Piano Lauree Scientifiche "Matematica e Statistica" 2011-12

Modelli matematici e realtà:
Laboratorio computazionale sulle equazioni differenziali prima parte

R. Vermiglio[1]

[1]Dipartimento di Matematica e Informatica - Università degli Studi di Udine

19 aprile 2012

Chimica

Decadimento radioattivo

Il decadimento radioattivo è la transizione di alcuni nuclei atomici instabili verso uno stato avente energia minore, attraverso l'emissione di una o più particelle. L'atomo radioattivo si trasforma quindi in un altro atomo, che può essere a sua volta radioattivo oppure stabile.

Il momento di decadimento è casuale, ma si è osservato che il numero di decadimenti di un dato isotopo rispetta una precisa legge statistica ed è **proporzionale al numero di atomi presenti**.

Vogliamo descrivere la legge che regola il decadimento radioattivo usando il "linguaggio matematico" ovvero vogliamo scrivere il **modello matematico** di tale fenomeno reale

Decadimento radioattivo: costruiamo il modello matematico

Indichiamo con

- $N(t)$ il numero di atomi presenti al tempo t (**variabile di stato**)
- $\lambda > 0$ la costante di decadimento dell'isotopo, che descrive la probabilità che un atomo decada in un secondo

Il numero di atomi decaduti in un intervallo di tempo Δt risulta

$$\lambda \Delta t N(t)$$

e quindi

$$N(t + \Delta t) = N(t) - \lambda \Delta t N(t),$$

da cui si ottiene

$$N(t + \Delta t) - N(t) = -\lambda \Delta t N(t)$$

Decadimento radioattivo, continua

Dividendo per Δt e passando al limite per $\Delta t \to 0$

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{N(t+\Delta t) - N(t)}{\Delta t} = -\lambda N(t),$$

si ottiene l'equazione differenziale ordinaria che rappresenta il (**modello matematico**) per il decadimento radioattivo

Modello decadimento radioattivo

$$N'(t) = -\lambda N(t)$$

Decadimento radioattivo: troviamo la soluzione

Dato il numero N_0 di atomi presenti nel campione all'istante iniziale $t = 0$, vogliamo risolvere

$$\begin{cases} N'(t) = -\lambda N(t), & t > 0 \\ N(0) = N_0 \end{cases}$$

Dividiamo l'equazione differenziale per $N(t) \neq 0$

$$\frac{N'(t)}{N(t)} = -\lambda$$

ed integriamo tra 0 e t

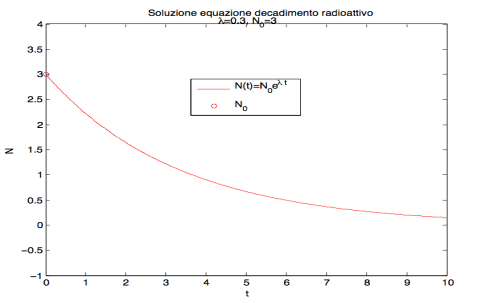
$$\int_0^t \frac{N'(s)}{N(s)} ds = -\int_0^t \lambda ds$$

$$\log(N(t)) - \log(N_0) = -\lambda t$$

Decadimento radioattivo: la soluzione

Soluzione

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}, \quad t > 0$$



Decadimento radioattivo: applicazioni

- Calcolo del tempo di dimezzamento: $T = \frac{\log(2)}{\lambda}$
- Datazione di reperti di origine organica con il metodo del ^{14}C :

$$t = \frac{1}{\lambda} \cdot \log \frac{N_0}{N(t)}$$

Fu proposto dal chimico statunitense Willard Frank Libby, che vinse il premio Nobel nel 1960.

Willard Frank Libby (1908-1980)

Dinamica di popolazioni

Modello di crescita di Malthus

Malthus era uno studioso inglese di economia politica e demografia.


Thomas Robert Malthus (1766 -1834)

Egli propose un semplice modello per lo studio della crescita di una popolazione in un **ambiente chiuso** e **con risorse illimitate**.

Sia $u(t)$ la numerosità della popolazione all'istante $t \geq 0$. La sua crescita nell'intervallo di tempo Δt è data dalla differenza tra il numero di individui nati ed il numero di individui morti nel periodo Δt. Supponendo che le **nascite** e le **morti** siano **proporzionali alla popolazione**, si ottiene

$$u(t+\Delta t) = u(t) + (n\Delta t)u(t) - (m\Delta t)u(t), \quad t \geq 0,$$

dove n, m sono il tasso di **natalità** e **mortalità** (nati e morti nell'unità di tempo).

Modello di Malthus, continua

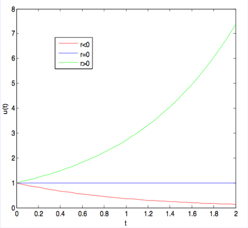
Indicato con $r = n - m$ il tasso di **riproduzione** della popolazione, passando al limite per $\Delta t \to 0$, otteniamo l'equazione differenziale

$$u'(t) = r\,u(t), \quad t \geq 0.$$

Noto il valore iniziale $u(0) = u_0$, la soluzione risulta

$$u(t) = u_0 e^{rt}, \quad t \geq 0.$$

Se $r < 0$ la popolazione decresce ed è destinata all'estinzione in un tempo infinito, se $r = 0$ rimane costante, mentre se $r > 0$ la continua a crescere.

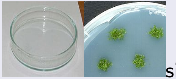


Adeguatezza e adattibilità del modello

Questo semplice modello di crescita può essere appropriato in una fase iniziale di sviluppo, quando la popolazione non ha vincoli di spazio e risorse.

Esempio

Una popolazione di batteri in disco di Petri piuttosto grande



sinistra: disco di Petri; destra: Physcomitrella

Ciò definisce l' ADEGUATEZZA del modello alla descrizione del fenomeno.

Abbiamo già incontrato la stessa equazione differenziale quando abbiamo studiato il decadimento radioattivo!!
Uno stesso modello matematico può essere proposto per descrivere fenomeni in diversi contesti applicativi, cambiando significato alle variabili di stato e ai suoi parametri. Questo aspetto è molto importante viene definito come ADATTABILITÀ del modello.

Le equazioni differenziali

Le Equazioni Differenziali Ordinarie (EDO) sono relazioni tra delle funzioni incognite e le loro derivate.

Se indichiamo con $u(t)$ la funzione incognita, allora un'**equazione differenziale ordinaria** è

$$u'(t) = f(t, u(t)), \quad t_0 \leq t \leq t_f \tag{1}$$

Sotto opportune ipotesi sulla funzione f, che descrive la **legge di evoluzione**, **esiste** ed è **unica** la soluzione di (1) che soddisfa alle condizioni iniziali

$$u(t_0) = u_0 \tag{2}$$

Quando ci sono più equazioni si parla di **sistema** di EDO.

I sistemi di EDO rappresentano uno dei **modelli matematici** più importanti nella descrizione della dinamica di fenomeni reali.

Modello numerico

In generale è difficile ottenere una formula esplicita per la soluzione del problema a valori iniziali (1)-(2).

Abbiamo bisogno dei metodi per l'approssimazione delle soluzioni che possono essere implementati sul calcolatore $\rightsquigarrow$ **modello numerico**.

L'introduzione e il largo impiego dei calcolatori nel campo scientifico ha consentito di trattare problemi di dimensioni sempre maggiori e sempre più complessi.

Allo stesso tempo ha reso necessario lo sviluppo e l'analisi di metodi di risoluzione computazionalmente più efficienti.

Il metodo di Eulero

Suddividiamo $[t_0, t_f]$ in N sottointervalli $[t_n, t_{n+1}]$ di ampiezza $h = \frac{t_f - t_0}{N}$, i.e.

$$t_0 < t_1 < ... < t_N = t_f, \quad t_{n+1} = t_n + h, n = 0, 1, ..., N.$$

Da

$$u'(t_0) = f(t_0, u_0) \approx \frac{u(t_0 + h) - u(t_0)}{h}$$

abbiamo che

$$u(t_0 + h) \approx u_1 = u_0 + hu'(t_0) = u_0 + hf(t_0, u_0).$$

Applicando ricorsivamente tale formula, otteniamo

$$u_{n+1} = u_n + hf(t_n, u_n), \quad n \geq 0,$$

dove

$$u_n \approx u(t_n), n = 1, 2, .., , N.$$

Tale tecnica di approssimazione è nota come metodo di Eulero 

Altri algoritmi più accurati ed efficienti sono stati sviluppati e studiati per approssimare le soluzioni di equazioni differenziali ordinarie.

Nell'attività di laboratorio computazionale analizzeremo il comportamento delle soluzioni di alcuni semplici modelli matematici (**simulazione numerica**)

Impareremo a disegnare i grafici delle funzioni e useremo dei programmi che fanno uso delle funzioni (**function**) che il MATLAB mette a disposizione per la risoluzione di sistemi di equazioni differenziali ordinarie.

Impareremo a scrivere una **function** per la risoluzione di sistemi di equazioni differenziali ordinarie con il metodo di Eulero.

Modello di Verhulst

Dopo aver letto del modello di crescita di una popolazione di Malthus,

Pierre F. Verhulst (1804-1849)

il matematico Verhulst ne propose nel 1838 un miglioramento per descrivere le auto-limitazioni alla crescita dovute a risorse limitate (competizione interna alla popolazione)

$$u'(t) = ru(t)(1 - \frac{u(t)}{k}) = ru(t) - \mathbf{c}u(t)^2, \quad t \geq 0 \tag{3}$$

dove $r > 0$ rappresenta il tasso di crescita e $k > 0$ la capacità. Il parametro $\mathbf{c} = \frac{r}{k} > 0$ descrive la competizione interna.

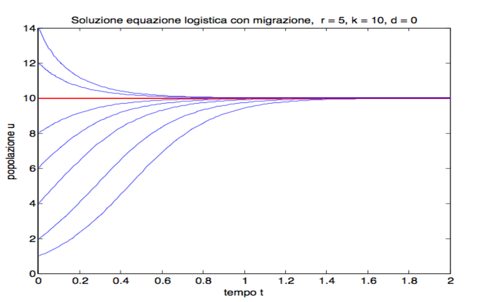
L'equazione viene chiamata anche **equazione logistica**.

Modello di Verhulst, continua

Assegnato un valore iniziale $u(0) = u_0 > 0$, la soluzione risulta

$$u(t) = \frac{k u_0 e^{rt}}{k - u_0(e^{rt} - 1)} = \frac{k}{1 + k_0 e^{-rt}}, \quad t \geq 0, \tag{4}$$

dove $k_0 = \frac{k - u_0}{u_0}$. Tale funzione si chiama **funzione sigmoidea**.



Soluzioni equazione logistica $r = 5$, $k = 10$.

Modello di Verhulst, continua

La **legge di evoluzione** è data dalla parabola

$$f(u) = ru(1 - \frac{u}{k}).$$

- $f(0) = f(k) = 0 \rightsquigarrow$ ci sono due soluzioni costanti $u_1 = 0$ e $u_2 = k$. Tali soluzioni si chiamano **soluzioni stazionarie** o **equilibri**. Perchè secondo te hanno questo nome?
- $f(u) > 0, 0 < u < k \rightsquigarrow$ per valori iniziali u_0 tali che $0 < u_0 < k$, $u(t)$ cresce con t. Inoltre $\lim_{t\to+\infty} u(t) = k$;
- $f(u) < 0, u > k \rightsquigarrow$ per valori iniziali u_0 tali che $u_0 > k$, $u(t)$ decresce con t. Inoltre $\lim_{t\to+\infty} u(t) = k$;

Altri modelli di crescita

Volendo tener conto di una **migrazione** di una frazione $d > 0$ della popolazione per unità di tempo, si ottiene il modello

$$u'(t) = ru(t)(1 - \frac{u(t)}{k}) - du(t), \quad t \geq 0. \tag{5}$$

Volendo tener conto di una riduzione dovuta a un **prelievo p** costante nel tempo (es. pesca o caccia), si ottiene il modello

$$u'(t) = ru(t)(1 - \frac{u(t)}{k}) - \mathbf{p}, \quad t \geq 0. \tag{6}$$

Per descrivere una crescita che risulta difficile quando gli individui sono pochi, è più rapida quando gli individui aumentano (**effetto branco**) e rallenta quando si supera una soglia, si può considerare il modello

$$u'(t) = ru^2(t)(1 - \frac{u(t)}{k}) \quad t \geq 0. \tag{7}$$

Simulazione numerica

La **function**

$$[tout, uout, ustar] = sologistica(tspan, u0, r, k, p, d)$$

calcola un'approssimazione della soluzione del problema

$$\begin{cases} u'(t) = r u(t)(1 - \frac{u(t)}{k}) - d u(t) - \mathbf{p}, \quad t \in [t_0, t_f], \\ u(t_0) = u0 \end{cases} \tag{8}$$

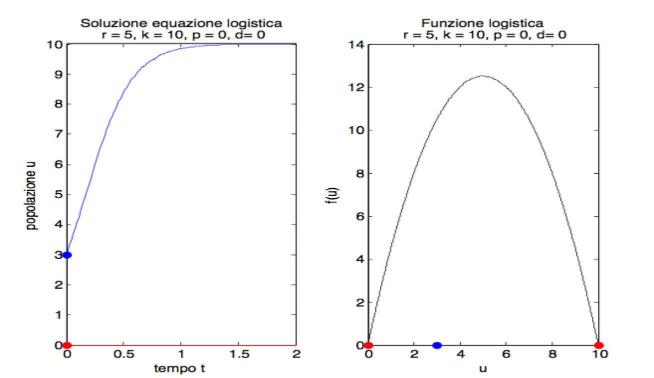
dove $tspan = [t_0 \ \ t_f]$, $u0$ è il valore iniziale, $r > 0$ rappresenta il tasso di crescita, $k > 0$ la capacità, $d \geq 0$ il tasso di migrazione e $\mathbf{p} \geq 0$ il prelievo. Il vettore *uout* contiene i valori approssimati della soluzione di (8) nei punti del vettore *tout*, *ustar* contiene i valore dei punti di equilibrio.

Inoltre **sologistica** disegna i grafici della soluzione e della funzione che descrive la legge di evoluzione

$$f(u) = r u(1 - \frac{u}{k}) - d u - \mathbf{p}$$

Esempio

$>>$[tout,uout,ustar] $=$ sologistica([0 2],3,5,10,0,0)



Soluzione equazione logistica (3) con $r = 5$, $k = 10$

Equazione logistica

Poni $\mathbf{p} = 0$ e $d = 0$ e usa la **function sologistica** per simulare numericamente il comportamento delle soluzioni di (3)

- $u_1 = 0$ e $u_2 = k$ sono i punti di equilibrio. Come si comporta la soluzione se il valore iniziale $u0 = 0$ o $u0 = k$?
- Come si comporta la soluzione per valori iniziali $u0$ tali che $0 < u0 < k$?
- Come si comporta la soluzione per valori iniziali $u0$ tali che $u0 > k$?
- $u_1 = 0$ e $u_2 = k$ sono i punti di equilibrio.
- Varia i parametri r, k e descrivi il comportamento delle soluzioni.
- Con i vettori $tout, uout$ e la funzione del MATLAB **plot** disegna il grafico della soluzione.

Equazione logistica con migrazione

Poni **p** $= 0$ e $0 < d < r$ e usa **sologistica** per studiare il comportamento delle soluzioni di (5).

- Varia il valore iniziale $u0$. Osserva i valori di equilibrio $ustar = [u_1, u_2]$. Ci sono due equilibri $0 < u_1 < u_2 < k$? Verifica che $u_2 = k(1 - \frac{d}{r})$.
- Come si comporta la soluzione se il valore iniziale $u0 = 0$ o $u0 = u_2$?
- Come si comporta la soluzione per valori iniziali $u0$ tali che $0 < u0 < u_2$?
- Come si comporta la soluzione per valori iniziali $u0$ tali che $u0 > u_2$?
- Cosa è cambiato rispetto all'equazione senza migrazione?
- Varia i parametri r, k, d e descrivi il comportamento delle soluzioni.
- Con i vettori $tout, uout$ e la funzione del MATLAB **plot** disegna il grafico della soluzione.

La presenza della migrazione non ha modificato il comportamento qualita-

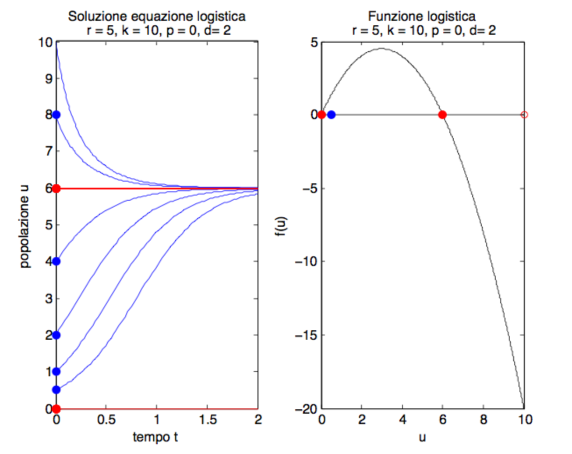
Simulazione equazione logistica con migrazione

Se $0 < d < r$, si osserva che

- ci sono due equilibri $u_1 = 0$ e $u_2 = k(1 - \frac{d}{r}) > 0$;
- per valori iniziali u_0 tali che $0 < u_0 < u_2$, $u(t)$ cresce con t e $\lim_{t\to+\infty} u(t) = u_2$;
- per valori iniziali u_0 tali che $u_0 > u_2$, $u(t)$ decresce con t e $\lim_{t\to+\infty} u(t) = u_2$.

La presenza della migrazione non ha modificato il comportamento qualitativo delle soluzioni, ma ha abbassato il valore dell'equilibrio non nullo, che è positivo solo se $0 < d < r$.

Simulazione equazione logistica con migrazione



Soluzioni equazione logistica con migrazione $r = 5$, $k = 10$, $d = 2$.

Equazione logistica con prelievo

Poni $d = 0$ e usa la **function sologistica** per studiare il comportamento delle soluzioni di (6).
Sia $4\mathbf{p} < rk$.

- Varia il valore iniziale $u0$. Osserva i valori di equilibrio $ustar = [u_1, u_2]$. Ci sono due equilibri $0 < u_1 < u_2 < k$?
- Come si comporta la soluzione per valori iniziali $u0$ inferiori al valore critico u_1? La popolazione si può estinguersi in tempo finito?
- Come si comporta la soluzione per valori iniziali $u0$ tali che $u_1 < u0 < u_2$?
- Come si comporta la soluzione per valori iniziali $u0$ tali che $u0 > u_2$?
- Varia i parametri $r, k, \mathbf{p}$ e descrivi il comportamento delle soluzioni.

Equazione logistica con prelievo, continua

Sia $4\mathbf{p} = rk$.

- Come si comporta la soluzione se $u_0 = \frac{k}{2}$? C'è un unico equilibrio?
- Come si comporta la soluzione se per valori iniziali inferiori al valore critico $\frac{k}{2}$? La popolazione si estingue in tempo finito?
- Come si comporta la soluzione per valori iniziali $u_0 > \frac{k}{2}$?
- Varia i parametri $r, k, \mathbf{p}$ e descrivi il comportamento delle soluzioni.

Equazione logistica con prelievo, continua

Sia $4\mathbf{p} > rk$.

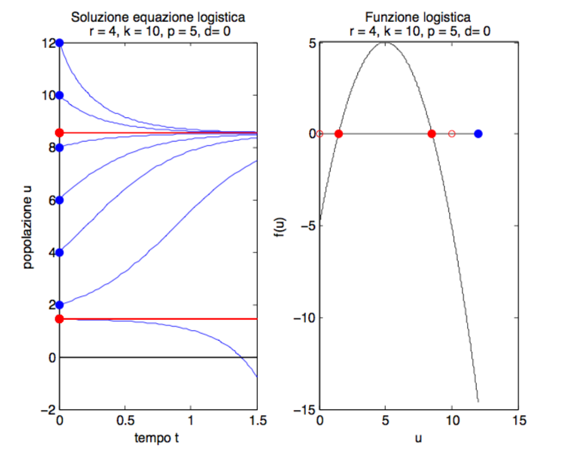
- Osserva il comportamento delle soluzioni al variare u_0? La popolazione si estingue?
- Ci sono punti di equilibrio?
- Varia i parametri $r, k, \mathbf{p}$ e descrivi il comportamento delle soluzioni.

Simulazione equazione logistica con prelievo $4\mathbf{p} < rk$

Se $4\mathbf{p} < rk$, si osserva che

- ci sono due equilibri $0 < u_1 < u_2 < k$
- per valori iniziali inferiori al valore critico u_1, la popolazione si può estinguere in tempo finito;
- per valori iniziali u_0 tali che $u_1 < u_0 < u_2$, la popolazione $u(t)$ cresce con t e $\lim_{t\to+\infty} u(t) = u_2$;
- per valori iniziali u_0 tali che $u_0 > u_2$, la popolazione $u(t)$ decresce con t e $\lim_{t\to+\infty} u(t) = u_2$;

Simulazione equazione logistica con prelievo $4\mathbf{p} < rk$



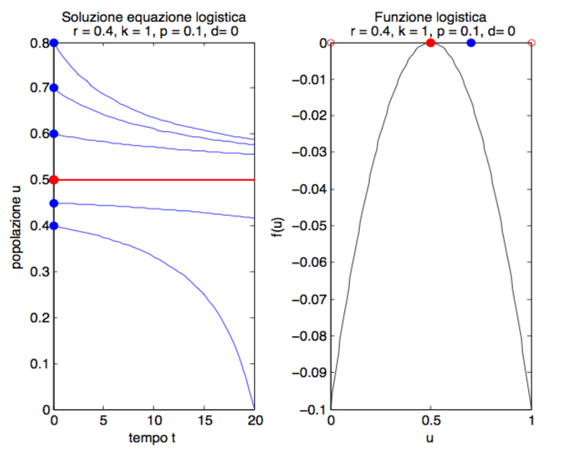
Soluzioni equazione logistica con prelievo $r = 4, k = 10, \mathbf{p} = 5$.

Simulazione equazione logistica con prelievo $4\mathbf{p} = rk$

Se $4\mathbf{p} = rk$, si osserva che

- c'è un unico equilibrio, i.e. $u_1 = u_2 = \frac{k}{2}$;
- per valori iniziali inferiori al valore critico $\frac{k}{2}$, la popolazione si estingue in tempo finito;
- per valori iniziali $u_0 > \frac{k}{2}$, la popolazione $u(t)$ decresce con t e $\lim_{t\to+\infty} u(t) = \frac{k}{2}$;

Simulazione equazione logistica con prelievo $4\mathbf{p} = rk$



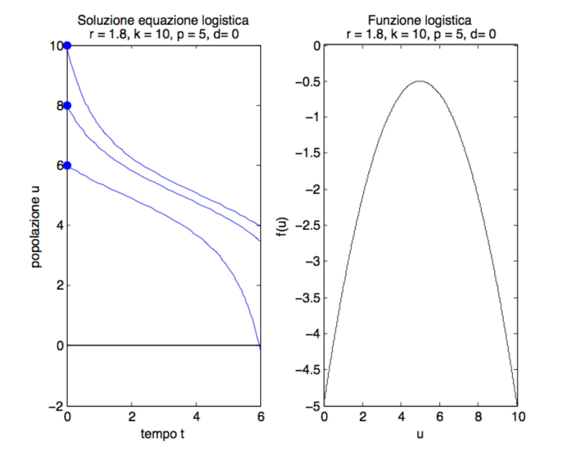
Soluzioni equazione logistica con prelievo $r = 0.4$, $k = 1$, $\mathbf{p} = 0.1$.

Simulazione equazione logistica con prelievo $4\mathbf{p} > rk$

Se $4\mathbf{p} > rk$, si osserva che

- non ci sono equilibri;
- per ogni valore iniziale $u_0 > 0$, la popolazione si estingue in tempo finito.

Simulazione equazione logistica con prelievo $4\mathbf{p} > rk$



Soluzioni equazione logistica con prelievo $r = 1.8, k = 10, \mathbf{p} = 5.$

Equazione logistica con prelievo e/o migrazione, continua

Usa la **function sologistica** per simulare il comportamento delle soluzioni dell'equazione logistica (8) in presenza di migrazione e/o prelievo, variando il valore inziale $u0$ ed i parametri r, k, d, $\mathbf{p}$

Interpreta e commenta i risultati delle simulazioni alla luce di quanto ottenuto nei casi analizzati in precedenza.

Un semplice codice

Risolve (1)-(2) con il metodo di Eulero in $tspan = [t_0 \;\; t_f]$

```
function [tout,uout]=EE(f,tspan,u0,N)
t0=tspan(1);
tf=tspan(end);
h=(tf-t0)/N;
tout=[t0:h:tf];
uout(1)=u0;
n=1;
while n < (N+1)
   u=uout(n);
   t=tout(n);
   uder = f(t,u);
   uout(n+1) = u + h*uder;
   n= n + 1;
end
```

L'approssimazione della soluzione dell'equazione logistica (3) con $r = 5$ e $k = 10$ con valore iniziale $u0 = 2$ in $[0, 10]$ con il metodo di Eulero si ottiene con

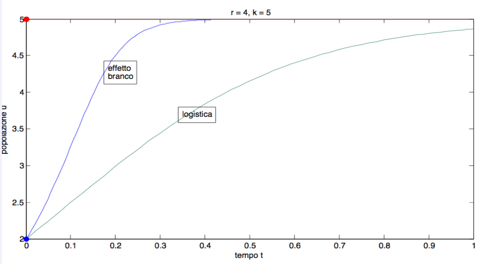
```
>>r=5;
>>k=10;
>>fode=@(t,u)r*u*(1-u/k);
>>[t,u]=EE(fode,[0 10],2,100);
```

- Disegna il grafico della soluzione numerica ed il grafico della soluzione esatta (4).
- Come puoi calcolare l'errore dell'approssimazione?
- Come si comporta l'errore aumentando N e riducendo quindi h?

Simulazione numerica equazione con effetto branco

Per simulare numericamente la soluzione dell'equazione logistica con effetto branco (7), modifica la definizione di *fode* e usa il codice **ode 45** di MATLAB come segue

```
>> [tout,uout]=ode45(fode,[0 20],[2 0]);
>> plot(tout,uout);
```



Soluzione equazione logistica senza e con effetto branco $r = 4$, $k = 5$ (ode45)