$\boxed{\text{Chemické a biologické modely popsané ODR 1. řádu}}$

Reakční rychlost udává změnu produkce chemické látky způsobenou chemickou reakcí v izotermálním prostředí za jednotku času. Reakční rychlost je úměrná frekvenci/četnosti molekulárních srážek. Experimentální data ukazují, že tato frekvence/četnost srážek je úměrná součinu molárních koncentrací chemických látek, které do reakce vstupují. Zákon (pravidlo) působících hmot je tvrzení (fyzikální chemie), které říká, že:

(*) **Reakční rychlost se rovná (modulo násobení konstantou) součinu molárních koncentrací chemických látek.**

Příklady ① V případě chemické reakce „A produkuje P", kterou zapisujeme $\boxed{A \xrightarrow[k]{} P}$, kde A, P jsou chemické látky a k je konstanta vstupující do (*) a udávající rychlost produkce P z látky A, dostáváme rovnici

molární

(1) $$\frac{dp}{dt} = ka,$$

kde malá písmena $a, p, x, \ldots$ značí molární koncentraci látek $A, P, X, \ldots$, tj. počty molů látek A, P, X na jednotku objemu.

Z pohledu veličiny A (koncentrace a), reakce $A \xrightarrow[k]{} P$ má tvar

(1') $$\frac{da}{dt} = -ka,$$

což ve spojení s (1) dává

(1'') $$\frac{d}{dt}(p+a) = 0 \quad \Longrightarrow \text{ součet koncentrací se nemění v čase}$$

② Pokud dvě molekuly A produkují P, tj. $2A \xrightarrow{k} P$, pak dostáváme

(2) $$\frac{dp}{dt} = ka^2 \quad \text{a} \quad \frac{da}{dt} = -2ka^2$$

③ Pokud látky A, B vstupují do chemické reakce, která vytváří P, tzn.

(3) $$A + B \xrightarrow[k]{} P$$

$\boxed{O_2 + O \to O_3}$

pak rovnice popisující změnu koncentrací a, b a p mají tvar

(3') $$\frac{dp}{dt} = kab, \quad \frac{da}{dt} = -kab \quad \text{a} \quad \frac{db}{dt} = -kab,$$

což implikuje

$$(3'') \qquad \frac{d}{dt}(2p+a+b)=0.$$

(4) V některých procesech (katalýza), chemická látka vstupuje do chemické reakce, ale zároveň se v ní i produkuje. Máme-li např. reakci

$$(4) \qquad A+X \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} 2X$$

pak, protože X je na obou stranách rovnice dostáváme

$$(4') \qquad \frac{dx}{dt} = k_1 a x - 2k_{-1}x^2.$$

Je-li $a>0$ ve velké koncentraci, lze ji považovat za konstantu a dostáváme

$$(4'') \qquad \frac{dx}{dt} = cx(1-\lambda x).$$

Je výhodné převést rovnice do bezrozměrného tvaru. Pro typické konstantní hodnoty t_* a x_* časové škály a veličiny x definujeme nové proměnné $\tilde{t} := \frac{t}{t^*}$ a $\tilde{x} := \frac{x}{x^*}$. Odvodíme z (4') rovnici pro $\tilde{x}(\tilde{t})$. Protože

$$\frac{d\tilde{x}}{d\tilde{t}} = \frac{1}{x^*}\frac{dx}{d\tilde{t}} = \frac{1}{x^*}\frac{dx}{dt}\frac{dt}{d\tilde{t}} = \frac{t^*}{x^*}\frac{dx}{dt} \overset{(4')}{=} \frac{t^*}{x^*}cx(1-\lambda x)$$

$$= t^*c\,\tilde{x}(1-\lambda x^*\tilde{x}) = \tilde{x}(1-\tilde{x}),$$

kde jsme položili $t^*c=1$ a $\lambda x^*=1$, tzn. $t^*=\frac{1}{c}$ a $x^*=\frac{1}{\lambda}$.

Rovnice v bezrozměrném tvaru

LOGISTICKÁ ROVNICE (4''') $\frac{dy}{dt} = y(1-y)$ neobsahuje žádné parametry modelu.

(5) V chemických rovnicích může vystupovat další katalyzátor Y:

$$(5) \qquad A+X \xrightarrow{k_1} 2X, \quad X+Y \xrightarrow{k_2} 2Y, \quad Y \xrightarrow{k_3} A$$

Pak zákon působících hmot dává

$$(5') \qquad \frac{dx}{dt} = k_1ax - k_2xy, \quad \frac{dy}{dt} = k_2xy - k_3y, \quad \frac{da}{dt} = k_3y - k_1ax$$

Tedy po sečtení

$$(5'') \qquad \frac{d}{dt}(x+y+a)=0$$

Je-li $a>0$ ve výrazně větším množství, pak (5') se redukuje na rce

$$(5''') \qquad \boxed{\frac{dx}{dt} = cx(1-\beta y) \quad \text{a} \quad \frac{dy}{dt} = k_2y\left(x-\frac{k_3}{k_2}\right)}, \quad c,\beta,k_2,k_3>0$$

což je systém dvou rovnic 1. řádu. Systém (5'') je blízká LOTKA-VOLTERROVĚ RCI.

Některé procesy, jako radioaktivní rozpad nebo růst populace, uzavírají chemické reakce, přesto je struktura rovnic, které tyto procesy popisují, podobná.

(6) Rovnice

(6) $\frac{dx}{dt} = ax$ kde a je rychlost změny x

je rovnice produkce/růstu pokud $\boxed{a>0}$, a
rovnice rozpadu/anihilace pokud $\boxed{a<0}$.

Je-li produkce x dána přítomností jiného materiálu y, pak

(6') $\frac{dx}{dt} = ay$

Je-li $b \in \mathbb{R}^+$ (konstanta), pak $\frac{dx}{dt} = b$ je rovnice pro růst/spotřeba s konstantní rychlostí.

Některé biologické procesy jsou popisovány schématicky/symbolicky s obecnými reliminantami, např. i komplikovaný proces je třeba popsán:

(6'') $\boxed{\begin{aligned} \dot{x} &= f(x,y) \\ \dot{y} &= g(x,y) \end{aligned}}$

POROVNEJ S (6).

V případě, kdy $\boxed{\frac{\partial f}{\partial y} < 0 \quad a \quad \frac{\partial g}{\partial x} > 0}$ systém (6'') popisuje aktivační/inhibiční procesy,

neboť y inhibuje (způsobuje zánik/rozpad) x a x aktivuje růst y.

V případě, kdy $\boxed{\frac{\partial f}{\partial y} < 0 \quad a \quad \frac{\partial g}{\partial x} < 0}$ systém (6'') popisuje soutěživý systém, kdy se oba druhy vzájemně potlačují.

(7) Vývoj populace

(7i) Matematický model infekce bude sledovat tři disjunktní skupiny obyvatelstva: I označuje infikované, S označuje neinfikované, ale schopné infekci STIKU a U označuje počet uzdravených. Model je založen na dvou postupných

(7) $S + I \xrightarrow{\beta} 2I \quad a \quad I \xrightarrow{\gamma} U,$ β ... rychlost infekce

které vedou na následující systém 3 rovnic pro evoluci S, I a U:

$$(7') \qquad \boxed{\frac{dS}{dt} = -\beta S I, \quad \frac{dI}{dt} = \beta S I - \gamma I \quad a \quad \frac{du}{dt} = \gamma I}$$

Virová nákaza může být charakterizována počtem nenapadených X, počtem napadených Y a počtem virů V. Protože X je napaden virem V, a V poté snižováním X, dostáváme

$$X + V \xrightarrow{\beta} Y.$$

Viry V se nezvyšují samy o sobě, ale rostou proporcionálně s Y. Růst X je konstantní a rychlost šíření nemoci je úměrná X. Podobně Y zaniká s počtem Y. Tedy:

$$(7'') \qquad \begin{cases} \dfrac{dX}{dt} = \lambda - \mu X - \beta X V \\ \dfrac{dY}{dt} = \beta X V - \alpha Y \\ \dfrac{dV}{dt} = k Y - u V - \beta X V \end{cases}$$

- Malthusův zákon = základní vztah pro populační dynamiku

$$(7''') \qquad \frac{dN}{dt} = bN \qquad\qquad N \ldots \text{počet (obyvatel)}$$

Velmi dobrý model pro počáteční fázi. Chybný*) a pohledu chování pro velké časové období. Víme, řešením (7''') s $\boxed{N(0) = N_0 > 0}$ že

$$(7'''') \qquad N(t) = N_0 e^{bt} \longrightarrow +\infty \quad \text{pro } t \to +\infty.$$

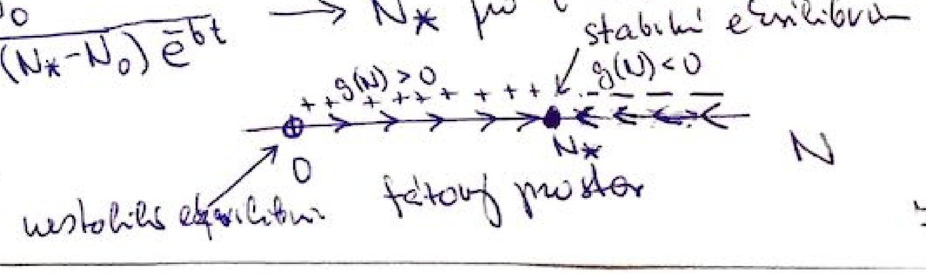
- Lepší model je tzv. logistická rovnice, kdy počet jedinců začne klesat jakmile N překročí kritickou hodnotu $N_* > 0$. Je-li $b > 0$ primární rychlost růstu v počáteční fázi, začínce $1 - \frac{N}{N_*}$ je inhibiční faktor, pak

$$\boxed{(7''''') \qquad \frac{dN}{dt} = b\left(1 - \frac{N}{N_*}\right) N \qquad s \quad 0 < N_0 < N_*.}$$

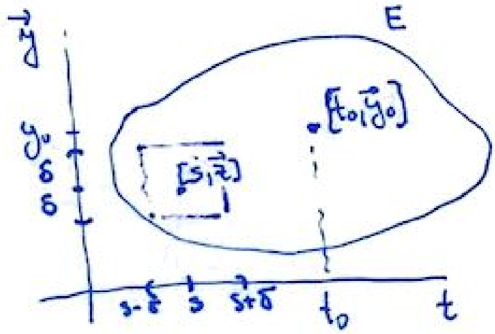
DÚ: NAKRESLETE SI SMĚROVÉ POLE.

Metodou separovaných proměnných dostaneme

$$(7^6) \qquad N(t) = \frac{N_* N_0}{N_0 + (N_* - N_0)\, e^{-bt}} \longrightarrow N_* \quad \text{pro } t \to +\infty$$



*) neodpovídající realitě.



7.3 ZÁKLADNÍ EXISTENČNÍ VĚTY

Uvažujme úlohu

$$(P)\qquad \boxed{\begin{aligned}\vec{y}\,' &= \vec{f}(t,\vec{y})\\ \vec{y}(t_0) &= \vec{y}_0\end{aligned}}$$

kde $t_0\in\mathbb{R}$, $\vec{y}_0\in\mathbb{R}^N$ a $\vec{f}=(f_1,\dots,f_N): \underset{\subset \mathbb{R}\times\mathbb{R}^N}{E} \to \mathbb{R}^N$ jsou data úlohy (počáteční čas, počáteční hodnota, pravá strana), přičemž

$$(t_0,\vec{y}_0)\in E \subseteq \mathbb{R}\times\mathbb{R}^N$$

kde E je <u>otevřená</u> podmnožina v $\mathbb{R}\times\mathbb{R}^N$, tzn. že pro každý bod $(s,\vec{z})\in E$ existuje $\delta>0$ tak, že $(s-\delta,s+\delta)\times B_\delta(\vec{z})\subset E$, kde $B_\delta(\vec{z}) := \{\vec{y}\in\mathbb{R}^N;\ |\vec{z}-\vec{y}|_{\mathbb{R}^N}<\delta\}$

<u>Definice</u> Řekneme, že funkce $\vec{y}:(a,b)\to\mathbb{R}^N$ je řešením <u>Cauchyho</u> <u>(počáteční) úlohy (P)</u> pokud $\vec{y}\,'(t)=\vec{f}(t,\vec{y}(t))$ pro všechna $t\in(a,b)$ a $\vec{y}(t_0)=\vec{y}_0$, kde $t_0\in(a,b)$.

Motivace studovat systémy ODR 1. řádu pramení jednak z mnoha aplikací (viz některé výše uvedené) a také z možnosti zapsat skalární diferenciální rovnici k-tého řádu typu

(odr) $\qquad y^{(k)} = h(t,y,y',\dots,y^{(k-1)})$

jako systém ODR 1. řádu. Stačí totiž označit

$$y_1 := y,\quad y_2 := y',\ \dots,\ y_k := y^{(k-1)}$$

a pak

$$y_1' = y_2,\quad y_2' = y_3,\ \dots,\ y_{k-1}' = y_k \quad\text{a}\quad y_k' \overset{\text{(odr)}}{=} h(t,y_1,\dots,y_k),$$

což je totéž jako $\boxed{\vec{y}\,' = \vec{f}(t,\vec{y})}$, kde $\vec{y}=(y_1,\dots,y_k)^T$ a

$$\vec{f}(t,\vec{y}) = (y_2,y_3,\dots,y_k,h(t,y_1,\dots,y_k))^T.$$

Důležitý krok! zapamatovat!

Základní matematická teorie pro úlohu (P) je založena na dvou předpokladech kladených na funkci $\vec{f}$:

(P1) $\vec{f}: E \to \mathbb{R}^N$ je spojitá na otevřené množině $E \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d$

tzn. f je spojitá v každém bodě $(t_*, \vec{z}_*) \in E$

tzn. pro všechna $(t_*, \vec{z}_*) \in E$ a

$$(\forall \varepsilon > 0)(\exists \delta > 0)\ \forall (t, \vec{z}) \in (t_* - \delta, t_* + \delta) \times B_\delta(\vec{z}_*)\ \|\vec{f}(t, \vec{z}) - \vec{f}(t_*, \vec{z}_*)\|_{\mathbb{R}^N} < \varepsilon$$

kde $B_\delta(\vec{z}_*) := \{\vec{z} \in \mathbb{R}^N;\ \|\vec{z} - \vec{z}_*\|_{\mathbb{R}^N} \le \delta\}$

a $\|\vec{z}\|_{\mathbb{R}^N} := \left(\sum_{i=1}^{N} z_i^2\right)^{1/2}$.

Podobně jako pro $h \in C(\langle \alpha, \beta \rangle)$ platí, že h je omezená na $\langle \alpha, \beta \rangle$, tak z (P1) plyne: $\left[\forall\, \sigma := \{(t, \vec{z}) \in E;\ t \in \langle t_0 - a, t_0 + a \rangle \text{ a } \|\vec{z} - \vec{y}_0\|_{\mathbb{R}^N} \le b\}\right]$

$$\exists M = M_\sigma > 0\ \forall (t, \vec{z}) \in \sigma\ \ \|\vec{f}(t, \vec{z})\| \le M$$

(P2) $\vec{f}: E \to \mathbb{R}^N$ je na E lokálně lipschitzovská vzhledem k $\vec{y}$;

tzn. $\forall\, \sigma$ definované výše $\exists \lambda = \lambda_\sigma > 0$ tak, že

$$\forall\ (t, \vec{y}_1), (t, \vec{y}_2) \in \sigma \quad \|\vec{f}(t, \vec{y}_1) - \vec{f}(t, \vec{y}_2)\|_{\mathbb{R}^N} \le \lambda \|\vec{y}_1 - \vec{y}_2\|_{\mathbb{R}^N}$$

Věta 7.2 (Peanova věta o existenci)

Je-li splněn předpoklad (P1), pak $\underline{\exists \delta > 0}$ a $\vec{y}: (t_0 - \delta, t_0 + \delta) \to \mathbb{R}^N$ řešící Cauchyho úlohu (P).

Věta 7.3 (Picard-Lindelöfova věta o existenci a jednoznačnosti)

Platí-li předpoklady (P1) a (P2), pak existuje právě jedna ($\exists!$) $\vec{y}: (t_0 - \delta, t_0 + \delta) \to \mathbb{R}^N$ řešící Cauchyho úlohu

$$\left[\ \delta := \min\left\{a, \frac{b}{M}\right\}\ \right]$$

Obě věty dokážeme v Kapitole 9.

Příklad Uvažujme rov typu $y' = |y|^\alpha$, ($\alpha > 0$.) Pak $f(t,y) = g(y) := |y|^\alpha$ je sudá.
Zkoumejme, pro jaká α je $g(y)$ lipschitzovská.

Řešení Je-li $\alpha \geq 0$, pak $D_g = \mathbb{R}$. Navíc $g \in C(\mathbb{R})$ a tedy $g \in C([-A,A])$ a tak g je omezená na $[-A,A]$ pro $A > 0$ libovolné, tzn. $\forall A > 0 \ \exists M = M_A \quad |g(y)| \leq M$ na $[-A,A]$.

Je-li $y_1 \neq y_2$, $y_1, y_2 \in [-A,A]$, pak

(i) $$\left|\frac{g(y_1) - g(y_2)}{y_1 - y_2}\right| \leq \frac{2M}{\delta} \qquad \text{pro } |y_1 - y_2| > \delta$$

(ii) $$\left|\frac{g(y_1) - g(y_2)}{y_1 - y_2}\right| \simeq \left|g'(y_1)\right| \qquad \text{pro } |y_1 - y_2| \leq \delta$$
δ malé dostatečně

ale $|g'(y_1)| \leq \alpha |y_1|^{\alpha-1} \leq \alpha |A|^{\alpha-1}$ je-li $\alpha \geq 1$

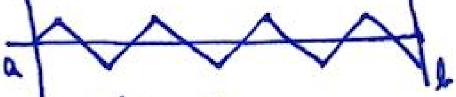
$\leq \frac{\alpha}{\epsilon^{1-\alpha}}$ je-li $\alpha \in (0,1)$ a $|y_1| \geq \epsilon$

Tedy: pro $\alpha \geq 1$, $g(y) = |y|^\alpha$ je lipschitzovská (na $[-A,A]$) s konstantou
$$\lambda := \max\left\{\frac{2M}{\delta}, \alpha |A|^{\alpha-1}\right\}.$$

: pro $\alpha \in (0,1)$, $g(y) = |y|^\alpha$ je lipschitzovská na $[\epsilon, A]$, $\epsilon > 0$,
s $$\lambda := \max\left\{\frac{2M}{\delta}, \frac{\alpha}{\epsilon^{1-\alpha}}\right\}.$$ ☒

Příklad: (i) Funkce, která je $C^1((a,b))$ je na (a,b) lokálně lipschitzovská

(ii) Funkce $g(y) = y^2$ je lipschitzovská na $\langle -A, A\rangle$ pro $A > 0$ libovolné, ale není lipschitzovská na $\mathbb{R}$.
Je však na $\mathbb{R}$ lokálně lipschitzovská.

(iii) Funkce  je na $\langle a,b\rangle$ lipschitzovská, ale není $C^1((a,b))$.

Uvažujme rovnici se separovanými proměnnými, tj.

$$y' = f(t)\,g(y).$$

Z Věty 7.3, a z předchozích příkladů plyne následující tvrzení.
z Věty 7.1

<u>Tvrzení</u> A Jsou-li $f \in C((t_0-\delta, t_0+\delta))$ a $g \in C(y_0-\Delta, y_0+\Delta)$, pak v bodě $[t_0, y_0]$ může dojít k větvení řešení pouze tehdy když

(i) $g(y_0) = 0$,

a

(ii) $g'(y_0)$ neexistuje resp. g není v okolí y_0 lipschitzovská.

Doplňme si o ještě jedno tvrzení, které se týká slepování řešení

<u>Tvrzení B</u> (O slepování řešení) Nechť $\vec{y}_1$ řeší $\vec{y}\,' = \vec{f}(t, \vec{y})$ na (a,b) a $\vec{y}_2$ stejnou rovnici na (b,c) a navíc platí:

(*) $$\lim_{t\to b-} \vec{y}_1(t) = \lim_{t \to b+} \vec{y}_2(t) = \vec{z} \quad \text{a} \quad \vec{f} \text{ je spojitá v } (b, \vec{z}),$$

pak

$$\vec{y}(t) := \begin{cases} \vec{y}_1(t) & \text{pro } t \in (a,b), \\ \vec{z} & \text{pro } t = b, \\ \vec{y}_2(t) & \text{pro } t \in (b,c), \end{cases}$$

je řešením $\vec{y}\,' = \vec{f}(t, \vec{y})$ na (a,c). □

Dk Stačí dokázat $\vec{y}\,'(b) = f(b, \vec{z})$. Z (*) dále plyne.

$$\lim_{t \to b-} \vec{f}(t, \vec{y}_1(t)) = \vec{f}(b, \vec{z}) = \lim_{t\to b+} \vec{f}(t, \vec{y}_2(t))$$

$$\lim_{t\to b-} \vec{f}(t, \vec{y}_1(t)) = \lim_{t \to b-} y_1'(t) = y_1'(b-), \qquad \lim_{t\to b+} \vec{f}(t, \vec{y}_2(t)) = \lim_{t\to b+} y_2'(t) = y_2'(b+),$$

kde jsme využili věty o jednostranných derivacích. ▨