VYSOKÁ ŠKOLA
CHEMICKO-TECHNOLOGICKÁ V PRAZE
Ústav matematiky

Představení ústavu matematiky
Nabídky spolupráce

30. 01. 2017

Cíle setkání

- Navázání vědecké spolupráce
- Spoluúčast při zadávání bakalářských a diplomových prací jako vedoucí či jako konzultant
- Spolupráce školitele specialisty v doktorském studiu
- Konzultační činnost

Představované obory:

1. Dynamické systémy
2. Numerická matematika
3. Diskrétní matematika
4. Pravděpodobnost a stochastická analýza
5. Matematický software

Dynamické systémy

Dynamické systémy

Šimon Axmann, Miroslava Dubcová, Drahoslava Janovská,
Milan Kubíček, Jana Němcová, Pavel Pokorný, Leszek Szala

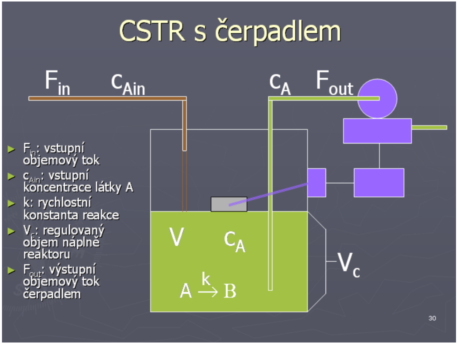
- Matematické modelování chemických a fyzikálních procesů
  - reakčně-difúzní systémy (**DJ**, **MK**)
  - mechanika a termodynamika tekutin (**ŠA**)
- Matematická analýza dynamických systémů
  - spojité dynam. systémy
    - obyčejné diferenciální rovnice (**MK**, **MD**, **DJ**, **JN**)
    - parciální diferenciální rovnice (**ŠA**, **DJ**)
  - diferenční rovnice s náhodnými perturbacemi (**LS**)
  - dynam. systémy s nespojitým vektorovým polem, algebro-diferenciální rovnice (**DJ**)
- Deterministický chaos (**PP**)
- Matematická teorie řízení (**JN**) a teorie optimalizace (**MK**)

Matematická analýza dynamických systémů

- Existence a vlastnosti řešení
  - existence a stabilita stacionárních stavů
  - existence časově periodických řešení — př.: Bělousov–Žabotinský
  - chaotické chování, deterministický chaos
  - regularita řešení, asymptotické chování
- Rekonstrukce dynamiky z časových řad (**MD**)
  - Takensova metoda vnoření
  - ze znalosti jedné stavové veličiny určit dimenzi stavového prostoru a kvalitativní chování ostatních stavových proměnných
- Transformační metody řešení PDR
  - Laplaceova transformace (**MD**)
  - Fourierova transformace (**PP**)
- Návrh vhodné numerické metody — viz též **numerika**

Příklad: Chemický reaktor s čerpadlem

Výška hladiny (objem) je regulována pomocí čerpadla a snímače výšky hladiny.



Tomáš Hanus: Bifurkační analýza autonomních soustav obyčejných diferenciálních rovnic s nespojitými pravými stranami. Disertační práce. VŠCHT Praha, 2012.

Pro $V > V_c$:

$$\frac{dV}{dt} = F_{in} - F_{out}$$

$$\frac{dc_A}{dt} = \frac{F_{in}(c_{A_{in}} - c_A)}{V} - kc_A$$

Pro $V < V_c$:

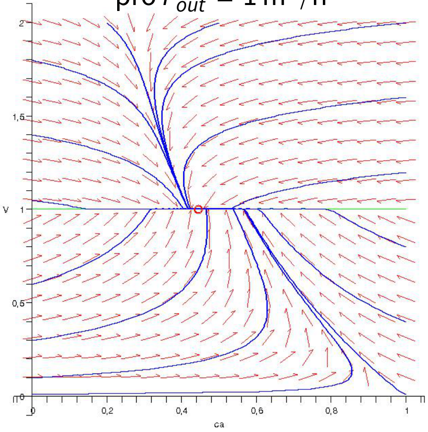
$$\frac{dV}{dt} = F_{in}$$

$$\frac{dc_A}{dt} = \frac{F_{in}(c_{A_{in}} - c_A)}{V} - kc_A$$

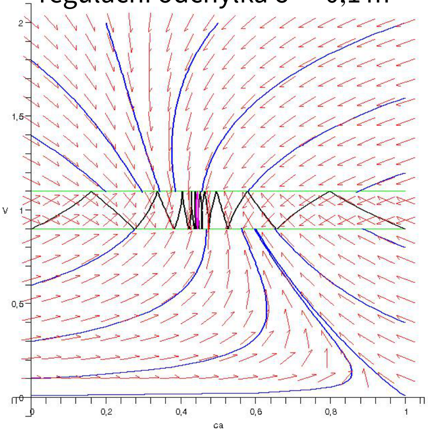
$$h(V, c_A) = V - V_c$$

- Pohyblivý parametr: Tok čerpadlem $F_{out} \in \langle 0{,}82, \infty)\ \mathrm{m}^3/\mathrm{h}$
- Rovnovážný stav $\circ$ je v oblasti $V > V_c \implies$ hladina se ustaluje na regulované úrovni.

Fázový portrét
pro $F_{out} = 1\,\mathrm{m}^3/\mathrm{h}$



Spínací hystereze,
regulační odchylka $\delta = 0{,}1\,\mathrm{m}^3$



Matematická teorie řízení

- Vlastnosti řídících systémů
  - pozorovatelnost
  - řiditelnost
  - stabilita
  - ...
- Stavová reprezentace zobrazení vstup–výstup
- Redukce systému
- Identifikace systému — určení mat. modelu z naměřených dat
- Návrh pozorovatelů systému

Dynamické systémy

Numerická matematika

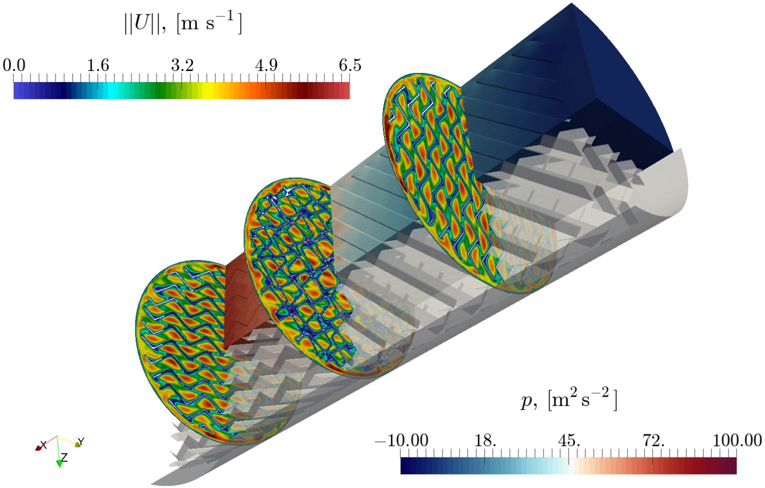
Numerická matematika

Miroslava Dubcová, Martin Isoz, Drahoslava Janovská,
Milan Kubíček, Carmen Simerská

- Řešení rovnic (algebraických, diferenciálních)
- Redukce řádu modelů
- Kvaterniony

Numerická matematika I — řešení rovnic

- Numerické metody řešení algebraických rovnic, obyčejných diferenciálních rovnic a parciálních diferenciálních rovnic.
  - metoda konečných prvků pro řešení PDR.
  - metoda konečných objemů pro řešení PDR (OpenFOAM) (**MI**)
- Odhad parametrů v ODR a PDR z experimentálních dat

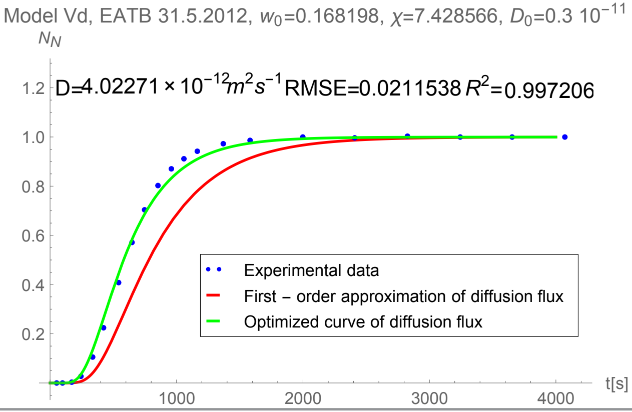


Tlakové rychlostní pole při proudění plynu v koloně se strukturovanou výplní — spočítáno pomocí OpenFOAM

Odhad parametrů v DR z experimentálních dat

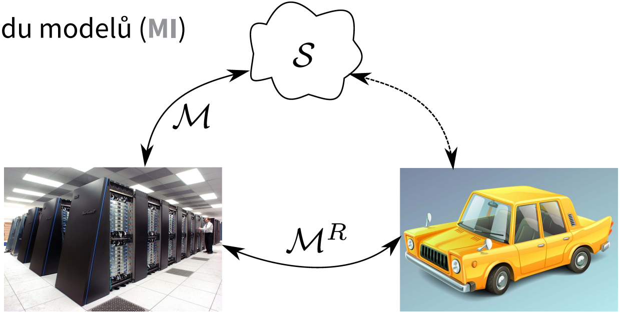
$$\frac{\partial w}{\partial t} = (1-w)\frac{\partial}{\partial x}\left(Dw\frac{\partial \ln a}{\partial w}\frac{\partial w}{\partial x}\right), \quad \text{kde} \quad \frac{\partial \ln a}{\partial w} = \frac{(1-w)}{w}(1+\chi w)$$

$$w(0,t) = w_0, \quad w(l,t) = 0, \quad w(x,0) = 0, \quad \text{pro} \quad x \in \langle 0, l\rangle, \quad t > 0$$



Numerická matematika II — redukce řádu modelů

- Metody redukce řádu modelů (**MI**)



Numerická matematika III — kvaterniony

- Numerická lineární algebra pro kvaterniony (**DJ**)
- Modelování spinů v kvantové fyzice a chemii při změnách symetrie
  - zvýšení numerické přesnosti
  - efektivnější uložení dat
  - vyšší výpočtová náročnost
- Reprezentace rotace v $\mathbb{R}^3$ pomocí kvaternionů
  - počítačové hry
  - kontrola pozice rakety — „Robust control of the missile attitude based on quaternion feedback“

Numerická matematika

Diskrétní matematika

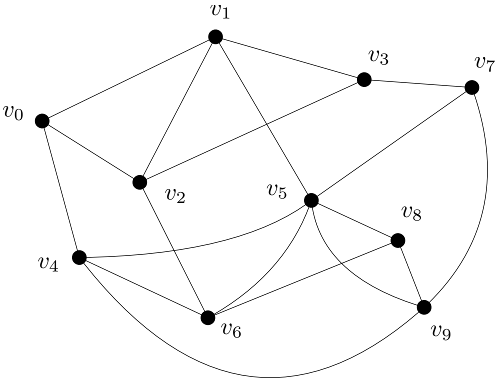
Diskrétní matematika

Lenka Háková, **Tomáš Hejda**, **Eva Jelínková**,
Jana Maxová, **Daniel Turzík**

- Teorie grafů, grafové algoritmy (**EJ**, **JM**, **DT**)
- Grupy reflexí a jejich aplikace (**LH**)
- Kombinatorika (**TH**, **EJ**)

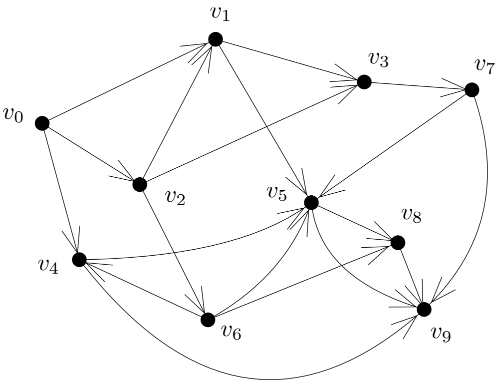
Grafy

(neorientovaný) graf



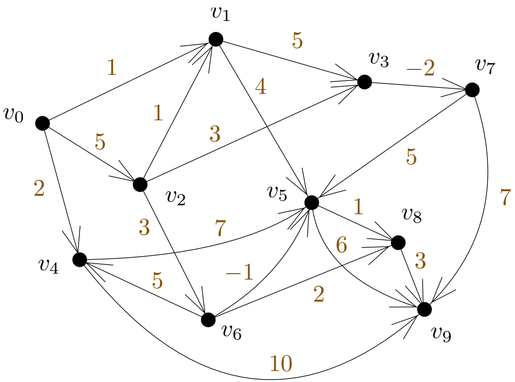
Grafy

orientovaný graf



Grafy

orientovaný ohodnocený graf



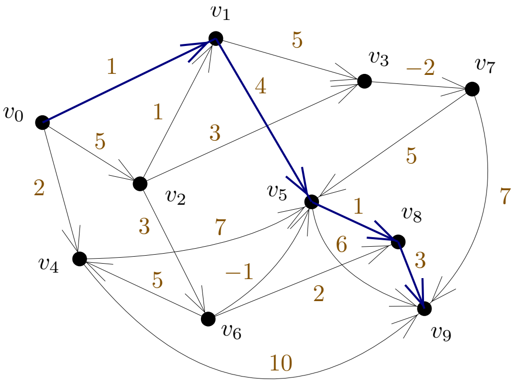
Co lze modelovat pomocí grafů

Grafy modelují například:

- Různé dopravní úlohy (nejkratší cesty apod.)
- Toky v sítích (voda, elektřina, automobily, počítačové sítě)
- Základní struktura molekul
- Vztahy mezi objekty
- Přechody mezi jednotlivými stavy systému (teorie her)

Hledání nejkratší cesty

- Hledáme nejkratší cestu z v_0 do v_9
- Lze efektivně (v polynomiálním čase)
  - dynamické programování, Dijkstrův alg. (pro váhy ≥ 0)
  - Bellmanův-Fordův alg. (pro obecné váhy)



Časová složitost algoritmů

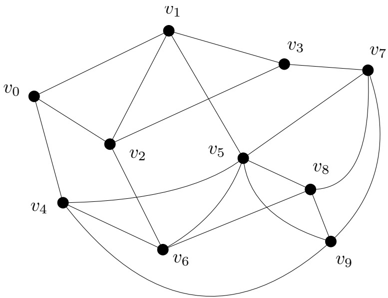
- n — velikost vstupu (např. počet vrcholů)
- údaje pro běžný počítač — 10^9 operací za 1 s

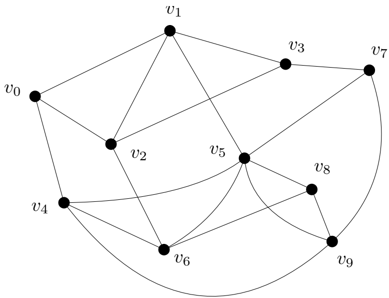
# kroků	$n = 10$	$n = 100$	$n = 1\,000$	$n = 1\,000\,000$
n	10 ns	100 ns	1 µs	1 ms
$n \log n$	33 ns	664 ns	9.9 µs	20 ms
n^2	100 ns	10 µs	1 ms	16.5 min
n^3	1 µs	1 ms	1 s	31 let
2^n	1 µs	$3 \cdot 10^{14}$ let	$3 \cdot 10^{286}$ let	$\approx \infty$
$n!$	3 ms	$3 \cdot 10^{142}$ let	$\approx \infty$	$\approx \infty$

Důsledek:
Vyzkoušení všech možností není možné už pro relativně malé grafy.

Průchod grafem — dvě úlohy

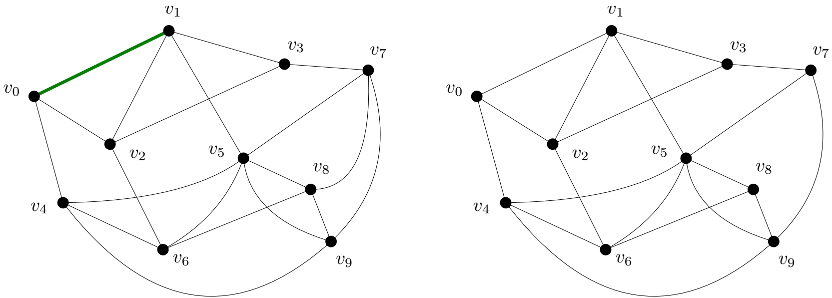
1. Kreslení grafu jedním tahem
   - hledáme tah v grafu, který projde každou **hranou** právě 1×
   - lze efektivně (v polynomiálním čase)
2. Hamiltonovská kružnice
   - hledáme (uzavřený) tah, který projde každým **vrcholem** právě 1×
   - pravděpodobně vyžaduje exponenciální čas





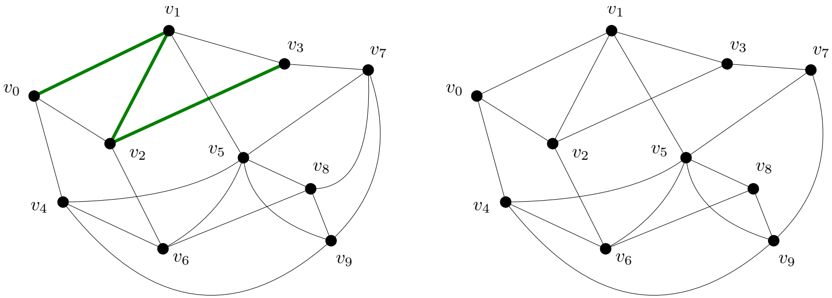
Průchod grafem — dvě úlohy

1. Kreslení grafu jedním tahem
   - hledáme tah v grafu, který projde každou **hranou** právě 1×
   - lze efektivně (v polynomiálním čase)
2. Hamiltonovská kružnice
   - hledáme (uzavřený) tah, který projde každým **vrcholem** právě 1×
   - pravděpodobně vyžaduje exponenciální čas



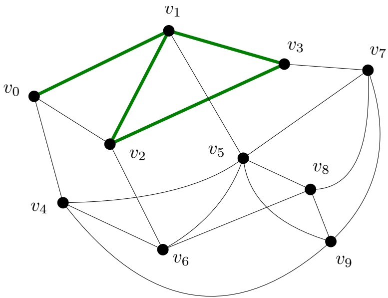
Průchod grafem — dvě úlohy

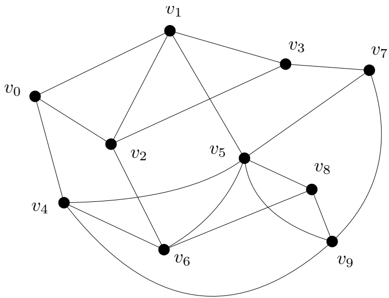
1. Kreslení grafu jedním tahem
   - hledáme tah v grafu, který projde každou **hranou** právě 1×
   - lze efektivně (v polynomiálním čase)
2. Hamiltonovská kružnice
   - hledáme (uzavřený) tah, který projde každým **vrcholem** právě 1×
   - pravděpodobně vyžaduje exponenciální čas



Průchod grafem — dvě úlohy

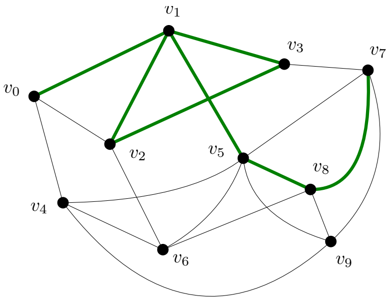
1. Kreslení grafu jedním tahem
   - hledáme tah v grafu, který projde každou **hranou** právě 1×
   - lze efektivně (v polynomiálním čase)
2. Hamiltonovská kružnice
   - hledáme (uzavřený) tah, který projde každým **vrcholem** právě 1×
   - pravděpodobně vyžaduje exponenciální čas

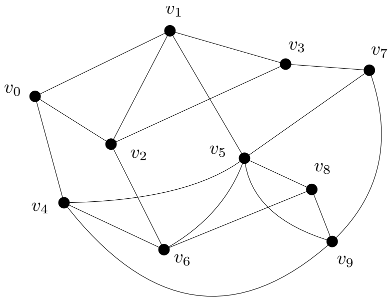




Průchod grafem — dvě úlohy

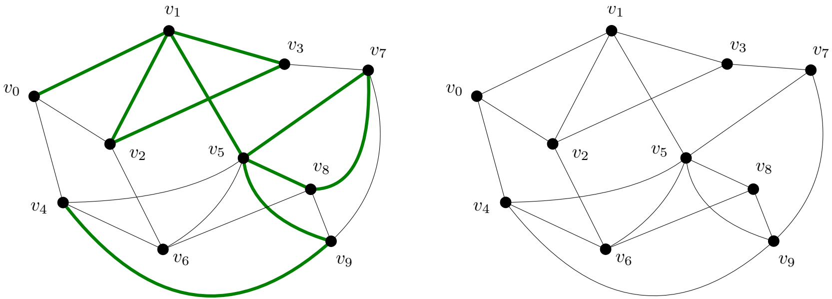
1. Kreslení grafu jedním tahem
   - hledáme tah v grafu, který projde každou **hranou** právě 1×
   - lze efektivně (v polynomiálním čase)
2. Hamiltonovská kružnice
   - hledáme (uzavřený) tah, který projde každým **vrcholem** právě 1×
   - pravděpodobně vyžaduje exponenciální čas





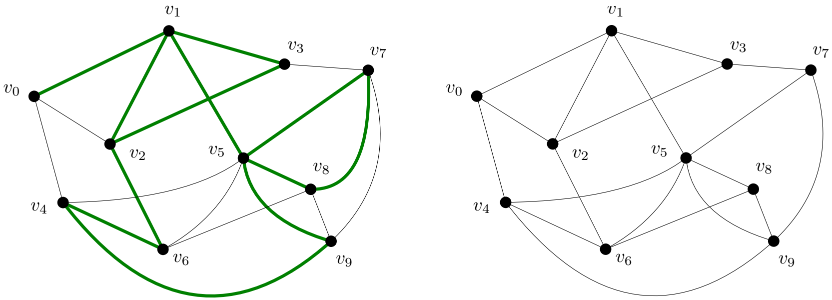
Průchod grafem — dvě úlohy

1. Kreslení grafu jedním tahem
   - hledáme tah v grafu, který projde každou **hranou** právě 1×
   - lze efektivně (v polynomiálním čase)
2. Hamiltonovská kružnice
   - hledáme (uzavřený) tah, který projde každým **vrcholem** právě 1×
   - pravděpodobně vyžaduje exponenciální čas



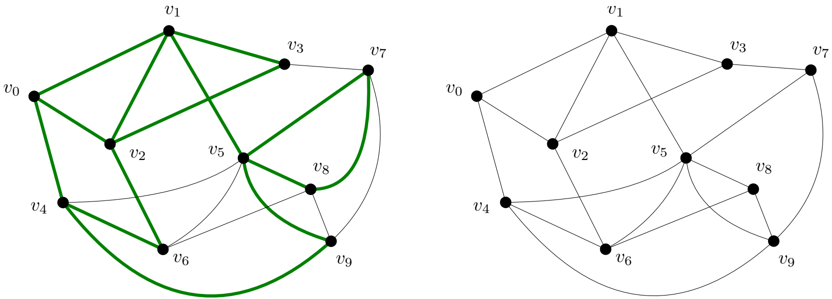
Průchod grafem — dvě úlohy

1. Kreslení grafu jedním tahem
   - hledáme tah v grafu, který projde každou **hranou** právě 1×
   - lze efektivně (v polynomiálním čase)
2. Hamiltonovská kružnice
   - hledáme (uzavřený) tah, který projde každým **vrcholem** právě 1×
   - pravděpodobně vyžaduje exponenciální čas



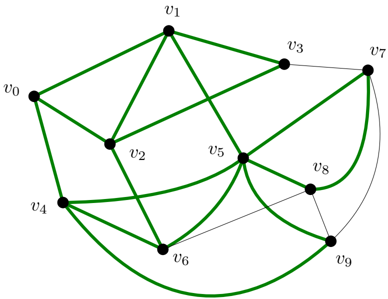
Průchod grafem — dvě úlohy

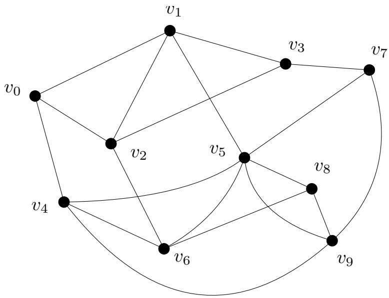
1. Kreslení grafu jedním tahem
   - hledáme tah v grafu, který projde každou **hranou** právě 1×
   - lze efektivně (v polynomiálním čase)
2. Hamiltonovská kružnice
   - hledáme (uzavřený) tah, který projde každým **vrcholem** právě 1×
   - pravděpodobně vyžaduje exponenciální čas



Průchod grafem — dvě úlohy

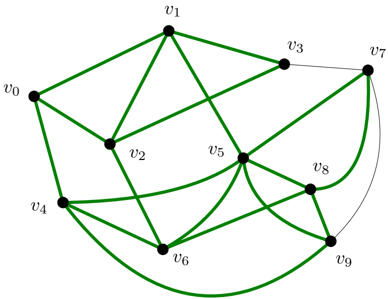
1. Kreslení grafu jedním tahem
   - hledáme tah v grafu, který projde každou **hranou** právě 1×
   - lze efektivně (v polynomiálním čase)
2. Hamiltonovská kružnice
   - hledáme (uzavřený) tah, který projde každým **vrcholem** právě 1×
   - pravděpodobně vyžaduje exponenciální čas

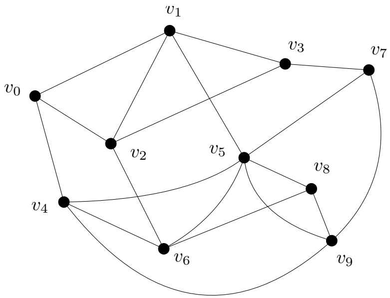




Průchod grafem — dvě úlohy

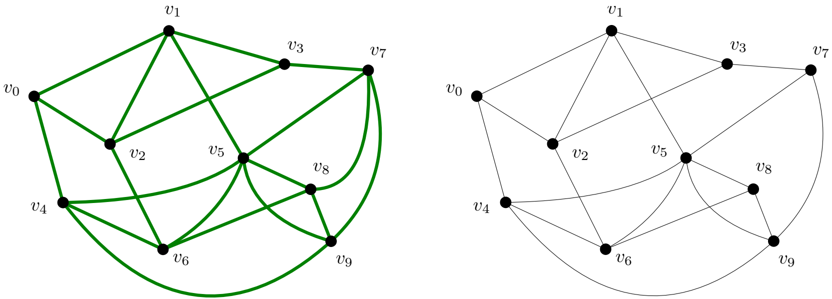
1. Kreslení grafu jedním tahem
   - hledáme tah v grafu, který projde každou **hranou** právě 1×
   - lze efektivně (v polynomiálním čase)
2. Hamiltonovská kružnice
   - hledáme (uzavřený) tah, který projde každým **vrcholem** právě 1×
   - pravděpodobně vyžaduje exponenciální čas





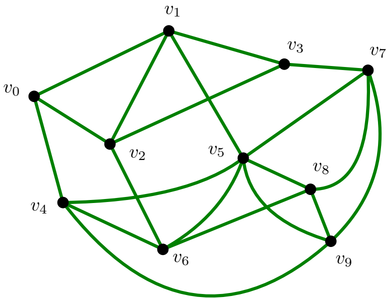
Průchod grafem — dvě úlohy

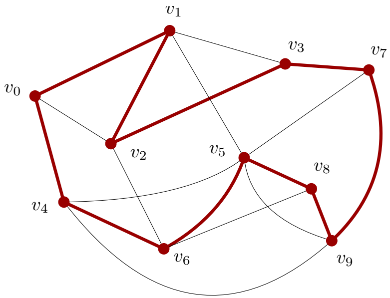
1. Kreslení grafu jedním tahem
   - hledáme tah v grafu, který projde každou **hranou** právě 1×
   - lze efektivně (v polynomiálním čase)
2. Hamiltonovská kružnice
   - hledáme (uzavřený) tah, který projde každým **vrcholem** právě 1×
   - pravděpodobně vyžaduje exponenciální čas



Průchod grafem — dvě úlohy

1. Kreslení grafu jedním tahem
   - hledáme tah v grafu, který projde každou **hranou** právě 1×
   - lze efektivně (v polynomiálním čase)
2. Hamiltonovská kružnice
   - hledáme (uzavřený) tah, který projde každým **vrcholem** právě 1×
   - pravděpodobně vyžaduje exponenciální čas





Průchod grafem — optimalizace

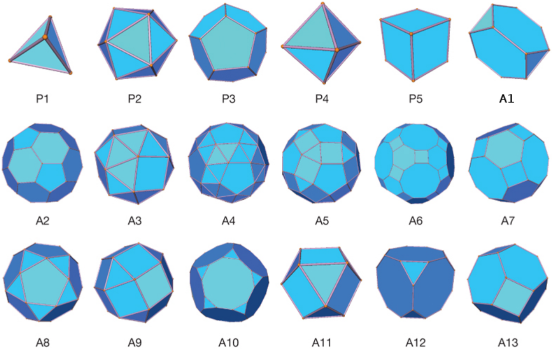
1. Problém čínského pošťáka
   - nejkratší tah, který projde každou **hranou** alespoň 1×
   - lze efektivně (v polynomiálním čase)
2. Problém obchodního cestujícího
   - nejkratší tah, který projde každým **vrcholem** alespoň 1×
   - pravděpodobně vyžaduje exponenciální čas

Další příklady studovaných úloh

- Souvislost grafu
- Rovinnost grafů (bez křížení hran) → navrhování čipů
- Hledání párování v grafu → přiřazování úkolů
- Různé varianty obarvení vrcholů/hran → rozvrhování
- Hledání největšího úplného podgrafu
- Hledání největší nezávislé množiny
- Minimální řez v grafu
- Maximální tok v grafu
- …

Grupy reflexí (LH)

- Množina zobrazení s operací skládání splňující určité podmínky — „axiomy“
- Symetrie pravidelných nebo semipravidelných polytopů
- Trojdimenzionální případ — platónská a archimédovská tělesa a jejich zobecnění



Speciální funkce definované na grupách reflexí

- „Orbit functions“
- Ortogonální baze funkčních prostorů (spojitých nebo diskrétních)
- Zachovávají symetrie definujících grup
- Aplikace:
  - zobecněné fourierovské transformace
  - cubature formulas

Diskrétní matematika

Pravděpodobnost a stochastická analýza

Pravděpodobnost a stochastická analýza

PAVEL KŘÍŽ, JANA ŠNUPÁRKOVÁ, MARKÉTA ZIKMUNDOVÁ

- Stochastické (parciální) diferenciální rovnice (**PK**, **JŠ**)
- Stochastická geometrie a prostorová statistika (**MZ**)
- Metadynamika (**PK**)

Stochastické diferenciální rovnice

- *„Diferenciální rovnice s náhodným šumem"*
- Základní motivace: modelování Brownova pohybu
- Ukázkový model: Langevinova rovnice:

$$\dot{x}(t) = f\big(x(t)\big) + dW(t)$$

  - umožňuje modelovat difuzi na úrovni částic
  - PDE popisující vývoj hustoty pravděpodobnosti — Fokker-Planckova rovnice:

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\big(p(x,t)f(x)\big) + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\frac{1}{2}p(x,t)\right)$$

  - šum má kumulativní charakter, nejde o náhodnou chybu
- Další užití v chemii: Chemická Langevinova rovnice
  - popisuje průběh koncentrací během chemické reakce, kde počty reagujících molekul podléhají náhodnému šumu

Stochastické parciální diferenciální rovnice

- *„Parciální diferenciální rovnice s náhodným šumem“*
- Ukázkový model: Rovnice vedení tepla:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + dW(x,t)$$

  - šum může mít různou podobu: na celém prostoru, jen na hranici, barevný v čase či v prostoru atp.
  - šum má kumulativní charakter, nejde o náhodnou chybu
- Užití v chemii:
  - stochastická rovnice reakce–difuze
  - stochastický Navier–Stokes
- Studované aspekty:
  - existence a konstrukce řešení (tzv. mild solution)
  - vlastnosti řešení (hladkost, asymptotika, …)
  - odhady parametrů

Stochastická geometrie a prostorová statistika

- *„Náhodné geometrické objekty náhodně umístěné v prostoru“*
- Integrální geometrie

Stochastická geometrie a prostorová statistika

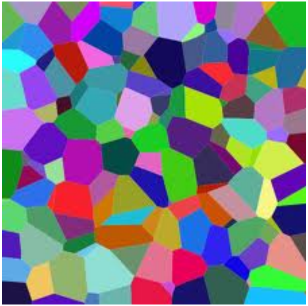
- *„Náhodné geometrické objekty náhodně umístěné v prostoru"*
- Integrální geometrie
- Prostorová statistika, prostorové modelování
- Stereologie

Stochastická geometrie a prostorová statistika

- *„Náhodné geometrické objekty náhodně umístěné v prostoru“*
- Integrální geometrie
- Prostorová statistika, prostorové modelování
- Stereologie

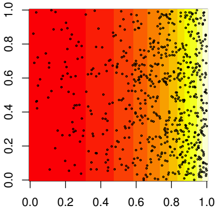
Využití:

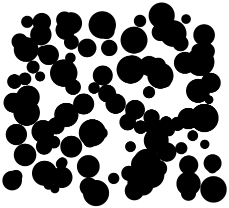
- analýza obrazu
- materiálový výzkum
- geostatistika

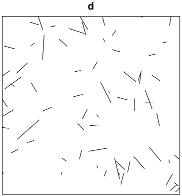


Bodový proces

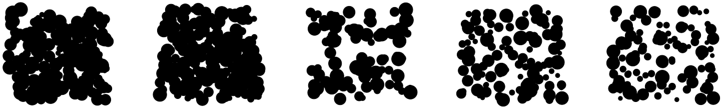
Příklady bodových procesů



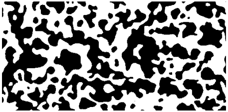
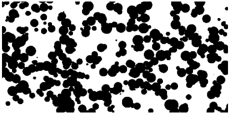
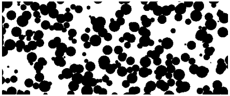
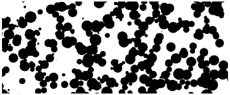
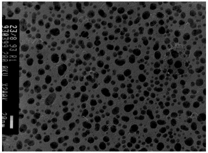
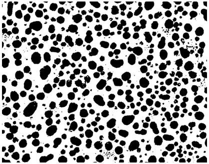
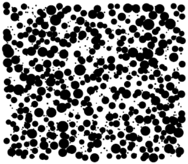




Časoprostorový vývoj



Reálná data

Metadynamika

- *„Zkoumání volné energie pomocí simulace — zaplňování energetických minim“*
- Ilustrace na jednorozměrném problému
  - Problém: překonání energetických bariér.
  - Idea: Přidání umělého potenciálu do aktuální pozice
  - Výpočet končí, je-li energetický profil plochý (všechny stavy stejně pravděpodobné)
  - Neznámý energetický profil je negativním obrazem přidaného umělého potenciálu
- Urychlování simulací komplikovaných molekulárních systémů
- Spolupráce s týmem doc. Spiwoka (ústav biochemie a mikrobiologie FPBT)
- Řešíme různé modifikace metody a její konvergenci

Pravděpodobnost a stochastická analýza

Matematický software

Použití matematického softwaru

MIROSLAVA DUBCOVÁ, LENKA HÁKOVÁ, TOMÁŠ HEJDA, MARTIN ISOZ,
PAVEL POKORNÝ, JANA NĚMCOVÁ, CARMEN SIMERSKÁ

- Mathematica, Maple (**MD**, **LH**, **PP**, **CS**) — počítačové algebraické systémy
- Matlab (**JN**) — matice, zpracování obrazu
- SageMath (**TH**) — diskrétní matematika
- OpenFOAM (**MI**) — metoda konečných objemů

Cíle setkání

- Navázání vědecké spolupráce
- Spoluúčast při zadávání bakalářských a diplomových prací jako vedoucí či jako konzultant
- Spolupráce školitele specialisty v doktorském studiu
- Konzultační činnost

Představované obory:

1. Dynamické systémy
2. Numerická matematika
3. Diskrétní matematika
4. Pravděpodobnost a stochastická analýza
5. Matematický software