14. 再议 1stOpt 复合数据微分方程拟合求解

之前给出的《1stOpt 复合数据微分方程拟合求解》一文中，介绍了通过引入新的变量及实施复合函数的求导变换，从而实现解决复合数据微分方程拟合问题。其实 1stOpt 中还有一种更简单便捷的方式可处理这类问题，在此结合实际案例给予介绍展示。

14.1 案例一

已知微分方程如下：

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = k_1x_1 + k_2x_2 + k_5 \\ \frac{dx_2}{dt} = k_3x_1 + k_4x_2 + k_5 \end{cases} \tag{14-1}$$

同时，初始条件为：t=0 时 x1=0.01,x2=-1。表.1 数据中给出了复合数据"x1+exp(x2)"及 x2 一阶导数的系列值。

表 14.1 数据：

t	0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1
x1+exp(x2)	-0.401, -1.036, -1.641, -2.094, -2.658, -3.224, -3.817, -4.536, -6.048, -7.070
$x_2' = \frac{dx_2}{dt}$	0.747, 0.129, -0.340, -0.784, -1.075, -1.541, -1.962, -2.226, -2.994, -3.325

两种求解方式分述如下。

方法一：按之前介绍过的，通过引入一个新的变量：

$$x_3 = x_1 + \exp(x_2) \tag{14-2}$$

两边求导得：

$$\frac{dx_3}{dt} = \frac{dx_1}{dt} + \exp(x_2)\frac{dx_2}{dt} \tag{14-3}$$

这样就得到一组新的微分方程组：

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = k_1x_1 + k_2x_2 + k_5 \\ \frac{dx_2}{dt} = k_3x_1 + k_4x_2 + k_5 \\ \frac{dx_3}{dt} = \frac{dx_1}{dt} + \exp(x_2)\frac{dx_2}{dt} \end{cases} \tag{14-4}$$

注意，因为：x3=x1+exp(x2)，则可以基于 x1 和 x2 的起始值计算出 x3 的初始值。

求解代码 14-1

```
Constant v=[0,0.01,-1];
InitialODEValue t=v1,x1=v2,x2=v3,x3=v2+exp(v3);
Variable t,x3,x2';
ODEFunction x1'=k1*x1+k2*x2+k5;
            x2'=k3*x1+k4*x2+k5;
            x3'=x1'+exp(x2)*x2';
Data;
0.1 -0.401 0.747
0.2 -1.036 0.129
0.3 -1.641 -0.340
0.4 -2.094 -0.784
0.5 -2.658 -1.075
0.6 -3.224 -1.541
0.7 -3.817 -1.962
0.8 -4.536 -2.226
0.9 -6.048 -2.994
1 -7.070 -3.325
```

计算结果

```
Root of Mean Square Error (RMSE): 0.12431145304933
Sum of Squared Residual: 0.309066747184717
Correlation Coef. (R): 0.997658672899351
R-Square: 0.995322827611295
Adjusted R-Square: 0.992984790316031
Determination Coef. (DC): 0.995047773073827
F-Statistic: 212.035904639413

Parameter            Best Estimate
-------------------- -------------
k1    -0.977487901515442
k2    9.15933011312369
k5    0.417624848780165
k3    0.908685675306948
k4    -1.22762160264351
```

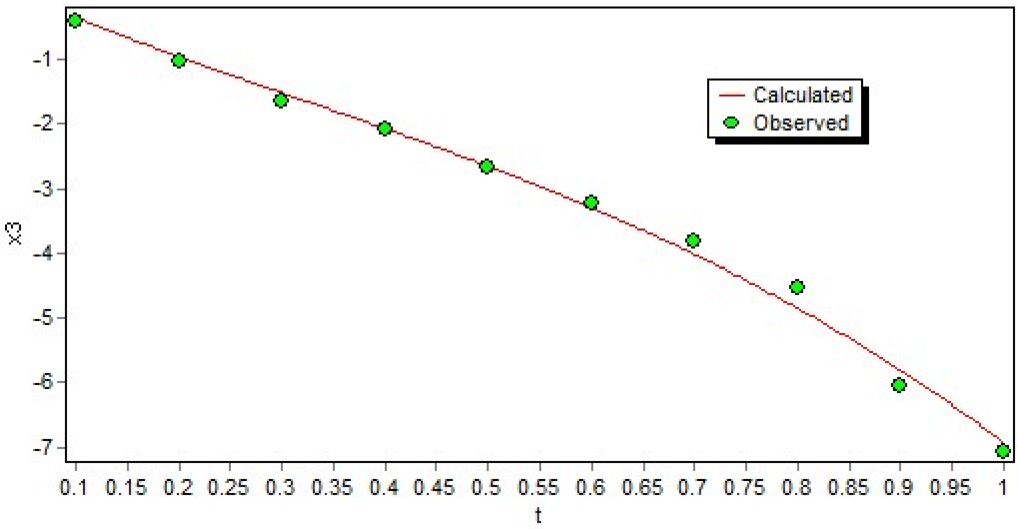

图 14-1.微分方程 x3 拟合对比图

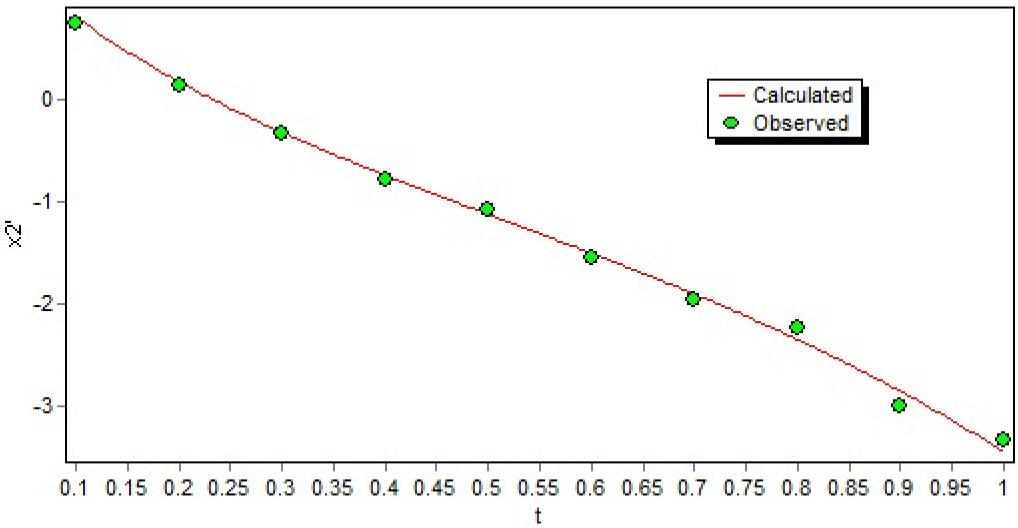

图 14-2.微分方程 x2’拟合对比图

方法二：直接定义求解：

通过“Variable”关键字直接定义复合数据变量，简单方便，不需要做任何其它额外工作。

求解代码 14-2

```
InitialODEValue t=0,x1=0.01,x2=-1;
Variable t,x1+exp(x2),x2';
ODEFunction x1'=k1*x1+k2*x2+k5;
            x2'=k3*x1+k4*x2+k5;
Data;
0.1 -0.401 0.747
0.2 -1.036 0.129
0.3 -1.641 -0.340
0.4 -2.094 -0.784
```

```
0.5 -2.658 -1.075
0.6 -3.224 -1.541
0.7 -3.817 -1.962
0.8 -4.536 -2.226
0.9 -6.048 -2.994
1 -7.070 -3.325
```

上述代码可以得到完全一致的结果。

14.2 案例二

有如下微分方程组及对应的数据，数据只知道 y1 与 y4 之和，同时已知 y1 和 y4 的初值分别为 0.9922 和 0.0.试通过微分方程拟合求解参数 k1，k2 及 k3.该案例是之前复合数据微分方程求解的文章中介绍使用过。

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dx} = k_1 y_1 \\ \frac{dy_2}{dx} = k_1 y_1 - k_2 y_2 \\ \frac{dy_3}{dx} = k_2 y_2 - k_3 y_3 \\ \frac{dy_4}{dx} = k_1 y_1 + k_2 y_2 + k_3 y_3 \end{cases} \tag{14-5}$$

表 14.2 数据

x	0,3,28,53,78,103,183,303,463,603
y1+y4	0.9922,0.9771,0.9098,0.7725,0.7146,0.7299,0.8097,0.8666,0.8777,0.8799

引入新变量的方法之前文章已经给出，这里给出直接定义求解的代码。

代码 14-3

```
InitialODEValue x=0,y1=0.9922,y4=0;
Parameter k1,k2,k3 ;
Variable x,y1+y4;
ODEFunction y1'=k1*y1;
            y2'=k1*y1-k2*y2;
            y3'=k2*y2-k3*y3;
            y4'=k1*y1+k2*y2+k3*y3;
Data;
x=0,3,28,53,78,103,183,303,463,603;
y1+y4=0.9922,0.9771,0.9098,0.7725,0.7146,0.7299,0.8097,0.8666,0.8777,0.8799
```

上述代码采用直接定义直接求解的方式，可以得到与“引入变量”方法完全相同的结果。

结果：

```
Root of Mean Square Error (RMSE): 0.00940056092631374
Sum of Squared Residual: 0.000883705457293367
Correlation Coef. (R): 0.894478947584964
```

R-Square: 0.800092587672704
Adjusted R-Square: 0.88532235210771
Determination Coef. (DC): 0.886887791400166
F-Statistic: 73.6570830936666

Parameter   Best Estimate
-------------------- -------------
k1   -0.0329169165695859
k2   0.0461211734519064
k3   0.0132797805588232
y2 Initial Value   0.951345178127449
y3 Initial Value   1.95592364637967

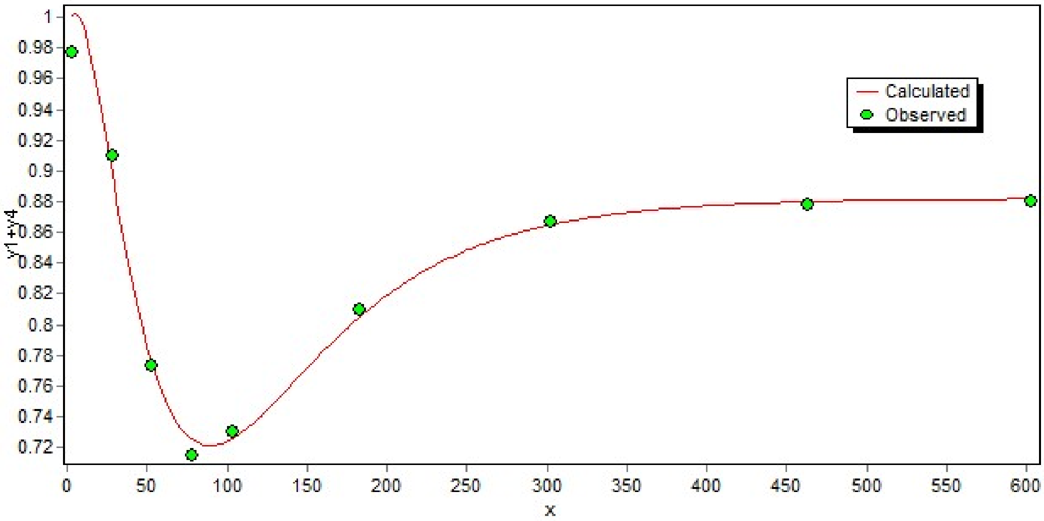

图 14-3.复合微分方程数据直接定义求解拟合对比图

14.3 小结

复合数据微分方程拟合问题可以直接定义求解，相比引入新的变量再通过复合函数求导变换的方法，更简单方便，对于任意复杂甚至不可求导的复合函数情况，也可以轻松应对处理。