Matematično modeliranje

1. predavanje

UP FAMNIT

Barbara Boldin

Kazalo

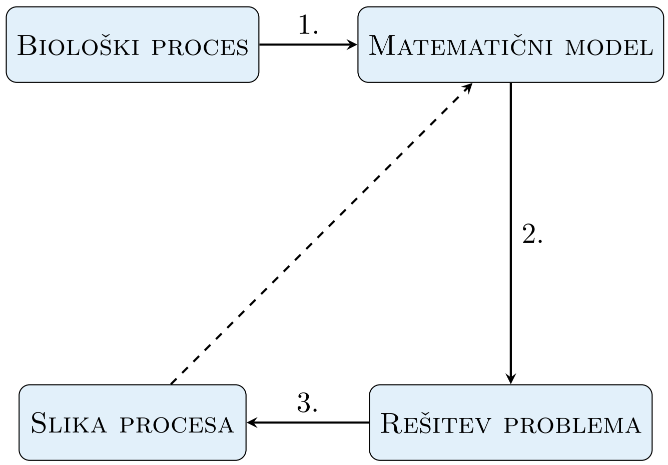
1 Uvod

V prvi polovici semestra se bomo ukvarjali z matematičnim modeliranjem v naravoslovju, natančneje s formulacijo, analizo in interpretacijo matematičnih modelov. Še posebej se bomo osredotočili na matematične modele v biologiji, ko so denimo

- epidemiološki modeli (kjer bomo skušali odgovoriti na vprašanja ko so: kdaj v populaciji pride do epidemije? Kdaj je dosežen vrh epidemije? Kakšna je končna velikost epidemije?),
- modeli v ekologiji (kjer bomo spoznavali klasične modele, ki opisujejo dinamiko plenilcev in njihovega plena, tekmovanje populacij za skupni vir itd.),
- modeli evolucijske dinamike (kjer bomo skušali razumeti, kako se fenotipi v dani populaciji spreminjajo skozi čas).

Čeprav se bomo ukvarjali predvsem z analizo bioloških procesov, pa bodo seveda obravnavane metode uporabne tudi za modeliranje v drugih naravoslovnih znanostih.

Kaj v biologiji sploh razumemo pod besedo "matematično modeliranje"? Matematični model je matematična struktura, ki je zgrajena na podlagi opažanj in predpostavk za dan proces. Namen modeliranja je predvsem bolje razumeti obravnavane biološke procese, včasih pa modele uporabljamo tudi za napoved dinamike (npr.: števila okuženih v teku epidemije). Sam proces modeliranja bi lahko opisali takole:



1. Formulacija modela: prvi korak je ob danih predpostavkah z izbranimi matematičnimi orodji zgraditi matematični model. Najbolj pogosto uporabljena matematična orodja so (navadne in parcialne) diferencialne enačbe, diferenčne enačbe, integralske enačbe in grafi.

2. Analiza: model analiziramo (pogosto tudi z uporabo numeričnih metod).

3. Interpretacija: dobljene matematične rezultate interpretiramo v luči biologije. V kolikor model nezadostno opiše obravnavan proces (npr.: v naravi opazujemo periodično dinamiko, naš model pa oscilacij ne omogoča), se vrnemo v fazo sestavljanja modela. Če pa smo z modelom zadovoljni, lahko nadaljujemo npr.: z oceno parametrov modela s pomočjo empiričnih podatkov.

Vsak matematični model je (poenostavljen) opis dinamičnega sistema, t.j. sistema, kjer se spremenljivke (npr.: velikost populacije, položaj telesa) spreminjajo skozi čas. Glede na to, kako opišemo neodvisno spremenljivko čas, ločimo

- diskretne modele (kjer je čas t diskretna spremenljivka, denimo $t \in \mathbb{N}$) in
- zvezne modele (kjer je čas t zvezna spremenljivka, denimo $t \in \mathbb{R}_+$).

Pri tem predmetu se bomo ukvarjali le z zveznimi matematičnimi modeli, ki so opisani z navadnimi diferencialnimi enačbami. Preden se lotimo specifičnih bioloških problemov zato spoznajmo nekaj osnov navadnih diferencialnih enačb.

2 Navadne diferencialne enačbe

Navadna diferencialna enačba (NDE) za neznano funkcijo $y(x)$ je vsaka enačba oblike

$$F(x, y(x), y'(x), \ldots, y^{(n)}(x)) = 0,$$

kjer je F dana funkcija. *Red* diferencialne enačbe je red najvišjega odvoda, ki v enačbi nastopa.

Primer. (a) $y''(x) - x^2 y'(x) + y(x) = 0$ je (linearna) diferencialna enačba 2. reda.

(b) $y'''(x) = \cos(x) y'^2(x) + 2y'(x)$ je (nelinearna) diferencialna enačba 3. reda.

Osredotočimo se na diferencialne enačbe 1. reda oblike

$$y' = f(x, y). \tag{1}$$

Funkcija $\varphi : D \subseteq \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ je rešitev enačbe (1) na množici D, če je na D odvedljiva in velja

$$\varphi'(x) = f(x, \varphi(x))$$

za vsak $x \in D$. V kolikor podamo še začetni pogoj $y(x_0) = y_0$, iščemo tisto rešitev enačbe (1), ki poteka skozi točko (x_0, y_0). Problemu

$$\begin{aligned} y' &= f(x, y) \\ y(x_0) &= y_0 \end{aligned}$$

rečemo *začetni problem*.

Kaj nam enačba $y' = f(x, y)$ pove geometrijsko? Če je φ rešitev enačbe (1), potem v točki x vrednost $f(x, \varphi(x))$ poda smerni koeficient tangente na rešitveno krivuljo. Res, če je φ rešitvena krivulja, ima tangenta na graf φ v točki x smerni koeficient

$$\varphi'(x) = f(x, \varphi(x)).$$

To pa pomeni, da lahko približno orišemo grafe rešitvenih krivulj, brez da bi poznali rešitev enačbe (1). Vsaki točki (x, y) priredimo kratek odsek premice s smernim koeficientom $f(x, y)$. Nabor takih mini tangent imenujemo *polje smeri*. Rešitvene krivulje vrišemo tako, da v vsaki točki tangenta na rešitveno krivuljo sovpada z vektorjem iz polja smeri. Bolj sistematično lahko polje smeri in rešitvene krivulje narišemo takole:

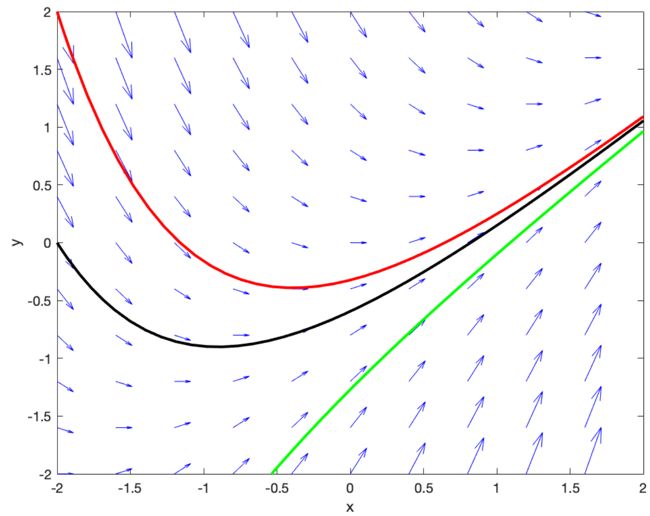
- izberemo nekaj vrednosti $c_1, \ldots, c_n \in \mathbb{R}$ in narišemo nivojnico

  $$f(x, y) = c_i$$

  za vsak $i = 1, \ldots, n$,

- za vsak $i = 1, \ldots, n$ izberemo nekaj točk na krivulji $f(x, y) = c_i$ in narišemo mini tangente s smernim koeficientom c_i,

- vrišemo rešitvene krivulje.



Slika 1: Polje smeri in nekaj rešitvenih krivulj za $y' = x - y$.

Primer. Skicirajmo polje smeri in nekaj rešitvenih krivulj enačbe

$$y' = x - y.$$

Polje smeri je prikazano na Sliki 1.

Splošne rešitve navadne diferencialne enačbe v večini primerov ne znamo zapisati v zaključeni obliki. Oglejmo si nekaj posebnih razredov diferencialnih enačb, kjer je to možno.

2.1 Najbolj enostavna diferencialna enačba

Najbolj enostavna je diferencialna enačba oblike

$$y' = f(x).$$

Rešitev, ki zadošča začetnemu pogoju $y(x_0) = y_0$ je

$$\varphi(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x} f(t)dt.$$

Primer. Rešitev začetnega problema

$$\begin{aligned} y' &= \cos(x) \\ y(0) &= 1 \end{aligned}$$

je funkcija $y(x) = 1 + \sin(x)$.

2.2 Enačba z ločljivima spremenljivkama

Je enačba oblike

$$y'(x) = f(x)g(y).$$

Enačbo preuredimo v

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dx} &= f(x)g(y) \\ \frac{1}{g(y)}\frac{dy}{dx} &= f(x). \end{aligned}$$

Integriramo po x (ne pozabimo, da je y funkcija x) in dobimo

$$\int \frac{1}{g(y)}\frac{dy}{dx}dx = \int f(x)dx.$$

Z upoštevanjem $dy = \frac{dy}{dx}dx$ dobimo

$$\int \frac{1}{g(y)}dy = \int f(x)dx + C,$$

kjer je C poljubna konstanta. Splošna rešitev je enoparametrična družina krivulj. Če je podan še začetni pogoj, lahko konstanto C natančno določimo.

Primer. Poiščimo rešitev enačbe

$$\frac{dy}{dx} = \frac{x}{y}.$$

Z ločitvijo spremenljivk in integracijo dobimo

$$\begin{aligned} \int y dy &= \int x dx \\ y^2 &= x^2 + C, \\ y(x) &= \pm\sqrt{x^2 + C}. \end{aligned}$$

Če je dan začetni pogoj, denimo $x(2) = 1$, dobimo (z izbiro pozitivnega korena)

$$1 = \sqrt{2^2 + C},$$

torej $C = -3$. Rešitev danega začetnega problema je torej $y(x) = \sqrt{x^2 - 3}$ (rešitev je definirana za $x > \sqrt{3}$).

2.3 Linearna diferencialna enačba 1. reda

Homogena linearna diferencialna enačba 1. reda je enačba oblike

$$y' = f(x)y. \tag{2}$$

Homogena LDE 1. reda je poseben primer enačbe z ločljivima spremenljivkama. Za zvezno funkcijo f je rešitev enačbe (2) pri začetnem pogoju $y(x_0) = y_0$

$$y(x) = y_0 e^{\int_{x_0}^{x} f(t)dt}.$$

Nehomogena linearna diferencialna enačba 1. reda je enačba oblike

$$y' = f(x)y + g(x). \tag{3}$$

Splošna rešitev enačbe (3) je vsaka funkcija φ, ki zadošča $\varphi'(x) = f(x)\varphi(x) + g(x)$ na preseku definicijskih območij funkcij f in g. Vsako posamezno rešitev enačbe (3) imenujemo *partikularna* rešitev. Izkaže se: če je y_P partikularna rešitev enačbe (3), potem je vsaka druga rešitev te enačbe obllike

$$y = y_H + y_P$$

kjer je y_H rešitev pripadajoče homogene enačbe $y' = f(x)y$.

Partikularno rešitev enačbe (3) lahko najdemo na več načinov. Ena od metod je metoda *variacije konstant*. Naj bo

$$y_H(x) = Ce^{\int_{x_0}^{x} f(t)dt} =: C\varphi(x)$$

splošna rešitev homogenega dela enačbe. Konstanto C sedaj spremenimo v funkcijo $C(x)$, torej obravnavamo funkcije

$$y(x) = C(x)\varphi(x).$$

Izračunamo odvod in vstavimo v (3). Dobimo

$$C'(x)\varphi(x) + C(x)\varphi'(x) = f(x)C(x)\varphi(x) + g(x).$$

Ker je funkcija φ rešitev homogenega dela, sledi

$$C'(x)\varphi(x) = g(x),$$

od tod pa

$$C'(x) = e^{-\int_{x_0}^{x} f(t)dt} g(x).$$

Z integracijo dobimo

$$C(x) = \int_{x_0}^{x} e^{-\int_{x_0}^{s} f(t)dt} g(s)ds.$$

Rešitev nehomogene enačbe z začetnim pogojem $y(x_0) = y_0$ je torej

$$\begin{aligned} y(x) &= C(x)\varphi(x) \\ &= \int_{x_0}^{x} e^{-\int_{x_0}^{s} f(t)dt} e^{\int_{x_0}^{x} f(t)dt} g(s)ds \\ &= \int_{x_0}^{x} e^{\int_{s}^{x_0} f(t)dt + \int_{x_0}^{x} f(t)dt} g(s)ds \\ &= \int_{x_0}^{x} e^{\int_{s}^{x} f(t)dt} g(s)ds. \end{aligned}$$

Primer. (a) Poiščimo splošno rešitev enačbe

$$y' - 2y = 8x.$$

Poiščimo še tisto rešitev, ki zadošča $y(0) = 1$.

Splošna rešitev homogenega dela je $y_H = Ce^{2x}$. Pišimo sedaj $y = C(x)e^{2x}$. Odvajamo, vstavimo v enačbo in dobimo

$$C'(x)e^{2x} + 2C(x)e^{2x} = 2C(x)e^{2x} + 6x$$

torej

$$C'(x) = 8xe^{-2x}.$$

Integracija po delih nam da partikularno rešitev

$$y_P(x) = -2(1 + 2x)e^{-2x}e^{2x} = -2 - 4x.$$

Splošna rešitev začetne enačbe je torej

$$y(x) = -2 - 4x + Ce^{2x}.$$

Če upoštevamo začetni pogoj $y(0) = 1$, dobimo $C = 3$ in s tem rešitev začetnega problema $y(x) = -2 - 4x + 3e^{2x}$.

(b) Poiščimo splošno rešitev enačbe

$$y' - y - e^{3x} = 0.$$

Splošna rešitev homogenega dela je $y_H(x) = Ce^x$. Za izračun partikularne rešitve pišemo $y(x) = C(x)e^x$, odvajamo, vstavimo v začetno enačbo in dobimo

$$C'(x) = e^{2x},$$

torej je partikularna rešitev

$$y_P(x) = \frac{1}{2}e^{3x}.$$

Splošna rešitev začetne enačbe je torej

$$y(x) = Ce^x + \frac{1}{2}e^{3x}$$

Na problem iskanja partikularne rešitve poglejmo še z drugega vidika.

(a) V primeru enačbe $y' - 2y = 8x$ je funkcija $g(x)$ polinom 1. stopnje. Odvajanje in seštevanje polinomov nam da polinom, zato partikularno rešitev iščemo med polinomi 1. stopnje, t.j. $y_P(x) = ax + b$. Odvajamo in vstavimo v začetno enačbo in dobimo

$$a - 2(ax + b) = 8x,$$

od tod pa $a = -4$ in $b = -2$. Na malo drugačen način smo tako dobili partikularno rešitev $y_P(x) = -4x - 2$.

(b) V drugem primeru je $g(x) = e^{3x}$, zato partikularno rešitev iščemo med funkcijami $y_P(x) = \alpha e^{3x}$. Odvajamo in vstavimo v enačbo in dobimo $(2\alpha - 1)e^{3x} = 0$, torej $\alpha = \frac{1}{2}$. Partikularna rešitev je res $y_P(x) = \frac{1}{2}e^{3x}$.

Naslednja tabela poda recept za iskanje partikurne rešitve za enačbe oblike

$$y'(x) + ay(x) = g(x)$$

za nekaj družin funkcij $g(x)$ (pri tem $P_n(x)$ in $Q_n(x)$ označujeta splošna polinoma stopnje n ter $b, c \neq a$).

$g(x)$	Predlog za $y_P(x)$
$P_n(x)$	$Q_n(x)$, $a \neq 0$
e^{bx}	αe^{bx}
$\cos(bx), \sin(bx)$	$\alpha \cos(bx) + \beta \sin(bx)$
$e^{ax} P_n(x)$	$x e^{ax} Q_n(x)$
$e^{bx} P_n(x)$	$e^{bx} Q_n(x)$
$e^{cx} \cos(bx), e^{cx} \sin(bx)$	$e^{cx}(\alpha \cos(bx) + \beta \sin(bx))$

2.4 Diferencialne enačbe 1. reda, ki se prevedejo na linearno DE

Nekatere diferencialne enačbe se da z ustrezno substitucijo prevesti na linearno diferencialno enačbo 1. reda. Med take spadata Bernoullijeva in Riccatijeva enačba.

2.4.1 Bernoullijeva diferencialna enačba

Je enačba oblike

$$y' + p(x)y = q(x)y^{\alpha}. \tag{4}$$

Če je $\alpha = 1$ imamo homogeno linearno diferencialno enačbo, za $\alpha = 0$ je to nehomogena linearna diferencialna enačba 1. reda. Za $\alpha \neq 0, 1$ uvedemo substitucijo

$$z = y^{1-\alpha}$$

in enačbo prevedemo na linearno diferencialno enačbo za neznano funkcijo z.

Primer. Poiščimo tisto rešitev enačbe

$$y' + 2y = y^2,$$

ki zadošča $y(0) = 1$.

Uvedemo substitucijo $z = y^{-1}$. Tedaj je $y' = \frac{z'}{z^2}$ in enačba se prevede v linearno enačbo

$$-z' + 2z = 1.$$

Splošna rešitev te enačbe je $z(x) = Ce^{2x} + \frac{1}{2}$, torej $y(x) = (Ce^{2x} + \frac{1}{2})^{-1}$. Z upoštevanjem začetnega pogoja izračunamo še C in dobimo rešitev $y(x) = 2(e^{2x} + 1)^{-1}$.

2.4.2 Riccatijeva diferencialna enačba

Je enačba oblike

$$y' = a(x)y^2 + b(x)y + c(x).$$

Enačba v splošnem ni rešljiva. Če pa eno rešitev y_1 uganemo, do splošne rešitve pridemo s substitucijo $y = y_1 + z$. Funkcija z zadošča Bernoullijevi diferencialni enačbi.

3 Enostavni populacijski modeli

V tem razdelku si poglejmo nekaj enostavnih populacijskih modelov in predpostavk, ki do teh modelov vodijo.

3.1 Malthusov model naravne rasti

Najbolj enostaven zvezni model je *Malthusov* model, poimenovan po angleškemu demografu, zgodovinarju in ekonomistu Thomasu Robertu Malthusu (1766-1834).

Naj $x(t)$ označuje število posameznikov neke populacije ob času t. Malthusov model je homogena linearna diferencialna enačba

$$\frac{dx}{dt} = rx(t), \tag{5}$$

katere rešitev je eksponentna funkcija $x(t) = x(0)e^{rt}$. Model torej bodisi predvidi neomejeno eksponentno rast populacije v primeru $r > 0$ bodisi eksponentno upadanje proti 0 v primeru $r < 0$. Kakšne predpostavke pripeljejo do tega enostavnega modela?

Denimo, da populacijo spremljamo v časovnem intervalu $[t, t + \Delta t]$ in da vsak posameznik na časovno enoto rodi r novih posameznikov (neodvisno od časa in velikosti populacije). Tedaj je

$$x(t + \Delta t) = x(t) + rx(t)\Delta t.$$

Velikost populacije (ki je diskretna spremenljivka) sedaj aproksimirajmo z zvezno spremenljivko (ta aproksimacija je smiselna kadar so populacije velike). V limiti $\Delta t \to 0$ tedaj dobimo Malthusov model (5). Parameter r imenujemo *per capita stopnja rasti* in ima enoto 1/čas.

3.2 Logistična enačba

V naravi je seveda rast populacije omejena z različnimi faktorji, kot so hrana, prostor itd. Omejeno rast populacije lahko opišemo s t.i. *logistično enačbo*

$$\frac{dx}{dt} = rx\Big(1 - \frac{x}{K}\Big), \quad r, K > 0. \tag{6}$$

Za majhne populacije je $x'(t) \approx rx$, torej je rast populacije približno eksponentna s stopnjo rasti r. Ko se populacija povečuje, pa se rast populacije upočasnjuje in je celo negativna, če x preseže vrednost K. Parameter K imenujemo *nosilna kapaciteta*.

Logistična enačba je primer enačbe z ločljivima spremenljivkama. Če je $x(0) = 0$, potem je $x(t) = 0$ za vse t. Prav tako velja: če je $x(0) = K$, potem je $x(t) = K$ za vse t. Če torej populacija bodisi ni prisotna bodisi je na nosilni kapaciteti, se populacijsko stanje skozi čas ne spreminja. Rečemo, da je populacija v *ravnovesnem stanju*. Sicer pa lahko računamo

$$\int \frac{dx}{x(1-\frac{x}{K})} = \int r dt$$

$$\int \frac{dx}{x} + \frac{1}{K} \int \frac{dx}{1-\frac{x}{K}} = \int r dt$$

$$\ln\left|\frac{x}{1-\frac{x}{K}}\right| = rt + \ln C$$

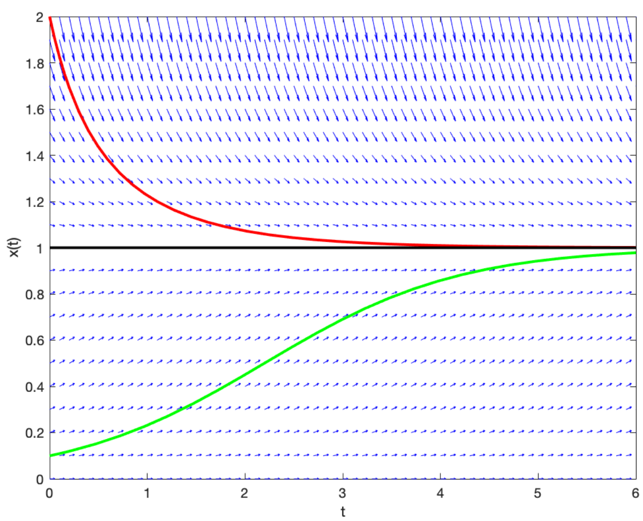
$$\left|\frac{x}{1-\frac{x}{K}}\right| = Ce^{rt}.$$

Denimo, da je $0 < x_0 = x(0) < K$. Tedaj lahko izračunamo $C = \frac{x_0}{1-\frac{x_0}{K}}$ in

$$x(t) = \frac{KCe^{rt}}{K + Ce^{rt}}.$$

Funkcija $x(t)$ je naraščajoča z $\lim_{t\to\infty} x(t) = K$. Če je populacija torej na začetku pod nosilno kapaciteto, bo populacija rasla in se približevala nosilni kapaciteti.

Kaj pa, če je začetna populacija nad nosilno kapaciteto, $x(0) = x_0 > K$? V tem primeru zlahka preverimo, da je $x(t)$ padajoča funkcija z $\lim_{t\to\infty} x(t) = K$. Slika 2 prikazuje polje smeri in tri rešitvene krivulji za logistično enačbo.



Slika 2: Polje smeri in tri rešitvene krivulje za logistično enačbo $x'(t) = x(1-x)$.