

Równania różniczkowe zwyczajne

Sprawozdanie z laboratorium 9

Jakub Grześ

29.05.2024

1 Treść zadań

Zadanie 1

Przedstaw każde z poniższych równań różniczkowych zwyczajnych jako równoważny układ równań pierwszego rzędu (ang. first-order system of ODEs):

- (a) równanie Van der Pol'a:

$$y'' = y'(1 - y^2) - y.$$

- (b) równanie Blasiusa:

$$y''' = -yy''.$$

- (c) II zasada dynamiki Newtona dla problemu dwóch ciał:

$$y_1'' = -\frac{GM y_1}{(y_1^2 + y_2^2)^{3/2}},$$

$$y_2'' = -\frac{GM y_2}{(y_1^2 + y_2^2)^{3/2}}.$$

Zadanie 2

Dane jest równanie różniczkowe zwyczajne

$$y' = -5y$$

z warunkiem początkowym $y(0) = 1$. Równanie rozwiązujemy numerycznie z krokiem $h = 0.5$.

- (a) Analityczna stabilność. Wyjaśnij, czy rozwiązania powyższego równania są stabilne?
- (b) Numeryczna stabilność. Wyjaśnij, czy metoda Eulera jest stabilna dla tego równania z użytym krokiem h ?

- (c) Oblicz numerycznie wartości przybliżonego rozwiązania dla $t = 0.5$ metodą Eulera.
- (d) Wyjaśnij, czy niejawną metodą Eulera jest stabilna dla tego równania z użytym krokiem h ?
- (e) Oblicz numerycznie wartości przybliżonego rozwiązania dla $t = 0.5$ niejawną metodą Eulera.

Zadanie 3

Model Kermacka-McKendricka przebiegu epidemii w populacji opisany jest układem równań różniczkowych:

$$S' = \frac{-\beta}{N}IS, \quad (3)$$

$$I' = \frac{-\beta}{N}IS - \gamma I, \quad (4)$$

$$R' = \gamma I, \quad (5)$$

gdzie:

- S reprezentuje liczbę osób zdrowych, podatnych na zainfekowanie,
- I reprezentuje liczbę osób zainfekowanych i roznoszących infekcję,
- R reprezentuje liczbę osób ozdrowiałych.

Parametr β reprezentuje współczynnik zakaźności (ang. transmission rate). Parametr γ reprezentuje współczynnik wyzdrowień (ang. recovery rate). Wartość $1/\gamma$ reprezentuje średni czas choroby.

Założenia modelu:

- Przyrost liczby osób zakażonych jest proporcjonalny do liczby osób zakażonych oraz do liczby osób podatnych.
- Przyrost liczby osób odpornych lub zmarłych jest wprost proporcjonalny do liczby aktualnie chorych.
- Okres inkubacji choroby jest zaniedbywalnie krótki.
- Populacja jest wymieszana.



Jako wartości początkowe ustal:

$$S(0) = 762, \quad I(0) = 1, \quad R(0) = 0.$$

Przyjmij też $N = S(0) + I(0) + R(0) = 763$ oraz $\beta = 1$. Zakładając, że średni czas trwania grypy wynosi $1/\gamma = 7$ dni, przyjmij $\gamma = 1/7$.

Całkując od $t = 0$ do $t = 14$ z krokiem 0.2, rozwiąż powyższy układ równań:

- jawną metodą Eulera

$$y_{k+1} = y_k + h_k f(t_k, y_k)$$

- niejawną metodą Eulera

$$y_{k+1} = y_k + h_k f(t_{k+1}, y_{k+1})$$

- metodą Rungego-Kutty czwartego rzędu (RK4)

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h_k}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \text{ gdzie}$$

$$k_1 = f(t_k, y_k)$$

$$k_2 = f(t_k + h_k/2, y_k + h_k k_1/2)$$

$$k_3 = f(t_k + h_k/2, y_k + h_k k_2/2)$$

$$k_4 = f(t_k + h_k, y_k + h_k k_3)$$

Wykonaj następujące wykresy:

- Dla każdej metody przedstaw na wspólnym rysunku wykresy komponentów rozwiązania (S, I, R) jako funkcje t (3 wykresy).
- Na wspólnym rysunku przedstaw wykresy funkcji $S(t)+I(t)+R(t)$ znalezione przez każdą metodę (1 wykres). Czy niezmiennik $S(t) + I(t) + R(t) \equiv N$ jest zachowany?

Wiemy, że liczba osób zakażonych w pewnej szkole kształtowała się następująco:

Dzień, t	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
Zakażeni, I	1	3	6	25	73	222	294	258	237	191	125	69	27	11	4

Wybierz jedną z powyższych metod numerycznych i oszacuj prawdziwe wartości współczynników $\theta = [\beta, \gamma]$. W tym celu wykonaj minimalizację funkcji kosztu. Jako funkcję kosztu wykorzystaj sumę kwadratów reszt (ang. residual sum of squares):

$$L(\theta) = \sum_{i=0}^T (I_i - \hat{I}_i)^2,$$

gdzie I_i oznacza prawdziwą liczbę zakażonych, a \hat{I}_i oznacza liczbę zakażonych wyznaczonych metodą numeryczną. Ponieważ nie znamy gradientu $\nabla_{\theta} L(\theta)$, do minimalizacji wykorzystaj metodę Nelder-Meada, która nie wymaga informacji o gradiencie.

Powtórz obliczenia, tym razem jako funkcję kosztu wykorzystując:

$$L(\theta) = -\sum_{i=0}^T I_i \ln \hat{I}_i + \sum_{i=0}^T \hat{I}_i.$$

Ile wynosił współczynnik reprodukcji $R_0 = \beta/\gamma$ w każdym przypadku?

2 Rozwiązania zadań

2.1 Zadanie 1

(a) równanie Van der Pol'a:

$$y'' = y'(1 - y^2) - y$$

Wprowadzamy zmienne:

$$u = y$$

$$v = y'$$

Teraz równanie Van der Pol'a można zapisać jako układ równań pierwszego rzędu:

$$\begin{cases} u' = v \\ v' = v(1 - u^2) - u \end{cases}$$

(b) równanie Blasiusa:

$$y''' = -yy''$$

Wprowadzamy zmienne:

$$u = y$$

$$v = y'$$

$$w = y''$$

Teraz równanie Blasiusa można zapisać jako układ równań pierwszego rzędu:

$$\begin{cases} u' = v \\ v' = w \\ w' = -uw \end{cases}$$

(c) II zasada dynamiki Newtona dla problemu dwóch ciał:

$$y_1'' = -\frac{GM y_1}{(y_1^2 + y_2^2)^{3/2}}$$

$$y_2'' = -\frac{GM y_2}{(y_1^2 + y_2^2)^{3/2}}$$

Wprowadzamy zmienne:

$$u_1 = y_1$$

$$u_2 = y_2$$

$$v_1 = y_1'$$

$$v_2 = y_2'$$

Teraz równania można zapisać jako układ równań pierwszego rzędu:

$$\begin{cases} u'_1 = v_1 \\ u'_2 = v_2 \\ v'_1 = -\frac{GMu_1}{(u_1^2+u_2^2)^{3/2}} \\ v'_2 = -\frac{GMu_2}{(u_1^2+u_2^2)^{3/2}} \end{cases}$$

2.2 Zadanie 2

Przypomnijmy, równanie różniczkowe jest postaci

$$y' = -5y$$

: z warunkiem początkowym $y(0) = 1$.

- (a) Zaczniemy od rozwiązania analitycznego. Skorzystamy z metody rozdzielania zmiennych.

$$\frac{dy}{dt} = -5y$$

$$\frac{1}{y} dy = -5 dt$$

Następnie całkujemy obie strony równania:

$$\int \frac{1}{y} dy = \int -5 dt$$

$$\ln |y| = -5t + C$$

Wyznaczamy y .

$$e^{\ln |y|} = e^{-5t+C}$$

$$|y| = e^C e^{-5t}$$

Ponieważ e^C jest stałą (oznaczymy ją jako C_1), możemy zapisać:

$$y = C_1 e^{-5t}$$

Aby znaleźć wartość C_1 , używamy warunku początkowego $y(t_0) = y_0$:

$$y_0 = C_1 e^{-5t_0}$$

$$C_1 = y_0 e^{5t_0}$$

Podstawiając C_1 do ogólnego rozwiązania, otrzymujemy:

$$y(t) = y_0 e^{-5(t-t_0)}$$

Zgodnie z definicją, rozwiązanie $y(t)$ jest stabilne, jeśli dla każdego ϵ istnieje δ takie, że jeśli dwa rozwiązania $y(t)$ i $\hat{y}(t)$ mają warunki początkowe $y(t_0)$ i $\hat{y}(t_0)$ spełniające

$$||\hat{y}(t_0) - y(t_0)|| < \delta$$

to

$$||\hat{y}(t) - y(t)|| < \epsilon$$

dla $t \geq t_0$.

Rozważmy teraz dwa rozwiązania tego równania z różnymi warunkami początkowymi $y(t_0) = y_0$ i $\hat{y}(t_0) = \hat{y}_0$:

$$y(t) = y_0 e^{-5(t-t_0)}$$

$$\hat{y}(t) = \hat{y}_0 e^{-5(t-t_0)}$$

Różnica między tymi rozwiązaniami wynosi:

$$|y(t) - \hat{y}(t)| = |y_0 e^{-5(t-t_0)} - \hat{y}_0 e^{-5(t-t_0)}| = |y_0 - \hat{y}_0| e^{-5(t-t_0)}$$

Zakładając, że

$$|y_0 - \hat{y}_0| < \delta$$

Można ograniczyć $|y(t) - \hat{y}(t)|$:

$$|y(t) - \hat{y}(t)| = |y_0 - \hat{y}_0| e^{-5(t-t_0)} < \delta e^{-5(t-t_0)}$$

Dla wszystkich $t \geq t_0$ i dowolnego $\delta < \varepsilon$:

$$\delta e^{-5(t-t_0)} < \varepsilon$$

Wynika z tego, że warunek stabilności jest spełniony, zatem rozwiązania tego równania różniczkowego są **stabilne**.

Rozwiązanie $y(t)$ jest asymptotycznie stabilne, jeśli $\|\hat{y}(t) - y(t)\| \rightarrow 0$ gdy $t \rightarrow \infty$.

Dla naszego równania:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |y(t) - \hat{y}(t)| = \lim_{t \rightarrow \infty} |y_0 - \hat{y}_0| e^{-5(t-t_0)} = 0$$

Co oznacza, że rozwiązanie jest również **asymptotycznie stabilne**.

(b) Warunkiem stabilności numerycznej dla metody Eulera jawnej jest:

$$|1 + h\lambda| < 1$$

Gdzie λ to współczynnik z równania różniczkowego, w tym przypadku $\lambda = -5$.

Podstawiając $h = 0.5$ oraz $\lambda = -5$:

$$|1 + 0.5 \cdot (-5)| = |1 - 2.5| = |-1.5| = 1.5 \not< 1$$

Zatem metoda Eulera **nie jest stabilna** dla kroku $h = 0.5$.

(c) Stosujemy metodę Eulera jawną:

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n)$$

W naszym przypadku:

n	x_n	y_n
0	0	1
1	0.5	-1.5

Tabela 1: Wartości numeryczne rozwiązania dla $t = 0.5$

Zatem wartość przybliżona dla $t = 0.5$ metodą Eulera jawnej wynosi $y(0.5) \approx y_1 = -1.5$.

(d) Warunek stabilności dla metody Eulera niejawnej jest:

$$\left| \frac{1}{1 - h\lambda} \right| < 1$$

Podstawiając $h = 0.5$ oraz $\lambda = -5$:

$$\left| \frac{1}{1 - 0.5 \cdot (-5)} \right| = \left| \frac{1}{1 + 2.5} \right| = \left| \frac{1}{3.5} \right| \approx 0.2857 < 1$$

Zatem metoda Eulera niejawna **jest stabilna** dla kroku $h = 0.5$.

(e) Niejawna metoda Eulera jest opisana równaniem:

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1})$$

y_{n+1} jest w postaci uwikłanej, ale można wyznaczyć ją jako zależność od y_n .

Dla naszego równania, $f(t, y) = -5y$, mamy:

$$y_{n+1} = y_n + h(-5y_{n+1})$$

$$y_{n+1} + 5hy_{n+1} = y_n$$

$$y_{n+1}(1 + 5h) = y_n$$

$$y_{n+1} = \frac{y_n}{1 + 5h}$$

Zatem w naszym przypadku:

n	x_n	y_n
0	0	1
1	0.5	0.2857

Tabela 2: Wartości numeryczne rozwiązania dla $t = 0.5$

Zatem wartość przybliżona dla $t = 0.5$ niejawną metodą Eulera wynosi $y(0.5) \approx y_1 = 0.2857$.

2.3 Zadanie 3

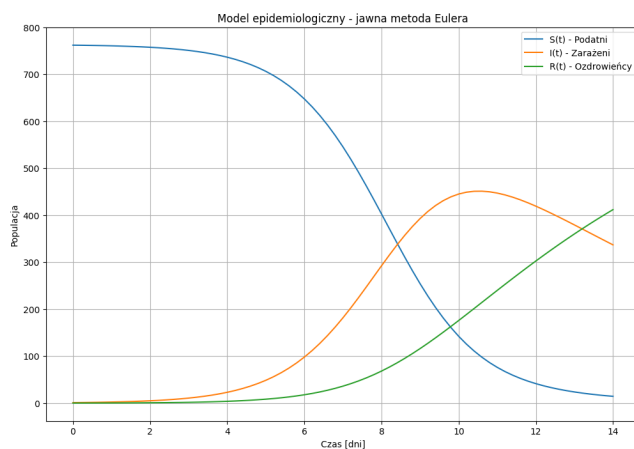
2.3.1 Porównanie metod

Po wczytaniu danych początkowych modelu przygotowano 3 procedury realizujące kolejno metodę jawną Eulera, metodę niejawną Eulera oraz metodę Rungego-Kutty czwartego rzędu.

Jawna metoda Eulera

```
# Inicjalizacja list wyników
S_ee = np.zeros(len(t))
I_ee = np.zeros(len(t))
R_ee = np.zeros(len(t))
S_ee[0] = S0
I_ee[0] = I0
R_ee[0] = R0

for n in range(1, len(t)):
    S_ee[n] = S_ee[n-1] - h * beta * S_ee[n-1] * I_ee[n-1] / N
    I_ee[n] = I_ee[n-1] + h * beta * S_ee[n-1] * I_ee[n-1] / N - h * gamma * I_ee[n-1]
    R_ee[n] = R_ee[n-1] + h * gamma * I_ee[n-1]
```



Wykres 1: Wykres parametrów modelu od czasu dla jawnej metody Eulera

Niejawna metoda Eulera - w tej metodzie konieczne jest rozwiązanie układu równań. Wykorzystano w tym celu metodę *fsolve* z biblioteki *Scipy*.

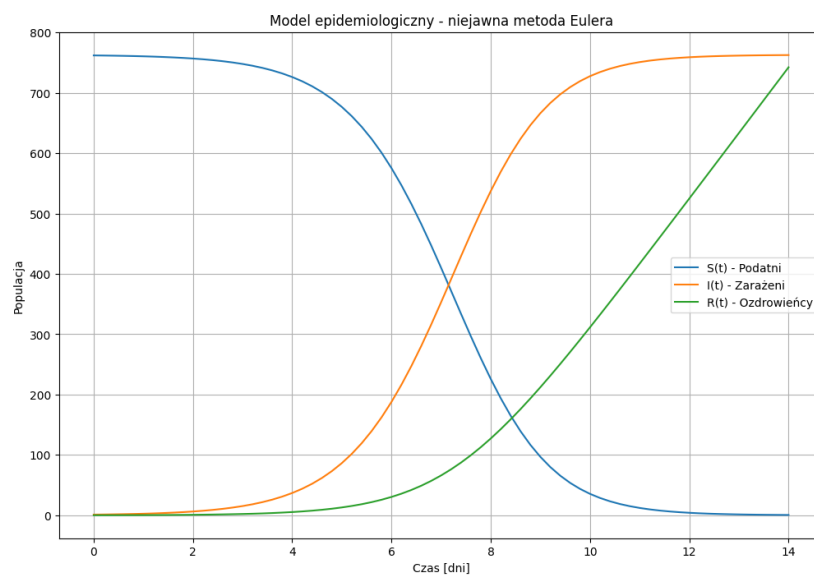
```
def f(y):
    S, I, R = y
    dSdt = -beta / N * I * S
    dIdt = beta / N * I * S - gamma * I
    dRdt = gamma * I
    return np.array([dSdt, dIdt, dRdt])

# Funkcja dla niejawnego metody Eulera
def implicit_euler_step(y_k, h):
    def implicit_eq(y_next):
        return y_next - y_k - h * f(y_next)

    y_next = fsolve(implicit_eq, y_k)
    return y_next

# Inicjalizacja list wyników
S_ee = np.zeros(len(t))
I_ee = np.zeros(len(t))
R_ee = np.zeros(len(t))
S_ee[0] = S0
I_ee[0] = I0
R_ee[0] = R0

# Iteracja
for n in range(1, len(t)):
    y_k = np.array([S_ee[n-1], I_ee[n-1], R_ee[n-1]])
    y_next = implicit_euler_step(y_k, h)
    S_ee[n], I_ee[n], R_ee[n] = y_next
```

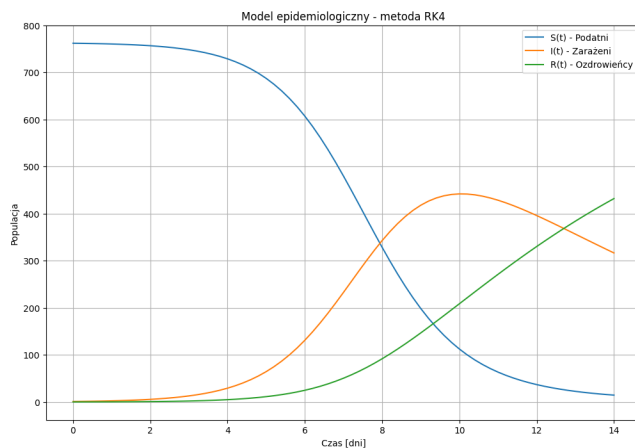


Wykres 2: Wykres parametrów modelu od czasu dla niejawnego metody Eulera

Metoda Rungego-Kutty czwartego rzędu - posłużono się wzorami podanymi w treści zadania.

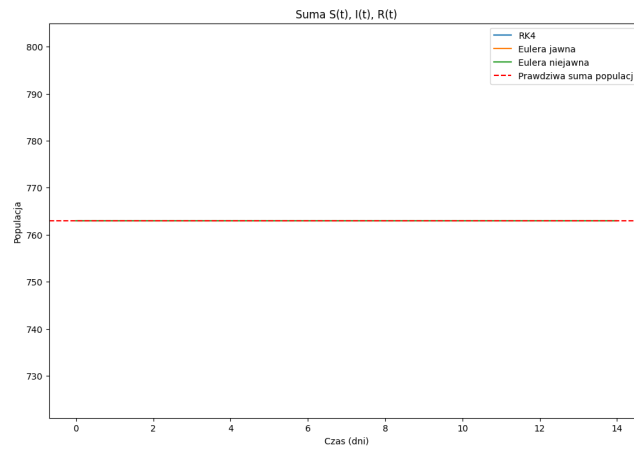
```
# Inicjalizacja list wyników
S_RK4 = np.zeros(len(t))
I_RK4 = np.zeros(len(t))
R_RK4 = np.zeros(len(t))
S_RK4[0] = S0
I_RK4[0] = I0
R_RK4[0] = R0

for n in range(1, len(t)):
    k1_S = - (beta / N) * I_RK4[n-1] * S_RK4[n-1]
    k1_I = (beta / N) * I_RK4[n-1] * S_RK4[n-1] - gamma * I_RK4[n-1]
    k1_R = gamma * I_RK4[n-1]
    k2_S = - (beta / N) * (I_RK4[n-1] + 0.5 * h * k1_I) * (S_RK4[n-1] + 0.5 * h * k1_S)
    k2_I = (beta / N) * (I_RK4[n-1] + 0.5 * h * k1_I) * (S_RK4[n-1] + 0.5 * h * k1_S) - gamma * (I_RK4[n-1] + 0.5 * h * k1_I)
    k2_R = gamma * (I_RK4[n-1] + 0.5 * h * k1_I)
    k3_S = - (beta / N) * (I_RK4[n-1] + 0.5 * h * k2_I) * (S_RK4[n-1] + 0.5 * h * k2_S)
    k3_I = (beta / N) * (I_RK4[n-1] + 0.5 * h * k2_I) * (S_RK4[n-1] + 0.5 * h * k2_S) - gamma * (I_RK4[n-1] + 0.5 * h * k2_I)
    k3_R = gamma * (I_RK4[n-1] + 0.5 * h * k2_I)
    k4_S = - (beta / N) * (I_RK4[n-1] + h * k3_I) * (S_RK4[n-1] + h * k3_S)
    k4_I = (beta / N) * (I_RK4[n-1] + h * k3_I) * (S_RK4[n-1] + h * k3_S) - gamma * (I_RK4[n-1] + h * k3_I)
    k4_R = gamma * (I_RK4[n-1] + h * k3_I)
    S_RK4[n] = S_RK4[n-1] + (h / 6) * (k1_S + 2 * k2_S + 2 * k3_S + k4_S)
    I_RK4[n] = I_RK4[n-1] + (h / 6) * (k1_I + 2 * k2_I + 2 * k3_I + k4_I)
    R_RK4[n] = R_RK4[n-1] + (h / 6) * (k1_R + 2 * k2_R + 2 * k3_R + k4_R)
```



Wykres 3: Wykres parametrów modelu od czasu dla metody Rungego-Kutty czwartego rzędu

Zbiory osób podatnych, zarażonych i ozdowieńców są rozłączne, więc suma $S(t) + I(t) + R(t) = \text{const} = N$ dla każdego t . Sprawdzono ten niezmiennik dla każdej metody i przedstawiono go na wspólnym wykresie.



Wykres 4: Wykres wartości sumy $S(t) + I(t) + R(t)$ dla każdej z metod w zależności od dnia

2.3.2 Poszukiwanie wartości współczynników modelu

Mając prawdziwe dane, możemy znaleźć wartości współczynników $\theta = [\beta, \gamma]$. Wykorzystamy w tym celu funkcję *minimize* z modułu *optimize* biblioteki *Scipy*. Przyjmuje ona funkcję kosztu, którą będzie minimalizować, początkowe wartości parametrów oraz metodę. W naszym przypadku skorzystamy z metody Nelder-Meada, która nie wymaga informacji o gradiencie.

Przyjmujemy funkcję kosztu

$$L(\theta) = \sum_{i=0}^T (I_i - \hat{I}_i)^2$$

gdzie I_i oznacza prawdziwą liczbę zakażonych, a \hat{I}_i oznacza liczbę zakażonych wyznaczonych metodą numeryczną. Skorzystamy z jawnej metody Eulera. Obliczony zostanie także współczynnik reprodukcji $R_0 = \frac{\beta}{\gamma}$.

```
def cost_function(theta):
    I_pred = model(theta, t_real)
    return np.sum((I_real - I_pred)**2)

# Początkowe wartości parametrów
theta_initial = [1.0, 1/7]
result = minimize(cost_function, theta_initial, method='Nelder-Mead')
beta_opt, gamma_opt = result.x
```

Parametr	Wartość
β	10.73
γ	3.02

Tabela 3: Wartości parametrów modelu

Współczynnik reprodukcji modelu wyniósł 3.56.

Powtórzone obliczenia, tym razem jako funkcję kosztu przyjmując

$$L(\theta) = - \sum_{i=0}^T I_i \ln \hat{I}_i + \sum_{i=0}^T \hat{I}_i$$

```
def cost_function_log(theta):
    I_pred = model(theta, t_real)
    term1 = np.sum(I_real * np.log(I_pred))
    term2 = np.sum(I_pred)
    return -(term1 - term2)
```

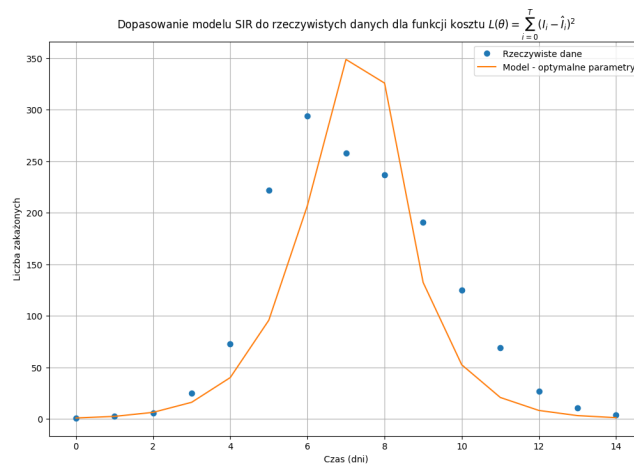
Parametr	Wartość
β	11.19
γ	2.19

Tabela 4: Wartości parametrów modelu

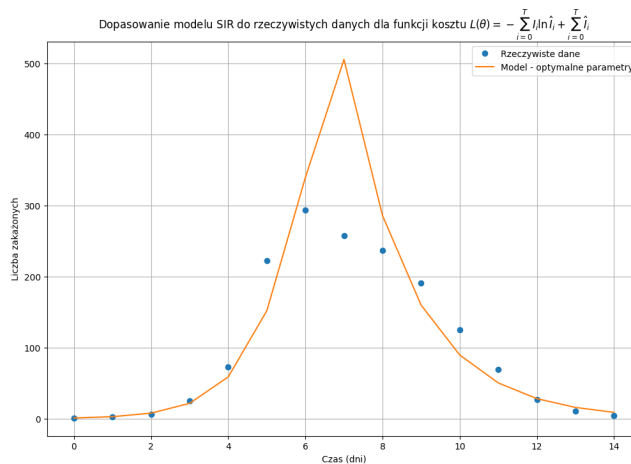
Współczynnik reprodukcji modelu wyniósł 5.1.

Otrzymane wyniki znacznie się różnią w zależności od przyjętej funkcji kosztu. Sugeruje to, że jej wybór jest istotny i musi być odpowiedni dla danego problemu.

Przedstawiono dopasowanie parametrów do danych dla obu funkcji kosztu na poniższych wykresach.



Wykres 5: Dopasowanie modelu dla pierwszej funkcji kosztu



Wykres 6: Dopasowanie modelu dla drugiej funkcji kosztu

3 Wnioski

- **Stabilność metod numerycznych**

Analiza stabilności numerycznej wykazała istotność doboru kroku czasowego dla danej metody. Proste metody takie jak jawna metoda Eulera mogą prowadzić do niestabilnych wyników dla zbyt dużych kroków. Należy zawsze rozsądnie dobrać metodę oraz krok, aby zapewnić stabilność, metody różnią się np. liczbą ewaluacji funkcji, adaptacyjnością kroków lub jej brakiem, czy uwzględnianiem większej liczby wartości co wymusza znajomość większej liczby punktów początkowych, aby iteracja mogła wystartować.

- **Zachowanie sumy populacji**

Poprawność metod numerycznych można badać np. poprzez sprawdzanie niezmienników układów (np. energii układu dwóch ciał). W naszym przypadku populacja pozostawała stała, ale powszechnym problemem dla prostych metod takich jak metoda Eulera czy Rungego-Kutty jest utrata niezmienników dla niektórych typów równań. Istnieją metody takie jak półjawna metoda Eulera, które unikają tego problemu.

- **Estymacja współczynników modelu**

Dzięki empirycznym danym oraz funkcji kosztu można było wyznaczyć parametry modelu. Wykonano obliczenia dla dwóch różnych funkcji kosztu, co prowadziło do różnych wyników. Wskazuje to na istotność wyboru funkcji kosztu, która może kalibrować model w różny sposób.

Bibliografia

- [1] dr inż. Marcin Kuta, *Ordinary differential equations*
- [2] dr inż. Marian Bubak, dr inż. Katarzyna Rycerz, *Wykład 10 - Metody całkowania równań różniczkowych zwyczajnych*