

KTH Matematik
Maria Saprykina
SF2718 Matematik för kemister VT18

Inlämningsuppgift 1

Autonoma differentialekvationer - dynamik i kontinuerlig tid

Lösningarna till denna inlämningsuppgift skall skrivas på engelska.

DEL I. 1-dimensionella system.

1. En enkel modell för hur en djurpopulations storlek varierar över tiden fås genom att anta att såväl antalet födda som avlidna individer under ett tidsintervall är proportionerligt mot populationens storlek och mot tidsintervallets längd. Formulera denna modell som en differentialekvation, lös differentialekvationen och diskutera modellens begränsningar.

2. En vanlig populationsmodell i kontinuerlig tid för en djurart som lever i en miljö med begränsade resurser är den så kallade logistiska modellen. Om antalet individer vid tiden t betecknas med $y(t)$ antas $y(t)$ uppfylla begynnelsevärdesproblemet

$$(1) \quad \frac{dy}{dt} = ry \left(1 - \frac{y}{K} \right), \quad y(0) = y_0,$$

där r och K är positiva konstanter.

a) Vilka antaganden och vilka resonemang ligger bakom formuleringen av begynnelsevärdesproblemet (1)?

b) Skissera differentialekvationens riktningsfält (eng. *Direction field*) och typiska lösningskurvor för hand.

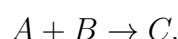
c) Undersök ekvationen numeriskt eller grafiskt med lämplig programvara.

d) Lös ekvationen analytiskt (dvs så att du får en explicit formell för $y(t)$).

e) Ange differentialekvationens stationära lösningar och ange också deras stabilitet.

f) Tolka sedan dina resultat och beskriv i ord hur populationen utvecklar sig för olika begynnelsevärden. Vilken tolkning kan man ge konstanterna r och K ? I engelsk litteratur kallas K ofta för "the carrying capacity (of the environment)", vad kan man mena med det?

3. Modellering av kemiska reaktioners förlopp. Vi tänker oss två ämnen A och B som reagerar med varandra för att bilda ämne C ,



En vanlig modell är att anta att reaktionshastigheten, det vill säga den hastighet med vilken C s koncentration växer, vid varje tidpunkt är proportionell mot produkten av reagenternas (A :s och B :s) koncentrationer.

a) Kan du ge en motivering till antagandet att reaktionshastigheten är proportionell mot produkten av reagenternas koncentrationer?

Låt $c(t)$ beteckna koncentrationen av ämne C vid tiden t . Modellera reaktionen $A + B \rightarrow C$ med en första ordningens ordinär differentialekvation för funktionen $c(t)$. (eng. initial-value problem) för $c(t)$. (Se t. ex. Zill & Wright *Differential Equations with Boundary-Value Problems*, 8:e upplagan, sid 23.). Vi väljer t så att reaktionen startar vid $t = 0$, vi kan då anta att $c(0) = 0$.

b) Skissera differentialekvationens riktningsfält och typiska lösningskurvor för hand.

c) Undersök differentialekvationen numeriskt eller grafiskt med lämplig programvara.

d) Ange differentialekvationens stationära lösningar och ange också deras stabilitet.

e) Tolka sedan dina resultat och beskriv i ord reaktionens förlopp.

4. Låt f vara en kontinuerlig reellvärd funktion av en reell variabel. Visa att en autonom differentialekvation

$$\frac{dy}{dt} = f(y)$$

endast kan ha montont växande, montont avtagande eller konstanta lösningar. (Speciellt kan de alltså inte ha oscillerande lösningar).

DEL II. 2-dimensionella system

Lotka-Volterra ekvationerna

Vi ska studera system av differentialekvationer som modellerar hur två djurpopulationers storlekar utvecklas och påverkar varandra. Vi tänker oss en rovdjursart som lever uteslutande av en bytestdjursart som i sin tur inte har några andra fiender än rovdjursarten i modellen.

Låt $x(t)$ vara antalet rovdjur och låt $y(t)$ vara antalet bytestdjur vid tiden t . I Lotka-Volterras klassiska modell antas dessa variabler uppfylla följande system av differentialekvationer.

$$(2) \quad \begin{cases} \frac{dx}{dt} = -ax + bxy \\ \frac{dy}{dt} = -cxy + dy \end{cases}$$

där a , b , c och d är positiva konstanter.

5. Redogör för vilka antaganden som ligger bakom formuleringen av systemet (2). Förklara speciellt vilket resonemang som ligger bakom produkttermerna xy och varför denna term har precis denna form.

6. Enligt Lotka-Volterras modell, hur utvecklar sig bytesdjurspopulationen om det inte finns några rovdjur? Hur utvecklar sig rovdjurspopulationen i avsaknad av bytesdjur?

7. Studera systemet (2) numeriskt för några olika uppsättningar värden på konstanterna a , b , c och d .

8. Bestäm stationära punkter till systemet (2) och gör en stabilitetsanalys. OBS: en av de kritiska punkterna är svårare att analysera än den andra. Ett sätt att avgöra dess stabilitet är att använda en Lyapunov funktion $H(x, y) = d \ln x - cx + a \ln y - by$.

8a. Som en extra övning på begreppet av Lyapunov funktioner, lös följande problem (ur Boyce-DiPrimas bok). Betrakta ett system av differentialekvationer

$$dx/dt = y - xf(x, y), \quad dy/dt = -x - yf(x, y)$$

där f är kontinuerlig och har kontinuerliga första partiella derivator. Visa att om $f(x, y) > 0$ i någon omgivning av origo, så är origo en asymptotiskt stabil fixpunkt. Tips: använd en Lyapunov funktion på formen $L(x, y) = c(x^2 + y^2)$ där c är en konstant.

9. Lösningsskurvorna till systemet (2) kan bestämmas exakt, detta finns beskrivet i litteraturen, t ex i många läroböcker i en första kurs i differentialekvationer. Redogör för hur de allmänna lösningsskurvor till (2) ser ut (du behöver inte härleda lösningarna; den ovannämnda Lyapunov funktionen $H(x, y)$ kan vara till hjälp).

10. Sammanfatta i ord vad lösningarna till systemet (2) säger om de två djurpopulationernas utveckling.

11. Hur påverkas enligt (2) de två populationerna om vi vid ett enstaka tillfälle ger systemet en liten störning, till exempel genom att plantera in en mindre mängd av bytesdjur (eller rovdjur). Leder det till bestående förändringar?

Vi kan modifiera Lotka-Volterras ekvationer så att bytesdjurens egen dynamik i avsaknad av rovdjur beskrivs av en logistisk ekvation.

$$(3) \quad \begin{cases} \frac{dx}{dt} &= -ax + bxy \\ \frac{dy}{dt} &= -cxy + ry(1 - \frac{y}{K}) \end{cases}$$

där a , b , c , r och K är positiva konstanter, och där $K > a/b$.

12. Bestäm stationära punkter till systemet (3) och analysera deras stabilitet. Skissera systemets fasporträtt. Tolka resultat i ord.

13. Hur påverkas enligt (3) de två populationerna om vi vid ett enstaka tillfälle ger systemet en liten störning, till exempel genom att plantera in en mindre mängd av bytesdjur (eller rovdjur). Leder det till bestående förändringar? Jämför med fråga 10.

Modeller som dessa används bland annat för att analysera hur djurpopulationer påverkas av mänsklig påverkan genom jakt. Vi kan till exempel tänka oss en rovfiskspopulation och en bytesfiskspopulation vars storlekar utvecklas enligt (3). Ett sätt att modellera hur ett måttligt fiske påverkar de båda fiskbestånden ges av följande modifierade version av ekvationerna (3).

$$(4) \quad \begin{cases} \frac{dx}{dt} = -ax + bxy - \delta x \\ \frac{dy}{dt} = -cxy + ry(1 - \frac{y}{K}) - \epsilon y \end{cases}$$

där a , b , c , r och K är som ovan och δ och ϵ är positiva konstanter.

14. Formulera i ord det antagande som ligger bakom modifieringen av ekvationerna.

15. Visa att systemet (4) uppfyller det som brukar kallas *Volterras princip*: Om både rovfisk och bytesfisk utsätts för ett måttligt fiske (δ och ϵ är små positiva konstanter), så kommer i långa loppet bytespopulationen att vara större och rovdjurspopulationen mindre jämfört med om inget fiske hade förekommit ($\delta = \epsilon = 0$).

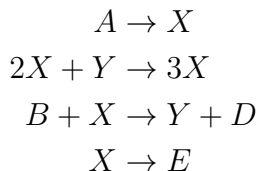
Belousov-Zhabotinsky reaktionerna och Brusselator-modellen

Belousov-Zhabotinsky reaktioner är en klass av kemiska reaktioner som uppvisar en rad intressanta fenomen. Under vissa förutsättningar fås stabilt periodiskt oscillerande koncentrationer, så kallade kemiska klockor.

Vi ska nu studera ett nytt system av modellreaktioner (den så kallade Brusselatormodellen¹), som är tänkta som en enkel modell som ska fånga

¹Modellen introducerades av en forsargrupp i Bryssel, där av namnet, under ledning av Ilya Prigogine, som fick Nobelpriset i kemi 1977 för sina studier av system långt från jämvikt

vissa egenskaper hos Belousov-Zhabotinsky reaktionerna. A , B , D , E , X och Y är tänkta ämnen som reagerar enligt



16. Skriv upp det system av differentialekvationer som gäller för koncentrationerna av de ingående ämnena, om vi som tidigare antar att reaktionshastigheten är proportionell mot produkten av reagenternas koncentrationer.

Antag nu att koncentrationerna för ämnena A , B , D och E hålls på fixa konstanta positiva nivåer, genom att A och B tillförs reaktionen i samma takt som de förbrukas medan D och E avlägsnans ur systemet i samma takt som de produceras. Vi är intresserade av att se hur koncentrationerna av de två ämnena X och Y varierar över tid.

Vi gör också följande förenklande antaganden.

- Alla proportionalitetskonstanter är $= 1$.
- Ämne A hålls på fix koncentration $a = 1$.

De gjorda antagandena leder till följande system av differentialekvationer,

$$(5) \quad \begin{cases} \frac{dx}{dt} = 1 - (b+1)x + x^2y \\ \frac{dy}{dt} = bx - x^2y \end{cases}$$

där $x(t)$ och $y(t)$ är koncentrationerna av ämnena X respektive Y , och b är den fixa koncentrationsnivån för ämne B , som tas som en kontrollparameter i systemet.

17. Visa att systemet (5) har en unik stationär punkt (x_0, y_0) , och bestäm denna (den kommer att bero b). Vad är den kemiska tolkningen av den stationära punkten?

18. Ni ska nu undersöka den stationära punktens stabilitet och hur den beror på b . Klassificera den stationära punkten för olika värden på $b > 0$, och skissera relevanta fasporträtt. Det finns två värden på b , när den stationära punkten byter karaktär (man säger att systemet genomgår en *bifurkation*), bestäm dessa.

19. Vilka slutsatser kan vi dra utifrån analysen i föregående uppgift? Vad blir tolkningen för den kemiska modellreaktionen?

20. Studera systemet (5) numeriskt/grafiskt för olika lämpliga värden på b . Målet är att kunna säga hur typiska lösningkurvor beter sig i långa

loppet. De två bifurkationsvärdena på b du fann i uppgift 18 ger tre intervall av b -värden, gör minst en undersökning i vart och ett av dessa intervall. Undvik b -värdena alltför nära bifurkationsvärdena, numeriken blir långsammare och mer krävande där.

21. Du bör nu ha funnit att det finns ett värde $\hat{b}$ sådant att om $b > \hat{b}$ så är den stationära punkten instabil, och att de numeriska undersökningarna tyder på att de typiska lösningskurvorna, när $b > \hat{b}$, i långa loppet närmar sig ett periodiskt förlopp, det vill säga att systemet har en så kallad *stabil gränscykel* (eng. *stable limit cycle*)².

Läs i artikeln *Hopf bifurcation* av Gert van der Heijden, första avsnittet "Hopf bifurcation for flows" (sidan 1 - 2), och verifiera att systemet (5) verkligen genomgår en så kallad Hopf-bifurkation, där fixpunkten förlorar sin stabilitet och en stabil gränscykel uppstår.

22. Sammanfatta din resultat för systemet (5) och tolka resultatet:

a) Hur kommer koncentrationerna för ämnena X och Y att variera i långa loppet för olika värden på b ?

b) Antag att systemet startar i jämvikt - hur kommer det, för olika värden på b , att reagera på små störningar, i form av tillskott av ämne X eller Y ?

²Synonymt säger man också *attraktiv* gränscykel