

Számítógéppel segített matematikai modellezés

kollégium

A tantárgy neve: Számítógéppel segített matematikai modellezés alapjai

Meghirdetés köre: SZTE

Heti óraszám: 2 (számítógépes laborban)

Kredit értéke: 2

Számonkérési forma: Kollokvium

Előtanulmányi feltételek: Kalkulus, Matematika biológusok,... számára

Tantárgyfelelős: Dr. Karsai János egyetemi docens

A tantárgy elméleti és gyakorlati időpontja, helye:

Később meghatározandó időpont, az SZTE Orvosi Informatikai Intézet egyik számítógépes oktatóterme

Átlagos (tervezett) hallgatói létszám: max 15 fő

Időterv, összóraszám:

A tantárgy tervezett hossza 1 félév, összóraszám: 30 óra (heti 2 óra) számítógépes előadás és gyakorlat. *A mélyebb igények kielégítésére a kurzus folytatódik egyéni kurzusok formájában a hallgató speciális érdeklődésének megfelelően.*

A tantárgy célkitűzései:

A hallgatók megismertetése a későbbi kutatómunka során alkalmazásra kerülő matematikai modellezési alapfogalmakkal, módszerekkel és a módszerek számítógépes megvalósításával. A hallgatók megismerkednek a legfontosabb modellekkel és használják a vizsgálatukra készült mintaalkalmazásokat. A kurzus végére a hallgatók képesek a tanultakat más szaktárgyak keretében, ill. saját kutatásaikban alkalmazni.

Előképzettségi szint, feltételezett tudásanyag:

A tantárgy hatékony elsajátításának feltétele, hogy a hallgató ismeri a Kalkulus I-II ill. az élettudományi szakokon tartott 1-2 féléves matematika tantárgy anyagát. A használt matematikai apparátus és a tekintett modellek legfontosabb tulajdonságait a kurzus során tárgyaljuk.

Feltételezett ismeretanyag: Halmazok és műveleteik; függvények, elemi függvények és tulajdonságaik, derivált és tulajdonságai, függvényközelítések, az integrálszámítás elemei, többváltozós függvények, a görbeillesztés alapjai, a differenciálegyenletek alapfogalmai.

Windows használat és szövegszerkesztési gyakorlat

Évközi ellenőrzés módjai:

A hallgatóknak a gyakorlatok során és házi feladatként önálló modellezési problémákat kell megoldani.

Vizsga:

A végső osztályzatot az önálló feladatokra kapott jegyek és a kurzus végén elkészített záróprojektre adott jegy, vagy elméleti vizsga jegye alkotják.

A vizsga tartalma: elméleti kérdés a kurzus anyagából, számítógépes vizsgálattal alátámasztva.

A tantárgy tartalma, tematikája:

Az oktatás módszere:

A matematikai modellezés elméleti alapjait számítógéppel illusztrálva oktatjuk. Egy adott témakör ismertetése után, a hallgatók a tanultakat azonnal számítógépen kipróbálják, önálló kísérleteket folytatnak. Minden témakörhöz kész oktatóanyagok állnak rendelkezésre. Támogatjuk a hallgatók által "hozott" problémák vizsgálatát is.

A kurzust a technikai eszközök, programok használatának megtanulásával, a Matematika számítógéppel kurzuson tanultak ismétlésével kezdjük. A lehetőségeknek megfelelően a Mathematica programozásával mélyebben is foglalkozunk.

Gondot okozhat a hallgatók ismereteinek, szakmájának inhomogenitása. Ezt megfelelő csoportosítással ill. ezen túlmenően szintrehozással korrigáljuk.

Az oktatás 8-12 fős csoportokban történik, ezzel is lehetőséget adunk a hallgatóknak a tanultak alapos gyakorlására.

Az alkalmazott eszközök

Wolfram Research: Mathematica, NAG: IRIS Explorer.

Összefoglaló tematika:

Az alábbi tematika kiindulási alap. Szerkezete lényegében azonos a különböző szakok hallgatói számára. Az egyes alkalmazások illeszkednek a szakok speciális igényeihez. Mélyebb matematikai ismereteket igénylő modelleket és alkalmazásokat egy második lépcsőben tárgyalunk.

0. *A szükséges a matematikai háttér ismertetése minden egyes témakör esetén.*

1. *A Mathematica rendszer használata:* numerikus és szimbolikus számítások, változók és függvények használata; egy és többváltozós függvények ábrázolásai; derivált, integrál, egyenletmegoldás.

2. *A matematikai modellezés legfontosabb lépései és számítógépes megvalósításai:* mérési adatok és ábrázolása, adat-transzformációk, görbeillesztések, zéróhelyek keresése stb.; differenciaegyenletek felállítása és vizsgálata; iránymező, az egyenletek formális és numerikus megoldása; a modell és az adatok illesztése; differenciaegyenletek megoldása és tulajdonságai.

3. *Egyszerű modellek és vizsgálatuk, 1D és 2D lineáris és nemlineáris egyenletek, rendszerek:* populációs modellek, kémiai reakciók, pszichológiai modellek, rekeszrendszerek; mozgások gravitációs térben, biológiai, mechanikai és elektromos oszcillátorok, inga mozgása stb.

4. *Bonyolultabb problémák, differenciaegyenletekkel, impulzív rendszerekkel, késleltetett rendszerekkel, parciális differencialegyenletekkel leírható modellek számítógépes vizsgálata:* diszkrét populációk, ismételt gyógyszeradagolás, epidemiológiai modellek lappangási idővel; populációk térbeli és időbeli változása. Véletlen mozgások, rezgések impulzusokkal, hőterjedés, hullámterjedés.

Tematika heti bontásban:

1. előadás

A Mathematica használata, numerikus és formális műveletek, változók használata, helyettesítési szabályok, egyváltozós függvények definiálása, ábrázolása, egyenletek formális megoldása

2. előadás

Paraméteres görbék a síkon: ParametricPlot. Többváltozós függvények ábrázolása: Plot3D, ContourPlot, DensityPlot; paraméteres felületek: ParametricPlot3D és verziói. Listák, vektorok, tömbök kezelése. Elegáns ábrázolások, animáció készítése a Mathematica-val.

3. előadás

Differenciálás, integrálás Mathematicával; speciális tulajdonságú függvények keresése, matematikai kísérletezés.

Kísérleti adatok ábrázolása: ListPlot, ListPlot3D; görbeillesztés a legkisebb négyzetek módszerével: Fit.

4. előadás

Vektoranalízis Mathematicával. Térbeli görbék: érintő vektor, normális sík; felületek: érintősík, normálvektor. Skalár- és vektormező, gradiens, divergencia, rotáció.

5. előadás

A modellezés alaplépései és gyakorlati bemutatásuk az exponenciális szaporodás modelljén. A modell pontossága és érvényességének határai.

6. előadás

Szétválasztható változójú differenciálegyenletek. 1D differenciálegyenletek formális és numerikus megoldása a Mathematica rendszerrel, iránymező ábrázolása. Populációs modellek vizsgálata: logisztikus modellek lehalászással. A modell módosítása és a változás számítógépes elemzése.

7-9. előadás

Másodfokú differenciálegyenletek alkalmazásai, lineáris és nemlineáris rezgések vizsgálata, a Van der Pol egyenlet és alkalmazásai.

Síkbeli differenciálegyenletek alkalmazásai és számítógépes vizsgálata, lineáris rendszerek formális megoldása. Ragadozó-áldozat, kompartment modellek és viselkedésük tanulmányozása a Mathematica és az IRIS Explorer rendszerekkel.

Többdimenziós rendszerek: fizikai és populációdinamikai modellek, kémiai reakciók modelljei.

10. előadás

Modellek impulzusokkal. Ismételt gyógyszeradagolás egyszerű és bonyolultabb feltételek mellett, impulzív rezgések.

11. előadás

Differenciaegyenletekkel leírható modellek: diszkrét populációk, véletlen mozgások; differenciaegyenletek megoldása a Mathematica rendszerben.

12. előadás

Késleltetett argumentumú differenciálegyenletekkel leírható modellek számítógépes vizsgálata. Kísérletek a kezdőfüggvény és a késleltetés hatásának elemzésére

13. előadás

Térbeli és időbeli változások vizsgálata: populációk térbeli és időbeli terjedése, hővezetés és hullámterjedés

14. előadás

Zárófeladat megoldása, a tanultak rendszerezése.

Kurzus segédlet:

Karsai J.: *Computer-Aided Mathematical Modeling with Mathematica (CD-ROM)*

További javasolt irodalom:

Karsai J.: *Impulzív jelenségek modelljei, Mathematica kísérletek*, Typotex, 2002.

Karsai J.: *Mathematica gyógyszerészhallgatók számára, SZOTE jegyzet*, 1996.

Wolfram S.: *Mathematica, A System for Doing Mathematics by Computer*, Addison-Wesley Publishing Company, 1991.

Batchelet E.: *Introduction to Mathematics for Life Scientists*, 3rd edition, Springer, 1979.

Dreyer T. P.: *Modelling with Ordinary Differential Equations*, CRC Press, 1993.

Hoppensteadt F. C., Peskin C. S.: *Mathematics in Medicine and the Life Sciences*, Springer-Verlag, 1992.

Zill D. G.: *Differential Equations with Computer Lab Experiments*, Brooks/Cole Publishing Company, 1998.

Klincsik M., Maróti Gy.: *Maple 8 tételben*, Novadat Kiadó, 1995

Maeder R. E.: *The Mathematica Programmer I-II*, Academic Press, 1996

Gaylord R. J., Wellin P. R.: *Computer Simulations with Mathematica*, Telos-Springer, 1995.

Beltrami E.: *Mathematics for Dynamic Modeling*, Academic Press, 1998.

Giordano F. R., Weir M. D., Fox W. P.: *A First Course in Mathematical Modeling*, Brooks/Cole Publishing Company, 1997.
Kaplan D., Glass L.: *Understanding Nonlinear Dynamics*, Springer, 1995.
de Jong M. L.: *Mathematica For Calculus-Based Physics*, Addison-Wesley, 1999.
Leah Edelstein-Keshet, *Mathematical Models in Biology*, Mc Graw Hill
Meerschaert M.M.: *Mathematical Modelling*, Academic Press, 1999
Murray D. J.: *Mathematical Biology*, Springer, 1997