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 $\underbrace{}_{\text{molárních}}$ koncentrací chemických látek, které do reakce vstupují. Zákon (pravidlo) působících hmot je tvrzení (fyzikální chemie), které říká, že:

(*) $\boxed{\text{Reakční rychlost se rovná (modulo násobení konstantou) součinu molárních koncentrací chemických látek.}}$

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 $A, P, X, \ldots$, na jednotku objemu.
tj. počty molů látek A, P, X

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

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 vytvoří P, tzn.

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

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

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 jej 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 $\quad (4''') \quad \frac{dy}{dt} = y(1-y)$ 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

$$(5') \qquad \frac{dx}{dt} = k_1 ax - k_2 xy, \quad \frac{dy}{dt} = k_2 xy - k_3 y, \quad \frac{da}{dt} = k_3 y - k_1 ax$$

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

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

což je systém dvou rovnic 1. řádu. Systém (5''') je blízký

LOTKA–VOLTERROVĚ RCI.

Některé procesy, jako radioaktivní rozpad nebo růst populace, uzahrnují 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 proměnnými, 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 neinfekované, ale schopné infekci šířit a U označuje počet uzdravených. Model je založen na dvou postupových

(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:

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

Virová nákaza může být charakterizována počtem nenapadených X, počtem napadených Y a počtem virů V. Protože X je napaden virem V, a V roste 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:

$$(7'') \quad \begin{cases} \dfrac{dX}{dt} = \lambda - \mu X - \beta X V \\[2mm] \dfrac{dY}{dt} = \beta X V - \alpha Y \\[2mm] \dfrac{dV}{dt} = kY - uV - \beta X V \end{cases}$$

- Malthusův zákon = základní vztah pro populační dynamiku

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

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

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

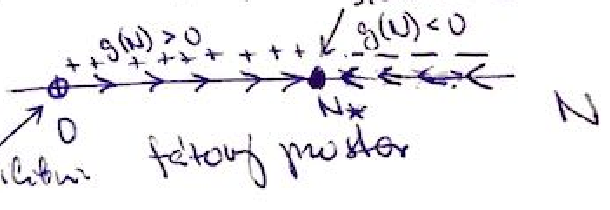
- Lepší model je tzv. logistická rovnice, kdy počet jedinců začne klesat jakmile N překročí kritickou hodnotu $N_* > 0$. Je-li $b > 0$ primární rychlost růstu v počáteční fázi, zadruhé $1 - \frac{N}{N_*}$ je inhibiční faktor, pak

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

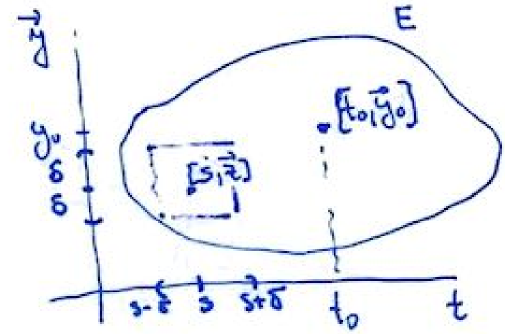
DÚ: NAKRESLETE SI SMĚROVÉ POLE!

Metodou separovaných proměnných dostaneme

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



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

Definice Řekneme, že funkce $\vec{y} : (a,b) \to \mathbb{R}^N$ je řešením Cauchyho (počáteční) úlohy (P) pokud $\vec{y}'(t) = \vec{f}(t,\vec{y}(t))$ pro všechna $t \in (a,b)$ a $y(t_0) = \vec{y}_0$, 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 rov k-tého řádu typu

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

jako systém ODR 1. řádu. Stačí totiž označit

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

a pak

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

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 <u>spojitá na otevřené množině $E \subset \mathbb{R}\times\mathbb{R}^d$</u>

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

tzn. pro všechna $(t_*, z_*) \in E$ a

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

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

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:

$$\left[\forall \sigma := \{(t,\vec{z}) \in E;\ t \in \langle t_0 - a, t_0 + a\rangle \text{ a } \|\vec{z} - \vec{y}_0\|_{\mathbb{R}^N} \le b\}\right.$$

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

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

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 <u>$\exists \delta > 0$ a $\vec{y}: (t_0 - \delta, t_0 + \delta) \to \mathbb{R}^N$</u> řešící Cauchyho úlohu (P).

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

Platí-li předpoklady (P1) a (P2), pak <u>existuje</u> <u>právě jedno</u> ($\exists!$) $\vec{y}: (t_0 - \delta, t_0 + \delta) \to \mathbb{R}^N$ 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) $$\left|\frac{g(y_1)-g(y_2)}{y_1-y_2}\right| \leq \frac{2M}{\delta}$$ pro $|y_1-y_2| > \delta$

(ii) $$\left|\frac{g(y_1)-g(y_2)}{y_1-y_2}\right| \simeq \left|g'(y_1)\right|$$ 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 $\alpha \geq 1$

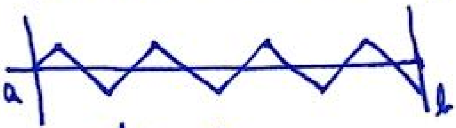
$\leq \dfrac{\alpha}{\epsilon^{1-\alpha}}$ je-li $\alpha \in (0,1)$ a $|y_1| \geq \epsilon$

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

Tvrzení 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 lipschitzovské.

Doplňme si obecnou teorii o ještě jedno tvrzení, které se týká nalepování řešení.

Tvrzení B (O nalepování 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:

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

$$\begin{array}{ccc} \| & & \| \\ \lim_{t \to b-} y_1'(t) & & \lim_{t \to b+} y_2'(t) \\ \| & & \| \\ y_1'(b-) & & y_2'(b+), \end{array}$$

kde jsme využili věty o jednostranných derivacích. ∎

Úvaha (o nalepování řešení ODR $y'=g(y)$.)

Uvažujme rci $\boxed{y'=g(y)}$ a nechť bod $a\in\mathbb{R}$ je (nulový, kritický, rovnovážný, singulární) takový bod, kde $g(a)=0$. Fce g je spojitá v okolí a.

Zkoumejme podrobněji co se děje když $g(y) \xrightarrow[(y\to a\pm)]{} g(a)$ pro $y\to a\pm$.

$\longrightarrow \quad \longleftarrow$

$y<a \quad a \quad y>a$

Víme, že $t = G(y(t)) + C$ kde G je prim. fce k $\frac{1}{g}$ na $(a, a+\Delta)$ resp. $(a-\Delta, a)$.

Definujme $\boxed{t^{\pm} := \lim_{y\to a\pm} G(y(t)) + C \in\mathbb{R}}$ a označme:

$y>a \qquad y^{+}(t) := G^{-1}(t-c)$

$y<a \qquad y^{-}(t) = G^{-1}(t-c)$

Z pohledu t^+ a t^- mohou nastat 4 možnosti:

- $t^+\in\mathbb{R}$, $t^-\in\mathbb{R}$
- $t^+\in\mathbb{R}$, t^- nevlastní
- $t^-\in\mathbb{R}$, t^+ —"—

} $\Rightarrow$ lze nalepit řešení } již z jedné strany

- t^+, t^- nevlastní } $\Rightarrow$ nelze nalepit

Uvažujme

$$y'(t^{\pm}) = \lim_{t\to t^{\pm}} y'(t) = \lim_{t\to t^{\pm}} g(y(t)) = \lim_{y\to a^{\pm}} g(y) = g(a) = 0$$

a tedy lze spojit s konstantním řešením $y(t)\equiv a$.

Dá se ukázat, že pro g lipschitzovskou v okolí bodu a ($g(a)=0$), platí: t^+ a t^- jsou nevlastní.

Příklad ① $y'=y^n$, $n\in\mathbb{N}$, $y\equiv 0$ řešení stacionární.

Pro $y>0$ $\quad G(y) = \int_y^1 \frac{ds}{s^n} \overset{n\neq 1}{=} \left[\frac{s^{1-n}}{1-n}\right]_y^1 = \frac{1}{1-n} - \frac{1}{(1-n)}y^{n-1} \xrightarrow[y\to 0+]{n\geq 2} +\infty$

$$\overset{n=1}{=} \left[\ln s\right]_y^1 = -\ln y \xrightarrow[y\to 0+]{} +\infty$$

② $y' = y^{2/3}$

Pro $y>0$ $\quad G(y) = \int_y^1 \frac{ds}{s^{2/3}} = \left[3s^{1/3}\right]_y^1 = 3 - y^{1/3} \xrightarrow[y\to 0+]{} 3\in\mathbb{R}$. □