + d$ je třetího řádu a protíná osu x nejvýše ve 3 bodech, kořenech kubické rovnice

$$ax^3 + bx^2 + cx + d = 0.$$

Několik kubických funkcí je na obr. 2.3. S rostoucím řádem funkce je „stále obtížnější vymýšlet“ názvy koeficientů a je snazší používat indexy. Můžeme tedy napsat

$$y = a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0$$

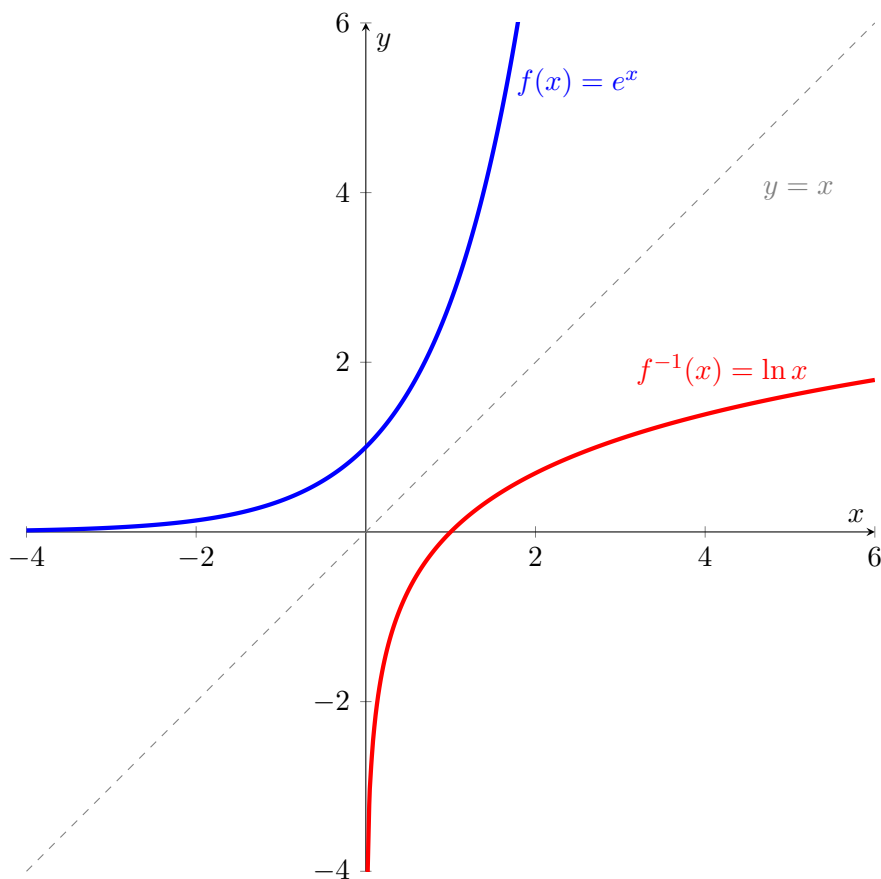
Polynom n -tého stupně je

$$y = a_nx^n + a_{n-1}x^{n-1} + \dots + a_2x^2 + a_1x + a_0$$

Pokud použijeme symbol součtu \sum , můžeme stejný polynom elegantně zapsat takto:

$$y = \sum_{i=0}^n a_i x^i$$

Polynom n -tého stupně má n kořenů v oboru komplexních čísel. Lze jím přesně proložit $n+1$ body.



Obrázek 2.4: Exponenciální a logaritmická funkce

2.2.2 Exponenciální a logaritmické funkce

Řadu procesů, jako např. eliminaci léku ledvinami, lze popsat **exponenciální funkcí** $y = a^x$. Jako a se obvykle používá Eulerovo číslo¹ $e \approx 2,718$, tedy $y = e^x$. Exponenciální funkce, viz obr. 2.4, roste extrémně rychle. Inverzní k exponenciální funkci je **logaritmická funkce** $y = \log_a x$, viz obr. 2.4, a se označuje jako základ logaritmu. Platí

$$y = a^x \Leftrightarrow x = \log_a y$$

Pokud $a = e$, označuje se logaritmus jako přirozený a značí se \ln , tedy $y = \ln x$.

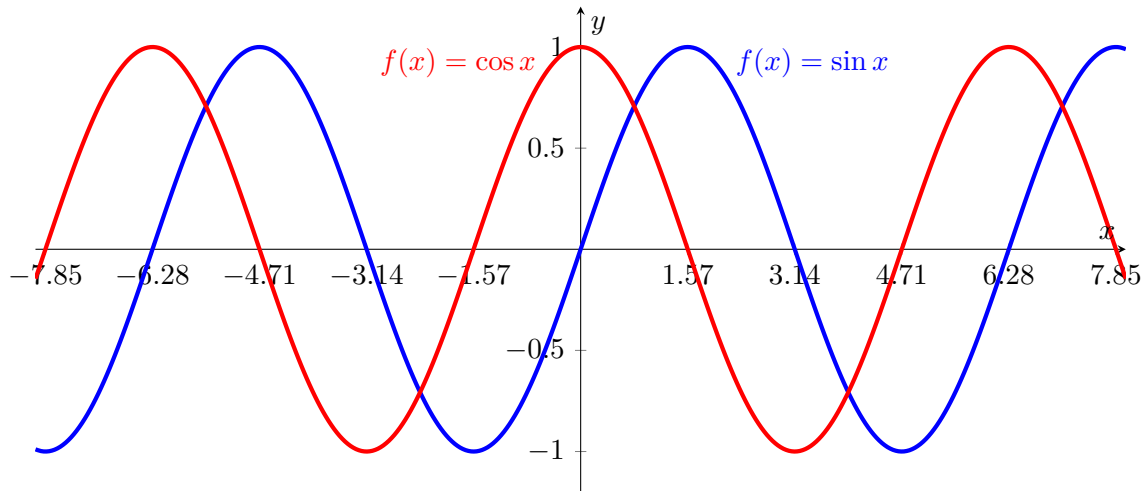
2.2.3 Goniometrické funkce

Pro popis periodických dějů se používají periodické goniometrické funkce sinus a cosinus (obr. 2.5), které se liší pouze posunutím o $\pi/2$ na ose x . Perioda obou funkcí je 2π . Pomocí těchto funkcí lze vyjádřit i komplexní číslo z jako

$$z = A(\cos \varphi + i \sin \varphi)$$

A se označuje jako amplituda a φ jako fáze komplexního čísla. Euler zjistil mimořádnou souvislost mezi komplexní exponenciální funkcí a goniometrickým vyjádřením komplexního čísla. Eulerův

¹Leonhard Euler, 1707-1783, švýcarský matematik a fyzik



Obrázek 2.5: Goniometrické funkce

vztah, někdy popisovaný jako nejkrásnější vztah matematiky, zní

$$A(\cos \varphi + i \sin \varphi) = Ae^{i\varphi}$$

2.3 Limita funkce

Intuitivně zformulováno představuje **limita funkce v bodě** x_0 hodnotu, jakou by funkce v bodě x_0 nabyla, kdyby se v tomto bodě chovala stejně, jako se chová v jeho blízkém okolí. Limitu funkce f „pro x jdoucí k x_0 “ značíme

$$\lim_{x \rightarrow x_0} f(x)$$

Z grafů na obr. 2.6 je zřejmých několik možností „vztahu“ limity v bodě k průběhu funkce:

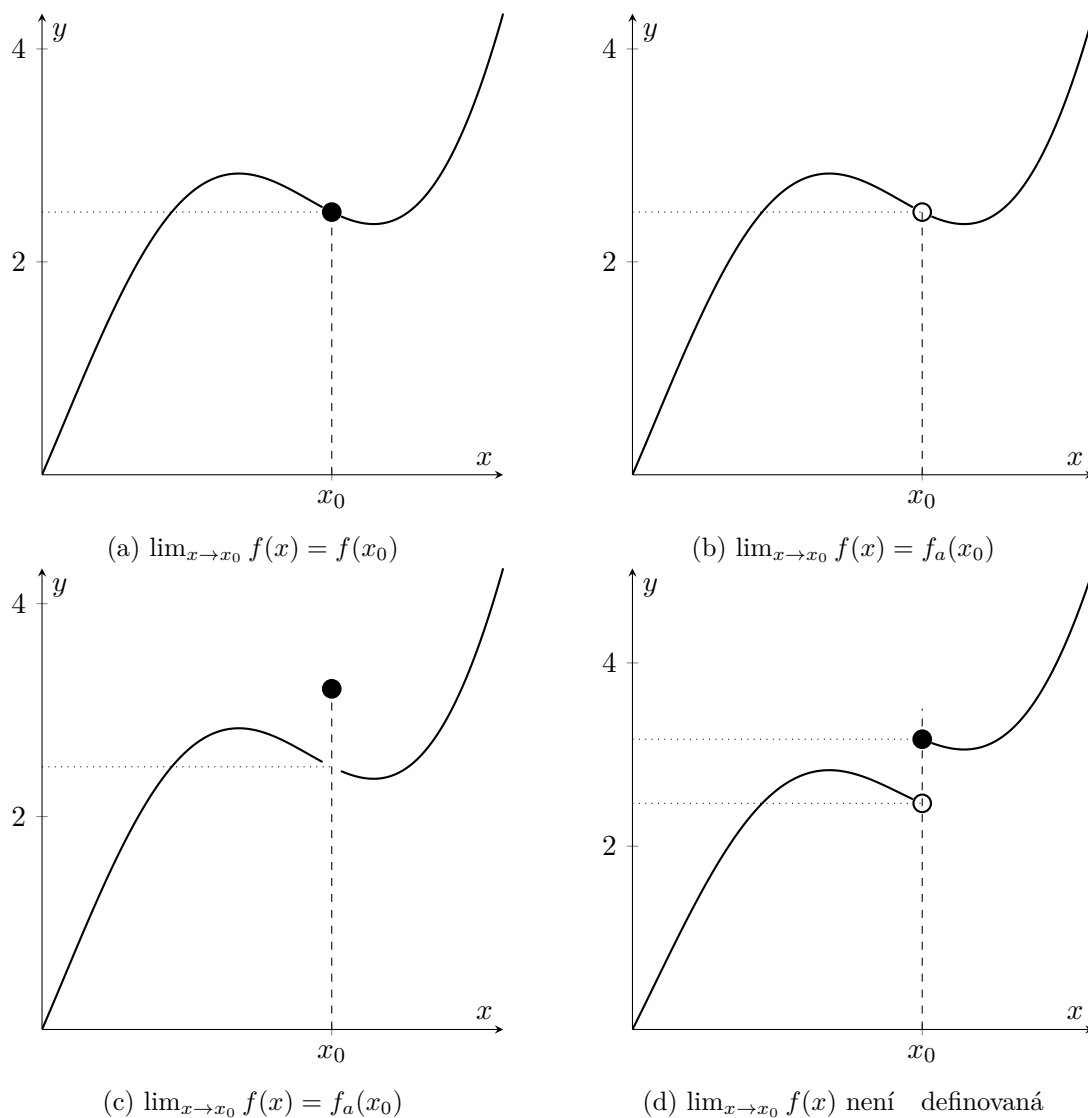
- Funkce je v bodě x_0 definována a spojitá. Zprava i zleva se funkce blíží k hodnotě $f(x_0)$. Platí $\lim_{x \rightarrow x_0} f(x) = f(x_0)$.
- Funkce není v bodě x_0 definována. To ale limitu „nelimituje“, poněvadž odvozuje chování v bodě na základě chování v okolí. Platí tedy totéž, co v předchozím případě, $\lim_{x \rightarrow x_0} f(x) = f_a(x_0)$. $f_a(x_0)$ znamenná hodnotu $f(x_0)$ z případu a). $f(x_0)$ nyní nelze psát, poněvadž f není v x_0 definována.
- Funkce je v bodě x_0 definována, má ale jinou hodnotu, než předpovídá její chování v okolí. Proto se limita nemění a platí $\lim_{x \rightarrow x_0} f(x) = f_a(x_0)$
- Funkce je v bodě x_0 definována, ale chování funkce zprava a zleva se liší (liší se limita zprava a limita zleva), proto nelze limitu definovat.

Ve většině případů je určení limity snadné, stačí pouze dosadit x_0 za x , např.

$$\lim_{x \rightarrow 0} x^3 + 2x^2 + 4 = 0^3 + 2 \cdot 0^2 + 4 = 4$$

Jindy prosté dosazení vede k neurčitému výsledku $\frac{0}{0}$ nebo $\frac{\infty}{\infty}$. Např.

$$\lim_{x \rightarrow 1} \frac{x^2 - 2x + 1}{x^2 - 1} = \frac{0}{0} = ?$$

Obrázek 2.6: Různé případy limity funkce v bodě x_0

Pak je třeba výraz nejprve vhodně upravit, např.

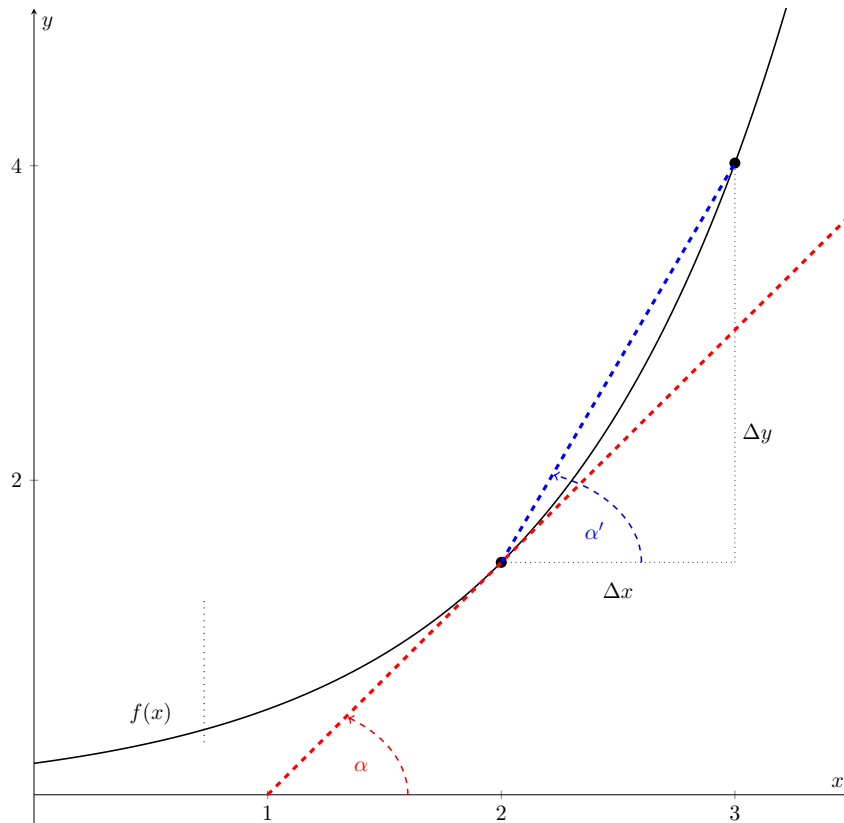
$$\lim_{x \rightarrow 1} \frac{x^2 - 2x + 1}{x^2 - 1} = \lim_{x \rightarrow 1} \frac{(x-1)^2}{(x+1)(x-1)} = \lim_{x \rightarrow 1} \frac{x-1}{x+1} = \frac{0}{2} = 0$$

2.4 Derivace funkce

Speciálním případem limity je derivace funkce. Určuje strmost nárůstu funkce.

2.4.1 Intuitivní představa derivace

Chceme posoudit, jak rychle narůstá funkce $f(x)$ v bodě x_0 , viz obr. 2.7. Řešení je v principu zřejmé: přiložíme k funkci v bodě $[x_0, f(x_0)]$ tečnu (červená přímka na obrázku) a určíme úhel α , který svírá s osou x , případně její směrnici $\tan \alpha$. Jak ale tuto tečnu a její směrnici určit? Můžeme najít přibližné řešení. Z obrázku je vidět, že směrnice $\tan \alpha$ modré úsečky, spojující

Obrázek 2.7: Derivace funkce $f(x)$ v bodě $x_0 = 2$

body $[x_0, f(x_0)]$ a $[x_0 + \Delta x, f(x_0 + \Delta x)]$, je jen o trochu vyšší než sklon tečny. Platí tedy

$$\tan \alpha \approx \tan \alpha' = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}$$

Je zároveň patrné, že se modrá a červená přímka budou postupně přibližovat, jak klesá Δx , až v limitním přechodu pro $\lim_{x \rightarrow x_0}$ splynou.

$$\tan \alpha = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta y}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}$$

2.4.2 Exaktní definice derivace

Často se místo symbolu Δx používá h . Derivace funkce v bodě x se značí $f'(x)$ nebo $\frac{df(x)}{dx}$. Derivace funkce f v bodě x je tedy definována jako

$$f'(x) \equiv \frac{df(x)}{dx} := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad (2.1)$$

Derivace je právě tím případem limity, kdy prosté dosazení vede k neurčitému výrazu typu $\frac{0}{0}$. Je proto nejprve potřeba použít nějakou úpravu či „trik“. Např.

$$\frac{dx^2}{dx} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{(x+h)^2 - x^2}{h} = \frac{(x+0)^2 - x^2}{h} = \frac{0}{0} = ? \quad (2.2)$$

Po předchozí úpravě však dostaneme

$$\frac{dx^2}{dx} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{(x+h)^2 - x^2}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{x^2 + 2hx + h^2 - x^2}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{2hx + h^2}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} 2x + h = 2x \quad (2.3)$$

2.4.3 Derivace elementárních funkcí

Obdobnými (většinou složitějšími) úpravami lze odvodit následující vztahy pro derivace elementárních funkcí, k je libovolná konstanta.

$$k' = 0 \quad (2.4)$$

$$(k \cdot f(x))' = k \cdot f'(x) \quad (2.5)$$

$$(x^n)' = n \cdot x^{n-1} \quad (2.6)$$

$$(\sin x)' = \cos x \quad (2.7)$$

$$(\cos x)' = -\sin x \quad (2.8)$$

$$(e^x)' = e^x \quad (2.9)$$

2.4.4 Derivace součtu, rozdílu, součinu a podílu

Pro derivaci součtu, rozdílu, součinu a podílu platí

$$(f(x) + g(x))' = f'(x) + g'(x) \quad (2.10)$$

$$(f(x) - g(x))' = f'(x) - g'(x) \quad (2.11)$$

$$(f(x) \cdot g(x))' = f'(x) \cdot g(x) + f(x) \cdot g'(x) \quad (2.12)$$

$$\left(\frac{f(x)}{g(x)}\right)' = \frac{f'(x) \cdot g(x) - f(x) \cdot g'(x)}{g^2(x)} \quad (2.13)$$

2.4.5 Derivace složených funkcí

Složenou funkcí se rozumí kombice dvou (nebo více) funkcí $f(x)$ a $g(x)$, přičemž jedna z nich je „uvnitř“ druhé, výsledek vnitřní funkce je argumentem vnější funkce. Ve výrazu $f(g(x))$ je f vnější a g vnitřní funkce. Uznačme výsledek vnitřní funkce jako y , tedy $y = g(x)$. Pro derivaci složené funkce pak platí

$$(f(g(x)))' = \frac{df(g(x))}{dx} = \frac{df(y)}{dx} = \frac{df(y)}{dy} \cdot \frac{dy}{dx} = f'(g(x)) \cdot g'(x) \quad (2.14)$$

Slovy formulováno: „derivace složené funkce je derivace vnější funkce krát derivace vnitřní funkce“. Pravidlo je nutno uplatnit opakovaně, pokud je vnořeno více úrovní funkcí.

2.4.6 Příklady výpočtu derivace funkcí

Příklad 1: Derivace složené funkce

$$(e^{x^2-2x})' = e^{x^2-2x} \cdot (2x-2)$$

Příklad 2: Derivace součtu funkcí

$$(\sin^2 x + \cos^2 x)' = 2 \sin x \cdot \cos x + 2 \cos x \cdot (-\sin x) = 0$$

Výsledek nás samozřejmě nepřekvapil, poněvadž víme, že derivace konstanty je nula a že

$$\sin^2 x + \cos^2 x = 1$$

Příklad 3: Derivace součinu funkcí

Podobně si ověříme pravidlo pro derivaci mocninné funkce, neboť

$$(x^5 \cdot x^4)' = 5x^4 \cdot x^4 + x^5 \cdot 4x^3 = 5x^8 + 4x^8 = 9x^8 = (x^9)'$$

Příklad 4: Derivace podílu funkcí

$$\left(\frac{e^x}{\sin x} \right)' = \frac{e^x \sin x - e^x \cos x}{\sin^2 x}$$

2.4.7 Derivace inverzních funkcí

Derivace inverzní funkce $f^{-1}(x)$ k $f(x)$ je rovna převrácené hodnotě derivace funkce $f(x)$ v bodě $f^{-1}(x)$,

$$(f^{-1}(x))' = \frac{1}{f'(f^{-1}(x))}$$

Příklad: Derivace logaritmu

Princip si ukážeme na derivaci logaritmu $\ln x$, inverzní funkci k e^x . Výraz v hranatých závorkách znamená „v bodě“, např. $[\ln x]$ znamená v bodě $[\ln x]$.

$$(\ln x)' = \frac{1}{(e^x)' [\ln x]} = \frac{1}{e^x [\ln x]} = \frac{1}{e^{\ln x}} = \frac{1}{x}$$

2.4.8 Derivace vyššího řádu

Dosud byla popsána derivace prvního řádu, tzv. první derivace, která popisuje rychlost růstu funkce. Derivace sama je ovšem též funkcí a je proto (většinou) možné ji znovu derivovat. Docházíme tak k druhým, třetím... derivacím, které se značí $f''(x)$, $f'''(x)$ nebo $\frac{d^2f(x)}{dx^2}$, $\frac{d^3f(x)}{dx^3}$. N-tá derivace je $f^{(n)}x$ nebo $\frac{d^nf(x)}{dx^n}$.

Příklad: Třetí derivace

$$\frac{d^3 x e^x}{dx^3} = [x e^x]''' = [e^x + x e^x]'' = [2e^x + x e^x]' = 3e^x + x e^x = e^x (x + 3)$$

2.4.9 Geometrický a fyzikální význam derivace

Geometrický význam derivace první derivace byl již naznačen. Derivace je směrnice tečny ke grafu funkce, určuje strmost nárůstu funkce.

Pokud se jedná o závislost nějaké proměnné na čase, určuje derivace okamžitou rychlost změny proměnné. Pokud je proměnnou dráha $s(t)$, kterou cyklista do doby t ujel, pak okamžitá rychlost cyklisty v čase t je

$$v = \frac{ds(t)}{dt}$$

Pokud $c(t)$ je koncentrace léčiva v plazmě v čase t , pak

$$-\frac{dc(t)}{dt}$$

je okamžitá rychlost poklesu plazmatické koncentrace léčiva.

Geometrickým významem druhé derivace je míra konvexity nebo konkavity funkce. První derivace funkce je v (lokálním) maximu i minimu nulová. V maximu je však funkce konkávní se zápornou druhou derivací. Velmi záporná druhá derivace značí velmi „ostré, špičaté“ maximum. Druhá derivace těsně pod nulou značí ploché maximum. V minimu je funkce naopak konvexní s kladnou druhou derivací. Vysoká druhá derivace znamená ostré minimum, nízká druhá derivace ploché minimum.

Fyzikálním významem druhé derivace je zrychlení. Nechť je $s(t)$ opět dráha, kterou cyklista do doby t ujel. Jeho okamžitá rychlost je

$$v = \frac{ds(t)}{dt}$$

Zrychlení a je nárůst okamžité rychlosti, proto

$$a = \frac{dv(t)}{dt} = \frac{d^2v(t)}{dt^2}$$

Druhá derivace je pro fyziku velmi důležitá, protože hned druhý Newtonův zákon popisuje vztah síly a zrychlení, tedy síly a druhé derivace polohy.

$$F = m \cdot a = m \cdot \frac{d^2v(t)}{dt^2}$$

Druhá derivace též popisuje oscilace a vlnění. Vlnová rovnice, popisující např. šíření elektrického vzruchu po axonu zní

$$\frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 z(x, t)}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 z(x, t)}{\partial x^2}$$

kde v je rychlost šíření vlny. Tím pomalu přecházíme k funkcím více proměnných.

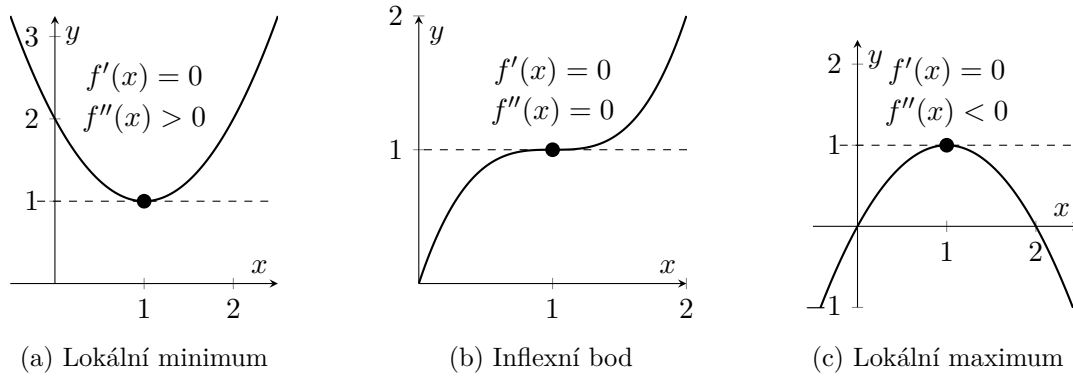
2.4.10 Vyšetřování průběhu funkce

Věnujme se však ještě krátce možnostem vyšetření průběhu funkce. Jak jsme již řekli, nulová derivace v bodě x_0 značí v tomto bodě 3 možné situace (obr. 2.8), které rozlišíme druhou derivací:

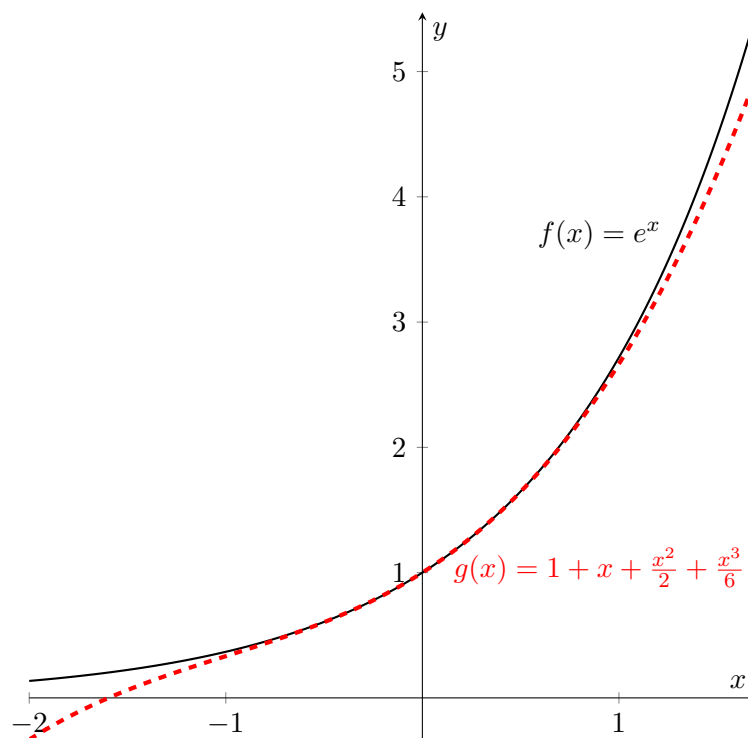
$$\frac{df(x_0)}{dx} = 0 \text{ a zároveň } \begin{cases} \frac{d^2f(x_0)}{dx^2} > 0 \dots \text{lokální minimum} \\ \frac{d^2f(x_0)}{dx^2} = 0 \dots \text{inflexní bod} \\ \frac{d^2f(x_0)}{dx^2} < 0 \dots \text{lokální maximum} \end{cases}$$

2.4.11 Taylorovy řady

Mějme za cíl přibližně nahradit nějakou složitou funkcí $f(x)$ v bodě x_0 a jeho blízkém okolí nějakou jednodušší funkcí $g(x)$. Například funkci $f(x) = e^x$ můžeme v okolí bodu $x_0 = 0$ aproximovat funkcí $g(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6}$, jak ukazuje obr. 2.9. Vidíme, že v blízkém okolí bodu $x_0 = 0$ je aproximace téměř přesná,



Obrázek 2.8: Vyšetření průběhu funkce

Obrázek 2.9: Aproximace funkce e^x polynomem

Pokusme se nyní konkrétně aproximovat funkci $f(x)$ v okolí bodu x_0 polynomem řádu n „centrovaným“ do bodu x_0 , tedy

$$g(x) = \sum_{i=0}^n a_i (x - x_0)^i = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)^2 + a_3(x - x_0)^3 \dots + a_n(x - x_0)^n$$

Chceme, aby se v bodě x_0 shodovaly hodnoty obou funkcí i všech jejich (prvních) n derivací,

tedy požadujeme platnost následujících rovností:

$$f(x_0) = g(x_0) \quad (2.15)$$

$$f'(x_0) = g'(x_0) \quad (2.16)$$

$$f''(x_0) = g''(x_0) \quad (2.17)$$

$$\vdots \quad (2.18)$$

$$f^{(k)}(x_0) = g^{(k)}(x_0) \quad (2.19)$$

Spočítejme všechny potřebné derivace funkce g .

$$g'(x) = a_1 + 2.a_2(x - x_0) + 3.a_3(x - x_0)^2 \dots + n.a_n(x - x_0)^{n-1}$$

$$g''(x) = 2.a_2 + 3.2.a_3(x - x_0) \dots + n.(n-1).a_n(x - x_0)^{n-2}$$

$$g'''(x) = 3!.a_3 + 4.3.2.a_4(x - x_0) \dots + n.(n-1).(n-2).a_n(x - x_0)^{n-3}$$

$$\vdots$$

$$g^{(k)}(x) = k!.a_k + (k+1)!.a_{k+1}(x - x_0) \dots + n(n-k+1).a_n(x - x_0)^{n-k}$$

$$\vdots$$

$$g^{(n)}(x) = n!.a_n$$

Dosadíme nyní derivace v bodě x_0 do rovností (2.15-2.18). Hrůza opadne, jakmile si uvědomíme, že pro $x = x_0$ jsou všechny členy obsahující $x - x_0$ nulové, čímž zmizí. Dostaneme tedy jednoduché vztahy

$$f(x_0) = a_0$$

$$f'(x_0) = a_1$$

$$f''(x_0) = 2a_2$$

$$f'''(x_0) = 3!a_3$$

$$\vdots$$

$$f^{(n)}(x_0) = n!.a_n$$

Tudíž $a_0 = f(x_0)$, $a_1 = f'(x_0)$, $a_2 = \frac{f''(x_0)}{2}$, \dots , $a_k = \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}$. Dospěli jsme tak k požadovanému polynomu

$$g(x) = \sum_{i=0}^n \frac{f^{(i)}(x_0)}{i!} (x - x_0)^i$$

$$= f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2}(x - x_0)^2 + \frac{f'''(x_0)}{6}(x - x_0)^3 \dots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n$$

Co kdybychom se neomezili na polynom řádu n a shodu v n derivacích, ale použili bychom hned polynom řádu ∞ , tedy nekonečnou mocninnou řadu. Opět bychom požadovali shodu v bodě x_0 i ve všech derivacích v bodě x_0 ,

$$g(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(i)}(x_0)}{i!} (x - x_0)^i$$

Lze ukázat, že za určitých podmínek pro některé funkce $f(x)$ polynom konverguje k funkci $f(x)$

ve všech bodech x , tedy že lze funkci $f(x)$ zcela a všech bodech nahradit polynomem $g(x)$.

Ilustrujme si použití polynomu na 2 příkladech:

Příklad 1: Aproximace funkce $f(x) = e^x$ v okolí bodu 0.

Spočítejme jednotlivé derivace. Pro funkci $f(x) = e^x$ platí, že $f(x) = e^x$, $f'(x) = e^x$, $f''(x) = e^x$, \dots , $f^{(n)}(x) = e^x$. Pro $x_0 = 0$ jsou tedy všechny derivace rovny 1. Po dosazení do rovnice ... dostaneme

$$e^x \approx 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} \dots + \frac{x^n}{n!}$$

Shodu pro polynom řádu 3 vidíme na obr. 2.9. Funkce e^x je právě jednou z funkcí, které lze zcela nahradit polynomem. Platí

$$e^x = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{x^i}{i!}$$

Speciálně pro $x = 1$ dostaneme vyjádření Eulerova čísla $e = 2,7182818285\dots$ pomocí nekonečné řady. Můžeme tak toto iracionální číslo vyjádřit s libovolnou přesností.

$$e = \frac{1}{0!} + \frac{1}{1!} + \frac{1}{2!} + \frac{1}{3!} \dots$$

Prvních 5 členů např. dává součet $1 + 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{6} + \frac{1}{24} = 2,708$, již docela blízký hodnotě e .

Příklad 2: Aproximace funkce $\sin x$ v okolí bodu 0.

Jednotlivé derivace pro $f(x) = \sin x$ jsou $f'(x) = \cos x$, $f''(x) = -\sin x$, $f^{(3)}(x) = -\cos x$, $f^{(4)}(x) = \sin x$, a dále stále periodicky. Pro $x_0 = 0$ jsou tedy derivace (včetně 0. derivace) postupně rovny 0, 1, 0, -1, 0, 1, 0, -1 ... Po dosazení do rovnice ... dostaneme

$$\sin x \approx x - \frac{x^3}{6} + \frac{x^5}{5!} + \dots$$

Shodu pro polynom řádu 5 vidíme na obr. 2.10. Vidíme typickou vlastnost polynomu - na okraji intervalu polynom rychle uniká k $\pm\infty$. I funkci $\sin x$ lze zcela nahradit polynomem. Platí

$$\sin x = \sum_{i=0}^{\infty} \sin[\pi(i \bmod 4)] \frac{x^i}{i!}$$

Použili jsme operaci modulo, t.j. zbytek po dělení. $i \bmod 4$ je zbytek po dělení čtyřmi.

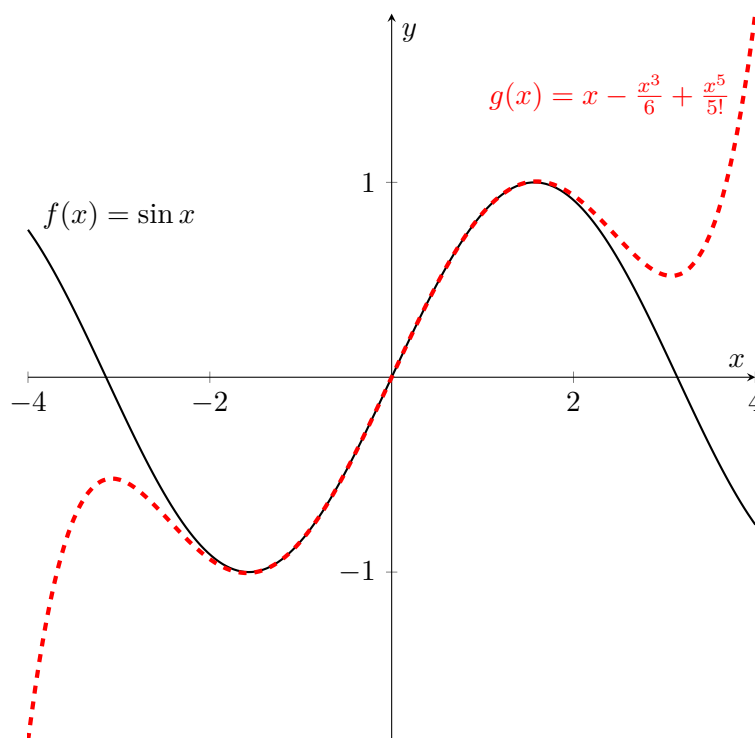
2.5 Funkce více proměnných

2.5.1 Představa funkce více proměnných

Reálná funkce n reálných proměnných přiřazuje n -tici reálných čísel reálné číslo, je to tedy zobrazení

$$f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} : (x_1, x_2, \dots, x_n) \rightarrow f(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

Funkce dvou proměnných má jasnou vizuální představu, např. kopce a údolí nad krajinou, viz obr. 2.11. Dva rozměry, x a y , „leží“ v rovině podstavy, funkční hodnotou je např. nadmořská výška. Funkce 3 proměnných je ještě představitelná, např. rozložení teploty v prostoru místnosti, kde je každému bodu přiřazena určitá teplota. Funkce více než 3 proměnných již nejsou vizuálně představitelné, ale matematicky s nimi lze nadále operovat.

Obrázek 2.10: Aproximace $\sin x$ polynomem

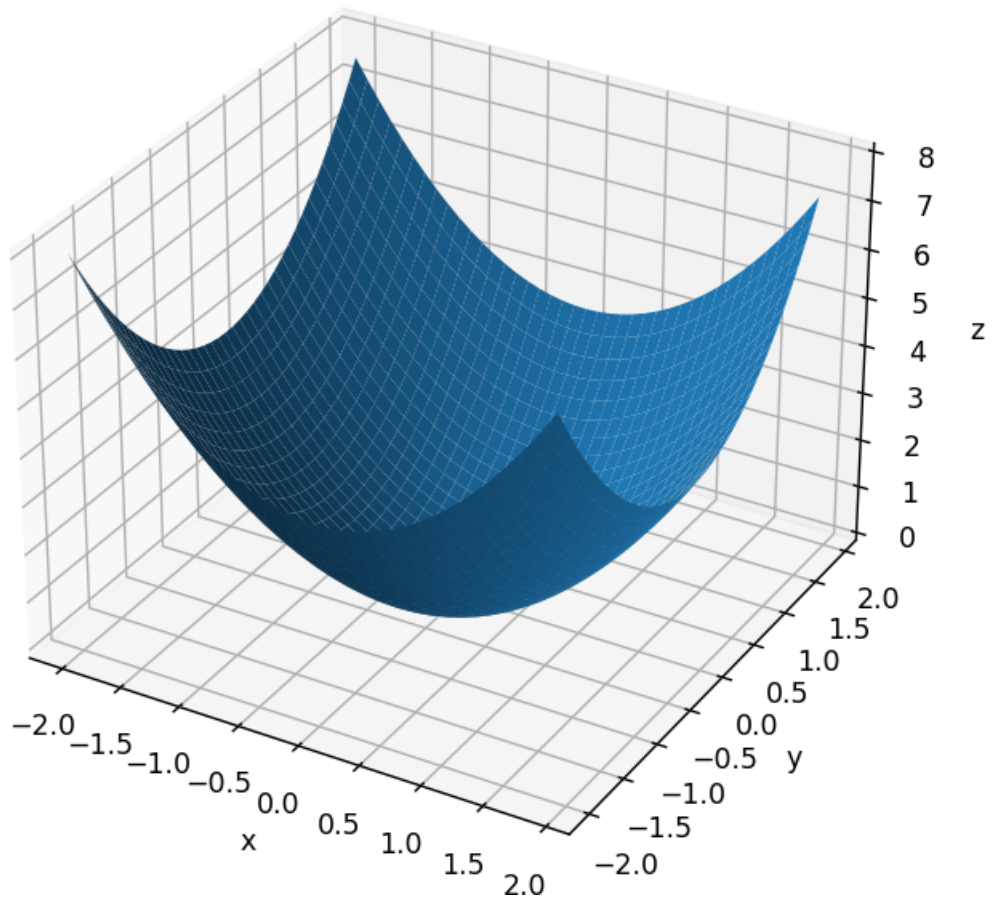
2.5.2 Parciální derivace

Parciální derivace je obdoba jednoduché derivace pro případ více proměnných. Parciální derivaci funkce f podle x značíme $\frac{\partial f}{\partial x}$. Jak bylo výše popsáno, pokud zjišťujeme derivaci funkce jedné proměnné v bodě x_0 , sestrojíme nejprve tečnu k funkci v tomto bodě a pak určíme její směrnici. Významem je tedy rychlost nárůstu funkce. Podobnou úlohu má i parciální derivace. Představme si pro jednoduchost funkci dvou proměnných, tedy hory v krajině. Problémem je, že u funkce dvou proměnných neexistuje jen jedna tečna, nýbrž celá tečná rovina. Kterákoli přímka v ní ležící a procházející bodem dotyku roviny s funkcí, je tečnou k funkci. Vyberme si dvě speciální tečny. První tečna bude mířit ve směru osy x , její projekce do podstavy (t.j. roviny x - y) bude rovnoběžná s osou x . Druhá tečna bude naopak mířit ve směru osy y , její projekce je rovnoběžná s osou y . Směrnice těchto dvou tečen označujeme jako parciální derivaci podle x , resp. podle y . Výhoda těchto speciálních tečen je v tom, že se při pohybu ve směru tečny mění jen jedna proměnná (x nebo y), ale druhá zůstává konstantní. Parciální derivace podle x a y k funkci $f(x, y)$ v bodě (x_0, y_0) tedy stejně jako obyčejnou derivaci definujeme jako

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0) := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + h, y_0) - f(x_0, y_0)}{h}$$

$$\frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0, y_0 + h) - f(x_0, y_0)}{h}$$

Jak je vidět přímo v definici, druhá proměnná se „v rámci parciální derivace“ chová jako konstanta. Můžeme tedy použít známá pravidla pro derivování, pouze druhou proměnnou považujeme za konstantu. Geometrickým významem parciální derivace funkce dvou proměnných je strmost funkce ve směru příslušné osy. Fyzikálním významem parciální derivace je rychlost nárůstu funkce se změnou jedné proměnné, přičemž ostatní proměnné zůstávají konstantní. Tento fyzikální význam je zachován i pro funkce 3 a více proměnných, ačkoli vizuální představu „tečné roviny“ již nelze uplatnit.

Obrázek 2.11: Rotační paraboloid: $z = x^2 + y^2$

Ilustrujme si postup na několika příkladech.

Příklad 1: $f(x, y) = x^3 + y^3$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 3x^2$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = 3y^2$$

Příklad 2: $f(x, y) = \sin x \cdot \cos y$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \cos x \cdot \cos y$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = -\sin x \cdot \sin y$$

Příklad 3: $f(x, y) = x^2 y \cdot \sin x$

Platí známé pravidlo pro derivování součinu. Přitom v součinu vystupuje pouze funkce x !

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 2xy \cdot \sin x + x^2 y \cdot \cos x$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = x^2 \cdot \sin x$$

Příklad 4: $f(x, y) = e^{x^2+y^2}$

Platí známé pravidlo pro derivování složené funkce.

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial x} &= e^{x^2+y^2} \cdot 2x \\ \frac{\partial f}{\partial y} &= e^{x^2+y^2} \cdot 2y\end{aligned}$$

Příklad 5: $f(x, y, z) = x^5 e^{xyz}$

Stejný postup platí pro funkci 3 a více proměnných.

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial x} &= 5x^4 e^{xyz} + x^5 e^{xyz} \cdot yz \\ \frac{\partial f}{\partial y} &= x^5 e^{xyz} \cdot xz \\ \frac{\partial f}{\partial z} &= x^5 e^{xyz} \cdot xy\end{aligned}$$

2.5.3 Vyšší a smíšené parciální derivace

Stejně jako v případě derivace funkce jedné proměnné je i výsledkem parciální derivace funkce více proměnných opět funkce více proměnných. Tuto novou funkci ovšem můžeme opět podrobit derivování, nyní ovšem máme více možností, podle x , podle y . . . Dospějeme tak druhým, třetím, případně smíšeným derivacím.

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$$

Příklad: $f(x, y) = e^{x^2+y^2}$

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial x} &= e^{x^2+y^2} \cdot 2x \\ \frac{\partial f}{\partial y} &= e^{x^2+y^2} \cdot 2y \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} &= e^{x^2+y^2} \cdot 4x^2 + 2e^{x^2+y^2} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} &= e^{x^2+y^2} \cdot 4y^2 + 2e^{x^2+y^2} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} &= \frac{\partial e^{x^2+y^2} \cdot 2x}{\partial y} = e^{x^2+y^2} \cdot 4xy\end{aligned}$$

V případě smíšených druhých derivací máme dvě možnosti: derivovat nejprve podle x a poté podle y , nebo opačně. Dostaneme tak $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$ nebo $\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}$. V matematické analýze se dokazuje Schwarzova věta, která tvrdí, že nezáleží na pořadí derivování ve smíšených parciálních derivacích, tedy že

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}$$

Vidíme např., že platí

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\partial (e^{x^2+y^2} \cdot 2x)}{\partial y} = e^{x^2+y^2} \cdot 4xy$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} = \frac{\partial (e^{x^2+y^2} \cdot 2y)}{\partial x} = e^{x^2+y^2} \cdot 4xy$$

2.5.4 Vyšetřování průběhu funkce více proměnných

Průběh funkce více proměnných může být podstatně složitější než průběh funkce jedné proměnné. V určitém bodě se například může nacházet lokální maximum nebo lokální minimum. Nebo se v určitém směru může nacházet minimum a v kolmém směru maximum, pak se jedná o tzv. sedlový bod. Obecně ale může být situace ještě komplikovanější. Podobně jako v případě funkcí jedné proměnné je nutnou podmínkou pro extrém funkce $f(x, y)$ v bodě (x_0, y_0) nulovost obou parciálních derivací, tedy

$$\frac{\partial f(x_0, y_0)}{\partial x} = 0; \quad \frac{\partial f(x_0, y_0)}{\partial y} = 0$$

Není to však podmínka postačující. Může se stát, že jsou obě parciální derivace nulové, ale ve směru „mezi osami“ funkce roste a nejedná se tedy o lokální extrém. V reálných problémech však podmínka většinou „postačující“ je.

Příklad: Najdeme lokální extrémy funkce $f(x, y) = x^2 + y^2$ (obr. 2.11).

Pro extrém musí platit

$$\frac{\partial(x^2 + y^2)}{\partial x} = 2x = 0$$

$$\frac{\partial(x^2 + y^2)}{\partial y} = 2y = 0$$

Jediným řešením je zjevně bod $(0,0)$, kde funkce dosahuje minima.

2.6 Integrální počet

2.6.1 Idea integrálního počtu

Pokud zderivujeme x^2 , získáme $2x$. Položme si opačnou úlohu. Co jsme museli zderivovat, abychom dostali $2x$? Snadné. x^2 . Ovšem též $x^2 + c$, kde c je libovolná konstanta. Integrovaní je právě ta zpětná cesta, určitý opak derivace. Takový integrál, opak derivace, se označuje jako neurčitý integrál a značí se symbolem \int . Dále existuje určitý integrál, který „počítá“ plochu pod křivkou, a úzce souvisí s neurčitým integrálem. Dále si přesněji definujeme oba integrály, popíšeme si jejich vlastnosti a způsoby výpočtu. Budeme se zabývat pouze funkcemi jedné proměnné.

2.6.2 Neurčitý integrál

Mějme funkci $F(x)$. Její derivaci označme $f(x)$, tedy $f(x) := F'(x)$. $F(x)$ označujeme jako primitivní funkci nebo synonymně jako neurčitý integrál k funkci $f(x)$ a značíme

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

dx značí proměnnou, podle níž integrujeme, podobně jako dx značilo proměnnou, podle níž jsme derivovali. Protože pro jakoukoli funkci $F(x) + c$ platí $(F(x) + c)' = f(x)$, měli bychom správněji psát

$$F(x) = \int f(x) dx + c$$

čímž vyznačíme, že řešením integrace není jedna funkce, ale celá nekonečná množina funkcí, které se navzájem liší o konstantu.

2.6.3 Metody integrace

Integrovaní je podstatně složitější činnost, než derivování. Pomocí pravidel pro derivování lze víceméně snadno zderivovat jakoukoli (běžnou) funkci. Integrovat jakoukoli funkci obecně nejen není snadné, ale ani možné. Např. integrál ze statistiky známé Gaussovy funkce

$$\int e^{-x^2} dx$$

sice existuje, ale není vyjádřitelný v uzavřené formě pomocí elementárních funkcí jako e^x , $\ln x$ nebo $\sin x$. Existuje několik metod integrace, ani s nimi však řada funkcí není snadno integrovatelná.

Přímá integrace

U základních elementárních funkcí, kde „původní derivaci přímo vidíme“, je integrace snadná.

Příklady:

$$\begin{aligned}\int 1 dx &= x + c \\ \int x dx &= \frac{1}{2}x^2 + c \\ \int x^n dx &= \frac{1}{n+1}x^{n+1} + c \\ \int \cos x dx &= \sin x + c \\ \int \sin x dx &= -\cos x + c \\ \int e^x dx &= e^x + c \\ \int e^{2x} dx &= \frac{1}{2}e^{2x} + c \\ \int \frac{1}{x} dx &= \ln x + c \\ \int \frac{1}{x^2} dx &= -\frac{1}{x} + c \\ \int f(x) \pm g(x) dx &= \int f(x) dx \pm \int g(x) dx + c \\ \int k \cdot f(x) dx &= k \cdot \int f(x) dx + c\end{aligned}$$

Cokoli dalšího už je složitější. Podobný jednoduchý vztah jako pro derivaci součinu a další podobné pro integrování neexistuje. Někdy pomůže substituční metoda nebo metoda per partes.

Substituční metoda

Pomocí substituční metody nahradíme, substituujeme, komplikovanější část integrované funkce jinou funkcí, čímž získáme jednodušší tvar, který už umíme přímo integrovat.

Příklad: Řešme integrál $\int x \sin x^2 dx$

„Uhádnout“ správné řešení neumíme. Použijme však následující substituci: nahradíme funkci x^2 funkcí t , tedy $t := x^2$. Pak platí

$$\frac{dt}{dx} = 2x \rightarrow x dx = \frac{1}{2} dt$$

Je to podivné, ale s diferenciály d můžeme operovat jako v jiných výrazech, násobit, dělit Dosadme nyní vše do původního výrazu a upravme. Dostaneme

$$\int x \sin x^2 dx = \int \frac{1}{2} \sin t dt = \frac{1}{2} \int \sin t dt = -\frac{1}{2} \cos t = -\frac{1}{2} \cos x^2$$

Tímto „trikem“ jsme integrál převedli na známý tvar a přímo vyřešili. Derivací ověříme, že

$$\frac{d}{dx} -\frac{1}{2} \cos x^2 = -\frac{1}{2} \frac{d \cos x^2}{dx} = x \sin x^2$$

Příklad: Zkusme ještě vyřešit integrál $\int \frac{\ln x}{x} dx$

Použijeme substituci $t := \ln x$, odkud $dt = \frac{dx}{x}$. Proto

$$\int \frac{\ln x}{x} dx = \int t dt = \frac{1}{2} t^2 = \frac{1}{2} \ln^2 x$$

Derivací ověříme, že

$$\frac{d}{dx} \frac{1}{2} \ln^2 = \frac{1}{2} \frac{d \ln^2}{dx} = \frac{\ln x}{x}$$

Metoda per partes

Druhou metodou, kterou si představíme, je metoda integrování „po částech“, per partes. Je aplikací pravidla pro derivování součinu.

$$(f \cdot g)' = f' \cdot g + f \cdot g' \rightarrow f' \cdot g = (f \cdot g)' - f \cdot g'$$

Nyní obě strany zintegrujeme a využijeme skutečnosti, že „integrál z derivace“ se rovná původní funkci.

$$\int f'(x) \cdot g(x) dx = \int (f(x) \cdot g(x))' dx - \int f(x) \cdot g'(x) dx$$

Tedy

$$\int f'(x) \cdot g(x) dx = f(x) \cdot g(x) - \int f(x) \cdot g'(x) dx$$

Zdánlivě jsme mnoho nezískali. Funkce g se však po derivaci může výrazně zjednodušit. Ukažme si postup na příkladech.

Příklad: Vypočítejme $\int \sin x \cdot x dx$.

Představme si, že $f'(x) = \sin x$ a $g(x) = x$. Pak $f(x) = -\cos x$ a $g'(x) = 1$. Dosadíme do výše uvedeného vzorce.

$$\int \sin x \cdot x dx = -x \cos x - \int -\cos x dx = -x \cos x + \sin x$$

Derivací ověříme, že

$$\frac{d}{dx}(-x \cos x + \sin x) = -\cos x + x \sin x + \cos x = x \sin x$$

Příklad: Vypočítejme nyní $\int \ln x \, dx$.

Integrál si představme jako $\int \ln x \cdot 1 \, dx$ a definujme $f'(x) = 1$ a $g(x) = \ln x$. Pak $f(x) = x$ a $g'(x) = \frac{1}{x}$. Dosadíme do vyše uvedeného vzorce.

$$\int \ln x \, dx = x \ln x - \int \frac{x}{x} \, dx = x \ln x - x = x(\ln x - 1)$$

Derivací ověříme, že

$$\frac{d}{dx}(x \ln x - x) = \ln x + \frac{x}{x} - 1 = \ln x$$

2.6.4 Určitý integrál

Určitý integrál, též označovaný jako Riemannův integrál, historicky vznikl nezávisle na integrálu neurčitým a nemá s ním na první pohled žádnou souvislost. Úkolem bylo určit velikost plochy pod křivkou. Princip spočíval v tom, že celá plocha pod křivkou rozdělí na úzké obdélníky a sečte se plocha všech obdélníků. Je přitom jasné, že jak roste počet obdélníků a klesá jejich šířka, součet plochy obdélníků se stále více blíží ploše pod křivkou, až v limitě obě plochy splynou. Určitý integrál je vlastně „sčítání nekonečně velkého počtu nekonečně malých čísel“. Výpočet plochy pod křivkou jako limity součtu je ovšem velmi obtížný. Elegantním řešením je výpočet určitého integrálu pomocí neurčitýho integrálu.

Vztah neurčitýho a určitého integrálu

Pokusíme se odvodit vztah mezi určitým a neurčitým integrálem. Chceme určit plochu pod křivkou na obr. 2.12, přičemž plochu budeme měřit od nějakého konkrétního, ale libovolného bodu vlevo, např. od $x = -2$. V takovém případě je změřená plocha funkcí x . Např. v bodě X_0 je to $S = S(x_0)$. O malý úsek h dále je obsah roven $S(x_0 + h)$. Rozdíl mezi oběma obsahy je na obr. 2.12 vyznačen žlutě. Je zjevné, že je tento rozdíl téměř roven obsahu červeně vyšrafovaného obdélníku o rozměrech h a $f(x_0)$. Platí tedy

$$f(x_0) \cdot h \approx S(x_0 + h) - S(x_0)$$

Jak se h blíží nule, „žlutá a červená plocha“ si jsou stále bližší, až v limitě pro $h \rightarrow 0$ splynou. Tedy

$$\lim_{h \rightarrow 0} f(x_0) \cdot h = \lim_{h \rightarrow 0} S(x_0 + h) - S(x_0)$$

Po úpravě dostaneme

$$f(x_0) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{S(x_0 + h) - S(x_0)}{h}$$

Výraz na pravé straně rovnice je ale právě definice derivace S podle x . Tedy

$$f(x) = \frac{dS(x)}{dx}$$

Po integraci platí

$$S(x) = \int f(x)dx + C$$

Konstanta C je libovolná, určena bodem, kde jsme „začali měřit“ plochu. Pro plochu mezi body $x = a$ a $x = b$ platí

$$S(b) - S(a) = \left[\int f(x)dx \right]_{(b)} + C - \left[\int f(x)dx \right]_{(a)} - C =: \int_a^b f(x)dx$$

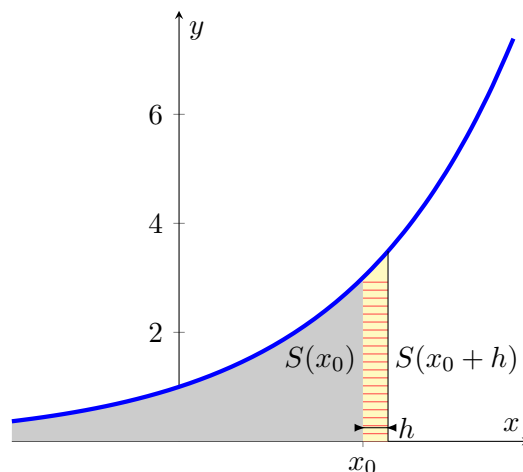
Tím dostáváme způsob, jak vypočítat určitý integrál pomocí neurčitého. Stačí určit libovolnou primitivní funkci (neurčitý integrál), určit její hodnoty v horní i dolní integrační mezi a obě hodnoty odečíst. Jestliže primitivní funkci k $f(x)$ označíme $F(x)$, tedy

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

platí

$$\int_a^b = [F(x)]_a^b = F(b) - F(a)$$

V kontextu výpočtu integrálu bývá zvykem rozdíl $F(b) - F(a)$ označovat $[F(x)]_a^b$.



Obrázek 2.12: Odvození vztahu určitého a neurčitého integrálu

Příklady aplikací určitého integrálu

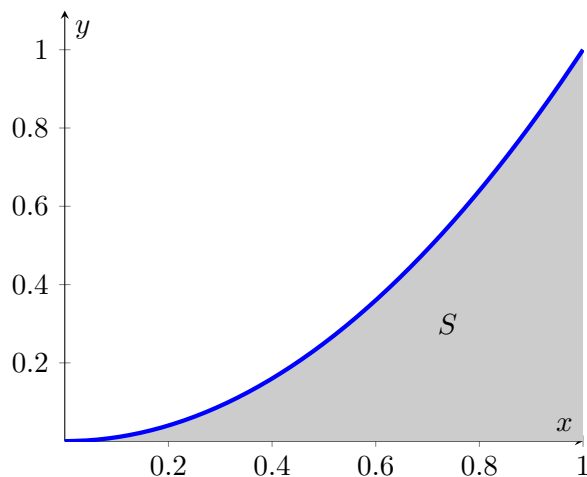
Příklad 1: Výpočet plochy pod grafem funkce

Chceme zjistit plochu pod grafem funkce $y = x^2$ pro $x \in [0, 1]$ (obr. 2.13).

$$S = \int_0^1 x^2 dx = \left[\frac{1}{3} x^3 \right]_0^1 = \frac{1}{3}$$

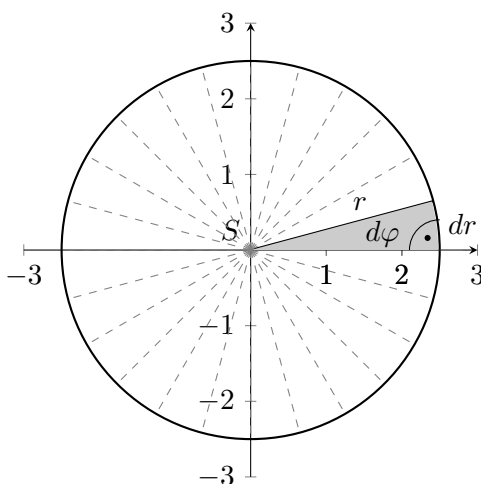
Příklad 2: Výpočet obsahu kruhu

Chceme odvodit známý vztah pro výpočet obsahu kruhu $S = \pi r^2$. Postupujme podle obr. 2.14. Máme kruh o poloměru r , který si celý rozložíme na infinitezimálně úzké rovnoramenné trojúhelníky, které každý svírají úhel $d\varphi$, mají ramena délky r a základnu dr . Umědomíme si, že úzký rovnoramenný trojúhelník je v podstatě pravoúhlý. Pro jeho obsah dS tedy platí $dS = r \cdot dr / 2$. Z definice úhlu víme, že $dr = r \cdot d\varphi$. Nyní stačí sečíst, tedy zintegrovat, všechny trojúhelníky přes celý kruh, tedy pro $\varphi \in [0, 2\pi]$.



Obrázek 2.13: Plocha pod grafem funkce

$$S = \int_0^S dS = \int_0^{2\pi} \frac{1}{2} r^2 d\varphi = \frac{1}{2} r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = \frac{1}{2} r^2 \cdot 2\pi = \pi r^2$$



Obrázek 2.14: Výpočet plochy kruhu

Příklad 3: Biologická dostupnost léku a AUC (area under curve)

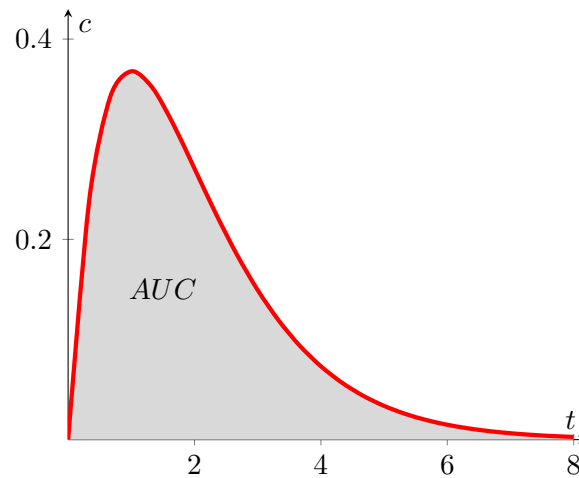
Víme, kolik léku jsme podali (D). Nevíme však, jaká jeho část se vstřebala do plazmy (D_r). Můžeme tuto vstřebanou část, označovanou jako biologická dostupnost léku, nějak zjistit? Je jasné, že veškeré množství léku, které se z plazmy eliminovalo, musí být právě tomu množství do ní vstřebaného. Eliminaci samu ale také měřit nemůžeme. Můžeme však měřit koncentraci léku opakovaně v čase a eliminaci z křivky koncentrace léku v čase dopočítat (obr. 2.15), když známe nějaké farmakokinetické parametry léku, např. jeho clearance. Clearance, Cl je definována jako objem plazmy, který je od léku úplně očištěn za jednotku času, má tedy rozměr např. $ml \cdot s^{-1}$. Za čas dt se tedy očistí $Cl \cdot dt$ plazmy. Pokud v tu chvíli činila plazmatická koncentrace léku c , odstranilo se množství $c \cdot Cl \cdot dt$ léku. Pokud clearanci považujeme za konstantní, odstranilo se od okamžiku podání léku za dostatečně („nekonečně“) dlouhou dobu

$$D_r = \int_0^{\infty} c \cdot Cl \cdot dt = Cl \cdot \int_0^{\infty} c dt$$

léku. Integrál $\int_0^{\infty} c dt$ je přitom plocha pod koncentrační křivkou a označuje se jako area under

curve (AUC). Pro biologickou dostupnost tedy platí

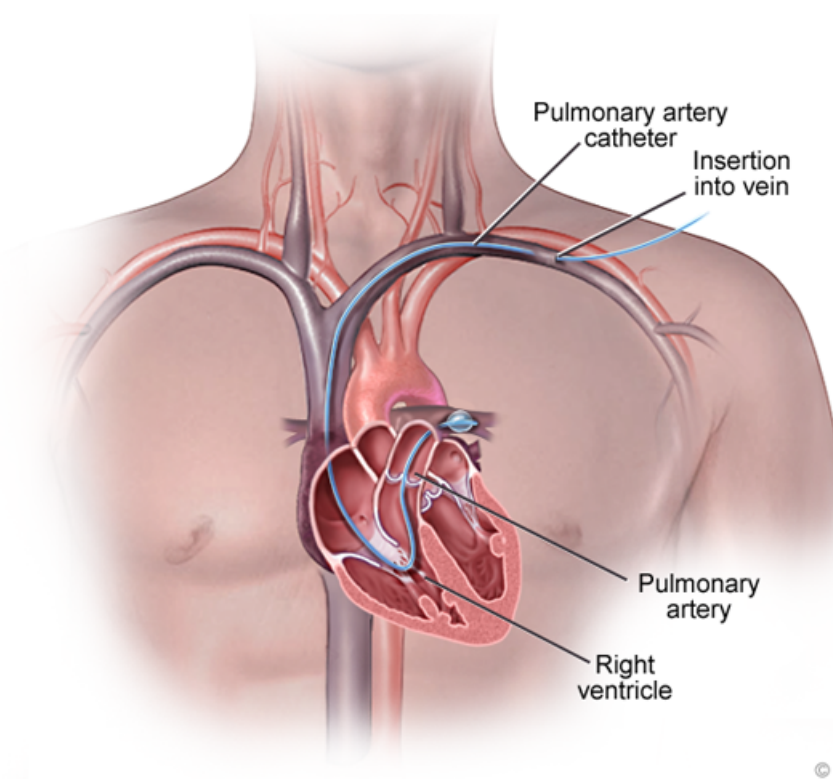
$$\frac{D_r}{D} = \frac{Cl \cdot AUC}{D}$$



Obrázek 2.15: Plocha pod křivkou plazmatické koncentrace léku v čase

Příklad 4: Měření srdečního výdeje pomocí Swan-Ganzova katetru

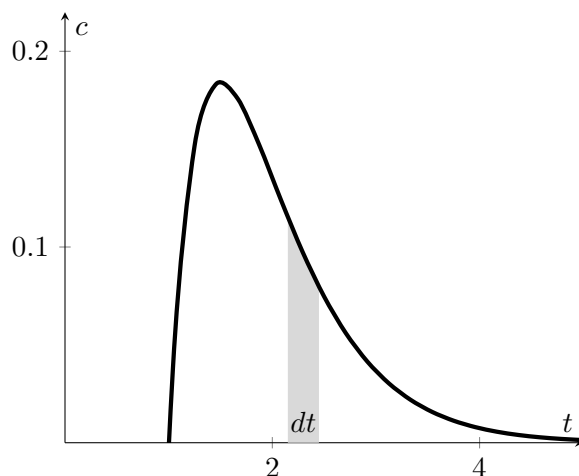
Swan a Ganz vyvinuli svůj po nich pojmenovaný plovoucí katetr v roce 1970. Katetr se cestou centrální žíly (např. v. jugularis interna) zavede přes pravou síň a komoru do a. pulmonalis (obr. 2.16).



Obrázek 2.16: Swan-Ganzův plicnicový katetr

Tam jednak měří tlak, jednak jej lze využít k měření srdečního výdeje. Princip techniky je následující: Chladná kapalina (tzv. termodiluční metoda) nebo nějaká měřitelná látka se rychle

vstříkne do pravé síně. Kapalina ochladí kolem tekoucí krev nebo zředí vstříkovanou látku. Jakmile krev doputuje do a. pulmonalis, čidlo na konci katetru změří teplotu nebo koncentraci látky v čase, výsledkem je křivka na obr. 2.17. Ze známého množství aplikované látky a změřené křivky lze dopočítat srdeční výdej.



Obrázek 2.17: Křivka měřená Swan-Ganzovým katetrem

Obr. 2.18 představuje a. pulmonalis, v níž je měřena křivka 2.17. Krev teče průtokem q , který v případě a. pulmonalis odpovídá minutovému srdečnímu výdeji. Za čas dt proteče kolmým průřezem a. pulmonalis (viz obrázek 2.18) objem krve $dV = q \cdot dt$. Pokud koncentrace látky (nebo pokles teploty) v tomto elementárním objemu krve je c , pak tento objem obsahuje $dN = c \cdot q \cdot dt$ látky. Po celou dobu měření přitom musí postupně protéct veškerá podaná látka N . Stačí tedy sečíst, zintegrovat, jednotlivá elementární množství látky. Integrujeme opět od 0 do „nekonečna“.

$$N = \int_0^N dN = \int_0^\infty c \cdot q \cdot dt = q \int_0^\infty c \cdot dt$$

Funkce $c(t)$ je změřená křivka. Integrál $\int_0^\infty c \cdot dt$ opět měří plochu pod křivkou. Pro srdeční výdej CO (cardiac output) tedy dostáváme

$$CO = \frac{N}{\int_0^\infty c \cdot dt}$$

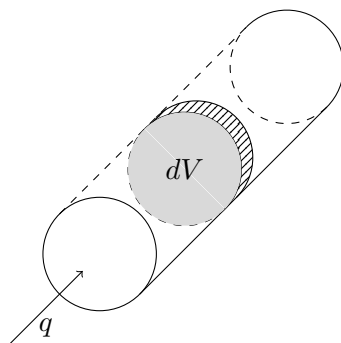
Na první pohled kontraintuitivní je skutečnost, že čím nižší je srdeční výdej, tím větší je křivka i plocha pod ní.

Zde odvozenou rovnici pro případ měření koncentrace nějaké látky je pro případ termodiluce nutno jen lehce „obohatit“ o teplotu krve a podávané tekutiny a o tepelnou kapacitu krve. Rovnice se v literatuře označuje jako Stewart-Hamiltonova a zní

$$CO = \frac{V(T_b - T_i)k_1k_2}{\int_{t_1}^{t_2} \Delta T \cdot dt}$$

kde V je objem podané tekutiny, T_b a T_i teploty krve a podané tekutiny, k_1 spojuje hustotu a tepelnou kapacitu, k_2 je kalibrační konstanta a ΔT je aktuálně měřený rozdíl mezi teplotou protékající krve a teplotou krve před podáním roztoku.

Je zajímavé poznamenat, že se změřená křivka 2.17 v průběhu putování krve příliš nemění. Je téměř stejná ve větvích a. pulmonalis jako přímo v a. pulmonalis, ale podobná je i po průchodu plicemi v arteriální krvi. Toho lze využít k méně invazivnímu, ale jen lehce méně přesnému měření srdečního výdeje pomocí tzv. transpulmonální termodiluce (například systémem zvaným



Obrázek 2.18: Měření srdečního výdeje pomocí Swan-Ganzova katetru

zvaným PiCCO). Chladný roztok se podává centrální katetrem do pravé síně a teplota se měří až speciálním arteriálním katetrem v arteria radialis nebo arteria femoralis. Odpadá tak invazivita a komplikace spojené s nutností zavedení katetru až do a. pulmonalis.

2.7 Obyčejné diferenciální rovnice

Nyní si v základech představíme pro potřeby matematického modelování zásadní oblast matematické analýzy, diferenciální rovnice. Říká se, že diferenciální rovnice jsou nejpřirozenější formulací fyzikálních zákonů. Obyčejné diferenciální rovnice se často označují zkratkou ODE, z anglického ordinary differential equations. V této kapitole popíšeme analytické metody řešení ODE. Analytickým řešením se rozumí matematický výraz popisující hledanou funkci, například $y = \cos x$. Poněvadž však většinu diferenciálních rovnic neumíme řešit analyticky, pro praktické použití důležitější jsou numerické metody řešení, které budou popsány v další kapitole. Výsledkem numerického řešení je graf nebo vybrané hodnoty hledané funkce, ale nikoli vztah ji popisující.

2.7.1 Idea diferenciálních rovnic

Představme si jakoukoli pro nás dosud známou algebraickou rovnici, například

$$x^2 + 2x - 1 = 0$$

Řešením (algebraické) rovnice je číslo. Diferenciální rovnice je rovnice, která obsahuje derivaci nějaké neznámé funkce. Řešením diferenciální rovnice je funkce. Jako příklad vezměme nějakou funkci, označme ji $y(x)$ a požadujme například, aby se její derivace rovnala funkci samé. Takový požadavek formulujeme diferenciální rovnicí

$$y' = y$$

Je zřejmé, že této diferenciální rovnici vyhovuje například funkce $y(x) = e^x$, ale též $y(x) = k \cdot e^x$, kde k je libovolná konstanta. Řešení diferenciální rovnice tedy není jednoznačné, ale liší se o konstantu. Hodnotu konstanty pro konkrétní případ aplikace můžeme určit ze známých okolností popisovaného děje, například ze známé hodnoty funkce v čase $t = 0$. Hovoříme o tzv. počátečních nebo okrajových podmínkách.

2.7.2 Základní pojmy

Vysvětlíme se několik základních pojmů z problematiky diferenciálních rovnic. Neznámou funkcí bude dále y , nezávisle proměnnou bude x , tedy $y(x)$. Pro derivaci budeme ekvivalentně používat zápis y' nebo $\frac{dy}{dx}$.

Řádem diferenciální rovnice se rozumí nejvyšší stupeň derivace přítomný v diferenciální rovnici. Je-li nejvyšší derivace první, pak jde o rovnici 1. řádu. Je-li nejvyšší derivace n -tá, pak je rovnice n -tého řádu. Rovnice $y'x + y = 2x^2$ je tedy 1. řádu, rovnice $xy' + 2x = y''$ je třetího řádu.

Lineární diferenciální rovnice je taková, kdy se neznámá, y nebo její derivace, vyskytuje pouze v součtu, nikoli v součinu. Rovnice $y' + 2y = x^2$ je tedy lineární, rovnice $yy' = x$ je nelineární. Poznamenejme, že x není neznámá, proto se součin x , resp. $f(x)$, a y v lineární rovnici vyskytovat může. Rovnice $xy' + 2y = x$ je tedy též lineární. Obecně můžeme lineární diferenciální rovnici 2. řádu (a obecně jakéhokoli řádu) zapsat jako

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

Pokud jsou $a(x)$, $b(x)$ i $c(x)$ konstanty, hovoříme o rovnici s konstantními koeficienty. Na pravé straně rovnice se nevyskytuje neznámá, pouze funkce x . Jestliže je pravá strana rovnice nulová, tedy $d(x) \equiv 0$, hovoříme o **homogenní** rovnici, jinak o **nehomogenní**.

Ve výše uvedeném příkladu jsme našli $y(x) = e^x$ jako jedno konkrétní řešení rovnice $y' = y$. Každé konkrétní řešení označuje jako **partikulární**. Existuje ale nekonečně mnoho partikulárních řešení, která jsou všechna zapsatelná obecným tvarem $y(x) = k \cdot e^x$, kde $k \in \mathbb{R}$. Takovému obecnému zápisu říkáme **obecné řešení**. Najít nějaké partikulární řešení, narozdíl od obecného řešení, může být snadné, lze jej např. uhádnout. Takovým zjevným partikulární řešení uvedené rovnice $y' = y$ je např. $y(x) = 0$.

2.7.3 Metoda separace proměnných

Řešme nyní rovnici již zmíněnou rovnici $y' = y$ systematickým způsobem. Derivaci můžeme přepsat do tvaru podílu dvou diferenciálů, dy a dx ,

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

S diferenciály můžeme zacházet jako s čísly, např. jimi násobit či dělit. Převědeme rovnici na tvar

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

Tím jsme vše související s y přesunuli na levou stranu rovnice a vše související s x na pravou stranu. Postup označujeme jako **separace proměnných**. Nyní před oba diferenciály napíšeme integrál a zintegrujeme, čímž vyřešíme rovnici.

$$\int \frac{dy}{y} = \int dx \rightarrow \ln y = x + C$$

Po úpravě dostaneme obecné řešení rovnice

$$y = e^{x+C} = e^C \cdot e^x = ke^x$$

kde $k := e^C$. Hodnotu konstanty získáme z počátečních podmínek. Požadujeme například, aby $y(0) = y_0$. Pak je $k = y_0$ a odpovídající partikulární řešení zní

$$y = y_0 e^x$$

Jen poznamenejme, že metoda má samozřejmě exaktní důkaz, popsany formální postup sám o sobě důkazem není.

Příklad: Antibiotikum vankomycin je z organismu eliminováno převážně v nezměněné podobě ledvinami, přičemž se řídí kinetikou 1. řádu, tedy rychlost eliminace vankomycinu je přímo úměrná jeho plazmatické koncentraci c . Tomu odpovídá diferenciální rovnice

$$\frac{dc}{dt} = -kc$$

popisující prostou eliminaci vankomycinu. Rovnice je separovatelná do tvaru

$$\frac{dc}{c} = -k dt$$

Po integraci dostaneme

$$\ln c = -kt + b \rightarrow c = B \cdot e^{-kt}$$

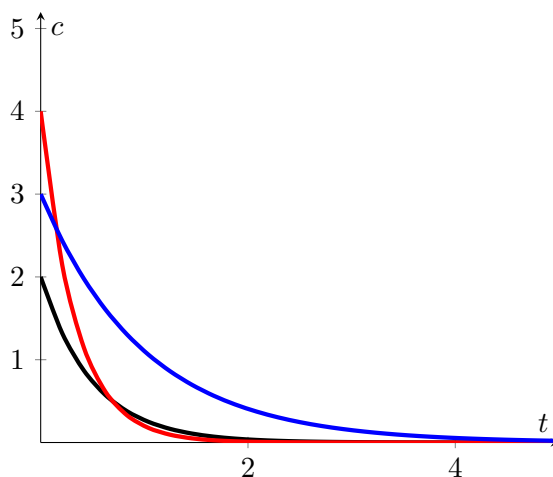
kde b , resp. $B = e^b$ je integrační konstanta. Tím jsme získali obecné řešení. Hodnotu konstanty B určíme z počáteční podmínky. Koncentraci v čase 0 označme c_0 . Platí tedy

$$c_0 = B \cdot e^{-k \cdot 0} = B$$

Finálním partikulárním řešením proto je

$$c = c_0 \cdot e^{-kt}$$

Příklady průběhů funkce ukazuje obr. 2.19. Poznamenejme ještě, že rovnice $\frac{dc}{dt} = -kc$ je homogenní, protože ji můžeme upravit na tvar s nulovou pravou stranou $\frac{dc}{dt} + kc = 0$.



Obrázek 2.19: Homogenní lineární diferenciální rovnice prvního řádu

2.7.4 Lineární diferenci rovnice prvního řádu, metoda variace konstant

Nyní si popíšeme další způsob řešení, tzv. *metodu variace konstant*. Nejprve si postup ukážeme na konkrétním příkladu, poté obecně.

Příklad: Rozšíříme předchozí příklad s eliminací vankomycinu o situaci, kdy vankomycin současně kontinuálně podáváme infúzí rychlostí v_0 . Zajímá nás, jak se vyvíjí plazmatická koncentrace v čase poté, co zapneme infuzi s vankomycinem. Problém nyní popisuje rovnice

$$\frac{dc}{dt} = v_0 - kc$$

zahrnující jak eliminaci ledvinami, tak kontinuální podávání léku. Oproti předchozímu příkladu jde nyní o nehomogenní rovnici s nenulovou pravou stranou,

$$\frac{dc}{dt} + kc = v_0$$

kde již nemůžeme separovat proměnné. K řešení použijeme následující „trik“, označovaný jako variace konstant. Nejprve budeme řešit odpovídající homogenní rovnici, což už jsme výše provedli a získali řešení

$$c = B \cdot e^{-kt}$$

kde B byla konstanta. Variace konstant spočívá v tom, že B nadále nebudeme považovat za konstantu, nýbrž za funkci t , $B(t)$. Řešení nehomogenní rovnice tedy hledáme ve tvaru

$$c = B(t) \cdot e^{-kt}$$

Pro c' platí

$$\frac{dc}{dt} = B'(t) \cdot e^{-kt} - kB(t)e^{-kt}$$

Po dosazení do rovnice dostaneme

$$B'(t) \cdot e^{-kt} - kB(t)e^{-kt} = v_0 - kB(t) \cdot e^{-kt}$$

Po zkrácení stejných členů dostáváme diferenciální rovnici pro $B(t)$

$$B'(t) \cdot e^{-kt} = v_0$$

která je separovatelná. Proto

$$\int dB = \int v_0 e^{kt} dt \rightarrow B = \frac{v_0}{k} e^{kt} + D$$

kde D je další integrační konstanta. Řešením původní nehomogenní rovnice tedy je

$$c = \left(\frac{v_0}{k} e^{kt} + D \right) \cdot e^{-kt} = \frac{v_0}{k} + D e^{-kt}$$

Na počátku požadujeme nulovou koncentraci vankomycinu, tedy $c(0) = 0$, odkud plyne

$$0 = \frac{v_0}{k} + D e^{-k \cdot 0} \rightarrow D = -\frac{v_0}{k}$$

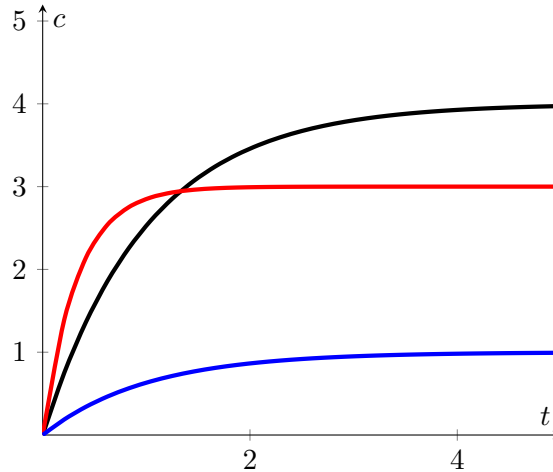
Partikulární řešením proto je

$$c = \frac{v_0}{k} (1 - e^{-kt})$$

Příklady řešení pro různé hodnoty parametrů jsou na obr. 2.20. Koncentrace zpočátku rychle roste k setrvalé, stacionární hodnotě, pro níž (v nekonečném čase) platí

$$c_{stac} = \frac{v_0}{k} (1 - e^{-k\infty}) = \frac{v_0}{k}$$

V reálném životě považujeme koncentraci za ustálenou po zhruba 5 poločasech.



Obrázek 2.20: Nehomogenní lineární diferenciální rovnice prvního řádu

Zformulujeme řešení ještě pro obecný případ lineární diferenciální rovnici prvního řádu

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

V předchozím případě šlo o speciální případ s konstantními koeficienty $a = 1$, $b = k$ i $c = v_0$. Rovnice je nehomogenní, protože má nenulovou pravou stranu. Nejprve vyřešíme odpovídající homogenní rovnici

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

Zde můžeme snadno separovat proměnné, dostaneme tedy

$$\frac{dy}{y} = -\frac{b(x)}{a(x)} dx$$

A po integraci

$$\ln y = \int -\frac{b(x)}{a(x)} dx + C \rightarrow y = k e^{\int -\frac{b(x)}{a(x)} dx}$$

kde k je konstanta. Nyní použijeme variaci konstanty k , kterou budeme dále považovat za funkci x , a budeme hledat řešení nehomogenní rovnice ve tvaru

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

Pro y' platí

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

Dosadíme za y do nehomogenní rovnice a dostaneme

$$a(x)k'(x) e^{\int -\frac{b(x)}{a(x)} dx} - a(x)k(x) \frac{b(x)}{a(x)} e^{\int -\frac{b(x)}{a(x)} dx} + b(x)k(x) e^{\int -\frac{b(x)}{a(x)} dx} = c(x)$$

Po úpravě dostáváme separovatelnou rovnici pro $k(x)$

$$a(x)k'(x)e^{\int -\frac{b(x)}{a(x)}dx} = c(x)$$

Po separaci a integraci obdržíme

$$dk = \frac{c(x)}{a(x)}e^{\int \frac{b(x)}{a(x)}dx} dx \rightarrow k = \int \frac{c(x)}{a(x)}e^{\int \frac{b(x)}{a(x)}dx} dx + D$$

Dosadíme do původní rovnice a získáme poněkud komplikovaný tvar obecného řešení.

$$y = e^{\int -\frac{b(x)}{a(x)}dx} \int \frac{c(x)}{a(x)}e^{\int \frac{b(x)}{a(x)}dx} dx + De^{\int -\frac{b(x)}{a(x)}dx}$$

2.7.5 Soustavy obyčejných diferenciálních rovnic prvního řádu

Soustavy obyčejných diferenciálních rovnic jsou mimořádně důležité, protože popisují řadu reálných procesů, kdy spolu různé proměnné interagují. Ilustrujme pojem soustava diferenciálních rovnic následujícím příkladem.

Příklad: Chceme matematicky popsat vývoj koncentrace inzulínu a glukózy v čase. Obě látky se vzájemně ovlivňují. Inzulín snižuje koncentraci glukózy, zároveň je však jeho produkce závislá na její koncentraci. Inzulín je současně odbouráván kinetikou prvního řádu, nezávisle na koncentraci glukózy. Necht' je glukóza zároveň přiváděna infúzí konstantní rychlostí v_0 . V následujícím modelu pro zjednodušení považujeme všechny vzájemné závislosti za lineární (s konstantami úměrnosti k_i), byť toto neodpovídá fyziologické realitě. g bude značit koncentraci glukózy ($g := [\text{glukóza}]$) a I koncentraci inzulínu ($I := [\text{inzulín}]$). Změny koncentrace glukózy a inzulínu v čase můžeme popsat následující dvojicí diferenciálních rovnic

$$\begin{aligned} \frac{dg}{dt} &= v_0 - k_1 I \\ \frac{dI}{dt} &= k_2 g - k_3 I \end{aligned}$$

Tato dvojice diferenciálních rovnic je „zvláštní“ tím, že ani jednu z rovnic nemůžeme řešit samostatně, neboť pro vyšetření každé z rovnic potřebujeme znát řešení druhé rovnice. Takovou dvojici rovnic označujeme jako **soustavu diferenciálních rovnic**. Analogická situace nastává u soustavy algebraických rovnic, kde jsou jednotlivé rovnice též provázané. Soustava rovnic může být libovolně rozsáhlá. Řešit soustavu diferenciálních rovnic analyticky je možné jen v nejjednodušších případech, obvykle je nezbytné řešení numerické.

Soustavu algebraických rovnic můžeme řešit eliminací proměnných, když jedné rovnice vyjádříme jednu z proměnných a dosadíme ji do ostatních rovnic. Zkusme použít podobný postup na uvedenou soustavu diferenciálních rovnic. Eliminujme glukózu. Zderivujeme druhou rovnici podle času a dosadíme poté za g' z první rovnice.

$$\frac{d^2 I}{dt^2} = k_2 \frac{dg}{dt} - k_3 \frac{dI}{dt} = k_2 v_0 - k_1 k_2 I - k_3 \frac{dI}{dt}$$

Získali jsme nehomogenní lineární diferenciální rovnici druhého řádu s konstantními koeficienty

$$\frac{d^2 I}{dt^2} + k_3 \frac{dI}{dt} + k_1 k_2 I = k_2 v_0$$

kterou budeme řešit v další části. Jakmile zjistíme funkci $I(t)$, z první rovnice dopočteme $g(t)$. Konkrétní volba konstant určuje nejen konkrétní hodnoty funkce, ale i její kvalitativní charak-

teristiky, např. jestli řešení v čase konverguje, zda dochází k oscilacím apod.

Řešili jsme soustavu tak, že jsme eliminovali proměnnou a ze soustavy dvou rovnic prvního řádu jsme získali jednu rovnici druhého řádu. Pro numerické řešení diferenciálních rovnic je ale postup obvykle opačný. Numericky řešit soustavu rovnic prvního řádu je totiž relativně snadné. Proto se nabízí, pokusit se rovnice vyšších řádů převést na soustavu rovnic prvního řádu a tu pak řešit. Postup je snadný. Jako příklad vezměme rovnici druhého řádu

$$y'' + by' + y = d$$

s neznámou funkcí $y(x)$. Definujme novou funkci $z(x) := y'$ jako derivaci funkce y . Pak platí $z' = y''$ a rovnici můžeme přepsat do tvaru

$$z' + bz + y = d$$

Můžeme sestavit novou soustavu dvou rovnic pro 2 neznámé funkce y a z , kterou dále numericky řešíme.

$$\begin{aligned} \frac{dz}{dx} &= d - y - bz \\ \frac{dy}{dx} &= z \end{aligned}$$

Pro potřeby numerického řešení (jakýchkoli) diferenciálních rovnic tedy stačí umět vyřešit soustavu rovnic prvního řádu.

2.7.6 Lineární diferenciální rovnice druhého řádu

V poslední části kapitol o diferenciálních rovnicích se budeme zabývat analytickým řešením nehomogenní rovnice druhého řádu s konstantními koeficienty. Takovou rovnicí je např. výše odvozená rovnice pro inzulin

$$\frac{d^2 I}{dt^2} + k_3 \frac{dI}{dt} + k_1 k_2 I = k_2 v_0$$

Pro jednoduchost zápisu přeznačme konstanty na b , c a d . Před nejvyšší derivací konstanta být nemusí, poněvadž je nutně nenulová a lze jí krátit.

$$\frac{d^2 I}{dt^2} + b \frac{dI}{dt} + cI = d$$

Řešme opět nejprve homogenní rovnici

$$\frac{d^2 I}{dt^2} + b \frac{dI}{dt} + cI = 0$$

Vysvětlíme nejprve pojem **lineární kombinace**. Mějme libovolné funkce I_1 a I_2 . Lineární kombinací funkcí I_1 a I_2 se rozumí jejich násobky a součty. Nechť p a q jsou libovolná reálná čísla. Pak každá funkce

$$I(x) := pI_1(x) + qI_2(x)$$

je lineární kombinací funkcí I_1 a I_2 . Každá homogenní diferenciální rovnice má pozoruhodnou vlastnost. Jestliže nějaké funkce I_1 a I_2 jsou řešením homogenní rovnice, pak i jejich jakákoli lineární kombinace je řešením. Důkaz je snadný. Nechť tedy I_1 a I_2 jsou řešením homogenní rovnice, tedy platí

$$\frac{d^2 I_1}{dt^2} + b \frac{dI_1}{dt} + cI_1 = 0$$

a

$$\frac{d^2 I_2}{dt^2} + b \frac{dI_2}{dt} + cI_2 = 0$$

Dosadíme $I(x) = pI_1(x) + qI_2(x)$ do homogenní rovnice.

$$\frac{d^2 I}{dt^2} + b \frac{dI}{dt} + cI = p \left(\frac{d^2 I_1}{dt^2} + b \frac{dI_1}{dt} + cI_1 \right) + q \left(\frac{d^2 I_2}{dt^2} + b \frac{dI_2}{dt} + cI_2 \right) = 0 + 0 = 0$$

$I(x)$ tedy splňuje homogenní rovnici a je tedy též jejím řešením, jak jsme chtěli dokázat.

Nehomogenní diferenciální rovnice má jinou pozoruhodnou vlastnost. Obecné řešení nehomogenní rovnice I_{ON} lze získat jako součet kteréhokoli jednoho partikulárního řešení nehomogenní rovnice I_{PN} a obecného řešení homogenní rovnice I_{OH}

$$I_{ON} = I_{PN} + I_{OH}$$

Najít nějaké partikulární řešení nehomogenní rovnice může být snadné, lze ho často „uhádnout“. Např. zjevným partikulárním řešením nehomogenní rovnice

$$\frac{d^2 I}{dt^2} + b \frac{dI}{dt} + cI = d$$

je konstantní řešení $I_{PN} = \frac{d}{c}$. Pak už stačí „pouze“ najít obecné řešení homogenní rovnice.

Zkusme tedy nyní najít řešení homogenní rovnice, a to ve tvaru $I = e^{kt}$. Po dosazení do rovnice a zkrácení e^{kt} dostaneme

$$k^2 e^{kt} + b k e^{kt} + c e^{kt} = 0 \rightarrow k^2 + b k + c = 0$$

Aby tedy $I = e^{kt}$ bylo řešením, musí k splňovat rovnici, tedy musí platit

$$k_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4c}}{2}$$

Můžeme rozlišit 3 situace podle hodnoty diskriminantu $D = \sqrt{b^2 - 4c}$.

1. $D > 0$

Dostáme 2 reálné hodnoty $k_{1,2}$ a 2 jim odpovídající řešení $I_1 = e^{k_1 t}$ a $I_2 = e^{k_2 t}$. Řešení jsou tzv. **lineárně nezávislá**, což znamená, že nelze vyjádřit jedno řešení jako násobek druhého řešení. V hlubší teorii diferenciálních rovnic se ukazuje, že rovnice n -tého řádu má nejvýše n lineárně nezávislých řešení. Protože řešíme rovnici druhého řádu, jsou řešení I_1 a I_2 veškerá lineárně nezávislá řešení. Jakékoli další řešení $I(x)$ homogenní rovnice lze vyjádřit v již známém tvaru $I(x) = pI_1(x) + qI_2(x)$, tedy

$$I_{OH} = p e^{k_1 t} + q e^{k_2 t}$$

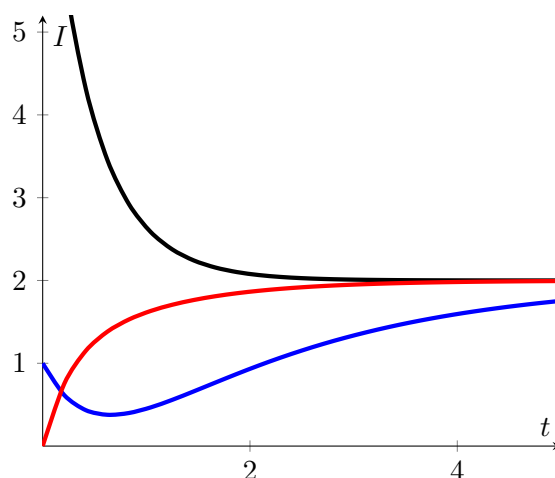
Obecné řešení nehomogenní rovnice je

$$I_{ON} = \frac{d}{c} + p e^{k_1 t} + q e^{k_2 t}$$

Konstanty p a q se určí z počátečních podmínek, které v případě rovnice druhého řádu musí být 2, např. počáteční koncentrace inzulínu a počáteční rychlost tvorby inzulínu (což vlastně nepřímo vyjadřuje počáteční koncentraci glukózy).

V případě našeho příkladu s inzulínem jsou b i c kladné, proto je v případě kladného diskriminantu určitě $\sqrt{b^2 - 4c} < b$, jsou tedy k_1 i k_2 záporné. S časem tedy exponenciální

komponenty klesají k 0 a zůstává stacionární hladina inzulínu $\frac{d}{c}$. Exponenciální komponenty se uplatní pouze zpočátku, než se ustaví stacionární hladina. Obr. 2.21 ukazuje možné průběhy funkcí, pokud je počáteční hladina nad nebo pod hladinou stacionární.



Obrázek 2.21: Lineární diferenciální rovnice druhého řádu, $D > 0$

2. $D = 0$

Pro nulový diskriminant dostáváme jediné lineárně nezávislé řešení

$$I_1 = e^{-\frac{b}{2}t}$$

Vzhledem k nulovému diskriminantu platí

$$b^2 - 4c = 0 \rightarrow c = \frac{b^2}{4}$$

čímž se diferenciální rovnice převádí na tvar

$$\frac{d^2 I}{dt^2} + b \frac{dI}{dt} + \frac{b^2}{4} I = 0$$

Prozradíme její druhé lineárně nezávislé řešení.

$$I_2 = te^{-\frac{b}{2}t}$$

Pro obecné řešení nehomogenní rovnice s nulovým diskriminantem tedy získáme

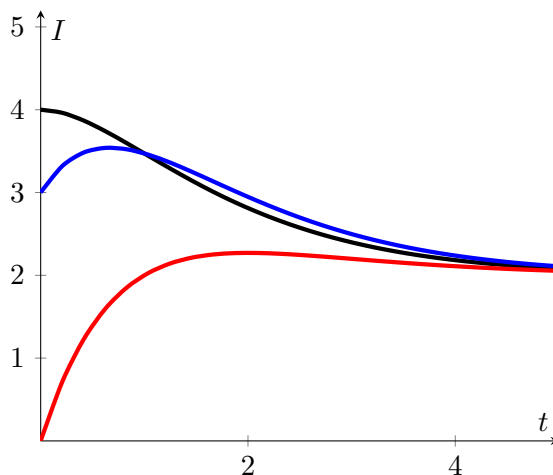
$$I_{ON} = \frac{d}{c} + pe^{-\frac{b}{2}t} + qte^{-\frac{b}{2}t}$$

Několik možných průběhů funkcí ukazuje obr. 2.22. Průběh je kvalitativně podobný průběhu s kladným diskriminantem.

3. $D < 0$

Pro záporný diskriminant pod odmocninou neexistuje reálné řešení, ale existují 2 řešení v oboru komplexních čísel. Odmocninu ze záporného diskriminantu můžeme upravit do následujícího komplexního tvaru.

$$\sqrt{D} = \sqrt{-|D|} = \sqrt{-1}\sqrt{|D|} = i\sqrt{|D|}$$

Obrázek 2.22: Lineární diferenciální rovnice druhého řádu, $D = 0$

Proto

$$k_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{D}}{2} = \frac{-b \pm i\sqrt{|D|}}{2}$$

Dostáváme tak 2 komplexně sdružená lineárně nezávislá řešení

$$I_1 = e^{-\frac{b}{2}t} e^{i\frac{\sqrt{|D|}}{2}t}$$

$$I_2 = e^{-\frac{b}{2}t} e^{-i\frac{\sqrt{|D|}}{2}t}$$

To je na první pohled podivný výsledek, poněvadž v reálném fyzickém světě musí být řešení reálné. Komplexní řešení je pouze matematická konstrukce. Můžeme však využít výše popsanou vlastnost homogenní lineární rovnice, že součet řešení je též řešením. Zkusme obě komplexně sdružená řešení převést do goniometrického tvaru a sečíst.

$$\begin{aligned} I_1 + I_2 &= e^{-\frac{b}{2}t} \cdot \left[e^{i\frac{\sqrt{|D|}}{2}t} + e^{-i\frac{\sqrt{|D|}}{2}t} \right] \\ &= e^{-\frac{b}{2}t} \cdot \left[\cos \frac{\sqrt{|D|}}{2}t + i \sin \frac{\sqrt{|D|}}{2}t + \cos \frac{\sqrt{|D|}}{2}t - i \sin \frac{\sqrt{|D|}}{2}t \right] \\ &= 2e^{-\frac{b}{2}t} \cos \frac{\sqrt{|D|}}{2}t \end{aligned}$$

Došlo k eliminaci komplexních členů a zbylo nám reálné řešení! Poznamenejme, že druhé lineárně nezávislé řešení bychom získali odečtením obou řešení. Řešení by bylo čistě imaginární a pro reálný svět irelevantní

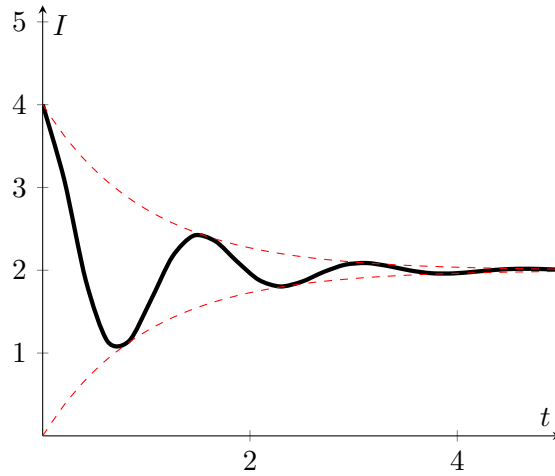
Pro obecné řešení nehomogenní rovnice se záporným diskriminantem tak získáme

$$I_{ON} = \frac{d}{c} + pe^{-\frac{b}{2}t} \cos \frac{\sqrt{|D|}}{2}t$$

Řešení je kvalitativně odlišné než řešení předcházející, vyskytují se zde totiž oscilace. Ve výrazu

$$e^{-\frac{b}{2}t} \cos \frac{\sqrt{|D|}}{2}t$$

můžeme vidět dvě části - oscilaci s konstantní amplitudou $\cos \frac{\sqrt{|D|}}{2}t$ a exponenciálně klesající amplitudu $-\frac{b}{2}t$. V čase tedy oscilující komponenta odezní a zbyde konstantní hladina inzulínu $I_0 = \frac{d}{c}$. Obr. ukazuje možný průběh funkce. Červené čárkované linie vyznačují exponenciálně klesající amplitudu. Všimněme si, že parametry původní rovnice, resp. soustavy rovnic, určovaly, zda dojde či nedojde k oscilacím. Oscilace v regulačních systémech je tedy možná, ale nikoli nutná.



Obrázek 2.23: Lineární diferenciální rovnice druhého řádu, $D < 0$

3 Poznámky k numerické matematice

Řadu, nebo spíše většinu reálných úloh nelze řešit analyticky, tedy nepodaří se nám najít jednoduchý vztah, vzorec, do něhož můžeme dosadit a ihned zjistit výsledek. Téměř zcela to platí pro diferenciální rovnice. V kapitole 2.7 jsme řešili všechny úlohy analyticky, to byly ale ve skutečnosti pečlivě vybrané výjimky. Většinou je třeba užít nějaký jiný postup, abychom získali alespoň číselný výsledek, když už nemáme analytické řešení. Rozvojem a studiem vlastností těchto postupů se zabývá numerická matematika. Formuluje též algoritmy, programy, k hledání řešení. Tím se pohybuje na hranici matematiky a informatiky.

3.1 Numerické řešení algebraických rovnic

Analyticky umím řešit jednoduché algebraické rovnice, jako $x^2 + 3x + 2 = 0$. Nelineární algebraické rovnice, např. $\cos x = x$ musíme řešit numericky. Zde si představíme 3 postupy numerického řešení algebraických rovnic. Všechny 3 postupy mají *iterativní* charakter. To znamená, že se znovu a znovu opakuje stejný výpočet s odlišnými čísly, přičemž výstup i -tého kroku je vstupem pro krok $i+1$. Na počátku je třeba zvolit nějaký odhad řešení, označme jej x_0 . Následují iterace. Pokud se již řešení mezi jednotlivými kroky příliš nemění, je např. menší než předem zvolené *kritérium ukončení* iterací ε , $|x_i - x_{i-1}| < \varepsilon$, program se ukončí a vypíše aktuální hodnotu x_i . Různé postupy se liší konvergencí a efektivitou. Konvergencí se míní skutečnost, že se postup stále více blíží správnému řešení. Konvergence může záviset na volbě počátečního x_0 . Pro některá x_0 může postup konvergovat, pro jiná nikoli. Efektivitou se rozumí počet provedených iterací, než program splní kritérium ukončení.

Každou algebraickou rovnici lze upravit na tvar $f(x) = 0$. Hledejme tedy numerické řešení této rovnice. Nechť řešením rovnice x_s , tedy $f(x_s) = 0$.

3.1.1 Metoda půlení intervalů

Metoda půlení intervalů je nejjednodušší, viz obr. 3.1. Je třeba zvolit dvě počáteční hodnoty x_0^L a x_0^R , jednu vlevo a druhou vpravo od x_s . Tyto dvě hodnoty vymezují interval, v němž se nachází řešení. Poněvadž uvažujeme monotónní úsek funkce f a její průsečík s osou x , tedy řešení x_s , se nachází mezi oběma krajními hodnotami, musí mít $f(x_0^L)$ a $f(x_0^R)$ opačné znamení, tedy $f(x_0^L) \cdot f(x_0^R) < 0$. V každé iteraci najdeme prostřední hodnotu mezi oběma krajními

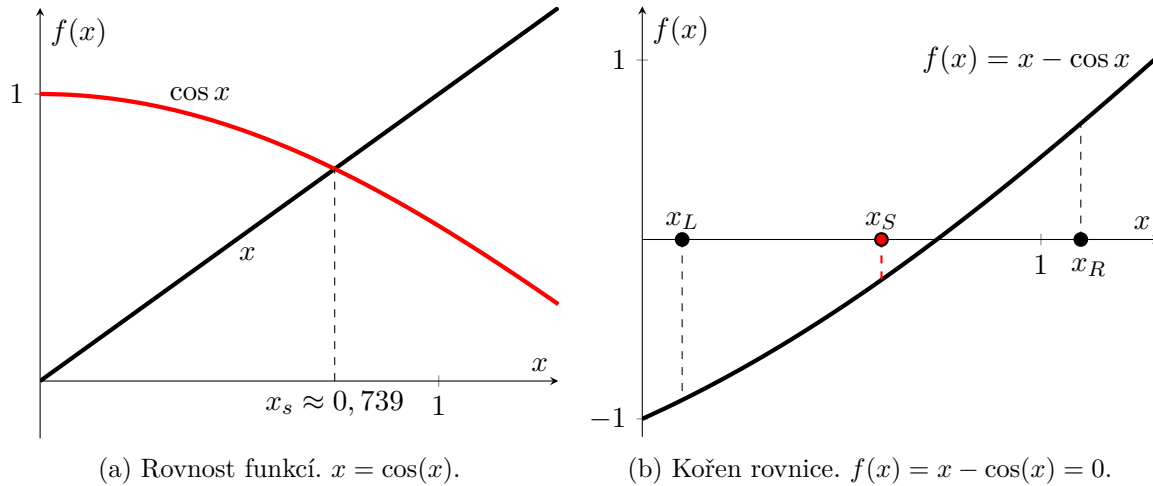
$$x^M := \frac{x_0^R - x_0^L}{2}$$

a určíme její funkční hodnotu, $f(x^M)$. Řešení x_s se určitě nachází mezi x^M a tou z krajních hodnot, která má opačné znaménko než $f(x^M)$. Nechť jsou tedy obecně v i -té iteraci algoritmu krajní hodnoty intervalu, v němž se nachází x_s , x_i^L a x_i^R . Pak

$$x_i^M := \frac{x_i^R - x_i^L}{2}$$

a definujeme nové krajní hodnoty x_{i+1}^L a x_{i+1}^R tak, že vždy jednou z nových krajních hodnot se stane x_i^M a druhá se nemění. Přitom $x_{i+1}^L := x_i^M$ a $x_{i+1}^R := x_i^R$, pokud $f(x_i^M) \cdot f(x_i^R) < 0$, jinak

$x_{i+1}^R := x_i^M$ a $x_{i+1}^L := x_i^L$. V každé iteraci se interval obsahující řešení x_s zkrátí na polovinu, odtud název metody. Iterace se provádějí tak dlouho, až je šířka intervalu menší než předem zvolené ε . Dokonce stačí polovina intervalu, protože x_i^M se od x_s liší nanejvýš o polovinu délky intervalu $[x_i^L, x_i^R]$. Výhodou metody je její jistá konvergence, pokud se nám podaří najít monotónní úsek funkce v okolí řešení.



Obrázek 3.1: Metoda půlení intervalů.

V Pythonu bychom algoritmus řešící rovnici $\cos(x) = x$ mohli napsat takto:

```
import math

def g(x):
    return x-math.cos(x)

epsilon = 0.001 # požadovaná přesnost řešení
j=0          # sledování počtu iterací
xL=0.0      # levá krajní hodnota počátečního intervalu
xR=1.0      # pravá krajní hodnota počátečního intervalu

while abs(xR-xL)/2 > epsilon: # kritérium ukončení iterací
    xM = (xL+xR)/2          # definice středu intervalu
    if g(xM)*g(xR)<0:      # volba nových krajních hodnot
        xL = xM
    else:
        xR = xM
    j+=1 # přibyla 1 iterace

print(xL) # levá krajní hodnota konečného intervalu
print(xR) # pravá krajní hodnota konečného intervalu
print(j)  # počet provedených iterací
```

V daném příkladu získáme pro $\varepsilon = 0,001$ po 9 iteracích interval řešení $[0.73828125, 0.740234375]$. Pro představu přesnosti dodejme, že na 8 desetinných míst je $x_s = 0,73908513$.

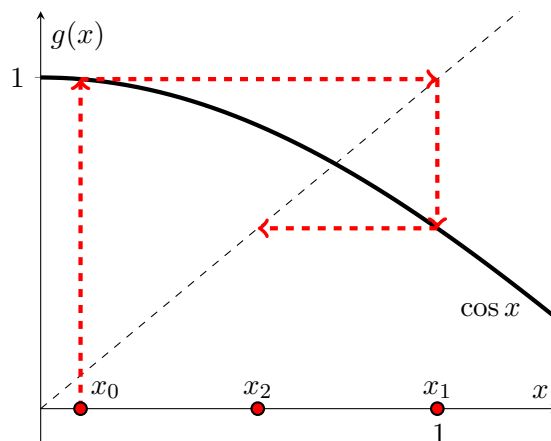
3.1.2 Metoda prosté iterace

Další metodou, zajímavou, ale asi nejméně používanou, je metoda prosté iterace. Je nutné z řešené rovnice $f(x) = 0$ vyjádřit x , tedy rovnici přeformulovat do tvaru $x = g(x)$. Například

rovnici $x - \cos x = 0$, kde $f(x) = x - \cos x$, přeformulujeme do tvaru $x = \cos x$, kde $g(x) = \cos x$. Opět se zvolí počáteční odhad řešení x_0 . Každý krok iterace je charakterizován jednoduchým předpisem

$$x_{i+1} := g(x_i)$$

Princip algoritmu objasňuje obr. 3.2. Algoritmus „postupuje“ ve směru červených šipek. Problematické jsou podmínky konvergence. Aby algoritmus konvergoval, je nutné aby pro všechny hodnoty mezi x_0 a řešením x_s platilo, že $|g'(x)| < 1$. Funkce tedy nesmí v žádném bodě tohoto intervalu růst nebo klesat příliš rychle. To často neplatí. Též rychlost konvergence závisí na $|g'(x)|$ a může být nízká.



Obrázek 3.2: Metoda prosté iterace. $g(x) = \cos(x)$.

Algoritmus řešící stejnou rovnici $\cos(x) = x$ implemenovaný v Pythonu je následující:

```
import math

def g(x):
    return math.cos(x)

j=0          # sledování počtu iterací
epsilon = 0.001 # požadovaná přesnost řešení
x1=0.9      # počáteční hodnota
x2=g(x1)

while abs(x1-x2) > epsilon: # kritérium ukončení iterací
    x1=x2          # iterační předpis
    x2=g(x1)
    j+=1          # přibyla 1 iterace

print(x1)       # předposlední hodnota iterace
print(x2)       # poslední hodnota iterace
print(j)        # počet provedených iterací
```

Pro stejnou přesnost $\varepsilon = 0,001$ jako v předchozím příkladě získáme z poslední iterace dvojici hodnot $0,7386421766270547$ a $0,7393834415834122$, a to až po 15 iteracích.

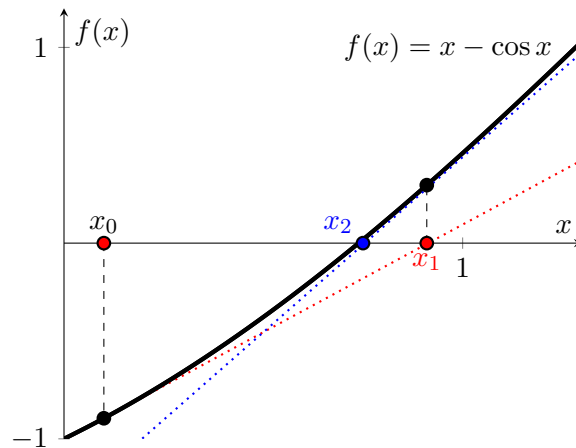
3.1.3 Newtonova metoda

Populární je Newtonova metoda, označovaná též Newton-Raphsonova metoda nebo metoda tečen. Konverguje velmi rychle, ale nikoli vždy. Řešíme opět rovnici $f(x) = 0$. Současně musíme

znát derivaci funkce f , f' . Opět je nutné poskytnout počáteční odhad řešení x_0 . Princip metody ilustruje obr. 3.3. V bodě x_0 zjistíme derivaci $f'(x_0)$, čímž známe směrnici tečny v tomto bodě. Posuneme se do bodu x_1 , kde tečna protíná osu x . Obecně x_{i+1} je bod, kde tečna v bodě x_i protíná osu x . Z obr. 3.3 je zřejmé, že pro iterační předpis platí

$$x_{i+1} := x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

Poznamenejme pro úplnost, že pokud derivaci neznáme a nahradíme ji odhadem derivace jako podílu 2 rozdílů, přechází metoda tečen v tzv. metodu sečen.



Obrázek 3.3: Newtonova metoda. $f(x) = x - \cos(x)$.

Algoritmus řešící opět stejnou rovnici $x - \cos(x) = 0$ zní:

```
import math

def f(x):
    # řešená rovnice
    return x-math.cos(x)

def fdev(x):
    # derivace funkce f
    return 1+math.sin(x)

j=0
epsilon = 0.001
x0=1
x1=x0-f(x0)/fdev(x0) # "nultá" iterace

while abs(x0-x1) > epsilon: # kritérium ukončení iterací
    x0=x1
    x1=x0-f(x0)/fdev(x0) # iterační předpis
    j+=1 # přibyla 1 iterace

print(x0) # předposlední hodnota iterace
print(x1) # poslední hodnota iterace
print(j) # počet provedených iterací
```

Pro stejnou přesnost $\varepsilon = 0,001$ jako v předchozím příkladě získáme z poslední iterace dvojici hodnot $0,7391128909113617$ a $0,739085133385284$, k čemuž nám stačí pouhé 2 iterace!! Počet iterací přitom s rostoucí přesností roste velmi pomalu. Například pro řešení s přesností 11

desetinných míst ($\varepsilon = 0,00000000001$) stačí pouhé 4 iterace ($x_s = 0.7390851332151607$).

3.2 Numerické řešení diferenciálních rovnic

Numerické řešení diferenciálních rovnic je stěžejní téma pro potřeby matematického modelování v medicíně a biologii. Představíme si dva neznámější iterativní postupy, jednodušší Eulerovu metodu a složitější, ale přesnější metodu podle Runga a Kutty 4. řádu. Diferenciální rovnici převedeme na explicitní tvar, kdy na levé straně rovnice se vyskytuje pouze derivace a ne pravé straně členy bez derivace, tedy

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

Hledanou neznámou bude funkce $x(t)$. Pokud není derivace explicitně vyjádřena (často to není možné), hovoříme o tzv. implicitním tvaru diferenciální rovnice, obecně $f(x', x, t) = 0$. Pak je do každého kroku numerického řešení nutno vložit řešení algebraické rovnice pomocí některé z metod uvedených v předchozí kapitole.

diskretizace

3.2.1 Eulerova metoda

Eulerova metoda využívá skutečnosti, že derivace je podíl dvou malých rozdílů, tedy

$$\frac{dx}{dt} \approx \frac{\Delta x}{\Delta t}$$

Výraz pro derivaci pak hned přepíšeme do tvaru

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} \approx f(x, t)$$

Iterativní předpis je definován výrazem

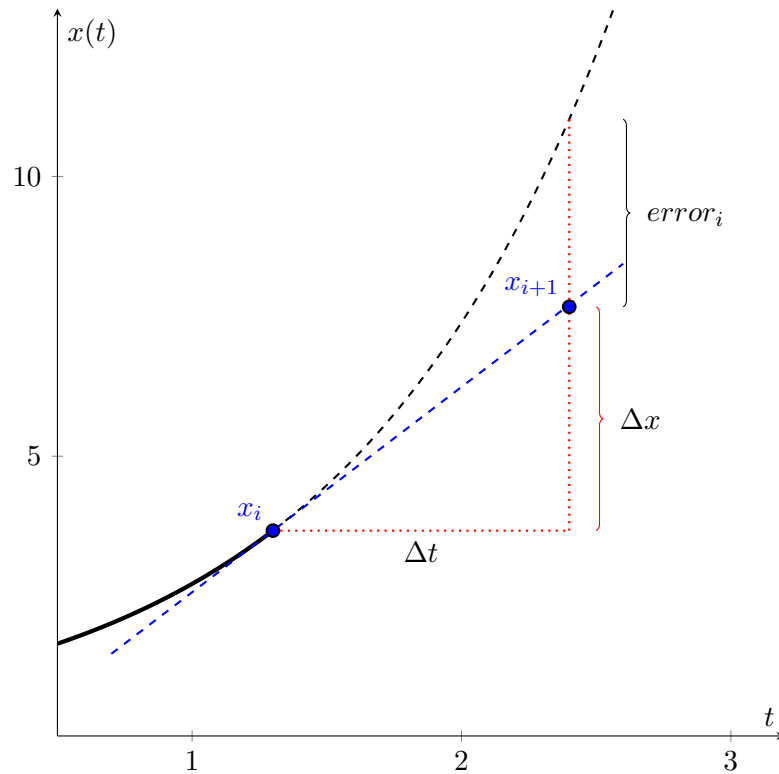
$$x_{i+1} := x_i + f(x, t) \cdot \Delta t$$

Musí být známa počáteční hodnota $x(0) = x_0$ v čase $t = 0$ resp $t = t_0$. V každém kroku metody se posuneme v čase o Δt dopředu a o Δx ve funkční hodnotě. Princip ilustruje obr. 3.4. Je patrné, že se hodnota x_{i+1} liší od správné hodnoty $x(t + \Delta t)$. V i -tém kroku tak vzniká chyba $error_i = x(t + \Delta t) - x_{i+1}$. Chyba zjevně závisí na velikosti kroku Δt . Drobné chyby se však kumulují v každém kroku a výsledná celková chyba postupně roste. Celkovou chybu někdy nelze eliminovat ani zmenšením kroku Δt . Pak sice klesne chyba jednotlivého kroku, ale vzroste počet kroků a celková kumulativní chyba klesnout nemusí. Dále popsaná metoda podle Runge a Kutta tento problém řeší.

Dále je uvedena možná implementace Eulerovy metody v Pythonu pro diferenciální rovnici $x' = -x$. Při počátečních podmínkách $x(0) = 10$ je analytickým řešením $x = 10e^{-t}$. Numerické i analytické řešení je zobrazeno na obr. 3.5. Je patrná drobná odlišnost obou křivek, tedy chyba Eulerovy metody.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

size = 50
t = np.linspace(0, 10, size) # vektor časových bodů
x_num = np.linspace(0, 10, size) # vektor numerických hodnot funkce
x_anal = np.linspace(0, 10, size) # vektor analytických hodnot funkce
```

Obrázek 3.4: Eulerova metoda

```

def g(a):                                     # derivace hledané funkce
    return -a

dt = 10/size   # časový krok

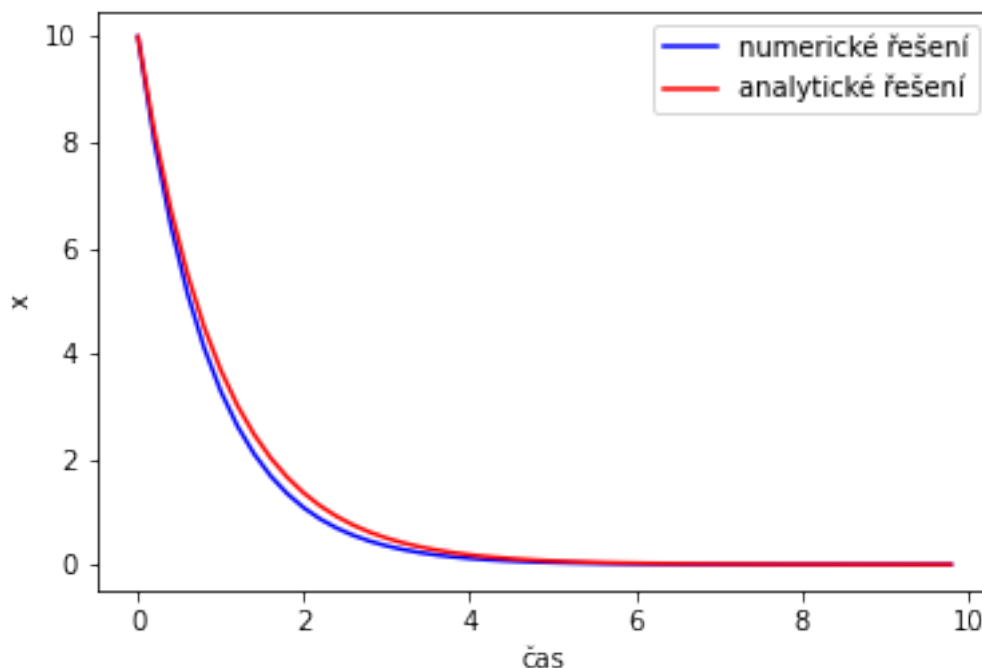
i=0
x[i] = 10     # počáteční hodnota funkce - x(t0)
t[i] = 0     # počáteční čas

while i < (size-1):   # iterace
    dx = dt * g(x_num[i])
    x_num[i+1] = x_num[i] + dx
    t[i+1] = t[i] + dt
    i += 1

x_anal = 10*np.exp(-t)   # analytické řešení

# graf řešení
fig, axes = plt.subplots()
axes.plot(t, x_num, 'b', label = 'numerické řešení')
axes.plot(t, x_anal, 'r', label = 'analytické řešení')
axes.set_xlabel('čas')
axes.set_ylabel('x')
axes.legend()

```

Obrázek 3.5: Eulerova metoda: $x'(t) = -x$

3.2.2 Metoda Rungeho a Kuty

Jak je jistě patrné, je Eulerova metoda velmi jednoduchá, ale nepříliš přesná. Výrazně přesnější metodu numerického řešení diferenciálních rovnic vypracovali počátkem 20. století němečtí matematici Carl Runge a Wilhelm Kutta. Metoda se snaží odstranit nepřesný odhad Δx po kroku Δt , tedy snížit chybu $error_i$. Hodnotu $x(t + \Delta t)$ neodhaduje v jednom kroku, ale v několika navzájem propojených krocích. Představíme si nejpoužívanější variantu se 4 kroky, tzv. Runge-Kuttovu metodu 4. řádu (často označovanou RK4). Řešíme rovnici

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

Opět zvolíme časový krok Δt . Postupně spočítáme 4 odhady Δx , označené k_1 až k_4 a z jejich váženého průměru dopočteme finální odhad Δx . Existují i jiné drobné modifikace téhož postupu. Algoritmus je následující:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_i, t_i) \Delta t \\ k_2 &= f\left(x_i + \frac{k_1}{2}, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right) \Delta t \\ k_3 &= f\left(x_i + \frac{k_2}{2}, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right) \Delta t \\ k_4 &= f(x_i + k_3, t_i + \Delta t) \Delta t \end{aligned}$$

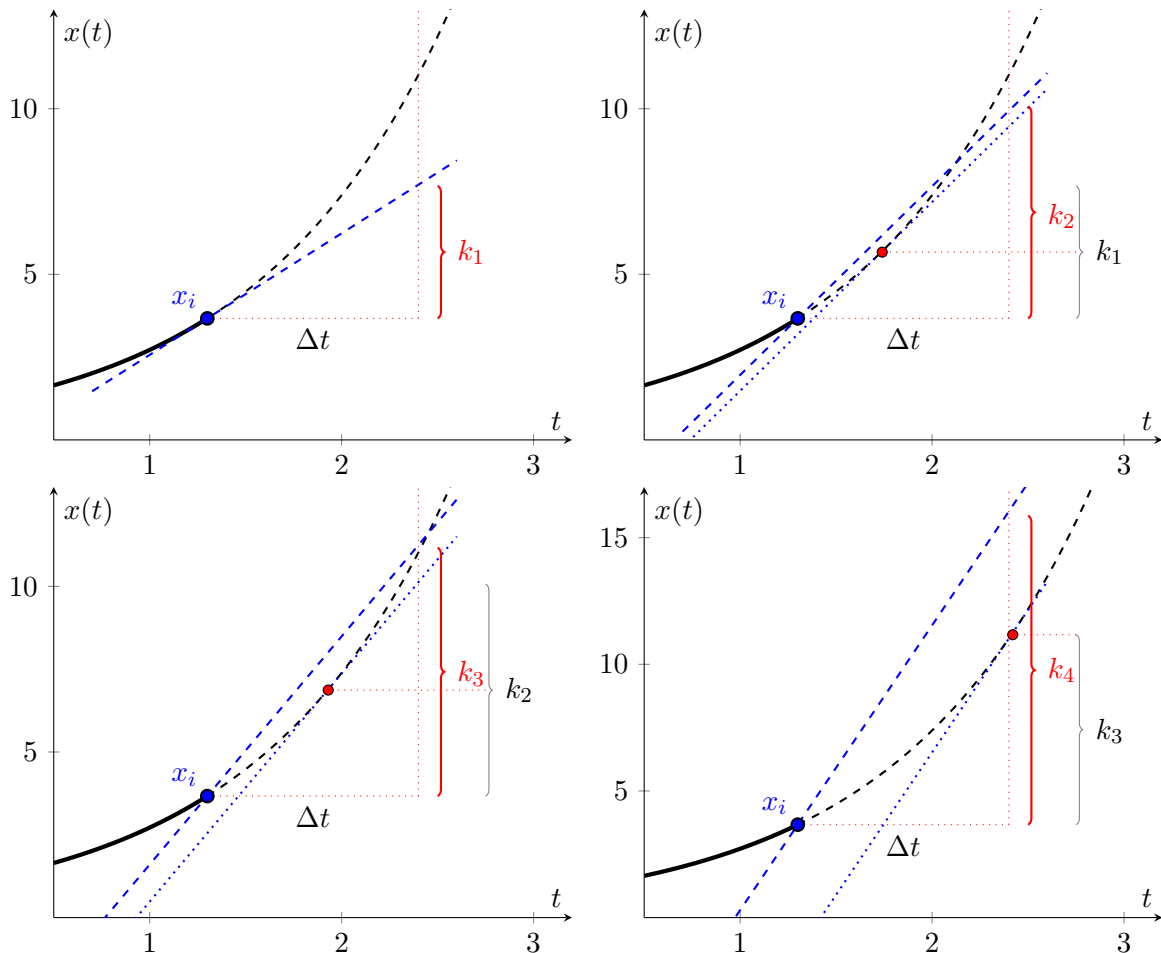
Odhad průměrného sklonu je

$$\Delta x := \frac{k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4}{6}$$

Odhady t_{i+1} a x_{i+1} definujeme jako

$$\begin{aligned} t_{i+1} &= t_i + \Delta t \\ x_{i+1} &= x_i + \Delta x \end{aligned}$$

Je zřejmé, že první krok, tedy určení k_1 , je identický s Eulerovou metodou.



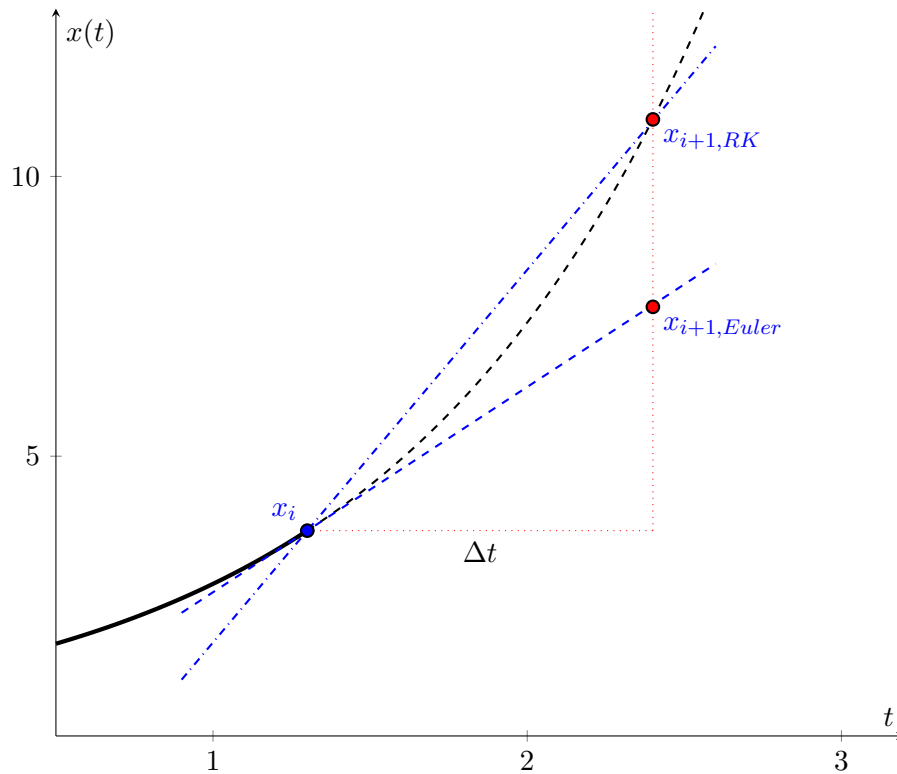
Obrázek 3.6: Konstrukce k_1 až k_4 v Rungově-Kuttově metodě

Obr. 3.7 ukazuje výsledky obou metod po jednom kroku, počítáno z hodnot k_1 až k_4 z obr. 3.6. Je vidět, že RK4 metoda je výrazně přesnější než Eulerova metoda. Odhad hodnoty x_{i+1} RK4 metodou je téměř přesně funkční hodnota v bodě $t + \Delta t$, $x(t + \Delta t)$.

Dále je uvedena možná implementace Runge-Kuttovy metody v Pythonu pro řešení stejné diferenciální rovnici $x' = -x$ jako v předchozí kapitole. Numerické i analytické řešení je zobrazeno na obr. 3.8. Obě křivky jsou prakticky totožné. Opět je patrné, že chyba metody RK4 je výrazně menší než metody Eulerovy, ačkoli časové kroky Δt jsou stejné.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

size = 50
```



Obrázek 3.7: Porovnání přesnosti Eulerovy a Rungovy-Kuttovy metody

```

t = np.linspace(0, 10, size)      # vektor časových bodů
x_num = np.linspace(0, 10, size)  # vektor numerických hodnot funkce
x_anal = np.linspace(0, 10, size) # vektor analytických hodnot funkce

def g(x,t=1):                    # derivace hledané funkce
    return -x

def RK(x,t=1):                   # 1 krok RK metody 4. řádu
    k1 = dt * g(x,t)
    k2 = dt * g(x+k1/2,t+dt/2)
    k3 = dt * g(x+k2/2,t+dt/2)
    k4 = dt * g(x+k3,t+dt)
    return x+(k1+2*k2+2*k3+k4)/6

dt = 10/size    # časový krok

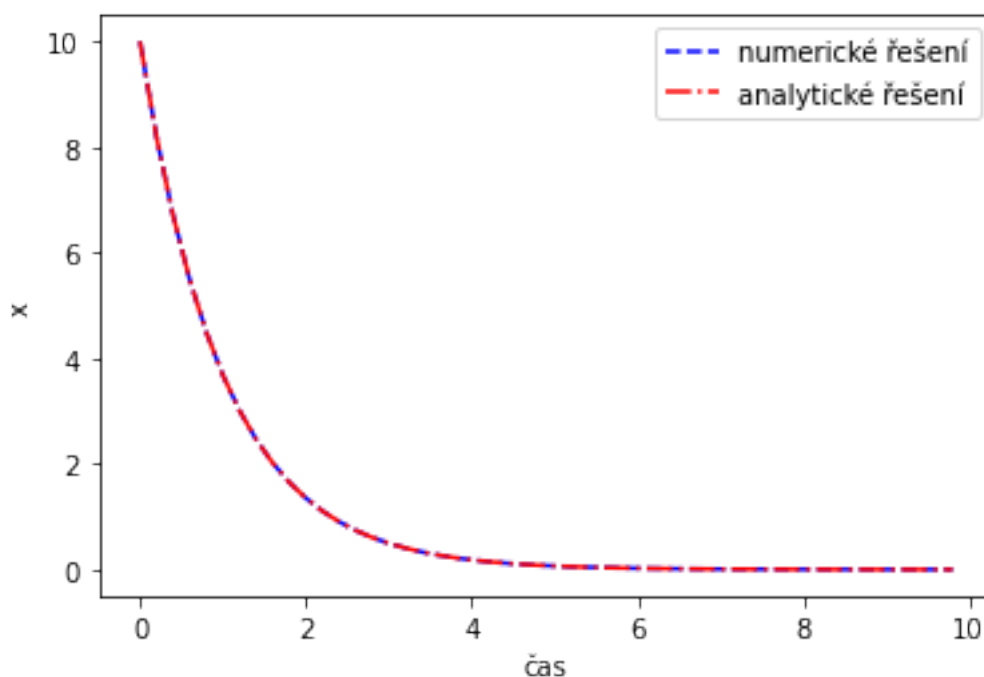
i=0
x_num[i] = 10  # počáteční hodnota funkce — x_num(t0)
t[i] = 0      # počáteční čas

while i < (size-1):    # iterace
    x_num[i+1] = RK(x_num[i],t[i])
    t[i+1] = t[i] + dt
    i += 1

x_anal = 10*np.exp(-t) # analytické řešení

```

```
# graf řešení
fig, axes = plt.subplots()
axes.plot(t, x_num, 'b', label = 'numerické řešení')
axes.plot(t, x_anal, 'r', label = 'analytické řešení')
axes.set_xlabel('čas')
axes.set_ylabel('x')
axes.legend()
```



Obrázek 3.8: Runge-Kutteova metoda 4. řádu: $x'(t) = -x$

3.3 Numerické řešení soustav diferenciálních rovnic

Pro řešení soustav diferenciálních rovnic jsou numerické metody zásadní. Analytické řešení je možné jen vzácně. Obě výše popsané metody se dají rozšířit pro případ soustavy rovnic. Uvažujme dvě funkce času, $x(t)$ a $y(t)$, které charakterizuje soustava diferenciálních rovnic

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= f_1(x, y, t) \\ \frac{dy}{dt} &= f_2(x, y, t)\end{aligned}$$

s počátečními podmínkami $x(0) = x_0$, $y(0) = y_0$ a $t(0) = t_0$.

3.3.1 Eulerova metoda

Úprava Eulerovy metody pro případ soustavy rovnic je snadná. Rovnice upravíme na tvar

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} \approx f_1(x, y, t)$$
$$\frac{\Delta y}{\Delta t} \approx f_2(x, y, t)$$

Pro iterační předpis dostaneme

$$x_{i+1} := x_i + f_1(x, y, t) \cdot \Delta t$$
$$y_{i+1} := y_i + f_2(x, y, t) \cdot \Delta t$$
$$t_{i+1} := t_i + \Delta t$$

Implementace v Pythonu může být následující.

```
import numpy as np
size = 100
t = np.linspace(0, 50, size)
x = np.linspace(0, 50, size)
y = np.linspace(0, 50, size)

def f1(x, y, t):
    return -x + 2*y

def f2(x, y, t):
    return -x + y

dt = 0.1

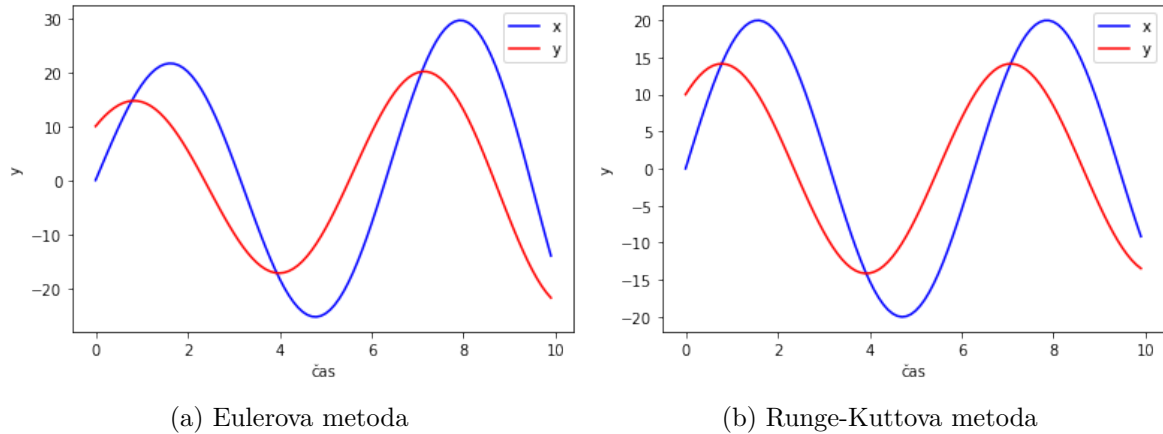
i=0
x[i] = 0
y[i] = 10
t[i] = 0

while i < size-1:
    dx = dt * f1(x[i], y[i], t[i])
    dy = dt * f2(x[i], y[i], t[i])
    x[i+1] = x[i] + dx
    y[i+1] = y[i] + dy
    t[i+1] = t[i] + dt
    i += 1

import matplotlib.pyplot as plt
fig, axes = plt.subplots()

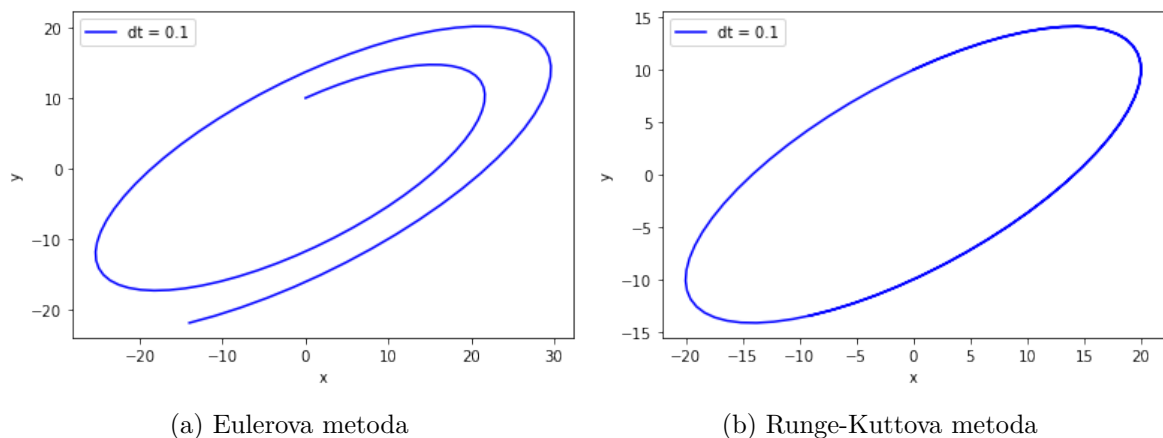
axes.plot(t, x, 'b', label = 'x')
axes.plot(t, y, 'r', label = 'y')
axes.set_xlabel('čas')
axes.set_ylabel('y')
axes.set_title('vývoj v čase')
axes.legend()
```

Obr. 3.9a ukazuje časový průběh řešení. Obr. 3.10a ukazuje tzv. fázový portrét. Jde o vzájemné zobrazení vývoje funkcí x a y po eliminaci nezávisle proměnné (zde času). Kdybychom z výšky pozorovali pohybující se objekt, trajektorie jeho pohybu, kterou bychom viděli, je příkladem fázového portréту, polohy vůči osám, tedy $x(t)$ a $y(t)$, jsou funkcemi času. Pomocí fázového portréту můžeme „zobrazit chování“ soustav diferenciálních rovnic, např. hledat oscilace či stabilní a nestabilní body.



Obrázek 3.9: Numerické řešení soustavy diferenciálních rovnic - vývoj v čase

```
fig, axes = plt.subplots()
axes.plot(x, y, 'b', label = 'dt = 0.1')
axes.set_xlabel('x')
axes.set_ylabel('y')
axes.set_title('fázový portrét')
axes.legend()
```



Obrázek 3.10: Numerické řešení soustavy diferenciálních rovnic - fázový portrét

3.3.2 Runge-Kuttova metoda

Upravit RK4 metodu pro soustavy diferenciálních rovnic je lehce složitější než v případě Eulerovy metody. V zásadě je třeba jednotlivá k_1 až k_4 tvořit pro obě proměnné zároveň. k odpovídající proměnné x označme k_x , k_y budou odpovídat y . Pro případ soustavy 2 výše uvedených rovnic by byl algoritmus následující:

$$\begin{aligned}
k_{1,x} &= f_1(x_i, y_i, t_i) \Delta t \\
k_{1,y} &= f_2(x_i, y_i, t_i) \Delta t \\
k_{2,x} &= f_1\left(x_i + \frac{k_{1,x}}{2}, y_i + \frac{k_{1,y}}{2}, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right) \Delta t \\
k_{2,y} &= f_2\left(x_i + \frac{k_{1,x}}{2}, y_i + \frac{k_{1,y}}{2}, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right) \Delta t \\
k_{3,x} &= f_1\left(x_i + \frac{k_{2,x}}{2}, y_i + \frac{k_{2,y}}{2}, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right) \Delta t \\
k_{3,y} &= f_2\left(x_i + \frac{k_{2,x}}{2}, y_i + \frac{k_{2,y}}{2}, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right) \Delta t \\
k_{4,x} &= f_1(x_i + k_{3,x}, y_i + k_{3,y}, t_i + \Delta t) \Delta t \\
k_{4,y} &= f_2(x_i + k_{3,x}, y_i + k_{3,y}, t_i + \Delta t) \Delta t
\end{aligned}$$

Odhad průměrných sklonů je

$$\begin{aligned}
\Delta x &:= \frac{k_{1,x} + 2k_{2,x} + 2k_{3,x} + k_{4,x}}{6} \\
\Delta y &:= \frac{k_{1,y} + 2k_{2,y} + 2k_{3,y} + k_{4,y}}{6}
\end{aligned}$$

Odhady t_{i+1} , x_{i+1} a y_{i+1} definujeme jako

$$\begin{aligned}
t_{i+1} &= t_i + \Delta t \\
x_{i+1} &= x_i + \Delta x \\
y_{i+1} &= y_i + \Delta y
\end{aligned}$$

Implementace v Pythonu může být následující.

```

import numpy as np
size = 100
t = np.linspace(0, 50, size)
x = np.linspace(0, 50, size)
y = np.linspace(0, 50, size)

def fx(x, y, t):
    return -x + 2*y

def fy(x, y, t):
    return -x + y

def RK(x, y, t=1):
    k1x = dt * fx(x, y, t)
    k1y = dt * fy(x, y, t)
    k2x = dt * fx(x+k1x/2, y+k1y/2, t+dt/2)
    k2y = dt * fy(x+k1x/2, y+k1y/2, t+dt/2)
    k3x = dt * fx(x+k2x/2, y+k2y/2, t+dt/2)
    k3y = dt * fy(x+k2x/2, y+k2y/2, t+dt/2)
    k4x = dt * fx(x+k3x, y+k3y, t+dt)

```



```
k4y = dt * fy(x+k3x,y+k3y,t+dt)
return (x+(k1x+2*k2x+2*k3x+k4x)/6, y+(k1y+2*k2y+2*k3y+k4y)/6)

dt = 0.1

i=0
x[i] = 0
y[i] = 10
t[i] = 0

while i < size-1:
    a,b = RK(x[i],y[i], t[i])
    x[i+1] = a
    y[i+1] = b
    t[i+1] = t[i] + dt
    i += 1
```

Obr. 3.9b a obr. 3.10b ukazují časový průběh obou funkcí a fázový portrét. Fázový portrét se podstatně liší od portréту téže soustavy rovnic řešené Eulerovou metodou, jde o stacionární cyklus oproti rostoucí amplitudě oscilací. Správné řešení plyne z Runge-Kuttovy metody, což opět dokumentuje její přesnost oproti Eulerově metodě (při stejném časovém kroku Δt). Rozbívání v Eulerově metodě je dáno postupnou kumulací chyb. Lze proto doporučit vždy upřednostnit RK metodu před Eulerovou metodou.

4 Poznámky k lineární algebře

Matematika bývá označována jako strukturální věda, čímž se míní, že „hledá“ strukturu či zákonitosti v jistých vztazích. Matematika však není přírodní věda, toto hledání má jinou povahu, než hledání v přírodních vědách. Přírodní vědy hledají zákonitosti v něčem, co je, co existuje, v přírodním světě. Matematika často postupuje tak, že extrahuje zákonitosti z intuitivně známých skutečností, např. z počítání s přirozenými čísly, a zkoumá, jaké jsou obecné důsledky těchto abstraktních zákonitostí. Lineární algebra je úchvatnou oblastí matematiky, často první výrazně abstrahující disciplínou, s níž se student matematiky setká. Buduje řadu základních představ a pojmů. Na její poznatky navazují další oblasti matematiky i fyziky, např. teorie diferenciálních rovnic či kvantová mechanika.

Ilustrujme si popsaný „abstrahující princip“ na příkladu. Dítě se v první třídě učí sčítat. 2 hrušky + 3 hrušky = 5 hrušek, 2 auta + 3 auta = 5 aut, 2 domy + 3 domy = 5 domů. Postupně zjistí, že všechny tyto rovnosti mají něco společného, totiž, že $2 + 3 = 5$. Je to první stupeň abstrakce. Můžeme počítat s čísly, nepotřebujeme konkrétní předměty. Mnohem později abstrakce pokračuje. $2 \cdot (3 + 4) = 2 \cdot 3 + 2 \cdot 4$, $4 \cdot (1 + 5) = 4 \cdot 1 + 4 \cdot 5$. Všechna čísla ve vztazích můžeme nahradit proměnnými a, b, c , zastupujícími libovolné číslo, ale početní zákonitost, zde označovaná jako distribuční zákon, tedy $a \cdot (b + c) = a \cdot b + a \cdot c$, stále platí. Nepotřebujeme tedy přímo čísla, stačí nám proměnné, které se řídí stejnými pravidly. Mají v jistém smyslu „stejnou strukturu“. Lineární algebra pokračuje touto cestou dále. Dalším stupněm abstrakce může být pojem vektoru.

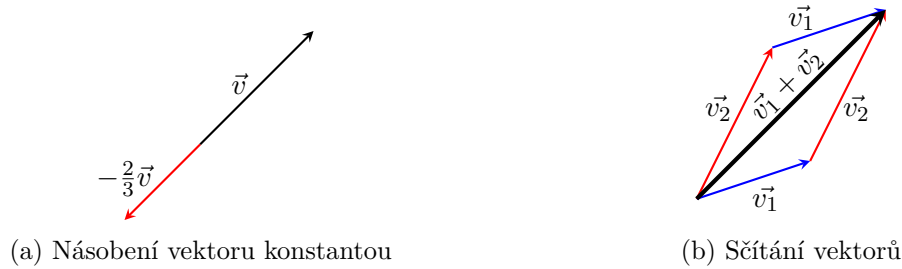
4.1 Vektory a vektorové prostory

Ukažme si, jak by cestou abstrakce matematika dospěla k pojmu **vektor**. Klasickou středoškolskou představou vektoru je „šipka mířící odněkud někam“. S taková „šipkou“ můžeme provádět některé „operace“, které mají charakteristické vlastnosti. Násobení šipky číslem šipku prodlouží, zkrátí, nebo obrátí, ale šipka stále zůstává šipkou. Pokud vynásobíme šipku číslem 1, nezmění se. 2 šipky sešteme tak, že přiložíme druhou na konec první. Můžeme však též přiložit první na konec druhé. Výsledná šipka, resp. bod, kam šipky společně dosáhnou, je totožná. „Nulovou“ šipku, tedy šipku délky 0, můžeme přičíst k jakékoli šipce, aniž by se tím změnila. Dalšími typickými vlastnosti jsou vzájemné „interakce“ obou operací, označované jako komutativita, distributivita a asociativita. Zapišme popsané vlastnosti formálně, matematicky. Místo slova šipka použijeme dále slovo vektor. Vektor označme \vec{v} , případně \vec{v}_1, \vec{v}_2 nebo \vec{v}_3 . Reálné číslo, jímž násobíme bude a .

Máme tedy 2 operace - násobení vektoru konstantou a sčítání vektoru. Obě operace jsou uzavřené, tedy výsledkem je opět vektor, nikoli třeba reálné číslo.

$$\begin{array}{ll} \vec{v}_2 = a \cdot \vec{v}_1 & \text{násobení vektoru konstantou} \\ \vec{v} = \vec{v}_1 + \vec{v}_2 & \text{sčítání vektorů} \end{array}$$

Operace splňují následujících 8 vlastností, jak se můžeme na chování šipek snadno přesvědčit:



Obrázek 4.1: Operace s vektory

$\vec{v} = \vec{0} + \vec{v}$	neutrální prvek sčítání
$\vec{v} + (-\vec{v}) = \vec{0}$	existence inverzního prvku
$\vec{v}_1 + \vec{v}_2 = \vec{v}_2 + \vec{v}_1$	komutativita
$\vec{v}_1 + (\vec{v}_2 + \vec{v}_3) = (\vec{v}_1 + \vec{v}_2) + \vec{v}_3$	asociativita sčítání
$\vec{v} = 1 \cdot \vec{v}$	neutrální prvek násobení
$a \cdot (\vec{v}_1 + \vec{v}_2) = (a \cdot \vec{v}_1) + (a \cdot \vec{v}_2)$	distributivita
$(a + b) \cdot \vec{v} = a \cdot \vec{v} + b \cdot \vec{v}$	distributivita
$(a \cdot b) \cdot \vec{v} = a \cdot (b \cdot \vec{v})$	asociativita násobení

Dosud jsme pouze „zkomplikovali“ banální představy o šípkách. Abstraktní krok je následující. Změňme od této chvíle význam slova vektor. Vektor již nebude znamenat pouze šípku, nýbrž jakýkoli objekt, na němž lze definovat 2 výše uvedené operace, které mají všech 8 uvedených vlastností. Takových objektů je řada, krom šipek například n -tice čísel, polynomy kteréhokoli stupně, funkce, které jsou řešením homogenní diferenciální rovnice, matice konkrétního typu a další. Matematika se může dále zabývat pouze chováním 8 uvedených vlastností. Zjištěné výsledky pak budou automaticky platit pro všechny konkrétní případy vektorů.

Zavedme ještě důležitý pojem **vektorový prostor**, též označovaný jako lineární prostor. Poznamenejme jen, že slovo prostor je v matematice (přinejmenším zde) pouhé synonymum ke slovu množina, nemá jiný speciální význam. Mějme nějakou množinu V , na jejíž prvcích nějak libovolně definujeme operaci násobení reálným číslem „ \cdot “ a operaci sčítání 2 prvků „ $+$ “, přičemž ale definované operace splňují 8 výše uvedených podmínek. Trojici $(V, \cdot, +)$ označíme jako vektorový prostor. Každý prvek vektorového prostoru nazveme **vektor**.

Zjevně tedy množina všech šipek s dvěma výše definovanými operacemi tvoří vektorový prostor. Ukažme si však, že i polynomy 3. stupně můžeme skutečně považovat za vektory, prvky vektorového prostoru. Vezměme nějaké dva (obecné) polynomy 3. stupně

$$\begin{aligned} y_1 &= a_1 x^3 + b_1 x^2 + c_1 x + d_1 \\ y_2 &= a_2 x^3 + b_2 x^2 + c_2 x + d_2 \end{aligned}$$

Operaci násobení číslem a sčítání budeme chápat „klasicky“, jak jsme zvyklí. Násobme polynom y_1 konstantou $k \in \mathbb{R}$. Pak dostaneme

$$y = ky_1 = (ka_1)x^3 + (kb_1)x^2 + (kc_1)x + (kd_1)$$

což je zjevně opět polynom 3. stupně. Operace násobení reálným čísle je tedy uzavřená. Nyní

sečteme vektory y_1 a y_2

$$y_1 + y_2 = (a_1 + a_2)x^3 + (b_1 + b_2)x^2 + (c_1 + c_2)x + (d_1 + d_2)$$

Výsledkem je opět polynom 3. stupně. Operace je též uzavřená. Velmi jednoduše se dá dále ukázat, že tyto dvě operace splňují všech 8 výše uvedených požadavků. Jako příklad ukažme komutativitu:

$$\begin{aligned} y_1 + y_2 &= (a_1 + a_2)x^3 + (b_1 + b_2)x^2 + (c_1 + c_2)x + (d_1 + d_2) \\ &= (a_2 + a_1)x^3 + (b_2 + b_1)x^2 + (c_2 + c_1)x + (d_2 + d_1) = y_2 + y_1 \end{aligned}$$

Polynomy 3. stupně tedy můžeme považovat za vektory. Množina všech polynomů 3. stupně společně s operacemi násobení konstantou a sčítání tvoří vektorový prostor.

V dalším textu zúžíme naši představu vektorů pouze na n -tice čísel. Rozlišujeme řádkové vektory

$$\vec{v} = (1, 2, 3)$$

a sloupcové vektory

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Záměna řádků a sloupců se označuje jako transpozice, značí se T . Tedy

$$(1, 2, 3) = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}^T$$

Jednotlivá čísla uvnitř vektoru se označují složky nebo komponenty vektoru, označujeme je indexy, např. $v_2 = 2$. i -tá složka je v_i .

4.1.1 Operace s vektory

Sčítání vektorů a násobení čísel probíhá „po složkách“, angl. element-wise.

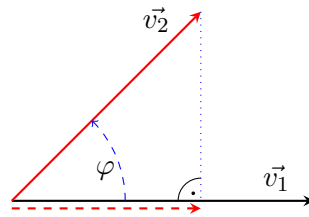
$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 5 \\ 7 \\ 9 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 4 \\ 5 \\ 6 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} -3 \\ -6 \\ -9 \end{pmatrix} &= -3 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Dále definujeme reálné číslo **skalární součin** 2 vektorů jako

$$(x_1, x_2, x_3) \cdot \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = x_1y_1 + x_2y_2 + x_3y_3$$

Obecně můžeme psát

$$\vec{u} \cdot \vec{v} = \sum_{i=1}^n u_i v_i$$



Obrázek 4.2: Operace s vektory

Např. $(1, 2, 3) \cdot (4, 5, 6)^T = 1 \cdot 4 + 2 \cdot 5 + 3 \cdot 6 = 29$

Délka vektoru je dle Pythagorovy věty přirozeně

$$v = \|\vec{v}\| = \sqrt{v_1^2 + v_2^2 + \dots + v_n^2}$$

Pomocí skalárního součinu můžeme psát

$$v = \sqrt{\vec{v} \cdot \vec{v}}$$

Geometricky představuje skalární součin kolmou projekci jednoho vektoru do druhého (a násobenou druhým vektorem), viz obr 4.2.

4.1.2 Lineární kombinace, lineární závislost a nezávislost vektorů

4.1.3 Báze a dimenze vektorového prostoru

vyjádření vektorů jako násobků báze příklad báze polynomů 3. prostoru

4.2 Matice

Maticí rozumíme seskupení několika čísel do obdélníkového nebo čtvercového tvaru. Matici obvykle uzavíráme do kulatých nebo hranatých závorek. Rozlišujeme řádky a sloupce matice. Např.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 3 \\ 5 & 5 & 8 & 7 \\ 6 & 9 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

je matice nazvaná A s 3 řádky a 4 sloupci. Hovoříme o matici typu 3×4 . Obecně má matice typu $m \times n$ m řádků a n sloupců. Matice typu $m \times m$ se označuje jako čtvercová.

Jednotlivá čísla označujeme jako prvky či elementy matice. Prvek v druhém řádku a třetím sloupci značíme a_{23} , pro uvedenou matici je $a_{23} = 8$. Obecně je prvek v i -tém řádku a j -tém sloupci a_{ij} . Prvek levý horní je a_{11} , pravý horní a_{1n} , levý dolní a_{m1} a prvek pravý dolní je a_{mn} .

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & a_{ij} & \vdots \\ a_{m1} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

Jednotlivé řádky matice můžeme považovat za řádkové vektory, sloupce za sloupcové vektory.

4.2.1 Typy matic

Kromě obecné matice výše uvedené, kdy je většina čísel v matici odlišných od 0 a není patrna žádná struktura uspořádání prvků, existují speciální typy matic.

Diagonální matice má prvky jen na hlavní diagonále

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 7 \end{pmatrix}$$

Jednotková matice je diagonální matice se všemi prvky rovnými 1.

$$E_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Symetrická matice je symetrická vůči hlavní diagonále

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 7 & -3 \\ -1 & 3 & 5 & 4 \\ 7 & 5 & 2 & 0 \\ -3 & 4 & 0 & 7 \end{pmatrix}$$

Horní a dolní trojúhelníková matice

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 7 & -3 \\ 0 & 3 & 5 & 4 \\ 0 & 0 & 2 & 9 \\ 0 & 0 & 0 & 7 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & 0 & 0 \\ 7 & 5 & 2 & 0 \\ -3 & 4 & 8 & 7 \end{pmatrix}$$

Transponovaná matice má vyměněné řádky a sloupce. Pro symetrickou matici zjevně platí $A^T = A$. Transponovaná matice A^T k výše uvedené matici A je typu 4×3 a zní

$$A^T = \begin{pmatrix} 1 & 5 & 6 \\ 2 & 5 & 9 \\ 3 & 8 & 1 \\ 3 & 7 & 0 \end{pmatrix}$$

4.2.2 Hodnost a determinant matic

1.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix}$$

2.

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix}$$

4.2.3 Operace s maticemi

Sčítání a odčítání matic *stejného typu* je prosté sčítání a odčítání po prvcích. Např.

$$\begin{pmatrix} 1 & 3 & -5 \\ -2 & 1 & 4 \\ 3 & 4 & -3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 5 & -2 \\ 2 & 6 & 10 \\ 10 & 12 & 6 \end{pmatrix}$$

Totéž platí pro **násobení matic číslem**. Např.

$$3 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 6 & 9 \\ 12 & 15 & 18 \\ 21 & 24 & 27 \end{pmatrix}$$

Operace splňují všech 8 výše popsaných vlastností. I množina všech matic stejného typu proto tvoří vektorový prostor. Chovají se totiž „jako šipky“.

Násobení vektoru maticí je složitější. Matici si představíme jako m řádkových vektorů napsaných pod sebou a provedeme skalární součin každého řádku s násobeným vektorem. Postupujeme systémem „řádek-krát-sloupec“. Např.

$$\begin{pmatrix} 1 & 3 & -5 & 1 \\ -2 & 1 & 4 & 1 \\ 3 & 4 & -3 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \cdot 1 + 3 \cdot 2 + (-5) \cdot 3 + 1 \cdot 1 \\ (-2) \cdot 1 + 1 \cdot 2 + 4 \cdot 3 + 1 \cdot 2 \\ 3 \cdot 1 + 4 \cdot 2 + (-3) \cdot 3 + 1 \cdot 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -7 \\ 14 \\ 5 \end{pmatrix}$$

Výsledky vektor má tolik prvků, jako má matice řádků. Násobený vektor musí mít tolik prvků, jako matice sloupců. Pokud je matice A typu $m \times n$, v násobení $\vec{y} = A \cdot \vec{x}$ má \vec{x} n prvků a \vec{y} m prvků.

Nejkomplikovanější je **násobení matice maticí**, $C = A \cdot B$. První matici, A , typu $m \times n$ si představíme jako složenou z m řádkových vektorů o n komponentách, druhou matici B typu $n \times p$ jako složenou z p sloupcových vektorů délky n . Provedeme skalární součin každého řádkového vektoru matice A s každým sloupcovým vektorem matice B . Pro to je nutné, aby byl „vnitřní“ rozměr obou matic, v tomto případě n , stejný, tedy počet sloupců první matice musí být stejný jako počet řádků druhé matice. Výsledná matice C je typu $m \times p$. Obecně pro prvek s indexy i , j matice C platí

$$C_{ij} = \sum_{k=1}^n A_{ik} \cdot B_{kj}$$

Obr. 4.3 názorně ukazuje postup výpočtu.

Například pro

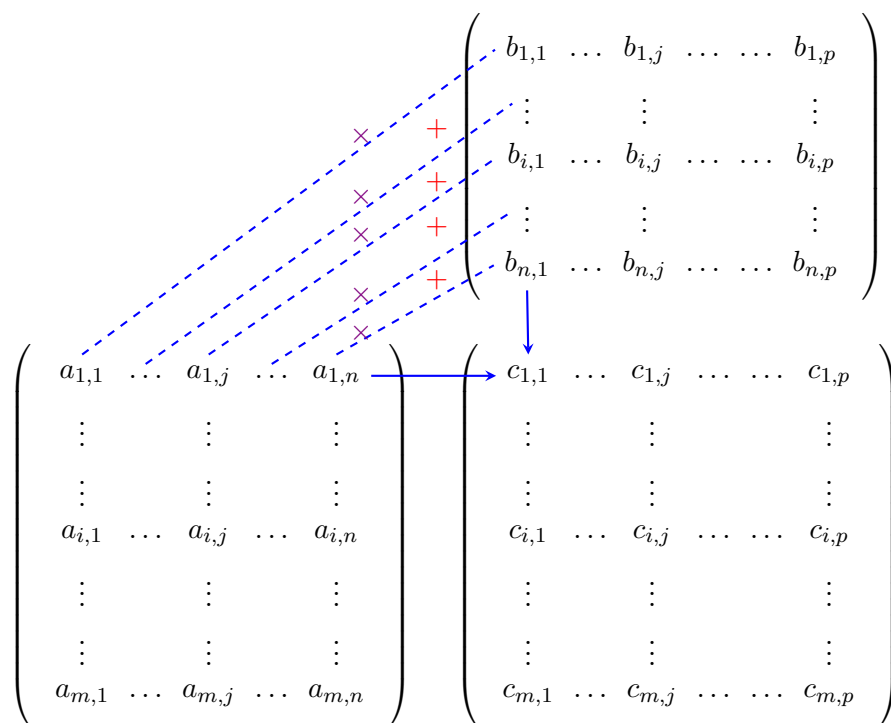
$$A = \begin{pmatrix} 1 & 5 & 6 \\ 2 & 5 & 9 \\ 3 & 8 & 1 \\ 3 & 7 & 0 \end{pmatrix}$$

a

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 6 \\ -2 & 9 \\ 3 & -1 \end{pmatrix}$$

je

$$C = A \cdot B = \begin{pmatrix} 1 \cdot 1 + 5 \cdot (-2) + 6 \cdot 3 & 1 \cdot 6 + 5 \cdot 9 + 6 \cdot (-1) \\ 2 \cdot 1 + 5 \cdot (-2) + 9 \cdot 3 & 2 \cdot 6 + 5 \cdot 9 + 9 \cdot (-1) \\ 3 \cdot 1 + 8 \cdot (-2) + 1 \cdot 3 & 3 \cdot 6 + 8 \cdot 9 + 1 \cdot (-1) \\ 3 \cdot 1 + 7 \cdot (-2) + 0 \cdot 3 & 3 \cdot 6 + 7 \cdot 9 + 0 \cdot (-1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9 & 45 \\ 19 & 48 \\ -10 & 89 \\ -11 & 81 \end{pmatrix}$$



Obrázek 4.3: Schéma násobení matic

Matice A je typu 4×3 , matice B typu 3×2 a matice C typu 4×2 .

4.2.4 Geometrická interpretace násobení vektoru maticí

Mějme jako příklad dvojrozměrný vektor v rovině $\vec{u} = (u_1, u_2)$ a vynásobme jej čtvercovou maticí typu 2×2 . Ukažme si několik příkladů, abychom „viděli“, co provede matice s vektorem (obr. 4.4).

Násobením maticí

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

dostaneme nový vektor $\vec{v} = A \cdot \vec{u} = (u_2, u_1)$. Došlo k výměně složek vektoru, což odpovídá zrcadlení vektoru podle osy $y = x$. Matice

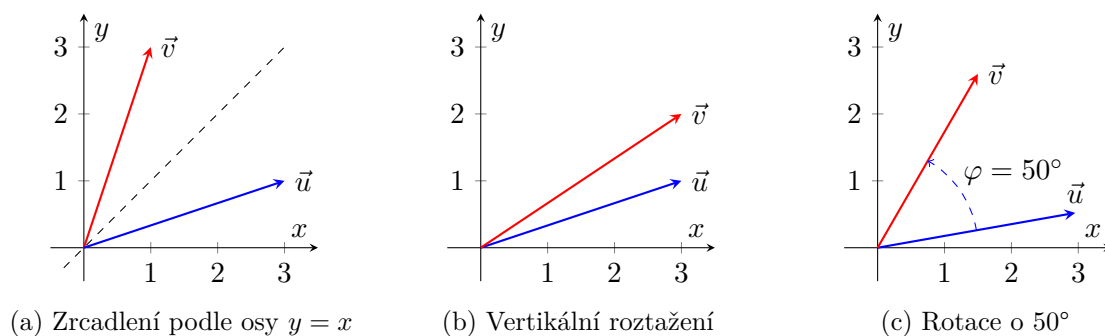
$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

prodlouží „y-vou“ složku vektoru dvakrát a nezmění „x-vou složku“, provede tedy vertikální roztažení. Matice

$$A = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}$$

způsobí rotaci vektoru o úhel φ proti směru hodinových ručiček, ale nezmění velikost vektoru.

Různé matice tedy působí různé, ale pro danou matici charakteristické změny vektoru. Pokud vektor násobíme čtvercovou maticí, výsledný vektor má stejnou dimenzi. Je možné násobit vektor i maticí obdélníkovou. Pak klesá nebo roste dimenze vektoru a geometrická interpretace už není snadná. Mohlo by jít např. o projekci 3D-vektoru do nějaké roviny (2D-vektoru).



Obrázek 4.4: Geometrická interpretace násobení vektoru maticí

4.2.5 Příklady aplikací matic v biologii a medicíně

převedení z teorie grafů

popis sítí - metabolické, genové regulační ...

analýza vícerozměrných dat. Principal component analysis

klasické fyzikální uplatnění

analýza obrazu

4.3 Soustavy lineárních algebraických rovnic

Soustavou m lineárních algebraických rovnic o n neznámých se rozumí celek m lineárních vzájemně provázaných rovnic, v nichž se dohromady vyskytuje n neznámých. Soustavou 3 rovnic o 3 neznámých x_1 , x_2 , a x_3 je například

$$2x_1 + x_2 - x_3 = 1 \quad (4.1)$$

$$-x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 4 \quad (4.2)$$

$$3x_1 - x_3 = -2 \quad (4.3)$$

Řešením této soustavy je trojice čísel x_1 , x_2 , a x_3 , které můžeme považovat za složky vektoru $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$. Na pravé straně soustavy, za „=“, stojí též 3 čísla, která můžeme považovat za složky nějakého vektoru, např. $\vec{b} = (1, 4, -2)$. Kdybychom z napsané soustavy „vypustili“ proměnné x_i , zbyla by nám struktura matice. Seskupme tedy koeficienty u proměnných do matice A .

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ -1 & -3 & 2 \\ 3 & & -1 \end{pmatrix}$$

Pak ale můžeme celou soustavu rovnic ihned přepsat do maticové rovnice

$$A\vec{x} = \vec{b}$$

Řešit soustavu rovnic tedy vlastně znamená hledat vektor \vec{x} , který vyhovuje dané maticové rovnici. Geometricky nahlíženo hledáme vektor \vec{x} , který matice A přetváří ve vektor \vec{b} . Tím jsme sice dospěli k novému „pohledu“ na řešení soustavy rovnic, ale zatím nám to jakkoli nepomohlo při vlastním řešení.

inverzní matice
gaussova metoda