

Matematyka numeryczna

Projekt grupowy

Wersja A

Wykonali:

Anna Czechowska

Karolina Trzcińska

Oleg Łyżwiński

Zadanie 1.

Funkcje

```
# Równanie różniczkowe jako układ dwóch równań
def rhs(t, y, xi, omega0, omega, A):
    x, v = y
    dxdt = v
    dvdt = -2 * xi * omega0 * v - omega0**2 * x + (omega**2 - omega0**2) * A * np.sin(omega * t)
    return [dxdt, dvdt]
```

```
# funkcja realizująca metodę Eulera
def MojEuler(x0, v0, t0, tf, dt, xi, omega0, omega, A):
    # tablica czasu określająca krok
    t = np.arange(t0, tf, dt)
    n = len(t)
    x = np.zeros(n)
    v = np.zeros(n)

    # Założenia początkowe
    x[0] = x0
    v[0] = v0

    # rozwiązanie metodą Eulera
    for i in range(n - 1):
        x[i + 1] = x[i] + dt * v[i]
        v[i + 1] = v[i] + dt * (-2 * xi * omega0 * v[i] - omega0**2 * x[i] + (omega**2 - omega0**2) * A * np.sin(omega * t[i]))
    return t, x, v
```

```
# Obliczanie pochodnej różnymi metodami
def Moj_oscylator(t0, tf, y0):
    #Eulera
    t_euler, x_euler, v_euler = MojEuler(x0, v0, t0, tf, dt, xi, omega0, omega, A)

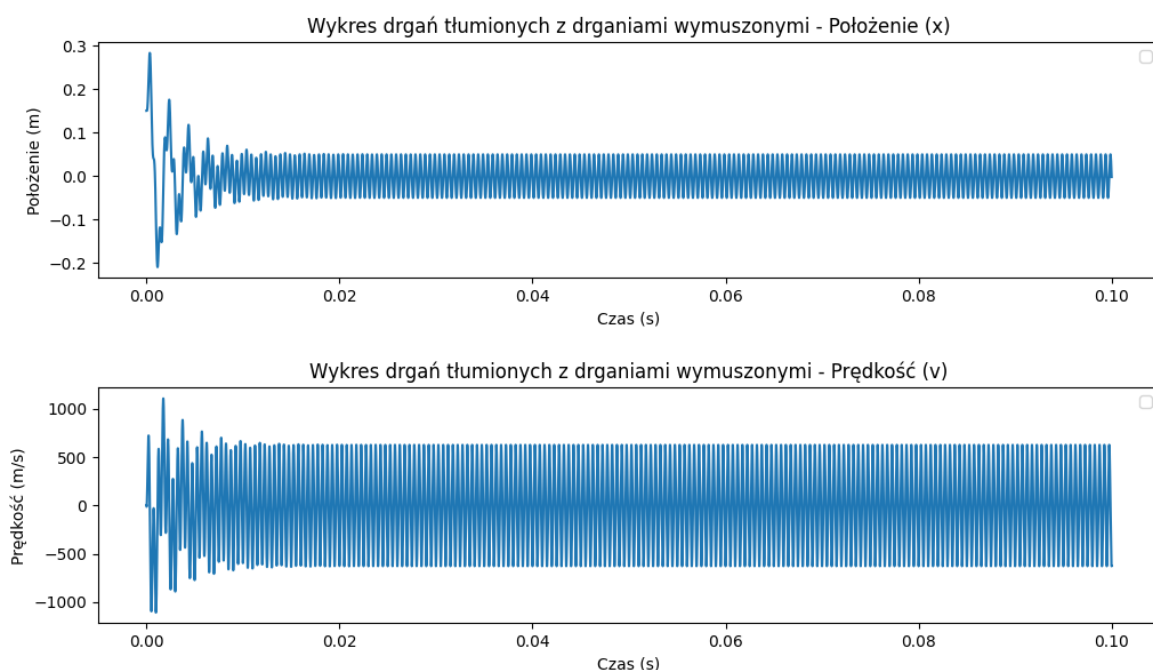
    # Metoda RK23
    sol_rk23 = solve_ivp(rhs, [t0, tf], y0, method='RK23', t_eval=t_euler, args=(xi, omega0, omega, A))

    # Metoda RK45
    sol_rk45 = solve_ivp(rhs, [t0, tf], y0, method='RK45', t_eval=t_euler, args=(xi, omega0, omega, A))

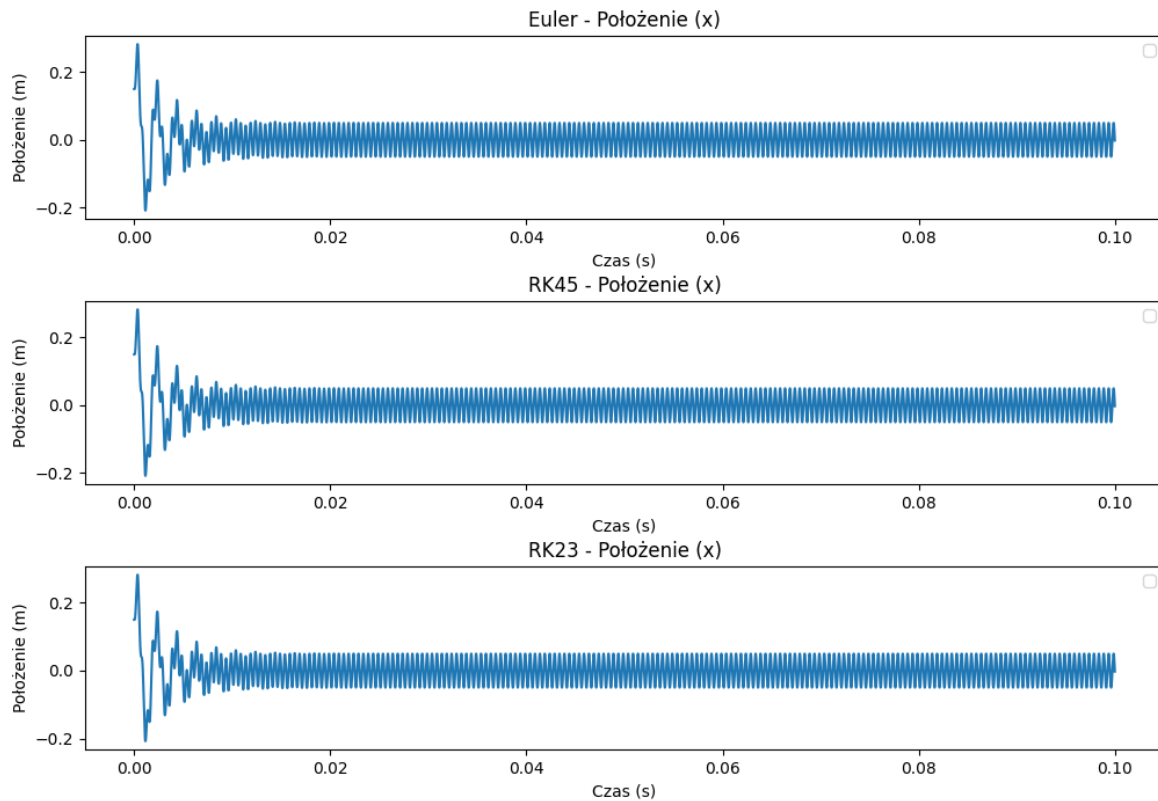
    return sol_rk23, sol_rk45, t_euler, x_euler, v_euler
```

Metody RK23 i RK45 to rodzaje jednokrokowej metody Rungego-Kutty służącego do rozwiązywania równań różniczkowych, który dostosowuje krok czasowy w trakcie obliczeń. W przypadku RK23 do liczenia i szacowania brane pod uwagę są rząd 2 i 3, natomiast przy RK45-rząd 4 i 5. Są to odpowiedniki funkcji z Matlaba, odpowiednio ode23 i ode45.

Poniżej przedstawiono otrzymaną charakterystykę drgań za pomocą napisanej funkcji Eulera dla położenia i prędkości.



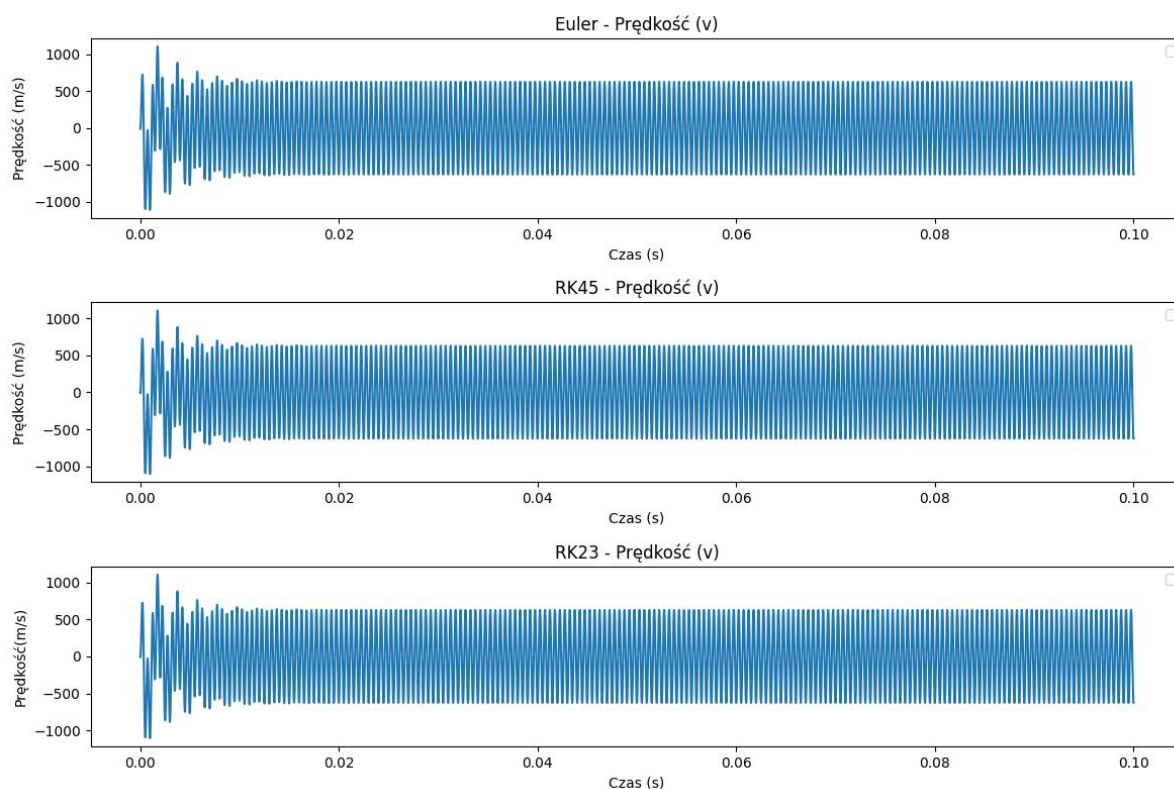
Poniżej przedstawione są charakterystyki dla zmiany położenia od czasu dla metody Eulera oraz dla metod RK23 i RK45.



Porównując otrzymane przebiegi nie zaobserwowano różnicy pomiędzy nimi. Po nałożeniu wszystkich trzech przebiegów na jeden wykres pokryły się one całkowicie.

Analizując charakterystyki zauważono, że wartości wychyleń przebiegów zmniejszały się, a po około 0.01 s wychylenie to normowało się i amplituda była stała.

Poniżej przedstawiono charakterystyki dla zmiany prędkości od czasu dla metody Eulera oraz dla metod RK23 i RK45.

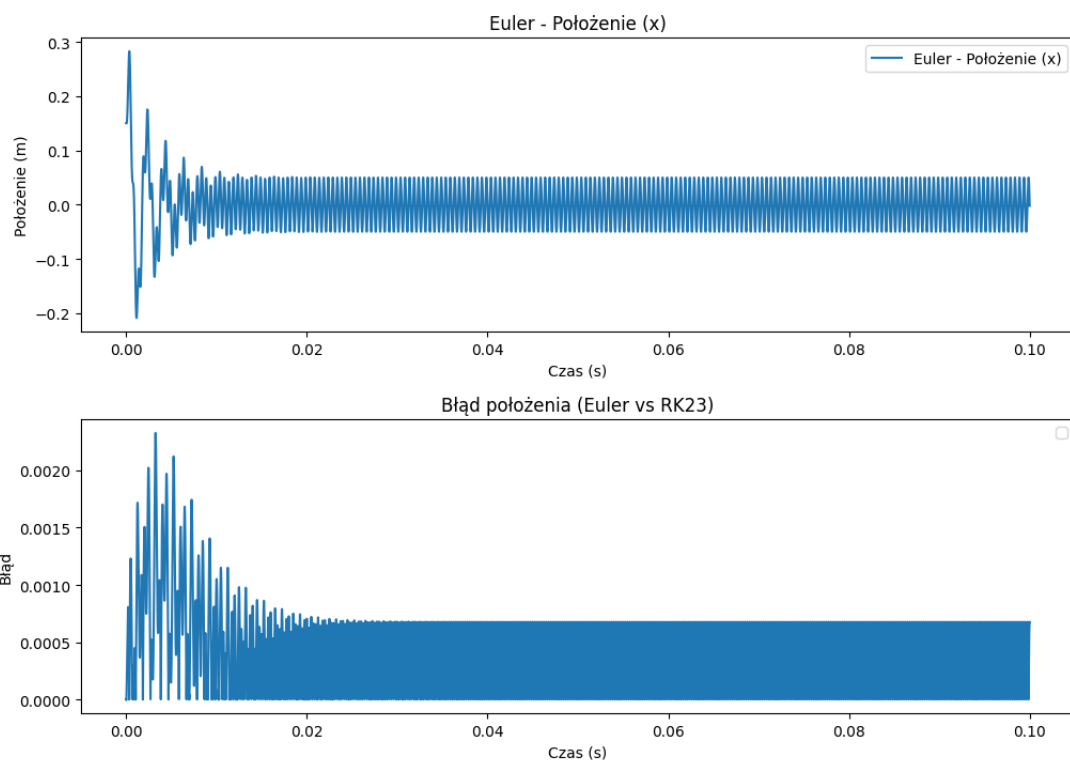


Podobnie jak w poprzednim przypadku, po porównaniu przebiegów, nie zaobserwowano żadnych różnic pomiędzy nimi. Po nałożeniu charakterystyk na jeden wykres również pokryły się one.

Analiza charakterystyk jest analogiczna do przebiegów dla zmiany położenia od czasu. Wahania wartości od początku maleją. W tym przypadku normują się nieco szybciej niż w 0.01 s.

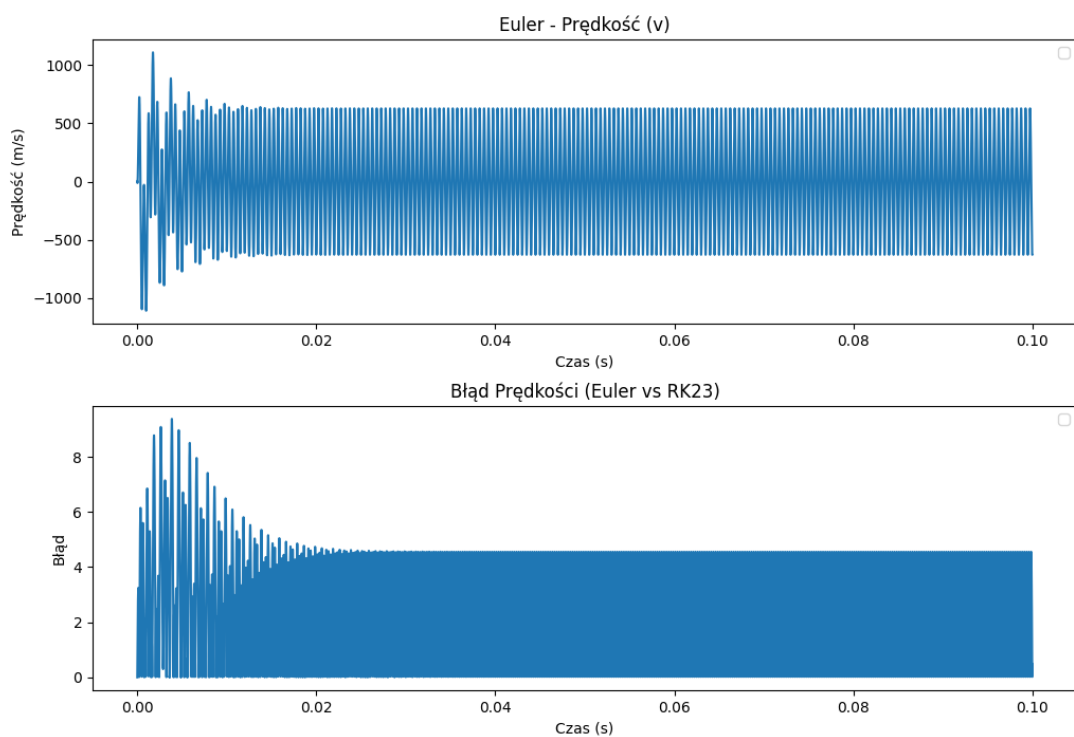
Na podstawie powyższych charakterystyk obliczono następnie błędy bezwzględne od czasu.

Poniżej przedstawiono błąd dla położenia (porównanie z metodą RK23).



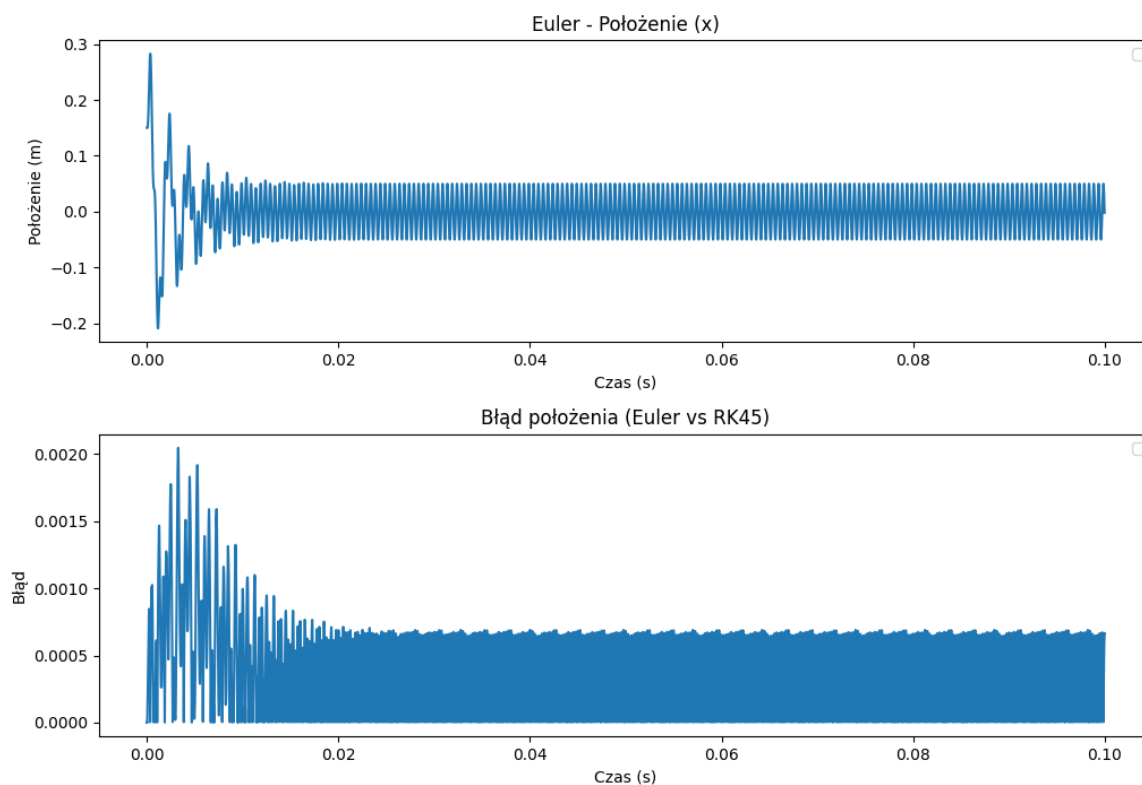
Analizując charakterystykę błędów, możemy zauważyć, że różnica wartości analogicznie do przebiegu położenia od czasu na początku ma większe wartości. Po początkowym chwilowym wzroście wartości, normują się one około 0.02 s na wartości około 0.0007, co pokazuje, że błąd potrzebuje więcej czasu, aby się ustabilizować.

Poniżej przedstawiono błąd dla prędkości (porównanie z metodą RK23).



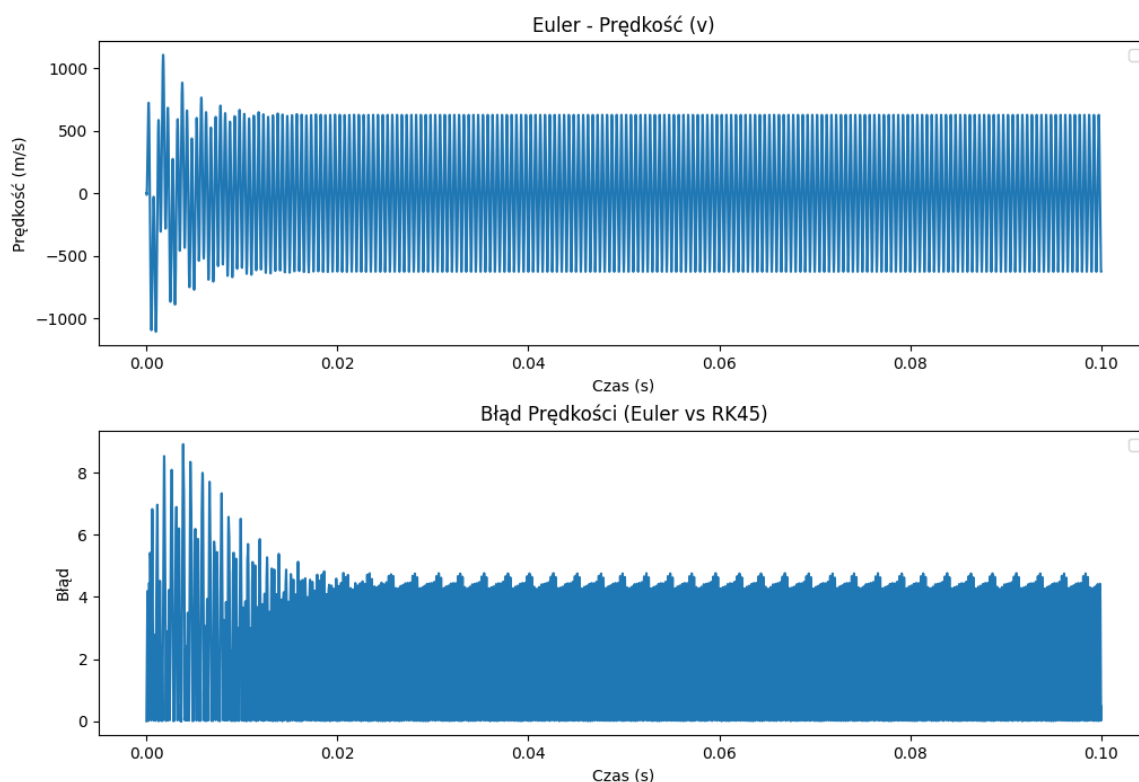
Analizując porównanie wyników prędkości pomiędzy metodą Eulera, a RK23 zauważono, że również i w tym przypadku błąd na początku jest większy. Na początku występuje wzrost wartości wychYLENIA przebiegu, następnie normują się one w około 0.02 s na wartości około 5.

Poniżej przedstawiono błąd dla położenia (porównanie z metodą RK45).



Analizując porównanie błędów dla położenia pomiędzy metodą Eulera, a RK45 zaobserwowano, że wyglądają analogicznie jak przy porównaniu do metody RK23. Po początkowym chwilowym wzroście wartości, normują się one około 0.02 s na wartości około 0.0007 (podobnie jak przy porównaniu do RK23).

Poniżej przedstawiono błąd dla prędkości (porównanie z metodą RK45).



Analizując porównanie błędów dla prędkości pomiędzy metodą Eulera, a RK45 zauważono, że również i w tym przypadku charakterystyka wygląda podobnie. Po nastąpieniu początkowego chwilowego wzrostu wartości, normują się one tak samo jak dla porównania do RK23 w około 0.02 s na wartości około 5.

Poniżej przedstawiono zestawienia liczbowe dla obu metod, gdzie można odczytać największy błąd bezwzględny dla każdej z charakterystyk różnic, wartości metod w tych punktach oraz obliczony błąd względny w %. Ponadto wyznaczono te same parametry dla czasu $t=0.04$, gdzie mamy do czynienia z już unormowanymi drganiami wymuszonymi.

Poniżej przedstawiono dane dla porównania: Euler vs RK45 dla maksymalnego błędów.

```
Maksymalny błąd bezwzględny wartości położenia: 0.002047 m
Wartość x w metodzie Eulera: -0.085778 m, Wartość x dla metody RK45: -0.083731 m
Maksymalny błąd bezwzględny wartości prędkości: 8.912584 m/s
Wartość v w metodzie Eulera: 512.879465 m/s, Wartość v dla metody RK45: 503.966881 m/s
Błąd względny dla maksymalnej wartości x (rk45): 2.445203
Błąd względny dla maksymalnej wartości v (rk45): 1.768486
```

Poniżej przedstawiono dane dla porównania: Euler vs RK45 dla $t=0.04$.

```
Błąd bezwzględny wartości położenia dla t=0.04: 0.000690 m
Wartość x w metodzie Eulera: -0.001992 m, Wartość x dla metody RK45: -0.002682 m
Błąd bezwzględny wartości prędkości dla t=0.04: 0.542537 m/s
Wartość v w metodzie Eulera: -626.993053 m/s, Wartość v dla metody RK45: -626.450516 m/s
Błąd względny dla wartości x dla t=0.04 (rk45): 25.720964
Błąd względny dla wartości v dla t=0.04 (rk45): 0.086605
```

Poniżej przedstawiono dane dla porównania: Euler vs RK23 dla maksymalnego błędu.

```
Maksymalny błąd bezwzględny wartości położenia: 0.002325 m
Wartość x w metodzie Eulera: -0.092289 m, Wartość x dla metody RK23: -0.089964 m
Maksymalny błąd bezwzględny wartości prędkości: 9.372881 m/s
Wartość v w metodzie Eulera: 342.502594 m/s, Wartość v dla metody RK23: 333.129713 m/s
Błąd względny dla maksymalnej wartości x (rk23): 2.584808
Błąd względny dla maksymalnej wartości v (rk23): 2.813583
```

Poniżej przedstawiono dane dla porównania: Euler vs RK23 dla $t=0.04$.

```
Błąd bezwzględny wartości położenia dla t=0.04: 0.000676 m
Wartość x w metodzie Eulera: -0.001992 m, Wartość x dla metody RK23: -0.002669 m
Błąd bezwzględny wartości prędkości dla t=0.04: 0.467554 m/s
Wartość v w metodzie Eulera: -626.993053 m/s, Wartość v dla metody RK23: -626.525498 m/s
Błąd względny dla wartości x dla t=0.04 (rk23): 25.344693
Błąd względny dla wartości v dla t=0.04 (rk23): 0.074627
```

Na podstawie wyników możemy zauważyć, że w przypadku porównania metod Eulera i RK45 różnice są mniejsze, jednak w obu porównaniach są one tego samego rzędu.

Maksymalny błąd bezwzględny dla wartości położenia w obu metodach wyniósł ok. 0,002m, co stanowi w przypadku RK45 błąd względny równy 2,45%, a w RK23 - błąd równy 2,58%.

Dla prędkości błąd względny wyniósł w obu metodach ok. 9m/s (dokładne dane powyżej), co daje błąd względny równy 1,77% dla RK45 i 2,81% dla RK23.

Jeśli chodzi o drgania wymuszone, to sprawdzono różnice wartości w punkcie $t=0,04$. Na podstawie charakterystyk widzimy, że błąd tam się utrzymuje na podobnej wartości i jest on mniejszy niż na początku oscylacji. Dla wartości położenia błąd bezwzględny dla obu metod wynosi ok. 0.0007m, co daje błąd względny równy ok. 25%.

Jest to bardzo wysoki błąd, ponieważ wartości położenia w tym punkcie są rzędu 10^{-3} (błąd rzędu 10^{-4}). W przypadku błędu wartości prędkości dla $t=0,04$, to błąd bezwzględny wynosi ok. 0.5m/s, co daje błąd względny równy 0.087% (RK45) i 0.075% (RK23).

Podsumowując otrzymane wyniki, napisana funkcja realizująca metodę Eulera w przybliżeniu dobrze wylicza równanie różniczkowe, ponieważ różnica między jej wynikami a wynikami z funkcji wbudowanych RK45 i RK23 nie różni się znacząco. Również w przypadku drgań wymuszonych utrzymują się one na stałej wartości. Jedynie niepokojący jest błąd względny dla położenia przy drganiach wymuszonych, ponieważ osiąga ok 25%. Jednak trzeba wziąć pod uwagę fakt, że punkt $t=0,04$ został wzięty przykładowo, i jest to punkt, w którym błąd osiąga lokalnie maksimum, natomiast wartości położenia są rzędu 10^{-3} . W przypadku gdy wybrano punkt, gdzie wartość położenia lokalnie osiąga mniej więcej maksimum ($t=0,03937$), wtedy otrzymujemy mniejszy błąd bezwzględny, a co za tym idzie również względny.

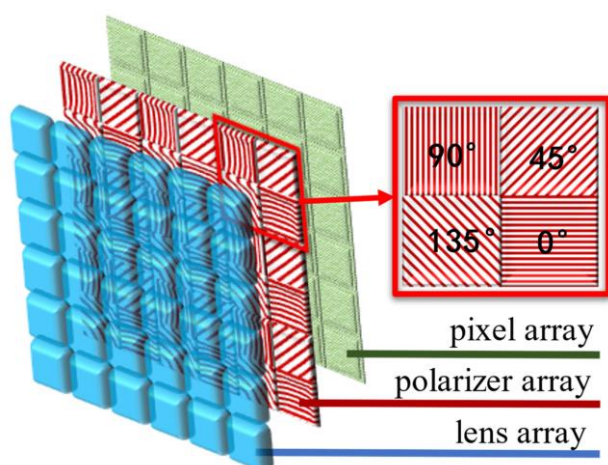

```
Błąd bezwzględny wartości położenia dla  $t=0.04$ : 0.001095 m  
Wartość  $x$  w metodzie Eulera: 0.061439 m, Wartość  $x$  dla metody RK45: 0.060344 m  
Błąd bezwzględny wartości prędkości dla  $t=0.04$ : 6.625681 m/s  
Wartość  $v$  w metodzie Eulera: -241.019137 m/s, Wartość  $v$  dla metody RK45: -247.644818 m/s  
Błąd względny dla wartości  $x$  dla  $t=0.04$  (rk45): 1.814641  
Błąd względny dla wartości  $v$  dla  $t=0.04$  (rk45): 2.675477  
Błąd bezwzględny wartości położenia dla  $t=0.04$ : 0.001229 m  
Wartość  $x$  w metodzie Eulera: 0.061439 m, Wartość  $x$  dla metody RK23: 0.060210 m  
Błąd bezwzględny wartości prędkości dla  $t=0.04$ : 7.194911 m/s  
Wartość  $v$  w metodzie Eulera: -241.019137 m/s, Wartość  $v$  dla metody RK23: -248.214048 m/s  
Błąd względny dla wartości  $x$  dla  $t=0.04$  (rk23): 2.041114  
Błąd względny dla wartości  $v$  dla  $t=0.04$  (rk23): 2.898672
```

Jak widać w tym przypadku błąd, maleje do ok. 2%. Zatem trzeba wziąć pod uwagę, że zarówno wartości, jak i błąd oscylują i błąd również zmienia swoją wartość.

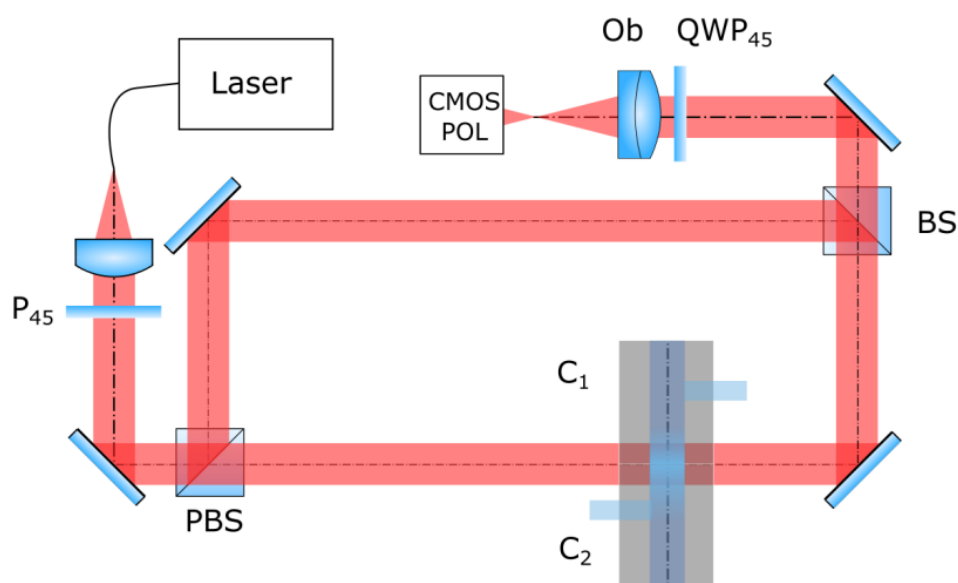
Zadanie 2.

Wstęp teoretyczny.

Celem projektu było określenia dyfuzji leków przez biomembrany lub biofilmy. Biofilm to ochronna błona bakterii. Wyniki zostały uzyskane dzięki metodzie interferometrii „jednego strzału”, wykorzystującej czujnik CMOS czuły na polaryzację (Rysunek 1). W ten sposób zbierając jeden obraz fazowy za pomocą polaryzacyjnej wersji interferometru Macha-Zehndera (Rysunek 2) uzyskiwano cztery interferogramy z przesuniętą fazą. Na podstawie czterech obrazów wykorzystując metodę czasowej dyskretnej zmiany fazy wyznaczono fazę badanego obiektu, którym była kuweta zawierająca biofilm oraz lek.



Rysunek 1 Budowa sensora wyposażonego w macierz mikropolaryzującą.



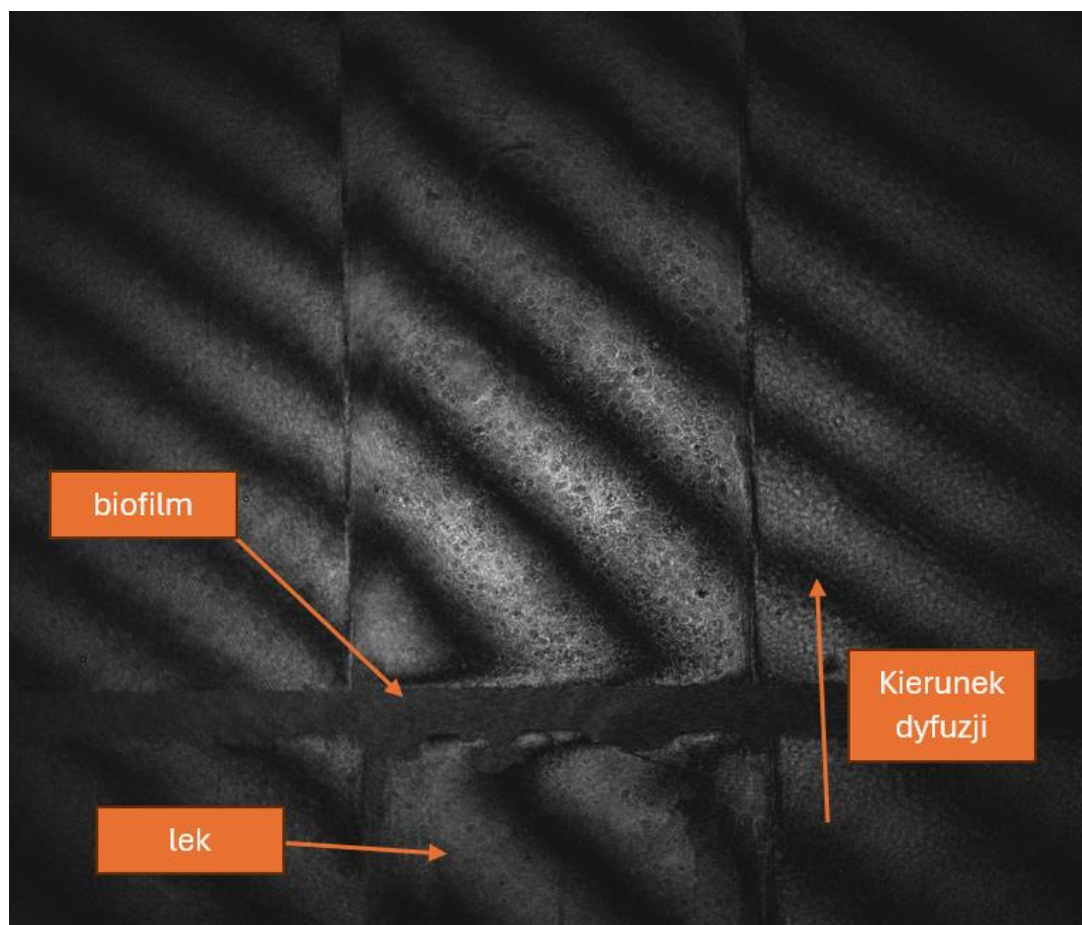
Rysunek 2 Laser: laser VBG 633 nm, polaryzator liniowy P_{45} , PBS: rozdzielacz wiązki polaryzacyjnej, C_1 , C_2 : odpowiednio górny i dolny przedział kuwety, z koncentracjami $C_2 > C_1$, BS: dzielnik wiązki, QW P_{45} - płytka ćwierćfalowa, Ob: obiektyw zmiennoogniskowy 80-200

mm, CMOS POL: kamera CMOS wyposażona w sensor z mikropolarizatorem (IMX250MZR, Sony), rozmiar piksela: 3,45 μm , 2448 x 2048 pikseli.

Powiązanie zmian w parametrach fizycznych z procesami biologicznymi jest wyzwaniem. Jedną z metod rozwiązania tego problemu jest badanie dyfuzji leku przez biofilm za pomocą interferometrii laserowej. Na przykład, gdy parametry biofilmu przestają się zmieniać pomimo ciągłej dyfuzji antybiotyku przez biofilm, można stwierdzić, że bakterie przestały reagować na działanie antybiotyku. Informacje o tym, przy jakim stężeniu antybiotyku i po jakim czasie ten proces się rozpoczyna, są bardzo cenne dla biologów

W niniejszym projekcie przeprowadzono badanie dyfuzji ampicyliny przez biofilm *Pseudomonas aeruginosa* PAO1. *Pseudomonas aeruginosa* to tlenowa bakteria Gram-ujemna, oportunistyczny patogen ludzki, powodujący przewlekłe i ostre infekcje ran oparzeniowych, dróg oddechowych i moczowych. Szczególnie narażeni są pacjenci z nowotworami, zakażeniem HIV oraz osoby z obniżoną odpornością. Wysoce zróżnicowane gatunki *P. aeruginosa*, zdolne do tworzenia biofilmów, są powszechne w środowisku i naturalnie odporne na wiele leków, jednak ampicylina proponowana do tego badania jest znana ze swojej zdolności do penetracji biofilmu.

Pojedynczy zebrany interferogram odpowiadający polaryzacji 0 wyglądał następująco:



W tej technice pomiarowej badana jest faza fali świetlnej będąca wynikiem interferencji wiązki obiektowej oraz przedmiotowej:

$$\varphi = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta n d,$$

gdzie:

d - grubość kuwety,

λ – długość fali,

Δn – współczynnik załamania.

Na tej podstawie stężenie substancji będzie równa:

$$C(x, t) = C_0 + \alpha \Delta n,$$

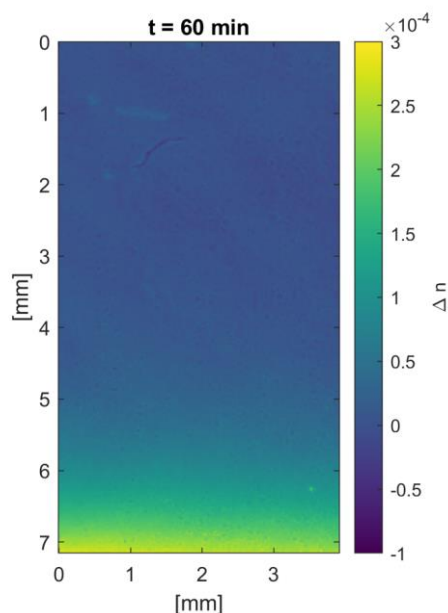
α – współczynnik proporcjonalności stężenia,

Wartość stężenia, które przedyskutowało przez membranę będzie równa:

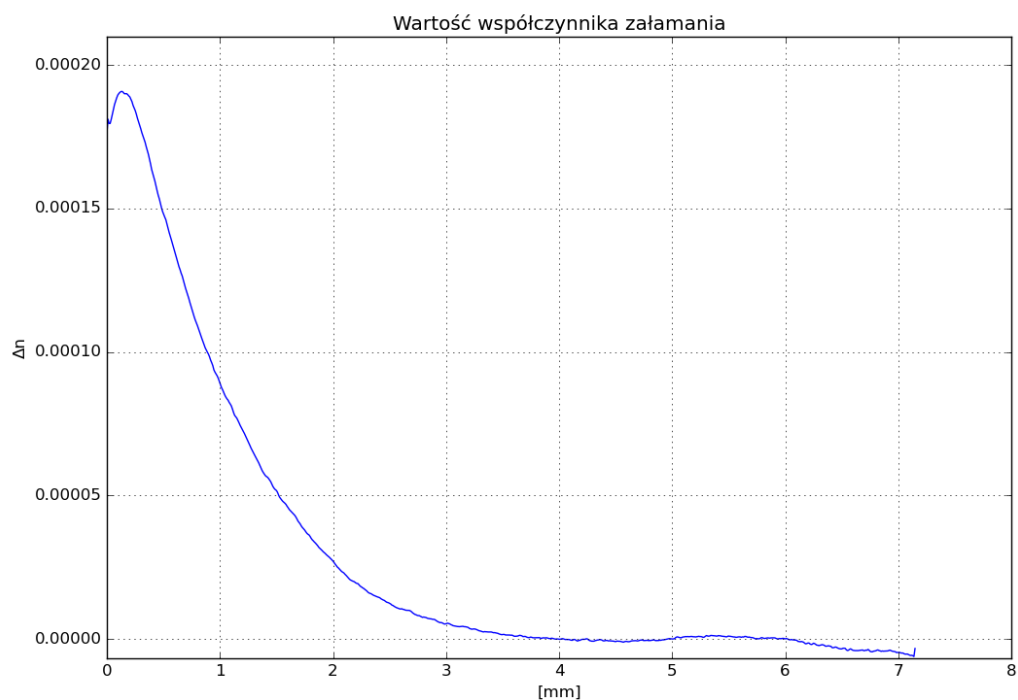
$$N(t) = S \int_0^{\delta} C(x, t) dx,$$

Część obliczeniowa

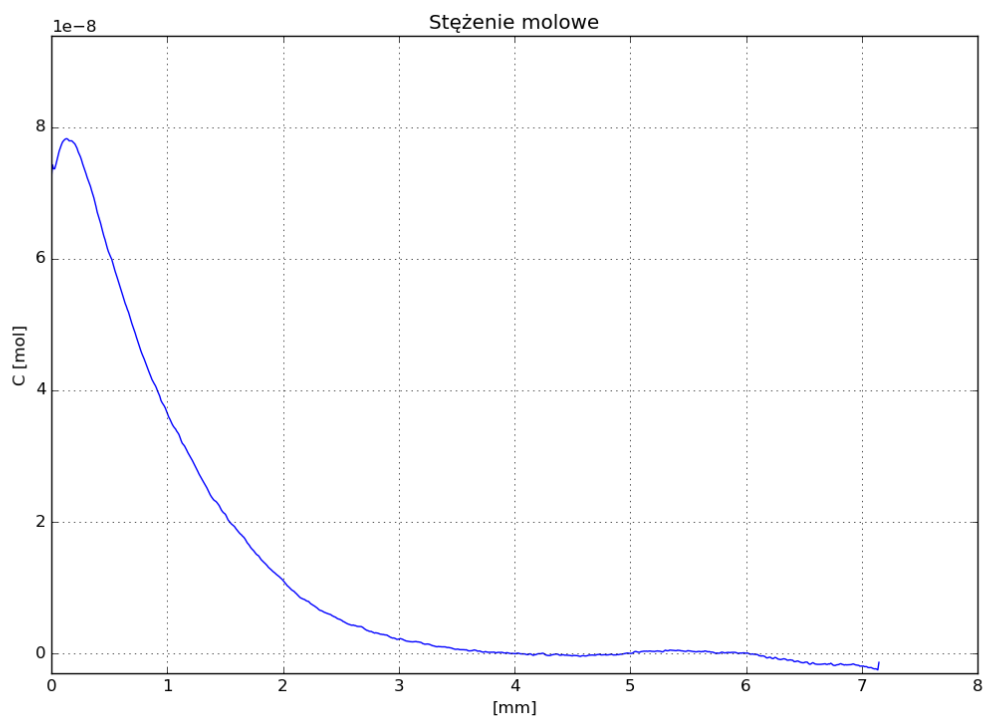
Wczytano zestaw 60 pomiarów zbieranych podczas godzinowego badania dyfuzji ampicyliny przez biofilm. Wczytano już przetworzone mapy 2D reprezentujące współczynnik załamania w kuwecie. Poniżej przedstawiono współczynnika załamania dla ostatniego pomiaru wykonanego po 60 minutach.



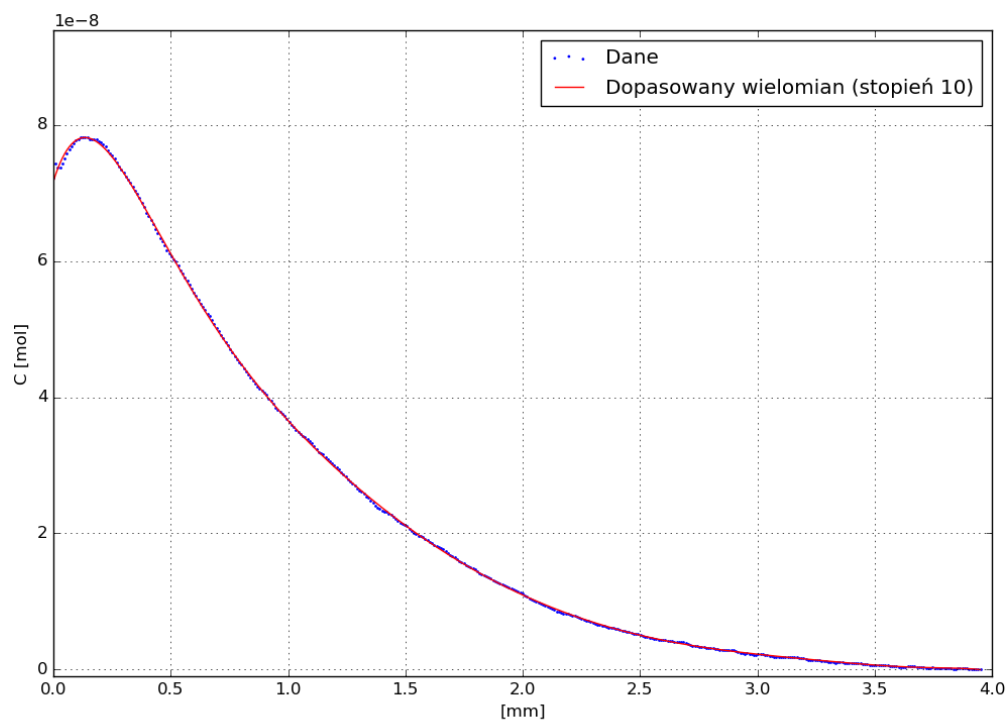
Z macierzy 2D wyznaczono wartość współczynnika załamania w przekroju próbki jako uśrednioną wartość Δn każdym wierszu, którą przedstawiono poniżej.



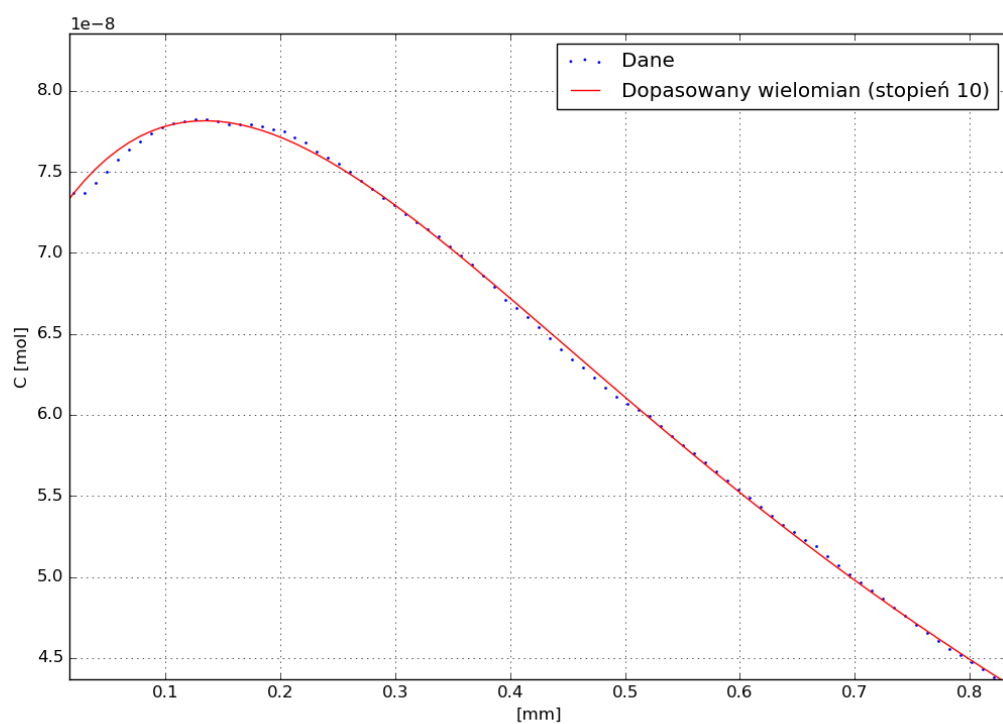
Poniżej umieszczono wyznaczoną wartość stężenia substancji poprzez pomnożenie wartości Δn przez współczynnik proporcjonalności stężenia (należało również uwzględnić parametry układu pomiarowego takie jak powiększenie oraz wielkość piksela).



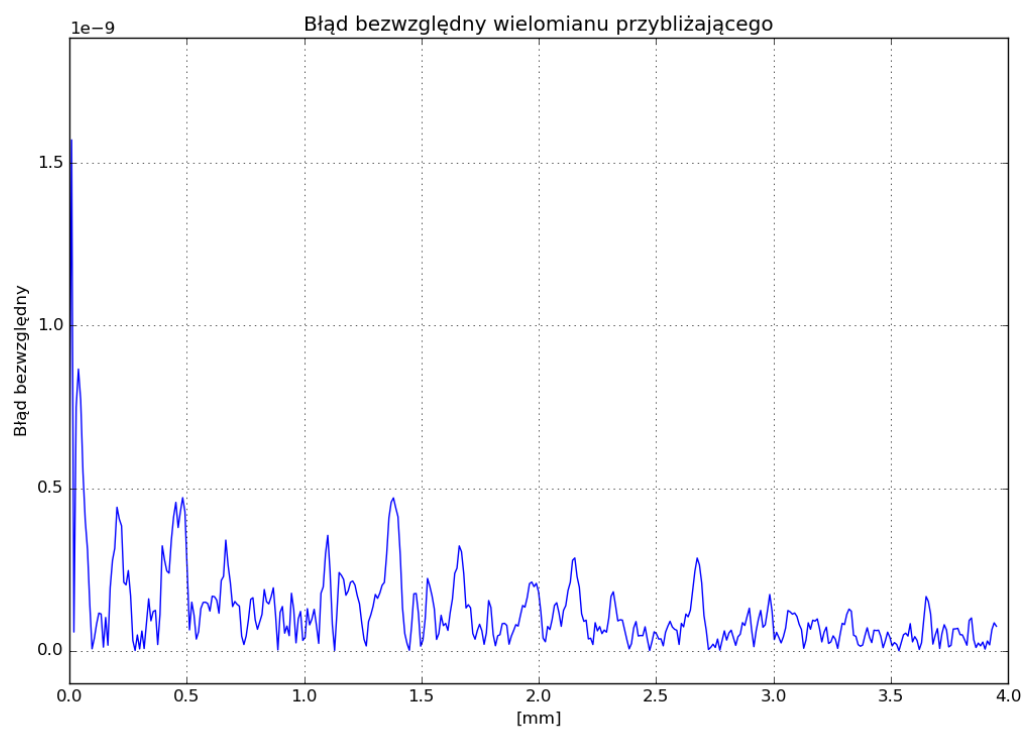
Przyjęto przedział od 0 do 4 mm, ponieważ to miejsce zostało przyjęte jako płaszczyzna odniesienia wyznaczona z obszaru referencyjnego. Dla tak przygotowanego obszaru wykonano interpolację punktów przez zastosowanie wielomianu 10 stopnia (funkcja polyfit z biblioteki numpy), która została zaprezentowana poniżej.



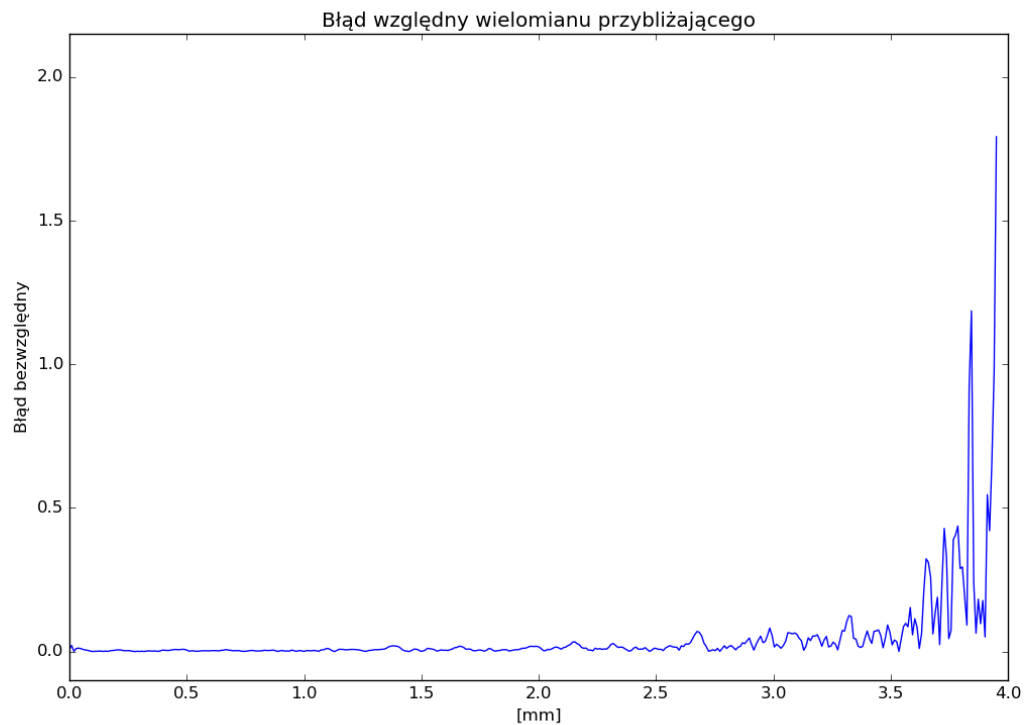
Poniżej widać przebieg przybliżonej funkcji w powiększeniu.

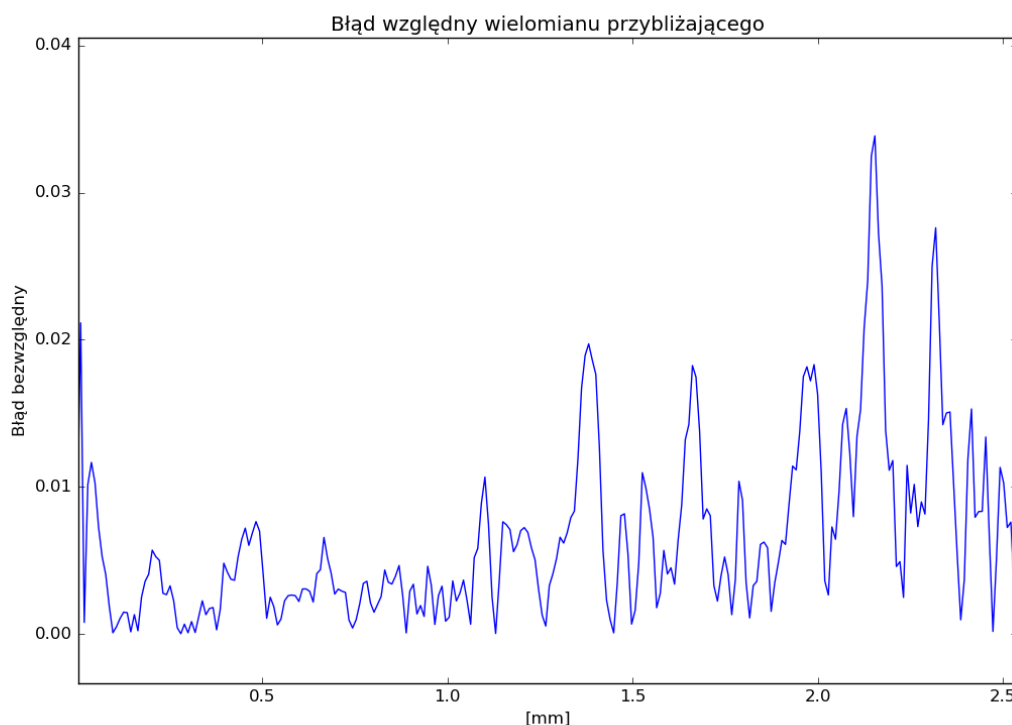


Wyznaczono wartości błędu bezwzględnego wielomianu interpolacyjnego, które zaprezentowane zostały na poniższym wykresie.



Charakterystyki poniżej przedstawiają wartości błędu względnego wielomianu interpolacyjnego.





Błąd względny w części obszaru o najwyższym stężeniu nie przekraczał 0,04%. Dla małych wartości stężenia otrzymano maksymalny błąd względny równy 1,7%. Na tej podstawie uznano, że dokładność przybliżenia była wystarczająca. W celu potwierdzenia jakości interpolacji wyznaczono wartość współczynnika determinacji:

Wartość R^2 : 0.999944764189407

Wyznaczony wielomian stopnia 10 opisuje 99,99448% danych. Uznano, że jest to wystarczająca dokładność do wyznaczenia stężenia substancji. Zwiększenie stopnia wielomianu wprowadzało znaczące błędy przy operacji całkowania.

Całkowanie

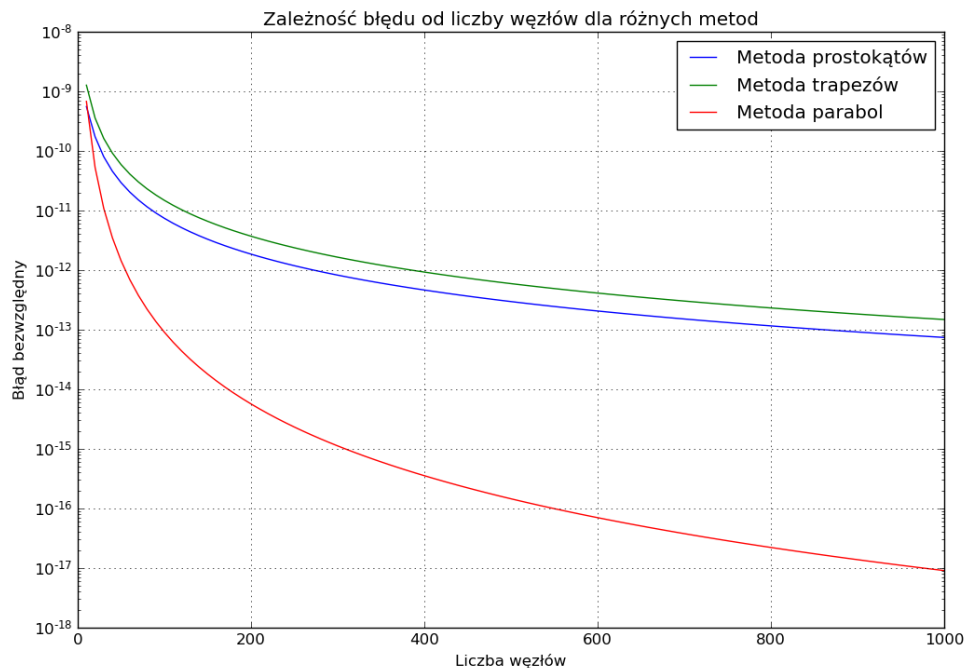
Wartość stężenia, które przedyskutowało przez biofilm, możemy wyznaczyć obliczając całkę z funkcji opisującej stężenie. W tym celu wykorzystano funkcję quad z biblioteki scipy.integrate. Uzyskano następującą wartość stężenia:

Stężenie substancji od $x=0.0$ do $x=3.9509399873232836$ wynosi: $8.862394766443552e-08$

W celu zbadania wpływu antybiotyku na biofilm należałoby wyznaczyć wartość całki dla wszystkich obrazów zebranych podczas godzinnego badania.

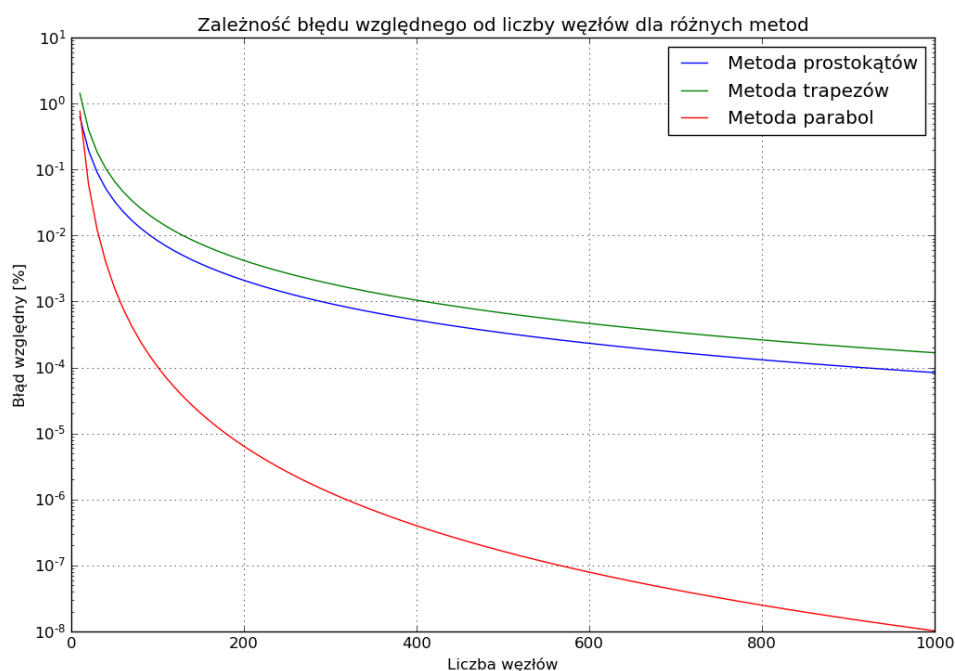
Wykonano pomiar dokładności trzech metod całkowania numerycznego (prostokątów, trapezów oraz parabol) w zależności od liczby węzłów na jakie podzielono obszar całkowania.

Otrzymano następujące wartości błędu bezwzględnego, które zaprezentowano na poniższym wykresie.



Na podstawie wykresu błędu bezwzględnego od liczby węzłów, wyraźnie możemy zaobserwować zależność dokładności uzyskanych wyników od zastosowanej metody. Najdokładniejszą metodą jest najbardziej złożona metoda parabol, a najmniej dokładną metoda trapezów. Możemy zaobserwować, że wraz ze wzrostem liczby węzłów, a co za tym idzie ilości przedziałów błąd wyznaczenia wartości całki maleje. Dla liczby węzłów równej 1000 w przypadku metody prostokątów różnica w stosunku do wyniku dokładnego jest rzędu 10^{-14} , trapezów jest rzędu 10^{-13} , a w przypadku metody parabol 10^{-18} .

Otrzymano następujące wartości błędu względnego i zaprezentowano na wykresie poniżej.



Na podstawie uzyskanych wyników możemy zaobserwować, że metoda. Błąd względny dla metody parabol przy 1000 węzłów wynosi:

```
Błąd względny metody prostokątów wynosi: 8.373460595804934e-05
Błąd względny metody trapezów wynosi: 0.00016747106988521774
Błąd względny metody parabol wynosi: 1.0243231922552585e-08
```

Możemy zaobserwować, że metoda parabol pozwoliła na uzyskanie wyniku z błędem względnym równym jedynie $1,034 \cdot 10^{-8}$. Uzyskany wynik mógłby stanowić podstawę do wnioskowania na wpływu antybiotyku na biofilm.