

B

Funzioni all'opera

*mais apud me omnia fiunt
Mathematicè in Natura, Ma a mio
parere tutto in natura avviene
secondo matematica.*

RENÉ DESCARTES-Corrispondenza
con Mersenne 11 Marzo 1640

Nella definizione di funzione lineare $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $f(x) = ax$, sono determinanti le caratteristiche seguenti

- Il dominio di f è tutta la retta \mathbb{R} ,
- la legge che produce l'output y dall'input x è quella della proporzionalità diretta: $y = ax$, con a costante reale.

Mancando una od entrambe di queste condizioni, si dice che f è nonlineare. A rigore quindi, nessuna funzione in cui l'input x rappresenti una grandezza fisica positiva o comunque non negativa può essere lineare (viene violata la prima condizione). Comunque (quale che sia il suo dominio) non può essere lineare una funzione in cui l'output y non è direttamente proporzionale all'input x (viene violata la seconda condizione). E in ogni caso, anche qualora una legge fisica sia accettabilmente espressa da una formula di proporzionalità diretta $y = ax$, la sua validità operativa è limitata generalmente ad un intervallo $[x_{\min}, x_{\max}]$ di valori dell'input x , in quanto questo, praticamente, non può assumere tutti i valori reali: una molla non può certo allungarsi a piacere, poichè dopo un certo stiramento semplicemente si rompe; la dilatazione termica di una sbarra o del mercurio di un termometro non può accettare temperature alte a piacere, semplicemente perché ad un certo punto la sbarra fonderà ed il termometro esploderà. Possiamo quindi ricordare i due principi seguenti:

- La validità operativa di una formula di proporzionalità diretta $y = ax$ nella descrizione di una legge fisica è generalmente limitata ad un intervallo $[x_{\min}, x_{\max}]$ della x ;
- Nella trattazione teorica è conveniente però ignorare l'esistenza di tale intervallo e supporre che x possa variare in tutto \mathbb{R} .

Accettando tali due principi, la legge in esame sarà esprimibile con una funzione lineare. Altrimenti occorrerà ricorrere alle funzioni nonlineari. In questo capitolo esamineremo diverse funzioni in un contesto realistico; partiremo da semplici modelli potenza e logaritmici per arrivare a modelli più complessi in cui non solo emergerà il ruolo

Limitazioni delle
funzioni lineari
come modelli

della funzione di volta in volta esaminata, ma si cercherà anche di illustrare la genesi del modello.

B.1. Potenze, iperboli, logaritmi e funzioni circolari

B.1.1. Funzioni potenza

Concetto di
Dimensione
lineare

Esponenti $n = 2$ ed $n = 3$: superfici e volumi. Un cubo di lato L ha volume L^3 ; la sua superficie è invece $6L^2$. La lunghezza del lato di un cubo è una **dimensione lineare** tipica del cubo come figura geometrica. Per figure solide irregolari, come il corpo di un animale, intendiamo con dimensione lineare ogni misura di lunghezza relativa al corpo stesso (altezza per un uomo, altezza al garretto per un cane, diametro interparietale per una scimmia, lunghezza del femore in un ippopotamo, ecc.). Suddividendo in cubetti il corpo dell'animale, è facile rendersi conto che il volume V del corpo è proporzionale al cubo di una qualunque dimensione lineare L , in simboli, $V = k_3 L^3$. Conseguentemente, se le dimensioni lineari sono modificate di un fattore σ (di ingrandimento se $\sigma > 1$, di riduzione se $0 < \sigma < 1$), il volume viene modificato di un fattore σ^3 . Analogamente, la superficie S del corpo è proporzionale al quadrato di una qualunque dimensione lineare L , in simboli, $V = k_2 L^2$. Conseguentemente, se le dimensioni lineari sono modificate di un fattore σ , le superfici del corpo vengono modificate di un fattore σ^2 . Per **superfici** possiamo intendere, per esempio nell'uomo, non solo la superficie dell'epidermide, ma anche la superficie polmonare, quella intestinale, ecc.

Cambi di scala
delle dimensioni
lineari
su aree e
volumi

Questo pone delle limitazioni alle dimensioni lineari degli animali, se si vuole che certe prestazioni vengano conservate. Essendo $S = k_2 L^2 = k_2 \left(\sqrt[3]{V/k_3}\right)^2 \propto V^{2/3}$,¹ una modifica del volume di un fattore σ implica una modifica delle superfici di un fattore $\sigma^{2/3}$.² Per esempio, se un uomo di 80 kg raddoppia il peso (andando a 160 kg), ha approssimativamente³ aumentato il volume di un fattore $\sigma = 2$, mentre le superfici (incluse quelle dei polmoni, dell'intestino, ecc.) sono aumentate di un fattore $2^{2/3} \approx 1.59$, troppo poco per sostenere il metabolismo richiesto dal raddoppio della massa corporea.⁴

In prima approssimazione, una pulce *Ctenocephalides canis* di peso p e di altezza h , con la sua struttura muscolare, può saltare $n = 200$ (circa) volte la sua altezza h , per un'altezza complessiva del salto $H = nh$. Nel salto deve valere

$$W = p H = p n h$$

dove il lavoro W compiuto da un muscolo in una contrazione è proporzionale al cubo delle dimensioni lineari (sezione dei muscoli * contrazione). Siccome peso p e lavoro W sono entrambi proporzionali al cubo delle dimensioni lineari ne segue la relazione

$$H = nh = \text{altezza del salto} = \text{costante}$$

¹ Con il simbolo \propto indichiamo qui la proporzionalità diretta delle grandezze in esame.

² Sul ruolo dell'esponente $2/3$ vedi anche p. 44.

³ In questo ragionamento possiamo assumere che la densità dei corpi animali sia 1 g/cm^3 , come se fossero interamente composti di acqua.

⁴ Cfr. La storia del cavallo poliploide in BATESON G.: *Mind and Nature*, Adelphi (1984).

Se avessimo una pulce gigante (10 volte il prototipo) il suo salto non supererebbe quello della sua piccola parente.

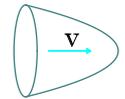
Esponente $n = 4$: formula di Poiseuille. Un breve tratto di arteria può essere pensato come un cilindro rigido, di lunghezza L in [m], e di raggio R in [m]. Come ogni liquido, il sangue ha una frizione interna η detta viscosità e misurata⁵ in *poiseuille* [$1 \text{ Pl} = 1 \text{ Pa} \cdot \text{s} = 1 \frac{\text{kg}}{\text{m} \cdot \text{s}}$]. Se la velocità non supera un certo valore critico, il flusso di sangue scorre laminare: le particelle del liquido scorrono parallelamente all'asse del cilindro, con velocità che cresce regolarmente da zero (sulle pareti) fino ad un valore massimo (sull'asse), e si comportano come se costituissero delle lamine cilindriche che scorrono come i tubi di un telescopio. Se la differenza di pressione agli estremi del cilindro è Δp [Pa], la velocità v [m s^{-1}] in punti a distanza r dall'asse è data dalla formula di Poiseuille⁶

$$v(r) = \frac{\Delta p}{4\eta L} (R^2 - r^2)$$

La velocità varia dal valore minimo 0 per $r = R$, al valore massimo sull'asse $r = 0$. Il volume di sangue che passa in 1 secondo attraverso una sezione dell'arteria è uguale al volume del solido di rotazione che si ottiene facendo ruotare la parabola $v = v(r)$ sul suo asse, per $0 \leq r \leq R$. Si dimostra che il volume di tale solido di rotazione è uguale a:

$$V(R) = 2\pi \int_0^R r v(r) dr = \frac{\pi \Delta p R^4}{8 \eta L}$$

La formula ha particolari conseguenze per la presenza della quarta potenza del raggio. Ad esempio, una riduzione del diametro di un'arteria da 1 mm a 0.75 mm (una riduzione del 25%) significa sostituire R con $0.75 R$ e quindi la sostituzione di R^4 con $(0.75 * R)^4 \sim 0.32 * R^4$; quindi la riduzione del flusso è ben del 68%. Per ripristinare il flusso originario si può o diminuire la viscosità del sangue o aumentare la differenza di pressione. Valori naturali dei parametri possono essere per una arteriola: $L = 0.02$ m, $R = 8 * 10^{-5}$ m, $\eta = 0.0027 \text{ Pl}$, $\Delta p = 4 * 10^2$ Pa. Con tali valori si ha una velocità massima di $1.185 * 10^{-2}$ m/s al centro dell'arteriola ed un flusso di $1.2 * 10^{-4}$ cm³/s.



B.1.2. Modelli iperbolici

I modelli di crescita esponenziali non sono gli unici modelli di interesse, non sempre la variabile indipendente è il tempo e per giunta le funzioni coinvolte non sono sempre funzioni esponenziali. Consideriamo qui alcuni modelli descritti da iperboli equilateri

traslate .

Meccanica muscolare: curva forza-velocità. Nell'esperienza comune, quando un braccio solleva una massa la velocità cui la massa può essere alzata dipende dalla massa stessa. Un muscolo isolato può essere studiato applicando all'estremità una massa m e

Fisiologia:
quarta potenza
della
dimensione
lineare

La formula di
Poiseuille

Legge di Hill
sulla dinamica
muscolare
come esempio
di
proporzionalità
inversa

⁵ Dal nome di Jean Louis Poiseuille (1799-1869).

⁶ Cfr. RANDALL J.-S., *Elements of Biophysics*, II ed., Chicago, Year Book, 1962, pp. 210-223.

misurando la velocità v della contrazione (ottenuta quest'ultima con stimoli elettrici). A. V. HILL propose nel 1938 una relazione empirica⁷ fra v e m data da:

$$v = f(m) = a \frac{m_0 - m}{m + b} \quad (\text{B.1.1})$$

con $a > 0$ e $b > 0$. La funzione $v = f(m)$ è definita per $0 \leq m \leq m_0$; in $m = 0$ il muscolo si contrae alla massima velocità v_{\max} ; per m crescente, v decresce sino a che m raggiunge il valore m_0 della forza isometrica⁸ in corrispondenza della quale il muscolo non può più contrarsi ($v = 0$).

La (B.1.1) può essere riscritta come

$$v = \frac{-a m + a m_0}{m + b}$$

dal che si vede che il grafico della legge di Hill è un tratto di un ramo della iperbole decrescente (essendo $-ab - am_0 < 0$, ) con asintoto verticale $m = -b$ ed asintoto orizzontale $v = -a$ (ciò che rappresenta il significato geometrico dei parametri a e b), vedi Figura B.1.1 (a).

Determinazione
dei parametri

Per determinare i parametri a e b nella (B.1.1) da dati sperimentali, occorre innanzitutto determinare il valore m_0 della forza isometrica; riscrivendo poi la (B.1.1) nella forma $m + b = a(m_0 - m)/v$, basta porre $Y = m$ e $X = (m_0 - m)/v$ per avere la forma $Y = aX - b$ che si presta a calcolare i parametri a e b con le tecniche di regressione lineare utilizzando tutti i punti osservati meno l'ultimo (che avendo $v = 0$ non consente di calcolare la X corrispondente).



Laboratorio B.1.1. Consideriamo un esperimento sul muscolo sartorio di una rana, di 0.165 g di massa e 3.8 cm di lunghezza. Il muscolo viene tenuto in stato contrattile a 0° C di temperatura da stimoli elettrici di 11.4 impulsi al secondo. I carichi espressi in grammi sono $m = (2.27, 7.73, 15.9, 27.3, 40.9, 51.8, 65.9)$, e le velocità corrispondenti espresse in cm/s sono $v = (4.04, 2.90, 1.82, 1.20, 0.59, 0.27, 0)$. La forza (massa) isometrica è quindi di 65.9 g.

```
m = c(2.27, 7.73, 15.9, 27.3, 40.9, 51.8, 65.9) # pesi
v = c(4.04, 2.90, 1.82, 1.20, 0.59, 0.27, 0) # velocita'
m0 = 65.9 # forza isometrica
Y = m[-7] # eliminazione ultimo dato
X = ((m0-m)/v)[-7]
# eliminazione ultimo dato e cambio di variabili
(a = var(Y)/cov(X, Y)) # pendenza retta sulle Y
(b = -mean(Y)+a*mean(X)) # intercetta retta sulle Y
plot(m, v) # scatter plot
f = function(m) a*(m0-m)/(m+b) # legge di Hill
curve(f, add=TRUE) # grafico della legge di Hill
```

⁷ Cfr. HILL, V.A., The heat of shortening and the dynamics constants of muscles. *Proceedings of the Royal Society B*, 126, 1938, pp. 136–195; la legge di Hill può essere dedotta da una teoria microscopica della struttura muscolare, cfr. HOPPENSTEADT, F. C. e PESKIN, C. S., *Mathematics in Medicine and Life Sciences*, Springer-Verlag, New York, 1992, pp. 199–298.

⁸ Qui si utilizza il linguaggio comune in cui le masse si identificano con il peso.

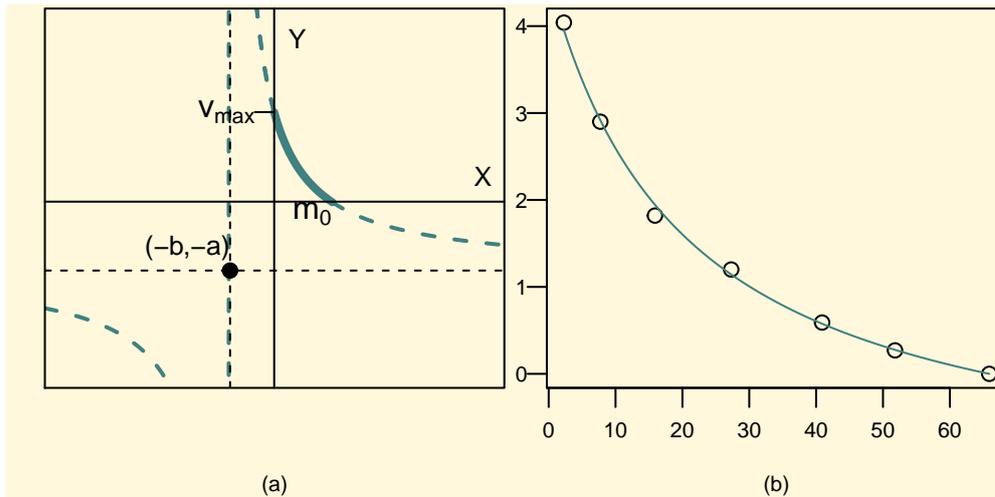


Figura B.1.1. (a) In linea solida la porzione dell'iperbole nel primo quadrante (m, v) che corrisponde a possibili dati sperimentali. (b) Esperimenti sul muscolo sartorio di una rana: determinazione dei coefficienti della legge di Hill.

Il procedimento descritto conduce a due rette di regressione; essendo che i valori di $Y = m$ possono essere considerati come esatti, conviene scegliere la retta di regressione su Y , in corrispondenza alla quale si ottiene per la legge di Hill l'espressione seguente:

$$v = \frac{1.415 (65.9 - m)}{m + 20.492} \quad (\text{B.1.2})$$

In Figura B.1.1 sono riportati i punti sperimentali e la curva teorica che abbiamo ottenuto, per i valori di m che interessano (da 0 a m_0).

Cinetica di Michaelis-Menten. Vari fenomeni biologici presentano una saturazione della risposta (output) al crescere dello stimolo (input). Per esempio la crescita fotosintetica dei vegetali è direttamente proporzionale all'intensità luminosa finché questa è bassa; ad alta intensità luminosa, per quanto elevata questa sia, la crescita fotosintetica non supera un valore limite di saturazione. Tali leggi $x \mapsto y$ con saturazione sono descritte nel caso più semplice dalla legge di Michaelis-Menten (detta talvolta di Briggs-Haldane)

$$y = \frac{K x}{m + x} \quad (\text{B.1.3})$$

dove $K > 0$ è una costante che rappresenta una limitazione superiore per i valori di y (il valore limite di saturazione), e $m > 0$ è una seconda costante, detta costante di semisaturazione, in quanto per $x = m$ si ha $y = \frac{1}{2} K$ (vedi Figura B.1.2).

La (B.1.3) mostra che il grafico della legge di Michaelis-Menten è un tratto di un ramo di una iperbole crescente (essendo $mK - 0 * 1 > 0$, ) con asintoto verticale $x = -m$ ed asintoto orizzontale $y = K$ (ciò che rappresenta il significato geometrico dei parametri m e K).

Per determinare le due costanti K ed m da dati sperimentali conviene riscrivere la (B.1.3) nella forma

$$\frac{1}{y} = \frac{1}{K} \frac{x + m}{x} = \frac{1}{K} + \frac{m}{K} * \frac{1}{x}$$

Cinetica di Michaelis-Menten

... come secondo esempio di proporzionalità inversa

Determinazione dei coefficienti nella legge di Michaelis-Menten

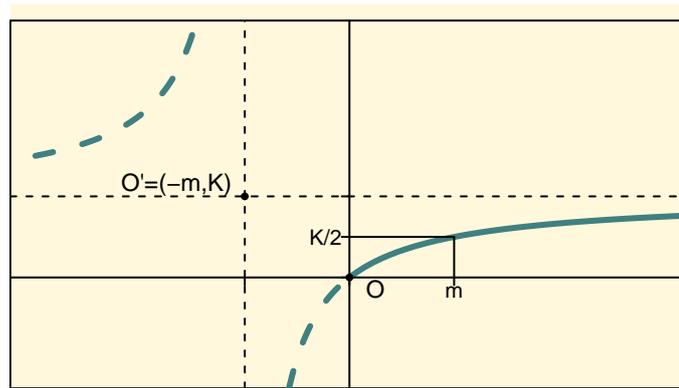


Figura B.1.2. Cinetica di Michaelis-Menten. La porzione significativa del grafico è a tratto continuo. Si notino gli asintoti (tratteggiati) $y = K$ e $x = -m$.

Nel piano cartesiano con ascissa $1/x$ e ordinata $1/y$ la relazione precedente rappresenta una retta i cui coefficienti (pendenza m/K e intercetta sull'asse delle ordinate $1/K$) possono essere determinati – da dati sperimentali – con la regressione lineare; da tali coefficienti è poi immediato il calcolo dei parametri della formula di Michaelis-Menten.⁹

Popolazione mondiale: modello di Keyfitz. Crescita della popolazione umana mondiale

anno	1500	1750	1850	1910	1930	1950	1950	1970	1990	2010
popolazione	0.500	0.790	1.260	1.750	2.070	2.520	2.525	3.682	5.310	6.930

Tabella B.1.1. Crescita della popolazione mondiale in miliardi.

Modello di Keyfitz come terzo esempio di proporzionalità inversa

La Tabella B.1.1 riporta alcuni dati delle Nazioni Unite sulla crescita della popolazione umana mondiale a partire dal 1500.¹⁰ I dati possono essere fittati da un modello di crescita iperbolica del tipo

$$N(t) = \frac{b}{t + a}$$

Determinazione dei coefficienti nella legge di Keyfitz

con t il tempo in anni (d.C.) ed N la popolazione mondiale in miliardi.¹¹ Potendosi anche scrivere $1/N = (a/b) + (1/b)t$, possiamo determinare i coefficienti a e b con la regressione lineare assumendo come variabili $X = t$ e $Y = 1/N$. La retta di regressione su $X = t$ è

$$1/N = 7.681191 - 0.003737t$$

⁹ Un tale procedimento grafico (detto di Lineweaver–Burk) presenta l'inconveniente che i punti $(\frac{1}{x}, \frac{1}{y})$ tendono ad accumularsi in una nuvola nei pressi dell'origine, con relativamente pochi punti lontani da essa. Conseguentemente la correlazione può risultare bassa e le rette di correlazione abbastanza divaricate.

¹⁰ Cfr. <https://tinyurl.com/y8z7w5re> visitato il 16 ottobre 2017.

¹¹ Cfr. KEYFITZ, N., *Introduction to the Mathematics of Population*, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1968.

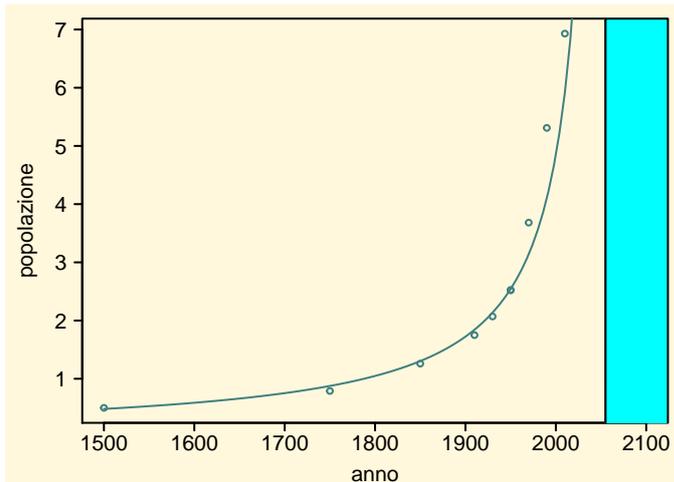


Figura B.1.3. Evoluzione della popolazione mondiale (in miliardi) secondo il modello iperbolico di Keyfitz.

con una correlazione elevatissima $r = -0.995$. Quindi

$$\begin{cases} a = (a/b)/(1/b) = -2055.212 \\ b = -1/(0.00373742) = -267.564224 \end{cases}$$

e la stima per la popolazione mondiale secondo questo modello è:

$$N(t) = \frac{267.564}{2055.212 - t} \quad (\text{B.1.4})$$

In Figura B.1.3 riportiamo i dati e la iperbole di equazione (B.1.4).

L'iperbole presenta un asintoto verticale in $t = 2055.212$, corrispondente alla data del 18 marzo 2055 giorno in cui, secondo tale modello, la popolazione umana mondiale diventerebbe infinita. Va osservato che l'esistenza del giorno della fine del mondo non è tanto una previsione inaspettata del modello quanto una conseguenza ovvia del fatto che si è arbitrariamente scelta una iperbole rettangolare per interpolare i punti della Tabella B.1.1: sapevamo quindi fin dall'inizio, che ci sarebbe stato un asintoto verticale, e l'unico problema caso mai era di calcolarne la posizione.¹²

Conclusioni nascoste nei modelli

B.1.3. Modelli logaritmici

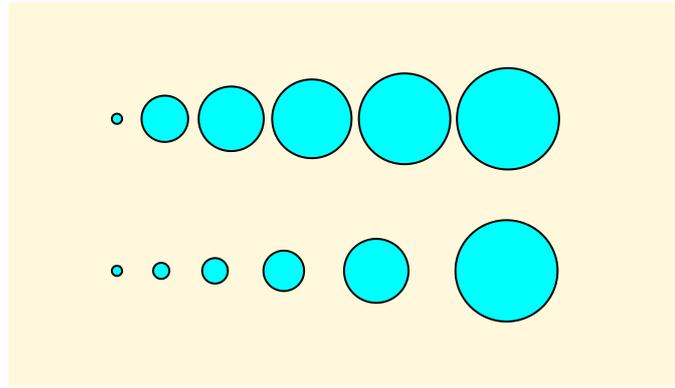
La legge di Weber–Fechner. Ad uno stimolo fisico, come per esempio uno stimolo sonoro o luminoso di una determinata intensità, il corpo umano reagisce con la percezione o la sensazione dello stimolo stesso. Mentre gli stimoli hanno la loro scala di misura ben definita, non è ovvio come misurare le sensazioni. ERNST WEBER (1846) e GUSTAV FECHNER (ritenuti tra i fondatori della psicologia sperimentale)¹³ hanno osservato che, dato un valore s_0 di uno stimolo (per esempio un peso di 100 g sul palmo di una mano), non tutti gli stimoli $s > s_0$ sono percepiti come diversi da s_0 . Per esempio, pesi di 101, 102, 103 o di 104 g sono avvertiti come indistinguibili da 100 g, mentre 105 g è sentito come diverso da 100 g. Ciò non significa che la mano abbia

Logaritmo: la legge di Weber–Fechner

¹² Uno degli autori aveva svolto gli stessi calcoli con i dati disponibili nel 1990 e all'epoca la fine del mondo era stimata nel 2023; è evidente la fragilità del modello.

¹³ Cfr. FECHNER, G. *Elemente der Psychophysik, Breitkopf und Härtel, Leipzig, 1860.*

Figura B.1.4. Illustrazione della legge di Weber-Fechner. Le aree dei dischi aumentano secondo una progressione aritmetica nella prima riga, secondo una progressione geometrica nella seconda riga. La percezione nella riga superiore è di uno smorzamento della crescita.



una «pesata minima» di 5 g: infatti partendo da $s_0 = 500$ g, il minimo peso avvertito come maggiore di 500 g non è certo 505 g ma è 525 g.

La legge psicofisica di Weber-Fechner afferma che per ogni data grandezza fisica che sia uno stimolo per i sensi umani, esiste una costante r tale che il minimo stimolo maggiore di un dato s avvertito come distinto e maggiore di s è $s + rs$. In altri termini, se s e $s + \Delta s$ sono due stimoli successivi avvertiti come distinti (mentre tutti gli stimoli maggiori di s e minori di $s + \Delta s$ sono indistinguibili da questi),¹⁴ il rapporto $r = \Delta s/s$ è costante (non dipende da s). Nel caso del peso sul palmo della mano abbiamo per esempio $r = 1/20$.

Per gli altri sensi umani abbiamo valori di r del tipo $1/50$ per la vista, $1/10$ per l'udito, $1/8$ per l'olfatto, e $1/4$ per il gusto.

Partendo quindi da un dato stimolo s_0 , gli stimoli avvertiti come distinti sono, in successione: $s_1 = qs_0$, $s_2 = qs_1 = q^2s_0$, ..., $s_n = q^n s_0$, ..., dove $q = 1 + r$. Come misura della sensazione avvertita si può allora prendere l'indice n . Dalla relazione $s_n = q^n s_0$ prendendo il logaritmo in base 10 si ricava

$$n = \frac{\log_{10}(s_n) - \log_{10}(s_0)}{\log_{10}(q)} = \frac{1}{\log_{10} q} * \log_{10}(s_n) + \left(-\frac{\log_{10}(s_0)}{\log_{10}(q)} \right)$$

In accordo con la relazione appena ricavata, la legge di di Weber-Fechner stabilisce che una scala di sensazioni n corrispondenti ad uno stimolo fisico di intensità s è data da

$$n = a \log_{10}(s) + b$$

con a e b costanti da determinare caso per caso.

Logaritmo: la
sonorità

Sonorità. Per la legge di Weber-Fechner la sonorità (*loudness*) è data da

$$L = a \log_{10}(I) + b$$

dove I è l'intensità del suono (in W m^{-2}) e a e b sono da determinare; per farlo, si osserva che per un suono a 1000 Hz la minima intensità udibile è circa $I_0 =$

¹⁴ La differenza minima percepibile o soglia differenziale è chiamata anche JND o *Just Noticeable Difference*. Si noti che esiste anche un valore di soglia percettiva definito come il valore minimo di uno stimolo sensoriale che viene percepito nel 50% delle stimolazioni: per il gusto un cucchiaino di zucchero in 7.5 litri d'acqua, per la vista la fiamma di una candela in una notte serena, illune a 50 km di distanza, ecc.

$10^{-12} \text{ W m}^{-2}$, e per tale intensità-soglia si fissa il valore $L = 0$. Quindi $0 = a \log_{10}(10^{-12}) + b = -12a + b$ impone $b = 12a$; si sceglie poi in modo arbitrario $a = 10$, ottenendo $b = 120$. Pertanto

$$L = 10 \log_{10}(I) + 120$$

è la scala richiesta. L si misura in dB (decibel).¹⁵ A rigore questa formula vale per suoni a 1000 Hz. Per frequenze diverse, si procede soggettivamente: per esempio ad un tuono si attribuiscono 120 dB in quanto individui normali avvertono in un tuono la stessa intensità di un suono a 1000 Hz di intensità di 1 W m^{-2} .

Grandezza apparente delle stelle. Originariamente le stelle visibili a occhio nudo furono suddivise in 6 classi di grandezza apparente, congegnate in modo che l'intensità luminosa di una stella di 6^a grandezza fosse $\frac{1}{100}$ di quella di una stella di 1^a grandezza. Detta allora I_0 l'intensità luminosa di una stella di 1^a grandezza, l'intensità di una di 2^a è I_0q , quella di una di 3^a è I_0q^2 , ..., quella di una di 6^a è I_0q^5 ; quindi $q^5 = \frac{1}{100}$ ovvero $q = 1/\sqrt[5]{100} = 10^{-2/5}$. Successivamente la grandezza apparente m di una stella di intensità luminosa I fu definita – in accordo con la classificazione precedente e con la legge di Weber-Fechner – con la formula $I = I_0q^{m-1}$, dove I_0 è l'intensità di una stella di riferimento di 1^a classe di grandezza. Quindi $\log_{10}(I) = \log_{10}(I_0) + (m-1) \log_{10}(q)$, ovvero

$$m = \left(1 - \frac{\log_{10}(I_0)}{\log_{10}(q)}\right) + \frac{1}{\log_{10}(q)} \log_{10}(I) = k - 2.5 \log_{10}(I)$$

essendo $\log_{10}(q) = -2/5$ e $1/\log_{10}(q) = -5/2 = -2.5$ e dove $k = 1 - \frac{\log_{10}(I_0)}{\log_{10}(q)}$. Per esempio, Sirio ha grandezza apparente -1.46 e Vega (che si era fissata come 0 originariamente) una grandezza apparente di 0.03; dalle relazioni

$$-1.46 = k - 2.5 \log_{10}(I_{\text{Sirio}})$$

$$0.03 = k - 2.5 \log_{10}(I_{\text{Vega}})$$

si ricava, sottraendo, $-1.49 = -2.5 \log_{10}(I_{\text{Sirio}}/I_{\text{Vega}})$, e quindi la intensità di Sirio è $10^{1.49/2.5} \approx 3.944573$ volte quella di Vega.

Relazione risposta/dosaggio farmacologico. Se una dose farmacologica è somministrata ad un individuo, la risposta – quantitativa o qualitativa – non è linearmente proporzionale al dosaggio: se una dose di 10 mg viene aumentata di 5 mg la risposta probabilmente varierà, ma se una dose di 100 mg viene aumentata di 5 mg la risposta probabilmente non cambierà. Applicando la legge di Weber-Fechner si può assumere che la risposta sia linearmente proporzionale al logaritmo della dose. Conseguentemente in una sperimentazione farmacologica il farmaco da somministrare va fissato in dosi progressive

$$d_0, d_0q, d_0q^2, d_0q^3, \dots$$

con $q > 1$. Una progressione aritmetica di dosaggi come 10 mg, 20 mg, 30 mg, 40 mg, ... non è adatta alla sperimentazione: si userà piuttosto una progressione geometrica di dosaggi come 10 mg, 20 mg, 40 mg, 80 mg, ... (qui con $d_0 = 10$ e $q = 2$).

¹⁵ 1 decibel = $\frac{1}{10}$ Bel, dal nome di A. G. Bell (1847-1922), coinvolto nella invenzione del telefono.

Logaritmo:
grandezza
apparente delle
stelle.

Logaritmo:
dosaggio
farmacologico

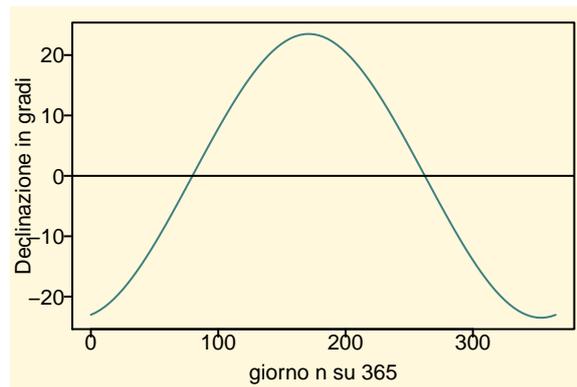


Figura B.1.5. Declinazione solare dell'asse terrestre in gradi (δ_n) come funzione del giorno (n) dell'anno.

Logaritmo: il pH

Concentrazione ioni idrogeno. Una importante applicazione alla chimica del concetto di logaritmo viene dalla valutazione della concentrazione di ioni idrogeno, denotata usualmente con $[H]$ o con $[H^+]$. Nelle soluzioni acide si trova $[H] \approx 10^{-2} \div 10^{-7}$ mol/l; nell'acqua distillata, approssimativamente, $[H] \approx 10^{-7}$ mol/l, una soluzione detta neutra. Concentrazioni inferiori fino a 10^{-12} indicano soluzioni alcaline o basiche. Per queste ampie oscillazioni appare comodo etichettare $[H]$ con l'esponente delle dette potenze (senza il meno) definendo:

$$pH = -\log_{10}[H]$$

Per esempio, per il liquido cerebrospinale si ha mediamente $[H] \approx 4.8 \cdot 10^{-8}$ mol/l, quindi $pH = -\log_{10}(4.8 \cdot 10^{-8}) = -\log_{10}(4.8) + 8 = 7.32$.

B.1.4. Modelli periodici

Calcolo del fotoperiodo. Ricordiamo alcuni fatti elementari di astronomia.¹⁶ Indichiamo con n l'ordinale del giorno dell'anno $1 \leq n < 365$, e indichiamo con τ l'ora dell' n -esimo giorno, calcolata dal mezzogiorno solare $-12 \leq \tau < 12$. L'angolo di declinazione solare (la latitudine astronomica) espresso in radianti per il giorno n è approssimativamente costante rispetto a τ , ed è uguale a

$$\delta_n = \text{asin} \left(\sin(\alpha) \cos\left(2\pi \frac{n-171}{365}\right) \right)$$

dove $\alpha \sim 23.5 \cdot \pi/180$ è la inclinazione dell'asse terrestre, e 171 è l'ordinale del Solstizio di Estate (21 giugno).¹⁷ Ad una latitudine θ , l'angolo di elevazione del Sole sull'orizzonte $\Phi_n(\theta, \tau)$ si ricava da

$$\sin(\Phi_n(\theta, \tau)) = \sin(\theta) \sin(\delta_n) + \cos(\theta) \cos(\delta_n) \cos(2\pi\tau/24)$$

Risolviendo l'equazione $\Phi_n(\theta, \tau) = 0$ ¹⁸ troviamo l'ora $-t_{0,n}$ del sorgere e l'ora $t_{1,n}$ del tramonto del sole per il giorno n . Abbiamo successivamente

$$\frac{\sin(\theta) \sin(\delta_n)}{\cos(\theta) \cos(\delta_n)} = \tan(\theta) \tan(\delta_n) = -\cos(2\pi\tau/24)$$

¹⁶ Per una derivazione delle formule qui presentate, cfr. MARSDEN, J. e WEINSTEIN, A., *Calculus III*, 2nd ed., Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1985, pp. 754–759.

¹⁷ Si interpreti il significato di massimo, minimo e intersezione con l'asse x per tale funzione.

¹⁸ Perché?

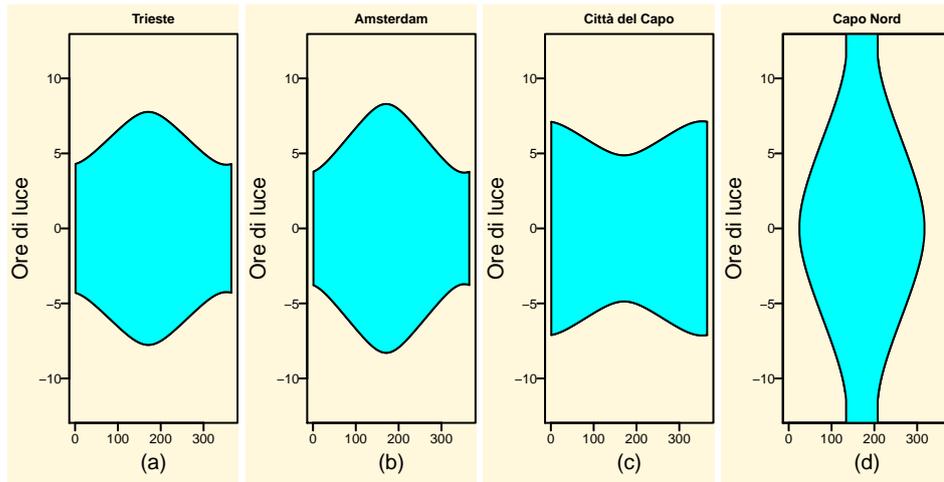


Figura B.1.6. In ascissa il giorno dell'anno, in ordinata l'ora del giorno (mezzogiorno = 0). (a) Fotoperiodo a Trieste (Italia, lat. 45.65 N). (b) Fotoperiodo ad Amsterdam (Paesi Bassi, lat. 52.37 N). (c) Fotoperiodo ad Città del Capo (Sudafrica, lat. -33.92 S). (d) Fotoperiodo a Capo Nord (Norvegia, lat. 71.11 N).

e quindi

$$-t_{0,n} = t_{1,n} = -(12/\pi)\text{acos}(-\tan(\theta)\tan(\delta_n))$$

L'intervallo di luce è $[-t_{0,n}, t_{1,n}]$ e la ampiezza $2t_{1,n}$ di tale intervallo è il fotoperiodo, cioè la durata in ore della luce, alla latitudine θ al giorno n . Fissata la latitudine terrestre θ , $-t_{0,n}$ e $t_{1,n}$ sono funzioni del giorno n (vedi la Figura B.1.6) dove $t = 0$ corrisponde a mezzogiorno.

Calcolo del
fotoperiodo

Come esempi, vediamo i pannelli della Figura B.1.6, corrispondenti rispettivamente alla latitudine di 45.65 N (Trieste), 52.37 N (Amsterdam), -33.92 S (Città del Capo) e 71.11 N (Capo Nord). Nella parte (a) si osserva come il fotoperiodo varia dalle 9 alle 14 ore circa; nella parte (d) si può osservare il largo intervallo estivo durante il quale il sole non tramonta mai (fotoperiodo di 24 ore). Si osservi la sottile differenza tra (a) e (b) e la notevole differenza tra (a) e (c). Spiegare!

Esercizi e complementi

1. La temperatura alla superficie del mare varia nel corso dell'anno secondo una legge che con buona approssimazione si può ritenere di tipo sinusoidale: $T(t) = C + k \sin(\frac{2\pi(t-t_0)}{12}) = C + k \sin(\frac{\pi(t-t_0)}{6})$ (dove il tempo è espresso in mesi). Si considerino i seguenti dati che riportano la temperatura media del mare a Trieste nei 12 mesi dell'anno

mese	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
T	10.2	9.3	10.1	13.1	17.9	22.7	24.7	24.8	23.2	19.0	16.0	13.2

Tabella B.1.2. Temperatura media del mare nei 12 mesi dell'anno a Trieste.

I parametri nel modello sono C , k e t_0 e la dipendenza della temperatura T dai parametri non è lineare. Fortunatamente possiamo scrivere

$$\begin{aligned} k \sin(\pi(t-t_0)/6) &= k \sin(\pi t/6) \cos(\pi t_0/6) - k \cos(\pi t/6) \sin(\pi t_0/6) = \\ &= A \sin(\pi t/6) + B \cos(\pi t/6) \end{aligned}$$

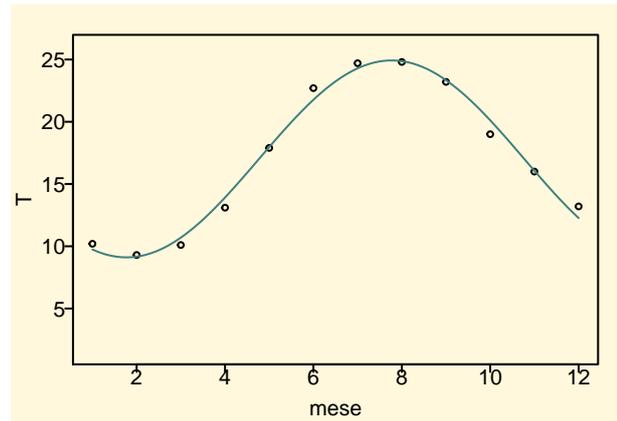


Figura B.1.7. Dati sperimentali e andamento sinusoidale della temperatura del mare a Trieste.

avendo definito $A = k \cos(\pi t_0/6)$ e $B = -k \sin(\pi t_0/6)$. Il modello diviene allora

$$T(t) = C + A \sin(\pi t/6) + B \cos(\pi t/6)$$

ed è lineare nei parametri. Applicando la regressione lineare

```
model = lm(T ~ sin(pi*mese/6)+cos(pi*mese/6), data = dati)
coefficients(model)
##      (Intercept) sin(pi * mese/6) cos(pi * mese/6)
##      17.016667      -6.322157      -4.750469
```

2. Supponiamo che

$$T(t) = A + B * \sin(\pi(t + C)/12)$$

descrive la temperatura corporea di un animale durante le 24 ore del giorno dopo l'iniezione di un vaccino. Nella Tabella B.1.3 sono riportate le misurazioni ora per ora della temperatura corporea. Si determinino i valori dei parametri A , B e C .

t	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
T	36.09	35.18	35.96	35.98	35.67	34.88	35.44	36.04	36.50	38.01	37.48	36.95
t	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
T	36.97	37.51	37.55	37.45	37.67	36.90	37.32	36.19	36.39	36.38	35.97	36.05

Tabella B.1.3. Temperatura corporea di un animale in gradi durante le 24 ore del giorno dopo la somministrazione di un vaccino.

B.2. Modelli differenziali

Nel Capitolo 3, abbiamo visto come ricostruire una funzione dalla conoscenza della derivata, ossia abbiamo affrontato il problema dell'antiderivazione. Nota la funzione $f(t)$, abbiamo visto come determinare una funzione $F(t)$ tale che $F'(t) = f(t)$. In altre parole abbiamo cercato la soluzione $X(t)$ dell'equazione

$$X'(t) = f(t)$$

nella funzione incognita $X(t)$. Una generalizzazione naturale consiste nello studiare equazioni del tipo $X'(t) = f(t, X(t))$ o, in breve

$$X' = f(t, X) \tag{B.2.1}$$

in cui il membro destro può dipendere dalla funzione incognita $X(t)$, oltre che dalla variabile indipendente t . L'equazione (B.2.1) è un'equazione differenziale, in particolare del primo ordine (in quanto compare solo la derivata prima della funzione incognita). Le equazioni differenziali sono uno strumento di fondamentale importanza nel modellare situazioni reali nei campi più svariati: fisica, chimica, biologia, economia, ... e persino urbanistica e psichiatria. La ragione di ciò risiede nel fatto che parecchie leggi scientifiche legano la velocità di variazione di una data grandezza alla grandezza stessa, o ad altre grandezze a questa collegate.

Per esempio, la legge economica della domanda e dell'offerta, nella sua formulazione elementare, indica che quando un bene viene richiesto in quantità $D(p)$ al prezzo p , e viene offerto in quantità $O(p)$ allo stesso prezzo, la variazione $p'(t)$ del suo prezzo è direttamente proporzionale all'eccesso di domanda $D(p) - O(p)$, ovvero $p' = \alpha(D(p) - O(p))$, con α positivo.¹⁹

Le variazioni X', Y', Z', \dots nel tempo di certi livelli ormonali nel sangue umano dipendono, secondo un complesso sistema di autoregolazione, dalle quantità X, Y, Z, \dots degli ormoni circolanti.

La seconda legge di Newton per il moto di un punto materiale su una retta afferma che la variazione della quantità di moto è uguale alla forza agente: $\frac{d}{dt}(mv) = F$.

Sovente, in questo capitolo scriveremo «equazioni» in luogo di «equazioni differenziali» e ometteremo l'indicazione della variabile indipendente t , scrivendo X in luogo di $X(t)$. Molto spesso affronteremo problemi come

$$\begin{cases} X'(t) = f(t, X(t)) \\ X(t_0) = X_0 \end{cases}$$

in cui all'equazione viene abbinata la condizione iniziale che la soluzione deve verificare.

Esaminiamo ora fenomeni di crescita²⁰ basati sulla funzione esponenziale. Alcune possibili applicazioni (e ne vedremo alcune) sono

- Il trasporto di una sostanza attraverso un compartimento;
- Il modello di Malthus per la crescita di una popolazione;
- Il decadimento radioattivo semplice (usata per esempio per la datazione col Carbonio-14);
- La variazione della pressione atmosferica con la quota;
- Il trasporto di una sostanza attraverso più compartimenti in serie con applicazioni:
 - alla chimica (scomposizione termica dell'acetone),
 - alla fisica (decadimento del radio),
 - alla fisiologia animale (digestione dei ruminanti);
- Il modello logistico di Verhulst per la crescita di una popolazione;
- Il modello di crescita di von Bertalanffy;

Modelli di
crescita

¹⁹ Quindi il prezzo aumenta (risp. diminuisce) quando la domanda è superiore (risp. inferiore) all'offerta.

²⁰ Parlando di crescita intendiamo qui sia la crescita propriamente detta (descritta da una funzione crescente) che la diminuzione, per la quale si usa talvolta il sinonimo decadimento (descritta da una funzione decrescente).

- Il modello di crescita di Gompertz;
- Il modello di crescita di Weibull.

Generalmente quando si costruisce un modello (per esempio un modello di crescita) si parte da un'assunzione sulla velocità di variazione della grandezza sotto esame e a partire da questa si trovano le funzioni caratterizzate da tale velocità di variazione.²¹ In questa sezione partiamo direttamente dai modelli (o funzioni) e a posteriori ricaviamo le velocità o i tassi di crescita corrispondenti (ovvero ricaviamo le equazioni differenziali che li caratterizzano). Il processo è invertibile, ma invitiamo lo studioso a fidarsi: le funzioni che di volta in volta introduciamo sono anche le più generali possibili una volta che sia nota la velocità (o il tasso) di crescita ed eventualmente le condizioni iniziali.

B.2.1. Modello di crescita esponenziale

Un modello di crescita particolarmente semplice per una grandezza X , sia essa una quantità, una concentrazione, una numerosità, ecc. è il modello esponenziale descritto dalla funzione²²

$$X(t) = X_0 e^{kt} \quad (\text{B.2.2})$$

A seconda del segno di k il modello descrive crescita (se $k > 0$) o decrescita (se $k < 0$). Qui X_0 rappresenta il valore iniziale di X ossia $X_0 = X(t = 0)$. Derivando la relazione B.2.2 si ha

$$X'(t) = k X_0 e^{kt} = k X(t)$$

e quindi

$$X'(t)/X(t) = k$$

Il rapporto $X'(t)/X(t)$ rappresenta la velocità relativa con cui la grandezza X varia, ovvero il tasso di crescita ed è in questo caso costante.²³ La funzione B.2.2 risolve quindi il sistema (equazione differenziale e condizione iniziale)

$$\begin{cases} X'(t) = kX(t) \\ X(0) = X_0 \end{cases}$$

Tempo di dimezzamento e tempo di raddoppio. Consideriamo la funzione B.2.2 ed esaminiamo i casi $k < 0$ ed $k > 0$ separatamente.

Tempo di dimezzamento $k < 0$ La grandezza X diminuisce. Ci chiediamo quanto tempo $\Delta t_{1/2}$ debba trascorrere dall'istante iniziale affinché la grandezza X si dimezzi. Dobbiamo allora risolvere l'equazione $X(\Delta t_{1/2}) = X_0/2$ nella variabile $\Delta t_{1/2}$; troviamo

$$X_0 \exp(k \Delta t_{1/2}) = X_0/2 \Rightarrow \Delta t_{1/2} = -\frac{\log(2)}{k} \approx -\frac{0.693}{k}$$

In maniera sorprendente $\Delta t_{1/2}$ non dipende dal valore di X_0 ; $\Delta t_{1/2}$ è in questo caso positivo ed è detto tempo di dimezzamento.

²¹ In altre parole si risolve un'equazione differenziale o un sistema di equazioni differenziali.

²² Se $k = 0$ il modello si riduce a $X(t) = X_0$.

²³ Si noti che abbiamo usato come variabile indipendente il tempo ma vedremo anche esempi in cui interviene la stessa funzione senza che t abbia il ruolo di un tempo.

$k > 0$ Ci chiediamo in questo caso quanto tempo Δt_2 debba trascorrere per avere un raddoppio di X . Procedendo come prima troviamo $\Delta t_2 = \log(2)/k$ o anche

Tempo di raddoppio

$$k\Delta t_2 = \log(2)$$

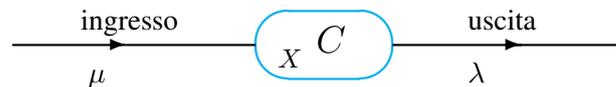
Anche in questo caso Δt_2 non dipende dal valore iniziale X_0 e risulta positivo. Chiameremo Δt_2 tempo di raddoppio.

Ripetiamo che l'indipendenza del tempo di dimezzamento e del tempo di raddoppio dalla valore iniziale X_0 , è un fatto specifico del modello $X(t) = X_0 \exp(kt)$ che stiamo studiando. Esaminando la cinetica delle reazioni chimiche, discuteremo modelli in cui il tempo di dimezzamento di un reagente dipende proprio dalla sua concentrazione iniziale. Talora è conveniente esprimere il modello esponenziale $X(t) = X_0 \exp(kt)$ in base 2. Per esempio nel caso di un modello di crescita (k positivo)

$$X(t) = X_0 e^{kt} = X_0 e^{\log(2)t/\Delta t_2} = X_0 2^{t/\Delta t_2}$$

Tale rappresentazione è sovente usata nei modelli di crescita batterica; in questo contesto si esprime la quantità in termine di generazioni N dove $N = t/\Delta t_2$ e quindi $X(N) = X_0 2^N$.²⁴

Modelli compartimentali. Parecchi fenomeni naturali possono essere modellati pensando ad uno o più recipienti, che chiameremo compartimenti, con varie sostanze che ne entrano o ne escono. Potremmo per esempio essere interessati a conoscere come il nostro corpo assimili, distribuisca ed elimini tali sostanze: pensiamo per esempio all'assorbimento di farmaci somministrati per via endovenosa o per via orale. Il caso che esamineremo ora²⁵ è quello in cui vi sia un solo compartimento C , che raffigureremo come un ovale. Non conosciamo esattamente cosa avviene all'interno di tale ovale, ma possiamo osservare come l'ovale interagisce con l'ambiente.



Chiamiamo $X(t)$ la quantità di sostanza presente al tempo t nel compartimento C .²⁶ Assumiamo che tale quantità vari nel tempo a causa di due fattori:

- 1 Iniezione dall'esterno con tasso di iniezione costante μ .
- 2 Eliminazione verso l'esterno con tasso di eliminazione costante λ .

La differenza $k = \mu - \lambda$ rappresenta il tasso netto di crescita ed è dunque costante e quindi il modello è ancora descritto dalla funzione

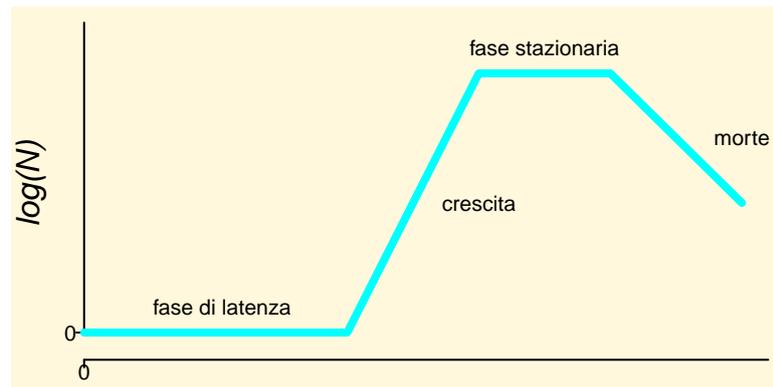
$$X(t) = X_0 e^{(\mu-\lambda)t} \quad (\text{B.2.3})$$

²⁴ Questa rappresentazione è usata anche nell'analisi dei cicli di amplificazione PCR (*polymerase chain reaction*) dove N è il ciclo di amplificazione.

²⁵ Riprenderemo a p. 37 l'argomento.

²⁶ A volte è più interessante conoscere la concentrazione della sostanza.

Figura B.2.1. Schematizzazione delle varie fasi di un processo di crescita batterica. La numerosità N è visualizzata in scala logaritmica.



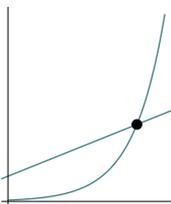
Modello di Malthus. L'equazione (B.2.3) si adatta bene anche alla descrizione dello sviluppo di una popolazione. In questo caso μ rappresenta il tasso di natalità e λ il tasso di mortalità. Il modello venne applicato alle popolazioni umane da T. MALTHUS (1766-1834) nel 1798.²⁷ Diremo che la crescita di una popolazione segue la legge di Malthus quando la numerosità $N(t)$ cresce secondo la legge $N(t) = N_0 \exp(kt)$, dove $k = \mu - \lambda$.

Crescita batterica. Alcuni semplici modelli che descrivono la crescita batterica prevedono un tempo di latenza iniziale (lag time) seguita da una fase di crescita, cui sopraggiunge una fase stazionaria e la morte anche se alcuni batteri restano vitali ma non si riproducono più. Lo schema nel caso in cui la fase di crescita sia esponenziale è riportato in figura B.2.1.

B.2.2. Modelli con saturazione

Il modello di Malthus prevede che la popolazione cresca senza limiti; in un contesto reale le risorse disponibili per la popolazione dovrebbero però risultare sempre superiori alla richiesta della popolazione; un'ipotesi spesso ottimistica sullo sviluppo delle risorse è invece quella di una crescita lineare.

Quando la retta (delle risorse) viene superata dalla funzione esponenziale che descrive la crescita (e succederà sempre!) le risorse non saranno sufficienti e lo sviluppo non sostenibile. Il punto di intersezione tra esponenziale e curva è il punto di crisi malthusiana.



Modelli più realistici di crescita presentano un tasso di crescita non costante, e tra i vari modelli sono utili quelli che prevedono una saturazione, ossia che comunque la crescita non possa superare mai un dato valore soglia, peraltro avvicinandosi ad esso in modo asintotico, per tempi molto grandi. Consideriamo qui di seguito alcuni modelli con saturazione.

²⁷ Cfr. MALTHUS, J., *An essay of the principle of the population as it affects the future improvement of society*, London, John Murray, C Roworth, 1826.

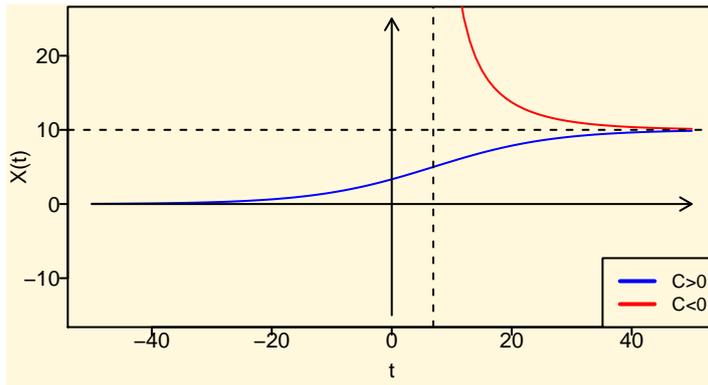


Figura B.2.2. Forma generale della funzione logistica. Sono rappresentati assieme i due tipi corrispondenti ai due casi $C > 0$ e $C < 0$.

Il modello logistico. La funzione

$$X(t) = \frac{K}{1 + Ce^{-rt}} \quad (\text{B.2.4})$$

descrive un **modello logistico**, o **modello di Verhulst–Pearl**.²⁸

Studio della funzione. Si assume sempre $K > 0$. Si assume anche $C \neq 0$, altrimenti la (B.2.4) definisce una funzione costante $X(t) = K$. Si assume anche $r > 0$. Conseguentemente, $X(t) \rightarrow 0$ per $t \rightarrow -\infty$, mentre $X(t) \rightarrow K$ per $t \rightarrow +\infty$. Il segno del parametro C distingue due tipi di grafici.

Primo tipo: $C > 0$. La funzione $X(t)$ è definita per ogni t reale, è crescente, il grafico è compreso fra un asintoto orizzontale inferiore a quota 0 ed uno superiore a quota K . Al crescere di t la funzione cresce inizialmente convessa, fino alla quota $K/2$, per poi continuare a crescere concava.

Secondo tipo: $C < 0$. La funzione $X(t)$ è definita per ogni t reale diverso da $t_\infty = \log(-C)/r$; in questa ascissa ha un asintoto verticale, cioè $X(t) \rightarrow \infty$ per $t \rightarrow t_\infty$. Sulla semiretta sinistra $(-\infty, t_\infty)$ la funzione decresce concava, sulla semiretta destra $(t_\infty, +\infty)$ la funzione decresce convessa.

I due tipi sono rappresentati assieme nella Figura B.2.2, nella quale i parametri sono $K = 10$, $r = 0.1$ e $|C| = 2$.

Calcolo dei parametri da dati sperimentali. È stato dimostrato dal matematico italiano B. DE FINETTI²⁹ che, come una retta è individuata da due suoi punti, così il modello logistico del primo tipo è individuato, sotto ragionevoli ipotesi, da tre punti del suo grafico.

B.2.1. Teorema. Siano dati tre istanti di tempo $t_0 = 0, t_1 = 1, t_2 = 2$ e tre ordinate $0 < x_0 < x_1 < x_2$. Condizione necessaria e sufficiente affinché esista un modello logistico (B.2.4) del primo tipo il cui grafico passa per i tre punti $(t_0, x_0), (t_1, x_1)$ e (t_2, x_2) (ossia tale che $X(t_0) = x_0, X(t_1) = x_1$ ed $X(t_2) = x_2$) è che x_1 superi

²⁸ Cfr. VERHULST P., Notice sur la loi que la population poursuit dans son accroissement. *Correspondance mathématique et physique*, 10, 1838, pp. 113-121; PEARL R., *Studies in human biology*, Williams and Wilkins Company, Baltimore, 1924, p. 572.

²⁹ Cfr. GINI C., DE FINETTI B., Calcoli sullo sviluppo futuro della popolazione italiana, *Annali di Statistica*, Ser. VI, Vol. X, 1931.

la media geometrica di x_0 e x_2 , ossia che $x_1 > \sqrt{x_0 x_2}$. In tal caso il modello è univocamente individuato dai tre punti dati ed i suoi parametri sono dati dalle formule:

$$e^{-r} = \frac{x_0(x_2 - x_1)}{x_2(x_1 - x_0)}, \quad K = \frac{x_0 x_1 (1 - e^{-r})}{x_0 - x_1 e^{-r}}, \quad C = \frac{K}{x_0} - 1 \quad (\text{B.2.5})$$

La condizione $x_1 > \sqrt{x_0 x_2}$ è soddisfatta se, in particolare, si ha $x_1 > (x_0 + x_2)/2$ (per una nota disuguaglianza),³⁰ in pratica se i tre punti sono sulla parte concava della curva (perché allora (t_1, x_1) sta sopra la corda che unisce (t_0, x_0) e (t_2, x_2)).

Esempio B.2.2. Nel 1931 il matematico italiano B. DE FINETTI applicò il Teorema (B.2.1) ai dati dei censimenti della popolazione italiana degli anni 1881, 1901 e 1921. Ponendo l'origine del tempo nel 1881 e prendendo come unità di misura del tempo t un periodo di 20 anni, i tre istanti di tempo sono $t_0 = 0$, $t_1 = 1$ e $t_2 = 2$. Negli anni corrispondenti la popolazione italiana residente risultava pari a $x_0 = 28.459628$, $x_1 = 32.614437$ ed $x_2 = 37.142886$ milioni di individui. Si ha $\sqrt{x_0 x_2} = 32.51265 < x_1$ (anche se «per poco»), per cui esiste un'unico modello logistico del primo tipo che interpola i tre dati, con coefficienti calcolabili con le formule (B.2.5):

$$e^{-r} = 0.835126, \quad K = 125.1858, \quad C = 3.398715$$

La Figura B.2.3 mostra i dati dei tre censimenti e la curva logistica che li interpola. La *carrying capacity* in questo modello è $K = 125.1858$ milioni di individui. Per l'anno 2011 il modello prevede una popolazione di 60.95725 milioni di individui: il dato reale valutato al 15° censimento generale del 9 ottobre 2011 era pari a 59.433744 milioni di individui, sorprendentemente vicino alla previsione del modello, considerata la notevole distanza, evidente anche visualmente nella figura, che separa il 2011 dagli anni dei tre punti dati.³¹ Il valore di 125 milioni che il modello prevede per il 2400 è una pura speculazione priva di credibilità pratica.³²

Applicazioni. Vedremo ora alcune applicazioni alla biologia. In questi casi, la variabile indipendente t rappresenta il tempo, mentre la variabile dipendente $X(t)$ descrive tipicamente una quantità di biomassa, espressa in vari modi (μg , g, kg, ... o semplicemente numero di individui di una popolazione), ma sempre positiva. Se consideriamo una popolazione che non subisce né emigrazione né immigrazione, e che vive in un territorio delimitato, non modificabile, allora $X(t)$ assume anche il significato

Significato dei
parametri del
modello
logistico nelle
applicazioni alla
biologia

³⁰ Per x_0, x_2 positivi si ha sempre $(x_0 + x_2)/2 \geq \sqrt{x_0 x_2}$. Questa disuguaglianza equivale alla $(x_0 + x_2)^2 \geq 4x_0 x_2$, che a sua volta equivale alla $(x_0 - x_2)^2 \geq 0$, che è sempre vera.

³¹ Il confronto fra i dati del DE FINETTI e quello del 2011 è comunque viziato dalle modifiche del territorio italiano intervenute nel dopoguerra a seguito del trattato di pace del 1947.

³² Secondo l'ISTAT, la popolazione italiana raggiungerà un massimo di 63.9 milioni nel 2042, per poi decrescere. Fonte: www.istat.it/it/files/2011/12/futuro-demografico.pdf (visitato il 16 settembre 2017).

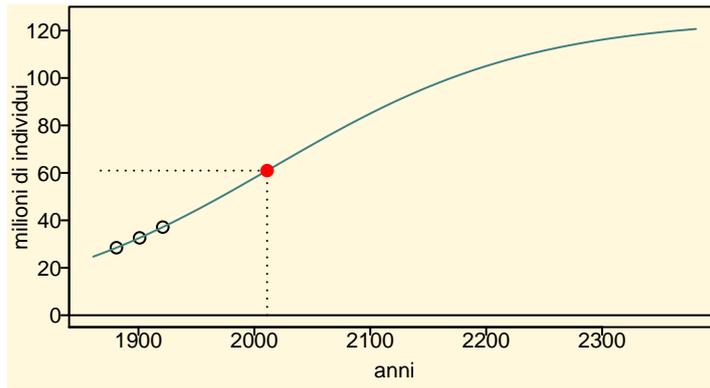


Figura B.2.3. Il modello logistico di crescita della popolazione italiana secondo DE FINETTI (1931). Il pallino rosso indica la previsione di 60.95725 milioni di individui nel 2011, contro un dato reale di 59.433744 milioni.

di densità della popolazione sul territorio.³³ Il parametro K ha le stesse dimensioni di $X(t)$, e rappresenta il valore ipotetico asintotico (per $t \rightarrow +\infty$) della biomassa, o della popolazione; ovvero quanto, molto alla lunga, sarebbe il valore finale di X «sostenibile» dalle risorse del sistema biologico o ecologico; per tale motivo, nelle applicazioni, K è chiamato portata o capacità sostenibile del modello (in inglese *carrying capacity*).

Per interpretare il modello logistico è utile il risultato seguente:

B.2.3. Teorema. Il tasso di crescita del modello logistico è

$$\frac{X'(t)}{X(t)} = r \left(1 - \frac{X(t)}{K} \right) \quad (\text{B.2.6})$$

DIMOSTRAZIONE. Calcolando la derivata di $X(t)$ troviamo

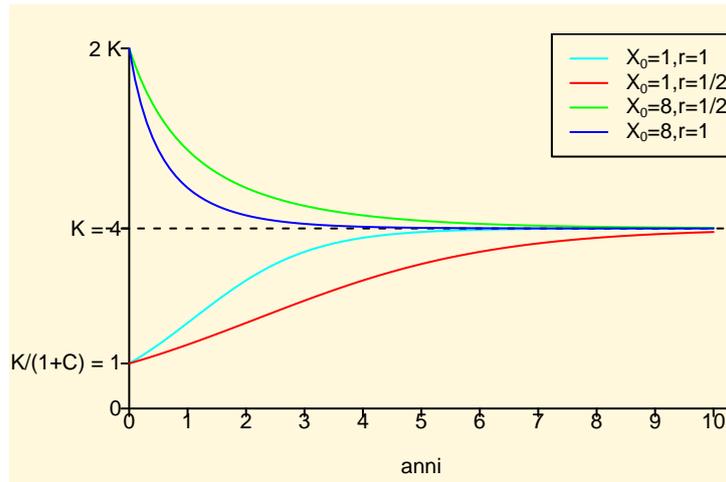
$$\begin{aligned} X'(t) &= \frac{r C K}{(1 + C e^{-rt})^2} e^{-rt} = \frac{r C X(t)}{1 + C e^{-rt}} e^{-rt} \\ &= r X(t) \left(1 - \frac{1}{1 + C e^{-rt}} \right) = r X(t) \left(1 - \frac{X(t)}{K} \right) \end{aligned}$$

L'ipotesi su cui si basa il modello (B.2.4) è che quindi il tasso di crescita non dipenda dal tempo e sia una funzione lineare (della variabile X), ossia una retta, con pendenza negativa ($-r/K$) per descrivere il fatto ovvio che il tasso di crescita diminuisce quando la densità della popolazione cresce (a causa del sovraffollamento nel territorio limitato a disposizione). Il coefficiente $r > 0$ è detto tasso specifico (o intrinseco) di crescita (in inglese *maximum specific growth rate*). Esso rappresenta il valore massimo del tasso di crescita (quello che si ha per $K \rightarrow +\infty$, cioè se sono disponibili risorse illimitate (in inglese si dice *non-limiting resources*, e non *unbounded resources*), ossia se non vi è competizione per le risorse, e la probabilità di incontro è pari a 0).³⁴

³³ Per esempio il numero di volpi per km^2 in Gran Bretagna. Il territorio non è necessariamente 2-dimensionale; può essere 3-dimensionale, per esempio nel caso del numero di cellule di *Lactobacillus delbrueckii*, sottospecie *bulgaricus*, in 1 mL di una confezione industriale di yogurt.

³⁴ Per questo motivo, nelle applicazioni, invece di r si usa molto spesso il simbolo μ_{\max} .

Figura B.2.4. Grafico del modello logistico. La curva in rosso descrive un modello realistico per la crescita di una popolazione di volpi in Gran Bretagna ($r = 1/2, X_0 = 1$).



Per esemplificare brevemente queste interpretazioni, consideriamo la presentazione grafica (Figura B.2.4) di un semplice modello di crescita di una popolazione di volpi in Gran Bretagna,³⁵ fissando come parametri i valori realistici $r = 0.5/\text{anno}$, $K = 4$ volpi/km², dove abbiamo assunto densità $X_0 = 1$ volpe/km².

Immaginiamo quindi uno sperimentatore che misuri una variabile numerica $X = X(t)$ (che dipende dal tempo t) in n determinati istanti di tempo $t_0 < t_1 < \dots < t_n$, ottenendo i valori osservati x_k ($k = 1, \dots, n$), ed immaginiamo ancora che abbia motivo di supporre che $X = X(t)$ sia un modello logistico (B.2.4) del primo tipo. Se $n > 3$ (come auspicabile in un esperimento), non sarà possibile ottenere i parametri del modello con il Teorema (B.2.1), in quanto ogni terna di punti (t_k, x_k) potrebbe dare una diversa terna (r, K, C) di parametri. La situazione è la stessa che si è incontrata quando n punti sperimentali (t_k, y_k) sono ritenuti legati da un modello del tipo $y = a + bt$ (con grafico una retta): ogni coppia di punti (t_k, y_k) potrebbe dare una diversa coppia (a, b) di parametri della retta (risp. intercetta e pendenza). La soluzione in quel caso ed anche qui è operare con la statistica, in particolare con la tecnica della retta di regressione.

Ora il modello (B.2.4) è nonlineare; occorre trovare un cambiamento di variabili che porti ad un modello in cui i parametri incogniti compaiono in modo lineare. La (B.2.4) equivale a:

$$1/X(t) = (1 + C e^{-rt})/K, \text{ e questa a: } K/X(t) = 1 + C e^{-rt}$$

ed ancora a:

$$K/X(t) - 1 = C e^{-rt}$$

Passando ai logaritmi (naturali, in base e) di ambo i membri si ottiene la relazione cercata:

$$\underbrace{\log(K/X(t) - 1)}_{y=} = \underbrace{\log(C)}_a \underbrace{-r}_{+b} \underbrace{t}_t$$

Affinché questo funzioni occorre però una valutazione preliminare di K , in modo che i valori $K/x_k - 1$ ottenuti dalle osservazioni siano positivi, in modo che ne esistano

³⁵ Cfr. ANDERSON R., JACKSON H., MAY R., SMITH A., Population dynamics of fox rabies in Europe. *Nature* 289, 1981, pp. 765-771.

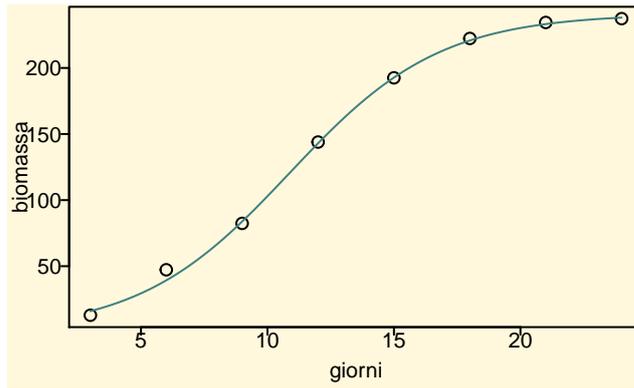


Figura B.2.5. Crescita logistica delle foglie di *Castanea sativa* (fonte: S. CASAGRANDE, 2000). La curva logistica è ottenuta stimando il parametro K di *carrying capacity* con il metodo di DE FINETTI, e stimando gli altri parametri con la regressione lineare dopo una opportuna trasformazione delle variabili.

i logaritmi. Può essere utile o un'osservazione visuale dei punti, oppure lo stesso Teorema (B.2.1) applicato in modo opportuno.

Esempio B.2.4. In uno studio³⁶ sull'accrescimento delle foglie del castagno (*Castanea sativa*) sono stati misurati $n = 8$ valori x_k di biomassa delle foglie (in un'opportuna unità di misura, $k = 1, \dots, 8$) ad intervalli regolari di 3 giorni dall'impianto, convenzionalmente avvenuto al tempo $t = 0$ (misura del tempo in giorni). La fisiologia vegetale insegna che la crescita è all'inizio su base di riproduzione cellulare, per cui vi è una prima fase di crescita convessa di tipo esponenziale. Segue poi una fase di distensione, dove le cellule crescono perché distendono la parete. La limitata elasticità della parete alla fine limita la crescita, e si arriva alla fase di crescita concava senescente. Le curve di crescita hanno quindi in genere un aspetto logistico. I dati misurati sono:

t_k	3	6	9	12	15	18	21	24
x_k	12.87	47.28	82.37	143.93	192.54	222.3	234.4	237.3

È ragionevole (visti gli ultimi due punti) ipotizzare un valore prossimo $K = 240$ per la *carrying capacity* K . Per esempio, applicando le formule di DE FINETTI alle osservazioni dei giorni 15, 18 e 21 si ha $K = 240.9773$; assumiamo quindi tranquillamente tale valore di K , e calcoliamo i dati sui quali eseguire la regressione lineare:

t_k	3	6	9	12	15	18	21	24
$\log(K/x_k - 1)$	2.875	1.410	0.655	-0.394	-1.380	-2.477	-3.573	-4.167

A conti fatti (con R) la retta di regressione ha intercetta $a = 3.6504$ e pendenza $b = -0.3357$. Ricaviamo quindi

$$C = e^a = e^{3.6504} = 38.49006, \quad r = -b = 0.3357$$

La Figura B.2.5 rappresenta gli 8 punti (t_k, y_k) e il grafico del modello logistico ottenuto:

$$X(t) = \frac{240.9773}{1 + 38.49006 e^{-0.3357t}}$$

Il metodo DE FINETTI può essere utile quando non sia accettabile una stima visuale di K . Nello stesso studio sulla crescita logistica delle foglie sono stati misurati $n = 14$

³⁶ S. CASAGRANDE, Laurea in Scienze Naturali, Trieste, 16 dicembre 2000.

valori x_k di biomassa di foglie di laurotino (o lentaggine, *Viburnum tinus*). Una stima visuale della *carrying capacity* è dubbia. I dati ottenuti sono:

t_k	3	6	9	12	15	18	21
x_k	5.30	9.00	9.06	9.86	14.02	22.07	28.80
t_k	24	27	30	33	36	39	42
x_k	43.53	58.18	70.19	80.71	94.42	112.02	112.43

Per esempio, con i dati dei giorni 27, 30 e 33 si ottiene col metodo DE FINETTI la stima $K = 108.59$. I dati sperimentali e curva logistica che li approssima sono raffigurati in Figura B.2.6 (a), dove sono stati esclusi dal calcolo gli ultimi due punti che, avendo ordinate x_k maggiori della *carrying capacity* K impostata, avrebbero portato a valori negativi dell'argomento $(K/x_k - 1)$ della funzione logaritmo. Le stime degli altri parametri sono $r = 0.14316$ e $C = 51.757$.

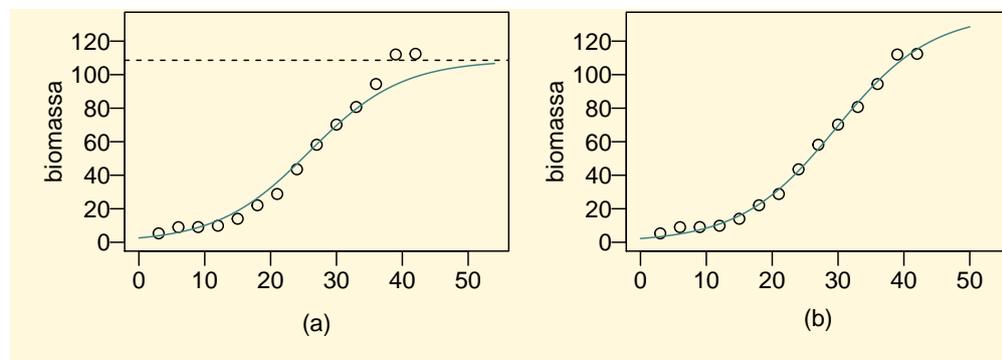


Figura B.2.6. Crescita logistica delle foglie di *Viburnum tinus* (fonte: S. CASAGRANDE, 2000). Ascisse in giorni. (a) La curva logistica è ottenuta stimando il parametro K di *carrying capacity* con il metodo di DE FINETTI, e stimando gli altri parametri con la regressione lineare omettendo gli ultimi due punti, le cui ordinate superano K . (b) Curva logistica ottenuta dagli stessi dati senza eccezioni col comando `nls`.

R **Laboratorio B.2.5.** Volendo determinare un'approssimazione migliore dei parametri si può ricorrere alla funzione `nls` che consente di minimizzare i quadrati degli errori quando la dipendenza del modello dai parametri non sia lineare. Vista la delicatezza delle operazioni coinvolte nell'operazione di minimizzazione è spesso conveniente partire da una prima approssimazione da inserire nell'argomento `start` di `nls`. Come esempio, riportiamo nella Figura B.2.6 (b) la curva logistica calcolata usando il comando `nls` di R a partire dalla prima approssimazione data dalla curva in (a): la curva in (b) ha parametri $K = 136.39$, $r = 0.1378$ e $C = 60.07$

R **Laboratorio B.2.6.** Si consideri la Tabella B.2.1 che descrive la crescita di una popolazione di polipi della medusa *Aurelia aurita* ancorati a conchiglie di ostriche in 2 diverse condizioni sperimentali (HD e LD), caratterizzate da bassa densità iniziale ed

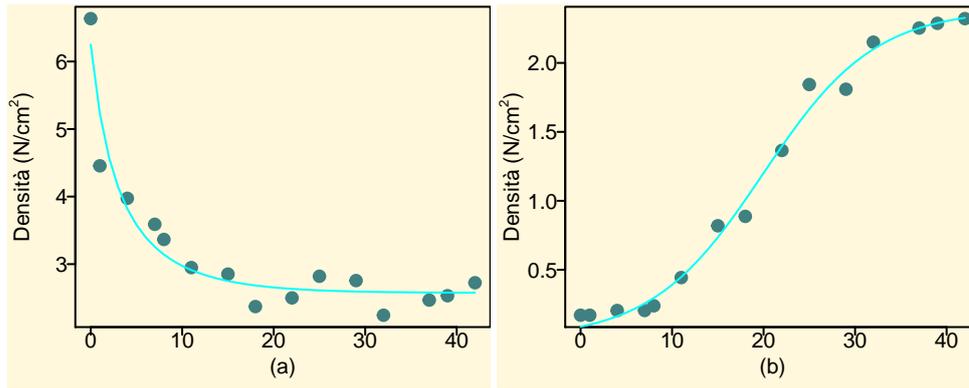


Figura B.2.7. Crescita di polipi su ostriche in 2 diverse condizioni sperimentali. (a) Valori iniziali superiori alla portata. (b) Valori iniziali inferiori alla portata.

alta densità.³⁷ Nella tabella viene riportata la densità di polipi ($\#/cm^2$) e il tempo in giorni.

Tempo (giorni)	Densità	Trattamento	Tempo (giorni)	Densità	Trattamento
0	6.63	HD	0	0.17	LD
1	4.46	HD	1	0.17	LD
4	3.97	HD	4	0.20	LD
7	3.59	HD	7	0.20	LD
8	3.37	HD	8	0.24	LD
11	2.95	HD	11	0.44	LD
15	2.85	HD	15	0.82	LD
18	2.37	HD	18	0.89	LD
22	2.50	HD	22	1.37	LD
25	2.82	HD	25	1.84	LD
29	2.76	HD	29	1.81	LD
32	2.24	HD	32	2.15	LD
37	2.47	HD	37	2.25	LD
39	2.53	HD	39	2.29	LD
42	2.72	HD	42	2.32	LD

Tabella B.2.1. Densità di una popolazione di polipi della medusa *Aurelia aurita* su conchiglie in 2 diverse condizioni sperimentali.

Pur nella sua apparente semplicità il modello di crescita logistico descrive bene il comportamento sia nel caso di bassa densità (valori iniziali inferiori alla portata), che nel caso di alta densità (valori iniziali superiori alla portata).

Il codice potrebbe essere

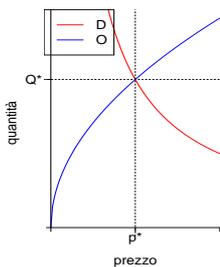
```
with(medusa, plot(t, density))
# assumendo che il dataset medusa contenga i dati del grafico (b)
modello = nls(density~K/(1+ C*exp(-r*t)),
  start = list(K = 2, C = 20, r = 0.1),
  data = medusa) # attribuendo delle stime iniziali ai parametri
lines(0:42, predict(modello, newdata = data.frame(t = 0:42)))
summary(modello)
```

³⁷ Per i dati completi cfr. MELICA V., INVERNIZZI S., CARISTI G., Logistic density-dependent growth of an *Aurelia aurita* polyps population, *Ecological Modelling*, 291, 2014, pp. 1-5.

Si noti che i coefficienti K ed r dei 2 modelli sono confrontabili.

	LD	HD
K	2.5733	2.3890
C	-0.5883	26.3803
r	0.1474	0.1642

Equilibri. Le soluzioni di un'equazione $X' = f(X)$ del tipo $X(t) = X^*$ costante, cioè quelle che non variano nel tempo o, se si preferisce, quelle che nel piano (t, X) , hanno per grafico una retta orizzontale, vengono dette **equilibri**³⁸ dell'equazione $X' = f(X)$. Se $X(t) = X^*$ è un equilibrio, si ha ovviamente $0 = (X^*)' = f(X^*)$ e quindi X^* è uno zero della funzione f . Viceversa, se $f(X^*) = 0$, la funzione $X(t) = X^*$ è una soluzione costante di $X' = f(X)$ e dunque è un equilibrio. Gli equilibri sono quindi esattamente le ascisse delle intersezioni del grafico di f con l'asse delle ascisse. L'equazione logistica $X' = rX(1 - X/K)$ ha due equilibri: $X_u^* = 0$ e $X_s^* = K$. Un equilibrio dell'equazione $p' = \alpha(D(p) - O(p))$ della domanda e dell'offerta è un prezzo p^* per il quale la domanda uguaglia l'offerta. Di norma, poiché a prezzi crescenti pochi consumatori sono disposti a comprare e molti offerenti sono disposti a vendere, si assume che la domanda $D = D(p)$ sia decrescente e che l'offerta $O = O(p)$ sia crescente. Con le ulteriori ovvie condizioni $\lim_{p \rightarrow +\infty} D(p) = 0$ ed $O(0) = 0$, il prezzo di equilibrio p^* (che mette d'accordo consumatori e venditori) risulta unico.³⁹



Si distinguono equilibri **stabili** e **instabili**. Nell'equazione logistica $X' = rX(1 - X/K)$, le soluzioni con condizione iniziale positiva vicina all'equilibrio $X_u^* = 0$, essendo crescenti, se ne allontanano: intuitivamente, $X_u^* = 0$ è **instabile**. Invece le soluzioni con condizione iniziale vicino all'equilibrio $X_s^* = K$ vi si avvicinano, anzi, per la (B.2.4), tendono ad esso per $t \rightarrow \infty$: intuitivamente, $X_s^* = K$ è **stabile**. Nelle ipotesi dette sulle curve della domanda e dell'offerta, l'equilibrio p^* del prezzo di un bene è un equilibrio stabile (la situazione è la medesima dell'equilibrio X_s^* dell'equazione logistica: $p' > 0$ per $p < p^*$, $p' < 0$ per $p > p^*$).

La legge di Gompertz

Legge di Gompertz. Una seconda legge di crescita con saturazione che appare spesso nei modelli di crescita di una popolazione è la legge di Gompertz.⁴⁰

$$X(t) = X_0 \exp \left[r \frac{1 - e^{-bt}}{b} \right] \quad (\text{B.2.7})$$

B.2.7. Teorema. Il tasso di crescita del modello di Gompertz è

$$\frac{X'(t)}{X(t)} = r e^{-bt} \quad (\text{B.2.8})$$

³⁸ Sinonimo italiano di equilibrio è stato stazionario. In inglese si dice *equilibrium*, *steady state*, oppure *stationary solution*.

³⁹ Nel grafico a margine vengono riportate le funzioni $p \rightarrow D(p)$ e $p \rightarrow O(p)$; solitamente il grafico viene rappresentato in termine delle loro funzioni inverse.

⁴⁰ Cfr. GOMPERTZ B., On the nature of the function expressive of the law of mortality. *Philosophical Transactions*, 27, 1825, pp. 513–585.

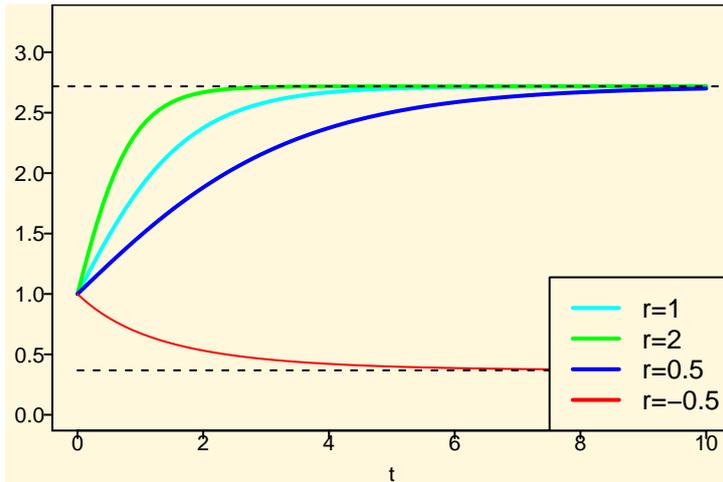


Figura B.2.8. Modello di Gompertz. Nei grafici riportati $X_0 = 1$ e quindi $K = e$ (se $r > 0$ con $b = r$) e $K = 1/e$ (se $r < 0$ con $b = -r$).

DIMOSTRAZIONE.

$$X'(t) = X_0 \exp \left[r \frac{1 - e^{-bt}}{b} \right] r e^{-bt} = X(t) r e^{-bt}$$

Tasso di crescita nella legge di Gompertz

Il tasso di crescita, in questo caso, anziché essere costante come nel semplice modello di Malthus decade esponenzialmente al crescere del tempo, a partire dal valore r assunto al tempo 0; assumiamo qui $b > 0$ (se $b = 0$ il modello si riduce al modello di Malthus). Il modello di Gompertz viene comunemente usato in oncologia clinica per descrivere la crescita dei tumori solidi, nei quali le cellule più interne non hanno accesso ai nutrienti ed all'ossigeno, cosicché generalmente non si riproducono più e muoiono, generando un centro necrotico.⁴¹

La (B.2.7) definisce se $r > 0$ una funzione crescente (la derivata è sempre positiva). Per $t \rightarrow +\infty$ si ha la portata del modello: $K = X_0 e^{r/b}$. Ogni soluzione X dell'equazione di Gompertz con $X(0) = X_0 > 0$ verifica quindi per ogni $t > 0$ la disuguaglianza

$$X_0 < X(t) < K$$

Possiamo anche esprimere il modello in termini della portata K

$$X(t) = X_0 \left(\frac{K}{X_0} \right)^{1 - \exp(-bt)}$$

Portata del modello di Gompertz

Modello di Von Bertalanffy. Il modello di Von Bertalanffy è descritto dall'equazione

$$X(t) = K - (K - X_0)e^{-rt}$$

⁴¹ Cfr. NORTON L., A Gompertzian model of human breast cancer growth. *Cancer Research* 48, 1988, pp. 7067-7071.

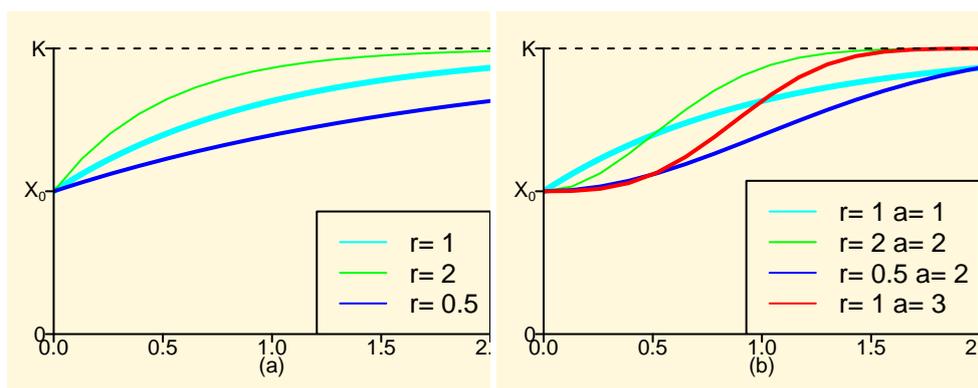


Figura B.2.9. (a) Grafico dei modelli di von Bertalanffy con $K = 1$, $X_0 = 1/2$ per vari valori di r . (b) Grafico dei modelli di Weibull con $K = 1$, $X_0 = 1/2$ per vari valori di r ed a .

Derivando ricaviamo subito

$$X'(t) = r(K - X_0)e^{-rt} = r(K - X(t))$$

e si vede che questo modello è una semplice variante del modello di Malthus, in cui la crescita di X è proporzionale alla differenza del valore attuale di X da un valore massimo K (la portata).

Modello di Weibull. Il modello di Weibull è descritto dall'equazione

$$X(t) = K - A \exp(-r t^a)$$

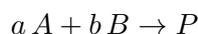
Derivando ricaviamo subito

$$X'(t) = rA \exp(-r t^a) a t^{a-1} = (K - X(t)) t^{a-1} \quad (\text{B.2.9})$$

e il modello si riduce al modello di von Bertalanffy per $a = 1$. Inoltre in questo caso il membro destro dell'equazione (B.2.9) dipende in modo esplicito dalla variabile indipendente t .

B.2.3. Cinetica chimica

Consideriamo una reazione chimica, a temperatura costante, che coinvolga due sostanze A e B



La velocità di reazione v è definita come⁴²

$$v = -\frac{1}{a}[A'(t)] = -\frac{1}{b}[B'(t)]$$

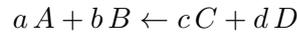
Le concentrazioni molari delle sostanze sono riportate tra parentesi quadre. L'equazione cinetica ha la forma

$$v = k[A]^\alpha[B]^\beta \quad (\text{B.2.10})$$

⁴² Si noti il segno meno, in quanto siamo interessati al risultato della reazione. Alla sparizione di a moli di A corrisponde la creazione di una mole del prodotto P .

in cui gli esponenti α e β , detti ordini di reazione rispetto ad A e B , sono determinati sperimentalmente.⁴³ L'ordine totale della reazione è dato da $\alpha + \beta$, mentre il numero k è chiamato velocità specifica o costante di velocità di reazione. La formula (B.2.10) si riferisce al caso in cui la reazione proceda da sinistra a destra. In generale la velocità della reazione diretta è limitata dalla velocità della reazione inversa (ossia da destra a sinistra)

Velocità di reazione



dove abbiamo supposto che sia $P = c C + d D$. L'espressione (B.2.10) viene sostituita dalla relazione

$$v = k_d[A]^\alpha[B]^\beta - k_i[C]^\gamma[D]^\delta$$

in cui la velocità netta viene espressa come differenza della velocità della reazione diretta e di quella inversa. Qui k_i e k_d sono le costanti di velocità per le reazioni diretta ed inversa rispettivamente. Quando $v = 0$, ossia se

$$\frac{[A]^\alpha[B]^\beta}{[C]^\gamma[D]^\delta} = \frac{k_i}{k_d} \quad (\text{B.2.11})$$

la velocità della reazione diretta $a A + b B \rightarrow c C + d D$ è uguale alla velocità della reazione inversa $c C + d D \leftarrow a A + b B$ e il sistema si trova in condizioni di equilibrio chimico, intrinsecamente dinamico. Se α , β , γ e δ coincidono con i coefficienti stechiometrici a , b , c e d , l'espressione a sinistra in (B.2.11) è detta costante di equilibrio. Come nel caso dei modelli ad un compartimento diciamo tempo di dimezzamento o di semitrasformazione di una sostanza A coinvolta in una reazione chimica l'intervallo di tempo $\Delta t_{1/2}$ necessario per ridurre la concentrazione della sostanza alla metà del valore iniziale. Esamineremo ora alcune tipiche reazioni chimiche.

Equilibrio chimico.

Reazione $A \rightarrow P$ di ordine 0. Supponiamo che la reazione $A \rightarrow P$ sia descritta dalla funzione

$$[A(t)] = [A_0] - kt$$

dove $[A_0]$ denota la concentrazione iniziale della sostanza A . Derivando si trova $[A'(t)] = -k$ e quindi la reazione è di ordine 0 (vedi l'equazione (B.2.10)).

Reazione $A \rightarrow P$ di ordine 1. Se la reazione $A \rightarrow P$ è descritta dalla funzione

$$[A(t)] = [A_0]e^{-kt}$$

allora derivando si trova

$$A'(t) = -k[A(t)]$$

e quindi abbiamo una reazione del primo ordine. Si noti che per una reazione chimica di questo tipo il tempo di semitrasformazione risulta dato da $\log(2)/k$ ed è indipendente (vedi p. 14) dalla concentrazione iniziale del reagente.

⁴³ La velocità di reazione potrebbe dipendere anche dalla concentrazione dei prodotti. Si noti che il meccanismo della reazione dipende in generale da una sequenza di n tappe intermedie «elementari». Nel caso delle reazioni elementari gli ordini di reazione coincidono con i coefficienti stechiometrici a e b dei reagenti; ciò non è più vero per la reazione complessiva; in particolare gli ordini di reazione non sono necessariamente numeri interi.

Reazioni $A \rightarrow P$ di ordine 2. Se consideriamo la funzione

$$[A(t)] = \frac{1}{kt + 1/[A_0]}$$

per derivazione troviamo subito $[A'(t)] = -k[A(t)]^2$ e quindi abbiamo una reazione del secondo ordine. Proviamo a calcolare il tempo di semitrasformazione. Si deve risolvere l'equazione nell'incognita $\Delta t_{1/2}$

$$[A_0]/2 = \frac{1}{k\Delta t_{1/2} + 1/[A_0]} \quad \text{e quindi} \quad \Delta t_{1/2} = \frac{1}{k[A_0]}$$

Il tempo di semitrasformazione è inversamente proporzionale alla concentrazione iniziale del reagente.

Esercizi e complementi

- Una colonia di batteri *E. coli* si sviluppa secondo la legge di Malthus con tempo di raddoppio di 20 min. Nel libro di fantascienza *Andromeda* lo scrittore M. CRICHTON afferma che un singolo batterio, di massa pari a 10^{-12} g, genererebbe in 24 ore una supercolonia di massa pari alla massa della Terra, ovvero 5.98×10^{24} g. È vero?
- I modelli compartimentali sono di uso frequente in farmacocinetica: supponiamo che un farmaco venga somministrato con un'iniezione che possiamo ritenere istantanea nel compartimento in cui si effettueranno le misure della sua concentrazione $C(t)$, per esempio il plasma. Se il farmaco viene somministrato in un'unica dose, dopo la somministrazione è lecito considerare nullo il tasso di iniezione μ e positivo il tasso di eliminazione λ . Il modello risulta allora descritto dall'equazione $C(t) = C_0 e^{-\lambda t}$. Il tempo di dimezzamento è anche detto emivita del farmaco. Si consideri ora la concentrazione $C(t)$ espressa in $\mu\text{g}/\text{cm}^3$ di un farmaco nel plasma. Si sono raccolti i seguenti dati

Tempo (minuti)	0	10	20	30	40	50
Concentrazione ($\mu\text{g}/\text{cm}^3$)	9.7	5.1	3.3	2.5	1.4	0.9

Determinare, tramite la regressione lineare (dopo un opportuno cambio di variabili), la legge che regola la concentrazione del farmaco in funzione del tempo.

- Si consideri lo sviluppo della popolazione di una città. Sia $N(t)$ la numerosità della popolazione al tempo t . Si fissi l'origine dei tempi nel 1945. Si esaminino i seguenti dati

1 gennaio	1945	1965	1970	1985	1995	2000
	302 145	282 432	278 111	262 145	251 024	247 012

In ipotesi di sviluppo di tipo malthusiano si determini: 1) il valore del tasso di crescita, 2) la popolazione attesa secondo il modello ottenuto per l'anno 2010, 3) Il tempo di dimezzamento.

- Una popolazione di batteri cresce secondo la legge di Malthus $N(t) = N_0 \exp(kt)$, dove N è la biomassa (in grammi) e t il tempo (in secondi). In un'ora N raddoppia. Calcolare k .
- Una popolazione di batteri cresce secondo la legge di Malthus $N(t) = N_0 \exp(kt)$, dove N è la biomassa (in grammi) e t il tempo (in minuti). Alle 8:00 si hanno 2 g di biomassa. Alle 10:45 (stesso giorno) si hanno 10 g di biomassa. Nello stesso istante si prelevano 9 g dalla provetta. A che ora la biomassa ha nuovamente il valore 10 g?

6. Un anticoagulante viene iniettato nel plasma di un paziente. Si indichi con $Q(t)$ la quantità di anticoagulante presente nel plasma al tempo t . Si supponga che $Q(t)$ decresca nel tempo con velocità pari a $Q(t)$ stessa. 1) 100 mg di anticoagulante si riducono a 73 mg in 12 ore. Determinare il tempo di dimezzamento dell'anticoagulante. 2) Dopo quanto tempo la quantità di anticoagulante è pari a 1 mg?
7. Si consideri il modello di crescita $N(t) = 10 \exp(1.5t)$. Si supponga che le risorse aumentino come $R(t) = 100 + 4t$.
- Quanti individui aggiuntivi potrebbero sopravvivere al tempo $t = 0$?
 - Si determini il punto di crisi malthusiano (usando il metodo delle tangenti di Newton).
8. Determinare gli eventuali equilibri delle equazioni:
1. $X' = 2X - 8X^3$
 2. $X' = 1 - X^2$
 3. $X' = X^3 - 3X + 1$
- Si provi a dire quali risultano stabili.
9. Si dimostri che la funzione (B.2.4) è convessa se $X_0 > K$, mentre se $0 < X_0 < K$ la funzione $X(t)$ è convessa se risulta minore di $K/2$, quando supera il valore $K/2$ diviene concava.
10. Si consideri la reazione $A + B \rightarrow P$ descritta dalle equazioni

$$\begin{cases} [A(t)] = \frac{[A_0]^2 - [B_0][A_0]}{[A_0] - [B_0]e^{([B_0] - [A_0])kt}} \\ [B(t)] = [B_0] - [A_0] + [A(t)] \end{cases}$$

Si verifichi che la reazione è di ordine 1 sia rispetto ad A che rispetto a B , e quindi ha ordine complessivo 2:

$$[A'(t)] = [B'(t)] = -k[A][B]$$

B.2.4. Metodi numerici: la spezzata di Eulero

Non forniremo tecniche risolutive di equazioni differenziali; ci limitiamo qui ad illustrare alcune tecniche numeriche di vasta applicabilità che consentono di approssimare soluzioni di equazioni differenziali. Introdurremo ora una tecnica particolarmente intuitiva, il metodo della spezzata di Eulero. Nell'equazione

$$X'(t) = f(t, X(t)) \quad (\text{B.2.12})$$

sostituiamo la derivata $X'(t)$ con il quoziente di Newton (mantenendo la stessa condizione iniziale) $m_h = (X(t+h) - X(t))/h$; l'idea è che se prendiamo h piccolo commettiamo un piccolo errore.⁴⁴ In altre parole possiamo considerare l'equazione

$$\frac{X(t+h) - X(t)}{h} = f(t, X(t)) \quad (\text{B.2.13})$$

invece dell'equazione di partenza; per h piccolo le soluzioni di (B.2.12) e di (B.2.13) differiranno di poco, almeno per brevi intervalli della variabile t .

Ma cosa intendiamo per soluzioni di (B.2.13)? Supponiamo ci sia noto il valore iniziale (per esempio al tempo $t = 0$) $X_0 = X(t = 0)$. Con la formula (B.2.14) possiamo

⁴⁴ Si veda l'equazione (3.2.4) del Capitolo 3.

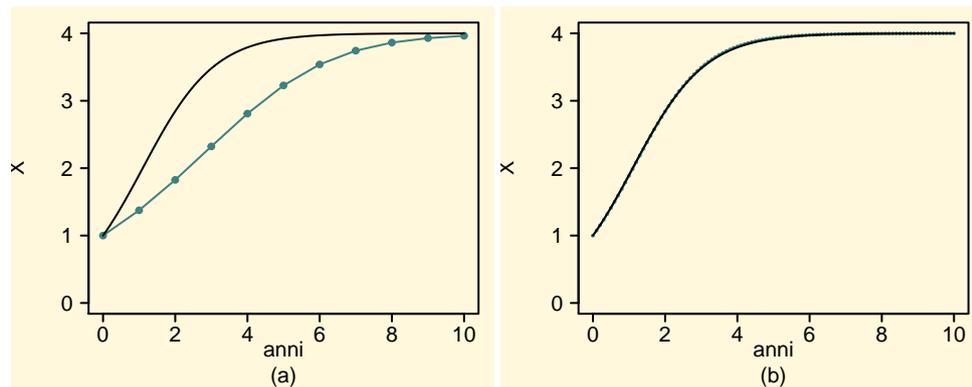


Figura B.2.10. Soluzione esatta e spezzata di Eulero per l'equazione logistica $X' = X(4 - X)/8$ con condizione iniziale $X(0) = 1$. (a) $h = 1$, 10 passi. (b) $h = 1/10$, 100 passi.

determinare $X(h)$, $X(2h)$, eccetera. Se congiungiamo i punti $(0, X(0))$, $(h, X(h))$, $(2h, X(2h))$, \dots , otteniamo una poligonale che chiameremo la **spezzata di Eulero**. Tale spezzata è l'approssimazione che cercavamo delle soluzioni di (B.2.12). Per semplicità di notazione, poniamo $X_n = X(nh)$ e $t_n = nh$. Allora dall'equazione (B.2.13) (ponendo in successione $t = 0, h, 2h, \dots$) ricaviamo

$$\begin{aligned} X_1 &= X_0 + f(t_0, X_0)h \\ X_2 &= X_1 + f(t_1, X_1)h \\ &\dots \end{aligned}$$

In generale, per $n = 0, 1, 2, \dots$ si hanno le relazioni ricorsive $t_{n+1} = t_n + h$ per la variabile t e

$$X_{n+1} = X_n + f(t_n, X_n)h$$

per la variabile X . Nel caso dell'equazione logistica $X' = 1/8 X(4 - X)$ (quella delle volpi, vedi p. 20) con $X_0 = 1$ otteniamo i valori numerici

$$\begin{aligned} X_1 &= X_0 + 1/8 X_0(4 - X_0) = 1 + 3/8 = 11/8 \\ X_2 &= 11/8 + 11/64 * (4 - 11/8) = 935/512 \approx 1.826172 \end{aligned}$$

e così via. Il processo descritto è un procedimento iterativo e si presta ad essere codificato; la funzione da iterare è $X + rX(1 - X/K)h$; consideriamo un arco di tempo di 10 anni. Se decidiamo di fotografare la situazione di anno in anno prendiamo il passo $h = 1$. Un frammento di codice, se partiamo da $X_0 = 1$ è

```
h = 1 # passo
t = 0 # valore iniziale di t
iterazioni = 10 # numero di iterazioni
X = 1 # valore iniziale di X
for (k in 1:iterazioni) # ciclo iterativo
  { X[k+1] = X[k]+0.5*X[k]*(1-X[k]/4)* h
    t[k+1] = t[k] +h
  }
plot(t, X, type="o") # grafico
```

Con 10 passi riotteniamo ovviamente la Figura B.2.10 (a) mentre con 100 passi di ampiezza $h = 0.1$ si ottiene la Figura B.2.10 (b) che possiamo confrontare con la soluzione esatta riportata nella stessa Figura.

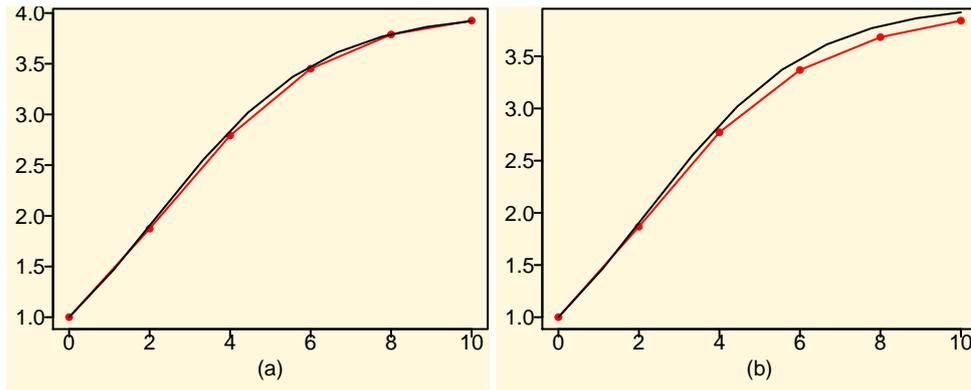


Figura B.2.11. In nero la soluzione, in rosso il risultato approssimato. (a) Risoluzione implicita del metodo di Eulero. (b) Risoluzione con il metodo predizione-correzione.

Esercizi e complementi

1. A fianco dell'approssimazione

$$\frac{X(t+h) - X(t)}{h} \approx f(t, X(t)) \quad (\text{B.2.14})$$

che usa come stima della derivata il quoziente di Newton a destra potremmo usare la stima della derivata con il quoziente di Newton a sinistra nel punto successivo $t+h$

$$\frac{X(t+h) - X(t)}{h} \approx f(t+h, X(t+h)) \quad (\text{B.2.15})$$

Facendo la media delle equazioni si trova

$$\frac{X(t+h) - X(t)}{h} \approx \frac{f(t, X(t)) + f(t+h, X(t+h))}{2} \quad (\text{B.2.16})$$

Si può mostrare che questa tecnica applicata al calcolo di un'antiderivata corrisponde precisamente all'uso del metodo dei trapezi; la chiameremo pertanto iterazione dei trapezi. Ripercorrendo quanto visto possiamo costruire il processo ricorsivo

$$\begin{cases} t_{n+1} &= t_n + h \\ X_{n+1} &= X_n + h \frac{f(t_n, X_n) + f(t_{n+1}, X_{n+1})}{2} \end{cases} \quad (\text{B.2.17})$$

Purtroppo siamo sfortunati! X_{n+1} compare sia a destra che a sinistra nell'equazione (B.2.17). A prima vista siamo in un circolo vizioso. Se siamo però in grado di ricavare X_{n+1} dall'equazione (B.2.17), possiamo procedere con l'iterazione. Nel caso dell'equazione logistica $X' = rX(1 - X/K)$ ciò si può fare (serve solo la formula risolutiva dell'equazione di secondo grado) ricavando

$$Y = \frac{K}{hr} \left(-1 + \frac{hr}{2} + \sqrt{\left(1 - \frac{hr}{2}\right)^2 + \frac{2hr(X + \frac{hrX}{2} - \frac{hrX^2}{2K})}{K}} \right) \quad (\text{B.2.18})$$

dove $Y = X_{n+1}$ e $X = X_n$ e con solo 5 passi di ampiezza $h = 2$ otteniamo la Figura (B.2.11): si vede chiaramente che il metodo fornisce risultati molto più vicini a quelli esatti del metodo di Eulero (a parità di passi).

- R** 2. Il metodo con passo iterativo implicito dato dalla Eq. B.2.17 non è facilmente realizzabile, salvo in alcuni casi particolari come quello dell'esercizio precedente. Una possibile correzione è la seguente: possiamo predire in prima battuta

$X_{n+1} \approx X_n + hf(t_n, X_n)$ con il metodo di Eulero. A questo punto correggiamo la nostra predizione usando l'iterazione dei trapezi (eq. B.2.18). Scrivere uno *script* per il caso logistico che usi tale generalizzazione del metodo di Eulero (metodo di predizione-correzione).

- R** 3. Si consideri l'equazione logistica $X' = X(4 - X)/8$. Si scelga $h = 1$ e si ricavi X_{n+1} usando l'equazione B.2.18. Si riproduca il *plot* della Figura B.2.11 (b).

B.3. Salendo con la dimensione

B.3.1. Modelli SIR

Fino ad ora abbiamo considerato modelli e quindi equazioni in cui compariva una sola funzione incognita. In questa sezione analizzeremo modelli ed equazioni in cui il numero di funzioni incognite è maggiore di uno. Adotteremo come modello guida il modello SIR che regola l'evoluzione di un'epidemia.⁴⁵

Esempio B.3.1. [Esempio guida] Dopo aver passato a casa le vacanze natalizie, dei 502 studenti di un collegio, 2 presentano sintomi influenzali, seguiti il giorno dopo da altri 3. Si stima che l'influenza duri in media 2 giorni e si assume per semplicità che il tempo di incubazione possa essere considerato nullo.

Per studiare la situazione descritta nell'Esempio B.3.1, occorre formulare delle ipotesi e sviluppare un modello matematico.

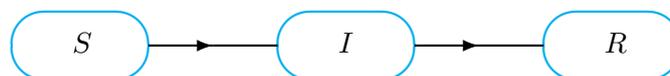
Supponiamo che la malattia conferisca immunità permanente. Possiamo allora pensare di suddividere la popolazione in esame in tre gruppi:

S : le persone suscettibili di essere infettate.

I : le persone infette.

R : i rimossi, ovvero quelli fuori dal gioco perché per un qualsivoglia motivo non possono più contrarre la malattia (per esempio perché è stato loro somministrato un vaccino).

Con abuso di notazione indicheremo con le lettere S , I e R anche le numerosità dei tre gruppi, da cui l'acronimo *SIR* che dà il nome al modello che stiamo studiando. Queste numerosità saranno funzioni del tempo e la loro somma è la numerosità della popolazione. Possiamo schematizzare la situazione come segue:



dove le frecce indicano la possibilità di passaggio da una classe all'altra.

⁴⁵ Cfr. KERMACK, W. O., MCKENDRICK, A. G., A Contribution to the Mathematical Theory of Epidemic. *Proc. Roy. Soc. Lond.* A 115, 1921, pp. 700–721.

Costruzione del modello. Vogliamo ora sviluppare un modello matematico che ci consenta di prevedere l'andamento di S , I ed R in funzione del tempo. Il modello che costruiremo descrive lo sviluppo di alcuni tipi di epidemia e si adatta bene al caso di un'epidemia influenzale. Facciamo alcune ipotesi di lavoro:

- ❶ I suscettibili S diminuiscono, man mano che vengono contagiati. La velocità media, calcolata in un piccolo intervallo di tempo $h = \Delta t$, con cui i suscettibili S sono contagiati è direttamente proporzionale alla numerosità degli infetti ed alla numerosità dei suscettibili stessi. In formule:

$$\frac{S(t+h) - S(t)}{h} = -bI(t)S(t) \quad (\text{B.3.1})$$

- ❷ Gli infetti I aumentano con la stessa velocità con cui i suscettibili si ammalano, meno la velocità con cui guariscono. Assumendo un tasso di guarigione a costante, abbiamo

$$\frac{I(t+h) - I(t)}{h} = bI(t)S(t) - aI(t) \quad (\text{B.3.2})$$

- ❸ I rimossi R aumentano perché gli infetti guariscono, e quindi

$$\frac{R(t+h) - R(t)}{h} = aI(t) \quad (\text{B.3.3})$$

In definitiva otteniamo il sistema

$$\begin{cases} S(t+h) - S(t) = -bI(t)S(t)h \\ I(t+h) - I(t) = (bS(t) - a)I(t)h \\ R(t+h) - R(t) = aI(t)h \end{cases} \quad (\text{B.3.4})$$

Se sommiamo le tre equazioni di (B.3.4) troviamo

$$S(t+h) + I(t+h) + R(t+h) = S(t) + I(t) + R(t)$$

Quindi la numerosità complessiva della popolazione è costante e si ha $S(t) + I(t) + R(t) = S(0) + I(0) + R(0)$. Come conseguenza, noti gli andamenti di I e di S , possiamo ricostruire l'andamento di R .

Determinazione dei parametri. Abbiamo costruito un modello per descrivere l'epidemia ma, fino a quando non conosceremo i valori dei parametri a e b , il modello non ci sarà di grande aiuto. Dobbiamo quindi cercare, sulla base dei dati a nostra disposizione di determinare i valori dei parametri. Richiamiamo tali dati: $S(0) = 500$, $I(0) = 2$, $I(1) = 5$; abbiamo qui assunto che $R(0) = 0$, ossia che nessuno sia inizialmente immune. Se esprimiamo il tempo in giorni e scegliamo $h = 1$, si ha $(S(1) - S(0))/h = -3$; infatti nel primo giorno si sono avuti tre nuovi casi di infezione. Da (B.3.1), ponendo $t = 0$ ed $h = 1$, ricaviamo

$$b = -\frac{S(1) - S(0)}{I(0)S(0)} = \frac{3}{500 * 2} = 0.003 = 3 * 10^{-3}$$

Infine, poiché la durata media dell'infezione è di 2 giorni, possiamo assumere $a = 0.5$. Infatti, prendendo $h = 2$ nella relazione (B.3.3), si ha $R(t+2) - R(t) = 2aI(t)$. Tutti (e soli) gli infetti al tempo t saranno guariti, ossia entreranno nella classe dei rimossi,

al tempo $t + 2$. Quindi $R(t + 2) - R(t) = I(t)$; ne segue che $aI(t)h = I(t)$ per $h = 2$ e pertanto $a = 0.5$.⁴⁶

Le equazioni differenziali. Dividendo le prime due equazioni del sistema (B.3.4) si ricava la relazione tra S ed I

$$\frac{\Delta I}{\Delta S} = \frac{I(t+h) - I(t)}{S(t+h) - S(t)} = \frac{a - bS(t)}{bS(t)} = \frac{a}{bS(t)} - 1 \quad (\text{B.3.5})$$

Se approssimiamo i quozienti di Newton con le derivate da (B.3.4) si ottiene il sistema di equazioni

$$\begin{cases} S' &= -bIS \\ I' &= (bS - a)I \end{cases} \quad (\text{B.3.6})$$

dove abbiamo tralasciato l'equazione $R' = aI$, perché già sappiamo che $R(t) = S_0 + I_0 + R_0 - S(t) - I(t)$. Da (B.3.5), ponendo $k = a/b$, otteniamo invece l'equazione

$$\frac{dI}{dS} = \frac{a}{bS} - 1 = \frac{k}{S} - 1 \quad (\text{B.3.7})$$

Le domande. Ci sono varie domande che ci si può porre, una volta assegnate le condizioni iniziali S_0 ed I_0 :

- ❶ Quale sarà il numero massimo degli infetti nel corso dell'epidemia?
- ❷ Quale sarà il numero S_∞ di suscettibili alla fine dell'epidemia?
- ❸ Quante persone dovremmo vaccinare per evitare l'insorgere dell'epidemia?
- ❹ Dopo quanto tempo si può considerare esaurito il decorso dell'epidemia?

La soluzione esatta. Una soluzione del sistema (B.3.6) associa ad ogni valore di t i valori di $S(t)$ e di $I(t)$ ossia il punto $P(S(t), I(t))$. Tale punto si muove al variare di t nel piano (S, I) , che chiameremo piano delle fasi del sistema, descrivendo una traiettoria. Se vogliamo avere informazioni sull'evoluzione dell'epidemia possiamo disegnare nel piano delle fasi tale traiettoria o anche disegnare i grafici delle leggi orarie $t \mapsto S(t)$ ed $t \mapsto I(t)$ nei piani (t, S) e (t, I) rispettivamente. Come facciamo a ricavare la traiettoria del punto P nel piano delle fasi? L'equazione (B.3.7) ci fornisce la derivata della funzione $I = I(S)$. Un'antiderivata risulta $I(S) = k \log(S) - S + C$ dove C si può ricavare imponendo le condizioni iniziali ($S(0) = S_0$ e $I(0) = I_0$): troviamo $C = I(0) - k \log(S_0) + S_0$ e quindi

$$I(S) = I_0 + k \log(S) - S - k \log(S_0) + S_0 \quad (\text{B.3.8})$$

Nel caso in esame, abbiamo $k = a/b = 0.5/0.003 \approx 167$ e quindi

$$I(S) \approx 2 + 167 \log(S) - S - 167 \log(500) + 500 \approx 167 \log(S) - S - 536$$

⁴⁶ Notiamo che in linea di principio, se le relazioni valgono per $h = 1$, non possono valere per $h = 2$. Stiamo però qui cercando di stimare i parametri coinvolti e ci consentiamo il lusso di fare qualche approssimazione. D'altro canto non potremmo usare la relazione (B.3.2) con $h = 1$ e $t = 0$ perché, anche se abbiamo tutti gli elementi per ricavare a da questa relazione, troveremmo $a = 0$. Ciò non deve stupirci. Se la durata dell'influenza è di 2 giorni, la guarigione non può avvenire in un giorno.

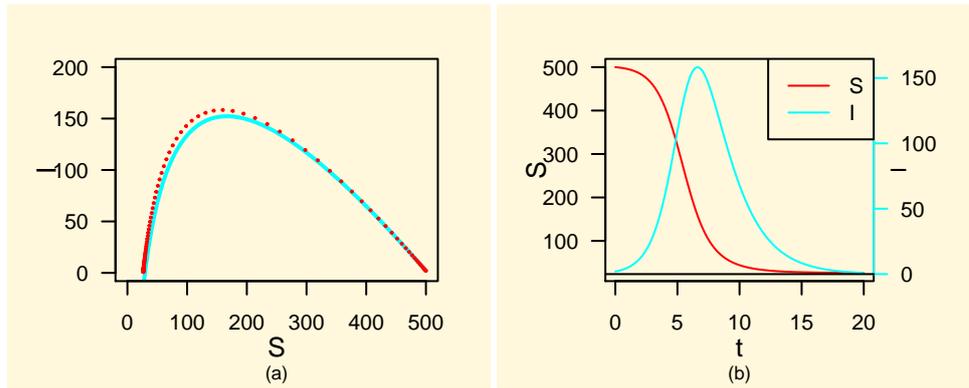


Figura B.3.1. Modello SIR. (a) La relazione SI esatta e approssimata con la spezzata di Eulero 100 passi. Parametri $a = 0.5, b = 0.003$. Si noti il picco degli infetti quando i suscettibili sono circa 170. (b) Le leggi orarie del modello SIR. Si sono effettuati 100 passi di ampiezza $h = 0.2$.

Le prime risposte. Possiamo dare alcune risposte ai quesiti che ci eravamo posti:

- ❶ Consideriamo la seconda equazione in (B.3.6). $I' = (bS - a)I$. Notiamo innanzitutto che se $S > k = a/b$ gli infetti aumentano, altrimenti diminuiscono. Nel nostro caso $k = 0.5/0.003 \approx 167$. Quindi gli infetti inizieranno a diminuire quando i suscettibili saranno ridotti a 167 e quindi già 335 individui dei 502 di partenza hanno avuto l'influenza. Il numero massimo di infetti I_{\max} si ha dunque quando $S = k$ e quindi $I_{\max} = I_0 + k \log(k) - k - k \log(S_0) + S_0 \approx 152$.
- ❷ L'epidemia termina quando $I = 0$ ovvero se $k \log(S) - S + I_0 - k \log(S_0) + S_0 = 0$. Col metodo delle tangenti di Newton si trova $S_{\infty} = 30$.⁴⁷
- ❸ Abbiamo visto che che la funzione $I(S)$ è decrescente se $S < k$. Quindi, per evitare l'insorgere dell'epidemia possiamo diminuire i suscettibili presenti inizialmente, ad esempio somministrando loro un vaccino. I vaccinati vengono così trasferiti nella classe dei rimossi. Somministrare un vaccino a 333 studenti, equivale a fissare $R_0 = 333$ e $S_0 = 500 - 333 = 167 = k$. In base a quanto appena detto, visto che i suscettibili sono ora in numero non superiore a k , gli infetti non possono che diminuire; in pratica l'epidemia è stroncata sul nascere.⁴⁸

La spezzata di Eulero e le leggi orarie. Purtroppo non siamo in grado di risolvere il sistema (B.3.6) e quindi di ricavare S ed I come funzione di t . Possiamo però facilmente generalizzare il metodo della spezzata di Eulero. Ritorniamo dunque alle prime due equazioni del sistema (B.3.4)

$$\begin{cases} S(t+h) - S(t) &= -bI(t)S(t)h \\ I(t+h) - I(t) &= (bS(t) - a)I(t)h \end{cases} \quad (\text{B.3.9})$$

⁴⁷ Si noti che questo risponde anche alla domanda su quante siano le persone che si sono infettate. Se, dopo il decorso dell'epidemia, restano $S_{\infty} = 30$ suscettibili significa che gli altri 472 studenti hanno contratto la malattia.

⁴⁸ Questo esprime bene il concetto di herd immunity. La vaccinazione di una parte significativa della popolazione funge da protezione (vaccino indiretto) anche al resto della popolazione.

Se poniamo

$$\begin{cases} S_n = S(nh) \\ I_n = I(nh) \\ t_n = nh \end{cases}$$

le relazioni (B.3.9), con l'aggiunta della ovvia relazione ricorsiva per t , divengono

$$\begin{cases} S_{n+1} = S_n - bI_n S_n h \\ I_{n+1} = I_n + (bS_n - a)I_n h \\ t_{n+1} = t_n + h \end{cases} \quad (\text{B.3.10})$$

Usando le equazioni (B.3.10), da $(S_0, I_0, 0)$ possiamo ricavare in successione (S_1, I_1, h) , $(S_2, I_2, 2h)$, \dots



Laboratorio B.3.2.

Realizziamo ora, con R, il processo iterativo descritto dal sistema (B.3.10); abbiamo già sottolineato che, per adottare i metodi numerici, dobbiamo scegliere dei valori numerici per i parametri, in questo caso a e b , e fissare le condizioni iniziali. Scegliamo allora i valori dati dall'esempio guida: $a = 0.5$, $b = 0.003$.

```
a = 0.5
b = 0.003
h = 1
n = 30
t = 0
I = 2
S = 500
for (i in 1:n)
{
  t[i+1] = t[i] + h
  S[i+1] = S[i] - b*S[i]*I[i]*h
  I[i+1] = I[i] + (b*S[i] - 0.5)*I[i]*h
}
```

Poiché i valori di S e di I hanno lo stesso ordine di grandezza il programma riporta in un'unica finestra grafica i grafici delle leggi orarie $S(t)$ ed $I(t)$. Esaminando le liste dei dati, si noterà che al diciassettesimo giorno il numero di infetti è inferiore a 2. L'epidemia può dirsi terminata. Si hanno ancora 12 suscettibili (da confrontarsi con i 30 previsti dalla soluzione esatta, che però non siamo in grado di calcolare esplicitamente). La discrepanza tra questi due numeri non è trascurabile. Ma dobbiamo ricordarci che con il metodo della spezzata di Eulero abbiamo risolto un sistema a tempo discreto e, tra l'altro, con un intervallo di tempo relativamente ampio, ossia $h = 1$ giorno. Se avessimo seguito lo sviluppo dell'epidemia ogni 6 ore saremmo stati molto più vicini alla soluzione esatta.

Esercizi e complementi



1. In un modello SIR la relazione tra suscettibili ed infetti è espressa dalla relazione $I(S) = 123 \log(S) - S - 400$. Si approssimino con il metodo delle tangenti di Newton le 2 soluzioni dell'equazione $I(S) = 0$.



2. Riprodurre i *plot* della Figura B.3.1.

B.3.2. Modelli compartimentali

Riprendiamo i modelli compartimentali (già introdotti nel caso di un singolo compartimento a pagina 14): i compartimenti in questione possono avere un loro spazio fisico e in questo caso si è interessati al passaggio dall'uno all'altro di una certa sostanza o possono essere semplicemente forme diverse di una sostanza (per esempio un farmaco e i suoi metaboliti). Le caratteristiche principali dei compartimenti sono le seguenti:

- ① Ciascun compartimento, sia esso spazialmente determinato o semplicemente individuato dalle sue caratteristiche deve risultare omogeneo. Per esempio, nello studio dell'assorbimento di un farmaco, l'organismo viene idealmente ripartito in comparti, non sempre individuabili in termini anatomici, ma caratterizzati dal fatto che è lecito ritenere omogenea in ciascuno di essi la concentrazione (o la quantità) del farmaco in esame.
- ② Se C_i e C_j sono due compartimenti, la velocità di trasmissione della sostanza in esame da C_i a C_j , dipende dalla concentrazione in C_i e in C_j , ma non in maniera esplicita dal tempo. In formule, dette X_i ed X_j le concentrazioni nei compartimenti C_i e C_j , e considerando solo la trasmissione dal compartimento C_i al compartimento C_j , si ha $X_i' = f(X_i, X_j)$, per un'opportuna funzione f . Di particolare interesse è il caso in cui la dinamica sia lineare, ossia quando la trasmissione da comparto a comparto proceda con tassi di iniezione ed eliminazione costanti o, in formule, quando la funzione f sia del tipo $f(X_i, X_j) = -a_{j \leftarrow i} X_i$; il segno meno è stato inserito in quanto la sostanza passa da C_i a C_j e quindi questo termine contribuisce alla diminuzione della sostanza contenuta in C_i . La situazione generale si ha quando il compartimento C_i interagisce con diversi compartimenti sia in ingresso che in uscita; la velocità di variazione risulta allora somma algebrica di diversi contributi lineari

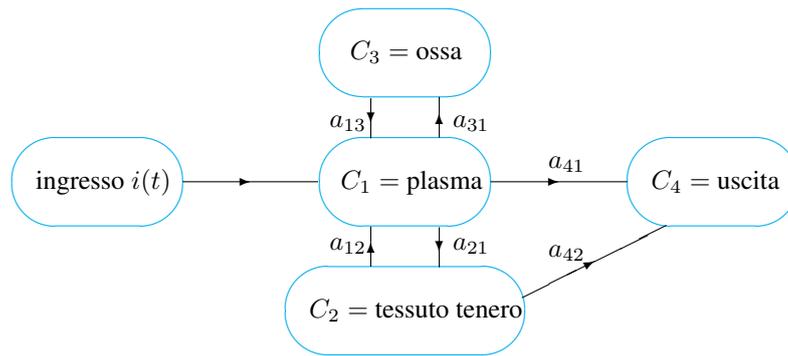
$$X_i' = \sum_{k \in K} a_{i \leftarrow k} X_k - \sum_{j \in J} a_{j \leftarrow i} X_i$$

dove i compartimenti C_k indicizzati da K sono quelli in ingresso per C_i e i compartimenti C_j indicizzati da J sono quelli in uscita per C_i .⁴⁹

Esempio B.3.3. [Esempio illustrativo] Un modello che descrive l'assorbimento di piombo nel corpo umano è stato proposto da M. Rabinowitz, G. Wetherill e J. Kople.⁵⁰ Possiamo pensare che il piombo presente nell'ambiente sia assorbito dal nostro corpo tramite tre tipi di processi: ingestione orale, assorbimento tramite l'epidermide, assorbimento polmonare. Comunque assorbito il piombo viene trasmesso al sangue. Per semplificare il modello che descriveremo assumiamo che l'assorbimento avvenga direttamente a livello plasmatico e sia descritto da una funzione del tempo $i(t)$. Parliamo anche di modello aperto in quanto scartiamo dalle nostre considerazioni la quantità di piombo presente nell'ambiente. Possiamo schematizzare il processo di ridistribuzione del piombo nei compartimenti del corpo umano come segue:

⁴⁹ Si noti che potrebbero esserci compartimenti per cui lo scambio è sia in ingresso che in uscita.

⁵⁰ Cfr. RABINOWITZ, M., WETHERILL, G. e KOPPLE, J., Lead Metabolism in the Normal Human: Stable Isotope Studies. *Science*, 182, 1973, p. 725–727.



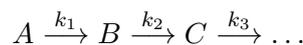
Denotiamo con X_k la quantità di piombo contenuta nel compartimento C_k . Assumiamo inoltre che il passaggio da un compartimento all'altro avvenga con dinamica lineare, ossia che la velocità di trasmissione del piombo dal compartimento C_k al compartimento C_i sia proporzionale alla quantità di piombo presente nel compartimento C_k , ossia X_k . La velocità di trasmissione $C_k \rightarrow C_i$ è quindi esprimibile come $a_{ik}X_k$. Il corrispondente sistema di equazioni differenziali risulta

$$\begin{cases} X_1' = -(a_{21} + a_{31} + a_{41})X_1 + a_{12}X_2 + a_{13}X_3 + i(t) \\ X_2' = a_{21}X_1 - (a_{12} + a_{42})X_2 \\ X_3' = a_{31}X_1 - a_{13}X_3 \end{cases}$$

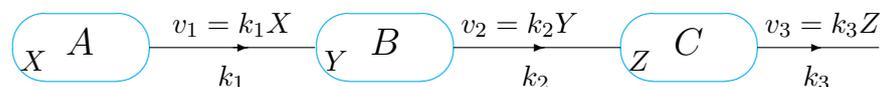
Il sistema (B.3.3) è un sistema di tre equazioni differenziali. Come nel caso di una singola equazione, un equilibrio di un sistema di equazioni differenziali è una soluzione costante. Nel caso in esame, se assumiamo che $i(t)$ sia costante, possiamo determinare l'equilibrio risolvendo il sistema di 3 equazioni lineari ottenuto eguagliando a zero i membri destri delle tre equazioni.

B.3.3. Reazioni chimiche consecutive

Molte reazioni chimiche si producono a stadi successivi. I prodotti del primo stadio reagiscono nel secondo stadio dando luogo a prodotti che possono subire un'ulteriore trasformazione e così via. Consideriamo per esempio il caso di tre reazioni consecutive del primo ordine



Schematizziamo la catena di reazioni come segue:



dove k_1 rappresenta il tasso di iniezione per la sostanza B ma è anche il tasso di eliminazione della sostanza A (visto che ciò A si trasforma un B) e lo stesso per le costanti k_2 e k_3 . X , Y e Z indicano rispettivamente le concentrazioni delle sostanze A , B e C ; assumiamo che le costanti k_1 , k_2 e k_3 siano distinte e che all'inizio $X(0) = X_0$, $Y(0) = 0$ e $Z(0) = 0$. Possiamo scrivere le seguenti equazioni cinetiche

$$X' = -k_1 X \quad (\text{B.3.11})$$

$$Y' = k_1 X - k_2 Y \quad (\text{B.3.12})$$

$$Z' = k_2 Y - k_3 Z \quad (\text{B.3.13})$$

Le soluzioni sono

$$X(t) = X_0 e^{-k_1 t} \quad (\text{B.3.14})$$

$$Y(t) = \frac{X_0 k_1 (e^{-k_2 t} - e^{-k_1 t})}{k_1 - k_2} \quad (\text{B.3.15})$$

$$Z(t) = A e^{-k_1 t} + B e^{-k_2 t} + C e^{-k_3 t} \quad (\text{B.3.16})$$

dove

$$A = \frac{X_0 k_1 k_2}{(k_1 - k_2)(k_1 - k_3)} \quad (\text{B.3.17})$$

$$B = \frac{X_0 k_1 k_2}{(k_2 - k_1)(k_2 - k_3)} \quad (\text{B.3.18})$$

$$C = \frac{X_0 k_1 k_2}{(k_3 - k_1)(k_3 - k_2)} \quad (\text{B.3.19})$$

Per convincersi basta calcolare le derivate: per esempio

$$Y'(t) = \frac{X_0 k_1 (-k_2 e^{-k_2 t} + k_1 e^{-k_1 t})}{k_1 - k_2} \quad (\text{B.3.20})$$

$$= \frac{X_0 k_1 (-k_2 e^{-k_2 t} + k_2 e^{-k_1 t} + (k_1 - k_2) e^{-k_1 t})}{k_1 - k_2} \quad (\text{B.3.21})$$

$$= -\frac{X_0 k_1 k_2 (e^{-k_2 t} - e^{-k_1 t})}{k_1 - k_2} + k_1 X(t) = k_1 X(t) - k_2 Y(t) \quad (\text{B.3.22})$$

e quindi la velocità con cui Y aumenta è la somma di 2 termini: il primo proporzionale alla quantità X (con segno + e costante pari alla tasso di iniezione), il secondo proporzionale alla quantità Y (con segno - e costante pari alla tasso di eliminazione). In particolare, se $k_3 = 0$, il modello si semplifica

$$X(t) = X_0 e^{-k_1 t} \quad (\text{B.3.23})$$

$$Y(t) = \frac{X_0 k_1 (e^{-k_2 t} - e^{-k_1 t})}{k_1 - k_2} \quad (\text{B.3.24})$$

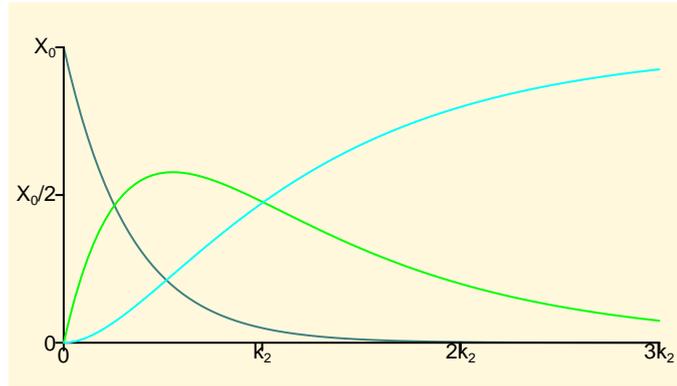
$$Z(t) = \frac{X_0}{k_2 - k_1} [k_2 (1 - e^{-k_1 t}) - k_1 (1 - e^{-k_2 t})] \quad (\text{B.3.25})$$

L'espressione per $Z(t)$ si può ricavare direttamente notando che la somma delle sostanze contenute nei 3 compartimenti è costante e quindi uguale ad X_0 . Vogliamo qui notare che se k_1 è molto minore di k_2 si ha $Z(t) \approx X_0(1 - e^{-k_1 t})$, mentre se k_1 è molto maggiore di k_2 si ha $Z(t) \approx X_0(1 - e^{-k_2 t})$.

Il tasso di formazione di C è approssimabile rispettivamente con il tasso di formazione k_1 di B da A o k_2 di C da B . Lo stadio che determina la velocità di reazione⁵¹ è rappresentato rispettivamente dalla prima o seconda reazione (ossia da quella più lenta). Il diagramma in cui si riportano i valori di X , Y e Z in funzione del tempo è detto profilo di concentrazione.

⁵¹ Viene spesso chiamato rate determining step che rappresenta il collo di bottiglia (*bottleneck*) della reazione.

Figura B.3.2. Profilo di concentrazione per un modello a 3 compartimenti. Con opportuni coefficienti un modello simile può essere usato per descrivere la digestione dei ruminanti dove A , B e C sono rumine, abomaso e duodeno.



Esercizi e complementi

1. Espressioni quali la (B.3.16) appaiono di frequente nello studio di reazioni chimiche e di decadimenti radioattivi a catena. Per tempi t piccoli e positivi, tutti gli esponenti sono prossimi a 0 e quindi usando l'approssimazione costante possiamo scrivere $Z(t) \approx A + B + C$. Il termine maggiore nella somma è l'esponenziale con il coefficiente maggiore. La situazione per tempi t grandi è diversa. Supponiamo che sia $k_1 < k_2 < k_3$. Possiamo allora scrivere:

$$Z(t) = Ae^{-k_1 t} + Be^{-k_2 t} + Ce^{-k_3 t} = e^{-k_1 t}(A + Be^{(k_1 - k_2)t} + Ce^{(k_1 - k_3)t})$$

Sappiamo che $e^{-x} \rightarrow 0$, se $x \rightarrow \infty$. I termini con coefficienti B e C allora diventano trascurabili per tempi sufficientemente grandi e l'andamento di $z(t)$ è in tal caso determinato dal termine $Ae^{-k_1 t}$. In altri termini, per grandi valori di t

$$z(t) \approx Ae^{-k_1 t}$$

2. Identificare nella Figura B.3.2 i grafici di $X(t)$, $Y(t)$ e $Z(t)$.
3. **Applicazioni alla farmacocinetica.** Somministriamo un farmaco in un compartimento extravascolare, per esempio per via intramuscolare. Possiamo pensare al compartimento extravascolare come ad un primo compartimento che smaltisce il farmaco in un secondo compartimento (il plasma) con tasso di eliminazione k_1 . Dal plasma il farmaco viene smaltito con tasso di eliminazione k_2 . Supponiamo per semplicità che sia $k_1 \neq k_2$. Ricaviamo allora per la concentrazione $C(t)$ del farmaco nel plasma (vedi la formula (B.3.24))

$$C(t) = \frac{C_0 k_1}{k_1 - k_2} (e^{-k_2 t} - e^{-k_1 t})$$

Il massimo della concentrazione si ha al tempo $\bar{t} = \log(k_2/k_1)/(k_2 - k_1)$ che si può utilizzare per determinare la relazione tra k_1 e k_2 .

4. Una combinazione di funzioni del tipo

$$f(t) = A_1 \exp(-k_1 t) + A_2 \exp(-k_2 t)$$

è chiamata modello **bi-esponenziale**. Supponiamo i parametri siano tutti positivi. Determinare la relazione tra i parametri affinché il modello descriva una densità di probabilità su $R_{\geq 0}$.

B.4. Due specie interagenti

Le situazioni più elementari in cui due specie possono interagire fra loro sono due:

- quella in cui le due specie, in competizione fra loro, si contendono lo stesso nutrimento,
- quella in cui una specie divora l'altra.

Le esaminiamo separatamente.

B.4.1. Due specie, un cibo

Supponiamo che due specie X e Y ⁵² sfruttino lo stesso nutrimento, in un ambiente delimitato; il nutrimento diminuirà quando i numeri rispettivi X e Y degli individui delle due specie aumentano, e le diminuite risorse faranno diminuire i tassi intrinseci di crescita X'/X e Y'/Y (che sarebbero costanti uguali ad a e c rispettivamente in caso di nutrimento illimitato). Conseguentemente il modello differenziale può essere

Modello per due specie che si contendono lo stesso cibo

$$\begin{cases} X' = (a - f(X, Y)) X \\ Y' = (c - g(X, Y)) Y \end{cases}$$

dove $f(X, Y)$ e $g(X, Y)$ rappresentano rispettivamente i fattori limitanti delle due specie dovuti al consumo del nutriente. Assumendo semplicemente

$$\begin{cases} f(X, Y) = bX + \sigma Y \\ g(X, Y) = \nu X + dY \end{cases}$$

si ottiene il sistema per due specie in competizione

$$\begin{cases} X' = (a - bX - \sigma Y) X \\ Y' = (c - \nu X - dY) Y \end{cases} \quad (\text{B.4.1})$$

con i coefficienti a, b, c, d, σ, ν tutti positivi. Risolvendo le equazioni $X' = Y' = 0$ troviamo immediatamente tre punti di equilibrio (X, Y) , e precisamente:

Esistenza di più stati di equilibrio

- $O = (0, 0)$: estinzione di entrambe le specie;
- $C = (0, c/d)$: sopravvivenza di Y ed estinzione di X ;
- $A = (a/b, 0)$: sopravvivenza di X ed estinzione di Y ;

Un quarto punto di equilibrio corrisponde alla coesistenza delle due specie, il che equivale a richiedere che il sistema algebrico lineare

$$bX + \sigma Y = a, \quad \nu X + dY = c$$

abbia una soluzione $E = (X^*, Y^*)$ nel primo quadrante, con coordinate entrambe diverse da zero. Trascurando il caso di probabilità nulla (per dati sperimentali) in cui sia $bd - \nu\sigma = 0$, la soluzione del sistema algebrico è

$$X^* = \frac{ad - \sigma c}{bd - \nu\sigma}, \quad Y^* = \frac{bc - a\nu}{bd - \nu\sigma}$$

⁵² Indichiamo con lo stesso simbolo la loro numerosità.

e questo è un punto del primo quadrante a coordinate positive se:

$$(i) \quad bd < \nu\sigma, \quad ad < \sigma c, \quad bc < a\nu \quad (B.4.2)$$

oppure se:

$$(ii) \quad bd > \nu\sigma, \quad ad > \sigma c, \quad bc > a\nu$$

Considereremo per brevità solo il caso (i); l'altro caso si tratta analogamente. Le condizioni assunte (B.4.2) hanno un immediato significato geometrico illustrato nella Figura B.4.1. Possiamo allora ottenere qualche informazione qualitativa sommaria nel

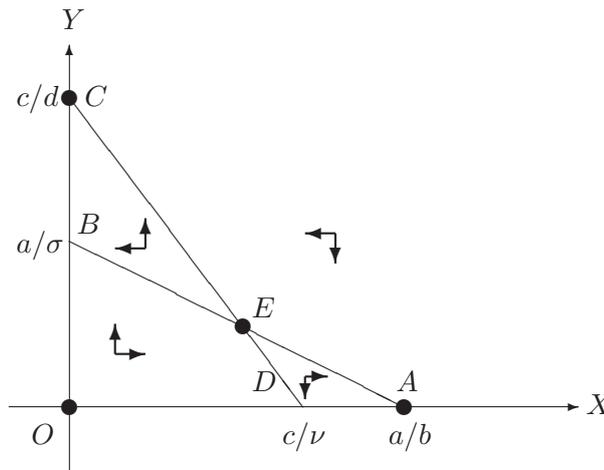


Figura B.4.1. Modello di due specie e un cibo. Il simbolo \bullet indica gli equilibri. I segni di X' e Y' nel quadrante positivo del piano delle fasi (X, Y) sono indicati con frecce: \rightarrow indica che $X' > 0$ (X cresce); \leftarrow indica che $X' < 0$ (X decresce); \uparrow indica che $Y' > 0$ (Y cresce); \downarrow indica che $Y' < 0$ (Y decresce).

piano delle fasi studiando il segno di X' e di Y' nelle quattro regioni in cui le rette $bX - \sigma Y = a$ e $\nu X + dY = c$ dividono il primo quadrante. I risultati sono presentati sempre in Figura B.4.1. Anche attraverso le soluzioni al computer (Figura B.4.2) si osserva che partendo da un punto iniziale (X_0, Y_0) nel quadrilatero $ODEB$ sia $X(t)$ che $Y(t)$ crescono: pertanto lo stato di estinzione di entrambe le specie non è stabile, cioè partendo entrambe anche con pochissimi individui all'inizio entrambe crescono (cibo in abbondanza). Analogamente non è stabile l'equilibrio E : stati iniziali generici prossimi ad E portano ad allontanarsi da E stesso. Risultano invece stabili gli equilibri A e C . Assumendo di partire da uno stato iniziale generico nel piano, il punto $(X(t), Y(t))$ tende al crescere di t verso uno dei due equilibri $A = (a/b, 0)$ o $C = (0, c/d)$. Questo risultato è noto in biologia come Legge di Esclusione Competitiva: nelle situazioni in cui in natura intervengono situazioni di competizione come quella qui descritta, l'una o l'altra delle specie coinvolte si estingue.

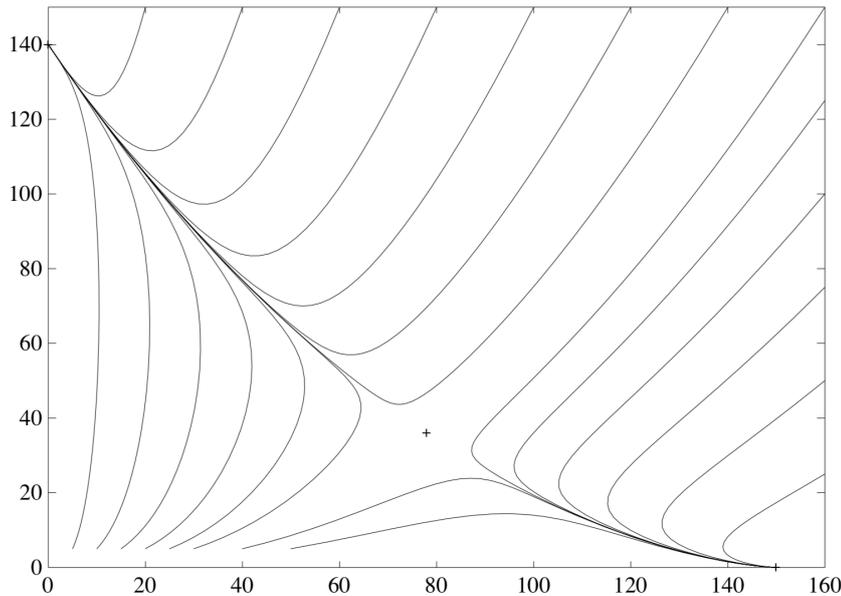


Figura B.4.2. Due specie X e Y in competizione per lo stesso cibo: alcune soluzioni $(X(t), Y(t))$ nel piano delle fasi del modello: $X' = (1.5 - 0.01X - 0.02Y)X$, $Y' = (4.2 - 0.04X - 0.03Y)Y$. L'equilibrio $E = (78, 36)$ di coesistenza è indicato con $+$. Tutte le soluzioni con condizioni iniziali generiche convergono verso $(0, 140)$ (estinzione della prima specie) oppure verso $(150, 0)$ (estinzione della seconda).

B.4.2. Modello di Lotka–Volterra

Introduciamo in questa Sezione il sistema oscillante di **Lotka–Volterra**. Si tratta di un modello preda–predatore introdotto indipendentemente da A. J. LOTKA⁵³ e da V. VOLTERRA.⁵⁴

Volterra era stato interessato allo studio delle oscillazioni di popolazioni biologiche da U. D'ANCONA. Costui aveva tratto delle statistiche sulla pesca nell'alto Adriatico durante la prima guerra mondiale e nei periodi vicini⁵⁵ indicando la percentuale dei Selaci nel totale del pescato per i porti di Trieste, Fiume (attualmente Rijeka, Croazia) e Venezia. Da questi dati si osserva che durante il periodo 1915–1920, in cui la pesca era meno intensa a causa della guerra, vi era stato un aumento relativo di Selaci, pesci che sono particolarmente voraci e si nutrono di altri pesci (vedi Figura B.4.3).

Ciò suggerì a Volterra lo studio di un modello per la interazione di due specie, di cui una predatore dell'altra. Supponiamo date due specie X , una preda (esempio: sardine), e Y un predatore (esempio: squali). Supponiamo quanto segue:

- Non vi è competizione fra individui della stessa specie (una tale competizione è detta intraspecifica) ma solo fra individui di specie diversa (competizione interspecifica);

Assunzioni
biologiche del
modello
preda-predatore
di
Lotka-Volterra

⁵³ Cfr. LOTKA, A., *Elements of Physical Biology*, Williams and Wilkins, Baltimore, 1925.

⁵⁴ Cfr. VOLTERRA, V., *Leçons sur la théorie mathématique de la lutte pour la vie*, Gautiers–Villars, Paris, 1931.

⁵⁵ Cfr. D'ANCONA, U., Dell'influenza della stasi peschereccia del periodo 1914–1918 sul patrimonio ittico dell'Alto Adriatico, *Regio Comitato Talassografico Italiano*, Memoria n. 126, Venezia, 1926.

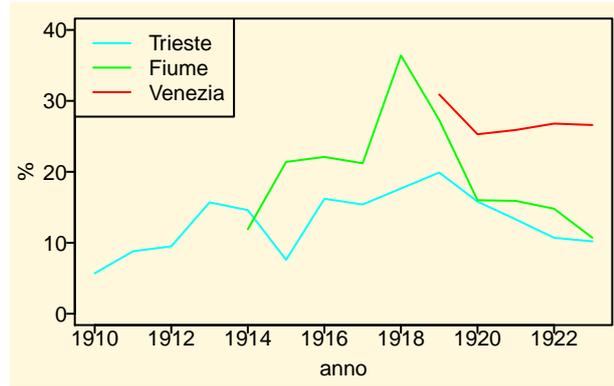


Figura B.4.3. Percentuale di Selaci nel pescato relativo a Trieste, Fiume e Venezia. Si osservi la rilevante oscillazione nel Golfo di Fiume (11.9% nel 1914, 36.4% nel 1918, 10.7% nel 1923).

- La preda X ha nutrimento illimitato, ed in assenza dei predatori cresce secondo il modello di Malthus $X' = aX$ ($a > 0$);
- Il predatore si nutre esclusivamente di prede; in assenza di prede, la popolazione Y dei predatori decresce, e la sua diminuzione segue la legge di Malthus $Y' = -cY$ ($-c < 0$);
- in presenza di prede e predatori, il tasso di crescita intrinseco delle prede X'/X diminuisce di un termine bY ($b > 0$) proporzionale alla densità sul territorio dei predatori. Analogamente, Y'/Y aumenta di un termine dX ($d > 0$).

Sistema di Lotka–Volterra

Con tali ipotesi si ottiene il sistema

$$\begin{cases} X' = (a - bY)X \\ Y' = (-c + dX)Y \end{cases} \quad (\text{B.4.3})$$

con i coefficienti a , b , c e d tutti positivi. Questo è il sistema di Lotka–Volterra. Richiedendo $X' = Y' = 0$ si ottiene il sistema algebrico lineare

$$\begin{cases} a - bY = 0 \\ -c + dX = 0 \end{cases}$$

e quindi troviamo immediatamente due punti di equilibrio

- $O = (0, 0)$: estinzione di entrambe le specie;
- $E = (c/d, a/b)$: coesistenza delle due specie.

Otteniamo un'informazione qualitativa sommaria nel piano delle fasi studiando il segno di X' e di Y' nelle quattro regioni in cui le rette $Y = a/b$ e $X = c/d$ dividono il primo quadrante (vedi la Figura B.4.4).

Questa analisi suggerisce fortemente la possibilità di oscillazioni, visto che i punti $(X(t), Y(t))$ sembrano girare attorno all'equilibrio E in senso antiorario. Possiamo confermare questo fatto tramite le seguenti considerazioni.

B.4.2.1. Grandezza conservata nel sistema di Lotka–Volterra

Supponendo $X > 0$ e $Y > 0$

$$\begin{aligned} dX' + bY' &= d(a - bY)X + b(-c + dX)Y = daX - bcY \\ -c \frac{X'}{X} - a \frac{Y'}{Y} &= -c(a - bY) - a(-c + dX) = -adX + bcY \end{aligned}$$

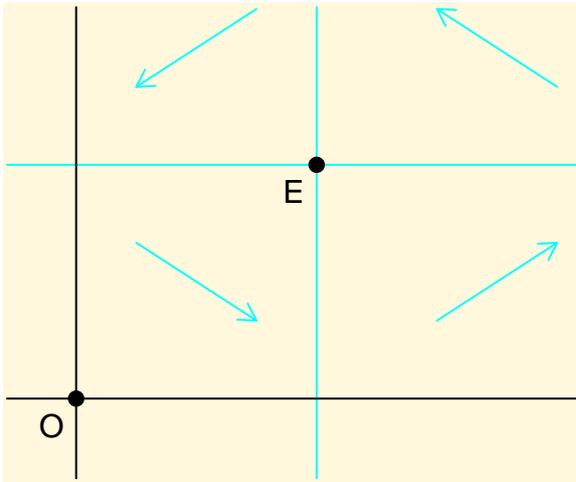


Figura B.4.4. Il piano delle fasi del sistema di Lotka-Volterra è diviso in 4 quadranti in base all'equilibrio $E = (c/d, a/b)$. In ciascun quadrante risulta ben definita la direzione della soluzione (X, Y) (ovvero i segni di (X', Y')). Il disegno suggerisce una rotazione delle soluzioni attorno all'equilibrio con verso antiorario.

da cui

$$dX' + bY' = c \frac{X'}{X} + a \frac{Y'}{Y}$$

e anche⁵⁶

$$-dX' - bY' + c \log(X)' + a \log(Y)' = 0$$

e quindi visto che la funzione $-dX + c \log(X) - bY + a \log(Y)$ ha derivata 0

$$-dX + c \log(X) - bY + a \log(Y) = \text{costante}$$

e passando agli esponenziali abbiamo che per ogni t il punto $(X(t), Y(t))$ sta su una curva di equazione

$$\Phi(X, Y) = X^c e^{-dX} Y^a e^{-bY} = h(X) g(Y) = \text{costante}. \quad (\text{B.4.4})$$

Le funzioni $h(X)$ e $g(Y)$ sono definite per variabili positive ed hanno la stessa forma $h(X) = X^c e^{-dX}$, $g(Y) = Y^a e^{-bY}$: ciascuna è positiva ed ha un solo punto di massimo,⁵⁷ rispettivamente per $X = c/d$ e $Y = a/b$. Quindi $\Phi(X, Y)$ assume valore massimo pari a $h(c/d)g(a/b)$ in $(X^*, Y^*) = (c/d, a/b)$: vedi Figura B.4.5. Le curve di livello $\Phi = k$ sono dunque delle curve chiuse che racchiudono $E = (c/d, a/b)$ che è la curva (degenere in un punto) di livello massimo. Le curve $(X(t), Y(t))$ soluzioni del sistema di Lotka-Volterra coincidono con tali curve chiuse, e pertanto tutte le soluzioni $X(t)$ e $Y(t)$ del sistema di Lotka-Volterra sono funzioni periodiche: vedi la Figura B.4.5.

Osservazione B.4.1. Va precisato che se $(X_1(t), Y_1(t))$ è la soluzione di (B.4.3) che percorre la curva \mathcal{C}_1 di equazione $\Phi = c_1$, e $(X_2(t), Y_2(t))$ è la soluzione di (B.4.3) che percorre la curva di livello più basso \mathcal{C}_2 di equazione $\Phi = c_2$, con $c_2 < c_1$, si ha che $X_1(t)$ e $Y_1(t)$ sono periodiche dello stesso periodo T_1 (uguale al tempo di percorrenza della curva \mathcal{C}_1) mentre $X_2(t)$ e $Y_2(t)$ sono periodiche di periodo T_2 diverso da T_1 .

⁵⁶ Si ricordi la derivata logaritmica a p. 154

⁵⁷ Questo esercizio va fatto a parte, tramite lo studio di funzione di $f(x) = x^\alpha e^{-\beta x}$ con $\alpha > 0$, $\beta > 0$ per $x > 0$. La derivata è $f'(x) = x^{\alpha-1} e^{-\beta x} (\alpha - \beta x)$ ed ha il segno di $\alpha - \beta x$; quindi f cresce per $0 < x < \alpha/\beta$ e decresce per $x > \alpha/\beta$; ne segue l'asserto.

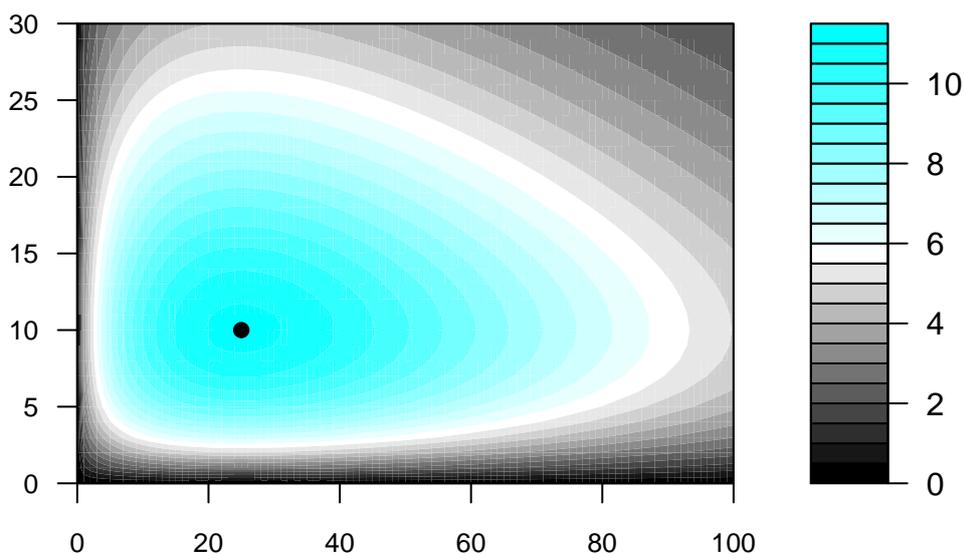


Figura B.4.5. Sistema di Lotka–Volterra. Curve di livello di Φ . Parametri $a = 1.00$, $b = 0.10$, $c = 0.50$, $d = 0.02$. Punto di equilibrio positivo $E = (25, 10)$.

Questo può provarsi formalmente. Quindi le oscillazioni di Lotka–Volterra non sono armoniche: il loro periodo dipende dalle condizioni iniziali.



Laboratorio B.4.2. Consideriamo un esperimento di interazione in laboratorio (Veilleux, 1976).⁵⁸ In questo caso $X = \textit{Paramecium aurelia}$ funge da preda e $Y = \textit{Didinium nasutum}$ funge da predatore; X ed Y sono misurati in numero di individui per centimetro cubo. Il tempo t è misurato in giorni, con 2 rilevazioni quotidiane per 35 giorni. La serie storica è riportata per esempio nel pacchetto **TSA** con il nome **veilleux**. Per prima cosa diamo un'occhiata all'inizio della serie storica e tracciamone un grafico

	0	0.5	1	1.5	2	2.5	3	3.5	4	4.5	5
Didinium	15.65	53.57	73.34	93.93	115.40	76.57	32.83	23.74	56.70	86.37	121.00
Paramecium	5.76	9.05	17.26	41.97	55.97	74.91	62.52	27.04	18.77	31.11	58.31

Tabella B.4.1. I primi 5 giorni della serie storica di Paramecium e Didinium dovuta a Veilleux. Il tempo è espresso in giorni.

Per ricavare i parametri possiamo stimare le derivate attraverso la regola dei 3 punti ed il quoziente di Newton agli estremi

```
library(TSA)
h = 0.5
data(veilleux)
x = veilleux[1:71,1]
```

⁵⁸ VEILLEUX, B. G., *The analysis of a predatory interaction between Didinium and Paramecium*, Masters thesis, University of Alberta. (1976) e VEILLEUX, B. G., *An Analysis of the Predatory Interaction Between Paramecium and Didinium*, *Journal of Animal Ecology*, 48 (3), p.787-803 (1979)

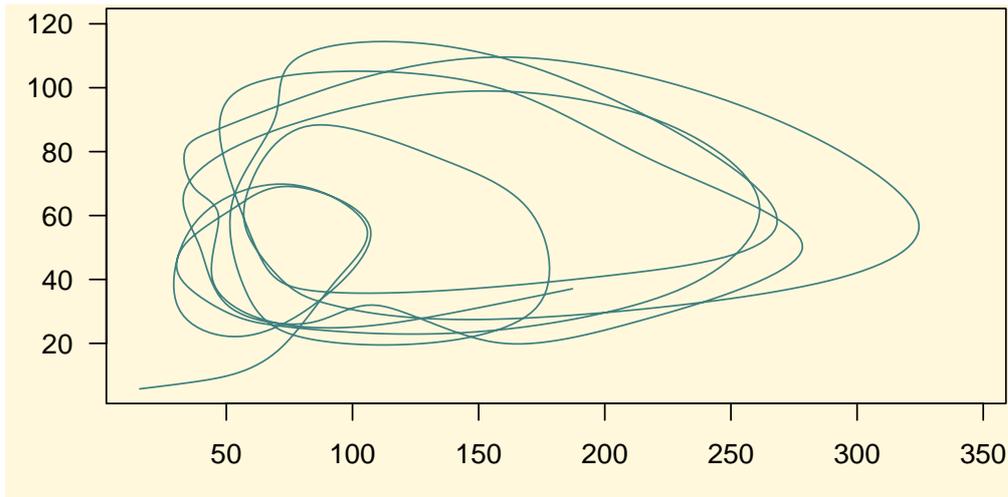


Figura B.4.6. Disegno nel piano delle fasi (densità di Didinium versus densità di Paramecium). Il punto iniziale è in basso a sinistra.

```

y = veilleux[1:71,2]
dx = c((x[2]-x[1])/h, c(x[3:71]-x[1:69]), (x[71]-x[70])/h)
# stima della derivata per il Didinium
dy = c((y[2]-y[1])/h, c(y[3:71]-y[1:69]), (y[71]-y[70])/h)
# stima della derivata per il Paramecium

```

Usiamo poi la regressione lineare per stimare i coefficienti del modello

```

cx = coefficients(lm(dx ~ x + x:y - 1)) # per a, b,
# + x:y indica aggiungere il prodotto xy
# -1 indica togliere il termine costante (intercetta = 0)
cy = coefficients(lm(dy ~ y + x:y - 1)) # per c, d
a = cx[1]
b = cx[2]
c = cy[1]
d = cy[2]

```

Il modello è quindi descritto dalle equazioni con

```

f = function(x,y) a*x+ b*x*y
g = function(x,y) c*y +d*x*y

```

Possiamo poi procedere con la solita tecnica a tracciare le leggi orarie

B.4.2.2. Implicazioni del modello di Lotka–Volterra

Ricaviamo qui alcune implicazioni matematiche del modello di Lotka–Volterra. Costateremo che esse non sono completamente soddisfacenti il contesto biologico.

- Per piccole oscillazioni intorno all'equilibrio E la crescita di ciascuna specie dipende solo dalla dimensione dell'altra popolazione: non vi è alcuna auto-limitazione alla crescita, neppure lineare.
- Il sistema completo (B.4.3) possiede un incredibile integrale dell'energia come ad indicare che qualcosa viene conservato nel tempo, come appunto l'energia nei sistemi meccanici conservativi; ma $\Phi(X, Y)$ (eq. B.4.4) non ha evidentemente alcun significato biologico diretto.

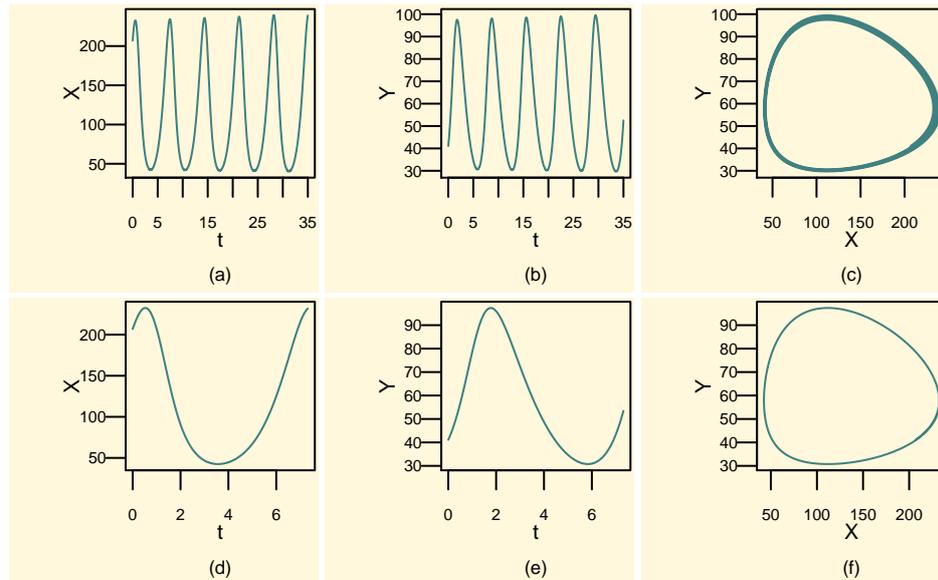


Figura B.4.7. Leggi orarie e grafico nel piano delle fasi a partire dal valore $x = e = y =$ corrispondenti al giorno numero 20. (a) Leggi orarie del *Didinium*. (b) Legge orarie del *Paramecium*. (c) Andamento di *Didinium* versus *Paramecium*. (d) Leggi orarie del *Didinium* su un solo periodo. (e) Legge orarie del *Paramecium* su un solo periodo. (f) Andamento di *Didinium* versus *Paramecium* su un solo periodo.

- Entrambe le specie, la preda ed il predatore, presentano nel tempo oscillazioni la cui ampiezza non ha relazione con la loro biologia ma solo con le dimensioni iniziali delle popolazioni, che possono essere arbitrarie.

La media \bar{X} di una funzione periodica $X = X(t)$ di periodo T è per definizione⁵⁹ uguale all'integrale

$$\bar{X} = \frac{1}{T} \int_0^T X(s) ds$$

Legge di
conservazione
delle medie

Si ha (Volterra):

B.4.3. Teorema. Le medie durante un periodo dei numeri di individui delle due specie non dipendono dalle condizioni iniziali, e sono uguali per ciascuna specie al valore assunto all'equilibrio positivo E .

DIMOSTRAZIONE. Si ha

$$\frac{Y'}{Y} = \frac{d}{dt} \log(Y) = dX - c$$

da cui, prendendo la primitiva che si annulla in $t = 0$,

$$\log \frac{Y(t)}{Y(0)} = d \int_0^t X(s) ds - ct$$

⁵⁹ Concetto che, assieme al teorema fondamentale del calcolo, viene usato solo in questo punto.

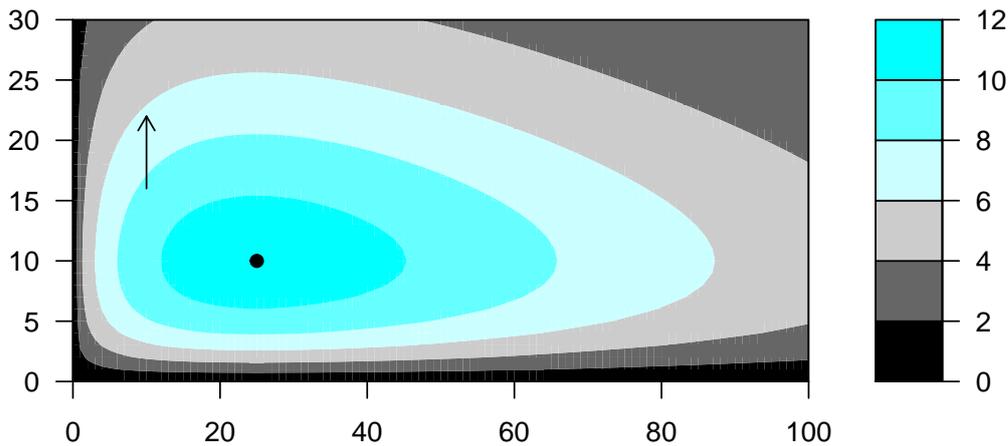


Figura B.4.8. Aumentando il numero di predatori si potrebbe finire in un ciclo in cui il numero massimo di prede aumenta.

e quindi, essendo per ipotesi $Y(0) = Y(T)$,

$$0 = \log \frac{Y(T)}{Y(0)} = d \int_0^T X(s) ds - cT$$

cioè

$$\bar{X} = \frac{1}{T} \int_0^T X(s) ds = c/d$$

Analogamente si prova che $\bar{Y} = a/b$. ■

Questo fatto ha implicazioni sorprendenti e biologicamente dubbie. Supponiamo che si voglia diminuire il numero di prede.⁶⁰

- (1) Si può aumentare il numero dei predatori.⁶¹ Ciò significa cambiare nel modello solo la condizione iniziale da (X_0, Y_0) a $(X_0, Y_0 + \delta)$ con $\delta > 0$, senza cambiare i coefficienti a, b, c, d del sistema. Secondo il modello (B.4.3) questo non cambierebbe la media delle prede, ed anzi facendolo in un punto «cattivo» del ciclo potrebbe aumentare il numero massimo delle prede.
- (2) Altrimenti, le prede possono essere eliminate per via chimica. Ma questo aumenta il numero di decessi anche nel predatore; cioè si sostituisce a con $a' < a$ e c con $c' > c$, tenendo fissi b e d . Secondo il modello (B.4.3) questo aumenterebbe il numero medio di prede, che passerebbe da c/d a $c'/d > c/d$, risultato contrario a quanto voluto

Queste discrasie fra le caratteristiche matematiche del modello di Lotka–Volterra e le aspettative biologiche naturali lo rendono di fatto irrealistico ed inaccettabile per

⁶⁰ Per esempio nei casi in cui le prede siano infestanti per qualche ragione, come i conigli per la agricoltura o la anofele per la malaria.

⁶¹ È la cosiddetta lotta biologica: nella bonifica antimalarica di Fiumicino (1919) fu introdotto come predatore (delle larve) delle anofele un piccolo pesce, la *Gambusia*; cfr. GRASSI B. e SELLA M., *Seconda relazione della lotta antimalarica a Fiumicino (Roma)*. Roma, 1920.

serie applicazioni. Perturbazioni ragionevoli del modello di Lotka-Volterra conducono a modelli più realistici, come esempio citiamo il modello di Holling-Tanner.

Indice analitico

- approssimazione
 - di funzioni
 - — soluzioni di equazioni, 30
- cinetica chimica, 26
- competizione
 - interspecifica, 43
 - intraspecifica, 43
- condizione
 - iniziale, 13
- crescita
 - iperbolica, 6
 - logistica, 12
 - malthusiana, 16
- Crichton M., 28
- dimensione
 - lineare, 2
- dinamica
 - lineare, 37
- emivita, 28
- equilibrio, 24, 38
 - stabile, instabile, 24
- farmacocinetica, 28, 40
- fotoperiodo, 10
- funzione
 - nonlineare, 1
- Gompertz, 24
- legge
 - di Hill, 4
 - di Keyfitz, 6
 - di Malthus, 16
 - di Michaelis–Menten, 5
 - di Newton, 13
 - di Poiseuille, 3
 - di Weber–Fechner, 7
- Malthus J., 16
- metodo
 - della spezzata di Eulero, 29
 - di Lineweaver–Burk, 6
- modelli
 - a più dimensioni, 32
 - ad un compartimento, 15
 - ad una dimensione, 13
 - con saturazione, 16
 - SIR, 32
- modello
 - di Gompertz, 24
 - di Verhulst–Pearl, 17
 - logistico, 17
- Newton I.
 - seconda legge, 13
- ordine
 - di reazione, 27
- piano delle fasi, 34
- profilo di concentrazione, 39
- sistema
 - di Lotka–Volterra, 44
 - lineare
 - — differenziale, 38
 - SIR, 32
- sistemi
 - di equazioni differenziali, 32
- spezzata di Eulero, 29, 30, 35
- stato stazionario, 24
- tasso di crescita, 14
- tempo
 - di dimezzamento, 14, 27
 - di raddoppio, 15
 - di semitrasformazione, 27