MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ VE FYZICE

Přírodovědecká fakulta UP Olomouc
září 2003

Obsah

1 Základní pojmy

Systém

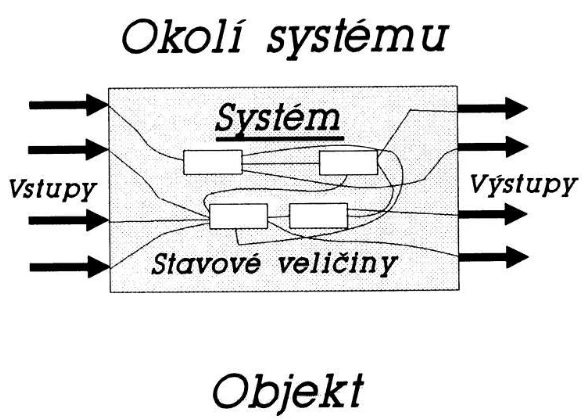
Pojmem systém rozumíme jakékoli účelové uspořádání jednodušších objektů, resp. komponentů ve složitější celek charakterizovaný součinností, resp. interakcí těchto objektů a vykazující určité výsledné vlastnosti odpovídající účelu, k němuž bylo toto uspořádání vytvořeno.

Systém jako model

V původním slova smyslu jsou jednoduššími, dílčími objekty fyzicky existující a oddělitelné komponenty a jejich součinnost spočívá v jejich vzájemném působení např. silovém, tepelném, elektrickém apod. Stále častěji se však pojem systém rozšiřuje na problémy abstraktní. Komponenty systému a jejich interakce jsou potom např. proměnné veličiny a rovnice, jimž tyto proměnné vyhovují, anebo jinak vyjádřené příznaky a relace mezi nimi. Zpravidla tento abstraktní systém formulujeme tak, aby popsal určitou třídu jevů pozorovaných v reálném světě a podstatně se s nimi shodoval. Takto vytvořený abstraktní systém pak nahrazuje v našem modelování původní reálné jevy a problémy a stává se jejich *modelem*.

Kauzalita, vstup, výstup

Pojem systém byl vytvořen především pro studium složitějších kauzálních vztahů, tedy vztahů mezi souborem určitých příčin a souborem jimi způsobených důsledků. Veličiny, které charakterizují vliv okolí na systém, jsou *vstupy systému*. Vnější projevy systému, které charakterizují vliv systému na jeho okolí, jsou jeho *výstupy*.



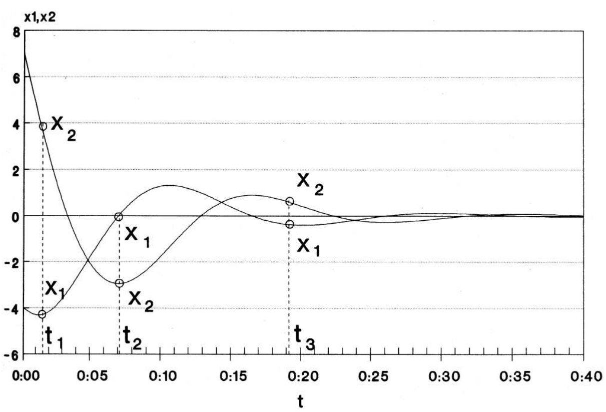
Obrázek 1: Systém a jeho okolí

Dynamický systém

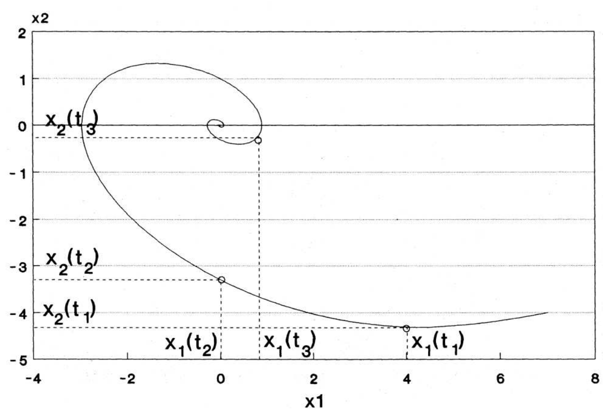
U většiny kauzálních vztahů reálného světa pozorujeme, že okamžitá hodnota výstupů není dána jen současnou hodnotou vstupů, ale i určitou historií, tedy stavem vstupů v minulosti. Takový systém se nazývá *dynamický*. (Např. snažíme-li se rozjet těžký vozík, nezáleží jeho okamžitá rychlost jen na současně působící síle, ale na integrálu této síly na celém intervalu rozjezdu a na počáteční rychlosti, s níž tento rozjezd začínal.)

Stav dynamického systému

Stav systému lze charakterizovat pomocí tzv. *stavových veličin*. Stavovou veličinou může být např. teplota systému atp. Vstupy systému spolu se stavovými veličinami určují výstup systému. Vývoj systému (tedy vývoj jeho stavových veličin) lze vyjádřit v tzv. *stavovém prostoru*. Stavový prostor je zobrazení stavových veličin v závislosti na sobě samých. V každém časovém okamžiku dostaneme ve stavovém prostoru jeden bod. Spojením těchto bodů dostaneme *stavovou trajektorii*.
Na obrázku 2 je příklad závislosti dvou stavových veličin X_1 a X_2 na čase. Stavová trajektorie těchto veličin je na obrázku 3.



Obrázek 2: Stavové veličiny



Obrázek 3: Stavová trajektorie

2 Matematický model

2.1 Stavová rovnice

Zákony dynamických jevů jsou dány rovnicemi typu

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i\left(x_1(t), ..., x_n(t), u_1(t), ..., u_m(t)\right) \quad i = 1, 2, ..., n \tag{2.1}$$

kde x_i je i-tá stavová veličina a u_i je i-tá vstupní veličina. Pomocí těchto rovnic můžeme modelovat vývoj stavových veličin v čase.

Příklady

- pro pohyb mechanické soustavy pohybující se vlivem působících sil platí

$$\frac{d}{dt}\begin{bmatrix}\text{hybnost}\\ \text{soustavy}\end{bmatrix} = \sum \begin{bmatrix}\text{síly působící}\\ \text{na soustavu}\end{bmatrix} \tag{2.2}$$

- pro rotující tělesa platí obdobná podmínka pro moment hybnosti

$$\frac{d}{dt}\begin{bmatrix}\text{moment}\\ \text{hybnosti}\end{bmatrix} = \sum \begin{bmatrix}\text{momenty sil}\\ \text{působících na soustavu}\end{bmatrix} \tag{2.3}$$

- pro teplo akumulující se v určitém prostoru nebo zásobníku platí

$$\frac{d}{dt}\begin{bmatrix}\text{akumulované}\\ \text{teplo}\end{bmatrix} = \sum \begin{bmatrix}\text{tepelné toky do}\\ \text{a z prostoru akumulace}\end{bmatrix} \tag{2.4}$$

Rovnici 2.1 lze vyjádřit i v integrálním tvaru

$$x_i(t) = x_i(0) + \int\limits_0^t f_i\left(x_1(\tau), ..., x_n(\tau), u_1(\tau), ..., u_m(\tau)\right) d\tau \quad i = 1, 2, ...n. \tag{2.5}$$

Pokud soubor stavových veličin $x_i(t)$ zapíšeme jako vektor

$$\mathbf{x} = [x_1 \dots x_n]^T \tag{2.6}$$

a dále označíme vektor vstupu, resp. vektor derivací

$$\mathbf{u} = (u_1, ..., u_m)\,, \tag{2.7}$$

resp.

$$\mathbf{f} = (f_1, ..., f_n), \tag{2.8}$$

můžeme rovnici 2.5 zapsat ve tvaru

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}(0) + \int\limits_0^t \mathbf{f}(\tau) d\tau \tag{2.9}$$

Pomocí těchto symbolů bude i soustava 2.1 zapsána jedinou vektorovou, tzv. *stavovou rovnicí*

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = \mathbf{f}\left(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)\right) \tag{2.10}$$

Výstupní rovnice dynamického systému

Stavové veličiny x_i volíme tak, aby rovnice pro derivace

$$\frac{dx_i}{dt} \tag{2.11}$$

byly tvaru (2.1). Proto se tyto veličiny obecně nemusejí shodovat s výstupy $y_1, ..., y_p$ zkoumaného systému. Označíme-li i výstup jako vektor

$$\mathbf{y} = [y_1, ..., y_p]^T, \tag{2.12}$$

můžeme výstupní rovnici obecně vyjádřit jako funkci

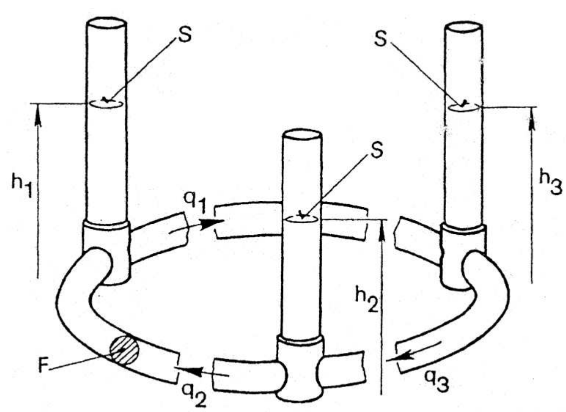
$$\mathbf{y} = \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \tag{2.13}$$

jejímiž argumenty jsou pouze stavové a vstupní proměnné.

Příklad

Na obrázku 4 je tříramenná hadicová vodováha sloužící k určení roviny. Taková vodováha má výrazné dynamické vlastnosti s málo tlumenými vlastními kmity hladin vody v koncovkách. Popišme tento pohyb ve vhodných stavových proměnných.

Základní vlastnost stavových proměnných mají zřejmě výšky hladin v koncovkách h_1,h_2,h_3, neboť rychlosti jejich změn souvisí s průtoky (vyjádřenými v jednotkách hmotnosti na jednotku času) ve spojovacích hadicích q_1,q_2,q_3 rovnicemi



Obrázek 4: Tříramenná hadicová vodováha

$$S\rho\frac{dh_1}{dt} = q_2 - q_1 \tag{2.14}$$

$$S\rho\frac{dh_2}{dt} = q_3 - q_2 \tag{2.15}$$

kde ρ je hustota použité kapaliny. Třetí stejně sestavená rovnice by však již neměla být do soustavy 2.10 zahrnována, neboť o výškách hladin platí, že

$$h_1 + h_2 + h_3 = 3h_S \tag{2.16}$$

protože objem náplně vodováhy zůstává konstantní (h_S je určena rovnovážným stavem dosaženým při stejných výškách hladin). Z toho plyne, že pouze dvě (libovolné) ze tří výšek hladin patří do vektoru **x**. Třetí je pak určena jejich konstantním součtem.

Kývání náplně vodováhy je výsledkem současného vlivu tíhových sil, setrvačnosti a pasivních odporů. Označme L délku hadicových spojů a F jejich průtočný průřez a dále předpokládejme, že $L >> h_S$. Síla působící na náplň hadicového spoje mezi koncovkami h_1 a h_2 je

$$F_N = pS = (h_1 - h_3)\rho g S, \tag{2.17}$$

kde g je gravitační konstanta. Změna průtoku s časem je tedy

$$\frac{dq_1}{dt} = \frac{F_N}{m} = \frac{(h_1 - h_3)\rho g S}{F L \rho}, \tag{2.18}$$

kde m je hmotnost kapaliny v hadicovém spoji. Dynamiku průtoků lze tedy vyjádřit rovnicemi

$$L\frac{dq_1}{dt} = \gamma F(h_1 - h_3) - Rq_1 \tag{2.19}$$

$$L\frac{dq_2}{dt} = \gamma F(h_2 - h_1) - Rq_2, \tag{2.20}$$

kde

$$\gamma = \frac{gS}{F_N} \tag{2.21}$$

R představuje konstantu laminárního odporu v hadicovém spoji. Ovšem při uzavřenosti a neměnnosti náplně vodováhy nejsou ani průtoky q_1, q_2, q_3 vzájemně nezávislé. Pouze vyrovnávají rozdíly mezi h_1, h_2, h_3 a protože neexistuje vnější síla, která by nutila náplň obíhat hadicemi, musí součet všech tří zrychlení být nulový

$$\frac{dq_1}{dt} + \frac{dq_2}{dt} + \frac{dq_3}{dt} = 0 \tag{2.22}$$

takže třetí rovnici pro q_3 už nemá smysl psát, byla by jen součtem prvních dvou. Ovšem nejen zrychlení, ale i průtoky q_i musejí mít nulový součet, protože jsou výsledkem integrací zrychlení při shodně nulových počátečních podmínkách, neboli

$$q_1 + q_2 + q_3 = 0 \tag{2.23}$$

a tak stavový vektor tohoto systému budou tvořit pouze dvě výšky a dva průtoky

$$\mathbf{x} = [h_1, h_2, q_1, q_2]^T \tag{2.24}$$

Po označení koeficientů

$$\frac{1}{S\rho} = a \qquad \frac{\gamma F}{L} = K \qquad \frac{R}{L} = r \tag{2.25}$$

je stavová rovnice 2.10 dána soustavou čtyř rovnic

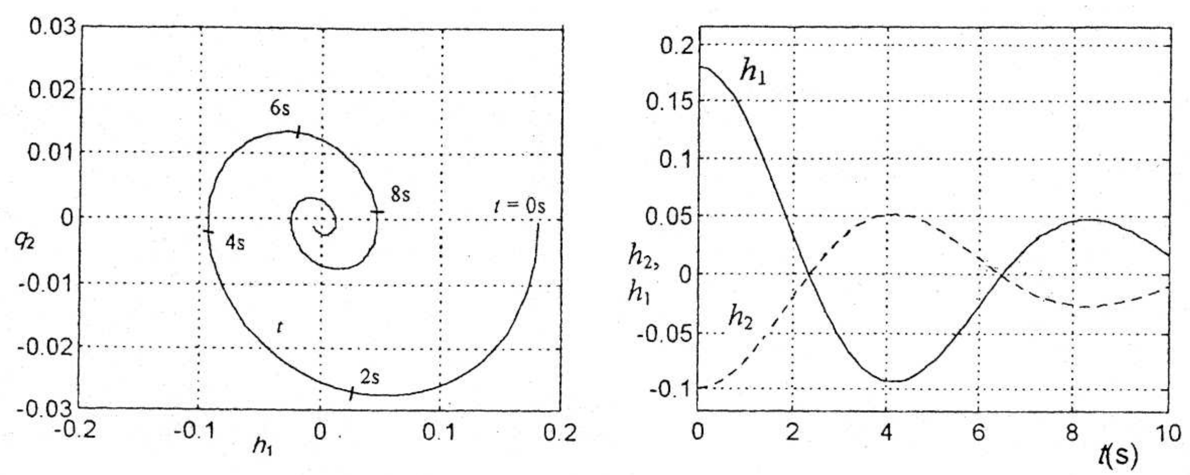
$$\frac{dh_1}{dt} = a\,(q_2 - q_1) \tag{2.26}$$

$$\frac{dh_2}{dt} = a\,(-q_1 - 2q_2) \tag{2.27}$$

$$\frac{dq_1}{dt} = K\,(2h_1 - 3h_S + h_2) - rq_1 \tag{2.28}$$

$$\frac{dq_2}{dt} = K\,(h_2 - h_1) - rq_2 \tag{2.29}$$

Na obrázku 6 je průmět stavové trajektorie[1] do roviny h_1, q_2 a závislost kmitů h_1 a h_2 na čase. Daný model je počítán pro parametry $a = 2$, $K = 0,1$ a $r = 0,32$.



Obrázek 5: Průmět stavové trajektorie $h_1 - q_2$ a záznam kmitů h_1, h_2 tříramenné vodováhy

[1]Vzhledem k tomu, že zde máme 4 stavové veličiny, stavovou trajektorii bychom museli zobrazit ve čtyřrozměrném prostoru. Můžeme si ovšem zobrazit její průmět do roviny libovolné dvojice stavových veličin.

2.2 Deduktivní a induktivní formulace modelu

Při sestavování matematického modelu stojíme před úkolem vystihnout matematickými prostředky určité projevy zvoleného systému, neboli identifikovat příslušný systém. Rozlišujeme dva zásadně odlišné principy hledání vhodného matematického modelu, postup deduktivní a postup induktivní.

Deduktivní postup

Dedukcí sestavujeme matematický model na základě obecně platných zákonů příslušné vědní disciplíny. Tento přístup lze použít tam, kde podstata vyšetřovaných jevů je dobře známa a kde je propracována a ověřena její teorie.
Jako příklad budeme vyšetřovat pohyb tělesa vrženého vertikálně z povrchu Země s počáteční rychlostí v_0 v gravitačním poli Země. Vliv ostatních nebeských těles budeme zanedbávat. Podle Newtonova gravitačního zákona se dvě tělesa přitahují silou

$$F = \kappa \frac{Mm}{r^2}, \tag{2.30}$$

kde κ je gravitační konstanta, M hmotnost Země, m hmotnost tělesa a r vzdálenost tělesa od středu Země. Na základě druhého Newtonova zákona

$$F = m \frac{dv(t)}{dt} \tag{2.31}$$

sestavíme pohybovou rovnici

$$v \frac{dv}{dr} = -\kappa \frac{M}{r^2}, \tag{2.32}$$

kde v je rychlost a chápeme ji jako funkci vzdálenosti od středu Země. Z odvozeného matematického modelu lze například stanovit nejmenší počáteční rychlost, při které se těleso již nevrátí na Zemi atd.

Induktivní postup

Induktivní postup jsme nuceni použít tam, kde nejsou splněny podmínky pro použití deduktivního postupu, tj. neexistují nebo nejsou známy exaktní zákony. Vždy je potřeba vycházet z konkrétních jevů, na základě kterých (většinou podle zkušenosti) sestavíme model, který se co nejlépe shoduje s pozorovanými skutečnostmi. Tento model sice popisujeme pomocí matematických vztahů, ale tyto vztahy nemají reálnou fyzikální interpretaci. Takto formulovaný model má zpravidla méně obecnou platnost, než model sestavený deduktivním postupem, na což je při řešení fyzikálních problémů nutno brát zřetel.

2.3 Linearita ve stavové formulaci

Vzhledem k výhodnosti lineárních vztahů využíváme i u modelů dynamických jevů co nejvíce ty modely, jejichž vztah vstup-výstup je lineární relací. Uvážíme-li, že simultánní integrace jsou lineární relace, tudíž o linearitě či nelinearitě stavové formule (2.10),(2.13) rozhoduje jen charakter vektorových funkcí $\boldsymbol{f}$ a $\boldsymbol{g}$.

Z algebry plyne, že každá *lineární funkce* $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ je vždy vyjádřitelná jako součin určité matice tzv. parametrů $\boldsymbol{P}$ a vektoru všech argumentů této funkce, přičemž nejen $\mathbf{x}$ a $\mathbf{u}$, ale i prvky matice $\mathbf{P}$ mohou být daným způsobem proměnné v čase. Protože však $\mathbf{x}$ a $\mathbf{u}$ uvažujeme odděleně, rozdělujeme i matici parametrů na dvě matice $\mathbf{A}$ a $\mathbf{B}$, z nichž matice $\mathbf{A}$ typu (n, n) je tzv. *matice dynamiky* a $\mathbf{B}$ (n, m) je tzv. *matice buzení*. Lineární stavová rovnice dynamického systému bez zpoždění je tedy obecně tvaru

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{A}(t)\,\mathbf{x}(t) + \mathbf{B}(t)\,\mathbf{u}(t)\,. \tag{2.33}$$

Výstupní rovnice 2.13 je rovněž dána maticovými součiny

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \mathbf{C}(t)\mathbf{x}(t) + \mathbf{D}(t)\mathbf{u}(t) \tag{2.34}$$

a lineární stavovou formulací dynamického systému ve spojitém čase (bez zpoždění) pak rozumíme takovou, jejíž stavová rovnice má tvar (2.33) a výstupní rovnice tvar (2.34).

3 Rovnovážný stav dynamického systému

Modelem dynamického systému popisujeme především *pohyb* modelovaného objektu, avšak prakticky ve všech problémech dynamického chování objektů má zásadní význam také otázka, kdy a za jakých podmínek se všechny stavové proměnné ustálí na konstantních hodnotách tzv. *rovnovážného stavu*. Jinými slovy, rovnovážný stav znamená takovou situaci, kdy všechny příčiny pohybu objektu se dostanou do vzájemné rovnováhy a pohyb ve všech stavových proměnných ustane.

3.1 Rovnice statiky dynamického systému

Budeme studovat podmínku rovnovážného stavu z hlediska stavové rovnice (2.10). Protože veškerý pohyb systému je vyjádřen n derivacemi, v rovnovážném stavu je nutné dosáhnout jejich anulování:

$$\frac{dx_i}{dt} = 0,\ i = 1, 2, ..., n. \tag{3.1}$$

K tomu, aby splnění tohoto požadavku znamenalo rovnovážný stav, je nutné, aby derivace se anulovaly trvalejším způsobem, a proto tento požadavek má smysl jen za konstantních hodnot působících vstupů:

$$u_i = u_{is},\ i = 1, 2, ..., m. \tag{3.2}$$

Souhrnně tyto podmínky rovnovážného stavu znamenají soustavu rovnic

$$f_i\left(\mathbf{x}, \mathbf{u}_s\right) = 0,\ i = 1, 2, ..., n \tag{3.3}$$

jejíž vektorový tvar

$$\mathbf{f}\left(\mathbf{x}, \mathbf{u}_s\right) = 0 \tag{3.4}$$

nazýváme *rovnice statiky dynamického systému*. Tato rovnice může být velmi rozmanitého tvaru a pokud má řešení (může jich být více), jsou to souřadnice možných rovnovážných stavů systému. Tato řešení budou však znamenat možnost rovnovážného stavu jen v případě reálných kořenů $\mathbf{x} = \mathbf{x}_s$.

3.2 Rovnovážný stav lineárního systému

Pro lineární dynamický systém je i rovnice statiky lineární. Uplatněním podmínek (3.3) na lineární stavovou rovnici (2.33) dostaneme soustavu lineárních algebraických rovnic

$$\mathbf{Ax} + \mathbf{Bu}_s = 0 \tag{3.5}$$

Této rovnici statiky vyhovuje

- buď jediné řešení $\mathbf{x}_s$, pokud matice $\mathbf{A}$ je regulární
- nebo vůbec neexistuje řešení, pokud matice $\mathbf{A}$ je singulární, tj. $det\,\mathbf{A} = 0$

V prvním případě má jediné řešení rovnice statiky tvar

$$\mathbf{x}_s = -\mathbf{A}^{-1}\mathbf{Bu}_s \tag{3.6}$$

a právě inverze matice $\mathbf{A}$ vyžaduje splnění podmínky její regulárnosti. Toto řešení ovšem nijak nesignalizuje, zda tento rovnovážný stav je či není stabilní.

3.3 Astatismus dynamického systému

V případě, že matice $\mathbf{A}$ je singulární, některé její řádky jsou lineárně závislé na ostatních, což může být způsobeno dvěma příčinami

- buď je závislost řádků dána nadbytečnými stavovými proměnnými
- nebo dojde k závislosti řádků $\mathbf{A}$ i tam, kde mezi stavovými veličinami algebraická závislost není - pak jde o *astatický dynamický systém*.

V případě astatického systému lze najít reálná čísla $C_1, C_2, ..., C_n$ taková, že pro konstantní vstupy $u = u_s$ rychlosti stavových proměnných trvale splňují podmínku

$$\sum_{i=1}^{n} C_i \frac{dx_i(t)}{dt} = 0 \tag{3.7}$$

kde alespoň jedna z derivací má nenulovou limitu

$$\lim_{t\to\infty} \frac{dx_i(t)}{dt} = konst \tag{3.8}$$

Kromě triviálního případu $\mathbf{u}_s = 0$ takový systém nemůže vyhovět podmínkám rovnovážného stavu, nemá tedy statickou charakteristiku a nazýváme jej proto *astatický*.

3.4 Singulární body statvové rovnice

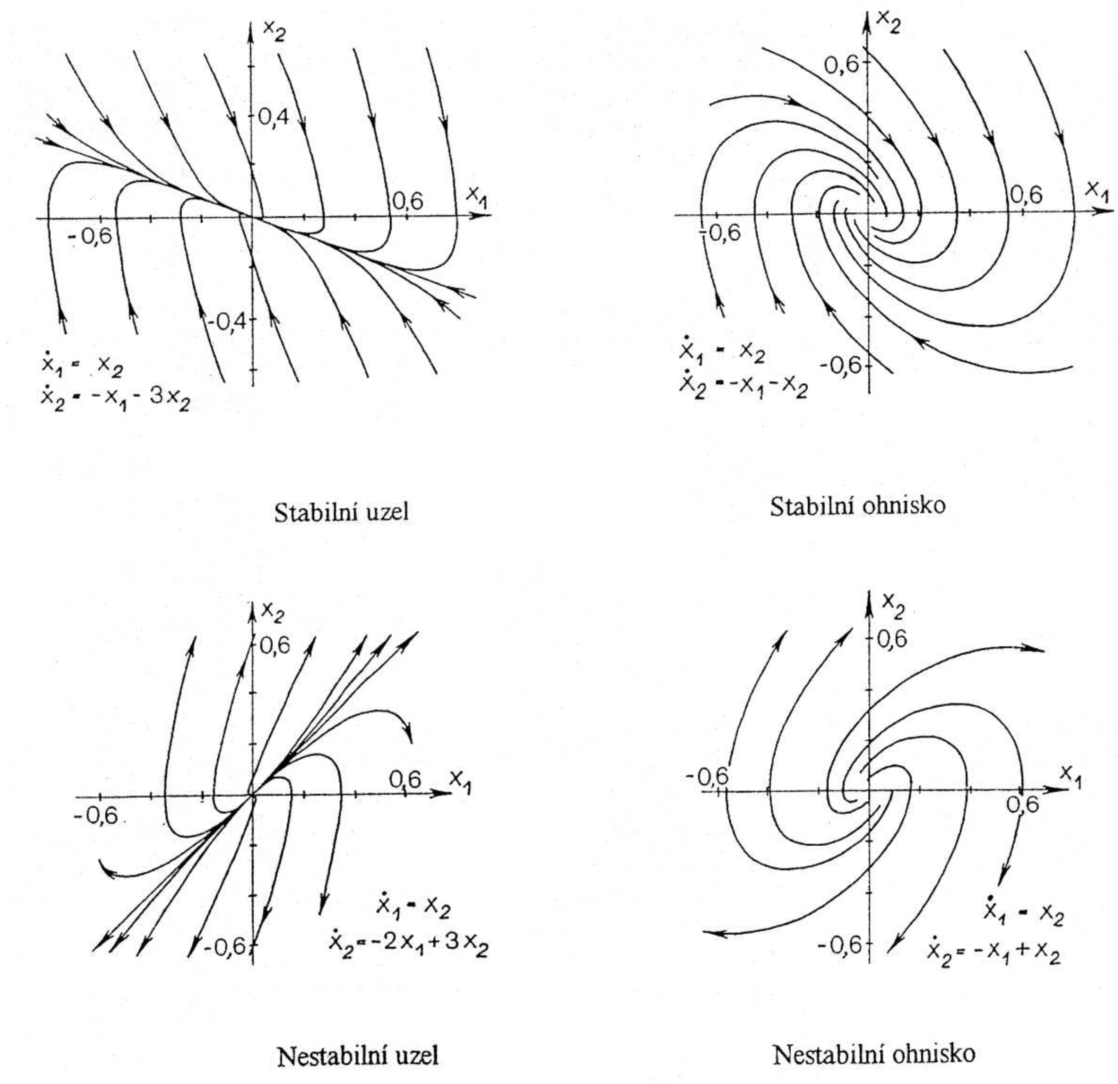
Funkcí $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ pravé strany stavové rovnice (2.10) je v každém okamžiku pohybu systému definován vektor rychlosti změny stavu $d\mathbf{x}/dt$, určující tečnu, neboli okamžitý směr stavové trajektorie ve stavovém prostoru $\mathbf{R}^n$. V průmětu stavové trajektorie do kterékoli roviny x_i, x_j je tečna tohoto průmětu v bodě $\mathbf{x}$ dána derivací

$$\frac{\partial x_j}{\partial x_i} = \frac{f_j(\mathbf{x}, \mathbf{u})}{f_i(\mathbf{x}, \mathbf{u})} \tag{3.9}$$

Směr stavové trajektorie je takto dán jednoznačně v každém bodě $\mathbf{x}$ (pro současnou okamžitou hodnotu $\mathbf{u}$), není však definován v bodě, který splňuje podmínky rovnovážného stavu (3.3), neboť zde derivace (3.9) vedou na neurčité výrazy typu „0/0“. Z hlediska pohybu systému má tedy bod $\mathbf{x}_s$ vyjímečné vlastnosti a je proto v teorii diferenciálních rovnic tzv. *singulárním bodem*. V pohybu systému to znamená, že tímto bodem prochází nekonečně mnoho stavových trajektorií, že tedy bod $\mathbf{x}_s$ je hromadným bodem všech stavových trajektorií směřujících buď k témuž rovnovážnému stavu (stabilní $\mathbf{x}_s$) anebo naopak z něj vycházejících (nestabilní $\mathbf{x}_s$).

3.5 Singulární bod typu uzel a ohnisko

Singulární body, tj. rovnovážné stavy mohou být stabilní a nestabilní. Kromě toho se rovnovážné stavy rozlišují také podle kmitavosti či nekmitavosti v okolí $\mathbf{x}_s$. Některé rovnovážné stavy jsou charakteristické tím, že systém se v nich ustaluje *nekmitavým* pohybem (stabilní případ) nebo se nekmitavým pohybem od nich vzdaluje (nestabilní případ). Takový singulární bod se nazývá stabilní, resp. nestabilní *uzel*. Dalším typem $\mathbf{x}_s$ je stabilní, resp. nestabilní *ohnisko* vyznačující se tím, že ustalování ve stabilním $\mathbf{x}_s$, resp. vzdalování se od nestabilního $\mathbf{x}_s$ se děje pohybem *kmitavým*, při němž se opakovaně mění znaménka derivací $dx_i/dt, i = 1, ..., n$.



Obrázek 6: Stavové trajektorie pohybu v okolí singulárního bodu

4 Numerické modelování

Ve většině praktických úloh je řešení stavových (2.10) a výstupních (2.13) rovnic nemožné nebo velmi obtížné. Z tohoto důvodu jsou tyto rovnice řešeny numericky pomocí výpočetní techniky.

4.1 Diskretizace spojitého systému numerickou metodou řešení

Při numerickém řešení stavových a výstupních rovnic je nutné tyto rovnice diskretizovat, tj. zvolit přiměřený interval Δt a tím přejít od spojitého času t k diskrétnímu času k. Místo spojitě proměnných původního modelu na počítačovém modelu pak pracujeme jen s odpovídajícími *posloupnostmi jejich vzorků*. Aplikací numerické metody se takto k původně spojitému systému přiřazuje nový diskrétní systém tak, aby posloupnosti vzorků jeho stavových veličin se co nejlépe shodovaly s odezvou stavu systému původního.

Podstatu diskrétního nahrazení numerickou metodou řešení si ukážeme na nejjednodušší *Eulerově metodě*. Řešení počáteční úlohy stavové rovnice (2.10) pro počáteční podmínku $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$ a pro daný průběh vstupu $\mathbf{u} = \mathbf{u}(k)$ vychází u této metody z nejjednodušší přibližné náhrady derivací dopřednými diferenčními podíly

$$\left.\frac{dx_i(t)}{dt}\right|_{t=t_k} \doteq \frac{x_i(k+1) - x_i(k)}{\Delta t} = f_i\left(\mathbf{x}(k), \mathbf{u}(k)\right) \tag{4.1}$$

„Nové“ souřadnice stavu v následujícím okamžiku diskrétního času počítáme tedy z „dosavadních“ $\mathbf{x}(t)$ a $\mathbf{u}(k)$ diferenčními rovnicemi

$$x_i(k+1) = x_i(k) + \Delta t\, f_i\left(\mathbf{x}(k), \mathbf{u}(k)\right),\ i = 1, 2, ..., n \tag{4.2}$$

které jsou stavovými rovnicemi diskrétního dynamického systému nahrazujícího původní spojitý (2.10).

4.2 Chyby numerických výpočtů

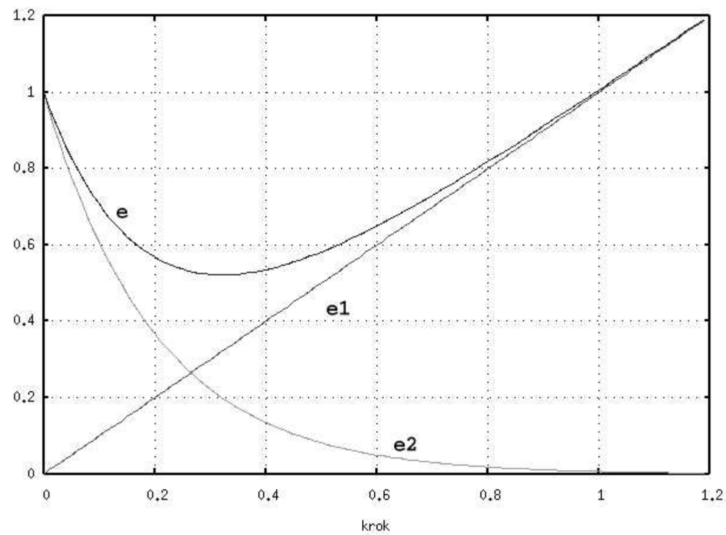
Při numerickém řešení matematických modelů vznikají dva druhy chyb:

1. **Aproximační chyba** - tato chyba souvisí s nepřesností, s jakou zvolená numerická metoda aproximuje přesné řešení. Měřítkem toho, jak přesně aproximujeme skutečnou funkci na daném intervalu je *globální (celková) chyba*, která je u Eulerovy metody úměrná zvolenému Δt. Čím kratší je tento časový interval, tím přesněji aproximujeme danou funkci. Z hlediska aproximační chyby je tedy výhodné volit integrační krok Δt co nejmenší.

2. **Zaokrouhlovací chyba** - tato chyba je dána tím, že počítač pracuje vždy s určitým počtem desetinných míst a tedy i s určitou přesností. Velikost zaokrouhlovací chyby je nepřímo úměrná velikosti integračního kroku Δt, protože čím menší je jeho hodnota, tím na daném intervalu provedeme více matematických operací a tím se nám zaokrouhlovací chyba akumuluje.

3. **Úhrnná chyba** - je to celková chyba, které se dopouštíme při výpočtu matematického modelu pomocí výpočetní techniky. Je dána součtem chyby globální a zaokrouhlovací.

Na obrázku 7 je znázorněný průběh aproximační (e1), zaokrouhlovací (e2) a celkové (e) chyby. Existuje jistá optimální hodnota Δt, při které je celková chyba nejmenší. Při určování kroku, s jakým bude výpočet probíhat se snažíme této hodnotě co nejvíce přiblížit.



Obrázek 7: Průběh aproximační (e1), zaokrouhlovací (e2) a celkové (e) chyby

5 Ověření funkčnosti modelu

Po sestavení matematického modelu je potřeba ověřit jeho funkčnost, tj. ověřit, jestli daný model vystihuje reálné chování systému, jestli jsme do modelu zahrnuli všechny relevantní veličiny ovlivňující chování systému atd. Dále je potřeba provést vhodné nastavení výpočetních konstant tak, aby se výstup modelu co nejvíce přiblížil výstupu reálného systému.

5.1 Optimalizace parametrů

Jestliže budeme vycházet z předem známé nebo předpokládané struktury matematického modelu, potom musíme nalézt takové hodnoty parametrů počítačového modelu, aby shoda reálného systému a počítačového modelu byla maximální. Taková úloha se označuje jako *optimalizace parametrů* dynamického systému. Předpokládejme, že stejný vstupní signál působí na vstup reálného systému a také na vstup počítačového modelu. Výstupní hodnoty, které budou změřeny na raálném systému označíme y_{exp}. Tyto hodnoty se se díky určitým chybám neshodují s výsledky počítačového modelu y_{model}. Na základě určení těchto veličin je nutno vypočítat, jak se liší chování reálného systému od chování počítačového modelu. Definujme veličinu e, která bude představovat odchylku mezi modelem a reálným procesem.

$$e_i = y_{exp}\left(t_i\right) - y_{model}\left(t_i\right),\ i = 1, ..., n \tag{5.1}$$

Na základě odchylek e_i je nutno matematický model upravit tak, aby se jeho výstupy co nejvíce shodovaly s výstupy reálného fyzikálního systému. Odchylku mezi modelem a reálným systémem definujeme pomocí tzv. *kriteriální funkce* $S\left(y_{exp}, y_{model}\right)$, která musí mít takovou vlastnost, že pro nejlepší matematický model má minimální hodnotu. V praxi se nejčastěji používá *kritérium střední kvadratické odchylky*, které je definované následujícím vztahem:

$$S\left(y_{exp}, y_{model}\right) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_{exp} - y_{model}\right)^2 \tag{5.2}$$

Cílem je najít takové hodnoty parametrů modelu, při kterých kriteriální funkce dosahuje co nejmenších hodnot.

5.2 Validace modelu

Nelze považovat za dostatečné, je-li matematický model pouze verifikován, tj. nalezeny takové hodnoty konstant, při kterých se jeho chování shoduje s chováním reálného systému, na kterém ověřujeme jeho funkčnost. Téměř každý složitý matematický model dovoluje nalézt takové kombinace parametrů, které umožňují dobrou shodu s určitým experimentem. Tato shoda však zdaleka nezaručuje matematickému modelu schopnost předpovídat skutečnost i za jiných podmínek. Proto musíme s matematickým modelem provádět tzv. *validaci*. Validace je testování, zda se matematický model chová za různých vstupních podmínek podobně jako reálný systém. Můžeme rozlišovat dva způsoby validace:

1. Výsledky získané ze simulačních experimentů se porovnávají s experimentálními daty, které jsme získali pozorováním reálného systému za určité období v minulosti a za podmínek, které byly použité při simulačních experimentech. Data, která používáme k validaci, však nesmí být použita stavbě a optimalizaci matematického modelu.

2. Na základě výsledků simulace se předpovídá chování reálného systému v budoucnosti. Tyto výsledky se porovnávají s údaji, které se získávají z následného pozorování reálného systému za určité období.

6 Seznam použité literatury

[1] Pazourek J.: Simulace biologických systémů, Praha, Grada 1992

[2] Zítek P.,Petrová R.: Matematické a Simulační modely, Praha Vydavatelství ČVUT 1996 (skriptum)