Problemlösning

Anastasia Kruchinina

Uppsala Universitet

Januari 2016

Exempel

ode45 parametrar

Miniprojekt 1

Rapport

Exempel 1

Använda explicit (framåt) och implicit (bakåt) Euler metoder för att lösa

$$y'(x) = 1000(\sin(x) - y(x)).$$

Exempel 1

Använda explicit (framåt) och implicit (bakåt) Euler metoder för att lösa

$$y'(x) = 1000(\sin(x) - y(x)).$$

Kolla mappen *stiff_problem1* med implementationen av problemet i Matlab.

ode45 - sätta parametrar

En möjlighet är att använda *globala* variabler som det görs i labben.

En annan möjlighet är anonyma funktioner (se exemplet)

```
a=1; b=1; c=1; %set parameters
[t,y]=ode45(@(x, y)ode(x, y, a, b, c),[0 20],[2 0]);
```

Runge–Kutta i Matlab

Styva problem har stora förändringar i lösningen under en kort tidsperiod, därför måste vi ta ett extremt litet tidssteg för att få en god approximation av den exakta lösningen.

Explicita metoder används för icke-styva problem.
Implicita metoder används för styva problem.

Vi kommer att undersöka två olika Matlab metoder för att lösa ODE:
`ode45` - icke-styva problem
`ode15s` - styva problem.

Skriv `help ode45` eller `help ode15s` i Matlab för att hitta mer information.

Runge–Kutta i Matlab - oscillator

Titta på exemplet i mappen `stiff_problem2_oscillator`. Här har vi ett styvt problem. Vi kommer att se att `ode45` är mycket långsammare än `ode15s`.

Uppgiften är att lösa den andra ordningens ode:

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \mu(1 - x^2)\frac{dx}{dt} - x$$

Skriv om denna ode som ett system av två första ordningens ode

Runge–Kutta i Matlab - oscillator

Titta på exemplet i mappen `stiff_problem2_oscillator`. Här har vi ett styvt problem. Vi kommer att se att `ode45` är mycket långsammare än `ode15s`.

Uppgiften är att lösa den andra ordningens ode:

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \mu(1 - x^2)\frac{dx}{dt} - x$$

Skriv om denna ode som ett system av två första ordningens ode

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= v \\ \frac{dv}{dt} &= \mu(1 - x^2)v - x \end{aligned}$$

Runge–Kutta i Matlab - oscillator

Köra `run(`μ`)` med

- $\mu = 0.1$
- $\mu = 1$
- $\mu = 10$
- $\mu = 100$
- $\mu = 1000$

Runge–Kutta i Matlab - oscillator

Köra `run(`μ`)` med

- $\mu = 0.1$
- $\mu = 1$
- $\mu = 10$
- $\mu = 100$
- $\mu = 1000$

Parametern μ bestämmer hur styvt problemet är.
Problemet är styvt för $\mu > 100$.

Jämför antalet tidsteg och exekveringstiden för både `ode45` och `ode15s`.

Runge–Kutta in Matlab - oscillator

För styva system behöver `ode15s` ett mycket mindre antal tidsteg, och exekveringstiden är några gånger mindre.

En ökande av parametern μ resulterar i ökande av skillnaden mellan koefficienterna i ode. Den skillnaden bestämmer ofta hur mycket styvt problemet är.

Simulera en genuttryck

Reaktions nätverk:

- transkription: $0 \xrightarrow{kR} \text{mRNA}$
- translation : $\text{mRNA} \xrightarrow{kP*mRNA} \text{mRNA} + \text{protein}$
- mRNA nedbrytning: $\text{mRNA} \xrightarrow{gR*mRNA} 0$
- protein nedbrytning: $\text{protein} \xrightarrow{gP*protein} 0$

ODE

$$\frac{dM(t)}{dt} = k_R - g_R M(t),$$
$$\frac{dR(t)}{dt} = -g_P P(t) + k_P M(t), \quad t > 0$$

Begynnelsevärden ($t = 0$): $M(0) = 0, R(0) = 0$.

Notera: reaktionshastighet, koncentration av molekyler

Kolla mappen *problem_genuttryck* med implementationen av problemet i Matlab.

Miniprojekt: Genetisk oscillator

Simulera en inre tidkontroll mekanism av en levande organism.

System med 2 gener.
Ändring av transkriptions hastigheter.

Modeller och metoder

En **matematisk modell** är en beskrivning av den verkliga världen med hjälp av det matematiska språket.
Exempel: deterministisk (ODE) och stokastisk modell (Markov-kedjan), statiska och dynamiska modeller, diskreta och kontinuerliga modeller, linjära och icke-linjära modeller.

Med hjälp av **numeriska metoder** kan vi få en approximativ lösning av det ursprungliga problemet.
Exempel: Euler bakåt, Runge-Kutta (Miniprojekt 1), Gillespie algoritm (Miniprojekt 2)

Deterministisk och stochastic model

Deterministisk modell - reaktionshastighet-ekvationer (system av ODE)
Dess beteende är helt förutbestämt utgående från angivna startvärden och parametrar.
Tillståndet hos ett system definieras av *koncentrationen av molekyler*.

Stokastisk model - tidskontinuerlig Markovprocess
Det är en modell som innehåller några slumpelement. Dess beteende är inte förutbestämt utgående från angivna startvärden och parametrar.
Tillståndet hos ett system definieras av *antalet molekyler*.

Hur skriver man en rapport?

Försök använda LaTeX
- det finns många tutorials och hjälp på internet

Hur infogar man MATLAB kod i ett LaTeX-dokument:
`http://www.howtotex.com/tips-tricks/how-to-include-matlab-code-in-latex-documents/`

Skicka rapporter som **pdf** !

Hur skriver man en rapport?

Krav: bra Matlab bilder!

Möjliga delar:
(Abstract / Sammanfattning)
Introduktion
Metoder
Resultater/Numeriska experiment
Slutsatser
Referenser
(Appendix) - t.ex. koden

`http://www.reading.ac.uk/internal/studyadvice/StudyResources/Essays/sta-featuresreports.aspx`.

Lycka till!