Matematika pro chemické inženýry

Drahoslava Janovská

9. Kvalitativní teorie SODR.

Jednodimenzionální dynamika, dvoudimenzionální dynamika, dynamické systémy, definice řešení, trajektorie řešení, typy trajektorií.

EVROPSKÁ UNIE
Evropské strukturální a investiční fondy
Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání

MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY

Povinná látka. Bude v písemkách a bude se zkoušet při ústní zkoušce (žádné označení)

★ Příklady k procvičení - dobrovolné

★ Pro studenty, kteří chtějí vědět víc. Tato látka se nebude přednášet, nebude v písemkách, nebude se zkoušet.

Obsah

★ Příklad: Vesmír ve sklenici

Naplníme sklenici živným roztokem a přidáme nějaké bakterie. Jak čas pokračuje bakterie se množí a umírají. Označme
b (= birth) specifickou rychlost (rychlost vztaženou na počet) růstu množství mikrobů ve sklenici,
p (= perish, hynutí) specifickou rychlost úhynu mikrobů.
Úhrná (celková) specifická rychlost růstu populace je $r = b - p$. Tedy, je-li x populační hustota (početní koncentrace) bakterií ve sklenici, tedy počet bakterií na jednotku objemu živného roztoku, pak rychlost růstu populace je rx a rychlost úhynu bakterií je px. Dostaneme

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = rx\,.$$

Začneme-li s populační hustotou x_0 bakterií v čase $t = 0$, pak

$$x(t) = \mathrm{e}^{rt} x_0\,, \quad x(0) = x_0\,.$$

Krátkodobě tento vzorec dává smysl. Říká, že v čase $t = 0$ máme ve sklenici x_0 bakterií a pak jejich počet exponenciálně roste. Nicméně s rostoucím časem to znamená, že počet bakterií bude mimořádně velký, dokonce větší, než počet atomů ve vesmíru. V dlouhém časovém horizontu tento model není reálný.

★

Jak počet bakterií roste, mají tendenci ničit samy sebe, produkují toxické zplodiny atd. Dává tedy smysl přidat rychlost vymírání a předpokládat, že úmrtnost se s počtem bakterií zvyšuje. Místo konstantního vymírání předpokládejme, že specifická rychlost vymírání je px. Tedy je-li ve sklenici x bakterií, jejich počet klesá rychlostí px^2. Dostaneme rovnici – dynamický systém

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = bx - px^2 \,. \tag{1}$$

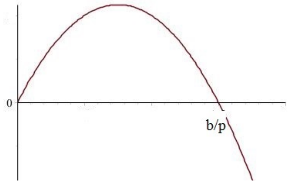
Co lze vyčíst z této rovnice? Je tato populace soustavně udržitelná nezávisle na čase? Tedy hledáme počet bakterií $\tilde{x}$, tak, aby $b\tilde{x} - p\tilde{x}^2 = 0$. V tomto případě je rychlost reprodukce a vymírání v rovnováze (ve stacionárním stavu), a tedy populace neroste ani neklesá.

Poznámka Pojem ustálený/stacionární stav je v inženýrství používán přednostně, protože takový stav nastává v termodynamicky nerovnovážném systému, tj. v otevřeném systému, což je převládající případ. Ta sklenice vody se zdá být uzavřený systém, ale není, pokud má být b konstantní, pak musí být konstantní množství živin ve vodě, což ovšem platí jen tehdy, když se živiny postupné přidávají úměrně tomu, jak jsou spotřebovávány biomasou. Tedy sklenice je fakticky otevřený systém, kde živiny jsou udržovány na konstantní hladině koncentrace neustálou regulací.

Položíme-li pravou stranu rovnice (1) rovnou nule,

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = bx - px^2 = 0 \;\Leftrightarrow\; x = 0 \;\vee\; b - px = 0 \;\Leftrightarrow\; x = 0 \vee x = \frac{b}{p}\,,$$

dostaneme dva stacionární stavy, které odpovídají kořenům kvadratické rovnice $bx - px^2 = 0$.



Je-li $\tilde{x} = 0$, nejsou ve sklenici žádné baktérie, tedy žádné baktérie se "nenarodí", žádné "neumřou". Kontaminujeme-li sklenici malým množstvím baktérií ($x > 0$ ale $x < \frac{b}{p}$), vidíme, že

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = bx - px^2 > 0\,.$$

Tedy počet bakterií začne růst hned poté, co je sklenice kontaminována.

Říkáme, že rovnovážný stav $\tilde{x} = 0$ je nestabilní, malá perturbace způsobí vychýlení z tohoto stacionárního stavu.

Uvažujme nyní stacionární stav $\tilde{x} = \dfrac{b}{p}$.

Na této úrovni populace je zrození a vymírání v rovnováze:

$$b\tilde{x} = b \cdot \frac{b}{p} = \frac{b^2}{p}, \quad p\tilde{x}^2 = p\left(\frac{b}{p}\right)^2 = \frac{b^2}{p}.$$

Co se stane, je-li velikost populace maličko větší nebo menší než $\tilde{x} = \dfrac{b}{p}$?

- Je-li $x > \tilde{x}$ je $\dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} < 0$, tedy počet bakterií klesne zpátky na $\dfrac{b}{p}$.
- Je-li naopak $x < \tilde{x}$ je $\dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} > 0$, a populace roste zpět k $\dfrac{b}{p}$.

Tedy malá perturbace x z bodu $\tilde{x} = \dfrac{b}{p}$ má za následek, že se populace vrátí do bodu $\dfrac{b}{p}$. Říkáme, že $\tilde{x} = \dfrac{b}{p}$ je stabilní stacionární stav (pevný bod).

Analytické řešení (Matlab, Mathematica, Maple)

$$x(t) = \frac{x_0 b e^{bt}}{(b - p x_0) + p x_0 e^{bt}} \, .$$

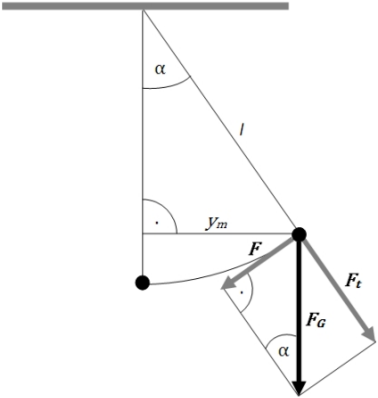
Je-li $x_0 > 0$, pak

$$\lim_{t \to \infty} \frac{x_0 b e^{bt}}{(b - p x_0) + p x_0 e^{bt}} = \frac{b}{p} \, ,$$

tedy pro $t \to \infty$ "skončí"systém v bodě $\tilde{x} = \dfrac{b}{p}$.

★ Příklad: Matematické kyvadlo

Matematické kyvadlo: malé závaží o hmotnosti m zavěšené na vlákně délky l zanedbatelné hmotnosti. Úhel α by neměl být větší než 5°.



Rozložíme tíhovou sílu F_G do směru prodloužení vlákna a do směru k němu kolmému. Složka F_t se ruší pevností vlákna a nemá na pohyb vliv. Příčinou pohybu kyvadla je síla F. Z obou pravoúhlých trojúhelníků vyjádříme $\sin\alpha$.

$$\sin\alpha = \frac{F}{F_G}, \qquad \sin\alpha = \frac{y_m}{l} \qquad \Longrightarrow \qquad F = \frac{F_G y_m}{l} = \frac{mgy_m}{l}.$$

Zákon síly $\quad F = ma_m \qquad \Longrightarrow \qquad ma_m = \dfrac{mgy_m}{l} \qquad \Longrightarrow \qquad a_m = \dfrac{gy_m}{l}$.

Pro okamžitou hodnotu zrychlení kmitavého pohybu platí rovnice

$$a = a_m \sin\omega t = \omega^2 y_m \sin\omega t\,,$$

tedy po úpravě a dosazení za úhlovou frekvenci dostaneme vztah pro periodu T

$$\omega = \sqrt{\frac{g}{l}}, \qquad \Longrightarrow \qquad T = 2\pi\sqrt{\frac{l}{g}}.$$

Perioda kmitání matematického kyvadla nezávisí na hmotnosti závaží m ani na velikosti výchylky y_m. Vzhledem ke konstantní hodnotě tíhového zrychlení perioda závisí pouze na délce kyvadla.

Dynamický systém

Dynamický systém . . . systém, který se s časem vyvíjí. Stav systému závisí na skaláru zvaném čas, označ. t
Fázový prostor systému . . . množina hodnot, které mohou proměnné nabývat, my se budeme zabývat jen systémy s konečnědimenzionálním fázovým prostorem.

Označení: x . . . stav systému, M . . . fázový prostor

Obvykle je stav systému úplně popsán proměnnými $x \in M$ a nějakými dalšími hodnotami = hodnotami parametrů. Obvyklý model . . . diferenciální rovnice

Diferenciální rovnice . . . vztahy mezi funkcí a jejími derivacemi (1 proměnná – ODR, více proměnných – PDR)
Soustava ODR

$$\mathbf{F}\left(t, \mathbf{y}, \frac{\mathrm{d}\mathbf{y}}{\mathrm{d}t}, \dots \frac{\mathrm{d}^k\mathbf{y}}{\mathrm{d}t^k}\right) = \mathbf{0},$$

$$\mathbf{y} : \mathbb{R} \longrightarrow N \subseteq \mathbb{R}^d, \quad \text{označení} \quad \frac{\mathrm{d}\mathbf{y}}{\mathrm{d}t} := \dot{\mathbf{y}},$$

graf řešení . . . trajektorie

$$\mathcal{C} = \{\mathbf{y}(t),\ t \in \mathbb{R}\} \ \dots\ \text{křivka v } N \subseteq \mathbb{R}^d$$

Libovolnou explicitní diferenciální rovnici lze přepsat jako soustavu obyčejných diferenciálních rovnic 1. řádu tak, že zavedeme nové proměnné

$$\frac{\mathrm{d}^k \mathbf{y}}{\mathrm{d}t^k} = \mathbf{G}\left(t, \mathbf{y}, \dot{\mathbf{y}}, \ldots, \frac{\mathrm{d}^{k-1}\mathbf{y}}{\mathrm{d}t^{k-1}}\right)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1 &:= \mathbf{y} \\ \mathbf{x}_2 &:= \dot{\mathbf{y}} = \frac{\mathrm{d}\mathbf{y}}{\mathrm{d}t}\,, \;\ldots\; \mathbf{x}_i := \frac{\mathrm{d}^{i-1}\mathbf{y}}{\mathrm{d}t^{i-1}} \;\ldots\; \mathbf{x}_k = \frac{\mathrm{d}^{k-1}\mathbf{y}}{\mathrm{d}t^{k-1}} \end{aligned}$$

$\Longrightarrow$ soustava k diferenciálních rovnic 1. řádu

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\mathbf{x}_i}{\mathrm{d}t} &= \mathbf{x}_{i+1}\,,\; i = 1, 2, \ldots, k-1\,, \qquad \mathbf{x}_i = \underbrace{(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \ldots, x_d^{(i)})}_{d \text{ proměnných}} \\ \frac{\mathrm{d}\mathbf{x}_k}{\mathrm{d}t} &= \mathbf{G}(t, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_k)\,, \qquad k \text{ rovnic} \end{aligned}$$

To je soustava $n = k \cdot d$ diferenciálních rovnic 1. řádu ve fázovém prostoru M, $\dim M = k \cdot d = n$.

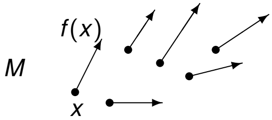
V dalším budeme předpokládat $x : \mathbb{R} \longrightarrow M$, $f(t,x)$ reprezentuje rychlost v čase t v bodě x.

$$\Longrightarrow \qquad f : \mathbb{R} \times M \longrightarrow \mathbb{R}^n .$$

Speciální případ:
autonomní diferenciální rovnice – pravá strana f nezávisí explicitně na čase

$$\Longrightarrow \qquad \dot{x} = f(x)\,, \quad f : M \longrightarrow \mathbb{R}^n$$

f ... rychlost v každém bodě fázového prostoru M

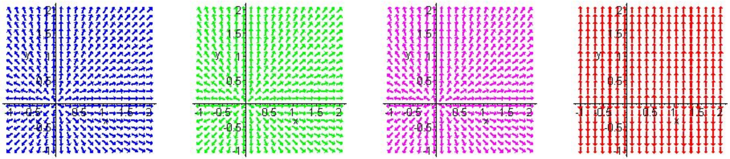


Obecně, až na výjimky, neexistuje důvod, proč se zabývat neautonomními systémy, protože každý neautonomní systém můžeme přepsat jako autonomní, zavedeme-li novou proměnnou např. $x_{n+1} = t$. Pro tuto proměnnou je $\dot{x}_{n+1} = 1$.

Příklad Směrové (časově proměnné) pole $f(t,x,y)$ zadané v rovině vztahem

$$f(t,x,y) = (x\cos t, y)\,, \qquad (x,y) \in \mathbb{R}^2,\ t \in \mathbb{R}$$

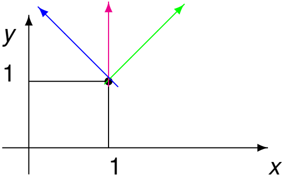
$t = 0$ $t = \pi/6$ $t = \pi/4$ $t = \pi/2$



$f(0,x,y)$ $f(\pi/6,x,y)$ $f(\pi/4,x,y)$ $f(\pi/2,x,y)$

x, y pevné, t se mění, např. $x = y = 1$

$$\begin{aligned} f(0,1,1) &= (1,1) \\ f(\pi/2,1,1) &= (0,1) \\ f(\pi,1,1) &= (-1,1) \end{aligned}$$



★ Příklad

Lineární diferenciální rovnici 2. řádu převedeme na soustavu dvou diferenciálních rovnic prvního řádu:

$$y'' = -y, \quad y(0) = 0, \quad y'(0) = 1\,. \tag{2}$$

Položíme $y_1(x) := y(x)\,, \quad y_2(x) := y'(x)$. Pak bude

$$\begin{aligned} y_1' &= y'(x) = y_2\,, \\ y_2' &= y'' = -y = -y_1\,. \end{aligned}$$

Dostaneme lineární soustavu dvou diferenciálních rovnic s počátečními podmínkami:

$$\begin{array}{rclrcl} y_1' &=& y_2\,, & y_1(0) &=& 0\,, \\ y_2' &=& -y_1\,, & y_2(0) &=& 1\,. \end{array} \tag{3}$$

Cvičení Vyřešte soustavu (3) a vypočtěte partikulární řešení rovnice (2). Ověřte správnost řešení.

Poznámka:

Počáteční (Cauchyova) úloha pro rovnici prvního řádu

$$\dot{x} = f(x)\,, \quad x(t_0) = x_0\,,$$

a hledáme řešení $x(t)$, které splňuje počáteční podmínku $x(t_0) = x_0$ v daném čase t_0.

Počáteční (Cauchyova) úloha pro rovnici druhého řádu

$$\ddot{x} = f(x)\,, \quad x(t_0) = x_0\,, \quad x'(t_0) = x_1\,,$$

hledáme řešení $x(t)$, které splňuje počáteční podmínky v daném čase t_0.

Okrajová úloha

$$\ddot{x} = f(x)\,, \quad x(t_0) = x_0\,, \quad x(t_1) = x_1\,.$$

Obecné řešení je takové řešení, které závisí na obecných konstantách, t.j. nejsou zadány žádné počáteční ani okrajové podmínky.

Logistická rovnice

Jednodimenzionální autonomní počáteční úloha (řešíme např. separací):

$$\dot{x} = f(x)\,, \qquad x(0) = x_0\,.$$

Příklad Jedna z nejjednodušších nelineárních obyčejných diferenciálních rovnic – logistická rovnice

$$\underbrace{\dot{x} = r\,x(1-x)}_{\text{nejjednodušší model růstu populace}}\,, \quad x(0) = x_0\,.$$

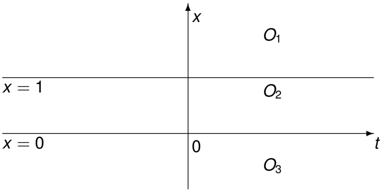
$x = \dfrac{N}{K}$, $N(t)$ ... množství jedinců v populaci v čase t,
parametr K ... kapacita prostředí ("carrying capacity"),
parametr r, $r = b - d$ ... rozdíl mezi koeficienty narození (b ... birth) a smrti (d ... death) populace, $r << K$.

Řešení separací

$$\dot{x} = r\,x(1-x) = 0 \iff x = 0 \ \vee \ x = 1 \quad \Longrightarrow$$

Dvě konstantní řešení: $x(t) = 0 \ \forall\, t \in \mathbb{R}$ a $x(t) = 1 \ \forall\, t \in \mathbb{R}$.

Logistická rovnice



$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} &= r\,x(x-1)\,, \\
\frac{\mathrm{d}x}{x(x-1)} &= r\mathrm{d}t \\
\int \frac{1}{x}\mathrm{d}x + \int \frac{1}{1-x}\mathrm{d}x &= r\int \mathrm{d}t \\
\ln\frac{|x|}{|1-x|} &= r\,t + c,\ c \in \mathbb{R}
\end{aligned}
$$

$$\text{na } O_1\colon x > 1 \implies \frac{|x|}{|1-x|} = \frac{x}{x-1}$$

$$\text{na } O_2\colon 0 < x < 1 \implies \frac{|x|}{|1-x|} = \frac{x}{1-x}$$

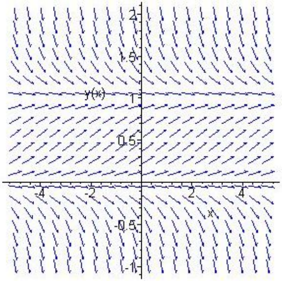
$$\text{na } O_3\colon x < 0 \implies \frac{|x|}{|1-x|} = -\frac{x}{1-x} = \frac{x}{x-1}$$

$$\ln\left|\frac{x}{1-x}\right| = r\,t + c\,,\quad x(0) = x_0 \quad\Longrightarrow\quad \ln\left|\frac{x_0}{1-x_0}\right| = c$$

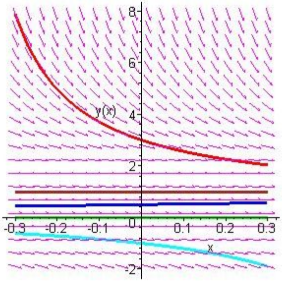
$$\ln\left|\frac{x}{1-x}\right| - \ln\left|\frac{x_0}{1-x_0}\right| = r\,t$$

$$x(t) = \frac{x_0}{x_0 + (1-x_0)\mathrm{e}^{-r\,t}}$$ . . . obecné řešení logistické rovnice

+ konstantní řešení $\left.\begin{array}{lll} x(t) = 0 & \forall t \in \mathbb{R} & (\text{pro } x_0 = 0) \\ x(t) = 1 & \forall t \in \mathbb{R} & (\text{pro } x_0 = 1) \end{array}\right\}$ rovnovážné stavy



směrové pole ($r = 0.9$)



několik integrálních křivek

Obecné řešení nemusí být vždy možné explicitně vyjádřit:

Příklad

$$\dot{x} = f(x)\,, \qquad f(x) = -\frac{x}{1+x^2}\,, \quad x(0) = x_0\,.$$

$$\underbrace{f(x) = 0 \iff x = 0}_{\text{rovnovážný stav } x = 0} \quad \Longrightarrow \quad \text{stacionární řešení } x(t) = 0,\ t \in \mathbb{R}$$

Nechť $x \neq 0$. Pak rovnici řešíme separací

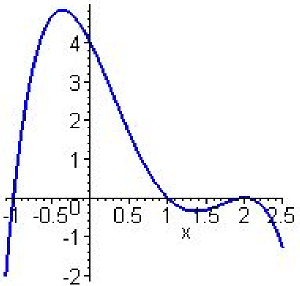
$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = -\frac{x}{1+x^2} \quad \Longrightarrow \quad \int \frac{1+x^2}{x}\mathrm{d}x = -\int \mathrm{d}t$$

$$\ln|x| + \frac{x^2}{2} = -t + C\,, \qquad x(0) = x_0\,, \quad \text{tj.} \quad ln|x_0| + \frac{x_0^2}{2} = C$$

Obecné řešení:

$$\ln|x| + \frac{x^2}{2} = -t + \ln|x_0| + \frac{x_0^2}{2} \tag{4}$$

Z rovnice (4) nelze explicitně vyjádřit $x(t)$.



3 rovnovážné stavy

$\dot{x} = f(x)$, $f(x) \ldots$ rychlost v bodě $x \in M$,

$M \ldots$ fázový prostor.

V jedné dimenzi jen tři možnosti:

$f(x) > 0 \ldots$ kladná rychlost
$f(x) < 0 \ldots$ záporná rychlost
$f(x) = 0 \ldots$ rovnovážný stav

$\mathrm{graf}(f) = \{(x, y), x \in M, y = f(x)\}$

Co lze vyčíst z grafu funkce f?

Je-li $f(x_0) > 0$, "pohyb"probíhá doprava a $x(t)$ roste monotónně tak dlouho, dokud $f(x(t)) > 0$. Je-li x^* první kořen f "za"x_0 a $f(x) > 0$ na $\langle x_0, x^*)$, pak $x(t) \longrightarrow x^*$ pro $t \longrightarrow \infty$. Nemá-li f kořeny za x_0, pak $x(t) \to \infty$ pro $t \to \infty$. Obdobně, je-li $f(x_0) < 0$, "pohyb"probíhá doleva a $x(t)$ klesá monotónně ...

Závěr: Dynamika jednodimenzionální autonomní ODR je jednoduchá: trajektorie se blíží monotónně k rovnovážnému stavu nebo k nekonečnu.

Příklad Logistická rovnice

$$\dot{x} = rx(1-x), \quad x(0) = x_0 .$$

Pro jednoduchost zvolme $r = 1$. Tedy $f(x) = x(1-x)$. Nakreslete si odpovídající parabolu a ilustrujte na tomto obrázku, že

- $x(t)$ roste na $(0, 1)$
- $x(t)$ klesá na $(-\infty, 0)$ a na $(1, +\infty)$.

★ Populační dynamika – dvě populace

Jako motivační příklad dvoudimenzionálního dynamického systému uveďme model chování dvou populací. Jedna populace - predátoři - se živí druhou polulací - kořistí, která má jinou potravu. Model je obměnou Lotkova-Volterrova systému, který je speciálním případem Bazykinova ekologického modelu.

Bazykinův model

$$\dot{x} = x - \frac{xy}{1+\alpha x} - \varepsilon x^2 , \tag{5}$$

$$\dot{y} = -\gamma y + \frac{xy}{1+\alpha x} - \delta y^2 , \tag{6}$$

kde $x \ldots$ velikost populace kořisti, $y \ldots$ velikost populace predátorů, $\alpha \geq 0 \ldots$ konstanta saturace predátorů, $\gamma \geq 0 \ldots$ konstanta úmrtnosti predátorů, nezáporné konstanty $\varepsilon, \delta \ldots$ konstanty soupeření mezi kořistí a predátory.

Přidejme ještě počáteční podmínky

$$x(0) = x_0 , \qquad y(0) = y_0 .$$

Dvoudimenzionální dynamika

$$z = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2 : \quad \dot{z} = f(z) = \begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P(x,y) \\ Q(x,y) \end{pmatrix} . \tag{7}$$

Nejprve hledáme množinu S rovnovážných stavů

$$S = \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 : \quad P(x,y) = Q(x,y) = 0\} .$$

Další informace o chování systému získáme pomocí tzv. "nulklín"(nullclines). Nulklíny jsou křivky, na nichž je jedna ze složek rychlosti $f(z)$ nulová. Tedy

$$\begin{aligned} N_x &= \{(x,y) : P(x,y) = 0\} \implies \begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ Q(x,y) \end{pmatrix} , \\ N_y &= \{(x,y) : Q(x,y) = 0\} \implies \begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P(x,y) \\ 0 \end{pmatrix} . \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{rovnovážný stav} &= \text{průsečík nulklín} \\ \mathbf{S} &= \mathbf{N_x} \cap \mathbf{N_y} . \end{aligned}$$

★ Dynamický systém Lotka-Volterra

Příklad Dynamický systém Lotka-Volterra pro dva soupeřící druhy je popsán soustavou

$$\dot{x} = x(a - bx - cy)\,, \tag{8}$$

$$\dot{y} = y(d - ex - fy)\,, \tag{9}$$

kde x, y jsou populace $\Rightarrow$ $x \geq 0, y \geq 0$, konstanty a, b, c, d, e, f jsou v biologických aplikacích kladné. Tedy fázový prostor

$$M = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : x \geq 0, y \geq 0\}\,.$$

Vypočtěme nulklínu N_x: $x(a - bx - cy) = 0 \Leftrightarrow x = 0 \vee a - bx - cy = 0 \Rightarrow$

$$N_x = \{(x, y) \in M, \underbrace{x = 0}_{\text{osa } y}\} \cup \{(x, y) \in M, y = \frac{a - bx}{c}\}\,.$$

Obdobně pro nulklínu N_y dostaneme

$$N_y = \{(x, y) \in M, \underbrace{y = 0}_{\text{osa } x}\} \cup \{(x, y) \in M, y = \frac{d - ex}{f}\}\,.$$

Množina rovnovážných stavů $S = N_x \cap N_y$ se obvykle skládá z bodů, výjimečně může obsahovat přímku.

Poznámka Rovnovážný stav odpovídá průsečíku jedné křivky v N_x s jednou křivkou v N_y. Tedy například průsečík $x = 0$ a $y = \dfrac{a - bx}{c}$ není rovnovážný stav, protože obě křivky jsou z N_x.

Pro kladné parametry má systém (8), (9) vždy následující tři rovnovážné stavy

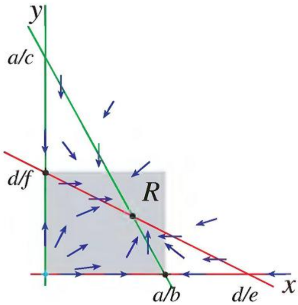
$$(0,0), \quad (0, \frac{d}{f}), \quad (\frac{a}{b}, 0),$$

a jeden rovnovážný stav

$$(x^*, y^*) = \left(\frac{af - cd}{bf - ce}, \frac{bd - ae}{bf - ce} \right) \quad \Longleftarrow \left\{ \begin{array}{l} a - bx - cy = 0 \\ d - ex - fy = 0 \end{array} \right.$$

(x^*, y^*) leží uvnitř M, pokud členy $af - cd$, $bd - ae$ a $bf - ce$ jsou nenulové a mají stejné znaménko.

Nechť $s := \mathrm{sgn}(af - cd) = \mathrm{sgn}(bd - ae) = 1$, pak, protože x^* a y^* jsou nezáporné, je také $bf - ce > 0$ a bod (x^*, y^*) leží uvnitř M. Nulklíny rozdělí v tomto případě fázový prostor M na čtyři oblasti.



Na obr. je pro $s = 1$ znázorněno vektorové pole. Je-li $x > \frac{a}{b}$, je
$\dot{x} = x(a - bx - cy) < x(a - a - cy) < 0.$
Tedy $\dot{x} < 0$ a x monotónně klesá a všechny počáteční podmínky zadané vpravo od přímky $\{(x, y) : x = \frac{a}{b}\}$ se pohybují vlevo.

Obdobně, je-li $y > \frac{d}{f}$, je $\dot{y} < 0$ a y monotónně klesá.

Důsledek: Obdélník $R = \{(x, y), 0 \leq x \leq \frac{a}{b}, 0 \leq y \leq \frac{d}{f}\}$ je invariantní množina, t.j. všechny trajektorie, které začínají v R, v R zůstanou. Všechny počáteční podmínky, které leží v $M \setminus R$, musí také nutně skončit v R.
Limitní chování pro $t \longrightarrow \infty$ pro libovolnou počáteční podmínku: trajektorie skončí v některém rovnovážném stavu:

★ Fázový portrét

Vratme se k dvoudimenzionálnímu dynamickému systému (7)

$$\dot{z} = f(z) = \begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P(x,y) \\ Q(x,y) \end{pmatrix} .$$

Ignorujeme-li časovou závislost, lze někdy najít řešení jako parametrizaci křivek ve fázovém prostoru.

Idea: Necht je trajektorie lokálně grafem funkce $y = Y(x)$. Pak $\dot{y} = \frac{\mathrm{d}Y}{\mathrm{d}x} \cdot \dot{x}$ a pro funkci Y dostaneme diferenciální rovnici

$$\frac{\mathrm{d}Y}{\mathrm{d}x} = \frac{\dot{y}}{\dot{x}} = \frac{Q(x,Y)}{P(x,Y)} = F(x,y) .$$

Toto je jedna diferenciální rovnice 1. řádu pro funkci $Y(x)$ (Y(x) . . . fázová křivka). Tato rovnice je obvykle neautonomní, protože nové vektorové pole $F(x, Y)$ závisí na nové nezávisle proměnné x.

★ Příklad

Příklad Soustavu

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \mathrm{e}^{x+y}(x+y) \\ \dot{y} &= \mathrm{e}^{x+y}(x-y) \end{aligned}$$

nelze pro $x(t), y(t)$ řešit explicitně, ale rovnice pro fázovou křivku je relativně jednoduchá:

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = \frac{x-y}{x+y}\,.$$

Tuto rovnici nelze řešit separací, ale zavedeme-li novou proměnnou $z = \frac{y}{x} = \frac{1}{x}y$ dostaneme

$$\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}x} = -\frac{1}{x^2}y + \frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = \frac{1}{x}\left(\frac{x-y}{x+y} - \frac{y}{x}\right) = \frac{1}{x}\left(\frac{1-z}{1+z} - z\right) = -\frac{1}{x}\cdot\frac{(z+1)^2-2}{1+z}\,,$$

a tato rovnice je separovatelná diferenciální rovnice 1. řádu.

★ Pokračování příkladu

Odseparujeme proměnné a zintegrujeme:

$$\int \frac{1+z}{(z+1)^2-2}\,\mathrm{d}z = -\int \frac{1}{x}\,\mathrm{d}x\,,$$

$$\frac{1}{2}\ln|(z+1)^2-2| = -\ln|x| + \ln C, \quad C>0,\ x>0,\ z=\frac{y}{x}\geq 0\,.$$

Označme
$O_1 = \{(x,z), x>0, z>-1+\sqrt{2}\}$ a $O_2 = \{(x,z), x>0, 0\leq z\leq -1+\sqrt{2}$.
Pak

$$\text{na } O_1 \text{ je} \quad z^2+2z-1 = \frac{C^2}{x^2}, \quad \text{na } O_2 \text{ je} \quad -z^2-2z-1+2 = \frac{C^2}{x^2}\,.$$

Po zpětném dosazení za z jsou $y_{1,2} = -x \pm \sqrt{2x^2+C^2}$ dvě větve řešení, tedy předpoklad, že graf $y = Y(x)$ je grafem funkce je špatně.

Z výpočtu je vidět, že trajektorie jsou hyperboly $(y+x)^2 - 2x^2 = \tilde{C}^2$.

Poznamenejme, že jsme nezískali žádnou informaci o časové závislosti trajektorií.

Dynamické systémy

Dynamický systém...Evoluční pravidlo, které definuje trajektorii jako funkci jednoho parametru $t \in \mathbb{R}$ (času) na množině stavů M, typicky $M = \mathbb{R}^n$ (fázový nebo také stavový prostor). Stav systému v čase t závisí i na výchozím stavu, t.j. na stavu, ve kterém byl systém v čase $t = 0$. Označme $\varphi(t, \sigma)$, $t \in \mathbb{R}$, $\sigma \in M$, stav systému v čase t, jestliže v čase $t = 0$ byl systém ve stavu σ.

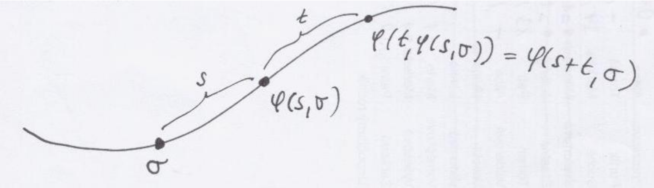
Dostaneme zobrazení

$$\varphi : \mathbb{R} \times M \longrightarrow M \quad (\varphi(t, \sigma) \in M)\,,$$

přičemž požadujeme, aby

1. $\varphi(0, \sigma) = \sigma$, t.j. v čase $t = 0$ byl systém ve stavu σ.
2. byla splněna aditivita času:

$$\varphi(t, \varphi(s, \sigma)) = \varphi(t + s, \sigma) \quad \forall t, s \in \mathbb{R},\ \forall \sigma \in M\,.$$



Dynamika systému

Definice Dvojice $\{S, \varphi\}$, kde φ splňuje 1. a 2. ... spojitý dynamický systém na stavovém prostoru S. Zobrazení φ ... dynamika systému

Úmluva V dalším budeme předpokládat, že stavový (fázový) prostor $S \subseteq \mathbb{R}^n$ je otevřená množina v $\mathbb{R}^n$, $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ ... stav systému.

Pro pevné $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ položme $\varphi_{\mathbf{x}}(t) = \varphi(t, \mathbf{x})$ $\forall t \in \mathbb{R}$, a pro pevné $t \in \mathbb{R}$ položme $\varphi^t(\mathbf{x}) = \varphi(t, \mathbf{x})$ $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$.

Dostali jsme dvě zobrazení:

$\underbrace{\varphi_{\mathbf{x}} : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}^n}$

parametrizace křivky procházející bodem $\mathbf{x}$,

$\varphi_{\mathbf{x}}(0) = \varphi(0, \mathbf{x}) = \mathbf{x} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$

$\underbrace{\varphi^t : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n}$

splňuje vlastnosti 1. a 2. $\Longrightarrow$

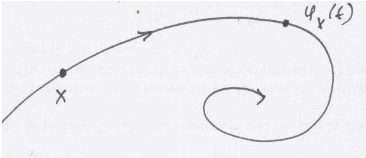
(i) $\varphi^0(\mathbf{x}) = \varphi(0, \mathbf{x}) = \mathbf{x} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$

neboli $\varphi^0 = \mathrm{id}\big|_{\mathbb{R}^n}$

(ii) $\varphi^t \circ \varphi^s = \varphi^{t+s} \Longrightarrow$

zobrazení φ^t je prosté, neboť existuje inverzní zobrazení $\left(\varphi^t\right)^{-1} = \varphi^{-t}$ protože $\varphi^{-t} \circ \varphi^t = \varphi^0 = \mathrm{id}$

Časový vývoj systému

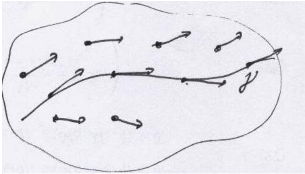


Bod $\mathbf{x}$ se pohybuje po křivce $\{\varphi_{\mathbf{x}}(t), t \in \mathbb{R}\}$, pohyb je určen vektorovým polem $\vec{v}(\mathbf{x})$ na stavovém prostoru $\mathbb{R}^n$. Jinými slovy: vektorové pole

$$\vec{v}(\mathbf{x}) = (v_1(\mathbf{x}), v_2(\mathbf{x}), \ldots, v_n(\mathbf{x}))$$

pohybuje stavovým bodem (počátečním stavem) $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n)$ po křivce $\{\varphi_{\mathbf{x}}(t), t \in \mathbb{R}\}$.

Křivka γ znázorňuje časový vývoj systému, tečné vektory ke křivce γ jsou rovny odpovídajícím vektorům vektorového pole $\vec{v}$.



Tedy pro dané vektorové pole $\vec{v}$ na stavovém prostoru $\mathbb{R}^n$ hledáme takové křivky (a jejich parametrizace), jejichž tečné vektory jsou rovny vektorům daného vektorového pole.

Tedy

$$\varphi_{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{x}(t) = \underbrace{(x_1(t), x_2(t), \ldots, x_n(t))}, \quad t \in \mathbb{R},$$

$n-$tice funkcí, které zadávají parametricky křivku γ

tečný vektor ke křivce γ v bodě $x(t)$ je vektor

$$\vec{\mathbf{x}}'(t) = (x_1'(t), x_2'(t), \ldots, x_n'(t)).$$

Dostáváme soustavu obyčejných diferenciálních rovnic (SODR) ve vektorovém tvaru:

$$\vec{\mathbf{x}}'(t) = \vec{\mathbf{v}}(\mathbf{x}(t)), \quad \text{obvykle píšeme jen} \quad \vec{\mathbf{x}}' = \vec{\mathbf{v}}(\mathbf{x}). \tag{10}$$

Rozepíšeme-li rovnici (10) po složkách, dostaneme soustavu n obyčejných diferenciálních rovnic 1. řádu (proměnnou t obvykle vynecháváme)

$$\begin{aligned} x_1'(t) &= v_1(x_1(t), x_2(t), \ldots, x_n(t)) \\ x_2'(t) &= v_2(x_1(t), x_2(t), \ldots, x_n(t)) \\ &\vdots \\ x_n'(t) &= v_n(x_1(t), x_2(t), \ldots, x_n(t)) \end{aligned}$$

Definice řešení a trajektorie řešení SODR

Definice Uspořádanou $n-$tici funkcí

$$\mathbf{x}(t) = (x_1(t), x_2(t), \ldots, x_n(t)), \quad t \in I \subset \mathbb{R}\,,$$

nazýváme řešením soustavy (10) obyčejných diferenciálních rovnic 1. řádu. Křivka, jejíž parametrizace je dána řešením $\mathbf{x}(t)$, se nazývá trajektorie řešení (trajektorie soustavy). Značíme ji obvykle γ nebo $\gamma_{\mathbf{x}}$, chceme-li zdůraznit, že trajektorie prochází bodem $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$.

Je-li $\mathbf{x}(t)$ řešením soustavy, $t_0 \in I$, $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, nazýváme $\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$ počáteční podmínkou pro řešení $\mathbf{x}(t)$. Příslušnou trajektorii značíme $\gamma_{\mathbf{x}_0}$.

Soubor všech trajektorií soustavy je fázový portrét soustavy.

★

Příklad

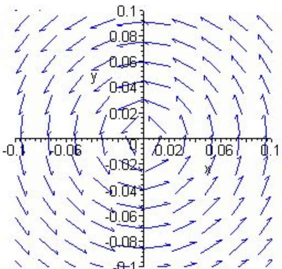
$$\begin{aligned} x' &= -y \\ y' &= x \end{aligned} \quad \Longrightarrow \quad \vec{\mathbf{v}}(x,y) = (-y, x)$$

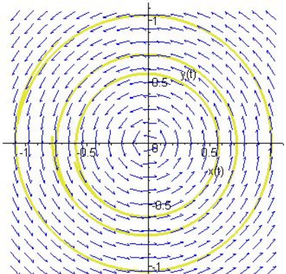
Řešení

$$\begin{aligned} x(t) &= r\cos(t) \\ y(t) &= r\sin(t) \end{aligned} \qquad r \geq 0,\ t \in \mathbb{R}$$

$(x(t), y(t)) \ldots$ parametrizace kružnice $S = [0, 0]$, poloměr $= r$

Fázový portrét je soubor všech trajektorií, trajektorie jsou soustředné kružnice.





★

Příklad Mějme soustavu

$$\begin{aligned} x' &= -\frac{y}{\sqrt{1+x^2+y^2}} \\ y' &= \frac{x}{\sqrt{1+x^2+y^2}} \end{aligned} \implies \vec{\mathbf{w}}(x,y) = \frac{1}{\sqrt{1+x^2+y^2}}(-y,x)\,.$$

Tedy

$$\vec{\mathbf{w}}(x,y) = \frac{1}{\sqrt{1+x^2+y^2}} \cdot \vec{\mathbf{v}},$$

t.j. směry vektorů pole $\vec{\mathbf{w}}$ jsou stejné jako směry vektorů pole $\vec{\mathbf{v}}$, a tedy vektory pole $\vec{\mathbf{w}}$ jsou tečné k soustředným kružnicím.

Známe tedy fázový portrét této soustavy, aniž bychom ji uměli řešit.

Fázový tok soustavy

Mějme soustavu (10) $\vec{\mathbf{x}}'(t) = \vec{\mathbf{v}}(\mathbf{x}(t))$. Zobrazení $\varphi : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$, pro které platí

(i) $\varphi(0, \mathbf{x}) = \mathbf{x} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$,

(ii) $\varphi(t, \varphi(s, \mathbf{x})) = \varphi(t + s, \mathbf{x}) \quad \forall t, s \in \mathbb{R}$,

(iii) $\dfrac{\mathrm{d}\varphi_{\mathbf{x}}(t)}{\mathrm{d}t} = \vec{\mathbf{v}}(\varphi_{\mathbf{x}}(t)) \quad \forall t \in \mathbb{R},\ \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$,

nazýváme fázovým tokem soustavy (10) respektive fázovým tokem vektorového pole $\vec{\mathbf{v}}$.

Poznámky

1. $\varphi(t, \mathbf{x}) = \varphi_{\mathbf{x}}(t)$ pro pevné $\mathbf{x}$ je řešením soustavy (10) s trajektorií $\gamma_{\mathbf{x}}$. $\varphi_{\mathbf{x}}(t)$ splňuje počáteční podmínku $\varphi_{\mathbf{x}}(0) = \mathbf{x}$. Jinak řečeno, $\mathbf{x}$ je počátečním stavem trajektorie $\gamma_{\mathbf{x}}$.
2. Fázový tok $\varphi : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$ představuje množinu všech řešení soustavy (10). Volbou různých počátečních stavů $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$ ve $\varphi(t, \mathbf{x})$ dostáváme různá řešení soustavy (10).

Typy trajektorií

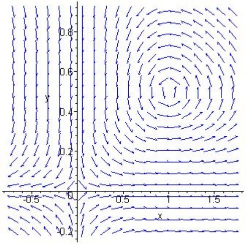
Řešme opět soustavu (10), t.j. $\overrightarrow{\mathbf{x}}'(t) = \overrightarrow{\mathbf{v}}(\mathbf{x}(t))$. Nechť $\varphi(t, \mathbf{x})$ je fázový tok této soustavy.

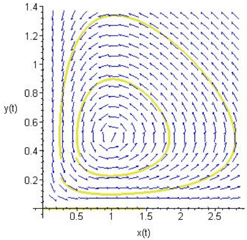
1. Je-li $\mathbf{x}_0$ rovnovážný stav soustavy (10), pak konstantní zobrazení $\varphi_{\mathbf{x}_0} : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}^n$ definované vztahem $\varphi_{\mathbf{x}_0} = \mathbf{x}_0 \quad \forall t \in \mathbb{R}$ je stacionárním řešením soustavy (10) mající jednobodovou trajektorii $\gamma_{\mathbf{x}_0} = \{\mathbf{x}_0\}$.

★ **Příklad** Najděte rovnovážné stavy soustavy

$$\begin{aligned} x' &= x - 2xy \\ y' &= -y + xy \end{aligned} \implies \begin{aligned} x - 2xy = 0 &\iff x = 0 \ \vee \ y = \frac{1}{2} \\ -y + xy = 0 &\iff x = 1 \ \vee \ y = 0 \end{aligned}$$

Soustava má dva rovnovážné stavy $S_1 = [0; 0]$, $S_2 = [1; 0,5]$. Na obr. je vektorové pole a fázový portrét, vykresleno v Maple. Co je špatně?





2. Uzavřená trajektorie: Existuje-li $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ a $T > 0$ takové, že

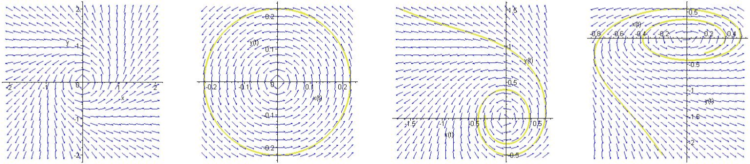
$$\varphi(0, \mathbf{x}_0) = \varphi(T, \mathbf{x}_0) = \mathbf{x}_0 \quad \text{a} \quad \varphi(t, \mathbf{x}_0) \neq \mathbf{x}_0 \ \forall t \in (0, T),$$

pak je trajektorie $\gamma_{\mathbf{x}_0}$ uzavřená nebo periodická s periodou T.

★ **Příklad** Uvažujme následující nelineární soustavu dvou diferenciálních rovnic:

$$\begin{aligned} x' &= -y + 0,5x(x^2 + y^2) \\ y' &= x + 0,5y(x^2 + y^2) \end{aligned}$$

Na obr. je vektorové pole a fázový portrét pro počáteční podmínky: $x(0) = 0,1; y(0) = 2,3$ (uzavřená trajektorie), $x(0) = 0,6; y(0) = 0,3$ a $x(0) = -0,6; y(0) = 0,3$.



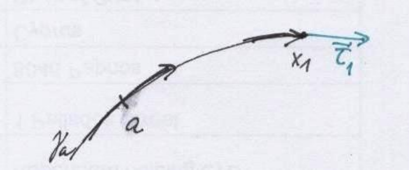
3. Trajektorie vcházející do resp. vycházející z rovnovážných stavů

Necht $\mathbf{x}_1$ je rovnovážný stav soustavy (10), $\gamma_{\mathbf{a}}$ trajektorie řešení $\varphi_{\mathbf{a}}(t)$, pro které platí

(i) $\lim_{t\to\infty} \varphi_{\mathbf{a}}(t) = \mathbf{x}_1$,

(ii) $\lim_{t\to\infty} \vec{\varphi}'_{\mathbf{a}}(t) = \vec{\tau}_1$.

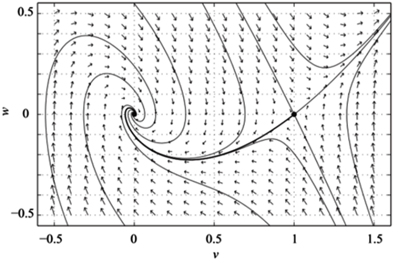
Říkáme, že trajektorie $\gamma_{\mathbf{a}}$ tohoto řešení vchází do rovnovážného stavu $\mathbf{x}_1$ ve směru vektoru $\vec{\tau}_1$.



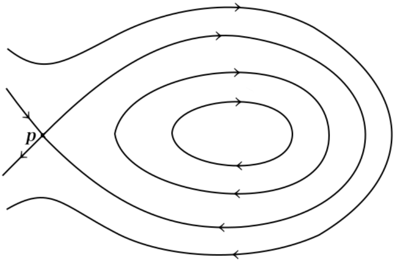
Platí-li pro trajektorii γ_a pouze (i) $\lim_{t\to\infty} \varphi_{\mathbf{a}}(t) = \mathbf{x}_1$ a limita φ'_a neexistuje, říkáme, že trajektorie "končí"v bodě $\mathbf{x}_1$. Trajektorie se v tomto případě blíží k rovnovážnému stavu "spirálovitě", t.j. nevstupuje do něj v určitém směru. Platí-li pro trajektorii γ_b pouze (i) a limita φ'_b neexistuje, říkáme, že trajektorie "začíná"v bodě $\mathbf{x}_2$.

4. heterokliniky, homokliniky

Necht $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ jsou rovnovážné stavy soustavy $\vec{\mathbf{x}}'(t) = \vec{\mathbf{v}}(\mathbf{x}(t))$.
Trajektorie γ, která vychází z, resp. začíná v rovnovážném stavu $\mathbf{x}_1$ a vchází, resp. končí v rovnovážném stavu $\mathbf{x}_2$ se nazývá heteroklinická trajektorie.
Trajektorie γ, která vychází z, resp. začíná v rovnovážném stavu $\mathbf{x}_1$ a vchází, resp. končí také v rovnovážném stavu $\mathbf{x}_1$ se nazývá homoklinická trajektorie.



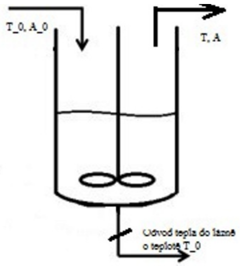
heteroklinika



homoklinika

★ Exotermní reakce 1. řádu v CSTR

$A \xrightarrow{k(T)} B$



Autokatalytický efekt:
Zvýšení teploty T zvýší rychlostní koeficient $k(T)$, tím se zvýší reakční rychlost, uvolní se reakční teplo a zvýší se teplota.

Inhibiční (regulační) efekt:
Snížení teploty odvodem tepla $\Rightarrow$ chlazení

Bilance složky A a entalpická bilance po převedení do bezrozměrného tvaru ($\alpha = \frac{c_A}{c_{A_{ref}}}$ je bezrozměrná koncentrace A, $\Theta = \frac{T - T_0}{T_{ref}}$ je bezrozměrná rozdílová teplota):

Bezrozměrné nezáporné parametry:

- κ_0 ... průtoční rychlost
- κ_T ... rychlost prostupu tepla
- D_a ... Damköhlerovo číslo (bezrozměrný rychlostní koeficient)
- β ... reakční entalpie
- $\gamma = \frac{RT_0}{E}$ ... reciproká aktivační energie

★

$$\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}\tau} = \underbrace{\kappa_0(\alpha_0 - \alpha)}_{\text{přítok - odtok } A} - \underbrace{D_a\,\alpha \exp\left(\frac{\Theta}{1+\gamma\Theta}\right)}_{\text{zánik } A \text{ reakcí}}$$

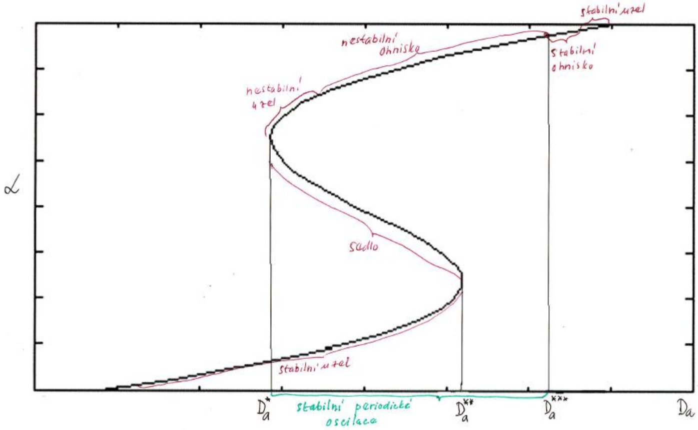
$$\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\tau} = \underbrace{-\kappa_T\Theta}_{1.} - \underbrace{\kappa_0\Theta}_{2.} + \underbrace{\beta D_a\,\alpha \exp\left(\frac{\Theta}{1+\gamma\Theta}\right)}_{3.}$$

1. chlazení médiem o teplotě T_0
2. odtok entalpie
3. nárůst entalpie při reakci

Dynamika zahrnuje:

a) vícenásobné stacionární stavy (studený, střední a horký)

b) destabilizaci stacionárního stavu za vzniku oscilací (limitní cyklus).



Pro $D_a < D_a^*$ jeden stabilní stacionární stav (studený)

Pro $D_a^* < D_a < D_a^{**}$ koexistence stabilního stacionárního stavu a stabilních periodických oscilací

Pro $D_a^{**} < D_a < D_a^{***}$ jeden stabilní limitní cyklus (periodické oscilace)

Pro $D_a > D_a^{***}$ jeden stabilní stacionární stav (horký)

Literatura k dalšímu studiu

- Hirsch, M. W. Differential equations, dynamical systems and introduction to chaos, 2nd ed.; Academic Press: San Diego, 2004. pdf
- Klíč, A.; Dubcová, M.; Buřič, L.; et al. Soustavy obyčejných diferenciálních rovnic – kvalitativní teorie, dynamické systémy, 1st ed.; VŠCHT Praha: Praha, 2009.
- Meiss J.D.: Differential dynamical systems. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2007.
- Rasmuson A., Andersson B., Olsson L., Andersson R.: Mathematical Modeling in Chemical Engineering. Cambridge University Press, 2014.
- Scheinerman E. R.: Invitation to Dynamical Systems. The John Hopkins University, 1996.