

1 Modelli matematici

Un modello è un insieme di equazioni e altre relazioni matematiche che rappresentano fenomeni fisici, spiegando ipotesi basate sull'osservazione della realtà. In generale un modello si costruisce a partire da leggi generali (per esempio leggi di conservazione o di bilancio) e relazioni costitutive, di natura sperimentale.

Lo studio del modello viene fatto attraverso vari passi successivi:

- . analisi teorica (studio di esistenza, unicità della soluzione, sensitività rispetto ai dati, regolarità, comportamento qualitativo).
- . ricerca di soluzioni approssimate, mediante algoritmi numerici,
- . individuazione dei parametri di interesse,
- . validazione del modello tramite opportuni esperimenti,
- . analisi statistica dei dati raccolti,
- . stima dei parametri, mediante il confronto tra dati sperimentali e risultati teorici,
- . studio dell'adeguatezza del modello al fenomeno rappresentato.

Un modello matematico può essere descrittivo, cioè può descrivere il fenomeno senza spiegarne i meccanismi (regressione statistica, per esempio quando vengono assegnati valori alle variabili forniti da osservazioni statistiche); interpretativo, cioè basato su ipotesi, come leggi fisiche (per esempio diffusione del calore); predittivo, che cerca di interpretare un fenomeno senza avere dati su osservazioni dirette (per esempio stima degli effetti su un ecosistema dell'inquinamento che verrà prodotto da una nuova fabbrica).

I modelli matematici possono essere suddivisi in deterministici (dove non interviene il caso), basati sul calcolo differenziale, e stocastici (influenzati dal caso) basati sul calcolo delle probabilità.

Esempi di modelli deterministici nella dinamica di popolazioni:

se $x(t)$ denota la misura della popolazione e $r(t, x)$ la funzione di accrescimento, la velocità con cui varia x si assume proporzionale alla misura stessa tramite la funzione di accrescimento r , per cui l'equazione differenziale del primo ordine che "rappresenta" il fenomeno è:

$$(1.1) \quad \frac{dx}{dt} = r(t, x)x, \quad x(t_0) = x_0.$$

modello di Malthus: se si suppone r costante, l'equazione (??) ha come soluzione

$$x(t) = x_0 e^{r(t-t_0)}.$$

modello di Verhulst-Pearl (logistica): dato che il modello di Malthus non va bene in caso di forte crescita (quando r è positivo), si inserisce nella funzione di accrescimento un "freno" e l'equazione (??) diventa

$$\frac{dx}{dt} = r \left(1 - \frac{x}{k}\right)x, \quad r > 0, \quad k > x_0.$$

La soluzione di questa equazione è:

$$(1.2) \quad x(t) = \frac{x_0 k}{x_0 + e^{-r(t-t_0)}(k - x_0)},$$

cioè inizialmente la soluzione si comporta come quella del modello precedente ma $x(t)$ tende a k per $t \rightarrow \infty$.

Come esempio per il modello di Malthus possiamo considerare il problema del decadimento radiattivo di una sostanza la cui concentrazione è $c(t)$, mentre $r = -k$, $k > 0$, è la costante di decadimento nell'unità di tempo. Assumendo, in base all'osservazione, che in un intervallo piccolo di tempo il decadimento sia proporzionale all'intervallo stesso di tempo trascorso e alla concentrazione della sostanza si ottiene:

$$c(t + \Delta t) - c(t) = -k\Delta t c(t).$$

Dividendo entrambi i membri per Δt e facendo il limite per $\Delta t \rightarrow 0$ si ha l'equazione:

$$(1.3) \quad \frac{dc(t)}{dt} = -kc(t),$$

che, assegnata la concentrazione iniziale della sostanza, $c(t_0) = c_0$, ha l'unica soluzione:

$$c(t) = c_0 e^{-k(t-t_0)}.$$

Direttamente dall'espressione della soluzione si ricava il "tempo di dimezzamento" cioè il tempo $t_{\frac{1}{2}}$ tale che:

$$\frac{c(t + t_{\frac{1}{2}})}{c(t)} = \frac{1}{2},$$

che risulta legato alla costante di decadimento da

$$t_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{k} \ln 2,$$

ed è indipendente da c_0, t_0, t .

Come applicazione, consideriamo il problema di determinare l'età dei reperti archeologici tramite il carbone radioattivo.

E' noto che le cellule degli organismi viventi assorbono dal CO_2 carbone, presente in proporzione più o meno costante, con due isotopi, il ^{14}C , radioattivo, prodotto dai raggi cosmici a causa delle collisioni con l'azoto nell'atmosfera, e il ^{12}C , stabile.

Quando l'organismo muore, cessa l'assorbimento di CO_2 e i nuclei di ^{14}C decadono in atomi di azoto emettendo particelle β .

Indicando con $q(t)$ la quantità di ^{14}C per grammo, con $T < t$ il tempo di morte, ponendo $q_T = q(T)$, si ha che

$$q(t) = q_T e^{-k(t-T)}, \quad \text{cioè } t - T = t_{\frac{1}{2}} \frac{\ln q(t) - \ln q_T}{\ln 2}.$$

Sapendo che $t_{\frac{1}{2}} = 5568 \pm 30$ anni, per determinare l'intervallo di tempo $t - T$ trascorso dalla morte, basta conoscere il rapporto $\frac{q(t)}{q_T}$, che a sua volta

è uguale a $\frac{q'(t)}{q'(T)}$ (valutabile tramite un contatore Geiger) ricordando che il numero di disintegrazioni di ^{14}C nell'unità di tempo è proporzionale alla velocità di decadimento.

2 Teoria dei compartimenti

La teoria dei compartimenti è una tecnica basata sull'analisi di un modello complicato mediante la sua separazione in un numero finito di parti componenti, chiamate compartimenti, che interagiscono mediante scambio di materiale.

Per compartimento si intende una quantità di materiale, non necessariamente identificabile con un volume fisico reale, che si comporta dal punto di vista cinetico in maniera da poter essere considerato perfettamente omogeneo (per esempio un composto perfettamente mescolato). Un sistema compartimentale consiste in due o più compartimenti interconnessi con scambio di materiale che può avvenire per passaggio attraverso barriere fisiche o per trasformazioni chimiche o fisiche. Se non c'è scambio di materiale con l'esterno il sistema si dice chiuso, se no aperto.

Nella costruzione di un modello va determinato per prima cosa il numero dei compartimenti e delle interconnessioni che permettono gli scambi.

Le equazioni di bilancio di massa per n compartimenti, ciascuno con quantità di materiale y_i sono date da:

$$(2.1) \quad \frac{dy_i}{dt} = \text{velocità di entrata} - \text{velocità di uscita}, \quad i = 1, \dots, n.$$

Esempi

Cinetica chimica

Consideriamo una reazione che avviene in una singola fase, caratterizzata dalle seguenti variabili: concentrazione delle specie chimiche (variabile di stato), velocità, energia interna o temperatura (variabile termodinamica). Il sistema chimico si suppone omogeneo, uniforme e con volume e temperatura costanti, composto da N specie, M_1, \dots, M_N .

Una reazione chimica usualmente si scrive nella forma:

$$(2.2) \quad \sum_{i=1}^N \nu_i M_i = 0,$$

dove i ν_i sono i coefficienti stechiometrici delle specie M_i nell'equazione di bilancio (se $\nu_i < 0$ si dice che M_i è un reagente, se $\nu_i > 0$ un prodotto).

Nel caso di R reazioni del tipo (??) si considera un sistema

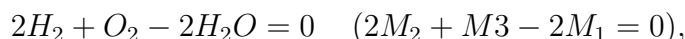
$$(2.3) \quad \sum_{i=1}^N \nu_{ij} M_i = 0, \quad j = 1, \dots, R,$$

dove ν_{ij} rappresenta il coefficiente stechiometrico della specie M_i nella reazione j -ma.

La velocità di reazione r_i è la velocità con cui varia la concentrazione della specie M_i durante la reazione. Indicata con $c_i(t)$ la concentrazione di M_i al tempo t , si ha:

$$r_i(t) = \frac{dc_i(t)}{dt}.$$

Per esempio nella reazione elettrolitica



si ha che per ogni mole di acqua decomposta viene generata mezza mole di ossigeno e una di idrogeno, per cui

$$r_1(t) = -r_2 = -2r_3.$$

La velocità di reazione $r(t)$, a temperatura fissata T è funzione solo delle concentrazioni delle varie specie, per cui si pone:

$$(2.4) \quad r(t) = K_T f(c_1, \dots, c_N),$$

con K_T eventualmente dipendente da T , ma non dalla concentrazione.

Per esempio nella legge di Arrhenius $K_T = A e^{-\frac{E}{RT}}$.

Una forma spesso assunta per la funzione f è data dal prodotto di potenze delle concentrazioni delle specie, per cui la (??) diventa

$$r(t) = K_T [c_1]^{\alpha_1} \dots [c_N]^{\alpha_N},$$

con K_T, α_i parametri da determinare (problema inverso). Il numero $\alpha = \alpha_1 + \dots + \alpha_N$ è l'ordine della reazione.

Nel caso di un sistema di R reazioni del tipo (??), si ha per ogni reazione:

$$(2.5) \quad \frac{dc_i}{dt} = \sum_{j=1}^R \nu_{ij} f_j(c_1, \dots, c_N), \quad i = 1, \dots, R,$$

che è un sistema di R equazioni differenziali del primo ordine, noto come modello deterministico di massa e azione della reazione.

Le funzioni f_1, \dots, f_R definiscono la cinetica del sistema.

Reazioni chimiche del primo ordine

Consideriamo una reazione monomolecolare reversibile, con y_1, y_2 concentrazioni di due sostanze in un sistema chiuso. Dalla legge di massa azione otteniamo:

$$(2.6) \quad \begin{cases} \frac{dy_1}{dt} = -k_1 y_1 + k_2 y_2, \\ \frac{dy_2}{dt} = k_1 y_1 - k_2 y_2. \end{cases}$$

Sommando le due equazioni si ottiene $y_1(t) + y_2(t) = y_1(0) + y_2(0)$.

Diffusione

Si considera la diffusione di un materiale tra due compartimenti (perfettamente miscelati e di volume fissato V_1, V_2) in cui il materiale è presente in concentrazione c_1, c_2 rispettivamente, separati da una membrana (con permeabilità diversa nelle due direzioni).

Indicato con $y_i(t) = c_i(t)V_i$ la massa del materiale nel compartimento i -mo all'istante t , assumiamo, secondo la legge di Fick, che la velocità di trasferimento del materiale attraverso la membrana sia proporzionale al prodotto dell'area A della superficie della membrana per il gradiente della concentrazione tra le due regioni.

Si ottengono così le due equazioni:

$$(2.7) \quad \begin{cases} \frac{dy_1}{dt} = -k_{21}Ac_1 + k_{12}Ac_2, \\ \frac{dy_2}{dt} = k_{21}Ac_1 - k_{12}Ac_2 - k_{02}c_2, \end{cases}$$

dove l'ultimo termine rappresenta l'escrezione del materiale dal compartimento 2.

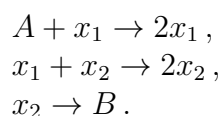
3 Oscillazioni nei sistemi chimici

Fino al 1800 i chimici ritenevano che le componenti di una reazione chimica tendessero sempre a un punto di equilibrio, in base alla convinzione che le reazioni chimiche fossero sistemi chiusi, cioè senza scambio di materiale o di energia con l'ambiente. La scoperta di possibili oscillazioni può essere fatta risalire a Fechner (1928).

Un esempio di reazione oscillante è quello scoperto da Belousov (1951) ed utilizzato in seguito per descrivere gli effetti delle interazioni nonlineari in chimica. Il meccanismo di base consiste nel processo di ossidazione dell'acido malonico $CH_2(COOH)_2$ in un mezzo acido mediante ioni di bromato BrO_3 , catalizzata dal cerio (che ha due stati, Ce^{3+} e Ce^{4+}). Il processo provoca oscillazioni periodiche negli ioni di cerio, che possono essere visualizzate attraverso altri ioni metallici catalizzatori e appropriate colorazioni.

Nella reazione, oltre alla concentrazione del catalizzatore ionico, oggetto dell'osservazione, variano nel tempo anche le concentrazioni di tutte le altre sostanze coinvolte.

Reazione di Lotka. Il modello che analizziamo dal punto di vista matematico è quello storico di Lotka (1920) in cui si studiano le oscillazioni di due delle sostanze interagenti, le cui concentrazioni vengono indicate con x_1, x_2 , soggette a tre reazioni chimiche che avvengono con velocità rispettivamente k_1, k_2, k_3 :



Il corrispondente sistema di equazioni differenziali è:

$$(3.1) \quad \begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -k_1Ax_1 + 2k_1Ax_1 - k_2x_1x_2, \\ \frac{dx_2}{dt} = -k_2x_1x_2 + 2k_2x_1x_2 - k_3x_2, \end{cases}$$

dove con A e B abbiamo indicato la concentrazione di sostanze coinvolte nelle reazioni, ma di cui supponiamo note le variazioni nel tempo.

Quando la concentrazione della sostanza A viene mantenuta costante, le equazioni sono le stesse del modello preda-predatore.

La forma del termine x_1x_2 segue la legge di massa azione, secondo cui la velocità di collisione molecolari di due specie chimiche in una soluzione è proporzionale al prodotto delle concentrazioni (approssimazione che dal punto di vista matematico risulta semplice).

Si può notare che il sistema di Lotka è conservativo. Infatti dividendo formalmente la seconda equazione per la prima, si ottiene un'equazione a variabili separabili:

$$\frac{dx_1}{dx_2} = \frac{(-k_1A - k_2x_2)x_1}{(k_2x_1 - k_3)x_2},$$

che ha come soluzioni le coppie (x_1, x_2) tali che

$$x_1 + x_2 - \frac{k_3}{k_2} \ln x_1 - \frac{k_1A}{k_2} \ln x_2 = c,$$

con c costante.

Pertanto le curve soluzioni del sistema possono essere viste come curve di livello della funzione “potenziale”

$$v(x_1, x_2) = x_1 + x_2 - \frac{k_3}{k_2} \ln x_1 - \frac{k_1A}{k_2} \ln x_2,$$

con la costante c individuata dalle condizioni iniziali.

Riscriviamo il sistema (??) nella forma del modello “preda-predatore”:

$$(3.2) \quad \begin{cases} \frac{dx}{dt} = x(a - by), \\ \frac{dy}{dt} = y(-c + dx). \end{cases}$$

Il sistema (??) è del tipo:

$$(3.3) \quad \begin{cases} \frac{dx}{dt} = f_1(x, y), \\ \frac{dy}{dt} = f_2(x, y), \end{cases}$$

dove le funzioni f_1, f_2 sono continue e derivabili e non dipendono esplicitamente da t , cioè il sistema è autonomo.

Il comportamento qualitativo di una sua soluzione $(x(t), y(t))$ si può studiare nel piano delle fasi, pensando, per ogni t fissato, la coppia $(x(t), y(t))$ come secondo estremo del vettore posizione $\mathbf{X}(t)$ avente come primo estremo $(0, 0)$. Al variare di t il punto $(x(t), y(t))$ descrive una traiettoria che rappresenta graficamente la soluzione del sistema (??), con velocità $\dot{\mathbf{X}}(t)$.

I punti stazionari (o di equilibrio) sono quelli in cui si annullano contemporaneamente le due componenti del vettore velocità e di conseguenza le funzioni f_1 e f_2 a secondo membro di (??).

Inoltre è interessante considerare i luoghi dei punti (x, y) in cui $\dot{x} = 0$ oppure $\dot{y} = 0$ (linee di pendenza nulla o nullcline).

Nel caso del sistema Lotka-Volterra (??), abbiamo due punti stazionari, $P_1 = (0, 0)$ e $P_2 = (\frac{c}{a}, \frac{a}{b})$, e le rette $x = \frac{c}{a}, y = \frac{a}{b}$ sono due nullcline che passano per P_2 , mentre gli assi cartesiani sono le nullcline per P_1 .

In assenza della sostanza 1 il punto P_1 è attrattivo, al contrario di quello che succede in assenza della sostanza 2, per cui il punto P_1 è instabile. Per quanto riguarda il punto P_2 , si vede che in un suo intorno le traiettorie hanno un comportamento “ciclico” (ellittico o spiraleggiante).

Un metodo per individuare la stabilità in un punto di equilibrio (\bar{x}, \bar{y}) consiste nella linearizzazione del sistema in un intorno del punto. Infatti, un punto di equilibrio per il sistema (??) è asintoticamente stabile se lo è per il sistema linearizzato (e questo accade se tutti gli autovalori della matrice jacobiana di (f_1, f_2) calcolata nel punto (\bar{x}, \bar{y}) hanno parte reale negativa).

Analogamente per quanto riguarda l’instabilità: un punto di equilibrio instabile per il sistema linearizzato lo è anche per il sistema non lineare.

Per linearizzare il sistema (??) intorno a una posizione di equilibrio (\bar{x}, \bar{y}) , consideriamo una soluzione $(x(t), y(t))$ sufficientemente vicina alla soluzione stazionaria (perturbazione), e definiamo due nuove coordinate cartesiane (X, Y) traslate rispetto a (x, y) :

$$(3.4) \quad \begin{cases} x(t) = \bar{x} + X(t), \\ y(t) = \bar{y} + Y(t). \end{cases}$$

Supponendo le funzioni f_1, f_2 sufficientemente regolari, possiamo pensare di approssimarle linearmente in un intorno di (\bar{x}, \bar{y}) , ottenendo che il sistema (??), a meno di infinitesimi di ordine superiore a $\sqrt{X^2 + Y^2}$, è equivalente a:

$$(3.5) \quad \begin{cases} \frac{d}{dt}X(t) = \frac{\partial f_1}{\partial x}(\bar{x}, \bar{y})X + \frac{\partial f_1}{\partial y}(\bar{x}, \bar{y})Y, \\ \frac{d}{dt}Y(t) = \frac{\partial f_2}{\partial x}(\bar{x}, \bar{y})X + \frac{\partial f_2}{\partial y}(\bar{x}, \bar{y})Y, \end{cases}$$

ricordando che $f_1(\bar{x}, \bar{y}) = f_2(\bar{x}, \bar{y}) = 0$, e che $\frac{dx}{dt} = \frac{dX}{dt}$, $\frac{dy}{dt} = \frac{dY}{dt}$.

Il sistema (??) è un sistema lineare dove la matrice dei coefficienti è la matrice jacobiana del vettore (f_1, f_2) calcolata in (\bar{x}, \bar{y}) .

Per il modello di Lotka, il sistema linearizzato del sistema (??) in un intorno di P_1 diventa:

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = aX, \\ \frac{dY}{dt} = -cY, \end{cases}$$

e in un intorno di P_2 :

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = -\frac{bc}{d}Y, \\ \frac{dY}{dt} = \frac{da}{b}X. \end{cases}$$

Quindi P_1 è un punto di equilibrio instabile per il sistema lineare (un autovalore con parte reale positiva) e quindi anche per il sistema (??), mentre per P_2 non si può dire niente, essendo stabile per il sistema linearizzato, ma non asintoticamente stabile (due autovalori immaginari).

Per dimostrare che P_2 è un punto di equilibrio stabile anche per il sistema (??) si può però far vedere che le orbite intorno a P_2 non sono spirali, ma orbite chiuse.

Infatti, riscrivendo le equazioni delle traiettorie che rappresentano le soluzioni (x, y) del sistema (??) nella forma

$$y^a e^{-by} = kx^c e^{-dx},$$

con k costante arbitraria,

sulla retta di pendenza nulla $x = \frac{c}{d}$, y deve soddisfare l'equazione

$$y^a e^{-by} = cost,$$

che ammette al più 2 soluzioni, eliminando così la possibilità che la traiettoria sia una spirale.

Quindi le traiettorie oscillano periodicamente intorno al punto P_2 con una frequenza regolata da \sqrt{ac} .

Ricordiamo inoltre la legge di conservazione delle medie, dovuta a Volterra: Il valore medio della concentrazione di ciascuna sostanza su un periodo di un ciclo è uguale al livello corrispondente di equilibrio, cioè rispettivamente $x_M = \frac{c}{d}$ e $y_M = \frac{a}{b}$.

Infatti, dalla prima equazione di (??) si ha

$$\frac{1}{T} \int_0^T \frac{x'(t)}{x(t)} dt = \frac{1}{T} \int_0^T \frac{(a - by(t))x(t)}{x(t)} dt = \frac{1}{T} \int_0^T (a - by(t)) dt.$$

Tenendo conto che $x(T) = x(0)$, si ha

$$\frac{1}{T} \int_0^T \frac{x'(t)}{x(t)} dt = \frac{1}{T} (\ln(x(T)) - \ln(x(0))) = 0,$$

e pertanto:

$$\frac{1}{T} \int_0^T (a - by(t)) dt = a - \frac{b}{T} \int_0^T y(t) dt = 0.$$

Un risultato analogo si ottiene per la media sull'altra componente.

Ciclo limite

Consideriamo il seguente sistema nonlineare

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = x + y - x(x^2 + y^2), \\ \frac{dy}{dt} = -x + y - y(x^2 + y^2), \end{cases}$$

che ha come ciclo limite la circonferenza unitaria.

Il punto $(0,0)$ é una spirale instabile, infatti gli autovalori della matrice jacobiana calcolata nell'origine sono $1 \pm i$. Qualunque traiettoria che parte da un punto della circonferenza $x^2 + y^2 = 1$ ripercorre periodicamente la stessa circonferenza, su cui si ha $\frac{dy}{dx} = -\frac{y}{x}$. Inoltre una traiettoria che parte dentro il cerchio unitario tende, spiraleggiando, asintoticamente alla circonferenza. Analogamente per le traiettorie che partono all'esterno del cerchio.

In generale, si chiama ciclo una soluzione del sistema dinamico (??) con un comportamento periodico. Il ciclo divide il piano in una regione interna, in cui c'è almeno una posizione di equilibrio, e in una esterna.

Un ciclo Γ si chiama ciclo limite se esiste un punto Q non appartenente a Γ tale che la traiettoria passante per Q tende a Γ per $t \rightarrow \infty$. Un ciclo Γ é attrattivo se vi é un intorno anulare di Γ tale che qualsiasi traiettoria che penetra in tale intorno tende a Γ per $t \rightarrow \infty$. Γ é repulsivo se esiste un intorno anulare di Γ tale che qualsiasi traiettoria che penetra in tale intorno tende a Γ per $t \rightarrow -\infty$.

Il ciclo dell'esempio é attrattivo. Riscrivendo il sistema in coordinate polari r, θ , si ha

$$\begin{cases} \frac{d\theta}{dt} = -1, \\ \frac{dr}{dt} = r(1 - r^2)(4 - r^2)(9 - r^2), \end{cases}$$

quindi si vede che esistono tre cicli limite, uno attrattivo ($r = 1$), uno repulsivo ($r = 3$) e uno ($r = 2$) attrattivo da una parte ($2 < r < 3$) e repulsivo dall'altro ($1 < r < 2$).