3. 隐式常微分方程拟合求解

1stOpt 可以很容易处理常微分方程拟合求解问题，书写代码也与一般的拟合代码无太大区别，除了用“ODEFunction”代替“Function”。但如果微分方程是隐函数形式，则不能直接求解，必须先进行转换成显示形式后，方能进行求解。

下面以三个实例分别介绍一般常微分方程拟合及不同形式的隐式常微分方程拟合。

3.1 一般正常微分方程（显示微分方程）求解

有如下微分方程组及相关数见表 3.1，其中 x 数据缺失，k1、k2 和 k3 三个待求参数。

$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = -k_1 y - k_2 xy + k_3 x \\ \frac{dx}{dt} = k_1 y - k_3 x \end{cases} \tag{3-1}$$

表 3.1 微分方程拟合数据

t	0,0.5,1.5,3.0,6.0,12.0,18.0,24.0,36.0
x	0,66.8041,40.0633,22.8622,8.2312,3.1214,1.8126,1.0809,0.7138

求解代码 3-1

```
Variable t,y;
ODEFunction y'=-k1*y-k2*x*y+k3*x;
                    x'=k1*y-k3*x;
Data;
t=[0,0.5,1.5,3.0,6.0,12.0,18.0,24.0,36.0];
y=[0,66.8041,40.0633,22.8622,8.2312,3.1214,1.8126,1.0809,0.7138];
```

结果：

```
Root of Mean Square Error (RMSE): 0.196645683621201
Sum of Squared Residual: 0.309356199094795
Correlation Coef. (R): 0.999970760574821
R-Square: 0.999941522004586
Adjusted R-Square: 0.999918130806421
Determination Coef. (DC): 0.999923730885994
F-Statistic: 17388.9308232477

Parameter                Best Estimate
-------------------- -------------
k1     86.5885826504692
k2     0.0337527437846824
```

k3	2.59305444270488
x Initial Value	56146.9478141654

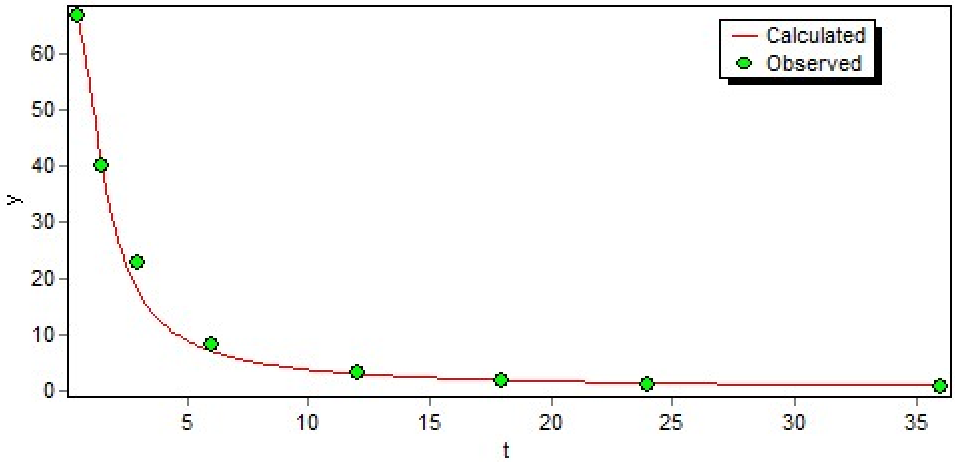

图 3-1 显示常微分方程拟合结果

计算结果中，因为 x 系列值缺失，x 的起始值（x Initial Value）将被自动视为一待求参数。该道题看似不复杂，但要得到上述稳定唯一最优结果，用其它软件工具都是有相当难度的。

3.2 隐式微分方程拟合之一

微分方程形式及数据如下：

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dx} = k_1 y_1 \\ \frac{dy_2}{dx} = \frac{dy_1}{dx} - k_2 y_2 \\ \frac{dy_3}{dx} = k_2 y_2 - k_3 y_3 \\ \frac{dy_4}{dx} = \frac{dy_1}{dx} + k_2 y_2 + k_3 y_3 \end{cases} \tag{3-2}$$

表 3.2 隐式微分方程拟合数据

x	0,3,28,53,78,103,183,303,463,603
y1	0.9922,0.9602,0.8352,0.5316,0.2798,0.1241,0.0175,0.0000,0.0000,0.0000
y2	0.0000,0.0169,0.0746,0.2409,0.4348,0.6058,0.7922,0.8666,0.8777,0.8799

上述微分方程组中的第二及第四个微分方程式的右边都含有微分项（dy1/dx），该微分项与第一个微分方程式的左边一样（阶数也相同），微分方程组属于隐式，1stOpt 9.0 之前的版本无法直接求解，因此需要进行简单的代换：将第二及第四个微分方程式的右边部分的微分项“dy1/dx”（参照微分方程式一）

用“k1*y1”替换，从而将隐式转换成显示形式如下：

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dx} = k_1y_1 \\ \frac{dy_2}{dx} = k_1y_1 - k_2y_2 \\ \frac{dy_3}{dx} = k_2y_2 - k_3y_3 \\ \frac{dy_4}{dx} = k_1y_1 + k_2y_2 + k_3y_3 \end{cases} \tag{3-3}$$

求解代码 3-2

```
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=[0.9922,0.9602,0.8352,0.5316,0.2798,0.1241,0.0175,0.0000,0.0000,0.0000];
y4=[0.0000,0.0169,0.0746,0.2409,0.4348,0.6058,0.7922,0.8666,0.8777,0.8799];
```

该微分方程组中 y2 和 y3 系列值缺失，其起始值也被自动视为未知参数求解。

结果：

```
Root of Mean Square Error (RMSE): 0.0534684363911388
Sum of Squared Residual: 0.0514597264220386
Correlation Coef. (R): 0.991238848138189
R-Square: 0.982554454058324
Adjusted R-Square: 0.97218519420709
Determination Coef. (DC): 0.977613829576548
F-Statistic: 18.3132100961998

Parameter           Best Estimate
-------------------- -------------
k1    -0.0141381652083349
k2    0.0362911495440166
k3    0.0109004606404055
y2 Initial Value    -2.2215185242052
y3 Initial Value    8.29247074749778
```

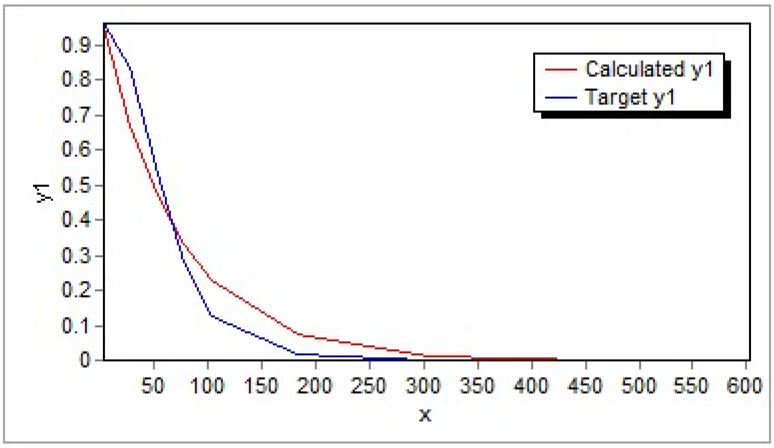

图 3-2 隐式常微分方程 y1 拟合结果

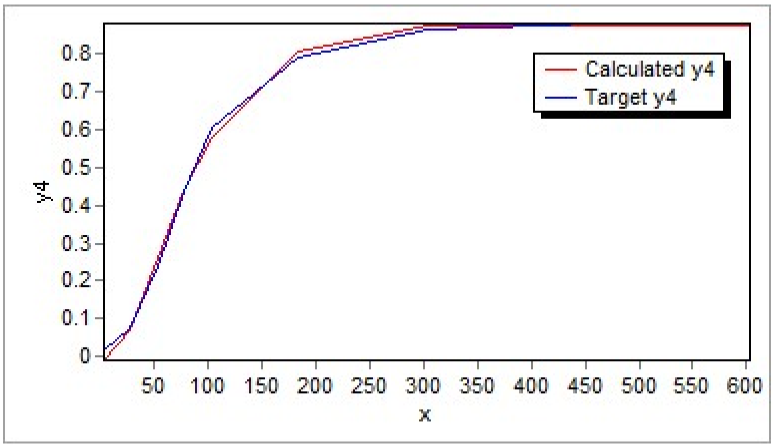

图 3-3 隐式常微分方程 y4 拟合结果

3.3 隐式微分方程拟合之二

微分方程形式及数据如下：

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = k_1 x\left(1 - \frac{x}{0.5033}\right) - k_3 \frac{dy}{dt} \\ \frac{dy}{dt} = k_2 y\left(1 - \frac{y}{3.0548}\right) - k_4 \frac{dx}{dt} \end{cases} \tag{3-4}$$

表 3.3

t	0,0.1,0.2,0.3,0.4,0.5,0.6,0.7,0.8
x	0.210,0.264,0.332,0.417,0.523,0.654,0.818,1.021,1.271
y	1.955,2.201,2.474,2.777,3.113,3.484,3.894,4.343,4.834

很明显，该微分方程组是隐式的，而且由于每个微分方程式左右都含有最高阶微分项，无法像前面案例二中那样进行简单的替换即可由隐式转换为显示。仔细观察上述微分方程组，如果令 dx/dt=fx, dy/dt=fy，其它均视为常数项，则可先

将微分方程组视为简单的二元一次代数方程组：

$$\begin{cases} fx = c1 - k3 \cdot fy \\ fy = c2 - k4 \cdot fx \end{cases} \tag{3-5}$$

其中：$c1 = k1 \cdot x \cdot (1 - \frac{x}{0.5033})$，$c2 = k2 \cdot \mathrm{y} \cdot (1 - \frac{y}{3.0548})$

对上述代数方程组就行简单的消元求解，可得：

$$fy = \frac{c2 - k4 \cdot c1}{1 - k4 \cdot k3} \tag{3-6}$$

由此，原微分方程组变换为：

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = fx = c1 - k3 \cdot fy = c1 - k3 \cdot \frac{c2 - k4 \cdot c1}{1 - k4 \cdot k3} \\ \frac{dy}{dt} = fy = \frac{c2 - k4 \cdot c1}{1 - k4 \cdot k3} \end{cases} \tag{3-7}$$

再将 c1 和 c2 表达式代入上式，原隐式微分方程组则变换成为标准的显示微分方程组，由此可编写如下求解代码：

求解代码 3-3

```
Variable t,x,y;
ConstStr c1=k1*x*(1-x/0.5033), c2=k2*y*(1-y/3.0548);
ConstStr fy=(c2-k4*c1)/(1-k4*k3);
Parameter k(4);
ODEFunction x'=c1- k3*fy;
            y'=fy;
Data;
t=[0,0.1,0.2,0.3,0.4,0.5,0.6,0.7,0.8];
x=[0.210,0.264,0.332,0.417,0.523,0.654,0.818,1.021,1.271];
y=[1.955,2.201,2.474,2.777,3.113,3.484,3.894,4.343,4.834];
```

结果：

```
Root of Mean Square Error (RMSE): 0.0716666417920553
Sum of Squared Residual: 0.0821777207320124
Correlation Coef. (R): 0.994549294097538
R-Square: 0.989128298389912
Adjusted R-Square: 0.980999696121201
Determination Coef. (DC): 0.962704408343618
F-Statistic: 12.2216309417145

Parameter                Best Estimate
--------------------     -------------
k1    0.541031512280236
k2    -0.653104293700696
k3    -0.361233810380086
k4    -2.96850001675036
```

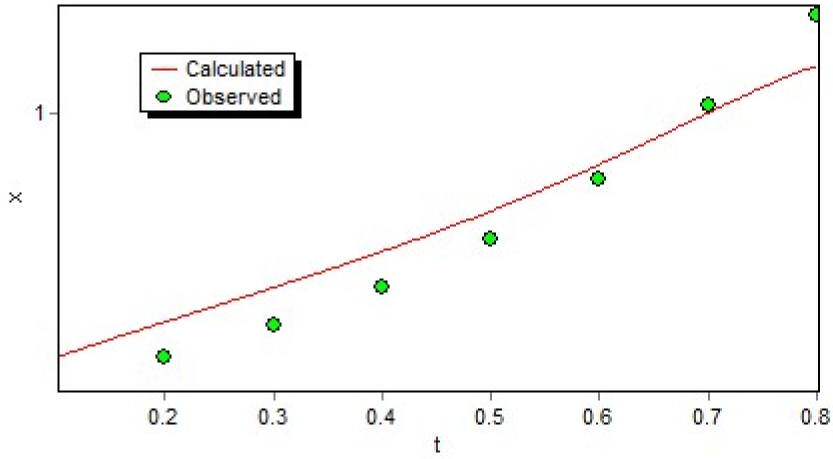

图 3-4 隐式常微分方程 x 拟合结果

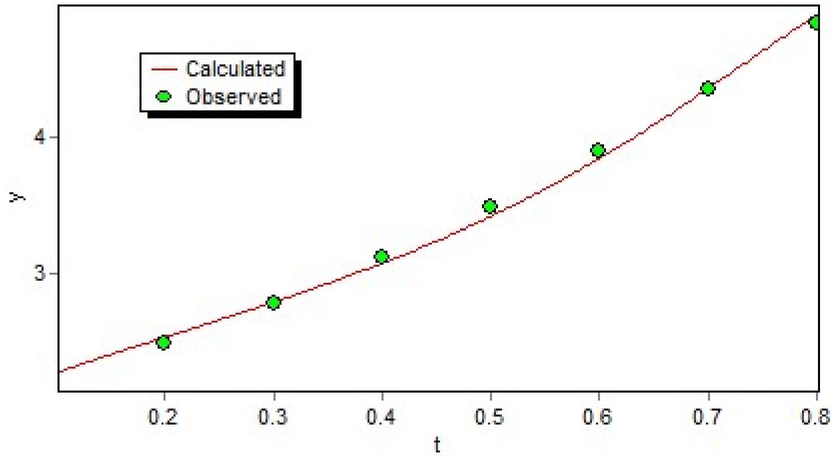

图 3-5 隐式常微分方程 y 拟合结果

3.4 小结

标准显示微分方程组拟合可以直接进行计算，但如果是隐式格式则需要通过一定的替代变换，将隐式格式微分方程组转换成显示格式后方可进行计算求解。

边值问题微分方程（BVP）实际上都可视为微分方程拟合问题去求解，也可理解为 BVP 问题就是普通微分方程拟合的特例。