МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»
(ННГУ)

Институт информационных технологий, математики и механики

Кафедра: высокопроизводительных вычислений и системного программирования

Направление подготовки: «Прикладная математика и информатика»
Магистерская программа: «Вычислительные методы и суперкомпьютерные технологии»

ОТЧЕТ

по первой лабораторной работе

на тему:

«Численное исследование модели авторепрессора»

Выполнил: студент
группы 3824М1ПМвм
Ивлев А.Д.

Нижний Новгород
2024

Оглавление

1. Введение

В данной работе будет исследоваться модель авторепрессора, которая задаётся нелинейным автономным ДУ 1-го порядка:

$$\dot{x} = f(x) = \frac{\alpha}{1 + x^n} - x$$

Данное ДУ получено из уравнения $\dot{x} = \frac{A}{1+kx^n} - \gamma x$, которое описывает синтез белка, регулируемого транскрипционным ингибитором. Где x – концентрация белка, k - коэффициент концентрации транскрипционного фактора, n – степень олигомера, A – коэффициент скорости производства белка, у которого свободна промоутерная зона, γ - коэффициент деградации белка от его концентрации в клетке.

Следовательно, из постановки задачи получим ограничения на модель авторепрессора: $x \geq 0$, $\alpha \geq 0$, $n \in \mathbb{N}$.

Для дальнейшей работы опишем несколько терминов:

- Состояние равновесия дифференциального уравнения $\dot{x} = f(x)$ — это состояние, в котором значения переменных в системе не меняются со временем, то есть $\dot{x} = 0$. Следовательно состояние равновесия x^* является решением уравнения $f(x^*) = 0$.
- Устойчивость дифференциального уравнения — это свойство решения уравнения притягивать к себе другие решения при условии достаточной близости их начальных состояний.
- Устойчивость по Ляпунову: Состояние равновесия x^* - называется устойчивым по Ляпунову, если $\forall\, \varepsilon > 0\, \exists\, \delta > 0 \colon \forall\, x(t) -$ решения ДУ: $|x^*(0) - x(0)| < \delta \Rightarrow \forall\, t > 0\, |x^*(t) - x(t)| < \varepsilon$.
- Асимптотическая устойчивость: Состояние равновесия x^* - называется асимптотически устойчивым, если оно устойчиво и $\lim_{t\to\infty} |x^*(t) - x(t)| = 0$

Для одномерного случая $x \in \mathbb{R}^1$ состояние равновесия x^* будет устойчивым при $\lambda = f'(x^*) < 0$ и неустойчивым при $\lambda > 0$. При $\lambda = 0$ требуются дополнительные исследования.

В рамках исследования будут числено найдены состояния равновесия данной модели, которые также будут исследованы на устойчивость.

2. Постановка задачи

- Реализовать метод Ньютона и метод деления пополам для нахождения состояния равновесия модели авторепрессора.
- При фиксированном параметре $\alpha = 10$ исследовать сходимость и скорость сходимости методов в зависимости от параметра n.
- Построить зависимость состояния равновесия x^* и его устойчивости от параметра $\alpha \in [0.1, 10]$ при $n = 2, 4, 6$.

Для модели авторепрессора состояние равновесия x^* будет единственным. И оно может быть найдено числено как решения уравнения $\dot{x} = \frac{\alpha}{1+x^n} - x = 0$, то есть после упрощения $g(x) = x^{n+1} + x - \alpha = 0$. Устойчивость определяется знаком выражения $f'(x^*) = -\alpha \frac{nx^{n-1}}{(1+x^n)^2} - 1$.

3. Методы исследования

3.1 Метод деления отрезка пополам

Метод деления отрезка пополам — это итерационный численный метод для нахождения корня непрерывной функции на отрезке, где функция меняет знак.

Условия применимости:

- Функция $f(x)$ должна быть непрерывной на отрезке [a, b].
- На концах отрезка функция должна принимать значения разных знаков: $f(a)f(b) < 0$.

Алгоритм

- **Инициализация**:
  - Задать начальный отрезок [a, b] и желаемую точность ε.
  - Проверить условие $f(a)f(b) < 0$. Если не выполняется, метод неприменим.
- **Итерационный процесс**:
  - Вычислить середину отрезка: $c = \frac{a+b}{2}$.
  - Найти значение функции в точке c.
  - Если выполнен критерий остановки, то c – найденный корень.
  - Если $f(a)f(\text{c}) < 0$, корень лежит в [a, c]. Заменить b на c.
  - Если $f(c)f(b) < 0$, корень лежит в [c, b]. Заменить a на c.
  - Повторять до достижения критерия остановки.
- **Критерий остановки**:
  - Длина отрезка становится меньше ε: $|\ b - a\ | < \varepsilon$.
  - По значению функции: $|\ f(c)\ | < \varepsilon$.
  - По количеству итераций: $n < N_{max}$.

Метод деления пополам имеет линейную скорость сходимости (последовательность сходится со скоростью геометрической прогрессии). Это связано с тем, что на каждом шаге метода длина интервала уменьшается вдвое.

Плюсы:

- Гарантированная сходимость при выполнении условий.
- Простота реализации.

Минусы:

- Относительно медленная скорость сходимости (линейная).
- Находит только один корень, даже если их несколько на отрезке.
- Необходимость выбора начальные границы отрезка удовлетворяющие условиям применимости.

3.2 Метод Ньютона

Метод Ньютона — это итерационный численный метод для нахождения корня уравнения, использующий информацию о производной функции.

Условия применимости

- Функция $f(x)$ должна быть гладкой в окрестности корня.
- Начальное приближение должно быть выбрано достаточно близко к истинному корню x^*.
- Производная $f'(\text{x})$ не должна обращаться в ноль вблизи корня (иначе метод расходится).

Алгоритм

- **Инициализация:**
    - Задать начальное приближение x_0 и точность ε.
- **Итерационный процесс:**
    - Если выполнен критерий остановки, то x_n – найденный корень.
    - Вычислить следующее приближение по формуле: $x_{n+1} = x_n + \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$.
- **Критерий остановки**:
    - Изменение x на итерации меньше ε: $|\ x_{n+1} - x_n\ | < \varepsilon$.
    - По значению функции: $|\ f(c)\ | < \varepsilon$.
    - По количеству итераций: $n < N_{max}$.

Метод Ньютона имеет квадратичную скорость при выполнении условий применимости. Для первого критерия остановки, используя разложение в ряд Тейлора можно показать, что $\varepsilon_{n+1} \approx |\frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}|\varepsilon_n^2$, где $\varepsilon_i = |x^* - x_i|$.

Плюсы:

- Высокая скорость сходимости (квадратичная, если начальное приближение x_0 близко к корню).
- Эффективен для гладких функций с известной производной.

Минусы:

- Требует вычисления производной.
- Может расходиться при плохом выборе x_0 или если $f'(\text{x}^*) \approx 0$.
- Не гарантирует сходимости для разрывных или негладких функций.

4. Результаты экспериментов

4.1 Реализация метода деления отрезка пополам и метода Ньютона

Программная реализация выполнялась на языке python. Полный код доступен по ссылке: https://github.com/Faert/NLD_Lab.

Считается, что условия применимости выполнены, что верно для нашей функции $g(x) = x^{n+1} + x - \alpha$ при правильном корректном выборе границ отрезка и начального приближения для методов деления пополам и Ньютона соответственно. Также для обоих методов проверяется критерий выхода по количеству итераций и один из двух альтернативных.

Метод деления отрезка пополам:

```
def Div_2(func, a = 0, b = 1, max_iter = 1000, eps = 0.001, history = None):
    for i in range(max_iter):
        c = (a+b)/2
        res_c = func(c)
        if(history != None):
            history[0].append(abs(a-b))
            history[1].append(abs(res_c))
        #if(abs(a-b) < eps):
        if(abs(res_c) < eps):
            return c
        if (np.sign(res_c) == np.sign(func(a))):
            a = c
        else:
            b = c
    return c
```

Где func – функция, у которой ищутся корни, a и b – границы отрезка поиска, max_iter - максимальное количество итераций, eps – желаемое значение точности, history – ссылка на список, где храниться история изменение точности.

Метод Ньютона:

```
def Newton(func, func_der, x0, max_iter = 1000, eps = 0.001, history = None):
    for i in range(max_iter):
        x1 = x0 - func(x0)/func_der(x0)
        res_x1 = func(x1)
        if(history != None):
            history[0].append(abs(x1-x0))
            history[1].append(abs(res_x1))
        #if(abs(x1-x0) < eps):
        if(abs(res_x1) < eps):
            return x1
        x0 = x1
    return x1
```

Где func – функция у которой ищутся корни, func_der – производная функции, у которой ищутся корни, x0 – начальное приближение, max_iter -–максимальное количество итераций, eps – желаемое значение точности, history – ссылка на список, где храниться история изменение точности.

4.2 Исследование сходимости и скорости сходимости методов

Проверим условия применимости методов для нашей функции $g(x) = x^{n+1} + x - \alpha$.

Метод деления отрезка пополам:

- Функция $g(x)$ непрерывна на всей области определения $[0, \infty)$.
- На концах отрезка функция должна принимать значения разных знаков: $g(a)g(b) < 0$. Зафиксируем a = 0, тогда $g(a) = -\alpha < 0$. Производная функции $g'(x) = (n+1)x^n + 1$ положительна на всей области определения, следовательно на ней функция возрастает. Поэтому, так как $g(x^*) = 0$, существует $b \in (x^*, \infty)$, такое что $g(b) > 0$.

Метод Ньютона:

- Функция $g(x)$ гладкая на всей области определения.
- Начальное приближение может быть выбрано достаточно близко к истинному корню x^*. Иначе может наблюдаться линейная скорость сходимости.
- Производная $g'(x) = (n+1)x^n + 1$ не обращается в 0 на всей области определения.

Для дальнейшего исследования зафиксируем параметр $\alpha = 10$, желаемую точность $\varepsilon = 10^{-6}$, максимальное количество итераций $N_{max} = 1000$, а критерий остановки по значению функции. Также возьмём границы метода деления пополам: a = 0, b = 1000, а начальное приближение метода Ньютона $x_0 = 500$.

На рисунках 1, 2 на левом графике изображено $\ln(1 + \varepsilon_i)$, где $\varepsilon_i = |b_i - a_i|$ для метода деления пополам и $\varepsilon_i = |x_i - x_{i-1}|$ для метода Ньютона, а на правом графике изображено $\ln(1 + |f(x_i)|)$.

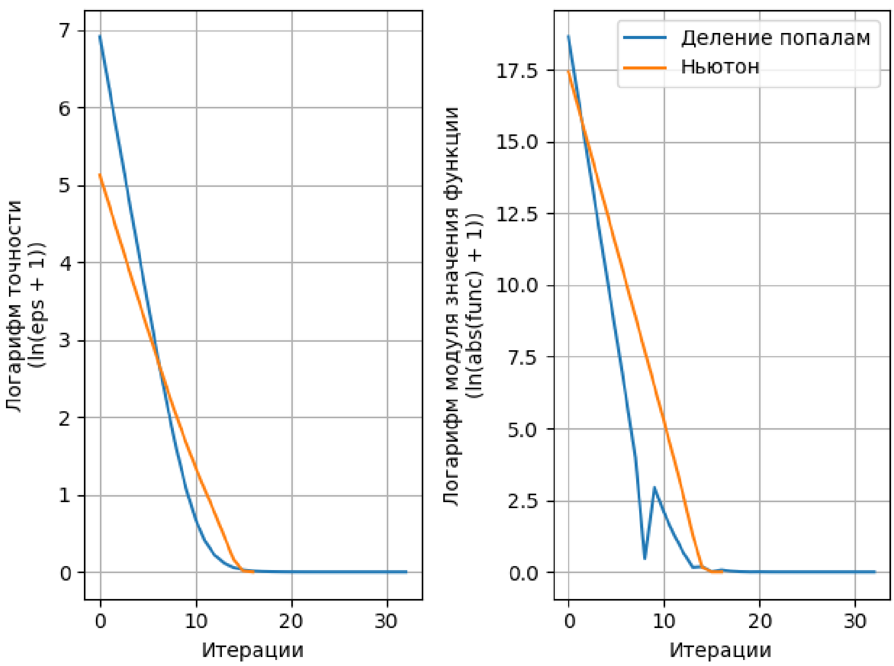

Рисунок 1. Изменение логарифмов значений критериев точности для методов при n = 2.

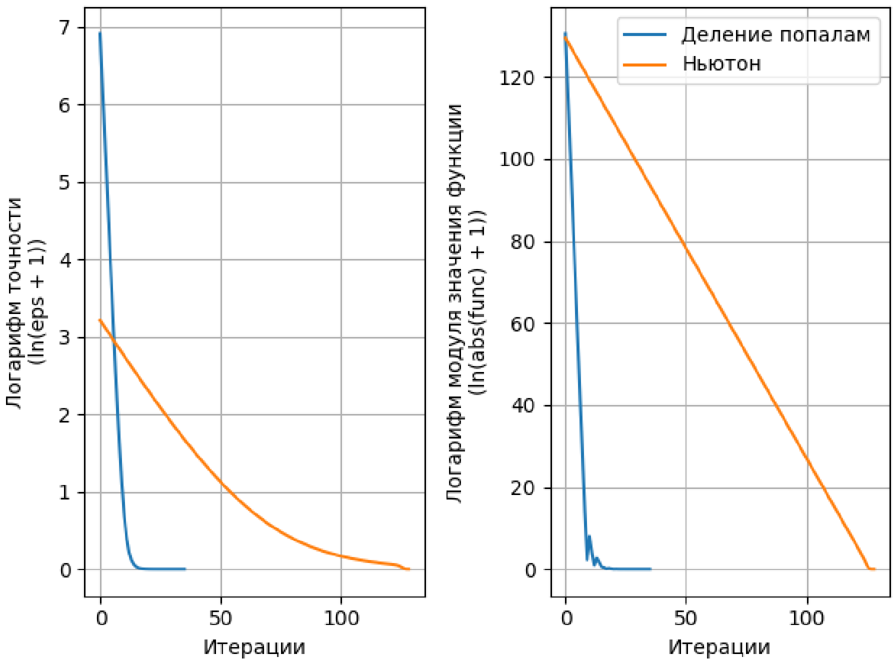

Рисунок 2. Изменение логарифмов значений критериев точности для методов при n = 20.

На рисунках 1, 2 можно заметить, что оба метода достигают желаемой точности. Метод Ньютона начинает сходиться с квадратичной скоростью, только на последних итерациях так как начальное приближение достаточно далеко от исходного корня. Также можно заметить, что его скорость сходимости зависит от параметра n, что показано на рисунке 3, где $n = \overline{1, 22}$. Что можно объяснить тем, что $\frac{f(x_n)}{f\prime(x_n)} \propto \frac{x}{n}$. Скорость сходимости метода деления отрезка пополам зависит от n только неявно, так как при изменении n смещается корень уравнения.

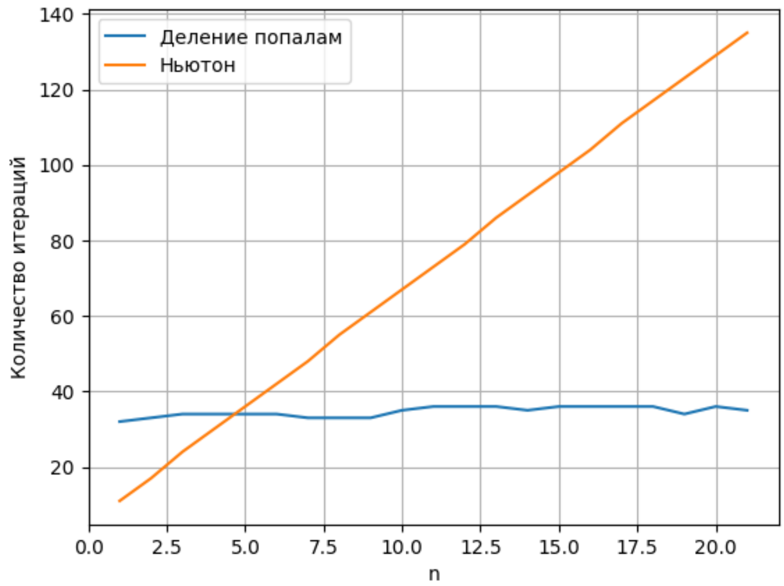

Рисунок 3. Зависимость, необходимого для достижения заданной точности, количества итераций методов от параметра n

4.3 Зависимость состояния равновесия и его устойчивости от параметра α

Теперь рассмотрим зависимость состояния равновесия x^* и его устойчивости от параметра $\alpha \in [0.1, 10]$ при $n = 2, 4, 6$. Поиск будет осуществляться методом деления пополам при указанных выше параметрах.

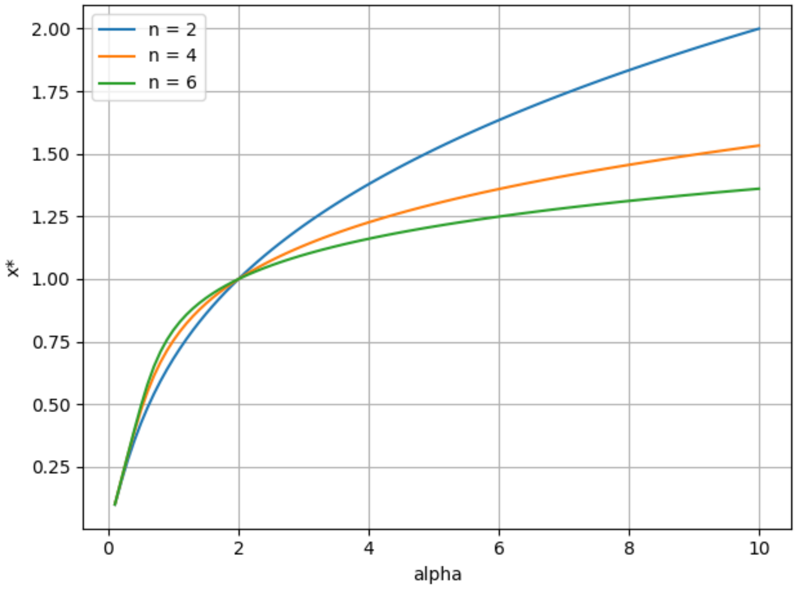

Рисунок 4. Зависимость состояния равновесия x^* от параметра $\alpha \in [0.1, 10]$ при $n = 2, 4, 6$

Можно заметить, что x^* растёт с увеличением параметра α, а от параметра n зависит скорость роста, что согласуется с физической моделью.

Для рассмотрения устойчивости состояния равновесия найдём производную исходной функции $f(x) = \frac{\alpha}{1+x^n} - x$: $f'(x) = \frac{-\alpha n x^{n-1}}{(1+x^n)^2} - 1$. Можно заметить, что она отрицательна на всей области определения $x \geq 0$. Следовательно состояние равновесия будет устойчивым при любых значениях параметров $\alpha \geq 0$, $n \in \mathbb{N}$.

5. Заключение

В рамках работы были реализованы метод деления отрезка пополам и метод Ньютона для нахождения состояния равновесия модели авторепрессора.

При фиксированном параметре $\alpha = 10$ были исследованы сходимость и скорость сходимости методов в зависимости от параметра n. Выявлена линейная зависимость количества итераций для метода Ньютона, а метод деления пополам зависит от параметра n лишь неявно.

Также была найдена зависимость состояния равновесия x^* от параметра α. x^* растёт с увеличением параметра α, а от параметра n зависит скорость роста, что согласуется с физической моделью. При этом состояние равновесия всегда устойчиво вне зависимости от параметров.