Matematično modeliranje

3. predavanje

UP FAMNIT

Barbara Boldin

Kazalo

1	\mathbf{Nel}	linearni ravninski sistemi NDE	1
	1.1	Ravnovesja in njihova lokalna stabilnost	-
	1.2	Fazni portret	
2	Din	namika v kemostatu	Į
	2.1	Model v brezdimenzijski obliki	(
	2.2	Analiza modela	,

1 Nelinearni ravninski sistemi NDE

1.1 Ravnovesja in njihova lokalna stabilnost

Na prejšnjih predavanjih smo obravnavali linearne ravninske sisteme navadnih diferencialnih enačb, spoznali rešitve le teh ter obravnavali stabilnost ničelnega ravnovesja linearnega sistema X' = AX. To znanje nam bo sedaj pomagalo pri razumevanju dinamike nelinearnih sistemov, v obliki katerih pogosto najdemo osnovne populacijske modele.

Naj bo sedaj dan nelinearen ravninski sistem navadnih diferencialnih enačb

$$x'(t) = f(x,y)$$

$$y'(t) = g(x,y).$$
(1)

Splošne rešitve takih sistemov običajno ne znamo poiskati (četudi vemo, da rešitev obstaja). Za razumevanje dinamike si tako pomagamo z analizo (lokalne) stabilnosti ravnovesij sistema ter analizo faznih portretov.

Naj bo (\bar{x}, \bar{y}) ravnovesna točka sistema (1). Velja torej

$$f(\bar{x}, \bar{y}) = 0$$

$$g(\bar{x}, \bar{y}) = 0.$$
(2)

Naj bo

$$h(t) = x(t) - \bar{x}$$

$$k(t) = y(t) - \bar{y}.$$

Zanima nas dinamika (x(t), y(t)) v primeru, ko je začetno stanje sistema blizu ravnovesne točke (\bar{x}, \bar{y}) (t.j. za majhne začetne (h, k)). Če imata funkciji f in g zvezne parcialne odvode lahko uporabimo Taylorjev razvoj in zapišemo

$$h'(t) = x'(t) = f(\bar{x} + h, \bar{y} + k) \approx f(\bar{x}, \bar{y}) + f_x(\bar{x}, \bar{y})h + f_y(\bar{x}, \bar{y})k$$

$$k'(t) = y'(t) = g(\bar{x} + h, \bar{y} + k) \approx g(\bar{x}, \bar{y}) + g_x(\bar{x}, \bar{y})h + g_y(\bar{x}, \bar{y})k.$$

Z upoštevanjem (2) lahko za majhne (h,k) dinamiko v bližini ravnovesne točke torej aproksimiramo z linearnim sistemom

$$\begin{pmatrix} h'(t) \\ k'(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_x(\bar{x}, \bar{y}) & f_y(\bar{x}, \bar{y}) \\ g_x(\bar{x}, \bar{y}) & g_y(\bar{x}, \bar{y}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix} =: J(\bar{x}, \bar{y}) \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Matrika J je Jacobijeva matrika, ki pripada sistemu (1).

Vemo torej, da lastne vrednosti $J(\bar{x}, \bar{y})$ določajo stabilnost trivialnega ravnovesnega stanja linearizacije (3). Kaj to pomeni za stabilnost ravnovesnega stanja (\bar{x}, \bar{y}) nelinearnega sistema (1)? Velja naslednja trditev (za dokaz glejte [1, 2])

Trditev. Naj bo dan sistem

$$x'(t) = f(x,y)$$

$$y'(t) = g(x,y)$$

in naj bo (\bar{x}, \bar{y}) ravnovesna točka tega sistema. Če imata funkciji f in g parcialne odvode, ki so zvezni na neki okolici ravnovesne točke (\bar{x}, \bar{y}) in je $J(\bar{x}, \bar{y})$ Jacobijeva matrika sistema v ravnovesni točki, potem velja:

- (i) Ravnovesje (\bar{x}, \bar{y}) je LAS natanko tedaj, ko je $\operatorname{tr}(J(\bar{x}, \bar{y})) < 0$ in $\det(J(\bar{x}, \bar{y})) > 0$.
- (ii) Ravnovesje (\bar{x}, \bar{y}) je nestabilno natanko tedaj, ko je $\operatorname{tr}(J(\bar{x}, \bar{y})) > 0$ ali $\det(J(\bar{x}, \bar{y})) < 0$.

DEFINICIJA. Naj bo dan sistem X'(t) = F(X), kjer je $X \in \mathbb{R}^n$ in $F : D \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ dana funkcija. Naj bo \bar{X} ravnovesna točka sistema in $J(\bar{X})$ Jacobijeva matrika sistema v ravnovesni točki \bar{X} . Ravnovesna točka \bar{X} je hiperbolična, če imajo vse lastne vrednosti matrike $J(\bar{X})$ od nič različne realne dele. Sicer je ravnovesje nehiperbolično.

Zgornja trditev nam torej pove, da lahko v primeru hiperboličnih ravnovesnih točk neline-arnega sistema lokalno stabilnost ravnovesne točke ugotovimo na podlagi linearizacije sistema okoli ravnovesne točke. Če je ravnovesje nehiperbolično, potem nam linearizacija ne da zadostne informacije o stabilnosti ravnovesne točke nelinearnega sistema.

Primer. Izračunajmo ravnovesja sistema

$$x'(t) = xy - x$$

$$y'(t) = xy - y.$$
(4)

in določimo njihovo stabilnost.

Sistem ima dve ravnovesji, $T_1(0,0)$ in $T_2(1,1)$. Jacobijeva matrika sistema je matrika

$$J(x,y) = \begin{pmatrix} y-1 & x \\ y & x-1 \end{pmatrix}.$$

V prvem ravnovesju je

$$J(T_1) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Matrika je diagonalna z lastnima vrednostima $\lambda_{1,2} = -1$. Ravnovesje T_1 je torej LAS, bolj natančno je to stabilen vozel. V drugem ravnovesju je

$$J(T_2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Sedaj imamo $\operatorname{tr}(J(T_2)) = 0$ in $\det(J(T_2)) = -1$, kar pomeni, da je ravnovesje T_2 sedlo (torej nestabilno ravnovesje).

1.2 Fazni portret

Za ravninske sisteme navadnih diferencialnih enačb lahko nekaj predstave o poteku rešitev dobimo tudi s t.i. faznim portretom. Če je (x(t), y(t)) rešitvena krivulja sistema (1), potem vektor $(f(x,y), g(x,y))^T$ poda tangentni vektor na rešitveno krivuljo v točki (x,y). Če v (x,y) ravnini narišemo večje število tangentnih vektorjev, lahko rešitveno krivuljo dokaj natančno narišemo.

Faznih portretov se lahko lotimo na bolj sistematičen način, tako da definiramo dva razreda krivulj:

- x-izokline (oz. bolj natančno x- ničte izokline) so krivulje podane z f(x,y) = 0. Na x-izoklini se torej spremenljivka x ne spreminja, spreminja se potencialno le y. Smer gibanja spremenljivke x se lahko spremeni le, če rešitvena krivulja prečka x-izoklino.
- y-izokline (oz. bolj natančno y- ničte izokline) so krivulje podane z g(x,y) = 0. Na y-izoklini se spremenljivka y ne spreminja, spreminja se potencialno le x. Smer gibanja spremenljivke y se lahko spremeni le, če rešitvena krivulja prečka y-izoklino.
- Ravnovesne točke sistema (1) so presečišča x- in y- izoklin, torej točke, ki hkrati zadoščajo f(x,y)=0 in g(x,y)=0.

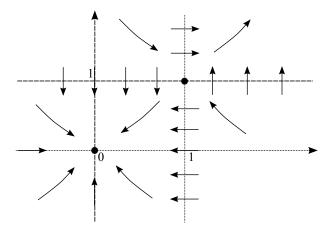
Primer. Narišimo fazni portret za sistem

$$x'(t) = xy - x$$

$$y'(t) = xy - y.$$
(5)

Tedaj sta x-izoklini podani z x = 0 in y = 1, y-izoklini pa z y = 0 in x = 1. Ravnovesni točki sta presešišči različnih izoklin, torej res dobimo točki (0,0) in (1,1).

Na x-izoklini se vrednost spremenljivke x ne spreminja, spreminja se lahko le vrednost y (gibanje je torej vertikalno). Na x-izoklini podani z x = 0 velja y'(t) = -y. Gibanje je torej



Slika 1: Fazni portret za sistem (5) (x-izokline črtkano, y-izoklino pikčasto)

navpično navzdol za y > 0 in navpično navzgor za y < 0. Za y = 1 je y'(t) = x - 1, torej je gibanje navpično navzdol za x < 1 in navpično navzgor za x > 1.

Na y-izoklini se vrednost spremenljivke y ne spreminja, spreminja se lahko le vrednost x (gibanje je torej horizontalno). Na y-izoklini podani z y = 0 velja x'(t) = -x. Gibanje je torej v levo za x > 0 in v desno za x < 0. Za x = 1 je x'(t) = y - 1, torej je gibanje v levo za y < 1 in v desno za y > 1.

Izokline razdelijo ravnino na podmnožice. Znotraj vsake take podmožice se smer gibanja spremenljivk ne menja, torej lahko enostavno orišemo gibanje orbit v ravnini. Fazni portret sistema (5) je na Sliki 1. Že prej smo s stabilnostno analizo ugotovili, da je ravnovesna točka (0,0) stabilen vozel, točka (1,1) pa je sedlo, kar je razvidno tudi iz faznega portreta.

Primer. Analizirajmo ravnovesja sistema

$$x'(t) = xy - ax$$

$$y'(t) = xy - ay.$$
(6)

v odvisnosti od realnega parametra a ter narišimo vse kvalitativno različne fazne portrete. Sistem ima dve ravnovesni točki, $T_1(0,0)$ ter $T_2(a,a)$. Jacobijeva matrika sistema je matrika

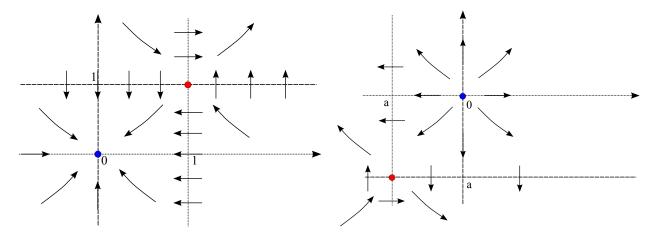
$$J(x,y) = \begin{pmatrix} y-a & x \\ y & x-a \end{pmatrix}.$$

Velja

$$J(T_1) = \begin{pmatrix} -a & 0 \\ 0 & -a \end{pmatrix}.$$

Ravnovesje T_1 je torej stabilen vozel za a > 0 in nestabilen vozel za a < 0. Nadalje je

$$J(T_2) = \begin{pmatrix} 0 & a \\ a & 0 \end{pmatrix}.$$



Slika 2: Fazna portret za sistem (6) za a > 0 (levo) in a < 0 (desno). Ravnovesje T_1 je označeno z modro, ravnovesje T_2 pa z rdečo.

Za $J(T_2)$ torej velja tr $(J(T_2))=0$ za poljuben a, medtem ko $\det(J(T_2))=-a^2<0$. Ravnovesje T_2 je torej za poljuben a sedlo. Kvalitativno imamo torej tri različne primere: a<0, a>0 ter kritični primer a=0, ko ravnovesji sovpadata. V primeru a=0 je ravnovesje (0,0) nehiperbolično. Za a=0 dobimo sistem

$$x'(t) = xy$$
$$y'(t) = xy,$$

Ker je x' > 0 in y' > 0 za pozitivne x, y, je ravnovesje (0, 0) nestabilno.

2 Dinamika v kemostatu

Pridobljeno znanje sedaj uporabimo za analizo dinamike v kemostatu.

Spomnimo se, da z Michaelis-Mentenovo stopnjo rasti K(C) dinamiko v kemostatu opisuje sistem

$$\frac{dN}{dt} = \frac{K_{\text{max}}C}{K_{\text{n}} + C}N - \frac{FN}{V} \tag{7a}$$

$$\frac{dC}{dt} = -\alpha \frac{K_{\text{max}}C}{K_{\text{n}} + C}N - \frac{FC}{V} + \frac{FC_0}{V}.$$
 (7b)

Pri tem N(t) označuje gostoto populacije mikroorganizmov, C(t) pa koncentracijo hranila. Za definicijo parametrov modela glejte 2. predavanje. Model ima torej dve odvisni spremenljivki in kar šest parametrov. Za lažje razumevanje dinamike sistema v odvisnosti od teh parametrov si poglejmo metodo, ki nam s pametno izbiro enot omogoča zmanjšanje števila parametrov v modelu.

2.1 Model v brezdimenzijski obliki

Pri izbiri enot neodvisne spremenljivke t in dveh odvisnih spremenljivkN in C imamo nekaj svobode. Denimo

$$N = 10^6 \text{celic/l}$$

= 10^3celic/ml

Zapišimo spremenljivke v obliki

$$N = N^* \hat{N}$$

$$C = C^* \hat{C}$$

$$t = t^* \hat{t},$$

kjer spremenljivka z * zajame številski del, spremenljivka z $^{\hat{}}$ pa enoto. Naš cilj je zapisati sistem v brezdimenzijski obliki (torej s spremenljivkami z *) in enote izbrati tako, da bo imel sistem čim bolj enostavno obliko.

Sistem (7) zapišemo kot

$$\begin{split} \frac{d(N^*\hat{N})}{d(t^*\hat{t})} &= \frac{K_{\max}C^*\hat{C}}{K_{\text{n}} + C^*\hat{C}}N^*\hat{N} - \frac{FN^*\hat{N}}{V} \\ \frac{d(C^*\hat{C})}{d(t^*\hat{t})} &= -\alpha \frac{K_{\max}C^*\hat{C}}{K_{\text{n}} + C^*\hat{C}}N^*\hat{N} - \frac{FC^*\hat{C}}{V} + \frac{FC_0}{V} \end{split}$$

in poenostavimo v

$$\begin{split} \frac{dN^*}{dt^*} &= \hat{t} K_{\text{max}} \frac{C^*}{\frac{K_{\text{n}}}{\hat{C}} + C^*} N^* - \hat{t} \frac{F}{V} N^* \\ \frac{dC^*}{dt^*} &= -\frac{\alpha \hat{t} K_{\text{max}} \hat{N}}{\hat{C}} \frac{C^*}{\frac{K_{\text{n}}}{\hat{C}} + C^*} N^* - \hat{t} \frac{FC^*}{V} + \hat{t} \frac{FC_0}{V\hat{C}}. \end{split}$$

S pametno izbiro enot lahko sedaj sistem poenostavimo. Res, če izberemo

$$\hat{t} = \frac{V}{F}, \ \hat{C} = K_n, \ \hat{N} = \frac{\hat{C}}{\alpha \hat{t} K_{\text{max}}} = \frac{F K_n}{\alpha V K_{\text{max}}}$$

in opustimo * v oznakah spremenljivk, potem dobimo sistem

$$\frac{dN}{dt} = a \frac{C}{1+C} N - N \tag{8a}$$

$$\frac{dC}{dt} = -\frac{C}{1+C}N - C + b,\tag{8b}$$

kjer je

$$a = \hat{t}K_{\text{max}} = \frac{VK_{\text{max}}}{F},\tag{9a}$$

$$b = \frac{\hat{t}FC_0}{V\hat{C}} = \frac{C_0}{K_n}.$$
 (9b)

S tem smo sistem s šestimi parametri prevedli na sistem z le dvema parametroma, kar nam bo precej olajšalo analizo dinamiko v odvisnosti parametrov.

2.2 Analiza modela

Sistem ima dve ravnovesni stanji:

$$(\hat{N}_1, \hat{C}_1) = (0, b),$$

 $(\hat{N}_2, \hat{C}_2) = \left(a\left(b - \frac{1}{a-1}\right), \frac{1}{a-1}\right).$

V prvem ravnovesnem stanju mikroorganizmi niso prisotni, koncentracija hranila pa je enaka koncentraciji hranila v shrambi (če ravnovesno vrednost hranila pretvorimo v izbrane enote).

Drugo ravnovesno stanje je z biološkega vidika smiselno le, ko je strogo pozitivno. Za to morata biti izpolnjena dva pogoja:

- (i) a > 1 in
- (ii) $b > \frac{1}{a-1}$.

Da bi interpretirali prvi pogoj, se spomnimo, da je $K_{\rm max}$ maksimalna stopnja rasti mikroorganizmov, ki je dosežena v optimalnih pogojih (ko $C \to \infty$). V optimalnih pogojih bi bila rast populacije mikroorganizmov eksponentna, $N'(t) = K_{\rm max}N$, torej $N(t) = N_0 e^{K_{\rm max}t}$. Zlahka preverimo, da je v tem primeru podvojitveni čas (t.j. čas, potreben za podvojitev populacije) populacije enak $T = \frac{\ln 2}{K_{\rm max}}$. Čas, v katerem populacija podvoji svojo velikost, je torej obratno sorazmerna s stopnjo rasti. Pogoj a > 1 lahko zapišemo v obliki $\frac{\ln 2}{K_{\rm max}} < \frac{\ln 2 \cdot V}{F}$. Ker je $\frac{V}{F}$ čas, ki je potreben da posodo z mikroorganizmi popolnoma napolnimo s hranilom (oziroma spraznimo), lahko zaključimo, da je vrednost \hat{C}_2 biološko smiselna, če čas, ki je potreben za podvojitev populacije v optimalnih razmerah ni prevelik.

Drugi pogoj $b > \frac{1}{a-1}$ lahko zapišemo kot $\frac{C_0}{\hat{C}} > \hat{C}_2$, kar pomeni, da koncentracija hranila v posodi ne sme preseči koncentracije hranila v shrambi.

Preverimo še lokalno stabilnost ravnovesnih točk. Jacobijeva matrika sistema je enaka

$$J = \begin{pmatrix} a \frac{C}{1+C} - 1 & a \frac{N}{(1+C)^2} \\ -\frac{C}{1+C} & -\frac{N}{(1+C)^2} - 1 \end{pmatrix},$$

torej imamo:

(i)
$$J(\hat{N}_1, \hat{C}_1) = \begin{pmatrix} \frac{ab}{1+b} - 1 & 0\\ -\frac{b}{1+b} & -1 \end{pmatrix}.$$

Ena lastna vrednost je enaka -1, torej je stabilnost ravnovesja odvisna od predznaka druge lastne vrednosti $\frac{ab}{1+b}-1$. Velja: $\frac{ab}{1+b}-1<0$ natanko tedaj, ko je $b<\frac{1}{a-1}$. Ravnovesno stanje (\hat{N}_1,\hat{C}_1) je LAS (bolj natančno, stabilen vozel) kadar $b<\frac{1}{a-1}$ in sedlo kadar velja $b>\frac{1}{a-1}$. Če je ravnovesje (\hat{N}_2,\hat{C}_2) biološko smiselno, je torej (\hat{N}_1,\hat{C}_1) sedlo.

(ii)
$$J(\hat{N}_2,\hat{C}_2)=\begin{pmatrix}0&a\beta\\-\frac{1}{a}&-\beta-1\end{pmatrix},$$
 kjer je
$$\beta=\frac{\hat{N}_2}{(1+\hat{C}_2)^2}.$$

Imamo $\operatorname{tr}(J(\hat{N}_2,\hat{C}_2)) = -\beta - 1$ in $\det(J(\hat{N}_2,\hat{C}_2)) = \beta$. Kadar je ravnovesno stanje (\hat{N}_2,\hat{C}_2) biološko smiselno je $\beta > 0$, torej je $\operatorname{tr}(J(\hat{N}_2,\hat{C}_2)) < 0$ in $\det(J(\hat{N}_2,\hat{C}_2)) > 0$. Ravnovesno stanje (\hat{N}_2,\hat{C}_2) je torej vedno LAS ko je biološko smiselno.

Vprašanje. Ali je (\hat{N}_2, \hat{C}_2) stabilen vozel ali stabilen fokus? Ker je

$$\operatorname{tr}^{2}(J(\hat{N}_{2}, \hat{C}_{2})) - 4\det(J(\hat{N}_{2}, \hat{C}_{2})) = (\beta - 1)^{2} > 0,$$

je torej ravnovesje (\hat{N}_2, \hat{C}_2) stabilen vozel vedno, ko je biološko smiselno.

Fazna portreta narišimo (i) ročno in (ii) s pomočjo programa MATLAB. Velja:

- N- izoklini sistema sta N=0 ter $C=\frac{1}{a-1}$.
- C- izoklino lahko zapišemo kot

$$N(C) = \frac{1+C}{C} \Big(b - C \Big).$$

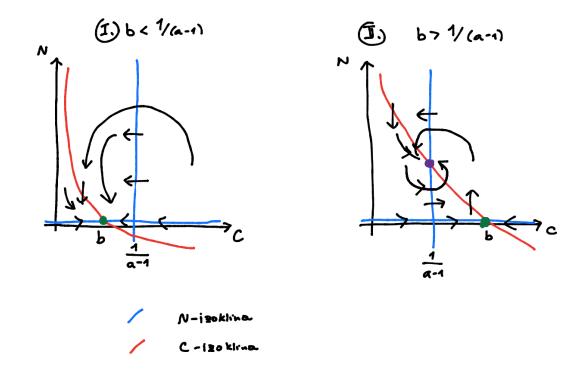
• presečišči različnih izoklin sta ravnovesni točki (\hat{N}_1,\hat{C}_1) in (\hat{N}_2,\hat{C}_2) .

Privzemimo, da je a>1 (očitno je, da bo v nasprotnem primeru populacija mikroorganizmov izumrla). Na N-izoklini N=0 velja C'=-C+b. Koncentracija hranila torej narašča dokler C< b in pada, ko C> b. Smer gibanja C se lahko obrne le, ko prečkamo C- izoklino. To pomeni, da na drugi N-izoklini, $C=\frac{1}{a-1}$, C narašča dokler je vrednost N pod vrednostjo \hat{N}_2 in pada, ko N preseže to vrednost.

Na *C*-izoklini je $N = \frac{1+C}{C}(b-C)$, torej

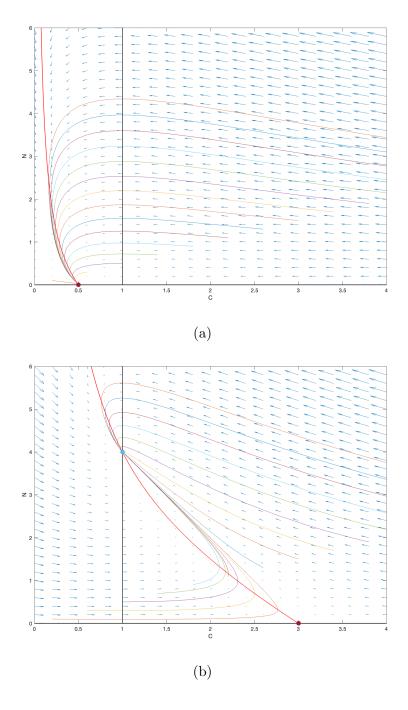
$$N' = \frac{1+C}{C} \left(b-C\right) \left(\frac{aC}{1+C} - 1\right).$$

Osredotočimo se na biološko smiselno območje $C \geq 0$. Če je $b < \frac{1}{a-1}$ (ravnovesje (\hat{N}_2, \hat{C}_2) ni biološko smiselno) bo populacija mikroorganizmov upadala. Če pa je $b > \frac{1}{a-1}$ (ravnovesje (\hat{N}_2, \hat{C}_2) je biološko smiselno), potem populacija mikroorganizmov upada za $C < \frac{1}{a-1}$ in narašča ko $C > \frac{1}{a-1}$. S tem dobimo fazna portreta na Sliki 3.



Slika 3: Skica faznega portreta za $b < \frac{1}{a-1}$ (levo) in $b > \frac{1}{a-1}$ (desno).

Na Sliki 4 lahko najdemo še oba kvalitativno različna fazna portreta narejena s programom MATLAB (MATLAB kodo za izris faznih portretov lahko najdete v e-učilnici). V primeru (a) Slike 4 ravnovesje (\hat{N}_2, \hat{C}_2) ni biološko smiselno in vse orbite se približujejo trivialnemu ravnovesju (\hat{N}_1, \hat{C}_1) . Drugače povedano, populacija mikroorganizmov na dolgi rok izumre. V primeru (b) je (\hat{N}_2, \hat{C}_2) biološko smiselno in tedaj tudi lokalno stabilno. Fazni portret pokaže, da se v tem primeru vse orbite, ki se začnejo v biološko smiselnem prvem kvadrantu približujejo ravnovesju (\hat{N}_2, \hat{C}_2) .



Slika 4: Fazni portret za (a) a=2,b=0.5 in (b) a=2,b=3. V prvem primeru populacija mikroorganizmov izumre, v drugem se približuje pozitivnemu ravnovesnemu stanju (\hat{N}_2,\hat{C}_2) .

Literatura

- [1] John Guckenheimer and Philip Holmes. Nonlinear oscillations, dynamical systems, and bifurcations of vector fields, volume 42. Springer Science & Business Media, 1983.
- [2] Stephen Wiggins. Introduction to applied nonlinear dynamical systems and chaos, volume 2. Springer Science & Business Media, 2003.