ΤΜΗΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ Ε.Κ.Π.Α.
715. ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΒΙΟΛΟΓΙΑ
14 ΙΟΥΝΙΟΥ 2022

Θέματα γνωριμίας ☺

- Όλα τα ερωτήματα (κεφαλαία λατινική αρίθμηση) βαθμολογούνται ισόποσα με 1 μονάδα.
- Κάθε ερώτημα θεωρεί δεδομένα τα προηγούμενα ασχέτως αν έχουν απαντηθεί ή όχι.

Δίνεται ο ακόλουθος χημικός μηχανισμός

$$
\begin{aligned}
A + C &\xrightarrow{k_1} 2C \\
C &\xrightarrow{k_2} B \\
A + C &\xrightarrow{k_3} E \\
&\overset{k_4[A]}{\dashrightarrow} A,
\end{aligned}
$$

όπου όλες οι παράμετροι είναι θετικές και, επιπλέον, $k_1 > k_3$.

$\boxed{\text{I.}}$ Να εξάγετε το αντίστοιχο σύστημα διαφορικών εξισώσεων, το οποίο και να απλοποιήσετε σε ένα 2×2, ως

$$\frac{\mathrm{d}[A]}{\mathrm{d}t} = \alpha [A] - \beta [A][C] \tag{1α'}$$

$$\frac{\mathrm{d}[C]}{\mathrm{d}t} = -\gamma [C] + \delta [A][C], \tag{1β'}$$

προσδιορίζοντας τις θετικές παραμέτρους $\alpha, \beta, \gamma, \delta$.

Θεωρούμε το πρόβλημα Cauchy για το παραπάνω μοντέλο ως εξής:

Με δεδομένα $[A]_0, [C]_0 \geq 0$, *αναζητούμε διάστημα* $\mathcal{I} \subseteq \mathbb{R}$ *με* $0 \in \mathcal{I}$ *και συνάρτηση* $([A], [C]) : \mathcal{I} \to [0, \infty)^2$, *τέτοια ώστε η* $([A], [C])$ *να ικανοποιεί τόσο το* (1) *στο* $(\mathcal{I} \setminus \{0\})^\circ$ *όσο και την* $([A], [C]) = ([A]_0, [C]_0)$ *για* $t = 0$. (Π_1)

Θεωρούμε, επίσης, δεδομένη την ύπαρξη μοναδικής, ομαλής, μεγιστικής και συνεχώς εξαρτώμενης από τα αρχικά δεδομένα λύσης του (Π_1).

$\boxed{\text{II.}}$ Να αποδείξετε την ολικότητα της λύσης του (Π_1).

$\boxed{\text{III.}}$ Να υπολογίσετε τα σημεία ισορροπίας του (Π_1).

$\boxed{\text{IV.}}$ Να βρείτε την αδιαστατοποιημένη εκδοχή του (Π_1), (Π_2), αιτιολογώντας ότι το (1) θα πάρει την ακόλουθη μορφή:

$$\frac{\mathrm{d}A_\alpha}{\mathrm{d}t_\alpha} = A_\alpha - A_\alpha C_\alpha \tag{2α'}$$

$$\frac{\mathrm{d}C_\alpha}{\mathrm{d}t_\alpha} = k\left(-C_\alpha + A_\alpha C_\alpha\right), \tag{2β'}$$

όπου k θετική αδιάστατη σταθερά.

$\boxed{\text{V.}}$ Να βρείτε τις μηδενοκλινείς καμπύλες και να απεικονίσετε αδρά το πεδίο διευθύνσεων.

$\boxed{\text{VI.}}$ Να βρείτε:

i. Την λύση του (Π_2) όταν $A_{\alpha 0} \coloneqq A_\alpha(0) = 0$ και $C_{\alpha 0} \coloneqq C_\alpha(0) \neq 0$.
ii. Την λύση του (Π_2) όταν $A_{\alpha 0} \neq 0$ και $C_{\alpha 0} = 0$.
iii. Τα αναλλοίωτα σύνολα του προβλήματος (Π_2).

$\boxed{\text{VII.}}$ Να επιχειρήσετε τον χαρακτηρισμό της ευστάθειας των σημείων ισορροπίας του (Π_2) μέσω γραμμικοποίησης.

$\boxed{\text{VIII.}}$ Να επαληθεύσετε ότι αν $A_{\alpha 0} \neq 0$ και $C_{\alpha 0} \neq 0$, τότε η λύση του (Π_2) σε πεπλεγμένη μορφή είναι η ακόλουθη:

$$\ln C_\alpha(t_\alpha) - C_\alpha(t_\alpha) + k\left(\ln A_\alpha(t_\alpha) - A_\alpha(t_\alpha)\right) = \underbrace{\ln C_{\alpha 0} - C_{\alpha 0} + k\left(\ln A_{\alpha 0} - A_{\alpha 0}\right)}_{\text{σταθερό}}.$$

$\boxed{\text{IX.}}$ Να δείξετε ότι αν $A_{\alpha 0} \neq 0$ και $C_{\alpha 0} \neq 0$, τότε η λύση είναι περιοδική.

<u>Υπόδειξη:</u> Αξιοποιήστε το διάγραμμα φάσης και υπολογίστε την μονοτονία της συνάρτησης $f(x) \coloneqq \ln x - x$.

$\boxed{\text{X.}}$ Να βρείτε την μέση τιμή της λύσης ανά περίοδο όταν $A_{\alpha 0} \neq 0$ και $C_{\alpha 0} \neq 0$.

<u>Λύσεις</u>

$\boxed{\text{I.}}$ Από τον παραπάνω χημικό μηχανισμό, καταλήγουμε στις εξισώσεις

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}[A]}{\mathrm{d}t} &= -(k_1 + k_3)[A][C] + k_4[A]\\
\frac{\mathrm{d}[C]}{\mathrm{d}t} &= (k_1 - k_3)[A][C] - k_2[C],\\
\frac{\mathrm{d}[B]}{\mathrm{d}t} &= k_2[C],\\
\frac{\mathrm{d}[E]}{\mathrm{d}t} &= k_3[A][C],
\end{aligned}$$

ή, ισοδύναμα και απλούστερα, στο σύστημα διαφορικών εξισώσεων (1), όπου $\alpha = k_4, \beta = k_1 + k_3, \gamma = k_2, \delta = k_1 - k_3$.

$\boxed{\text{II.}}$ Γνωρίζουμε ότι για το πρόβλημα (Π_1) υπάρχει μοναδική, ομαλή, μεγιστική και συνεχώς εξαρτώμενη από τα αρχικά δεδομένα λύση

$$([A],[C]) : (-\varepsilon_1, \varepsilon_2) \to [0,\infty)^2,$$

όπου $0 < \varepsilon_1, \varepsilon_2 \leq \infty$.

Έστω ότι η μεγιστική αυτή λύση δεν είναι θετικά ολική, δηλαδή $\varepsilon_2 < \infty$, άρα (στο συγκεκριμένο πρόβλημα) θα πρέπει η λύση να εκρήγνυται καθώς ο χρόνος τείνει στο ε_2. Θα καταλήξουμε σε άτοπο. Έστω $T \in (0, \varepsilon_2)$. Παρατηρώντας την (1α′), έχουμε ότι

$$\frac{\mathrm{d}[A]}{\mathrm{d}t} \leq \alpha[A],$$

άρα από σύγκριση έχουμε ότι

$$\max\left\{[A](t)\,\middle|\,t\in[0,T]\right\}\le[A]_0e^{\alpha T}=:A.$$

Επιπλέον, από την (1β′) έχουμε ότι

$$\frac{\mathrm{d}[C]}{\mathrm{d}t}\le\delta[A][C],$$

άρα ξανά από σύγκριση έχουμε ότι

$$\max\left\{[C](t)\,\middle|\,t\in[0,T]\right\}\le[C]_0\,\mathrm{e}^{\delta AT}.$$

Δηλαδή η λύση είναι φραγμένη στο $[0,T]$ από μια σταθερά που εξαρτάται συνεχώς (και κατά αύξοντα τρόπο) από το T. Αφού το T είναι αυθαίρετο, παίρνουμε το όριο για $T\to{\varepsilon_2}^-$ για να καταλήξουμε σε άτοπο.

Όσον αφορά το ε_1 και την αρνητική ολικότητα της μεγιστικής λύσης, πάλι θα χρησιμοποιήσουμε την μέθοδο της σύγκρισης, αφού όμως πρώτα αντιστρέψουμε τον χρόνο. Πράγματι αν

$$([A],[C])\colon(-\varepsilon_1,\infty)\to[0,\infty)^2$$

είναι η θετικά ολική μεγιστική λύση του (1) που βρήκαμε παραπάνω, τότε για την

$$\begin{aligned}(\chi,\psi)\colon(-\infty,\varepsilon_1)&\to[0,\infty)^2\\ s&\mapsto(\chi(s),\psi(s))\coloneqq([A](-s),[C](-s)),\end{aligned}$$

ισχύει ότι

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\chi}{\mathrm{d}s}&=-\alpha\chi+\beta\chi\psi\\ \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}s}&=\gamma\psi-\delta\chi\psi,\end{aligned}$$

καθώς επίσης ότι $(\chi(0),\psi(0))=([A]_0,[C]_0)$. Άρα,

$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}s}\le\gamma\psi,$$

συνεπώς, για αυθαίρετο $S\in(0,\varepsilon_1)$ ισχύει ότι

$$\max\left\{\psi(s)\,\middle|\,s\in[0,S]\right\}\le[C]_0\,\mathrm{e}^{\gamma S}=:B.$$

Επιπλέον, έχουμε ότι

$$\frac{\mathrm{d}\chi}{\mathrm{d}t}\le\beta\chi\psi,$$

δηλ.

$$\max\left\{\chi(s)\,\middle|\,s\in[0,S]\right\}\le[A]_0\,\mathrm{e}^{\beta BS}.$$

Έτσι, μπορούμε να καταλήξουμε με απαγωγή σε άτοπο στο ότι $\varepsilon_1=\infty$, επίσης.

$\boxed{\text{III.}}$ Τα σημεία ισορροπίας του (Π_1) είναι

$$\left([A]^*,[C]^*\right)=\begin{cases}(0,0),\\ \left(\frac{\gamma}{\delta},\frac{\alpha}{\beta}\right).\end{cases}$$

$\boxed{\text{IV.}}$ Σύμφωνα με τον αλγόριθμο αδιαστατοποίησης με το σημείο ισορροπίας, επιλέγουμε τις ποσότητες $\frac{\gamma}{\delta}, \frac{\alpha}{\beta}$, ως χαρακτηριστικές ποσότητες για την αδιαστατοποίηση των εξαρτημένων μεταβλητών $[A], [C]$, αντίστοιχα, του (Π_1) . Άρα έχουμε

$$A_\alpha(t_\alpha) \coloneqq \frac{\delta}{\gamma}[A](t_\alpha),\ C_\alpha(t_\alpha) \coloneqq \frac{\beta}{\alpha}[C](t_\alpha) \text{ και } t_\alpha \coloneqq \frac{t}{t_*},\ t_* > 0,$$

με t_* που μένει να προσδιοριστεί, και έτσι το (1) παίρνει τη μορφή

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}A_\alpha}{\mathrm{d}t} &= \alpha\left(A_\alpha - A_\alpha C_\alpha\right) \\ \frac{\mathrm{d}C_\alpha}{\mathrm{d}t} &= \gamma\left(-C_\alpha + A_\alpha C_\alpha\right), \end{aligned}$$

Συμπεραίνουμε, επομένως, ότι $t_* = \frac{1}{\alpha}$, δηλαδή $t_\alpha = \alpha t$. Έτσι καταλήγουμε στο σύστημα (2), όπου $k = \frac{\gamma}{\alpha}$ αδιάστατη θετική σταθερά.

Η αδιαστατοποιημένη εκδοχή του (Π_1) είναι η ακόλουθη

Με δεδομένα $[A]_0, [C]_0 \geq 0$, αναζητούμε διάστημα $\mathcal{I} \subseteq \mathbb{R}$ με $0 \in \mathcal{I}$ και συνάρτηση $(A_\alpha, C_\alpha) : \mathcal{I} \to [0, \infty)^2$, τέτοια ώστε η (A_α, C_α) να ικανοποιεί τόσο το (2) στο $(\mathcal{I} \setminus \{0\})^\circ$ όσο και την $(A_\alpha, C_\alpha) = \left(\frac{\delta}{\gamma}[A]_0, \frac{\beta}{\alpha}[C]_0\right)$ για $t = 0$. (Π_2)

$\boxed{\text{V.}}$ Από την $\frac{\mathrm{d}A_\alpha}{\mathrm{d}t} = 0$ έχουμε τις A_α-μηδενοκλινείς

$$A_\alpha = 0 \text{ και } C_\alpha = 1,$$

και από την $\frac{\mathrm{d}C_\alpha}{\mathrm{d}t} = 0$ έχουμε τις C_α-μηδενοκλινείς

$$C_\alpha = 0 \text{ και } A_\alpha = 1.$$

Κατά μήκος της

- A_α-μηδενοκλινούς $A_\alpha = 0$ παρατηρούμε ότι $\frac{\mathrm{d}C_\alpha}{\mathrm{d}t} = -kC_\alpha \leq 0$, δηλαδή η C_α φθίνει, και άρα η φορά της είναι προς «τα κάτω», δηλαδή προς την καμπύλη $C_\alpha = 0$.
- A_α-μηδενοκλινούς $C_\alpha = 1$ παρατηρούμε ότι $\frac{\mathrm{d}C_\alpha}{\mathrm{d}t} = k\left(A_\alpha - 1\right)$, δηλαδή η C_α φθίνει για $A_\alpha < 1$, και αυξάνει για $A_\alpha > 1$.
- C_α-μηδενοκλινούς $C_\alpha = 0$ παρατηρούμε ότι $\frac{\mathrm{d}A_\alpha}{\mathrm{d}t} = A_\alpha \geq 0$, δηλαδή η A_α αυξάνει, και άρα η φορά της είναι προς «τα δεξιά».
- C_α-μηδενοκλινούς $A_\alpha = 1$ παρατηρούμε ότι $\frac{\mathrm{d}A_\alpha}{\mathrm{d}t} = 1 - C_\alpha$, δηλαδή η A_α φθίνει για $C_\alpha > 1$, και αυξάνει για $C_\alpha < 1$.

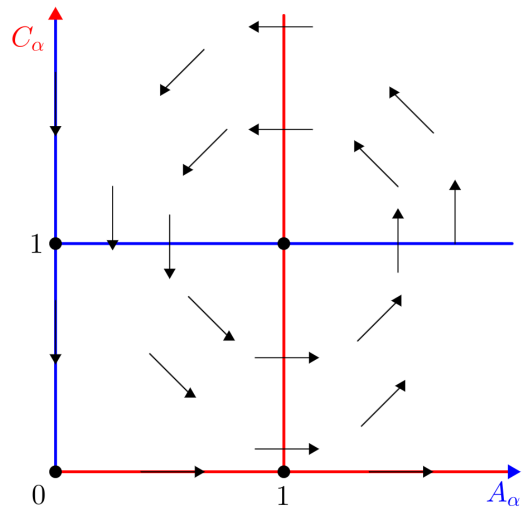
Η απεικόνιση του πεδίου διευθύνσεων φαίνεται στο Σχήμα 1, και μας δίνει πληροφορίες, γλαφυρά και περιεκτικά, για την ολική εικόνα του χώρου φάσης.

$\boxed{\text{VI.}}$

i. Από μοναδικότητα της λύσης του (Π_2), για $A_{\alpha 0} \coloneqq A_\alpha(0) = 0$ η (2α′) έχει λύση $A_\alpha\left(t_\alpha\right) = A_{\alpha 0} = 0$. Αντικαθιστώντας στην (2β′) έχουμε

$$\frac{\mathrm{d}C_\alpha}{\mathrm{d}t_\alpha} = -kC_\alpha,$$

που βλέπουμε εύκολα ότι είναι η εκθετική εξίσωση με λύση $C_\alpha\left(t_\alpha\right) = C_{\alpha 0}e^{-kt_\alpha}$. Άρα η λύση του ($\Pi_2$) όταν $A_{\alpha 0} = 0$ και $C_{\alpha 0} \neq 0$, είναι η $\left(0, C_{\alpha 0}e^{-kt_\alpha}\right)$. Άρα το σύνολο $\{0\} \times (0, \infty)$ είναι αναλλοίωτο.



Σχήμα 1: Ποιοτική απεικόνιση του πεδίου διευθύνσεων του (Π_2). Με μπλε οι A_α-μηδενοκλινείς καμπύλες και με κόκκινο οι C_α-μηδενοκλινείς.

ii. Ανάλογα αποδεικνύουμε ότι όταν $A_{\alpha 0} \neq 0$ και $C_{\alpha 0} = 0$ η λύση του (Π_2) είναι η $\left(A_{\alpha 0} e^{t_\alpha}, 0\right)$. Άρα το σύνολο $(0,\infty) \times \{0\}$ είναι αναλλοίωτο.

iii. Επομένως, βλέπουμε ότι τα αναλλοίωτα σύνολα του προβλήματος (Π_2) είναι

$$\{(0,0)\}\,,\ \{0\} \times (0,\infty)\,,\ \ (0,\infty) \times \{0\},\ \ \{(1,1)\}\,,\ \text{και}\ \ (0,\infty)^2 \smallsetminus \{(1,1)\}\,.$$

$\boxed{\text{VII.}}$ Υπολογίζουμε τον πίνακα Jacobi για το σύστημά μας ως

$$J(w,z) = \begin{pmatrix} 1-z & -w \\ kz & -k+kw \end{pmatrix},$$

δηλαδή

$$J(0,0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -k \end{pmatrix} \quad \text{και} \quad J(1,1) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ k & 0 \end{pmatrix}.$$

Άμεσα, από γραμμικοποίηση, έχουμε τα εξής:

- Οι ιδιοτιμές του πίνακα $J(0,0)$ είναι οι $\lambda_+ = 1 > 0$ και $\lambda_- = -k < 0$. Συνεπώς, το $(0,0)$ είναι θετικά ασταθές.
- Οι ιδιοτιμές του πίνακα $J(1,1)$ είναι οι $\lambda_\pm = \pm \mathrm{i}\sqrt{k}$. Συνεπώς, δεν μπορούμε να αποφανθούμε σχετικά με την ευ/α-στάθειά του $(1,1)$ μέσω γραμμικοποίησης, λόγω μη υπερβολικότητάς του.

$\boxed{\text{VIII.}}$ Αν $A_{\alpha 0} \neq 0$ και $C_{\alpha 0} \neq 0$, τότε έχουμε

$$\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t_\alpha}\left(\ln C_\alpha(t_\alpha) - C_\alpha(t_\alpha) + k\left(\ln A_\alpha(t_\alpha) - A_\alpha(t_\alpha)\right)\right) = 0 \Rightarrow \\
&\frac{\mathrm{d}C_\alpha}{\mathrm{d}t_\alpha}\left(\frac{1}{C_\alpha} - 1\right) + k\frac{\mathrm{d}A_\alpha}{\mathrm{d}t_\alpha}\left(\frac{1}{A_\alpha} - 1\right) = 0 \Rightarrow \\
&k\left(-C_\alpha + A_\alpha C_\alpha\right)\left(\frac{1}{C_\alpha} - 1\right) + k\left(A_\alpha - A_\alpha C_\alpha\right)\left(\frac{1}{A_\alpha} - 1\right) = 0
\end{aligned}$$

που ισχύει. Άρα έχουμε ότι

$$\ln C_\alpha(t_\alpha) - C_\alpha(t_\alpha) + k\left(\ln A_\alpha(t_\alpha) - A_\alpha(t_\alpha)\right) = \ln C_{\alpha 0} - C_{\alpha 0} + k\left(\ln A_{\alpha 0} - A_{\alpha 0}\right).$$

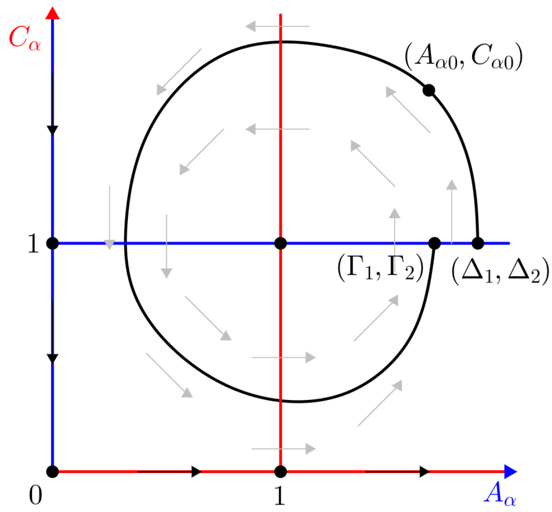
$\boxed{\text{IX.}}$ Σύμφωνα με το διάγραμμα φάσης, κάθε τροχιά είναι είτε περιοδική, είτε μια σπείρα. Μένει, επομένως, να δείξουμε το πρώτο. Αν $A_{\alpha 0} \neq 0$ και $C_{\alpha 0} \neq 0$ και $f(x) := \ln x - x$, τότε από το προηγούμενο ερώτημα έχουμε ότι

$$f(\Gamma_2) + kf(\Gamma_1) = f(\Delta_2) + kf(\Delta_1) = \text{σταθερό},$$

όπου (Γ_1, Γ_2) και (Δ_1, Δ_2) σημεία μιας τροχιάς του (Π_2) με μη μηδενικές αρχικές συνθήκες $(A_{\alpha 0}, C_{\alpha 0})$, όπως αποτυπώνεται αδρά στο Σχήμα 2. Εύκολα βλέπουμε ότι $\Gamma_2 = \Delta_2$, άρα έχουμε

$$f(\Gamma_1) = f(\Delta_1),$$

και αφού η f είναι γνησίως μονότονη (φθίνουσα) συνάρτηση για $\Gamma_1, \Delta_1 > 1$, άρα και «1-1», τότε $\Gamma_1 = \Delta_1$. Έπεται έτσι ότι η λύση του (Π_2) είναι περιοδική.



Σχήμα 2: Από το διάγραμμα φάσης, αρκεί να δείξουμε ότι $\Gamma_1 = \Gamma_2$, για να είναι η λύση περιοδική.

$\boxed{\text{X.}}$ Η μέση τιμή της λύσης ανά περίοδο T,

$$\left(\overline{A}_\alpha, \overline{C}_\alpha\right) = \frac{1}{T}\int_0^T (A_\alpha(t), C_\alpha(t))\, dt,$$

είναι ανεξάρτητη των αρχικών συνθηκών, και μάλιστα ισχύει ότι

$$\left(\overline{A}_\alpha, \overline{C}_\alpha\right) = (1, 1).$$

Πράγματι, υπό το πρίσμα του (2), έχουμε

$$0 = \ln(A_\alpha(T)) - \ln(A_\alpha(0)) = \int_0^T \frac{\mathrm{d}\ln A_\alpha}{\mathrm{d}t}(t)dt = \int_0^T \frac{1}{A_\alpha(t)}\frac{\mathrm{d}A_\alpha}{\mathrm{d}t}(t)dt$$
$$= \int_0^T (1 - C_\alpha(t))\, dt = T - T\overline{C_\alpha},$$

Αντίστοιχα αποδεικνύουμε ότι

$$0 = -kT + kT\overline{A}_\alpha.$$