



Unverzitet u Novom Sadu  
Prirodno-matematički fakultet  
Departman za matematiku i informatiku



Vanja Marinović

# O entropijskom metodu i eksponencijalnim ocenama rešenja za sisteme hemijskih reakcija

– Master rad –

Novi Sad, 2018.



# Sadržaj

<b>Uvod</b>	<b>5</b>
<b>1 Hemijske reakcije i njihovo modelovanje</b>	<b>7</b>
1.1 Modelovanje problema reakcije difuzije . . . . .	7
1.1.1 Modelovanje hemijskih reakcija. Zakon dejstva masa . . . . .	8
1.2 Sistem jednačina reakcija difuzije . . . . .	11
1.3 Modelovanje difuzije . . . . .	11
1.3.1 Hemijska ravnoteža . . . . .	12
1.4 Linearni RD sistemi na normalizovanom domenu . . . . .	13
1.5 Brzina konvergencije kod linearnog RD sistema . . . . .	14
<b>2 Entropijski metod</b>	<b>19</b>
2.1 Entropijski metod za sisteme hemijskih reakcija . . . . .	20
2.1.1 Primena na jednačinu provođenja toplote . . . . .	20
2.1.2 Opšte karakteristike entropijskog metoda . . . . .	24
2.2 Primena na linearne jednačine reakcije difuzije . . . . .	25
2.3 Furijeova analiza za domene uopštenog tipa . . . . .	27
2.4 Bakri-Emerijev metod . . . . .	30
2.4.1 Primeri primene Bakri-Emerijevog metoda . . . . .	31
<b>3 Teorema Geršgorina i sistemi reakcije difuzije</b>	<b>43</b>
<b>4 Skaliranje (bezdimezionisanje) sistema</b>	<b>47</b>
4.1 Dimenzija i osnovne jedinice . . . . .	47
4.2 Dimenzijska homogenost . . . . .	47
4.3 Proces bezdimezionisanja . . . . .	48
4.4 Primena na sisteme reakcije difuzije . . . . .	49
4.4.1 Primena na primer iz dela 1.5 . . . . .	49
4.4.2 Primena na Primer 4 . . . . .	50
<b>Literatura</b>	<b>53</b>



# Uvod

Entropijski pristup igra fundamentalnu ulogu u teoriji parcijalnih diferencijalnih jednačina (PDJ). Slobodno govoreći, entropija u matematičkom smislu predstavlja kvantitet, funkciju Ljapunova, koja je nerastuća duž trajektorija određene evolucione jednačine. Entropijska disipacija je po definiciji negativan vremenski izvod entropije.

Metode entropijske disipacije su nedavno otkriveni i razvijeni kako bi istražili kvalitativno ponašanje rešenja nelinearne parcijalne diferencijalne jednačine. Takođe i da bi se dobila eksplicitna ili barem optimalna konstanta u funkcionalnoj nejednakosti.

Takozvani entropijski metod biće naš pristup rešenju problema. Glavna ideja je kvantifikovati pad odgovarajuće entropijske funkcije u obliku funkcije entropijske disipacije, da bismo dobili takozvanu entropijsku nejednakost. Takva nejednakost može biti održiva samo ako su važe svi uslovi zakona održanja. Posle uspostavljanja date nejednakosti, direktna primena Gronvalove leme implicira konvergenciju rešenja ka tački ekvilibrijuma u relativnoj entropiji sa stopom i odgovarajućim konstantama, koje mogu biti eksplicitno izražene.

Posmatraćemo ponašanje rešenja na duži vremenski period kao i konvergenciju ka ravnotežnom stanju za sistem jednačina reakcije difuzije. Razmatrani reakcioni sistem je pretpostavljen tako da zadovoljava uslov partikularnog zakona održanja, bez mogućnosti postojanja graničnih stanja ravnoteže.

Izučavaćemo sisteme reakcije difuzije dobijene iz sistema hemijskih reakcija prvog reda i pokazati da sve trajektorije rešenja konvergiraju eksponencijalno ka odgovarajućem ekvilibrijumu sa eksplicitno izraženim stopama.

Prilikom primene entropijskog metoda, najteži deo predstavlja pronalazak odgovarajuće procene, tačnije postizanje entropijske nejednakosti. Jos od 1984. su frnacuski naučnici D. Bakry i M. Emery su pronašli način da uproste pomenuti postupak, predstavljajući Bakri-Emerijev pristup. Sastoji se u poređenju entropijske disipacije i njenog negativnog prvog izvoda, posle čega možemo izdvojiti konvergenciju entropijske funkcije ka svom ravnotežnom stanju. Tada na osnovu već postojećih teorema, eksplicitno znamo stopu konvergencije rešenja, što je i glavni zadatak.

Kasnijećemo uočiti kako naša teorija u entropijskom metodu ukršta puteve sa Geršgorinovom (Gershgorin) teoremom o karakterističnim korenima. Kako na neke sisteme ne možemo primeniti entropijski metod, pa samim tim ne možemo ni znati karakteristične korene matrice sistema, data teroema nam daje približan osećaj gde bi se oni mogli nalaziti. Na taj način se približavamo rešenju, koje nažalost nije eksplicitno kao u slučaju kod primene entropijskog metoda.

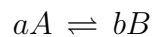
Na samom kraju predstavljena je u kratkim crtama tehnika bezdimenzionisanja, kao veoma koristan matematički alat. U mogućnosti je da u potpunosti uprosti i

parametrizuje probleme gde su uključene i merne jedinice. Naročito je veoma korisna kada su u pitanju diferencijalne jednačine.

# Glava 1

## Hemijske reakcije i njihovo modelovanje

Hemijska reakcija je proces koji vodi ka transformaciji jedne od skupa hemijskih supstanci ka drugoj. Obično je opisana hemijskom jednačinom, gde su reaktanti dati sa leve, a proizvod reakcije sa desne strane. Uopšteno hemijsku reakciju možemo predstaviti na sledeći način:



Ovde  $A$  i  $B$  predstavljaju hemijske supstance, a parametri  $a$  i  $b \in \mathbb{N}$  opisuju broj molekula uključenih u supstance  $A$  i  $B$ . Reakcije mogu da se odvijaju u oba smera, dok ne završe svoj proces, odnosno dođu u ravnotežno stanje (tačka ekvilibrijuma).

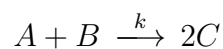
Većina hemijskih reakcija su reverzibilne, što znači da mogu da se odvijaju u oba smera. Direktna i povratna reakcija su u određenom smislu suprotstavljene i imaju različitu dinamiku, odnosno različite stope. Date stope zavise od koncentracije, a samim tim i njene promene u vremenu, povratna konstanta brzine se postepeno povećava i postaje jednaka sa konstantom brzine direktne hemijske reakcije, uspostavljajući takozvano ravnotežno stanje. Vreme dostizanja hemijske ravnoteže zavisi od raznih parametara kao što su temperatura, pritisak, vrsta materijala itd. Naš glavni cilj je ovde da izračunamo dato vreme, odnosno brzinu konvergencije ravnotežnom stanju.

Kako bismo mogli eksplicitno da izračunamo naznačenu brzinu, potrebno je da hemijsku reakciju prevedemo u matematički opis. Za hemijske sisteme (za više pogledati [14]), fundamentalan način za prevođenje hemijskih reakcija u odgovarajući skup jednačina dat je zakonom dejstva masa, što će biti predstavljeno u narednom poglavlju.

Prvo ćemo predstaviti neke od osnovnih hemijskih termina, kako bismo lako i brzo mogli doći do glavne teme ovog rada.

### 1.1 Modelovanje problema reakcije difuzije

Kroz jedan jednostavan primer ćemo objasniti čitav proces modelovanja. Posmatrajmo sledeću reakciju:



gde parametar  $k$  predstavlja stopu date reakcije. Da bismo celokupno definisali reakciju, potrebno je da uvedemo sledeći skup oznaka:

- hemijske supstance  $S = \{A, B, C\}$
- hemijska stanja  $C = \{(1, 1, 0); (0, 0, 2)\}$   
(objekti koji se pojavljuju pre i posle strelice reakcije)
- hemijske reakcije  $R = \{(1, 1, 0) \xrightarrow{k} (0, 0, 2)\}$

Takođe uvodimo i stohiometrijske koeficijente, kao broj molekula koji učestvuju u reakciji. Oni pripadaju skupu hemijskih kompleksa i direktno možemo uočiti njihov broj. (U prvom kompleksu, stohiometrijski koeficijenti za supstance  $A$  i  $B$  su 1, dok je za supstancu  $C$  to 0)

U našem prvom primeru smo imali 3 supstance, dok u uopštenom slučaju ih imamo  $N$ , pa bi tako naš skup hemijskih pojmova izgledao:

- $S = \{S_1, S_2, \dots, S_N\}$
- $C = \{y\} \subset \mathbb{N}^N$
- $R = \{y_r \xrightarrow{k_r} y_{r'} : y_r, y_{r'} \in C, k_r > 0\}$

Takođe uvodimo stohiometrijske koeficijente, kao broj molekula koji učestvuju u datoj reakciji. Oni pripadaju skupu hemijskih stanja i možemo ih direktno pročitati iz definicije. Naime, u prvom skupu stanja, stohiometrijski koeficijenti za  $A$  i  $B$  imaju vrednost 1, dok u drugom stohiometrijski koeficijent za  $C$  ima vrednost nula.

U zadatom primeru imamo 3 hemijske vrste, dok ih u generalnom slučaju ima  $N$ , pa tako skup hemijskih pojmova izgleda:

$$S = \{S_1, S_2, \dots, S_N\}, C = \{y\} \subset \mathbb{N}^N \text{ i } R = \{y_r \xrightarrow{k_r} y_{r'} : y_r, y_{r'} \in C, k_r > 0\}.$$

**Definicija 1** (*Sistemi hemijskih reakcija*) Uređena trojka  $\{S, C, R\}$  se naziva sistem hemijskih reakcija ako su zadovoljena sledeća tri uslova:

- Za svako  $S_i \in S$ , postoji najmanje jedno stanje  $y \in C$  čiji je stohiometrijski koeficijent  $y_i$  striktno pozitivan;
- Ne postoji trivijalna reakcija  $y \rightarrow y \in R$  za neko stanje  $y \in C$
- Za bilo koje  $y \in C$ , mora da postoji  $y' \in C$  tako da ili  $y \rightarrow y' \in R$  ili  $y' \rightarrow y \in R$ .

### 1.1.1 Modelovanje hemijskih reakcija. Zakon dejstva masa

Za hemijske sisteme fundamentalan princip za prevođenje hemijskih reakcija u odgovarajući skup jednačina je dat zakonom dejstva masa. U prostoj (elementarnoj) reakciji oblika:





stopa stvaranja proizvoda reakcije zavisi od koncentracije dostupnih reaktanata i takođe je okarakterisana konstantnom stopom  $k$ . Stopa potrošnje reaktanata takođe sledi iz ove veze.

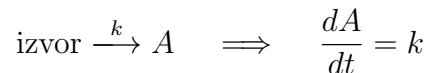
Označićemo koncentraciju supstance  $A$  sa  $A(t) \geq 0$ . Ukupna stopa promene koncentracije supstance  $A$  će imati doprinos od svoje proizvodnje i/ili potrošnje zbog svake hemijske reakcije koja je uključuje:

$$\frac{dA}{dt} = + \sum_{i=1}^n (\text{stopa stvaranja})_i - \sum_{i=1}^n (\text{stopa potrošnje})_i. \quad (1.2)$$

Hemijska reakcija formira matematički model u vidu obične diferencijalne jednačine prvog reda, i to po jednu za svaku hemijsku supstancu iz skupa  $\{A, B, C, \dots\}$ , a hemijske funkcije će biti polinomi u terminima proizvoda reakcije dobijenih od reaktanata.

Možemo da sumiramo osnovne forme hemijskih reakcija i odgovarajućih jednačinu koje su dobijene primenom zakona dejstva masa.

- **Konstantna proizvodnja:** jedinjenje  $A$  se proizvodi u sistemu sa konstantnom stopom  $k$ .



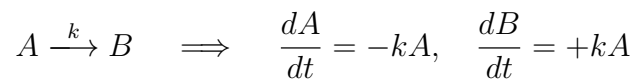
Ovo se naziva reakcija nultog reda, pošto stopa ne zavisi od koncentracije bilo koje od supstanci,  $k = k \cdot 1 = kA^0$ .

- **Razgradnja:** supstanca  $A$  se razgrađuje pri stopi  $k$  ( $A$  se razlaže i ne javlja se više u sistemu u ovom obliku)



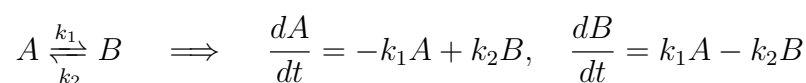
Ovo se zove reakcija prvog reda, pošto stopa zavisi linearno od koncentracije jedinog reaktanta.

- **Transformacija:** supstanca  $A$  je utrošena za proizvodnju supstance  $B$



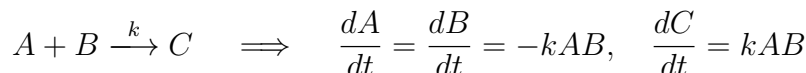
Ovo je najprostiji reakcioni „sistem”, u koji su uključene samo dve različite koncentracije usled jedne jedine reakcije.

- **Reverzibilna transformacija:**  $A$  se transformiše u  $B$  i obratno

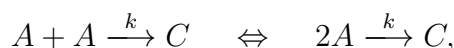


U ovom sistemu, stopa stvaranja svake od supstanci je dobijena sumiranjem stope reakcije koja je stvara i oduzimanjem stope koja je troši.

- **Formiranje jedinjenja:** reaktanti  $A$  i  $B$  proizvode supstancu  $C$



Stopa stvaranja proizvoda reakcije  $C$  je proporcionalna proizvodu koncentracija reaktanata, što proizilazi iz probabilističkog opisa sudara nezavisnih molekula, vidi [14]. Verovatnoća stvaranja molekula  $C$  se povećava kada se jedna od koncentracija  $A$  ili  $B$  povećava (i jasno je da se reakcija neće odvijati ako je jedna od njih ne postoji, tačnije kada je  $A = 0$  ili  $B = 0$ ). Međutim, ako pretpostavimo da su  $A$  i  $B$  iste supstance, tada prateći prethodne korake dobijamo:

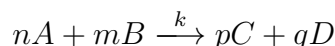


odakle slede jednačine:

$$\frac{dC}{dt} = +kA^2, \text{ ali } \frac{dA}{dt} \neq -kA^2.$$

Jednačina za stopu stvaranja supstance  $A$  ne može biti ispravna, jer bi odatle sledilo da  $A$  i  $C$  imaju istu stopu promene samo različitog predznaka, dok znamo da su za formiranje jednog molekula supstance  $C$  potrebna dva molekula supstance  $A$ . Ovo je problem „duplog brojanja” i to ćemo pojasniti u nastavku.

- **Višestruki proizvodi:**  $n$  molekula supstance  $A$  i  $m$  molekula supstance  $B$  reaguju kako bi proizveli  $p$  molekula supstance  $C$  i  $q$  molekula supstance  $D$ :



Kako bismo bili u mogućnosti da rešimo prethodni deo, uvodimo pojam reakcione stope:

$$\begin{aligned} \text{reakciona stopa} &= -\text{stopa potrošnje jedne jedinice reaktanta} \\ &= +\text{stopa stvaranje jedne jedinice proizvoda reakcije} \end{aligned}$$

Tada za primer višestrukih proizvoda reakcije imamo da:

$$\text{Stopa} = \frac{1}{p} \frac{dC}{dt} = \frac{1}{q} \frac{dD}{dt} = -\frac{1}{n} \frac{dA}{dt} = -\frac{1}{m} \frac{dB}{dt} = kA^n B^m$$

i možemo imati sledeće jednakosti:

$$\text{reaktanti: } \frac{dA}{dt} = -nkA^n B^m, \quad \frac{dB}{dt} = -mkA^n B^m$$

$$\text{proizvodi reakcije: } \frac{dC}{dt} = pkA^n B^m, \quad \frac{dD}{dt} = qkA^n B^m$$

Posledično, stopa promene za  $A$  u reakciji  $2A \xrightarrow{k} C$  je sada ispravno data sledećim izrazom:

$$\frac{dA}{dt} = -2kA^2$$

Posle uvođenja zakona dejstva masa možemo da nastavimo sa procesom modelovanja.

## 1.2 Sistem jednačina reakcija difuzije

Sistemi reakcije difuzije (RD sistemi) predstavljaju matematičke modele koji odgovaraju raznim fizičkim pojavama, od kojih je najčešća promena koncentracije u vremenu i prostoru određenih supstanci prilikom hemijskih reakcija. Usled toga, dati sistemi su veoma zastupljeni u hemiji. Međutim, oni mogu da opisuju i dinamičke procese „ne-hemijske” prirode, i to u oblastima biologije, geologije, fizike itd.

Sa matematičke tačke gledišta, RD sistemi imaju oblik semilinearne parabolične PDJ, koja se predstavlja sledećim opštim oblikom:

$$\partial_t \mathbf{c} = \mathbf{D} \nabla^2 \mathbf{c} + \mathbf{R}(\mathbf{c}), \quad (1.3)$$

gde  $\mathbf{c}(x, t)$  predstavlja vektor funkciju koncentracija, koji zavisi od prostorne promenljive  $x$  i vremenske promenljive  $t$ ,  $\mathbf{D}$  je dijagonalna matrica sastavljena od difuzionih koeficijenata i  $\mathbf{R}$  kao vektor reakcija koji zavisi od  $\mathbf{c}(x, t)$ .

Ako difuziona matrica  $\mathbf{D}$  zavisi od vektora funkcija  $\mathbf{c}(x, t)$ , tada izraz (1.3) predstavlja nelinearni RD sistem. Sa druge strane, ako je matrica  $\mathbf{D}$  konstantna matrica, izraz (1.3) predstavlja linearni RD sistem.

## 1.3 Modelovanje difuzije

Pretpostavimo da su hemijske supstance koje odgovaraju skupu hemijskih reakcija  $\{S, C, R\}$  sadržane u ograničenom skupu  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ , sa glatkim rubom  $\partial\Omega$ . Sa druge strane, označimo sa  $\mathbf{c}(x, t) = (c_1(x, t), \dots, c_N(x, t))$  vektor koncentracija, gde je  $c_i(x, t)$  koncentracija supstance  $S_i$  u trenutku  $t > 0$  u  $x \in \Omega$ . Svaka od supstanci  $S_i$  po pretpostavci difunduje u  $\Omega$  sa striktno pozitivnom konstantom difuzije  $d_i > 0$ . Odgovarajući sistem reakcije difuzije tada ima oblik:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{c} - \mathbf{D} \Delta \mathbf{c} = \mathbf{R}(\mathbf{c}), \quad (x, t) \in \Omega \times \mathbb{R}_+ \quad (1.4)$$

gde je difuziona matrica  $\mathbf{D} = \text{diag}(d_1, \dots, d_N)$  pozitivno definitna. Primenom zakona dejstva masa, reakcioni vektor  $\mathbf{R}(\mathbf{c})$  je modelovan na sledeći način:

$$\mathbf{R}(\mathbf{c}) = \sum_{r=1}^{|R|} k_r \mathbf{c}^{y_r} (y'_r - y_r) \quad (1.5)$$

gde  $\mathbf{c}^{y_r} := \prod_{i=1}^N c_i^{y_{r,i}}$  i gde  $k_r > 0$  označava konstantnu stopu  $r$ -te reakcije. Sistem (1.4) je povezan sa nenegativnim početnim uslovima  $\mathbf{c}_0(x)$ , ( $c_{i0} \geq 0 \quad \forall i \in \{1, \dots, N\}$ ) i homogenim Nojmanovim graničnim uslovom:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}(x, 0) &= \mathbf{c}_0(x) \quad \text{za } x \in \Omega \\ \nabla \mathbf{c} \cdot \nu &= 0 \quad (x, t) \in \partial\Omega \times \mathbb{R}_+ \end{aligned} \quad (1.6)$$

gde  $\nu := \nu(x)$  predstavlja jedinični vektor spoljašnje normale u tački  $x \in \partial\Omega$ .

U skupu hemijskih reakcija  $R$ , sa  $W$  označavamo matricu Vegšajdera (Rudolf Wegscheider):

$$W := [(y'_r - y_r)_{r=1, \dots, |R|}]^T \in \mathbb{R}^{|R| \times N}$$

i  $m = \dim(\ker(W))$ . Ako je  $m > 0$ , postoji matrica  $\mathbb{Q} \in \mathbb{R}^{m \times N}$  tako da važi:

$$\text{rang}(\mathbb{Q}) = m \quad \text{i} \quad \mathbb{Q}\mathbf{R}(\mathbf{c}) = 0 \quad \forall \mathbf{c} \in \mathbb{R}_{\geq 0}^N$$

i kolone matrice  $\mathbb{Q}$  formiraju bazu jezgra  $\ker(W)$ . Stoga, usled pomenutih Nojmanovih graničnih uslova, upotreba matrice  $\mathbb{Q}$  vodi ka sledećim zakonima odražanja mase za rešenja sistema (1.4):

$$\mathbb{Q} \cdot \tilde{\mathbf{c}}(t) = \mathbb{Q} \cdot \tilde{\mathbf{c}}_0 =: \frac{M}{|\Omega|} \in \mathbb{R}^m, \quad \forall t > 0,$$

gde  $\tilde{\mathbf{c}} := (\tilde{c}_1, \dots, \tilde{c}_N)$  i  $\tilde{c}_i := \int_{\Omega} c_i \frac{dx}{|\Omega|}$ , i  $M$  predstavlja početni vektor masa. Uvek možemo razmotriti bez umanjavanja opštosti, da je početni vektor masa  $M$  nenegativan,  $M \in \mathbb{R}_{\geq 0}^m$ .

### 1.3.1 Hemijska ravnoteža

U hemijskim reakcijama, kada je konstanta brzine direktne reakcije jednaka konstanti brzine povratne reakcije i kada koncentracije reaktanata i produkata reakcije ostaju nepormienjeni, moguće je ostvariti takozvanu hemijsku ravnotežu.

U ovom radu, pojam hemijske ravnoteže (ekvilibrijuma) predstavlja veoma bitnu stvar, njegovo nalaženje i dostizanje je naš glavni zadatak. Kako želimo da saznamo koliko brzo ga mozemo dostići, moramo znati pre svega njegovu eksplicitnu definiciju. Vodeći se oznakama iz prethodnih odeljaka, sada možemo da definišemo pojam ravnoteže, kao i njegove varijacije, razmatrajući pritom već obrađeni sistem reakcije difuzije (1.4).

**Definicija 2** (Ravnotežno stanje) *Posmatrajmo sistem hemijskih reakcija sa reakcionim vektorom  $\mathbf{R}$  definisanog kao u (1.5) i vektorom masa  $M \in \mathbb{R}_{\geq 0}^m$ . Tada razlikujemo sledeće slučajeve:*

(a)  $\mathbf{c}_{\infty}$  se naziva ravnotežno stanje ako važi:

$$\mathbf{R}(\mathbf{c}_{\infty}) = \mathbf{0}. \quad (1.7)$$

(b)  $\mathbf{c}_{\infty}$  se naziva ravnotežno stanje saglasno sa partikularnim zakonima održanja masa, ako za svaku direktnu reakciju  $y \xrightarrow{k_f} y'$  u  $R$  postoji u  $R$  takode i odgovarajuća povratna reakcija  $y' \xrightarrow{k_b} y$  gde su stope date sa  $k_f, k_b > 0$  i vazi uslov

$$k_f \mathbf{c}_{\infty}^y = k_b \mathbf{c}_{\infty}^{y'}. \quad (1.8)$$

(c)  $\mathbf{c}_{\infty}$  se naziva ravnotežno stanje saglasno sa zakonom održanja ukupne mase, ako za bilo koje stanje  $y \in C$  imamo zadovoljen sledeći uslov

$$\sum_{\{r: y_r=y\}} k_r \mathbf{c}_{\infty}^{y_r} = \sum_{\{s: y'_s=y\}} k_s \mathbf{c}_{\infty}^{y'_s}, \quad (1.9)$$

tačnije ukupni odliv jednak je ukupnom prilivu u  $\mathbf{c}_{\infty}$  i to za svaku supstancu  $y$ .

- (d)  $\mathbf{c}_\infty$  se naziva granično ravnotežno stanje ako je  $\mathbf{c}_\infty$  ravnotežno stanje i ako  $\mathbf{c}_\infty \in \partial\mathbb{R}_{>0}^m$ .

Iz prethodne definicije možemo uočiti poredak između razmatranih slučajeva, tačnije vrsta ravnotežnih stanja i to na sledeći način:

$$(b) \subset (c) \subset (a).$$

## 1.4 Linearni RD sistemi na normalizovanom domenu

Kao što znamo, posle modelovanja pojedinih hemijskih reakcija uz pomoć zakona dejstva masa, koji je predstavljen u odeljku 1.1.1, možemo dobiti ili linearni ili nelinearni sistem reakcija difuzije. Ovde ćemo predstaviti linearni sistem na opštem domenu, kao i kako tačka ekvilibrijuma (ravnotežno stanje) datog sistema zavisi od početnih uslova i početne mase u opštem slučaju.

Koristeći činjenicu da je RD sistem invarijantan u odnosu na skaliranje  $u_{old} = \lambda \cdot u_{new}$ , što će i biti predstavljeno u poslednjem odeljku, možemo posmatrati opšti domen  $\Omega$  kao skaliran  $|\Omega| = 1$ , bez gubitka opštosti.

Posmatrajmo sledeću reakciju (u opštem obliku):



modelovanu uz pomoć zakona dejstva masa i predstavljenu sledećim linearnim sistemom sa homogenim Nojmanovim graničnim uslovima:

$$\begin{aligned} u_t - d_a \Delta u &= -\alpha^2 u + \alpha \beta v, \\ v_t - d_b \Delta v &= \alpha \beta u - \beta^2 v, \end{aligned} \quad \text{na } \Omega \quad (1.11)$$

$$\begin{aligned} n \cdot \nabla u &= 0, \\ n \cdot \nabla v &= 0, \end{aligned} \quad \text{na } \partial\Omega \quad (1.12)$$

uz početne uslove  $u_0, v_0 \in L^\infty$ , gde  $u, v$  predstavljaju koncentracije supstanci U, V respektivno. Homogeni Nojmanovi granični uslovi nam govore da između supstanci nema interakcije na domenu.

Prethodni linearni sistem (1.11) čuva ukupnu masu, odnosno zadovoljava zakon održanja ukupne mase:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} (\beta u + \alpha v) dx = 0 \implies \int_{\Omega} (\beta u + \alpha v) dx = \int_{\Omega} (\beta u_0 + \alpha v_0) dx = M > 0 \quad (1.13)$$

gde  $M$  predstavlja početnu masu sistema (1.11). Takođe, sistem poseduje jedinstveno, konstantno stacionarno stanje, koje obeležavamo sa  $u_\infty$  i  $v_\infty$  koji zadovoljavaju prethodni zakon održanja ukupne mase:

$$\beta u_\infty + \alpha v_\infty = M, \quad (1.14)$$

kao i partikularni zakon održanja mase:

$$\alpha u_\infty = \beta v_\infty. \quad (1.15)$$

Uočavamo da izrazi (1.14) i (1.15) određuju stacionarno ravnotežno stanje. Njegova jedinstvenost je posledica monotonosti entropijske disipacije, koja će biti predstavljena u nastavku.

Razlikujemo dva slučaja u zavisnosti od očuvane ukupne mase i od znaka početnih uslova:

1. Posmatrajmo početne uslove  $u_0, v_0 \in L^\infty$  sa početnom, ukupnom masom  $M = 0$ . Tada je ukupna masa  $\int_{\Omega}(\beta u + \alpha v)dx = 0$  za svako  $t$  i u ovom slučaju imamo da  $u_\infty = v_\infty = 0$ . U tom slučaju očekujemo da

$$(u, v) \longrightarrow (0, 0) \quad \text{kad } t \rightarrow +\infty$$

Posebno, ovaj slučaj se pojavljuje kao linearizacija nelinearnog RD sistema u blizini ravnotežnog stanja, pa  $u$  i  $v$  predstavljaju poremećaje (perturbacije) koncentracija u odnosu na ravnotežnu,  $u = a - a_\infty$  i  $v = b - b_\infty$ .

2. Posmatrajmo nenegativne početne uslove  $u_0, v_0 \geq 0$  i pozitivnu inicijalnu masu  $\int_{\Omega}(\beta u_0 + \alpha v_0)dx = M, M > 0$ . U ovom slučaju, sistem (1.11) poseduje pozitivno, jedinstveno ravnotežno stanje  $u_\infty, v_\infty > 0$  koje zadovoljava uslov (1.13). Tada očekujemo:

$$(u, v) \longrightarrow (u_\infty, v_\infty) \quad \text{kad } t \rightarrow +\infty.$$

Prethodnom diskusijom smo grubo prezentovali slučajeve koji mogu nastupiti pri različitim početnim vrednostima sistema (1.11).

## 1.5 Brzina konvergencije kod linearnog RD sistema

U ovom odeljku će na jednom konkretnom primeru biti prikazan postupak određivanja brzine konvergencije rešenja RD sistema konstantnom ravnotežnom stanju. Posmatraćemo linearizovani RD sistem na ograničenom domenu, koji čine dve spregnute jednačine reakcije difuzije, a koji je dobijen linearizacijom polaznog nelinearnog sistema u okolini konstantnog ravnotežnog stanja.

Posmatrajmo sledeću reverzibilnu hemijsku reakciju:



gde  $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$  za dve hemijske supstance  $A, B$  opisane koncentracijama  $a, b$  na intervalu  $\Omega = [0, 1]$ . Tada možemo opisati reakciju sistemom PDJ, tačnije nelinearnim sistemom koji zadovoljava homogene Nojmanove granične uslove:

$$\begin{pmatrix} \partial_t a - d_a \partial_{xx} a \\ \partial_t b - d_b \partial_{xx} b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\alpha & \alpha \\ \beta & -\beta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} l a^\alpha \\ k b^\beta \end{pmatrix} \quad (1.17)$$

gde su  $d_a, d_b \in \mathbb{R}_+$  konstante difuzije, a  $l$  i  $k$  stope koje opisuju brzinu reakcije. Sistem (1.17) zadovoljava zakon održanja mase:

$$\beta a(x, t) + \alpha b(x, t) = \int_{\Omega} (\beta a(x, 0) + \alpha b(x, 0)) dx =: M > 0 \quad (1.18)$$

gde  $M$  predstavlja pozitivnu početnu masu sistema. Takođe, sistem poseduje i jedinstveno ravnotežno stanje  $(a_\infty, b_\infty)$  tako da važi:

$$la_\infty^\alpha = kb_\infty^\beta \quad (1.19)$$

i zadovoljava uslov održanja mase:

$$\beta \cdot a_\infty + \alpha \cdot b_\infty = \int_{\Omega} (\beta a(x, 0) + \alpha b(x, 0)) dx =: M \quad (1.20)$$

Naš cilj je da pokušamo da uprostimo sistem (1.17), kako bismo mogli naći optimalnu stopu konvergencije rešenja. Prvo ćemo linearizovati sistem u okolini ravnotežnog stanja:

$$u = a - a_\infty, \quad v = b - b_\infty.$$

Ovo nas dovodi do sledećeg sistema PDJ:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \partial_t u - d_a \cdot \partial_{xx} u \\ \partial_t v - d_b \cdot \partial_{xx} v \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -\alpha^2 l a_\infty^\alpha \frac{1}{a_\infty} & \alpha \beta k b_\infty^\beta \frac{1}{b_\infty} \\ \alpha \beta l a_\infty^\alpha \frac{1}{a_\infty} & -\beta^2 k b_\infty^\beta \frac{1}{b_\infty} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \\ &= F \cdot \begin{pmatrix} -\alpha^2 & \alpha \beta \\ \alpha \beta & -\beta^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{1}{a_\infty} & 0 \\ 0 & \frac{1}{b_\infty} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1.21)$$

gde je funkcija  $F = F(a_\infty, b_\infty) = la_\infty^\alpha = kb_\infty^\beta$ . Skaliranjem sistema (1.21), što će biti objašnjeno u poslednjem odeljku, dobija se sledeći sistem PDJ:

$$\begin{pmatrix} \partial_t u - d_a \partial_{xx} u \\ \partial_t v - d_b \partial_{xx} v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\alpha^2 & \alpha \beta \\ \alpha \beta & -\beta^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (1.22)$$

Sistem (1.22) može biti rešen primenom Furijeovog metoda razdvajanja promenljivih. Na taj način se dolazi do Laplasovog karakterističnog problema sa Nojmanovim graničnim uslovima na intervalu  $\Omega = [0, 1]$ :

$$\begin{aligned} \varphi_{xx} &= \lambda_k \cdot \varphi, \\ \varphi_x(0) &= \varphi_x(1) = 0. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Za detaljnije objašnjenje videti literaturu [1], [2]. Posle kraće računice dobijamo da su karakteristični koreni  $\lambda_k = -(k\pi)^2$ , a karakteristične funkcije  $\varphi_k = \cos(k\pi x)$ , gde  $k = 0, 1, \dots$ . To nas dovodi do novog oblika skupa rešenja:

$$u(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} u^k(t) \varphi_k(x), \quad v(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} v^k(t) \varphi_k(x) \quad (1.24)$$

što nam daje novi sistem koji zavisi od brojača  $k$ . Dobijeni sistem PDJ se, zbog linearnosti i homogenosti u odnosu na karakteristične funkcije  $\varphi_k$ , može rastaviti sisteme ODJ prvog reda:

$$\partial_t \begin{pmatrix} u^k \\ v^k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_a \lambda_k - \alpha^2 & \alpha \beta \\ \alpha \beta & d_b \lambda_k - \beta^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u^k \\ v^k \end{pmatrix} \quad (1.25)$$

koje možemo da rešimo određivanjem karakterističnih korena matrice sistema  $A_k$ :

$$A_k = \begin{pmatrix} d_a \lambda_k - \alpha^2 & \alpha \beta \\ \alpha \beta & d_b \lambda_k - \beta^2 \end{pmatrix}.$$

Karakteristični koreni se mogu prikazati u obliku:

$$\mu_{1,2}(k) = \frac{\tau}{2} \pm \sqrt{\frac{\tau^2}{4} - \Delta},$$

gde su:

$$\begin{aligned} \tau &= (d_a + d_b)\lambda_k - (\alpha^2 + \beta^2), \\ \Delta &= d_a d_b \lambda_k^2 - \lambda_k (d_a \beta^2 + d_b \alpha^2) \geq 0 \end{aligned}$$

i na nama je da ih dalje analiziramo u cilju određivanja brzine konvergencije.

U zavisnosti od različitih vrednosti brojača  $k$ , dobijamo različite vrednosti karakterističnih korena koji opisuju potencijalnu stopu konvergencije. Konkretno, za  $k = 0$  imamo:

$$\begin{aligned} \mu_1(0) &= 0, \\ \mu_2(0) &= -(\alpha^2 + \beta^2) < 0, \end{aligned}$$

gde  $\mu_1(0) = 0$  odgovara zakonu održanja mase. Za  $k = 1$  dobijamo:

$$\begin{aligned} \mu_1(1) &= -\frac{d_a + d_b}{2} \pi^2 - \frac{\alpha^2 + \beta^2}{2} + \sqrt{(\pi^2(d_a - d_b) + \alpha^2 - \beta^2)^2/4 + \alpha^2 \beta^2} < 0, \\ \mu_2(1) &= -\frac{d_a + d_b}{2} \pi^2 - \frac{\alpha^2 + \beta^2}{2} - \sqrt{(\pi^2(d_a - d_b) + \alpha^2 - \beta^2)^2/4 + \alpha^2 \beta^2} < 0. \end{aligned}$$

Stopa konvergencije data je minimumom od  $|\mu_1(1)|$  i  $|\mu_2(0)|$ . Jednostavnom proverom možemo utvrditi sledeći poredak:

$$|\mu_1(1)| > |\mu_2(0)| \iff \pi^2 > \frac{\alpha^2}{d_b} + \frac{\beta^2}{d_a}$$

$$(\iff F\pi^2 > \frac{\alpha^2}{d_b} + \frac{\beta^2}{d_a} \text{ pre skaliranja})$$

i stopa konvergencije zavisi od netrivialnog poretka reakcionih parametara, difuzionih konstanti i geometrijskih parametara domena.

Možemo razlikovati nekoliko slučajeva, u zavisnosti od vrednosti difuzionih konstanti:

1. Jednaki parametri difuzije  $d_a = d_b = d$  usled čega je  $|\mu_1(1)| = d\pi^2$ . U ovom slučaju, vrednost  $\mu_1(1)$  ne utiče na ostale parametre, već samo na difuzioni deo jednačine.
2. Jedna od difuzionih konstanti je nula ( $d_a = 0$  ili  $d_b = 0$ ). Ovde imamo eksponencijalnu ocenu sa stopom koja uključuje ostale pozitivne difuzione delove jednačine date reakcije.



3. Potpuno odsustvo difuzije ( $d_a = d_b = 0$ ). U ovom slučaju imamo sistem od dve obične diferencijalne jednačine čiji su karakteristični koreni:

$$\lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = -\alpha^2 - \beta^2,$$

gde prvi od njih odgovara zakonu održanju mase, a drugi predstavlja traženu stopu konvergencije.

Na ovom mestu je važno i detaljnije analizirati strukturu karakterističnih korena  $\mu_{1,2}(k)$ . Sa povećanjem vrednosti brojača  $k$  i difuzionih konstanti  $d_a$  i  $d_b$ , vrednosti karakterističnih korena opadaju. Budući da je  $\mu_{1,2}(k) \leq 0$  (jednakost važi samo za koren koji odgovara zakonu održanja mase), a da nas zanima optimalna stopa konvergencije rešenja, koreni koji se dobijaju za  $k > 1$  nisu od značaja za našu analizu. Dodajmo da je ovo u saglasnosti sa fizičkom interpretacijom jednačina difuzije: sa povećanjem konstanti difuzije  $d_a$  i  $d_b$  povećava se „brzina” kojom se sistem homogenizuje, odnosno dospeva u stanje u kom koncentracije  $u$  i  $v$  praktično ne zavise od prostorne promenljive  $x$ . To znači da se prostorna komponenta može smatrati tranzijentnom i da se celokupna analiza brzine konvergencije može osloniti na sisteme ODJ koji se dobijaju gore opisanim postupkom.



## Glava 2

# Entropijski metod

Entropijski metod je poslednjih godina znatno napredovao i proširio svoju upotrebu u razumevanju skalarnih linearnih i nelinearnih jednačina difuzije. Ideja entropijskog metoda je da proučava ponašanje trajektorija disipativne diferencijalne jednačine, koja predstavlja model određene hemijske reakcije. Metod se sastoji iz traženja odgovarajuće nenegativne Ljapunovljeve (Lyapunov) funkcije i njene disipacije. Između njih je potrebno uspostaviti određenu vezu i formirati takozvanu entropijsku nejednakost, koja nas posle vodi do stope konvergencije rešenja sistema.

Entropijski metod teži da kvantifikuje konvergenciju ka ravnotežnom stanju, koristeći funkcijske nejednakosti, koje se kvantitativno odnose na entropiju i njenu disipaciju u vremenu. On predstavlja nelinearni metod koji, u principu, izbegava bilo koju vrstu linearizacije i stanju je da obezbedi eksplicitno izračunljivu stopu konvergencije. Sa druge strane, zasnivajući se na funkcijskoj nejednakosti, a ne na posebnim diferencijalnim jednačinama, ima prednost da bude prilično robusna u odnosu na varijacije modela.

Najveća razlika između entropijskog metoda i tehnike linearizacije je u tome što linearizacija posmatra ponašanje rešenja u okolini tačke ravnoteže, dok entropijski metod obuhvata celokupnu sliku ponašanja rešenja.

Govoreći o samoj entropiji, sa matematičke strane ona predstavlja konveksnu Ljapunovljevu funkciju koja raste sa vremenom. Veoma je važno istaći da je veoma korisna u primeni na razne matematičke oblasti, kao što su globalna egzistencija i ograničenost za sisteme reakcije difuzije, sisteme unakrsne difuzije, kao i u dokazivanju jedinstvenosti slabog rešenja za difuzionu jednačinu [3]. Za izbor entropije ne postoji opšti postupak. On zavisi od strukture jednačina koje se analiziraju. Uobičajeni izbor funkcije entropije predstavlja kvadratna i logaritamska funkcija određene forme, koje odgovaraju linearnom, odnosno nelinearnom sistemu PDJ.

Predstavićemo u nastavku glavne elemente entropijskog metoda, primenjujući ga na osnovni model hemijske reakcije. Kroz rešavanje homogenog Nojmanovog problema za jednačinu provođenja toplote na ograničenom domenu (vidi 2.1.1), predstavićemo i osnovne pojmove. Obrađen je i niz različitih primera, koji daju rezultate različite tačnosti. Zatim, uvidećemo i određene sličnosti sa metodom linearizacije, u vidu istovetne stope konvergencije za isti model.

## 2.1 Entropijski metod za sisteme hemijskih reakcija

Entropijski metod je veoma koristan prilikom dokazivanja konvergencije rešenja evolucionih jednačina ka ravnotežnoj tački. Ovde, glavna primena biće prezentovana na teoriji hemijskih reakcija.

Posmatrajmo tako sledeći primer:

$$\partial_t f(t) = F(f)(t), \quad f : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}, \quad \forall t > 0 \quad (2.1)$$

sa početnim uslovom  $f(0) = f_0$ . Stanje  $f_\infty$  se naziva stanje ravnoteže, ako je ono vremenski nezavisno rešenje jednačine (2.1):

$$F(f_\infty) = 0. \quad (2.2)$$

Interesantno je istražiti da li trajektorija  $f(t)$  od evolucione jednačine (2.1) konvergira ka ravnotežnom stanju  $f_\infty$  kada vremenska promenljiva  $t$  neograničeno raste,  $t \rightarrow +\infty$ . Postoji nekoliko važnih pitanja na koja treba dati odgovor:

1. *Osnovno pitanje:* Da li trajektorije konvergiraju ka tački ravnoteže kada  $t \rightarrow +\infty$ ?
2. *Višestruka ravnotežna stanja:* Ka kojoj tački ravnoteže je obezbeđena konvergencija, ako je moguće da ih ima više od jedne?
3. *Stopa konvergencije:* Koliko brzo se dostiže ravnotežno stanje?

### 2.1.1 Primena na jednačinu provođenja toplote

U ovom odeljku želimo da predstavimo entropijski metod i to kroz dokazivanje konvergencije ka ravnotežnom stanju za jednačinu provođenja toplote sa homogenim Nojmanovim graničnim uslovima.

Neka je  $\Omega \subset \mathbb{R}^N$  ograničeni domen sa  $C^1$  granicom. Razmatraćemo jednačinu provođenja toplote za funkciju  $u(x, t)$ :

$$\begin{aligned} u_t - \Delta u &= 0 & \text{na } \Omega \\ \partial_\nu u &= 0 & \text{na } \partial\Omega \\ u(x, 0) &= u_0(x) & \text{na } \Omega \end{aligned}$$

gde  $\nu := \nu(x)$  predstavlja spoljašnju normalu jediničnog vektora u tački  $x \in \partial\Omega$ .

Ravnotežno stanje  $u_\infty(x)$  zadovoljava jednačinu  $-\Delta u_\infty = 0$  na  $\Omega$  i  $\partial_\nu u_\infty = 0$  na  $\partial\Omega$ . Tada vidimo da bilo koja konstanta funkcija  $u_\infty = \text{const.}$  predstavlja jedno stanje ravnoteže.

Međutim, primetimo da iz jednačine  $u_t - \Delta u = 0$ , nakon integracije nad  $\Omega$  dobijamo:

$$\partial_t \int_{\Omega} u dx - \int_{\Omega} \Delta u dx = 0.$$

Koristeći i homogene Nojmanove granične uslove imamo da  $\int_{\Omega} \Delta u dx = 0$ . Tada sledi da:

$$\partial_t \int_{\Omega} u dx = 0$$

i posledično vazi:

$$\int_{\Omega} u(x, t) dx = \int_{\Omega} u_0(x) dx, \quad \forall t > 0. \quad (2.3)$$

Izraz (2.3) predstavlja zakon održanja mase za jednačinu provođenja toplote. To nam daje nagoveštaj da ravnotežno stanje takođe treba da zadovoljava izraz održanja mase, tačnije treba da važi:

$$\int_{\Omega} u_{\infty} dx = \int_{\Omega} u_0(x) dx.$$

ili ekvivalentno:

$$u_{\infty} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} u_0(x) dx.$$

Nas cilj sada je da dokažemo konvergenciju funkcije  $u(x, t)$  ka stanju  $u_{\infty}$  kada  $t \rightarrow +\infty$ .

Pre dokazivanja konvergencije, potrebno je da u sledećem delu rada uvedemo pojedine definicije neophodne za celokupan postupak.

**Definicija 3** (Uopštena funkcija Ljapunova) *Funkcija  $V : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$  je pozitivno definitna ako:*

1.  $V(0) = 0$ ,
2.  $V > 0$  svuda na otvorenom skupu  $\Omega \subset \mathbb{R}^m$  koji sadrži 0.

*Funkcija  $V(u) = V(u(t))$  za bilo koje rešenje  $u = u(t)$  datog sistema ODJ  $\dot{u} = f(u)$  je funkcional po  $t$  čiji je izvod (za dovoljno glatko  $V$ ) definisan sa:*

$$\frac{dV}{dt} = \dot{V} = \sum_{i=1}^m \frac{\partial V}{\partial u_i} \dot{u}_i = \sum_{i=1}^m \frac{\partial V}{\partial u_i} f_i(u)$$

*Ako je  $V : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ , funkcija sa neprekidnim izvodima, pozitivno definitna i  $\frac{dV}{dt} \leq 0$  na skupu  $\Omega$  za bilo koji oblik rešenja  $u$  sistema  $\dot{u} = f(u)$ , tada nju zovemo funkcija (funkcional) Ljapunova za sistem  $\dot{u} = f(u)$ .*

**Lema 1** (Uopštena Gronvalova nejednakost – diferencijalni oblik) *Neka je  $I$  interval na realnoj osi oblika  $[a, \infty), [a, b)$  ili oblika  $[a, b]$ , gde  $a < b$ . Neka su  $\beta$  i  $u$  realne, neprekidne funkcije definisane na intervalu  $I$ . Ako je funkcija  $u$  diferencijabilna u unutrašnjosti intervala  $I$  ( $I^0$ ) i zadovoljava diferencijalnu nejednakost oblika:*

$$u'(t) \leq \beta(t)u(t), \quad t \in I^0$$

*tada je  $u$  ograničena rešenjem odgovarajuće diferencijalne jednačine ( $u'(t) = \beta(t)u(t)$ ):*

$$u(t) \leq u(a) \exp\left(\int_a^t \beta(s) ds\right)$$

*za svako  $t$  iz intervala  $I$ .*

U našem primeru sa jednačinom provođenja toplote, biće nam potreban specifičan oblike Gronvalove nejednakosti, koji ćemo prikazati u nastavku.

Pretpostavimo da je  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  diferencijabilna funkcija. Ako je:

$$\partial_t f(t) \leq \lambda f(t), \quad \forall t \geq 0$$

tada važi:

$$f(t) \leq e^{\lambda t} f(0) \quad \forall t \geq 0.$$

Posebno, kada je parametar  $\lambda < 0$ , tada funkcija  $f(t)$  opada eksponencijalno.

**Lema 2** (*Cizar-Kulbak-Pinskerova nejednakost – CKP*) Neka je  $\Omega \in \mathbb{R}^d$  domen i neka funkcije  $f, g \in L^2(\Omega)$  zadovoljavaju uslov  $f, g > 0$  i  $\int_{\Omega} f dx = \int_{\Omega} g dx = 1$ . Zatim, neka funkcija  $\Phi \in C^1(\mathbb{R})$  zadovoljava uslov:

$$\Phi(s) \geq \Phi(1) + \Phi'(1)(s - 1) + \gamma^2(s - 1)^2 1_{\{s < 1\}}.$$

za sve  $s \in \mathbb{R}$  i neko  $\gamma > 0$ , gde izraz  $1_{\{s < 1\}}$  predstavlja karakterističnu funkciju na nekom skupu  $A \subset \mathbb{R}$ . Na kraju, neka je

$$H_{\Phi}(f) = \int_{\Omega} \Phi\left(\frac{f}{g}\right) g dx.$$

Tada važi nejednakost:

$$\|f - g\|_{L^1(\Omega)}^2 \leq \frac{4}{\gamma^2} (H_{\Phi}(f) - H_{\Phi}(g)).$$

**Definicija 4** (*Entropijska funkcija*) Označimo sa  $\|\cdot\|$  uobičajenu normu na  $L^2(\Omega)$  prostoru. Definišemo entropijsku funkciju kao Ljapunovljev funkcional  $E(u) : [0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}$  i to:

$$E(u) = \|u(t) - u_{\infty}\|^2$$

Računajući prvi izvod entropijske funkcije po vremenu  $t$ :

$$\frac{d}{dt} E(u) = 2 \int_{\Omega} (u - u_{\infty}) u_t dx = 2 \int_{\Omega} (u - u_{\infty}) \Delta u dx = -2 \|\nabla u\|^2$$

dolazimo do sledećeg bitnog pojma, a to je entropijska disipacija, koju predstavljamo u sledećoj definiciji.

**Definicija 5** (*Entropijska disipacija*) Entropijska disipacije je definisana kao negativna vrednost prvog izvoda entropijske funkcije:

$$D(u) := -\frac{d}{dt} E(u).$$

Za nju  $D(u) = 0 \iff u = u_{\infty}$ , kada funkcija  $u$  zadovoljava zakone održanja.

U našem primeru, entropijska disipacija je data sa:

$$D(u) := -\frac{d}{dt}E(u) = 2\|\nabla u\|^2.$$

Primenom Poenkareove nejednakosti:

$$\|\nabla u\|^2 \geq \lambda\|u - u_\infty\|^2$$

dobijamo izraz:

$$D(u) = 2\|\nabla u\|^2 \geq 2\lambda\left\|u - \frac{1}{|\Omega|} \int_\Omega u dx\right\|^2 = 2\lambda\|u - u_\infty\|^2 = 2\lambda E(u).$$

Dobijeni rezultat pruža motivaciju za definiciju entropijske nejednakosti, čime se zaokružuje skup osnovnih pojmova entropijskog metoda.

**Definicija 6** (*Entropijska nejednakost*) *Entropijska nejednakost predstavljena je sledećim izrazom:*

$$D(u) \geq \lambda\Phi(E(u) - E(u_\infty)),$$

gde funkcija  $\Phi$  ima sledeća svojstva:

- $\Phi(u) = 0 \iff u = 0$ ,
- $\Phi(u) \geq 0$ ,

za svaku funkciju  $u$  koja zadovoljava zakone održanja.

Iz primera za jednačinu provođenja toplote imamo:

$$\frac{d}{dt}E(u) = -D(u) \leq -2\lambda E(u),$$

pa upotrebom Gronvalove leme imamo:

$$E(u)(t) \leq e^{-2\lambda t} E(u)(0),$$

ili ekvivalentno:

$$\|u(t) - u_\infty\| \leq e^{-\lambda t} \|u_0 - u_\infty\|.$$

Time smo dokazali konvergenciju rešenja toplotne jednačine ka ravnotežnom stanju. U nastavku ćemo predstaviti teoremu koja nam daje egzaktnu stopu konvergencije.

**Teorema 1** *Trajektorije  $u(x, t)$  jednačine provođenja toplote sa homogenim Nojmanovim graničnim uslovima konvergiraju eksponencijalno ka tački ravnoteže  $u_\infty$  sa stopom konvergencije  $\lambda$ , gde je  $\lambda$  konstanta iz Poenkareove nejednakosti.*

**Napomena 1** Kao što možemo da vidimo, entropijski metod se bazira na određenoj funkcionalnoj nejednakosti, koja nije u vezi sa početnom PDJ, i koja predstavlja entropijsku nejednakost. U našem specifičnom slučaju koji se tiče jednačine provođenja toplote, koristili smo Poenkareovu nejednakost, čija konstanta predstavlja stopu konvergencije ka ravnotežnom stanju.

### 2.1.2 Opšte karakteristike entropijskog metoda

Videli smo kako je entropijski metod primenjen na jednostavan primer jednačine provođenja toplote. Iako je bilo prilično lako uspostaviti entropijsku nejednakost, dati metod se uvek sastoji od istih koraka za bilo koju hemijsku reakciju opisanu sistemom diferencijalnih jednačina.

Sada ćemo postaviti osnovnu ideju primene entropijskog metoda na evolucionu jednačinu oblika:

$$\partial_t f = F(f),$$

koja poseduje jedinstveno stanje ravnotežno stanje  $f_\infty$  i zadovoljava zakon održanja mase. Metod se sastoji iz nalaženja sledećih koraka:

- određivanje entropijske funkcije  $E(f)$  koja ima svojstvo

$$E(f) - E(f_\infty) \leq C \|f - f_\infty\|,$$

- određivanje nenegativne funkcije entropijske disipacije

$$D(f) = -\frac{d}{dt}E(f) \geq 0,$$

- procena entropijske nejednakosti oblika

$$D(f) \geq \lambda(E(f) - E(f_\infty)),$$

koja važi za svako rešenje  $f$  evolucionne jednačine.

Ako su navedeni koraci uspešno sprovedeni, tada primenom Gronvalove leme imamo da  $E(f)(t) \rightarrow E(f_\infty)$  eksponencijalno. Korišćenjem poznate nejednakosti:

$$x \log \frac{x}{y} - x + y \geq (\sqrt{x} - \sqrt{y})^2,$$

dobijamo da  $f(t) \rightarrow f_\infty$  takođe eksponencijalno.

Za izbor entropijske funkcije ne postoji opšti postupak. Njen oblik zavisi od strukture jednačine koja se analizira. Navešćemo zato neke od uobičajenih entropijskih funkcija koje se koriste u primeni entropijskog metoda.

- *Logaritamska entropijska funkcija*

$$E(f|f_\infty) = f \log \frac{f}{f_\infty} - f + f_\infty,$$

koju koristimo kod rešavanja nelinearnog sistema jednačina reakcije difuzije;

- *Kvadratna entropijska funkcija*

$$E(f|f_\infty) = \frac{(f - f_\infty)^2}{f_\infty},$$

koju koristimo kod rešavanja linearnog sistema jednačina reakcije difuzije.

U nastavku ćemo objasniti kako entropijski metod funkcioniše prilikom primene na linearni sistem jednačina reakcije difuzije gde, kao što smo rekli, koristimo kvadratnu entropijsku funkciju.



## 2.2 Primena entropijskog metoda na linearni sistem jednačina reakcije difuzije

Ovde ćemo predstaviti osnovnu ideju entropijskog metoda na linearni sistem PDJ. U nastavku ćemo videti da je nemoguće to učiniti za sisteme PDJ-a reda većeg od 3, pa čitav problem svodimo na sistem ODJ, izuzimajući pritom difuzioni faktor.

Kada govorimo o linearnom sistemu PDJ, važno je naglasiti da on poseduje jednu dobru osobinu. Naime, bilo koja funkcija  $\Phi \in C^2$  koja zadovoljava uslove:

- $\Phi$  je konveksna funkcija;
- $\Phi(0) = 0$ ;
- $\Phi(x) > 0 \iff x > 0$ ;

može predstavljati entropijsku funkciju. Nakon primene test funkcije na sistem jednačina (1.11), tačnije:

$$\begin{aligned} u_t - d_a \Delta u &= -\alpha^2 u + \alpha \beta v, \\ v_t - d_b \Delta v &= \alpha \beta u - \beta^2 v, \end{aligned}$$

funkcijom  $\Phi'$  i integracijom na oblasti  $\Omega$ , imamo:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} u_t \Phi'(u) dx - d_a \int_{\Omega} \Phi'(u) \Delta u dx &= \int_{\Omega} \Phi'(u) (-\alpha^2 u + \alpha \beta v) dx \\ \int_{\Omega} v_t \Phi'(v) dx - d_b \int_{\Omega} \Phi'(v) \Delta v dx &= \int_{\Omega} \Phi'(v) (\alpha \beta u - \beta^2 v) dx \end{aligned}$$

Tada, koristeći parcijalnu intergaciju nad skupom  $\Omega$  i sumiranjem prethodnih jednakosti, dobijamo:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} (\Phi(u) + \Phi(v)) dx &= -d_a \int_{\Omega} \Phi''(u) |\nabla u|^2 dx - d_b \int_{\Omega} \Phi''(v) |\nabla v|^2 dx \\ &\quad - \int_{\Omega} (\alpha u - \beta v) (\alpha \Phi'(u) - \beta \Phi'(v)) dx \leq 0, \end{aligned}$$

a znak poslednjeg izraza sledi iz monotonosti funkcije  $\Phi'$ . Uvodeći sledeće oznake za delove od kojih se entropijski metod sastoji

- *Entropijska funkcija:*

$$E(u, v) = \int_{\Omega} (\Phi(u) + \Phi(v)) dx,$$

- *Entropijska disipacija:*

$$\begin{aligned} D(u, v) &= d_a \int_{\Omega} \Phi''(u) |\nabla u|^2 dx + d_b \int_{\Omega} \Phi''(v) |\nabla v|^2 dx \\ &\quad + \int_{\Omega} (\alpha u - \beta v) (\alpha \Phi'(u) - \beta \Phi'(v)) dx, \end{aligned}$$

imamo sledeću ocenu:

$$\frac{d}{dt}E(u, v) = -D(u, v) \leq 0.$$

Ako prethodne korake primenimo koristeći za funkciju  $\Phi(u) = \frac{u^2}{2}$ ,  $\Phi'(u) = u$ , kao najviše korišćenu funkciju za linearni sistem jednačina reakcija difuzije, dobijamo:

$$\frac{d}{dt} \frac{1}{2} \int_{\Omega} (u^2 + v^2) dx = -d_a \int_{\Omega} |\nabla u|^2 dx - d_b \int_{\Omega} |\nabla v|^2 dx - \int_{\Omega} (\alpha u - \beta v)^2 dx.$$

Sada želimo da uspostavimo entropijsku nejednakost sa ciljem da nađemo konstantu  $c$  koja zavisi samo od stohiometrijskih i difuzionih koeficijenata, kao i početne mase  $M$ , tako da važi:

$$D(u, v) \geq C [E(u, v) - E(u_{\infty}, v_{\infty})] \quad (2.4)$$

Možemo videti da nejednakost (2.4) može važiti samo u slučaju ako važe zakoni održanja mase. Inače, skup stanja za koje važi  $D(u, v) = 0$ , a to je  $\alpha u = \beta v$ , je veći od skupa za koji važi  $E(u, v) = E(u_{\infty}, v_{\infty})$  koji jedino zadovoljava stanje ravnoteže  $(u_{\infty}, v_{\infty})$ .

Obezbeđujući tako entropijsku nejednakost, možemo da izvršimo sledeću procenu:

$$\frac{d}{dt}(E(u, v) - E(u_{\infty}, v_{\infty})) = -D(u, v) \leq -C(E(u, v) - E(u_{\infty}, v_{\infty})),$$

iz koje, zbog Gronvalove nejednakosti, sledi eksponencijalna konvergencija ka ravnotežnoj tački:

$$E(u, v) - E(u_{\infty}, v_{\infty}) \leq e^{-Ct}(E(u_0, v_0) - E(u_{\infty}, v_{\infty})) \quad (2.5)$$

U slučaju kada koristimo kvadratnu entropiju, entropijsku nejednakost iz (2.5) čitamo kao:

$$d_a \int_{\Omega} |\nabla u|^2 dx + d_b \int_{\Omega} |\nabla v|^2 dx + \int_{\Omega} (\alpha u - \beta v)^2 dx \geq \frac{C}{2} \int_{\Omega} (u^2 - u_{\infty}^2 + v^2 - v_{\infty}^2) dx$$

što predstavlja ocenu entropijske nejednakosti za slučaj gde je početna masa nenegativna ( $M \geq 0$ ) i gde su početni uslovi  $u_0, v_0 \in L_+^{\infty}$ . U slučaju kada je početna masa jednaka nuli ( $M = 0$ ), što se pojavljuje kod razmatranja linearizovane verzije modelovanog nelinearnog sistema, ocena entropijske nejednakosti je uprošćena, i svodi se na:

$$d_a \int_{\Omega} |\nabla u|^2 dx + d_b \int_{\Omega} |\nabla v|^2 dx + \int_{\Omega} (\alpha u - \beta v)^2 dx \geq \frac{C}{2} \int_{\Omega} (u^2 + v^2) dx,$$

gde smo uzeli u obzir početne uslove  $u_0, v_0 \in L^{\infty}$ .

## 2.3 Furijeova analiza za domene uopštenog tipa

U ovom delu ćemo obraditi primer (1.11)

$$u_t - d_a \Delta u = -\alpha^2 u + \alpha \beta v$$

$$v_t - d_b \Delta v = \alpha \beta u - \beta^2 v$$

na uopštenom domenu  $\Omega$ . Za rešavanje ćemo koristiti Furijeovu metodu razdvajanja promenljivih, kao i poznavanje Laplasovog karakterističnog problema.

U nastavku sa  $\lambda_k$  i  $\varphi_k$  označavamo karakteristične korene i karakteristične funkcije Laplasovog operatora na ograničenom domenu  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ , sa homogenim Nojmanovim graničnim uslovima:

$$\begin{aligned} \Delta \varphi_k &= \lambda_k \varphi_k & \text{na } \Omega \\ n \cdot \nabla \varphi_k &= 0 & \text{na } \partial\Omega \end{aligned} \quad (2.6)$$

gde je  $k = 0, 1, \dots$ . Karakteristične funkcije treba da budu normalizovane i to tako da važi:

$$\int_{\Omega} \varphi_k \varphi_{k'} = \delta_{kk'}, \quad \int_{\Omega} \nabla \varphi_k \cdot \nabla \varphi_{k'} = -\lambda_k \delta_{kk'},$$

gde ortogonalnost gradijenata karakterističnih funkcija  $\nabla \varphi_k$  može lako biti testirana funkcijom  $\varphi_{k'}$  na koju zatim možemo primeniti parcijalnu integraciju. Povrh toga, možemo primetiti da usled homogenih Nojmanovih graničnih uslova imamo:

$$\lambda_0 = 0 \quad \text{i} \quad \varphi_0 = |\Omega|^{-1},$$

i da za svako  $\lambda_k < 0$ , gde je  $k \geq 0$ , i sve funkcije  $\varphi_k$ , gde je  $k \geq 1$ , imamo da važi sledeće:

$$\int_{\Omega} \varphi_k dx = |\Omega| \int_{\Omega} \varphi_k \varphi_0 dx = 0, \quad k = 1, 2, \dots$$

Pretpostavljajući rešenje u obliku Furijeovih redova  $u = \sum_{k=0}^{\infty} u^k(t) \varphi_k$ ,  $v = \sum_{k=0}^{\infty} v^k(t) \varphi_k$ , i uvrštavajući ga u početni sistem (2.6), svodimo problem na sledeći oblik:

$$\partial_t \begin{pmatrix} u^k \\ v^k \end{pmatrix} = A_k \begin{pmatrix} u^k \\ v^k \end{pmatrix}, \quad A_k := \begin{pmatrix} d_a \lambda_k - \alpha^2 & \alpha \beta \\ \alpha \beta & d_b \lambda_k - \beta^2 \end{pmatrix}, \quad k = 0, 1, \dots$$

Za fiksirano  $k \in \mathbb{N}_0$ , karakteristični problem za matrice  $A_k$  vodi ka paru karakterističnih korena  $\mu_i$  i karakterističnih vektora  $e_i$ ,  $i = 1, 2$ :

$$A_k \cdot e_1(k) = \mu_1(k) e_1(k), \quad A_k \cdot e_2(k) = \mu_2(k) e_2(k), \quad k = 0, 1, \dots$$

Za karakteristične korene dobijamo:

$$\mu_1(0) = 0, \quad \mu_2(0) = -(\alpha^2 + \beta^2) < 0,$$

odnosno, za  $k = 1, 2, \dots$ :

$$\mu_1(k) = \frac{d_a + d_b}{2} \lambda_k - \frac{\alpha^2 + \beta^2}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} (-\lambda_k (d_a - d_b) + \alpha^2 - \beta^2)^2 + \alpha^2 \beta^2} < 0,$$

$$\mu_2(k) = \frac{d_a + d_b}{2} \lambda_k - \frac{\alpha^2 + \beta^2}{2} - \sqrt{\frac{1}{4}(-\lambda_k(d_a - d_b) + \alpha^2 - \beta^2)^2 + \alpha^2 \beta^2} < 0.$$

U opštem slučaju važi da  $\mu_2(k) < \mu_1(k)$  i  $\mu_1(k+1) < \mu_1(k)$  za svako  $k \in \mathbb{N}$ . Za par karakterističnih vektora  $e_1, e_2$  imamo da važi  $\|e_1(k)\|_2 = 1 = \|e_2(k)\|_2$  i  $e_1(k) \cdot e_2(k) = 0$  i  $e_1(k) \cdot e_2(k) = 0$ . Konkretno imamo:

$$e_1(0) = \frac{1}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix}, \quad e_2(0) = \frac{1}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \begin{pmatrix} -\alpha \\ \beta \end{pmatrix},$$

a za  $k = 1, 2, \dots$  i za  $i = 1, 2$  važi:

$$e_i(k) \sim \begin{pmatrix} \frac{\mu_i(k) - d_b \lambda_k + \beta^2}{\alpha \beta} \\ 1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} \frac{\alpha \beta}{\mu_i(k) - d_a \lambda_k + \alpha^2} \\ 1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\mu_i(k) - d_a \lambda_k + \alpha^2}{\alpha \beta} \end{pmatrix}$$

usled normalizacije.

Sada možemo izraziti rešenja sistema (2.6) u terminima karakterističnih funkcija  $\varphi_k$  i karakterističnih vektora  $e_i(k), i = 1, 2$  za  $k \in \mathbb{N}_0$  u sledećem obliku:

$$\begin{pmatrix} u(t) \\ v(t) \end{pmatrix} = \sum_{k=0}^{\infty} [c^k(t)e_1(k) + d^k(t)e_2(k)] \varphi_k(t)$$

gde su koeficijenti  $c^k, d^k$  za svako  $k \in \mathbb{N}_0$  sledećeg oblika:

$$c^k(t) = c^k(0)e^{\mu_1(k)t},$$

$$d^k(t) = d^k(0)e^{\mu_2(k)t}.$$

### Primer 1 Jednačine reakcije difuzije.

Posmatrajmo sistem jednačina (1.11) iz ovog poglavlja

$$u_t - d_a \Delta u = -\alpha^2 u + \alpha \beta v$$

$$v_t - d_b \Delta v = \alpha \beta u - \beta^2 v$$

na uopštenom domenu  $\Omega$ . Naš glavni cilj je da uspostavimo entropijsku nejednakost i da odredimo optimalnu vrednost konstante  $\lambda$ , tačnije da važi:

$$D(u, v) \geq \lambda(E(u, v) - E(u_\infty, v_\infty)),$$

$$\lambda \leq \frac{D(u, v)}{E(u, v) - E(u_\infty, v_\infty)}.$$

U ovom slučaju za entropijsku funkciju usvajamo kvadratnu funkciju oblika  $\Phi(u) = \frac{u^2}{2}$ . Kako bismo došli do tražene konstante  $\lambda$ , potrebno je da izvršimo

minimizaciju razlomka relativne entropijske disipacije, što predstavlja desni deo prethodne nejednakosti:

$$I = \min_{\beta u^* + \alpha v^* = 0} \left[ \frac{d_a \int_{\Omega} |\nabla u|^2 dx + d_b \int_{\Omega} |\nabla v|^2 dx + \int_{\Omega} (\alpha u - \beta v)^2 dx}{\int_{\Omega} u^2 + v^2} \right]$$

gde je zadovoljen zakon održanja mase  $\beta u^* + \alpha v^* = 0$ , za  $u, v \in C^\infty$ . Sada ćemo izračunati potrebne izraze za proizvoljnu vektor funkciju  $(u, v)$  sa koeficijentima  $c^k$  i  $d^k$ . Koristeći osobinu ortogonalnosti karakterističnih funkcija  $c^k$  i  $d^k$  dobijamo:

$$\int_{\Omega} u^2 + v^2 = \sum_{k=0}^{\infty} [c^k e_1(k) + d^k e_2(k)]^2 = \sum_{k=0}^{\infty} (c^k)^2 + (d^k)^2$$

Zatim, imamo da je:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} |\nabla u|^2 &= \sum_{k=0}^{\infty} [c^k e_{1,1}(k) + d^k e_{2,1}(k)]^2 \int_{\Omega} |\nabla \varphi_k|^2 \\ \int_{\Omega} |\nabla v|^2 &= \sum_{k=0}^{\infty} [c^k e_{1,2}(k) + d^k e_{2,2}(k)]^2 \int_{\Omega} |\nabla \varphi_k|^2 \end{aligned}$$

Pozivajući se na to da je  $\int_{\Omega} |\nabla \varphi_k|^2 = -\lambda_k$ , možemo uočiti sledeće:

$$\begin{aligned} &d_a \int_{\Omega} |\nabla u|^2 + d_b \int_{\Omega} |\nabla v|^2 = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} [c^k e_1(k) + d^k e_2(k)]^T \cdot \begin{pmatrix} -d_a \lambda_k & 0 \\ 0 & -d_b \lambda_k \end{pmatrix} \cdot [c^k e_1(k) + d^k e_2(k)]. \end{aligned}$$

Štaviše, imamo da važi:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (\alpha u - \beta v)^2 dx &= \int_{\Omega} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}^T \cdot \begin{pmatrix} \alpha^2 & -\alpha\beta \\ -\alpha\beta & \beta^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} [c^k e_1(k) + d^k e_2(k)]^T \cdot \begin{pmatrix} \alpha^2 & -\alpha\beta \\ -\alpha\beta & \beta^2 \end{pmatrix} \cdot [c^k e_1(k) + d^k e_2(k)] \end{aligned}$$

Kombinujući poslednja dva izraza određujemo brojilac iz izraza za  $I$  na sledeći način:

$$\begin{aligned} &d_a \int_{\Omega} |\nabla u|^2 dx + d_b \int_{\Omega} |\nabla v|^2 dx + \int_{\Omega} (\alpha u - \beta v)^2 dx \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} [c^k e_1(k) + d^k e_2(k)]^T \cdot (-A_k) \cdot [c^k e_1(k) + d^k e_2(k)] \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \begin{pmatrix} c^k \\ d^k \end{pmatrix}^T \cdot \begin{pmatrix} -\mu_1(k) & 0 \\ 0 & -\mu_2(k) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c^k \\ d^k \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Stoga, usled uslova zakona održanja

$$0 = \int_{\Omega} \beta u + \alpha v = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} \int_{\Omega} e_1(0) \cdot \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix},$$

važi da je  $c^0 = 0$ , pa imamo:

$$I = \min_{c^0=0} \left[ \frac{\sum_{k=0}^{\infty} -\mu_1(k)(c^k)^2 - \mu_2(k)(d^k)^2}{\sum_{k=0}^{\infty} (c^k)^2 + (d^k)^2} \right].$$

Neka su sada  $l_1$  i  $l_2$  najmanje vrednosti za koje važi da su  $c^{l_1} \neq 0$  i  $c^{l_2} \neq 0$ , dok  $c^k = 0$  za  $k = 0, \dots, l_1 - 1$  i  $c^k = 0$  za  $k = 0, \dots, l_2 - 1$ . Kako je  $\mu_1(l_1 + j) < \mu_1(l_1) < 0$  i  $\mu_1(l_2 + j) < \mu_1(l_2)$  za svako  $j \geq 1$ , dobijamo sledeću ocenu:

$$\begin{aligned} I &= \min_{c^0=0} \left[ \frac{\sum_{k=l_1}^{\infty} -\mu_1(k)(c^k)^2 + \sum_{k=l_2}^{\infty} -\mu_2(k)(d^k)^2}{\sum_{k=l_1}^{\infty} (c^k)^2 + \sum_{k=l_2}^{\infty} (d^k)^2} \right] \\ &\geq \min[-\mu_1(l_1), -\mu_2(l_2)] \\ &> 0. \end{aligned}$$

Pod pretpostavkom da su  $c^0 = 0$ ,  $d^0 \neq 0$  i  $c^k \neq 0$ ,  $d^k \neq 0$  za  $k = 1, 2, \dots$ , zaključujemo da je:

$$I \geq \min[-\mu_1(1), -\mu_2(0)].$$

Dobijeni opseg za izraz  $I$  predstavlja optimalne vrednosti za potencijalnu stopu konvergencije rešenja. Što je vrednost manja, imaćemo brzu konvergenciju. ■

**Napomena 2** U najboljem mogućem slučaju bismo imali da je

$$I = \min[-\mu_1(1), -\mu_2(0)].$$

Tada bi stopa konvergencije biti ista kao i u slučaju iz odeljka 1.5, gde smo primenili tehniku linearizacije, samo sa skaliranim domenom  $\Omega$ . Koristeći oba pristupa, procena stope konvergencije je ista i na nama je da odlučimo koji ćemo metod koristiti.

Entropijski metod se bazira na funkcionalnoj nejednakosti (entropijska nejednakost) koja obično nije povezana sa početnim evolucionim sistemom. Ta osobina metod čini teškim za generalizaciju. Kada je jednom dokazana, ista nejednakost može biti korišćena i za neki drugi sistem koji ima na neki način sličnu entropijsku funkciju i entropijsku disipaciju.

Takođe, entropijski metod nam opisuje ponašanje rešenja na celom domenu, dok kod metode linearizacije ponašanje rešenja možemo oceniti samo u nekoj „maloj”, odnosno ograničenijoj okolini tačke ravnoteže. To predstavlja najveću razliku između ta dva metoda.

## 2.4 Bakri-Emerijev metod

Godine 1958. naučnici D. Bakry i M. Emery pronašli su jednostavan način za dokazivanje entropijske nejednakosti [3]. Međutim, taj postupak je bio primenljiv na

ograničen skup sistema diferencijalni jednačina. Naime, za funkciju  $\Phi$  iz Definicije 6 izabrali su funkciju  $\Phi(x) = x$ . Njihova ključna ideja je bila da izvrše procenu drugog izvoda funkcije entropije, tačnije prvog izvoda funkcije koja predstavlja entropijsku disipaciju. Pokazali su da pod određenim uslovima, odnosno za određene sisteme, važi sledeća nejednakost:

$$\frac{d}{dt}D(f) \leq -k D(f), \quad (2.7)$$

koja je održiva zbog konstante  $k > 0$ .

Ideja Bakri-Emerijevog metoda učinila je lakšim računanje brzine konvergenije sistema ravnotežnom stanju. Ako možemo uspostaviti nejednakost u obliku (2.7), primenjujući pritom već viđene korake iz primera jednačine provođenja toplote dolazimo do rešenja, tačnije do eksplicitno izračunljive stope konvergenije polaznog sistema.

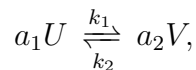
Važno je istaći da je primena Bakri-Emerijevog metoda pri rešavanju sistema parcijalnih diferencijalnih jednačina izuzetno složena. Za sisteme reda većeg od 3, dokazano je u radu [8] da je veoma robusna, gotovo nemoguća kalkulacija stope konvergenije sistema.

### 2.4.1 Primeri primene Bakri-Emerijevog metoda

U nastavku ćemo primenu Bakri-Emerijevog metoda ilustrovati na nekoliko primera. Budući da je njegova primena u analizi PDJ složena, ograničićemo se na analizu sistema ODJ. Iako je time primena Bakri-Emerijevog metoda značajno limitirana, treba imati na umu da se sistemi jednačina reakcije difuzije, u slučaju velikih vrednosti difuzionih konstanti, posle tranzijentnog inicijalnog vremenskog intervala mogu dobro aproksimirati sistemima ODJ u vremenskom domenu.

**Primer 2** *Primena entropijskog metoda na sistem ODJ.*

Posmatrajmo reverzibilnu reakciju sa jednim reaktantom i jednim proizvodom reakcije:



sa direktnim i povratnim konstantama brzine reakcije  $k_1 = k_2 = 1$ , a parametri  $a_1, a_2$  predstavljaju stohiometrijske koeficijente. Označimo sa  $u(t), v(t)$  koncentracije supstanci  $U, V$  respektivno. Koristeći zakon dejstva masa, reakciju možemo opisati nelinearnim sistemom ODJ:

$$\begin{aligned} u' &= -a_1u^{a_1} + a_1v^{a_2} \\ v' &= a_2u^{a_1} - a_2v^{a_2} \end{aligned} \quad t > 0.$$

sa početnim uslovima:

$$u(0) = u_0 > 0, \quad v(0) = v_0 > 0.$$

Uočimo da prethodni sistem zadovoljava zakon održanja masa:

$$a_2u(t) + a_1v(t) = a_2u(0) + a_1v(0) =: M > 0, \quad \forall t > 0$$

gde sa  $M$  označavamo početnu masu. Takođe, sistem poseduje jedinstveno ravnotežno stanje  $(u_\infty, v_\infty)$  koje zadovoljava zakon održanja ukupne mase, kao i uslov partikularnog zakona održanja mase:

$$a_2 u_\infty + a_1 v_\infty = M,$$

$$u_\infty^{a_1} = v_\infty^{a_2}.$$

Možemo primetiti da bi izostavljanjem uslova partikularnog zakona održanja mase, navedeni sistem bi imao beskonačno mnogo stacionarnih stanja. Postavlja se pitanje da li koncentracije  $u$  i  $v$  konvergiraju stanju ravnoteže kada  $t \rightarrow +\infty$ .

**Teorema 2** *Postoji konstanta  $\lambda > 0$  koja zavisi od početne mase  $M$ , tako da vazi:*

$$|u(t) - u_\infty| + |v(t) - v_\infty| \leq e^{-\lambda t} (|u_0 - u_\infty|^2 + |v_0 - v_\infty|^2)$$

**Dokaz.** Množeći jednačine sistema sa funkcijama  $\log(u)$  i  $\log(v)$  respektivno, dobijamo:

$$\begin{aligned} (u \log u - u)_t &= -a_1 (u^{a_1} - v^{a_2}) \log u, \\ (v \log v - v)_t &= a_2 (u^{a_1} - v^{a_2}) \log v. \end{aligned}$$

Sumirajući date jednačine dobijamo:

$$\frac{d}{dt} (u \log u - u + v \log v - v) = -(u^{a_1} - v^{a_2}) \log \frac{u^{a_1}}{v^{a_2}},$$

pa iz datog izraza izdvajamo i definišemo entropijsku funkciju i entropijsku disipaciju na sledeći način:

- *Entropijska funkcija:*  $E(u, v) := u \log u - u + v \log v - v,$
- *Entropijska disipacija:*  $D(u, v) := (u^{a_1} - v^{a_2}) \log \frac{u^{a_1}}{v^{a_2}}.$

Primetimo da je  $D(u, v) = 0 \iff (u, v) = (u_\infty, v_\infty)$ , što nam daje nadu da će konvergencija moći da se dokaže. Sada, saglasno definiciji funkcije entropije i entropijske nejednakosti, dobijamo:

$$-\frac{d}{dt} E(u, v) = D(u, v) \leq 0.$$

Da bismo pokazali konvergenciju ka tački ravnoteže, potrebne su nam dve veoma korisne ocene koje se odnose na relativnu entropiju:

1.  $E(u, v) - E(u_\infty, v_\infty) = u \log \frac{u}{u_\infty} - u + u_\infty + v \log \frac{v}{v_\infty} - v + v_\infty;$
2.  $E(u, v) - E(u_\infty, v_\infty) \geq C(|u - u_\infty|^2 + |v - v_\infty|^2).$



Druga po redu ocena nam daje konvergenciju entropijske funkcije  $E(u, v)(t) \rightarrow E(u_\infty, v_\infty)$  kada  $t \rightarrow +\infty$  i posle čega direktno sledi i konvergencija rešenja  $((u, v) \rightarrow (u_\infty, v_\infty))$ . Pošto znamo da važi:

$$\frac{d}{dt}(E(u, v) - E(u_\infty, v_\infty)) = -D(u, v),$$

želimo da dokažemo entropijsku nejednakost sledećeg oblika:

$$D(u, v) \geq k(E(u, v) - E(u_\infty, v_\infty)).$$

Kako bismo bismo dokazali poslednju nejednakost, koristićemo ideju Bakri-Emerijevog pristupa – ispitivaćemo ponašanje drugog izvoda relativne entropije  $E(u, v) - E(u_\infty, v_\infty)$ , odnosno ponašanje prvog izvoda entropijske disipacije  $D(u, v)$ . Naš cilj je da nađemo odnos između entropijske disipacije i njenog prvog izvoda, kako bismo mogli da lakom primenom Gronvalove leme dobijemo eksplicitnu stopu konvergencije rešenja.

Nakon izračunavanja prvog izvoda funkcije  $D(u, v)$  u nadi da možemo da primenimo Bakri-Emerijev metod, možemo napraviti sledeće ocene:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}D(u, v) &= -(u^{a_1} - v^{a_2})(a_1^2 u^{a_1-1} + a_2^2 v^{a_2-1}) \log \frac{u^{a_1}}{v^{a_2}} - (u^{a_1} - v^{a_2})^2 \left( \frac{a_1^2}{u} + \frac{a_2^2}{v} \right) \\ &\leq -k D(u, v), \end{aligned} \quad (2.8)$$

gde je  $c > 0$ . Izraz  $a_1^2 u^{a_1-1} + a_2^2 v^{a_2-1}$  ne može biti nula, osim u slučaju kada su  $u$  i  $v$  jednaki nuli istovremeno, što predstavlja trivijalan slučaj. Kako smo u postavci ovog primera uzeli u obzir striktno pozitivnu početnu masu ( $M > 0$ ), izbegli smo mogućnost trivijalne situacije.

Primenom Gronvalove leme na nejednakost (2.8), dobijamo:

$$D(u, v) \leq e^{-kt} D(u, v) \rightarrow 0 \quad \text{kada} \quad t \rightarrow +\infty.$$

Uzimajući u obzir nejednakost (2.8)

$$\frac{d}{dt}D(u, v) \leq -k D(u, v)$$

naš sledeći zadatak je da integralimo dati izraz od  $t$  do  $+\infty$ . Koristeći činjenicu da je  $D(u, v)(+\infty) = 0$  i da važi  $E(u, v)(+\infty) = E(u_\infty, v_\infty)$ , dobijamo sledeće:

$$-D(u, v) \leq -k(E(u, v) + E(u_\infty, v_\infty)),$$

odnosno:

$$\frac{d}{dt}(E(u, v) - E(u_\infty, v_\infty)) \leq -k(E(u, v) - E(u_\infty, v_\infty)).$$

Primenom Gronvalove leme imamo:

$$(E(u, v) - E(u_\infty, v_\infty)) \leq e^{-kt}(E(u_0, v_0) - E(u_\infty, v_\infty))$$

što nam daje konvergenciju entropijske funkcije  $E(u, v) \rightarrow E(u_\infty, v_\infty)$  kad  $t \rightarrow +\infty$ . Na samom kraju, primenom procene 2 za relativnu entropiju, dobijamo konvergenciju rešenja sa konstantnom stopom  $\alpha = \frac{k}{2}$  gde pritom znamo da je  $0 < k < 1$ :

$$(u, v) \rightarrow (u_\infty, v_\infty). \quad \blacksquare$$

**Napomena 3** Razmotrimo specijalan slučaj prethodnog primera, gde su stohiometrijski koeficijenti  $a_1 = 2$  i  $a_2 = 1$ . Želimo sada da pokažemo da u tom slučaju možemo odrediti egzaktnu konstantu konvergencije rešenja. Posle uvrštavanja vrednosti za  $a_1$  i  $a_2$  u (2.8), dobijamo:

$$\frac{d}{dt}D(u, v) = -(4u + 1)D(u, v) - (u^2 - v)^2\left(\frac{4}{u} + \frac{1}{v}\right) \leq -1 \cdot D(u, v) \quad (2.9)$$

Koristeći činjenicu da je izraz  $4u + 1 \geq 1$  i da je tada  $(u^2 - v)^2\left(\frac{4}{u} + \frac{1}{v}\right) > 0$ , u stanju smo da izvršimo sledeću procenu:

$$\frac{d}{dt}D(u, v) \leq -1 \cdot D(u, v). \quad (2.10)$$

Prateći korake iz primera (2.8), dolazimo do zaključka da funkcija entropije konvergira ka svom stanju ravnoteže sa konstantom 1, kada vremenska promenljiva  $t$  teži u beskonačnost. Nakon primene Cizar-Kilbak-Pinkserove nejednakosti (Lema 2), vidimo da rešenje  $(u, v)$  početnog sistema konvergira ka tački ravnoteže  $(u_\infty, v_\infty)$  sa stopom konvergencije  $\frac{1}{2}$ .

U ovom delu smo videli da je korišćenjem Bakri-Emerijevog metoda moguće doći do entropijske nejednakosti na relativno jednostavan način. Uopšteno govoreći, to predstavlja najteži, ključni korak u dolaženju do rešenja. U narednim primerima, imaćemo mogućnost da vidimo kako se proces komplikuje, i kako samo u malom broju slučajeva možemo doći do rešenja koristeći pomenuti metod.

**Napomena 4** Prirodno je razmišljati o primeni Bakri-Emerijevog metoda na reakcije opisane sistemom parcijalnih diferencijalnih jednačina, uključujući difuziju u proces. U tom slučaju, koncentracije neće zavisiti samo od vremenske, već i od prostorne promenljive. Tada imamo sledeći sistem:

$$\begin{aligned} \partial_t u(x, t) - d_u \Delta u(x, t) &= -a_1(u(x, t)^{a_1} - v(x, t)^{a_2}) \\ \partial_t v(x, t) - d_v \Delta v(x, t) &= a_2(u(x, t)^{a_1} - v(x, t)^{a_2}) \end{aligned}$$

Usled pojave prostorne promenljive  $x$ , Bakri-Emerijev metod nam nije od pomoći – previše je komplikovano izračunati stopu konvergencije rešenja sistema. Međutim, razvijen je postupak izračunavanja odgovarajuće entropijske nejednakosti za sisteme reda 3, gde su prvi rezultati dati u radu [8].

**Primer 3** *Reverzibilna hemijska reakcija.*

Posmatrajmo sada reverzibilnu hemijsku reakciju:



Kao i u prethodnom primeru, pretpostavljamo da su direktna i povratna konstanta brzine reakcije jednake 1. Označimo opet sa  $a(t)$ ,  $b(t)$  i  $c(t)$  koncentracije supstanci  $A$ ,  $B$  i  $C$  u trenutku  $t$  respektivno. Ovde pretpostavljamo da su svi stohiometrijski

koeficijenti jednaki 1. Nakon modelovanja primenom zakona dejstva masa, dobijamo  $3 \times 3$  sistem ODJ:

$$\begin{aligned} \dot{a}(t) &= -a(t)b(t) + c(t) \\ \dot{b}(t) &= -a(t)b(t) + c(t) \\ \dot{c}(t) &= a(t)b(t) - c(t) \end{aligned} \quad (2.11)$$

kom pridružujemo početne uslove:

$$a(0) = a_0 > 0, \quad b(0) = b_0 > 0, \quad c(0) = c_0 > 0,$$

i koji zadovoljava zakon održanja ukupne mase:

$$\begin{aligned} a(t) + c(t) &= a(0) + c(0) =: M_1 > 0, \\ b(t) + c(t) &= b(0) + c(0) =: M_2 > 0, \end{aligned} \quad (2.12)$$

gde  $M_1$  i  $M_2$  predstavljaju početne mase, koje su usvojene kao pozitivne da bi se izbegao trivijalan slučaj. Takođe, kao u prethodnom primeru, sistem ima jedinstveno stanje ravnoteže  $(a_\infty, b_\infty, c_\infty)$  koje zadovoljava partikularni zakon održanja mase, kao i zakon održanja ukupne mase:

$$\begin{aligned} a_\infty + c_\infty &= M_1 \\ b_\infty + c_\infty &= M_2 \\ a_\infty \cdot b_\infty &= c_\infty \end{aligned}$$

**Teorema 3** *Postoji eksplicitna konstanta  $\lambda > 0$  koja zavisi od početne mase  $M$ , tako da važi:*

$$|a(t) - a_\infty| + |b(t) - b_\infty| + |c(t) - c_\infty| \leq e^{-\lambda t} (|a_0 - a_\infty|^2 + |b_0 - b_\infty|^2 + |c_0 - c_\infty|^2)$$

**Dokaz.** Množeći jednačine sistema (2.11) funkcijama  $\log a$ ,  $\log b$  i  $\log c$ , respektivno, dobijamo:

$$\begin{aligned} (a \log a - a)_t &= (-ab + c) \log a, \\ (b \log b - b)_t &= (-ab + c) \log b, \\ (c \log c - c)_t &= (ab - c) \log c. \end{aligned}$$

Sumirajući sve jednačine, dobijamo:

$$\frac{d}{dt} (a \log a - a + b \log b - b + c \log c - c) = -(ab - c) \log \frac{ab}{c},$$

pa možemo da definišemo funkciju entropije i entropijsku disipaciju na sledeći način:

- *Entropijska funkcija:*  $E(a, b, c) = a \log a - a + b \log b - b + c \log c - c$ ,
- *Entropijska disipacija:*  $D(a, b, c) = (ab - c) \log \frac{ab}{c}$ .

Saglasno tome, dobijamo sledeću entropijsku nejednakost:

$$-\frac{d}{dt}E(a, b, c) = D(a, b, c) \leq 0.$$

Opet će, kao i u prethodnom primeru, biti potrebno da imamo ocene koje se tiču relativne entropije, koje u kasnijem delu dokaza koristimo, i to:

1.  $E(a, b, c) - E(a_\infty, b_\infty, c_\infty) = a \log \frac{a}{a_\infty} - a + a_\infty + b \log \frac{b}{b_\infty} - b + b_\infty + c \log \frac{c}{c_\infty} - c + c_\infty$ ,
2.  $E(a, b, c) - E(a_\infty, b_\infty, c_\infty) \geq C(|a - a_\infty|^2 + |b - b_\infty|^2 + |c - c_\infty|^2)$ .

Date ocene važe samo ako važi i zakon održanja mase i poznata nejednakost:

$$x \log \frac{x}{y} - x + y \geq (\sqrt{x} - \sqrt{y})^2.$$

Znamo da važi:

$$\frac{d}{dt}(E(a, b, c) - E(a_\infty, b_\infty, c_\infty)) = -D(a, b, c),$$

a želimo da dokažemo entropijsku nejednakost:

$$D(a, b, c) \geq k(E(a, b, c) - E(a_\infty, b_\infty, c_\infty)),$$

koja zadovoljava zakon održanje mase, tačnije izraz (2.12). Da bismo to učinili, koristimo ideju Bakri-Emerija, gde je potrebno da ispitamo ponašanje drugog izvoda relativne entropije  $E(a, b, c) - E(a_\infty, b_\infty, c_\infty)$  ili, ekvivalentno, prvog izvoda entropijske disipacije  $D(a, b, c)$ . Računanjem prvog izvoda funkcije  $D(a, b, c)$ , dobijamo:

$$\frac{d}{dt}D(a, b, c) = -(a + b + 1)(ab - c) \log \frac{ab}{c} - (ab - c)^2 \left( \frac{1}{a} + \frac{1}{b} + \frac{1}{c} \right). \quad (2.13)$$

Naš motiv, kao što smo već i napominjali, jeste dobijanje sledeće nejednakosti:

$$\frac{d}{dt}D(a, b, c) \leq -k D(a, b, c).$$

U Napomeni 3 imaćemo prilike da vidimo postojanje različitih slučajeva, u zavisnosti od izbora konstante  $k$ , koja nam će nam sigurno dati najbolju moguću procenu entropijske nejednakosti, a samim tim i najbolju moguću stopu konvergencije.

Primenom Gronvalove leme na dobijenu nejednakost možemo uočiti da funkcija koja predstavlja entropijsku disipaciju asimptotski teži nuli kad  $t$  neograničeno raste:

$$D(a, b, c) \leq e^{-kt} D(a, b, c) \rightarrow 0 \quad \text{kada} \quad t \rightarrow +\infty.$$

Nakon integracije nejednakosti:

$$\frac{d}{dt}D(a, b, c) \leq -k D(a, b, c)$$

u granicama od  $t$  do  $+\infty$ , kao i koristeći činjenicu da je  $D(a, b, c)(+\infty) = 0$  i  $E(a, b, c)(+\infty) = E(a_\infty, b_\infty, c_\infty)$ , možemo da formirati entropijsku nejednakost:

$$-D(a, b, c) \leq -k(E(a, b, c) - E(a_\infty, b_\infty, c_\infty)),$$

odakle sledi:

$$\frac{d}{dt}(E(a, b, c) - E(a_\infty, b_\infty, c_\infty)) \leq -k (E(a, b, c) - E(a_\infty, b_\infty, c_\infty)).$$

Nakon primene Gronvalove leme dolazimo do sledeće nejednakosti:

$$(E(a, b, c) - E(a_\infty, b_\infty, c_\infty)) \leq e^{-kt}(E(a_0, b_0, c_0) - E(a_\infty, a_\infty, c_\infty)),$$

što nam jasno daje konvergenciju funkcije entropije ka svom paru u tacki ravnoteže:

$$E(a, b, c) \rightarrow E(a_\infty, b_\infty, c_\infty),$$

i to kada  $t \rightarrow +\infty$ .

Najzad, primenom CKP nejednakosti (ocena 2 sa početka primera), dobijamo:

$$\begin{aligned} C \cdot (|a - a_\infty|^2 + |b - b_\infty|^2 + |c - c_\infty|^2) &\leq E(a, b, c) - E(a_\infty, b_\infty, c_\infty) \\ &\leq e^{-kt}(E(a_0, b_0, c_0) - E(a_\infty, a_\infty, c_\infty)) \end{aligned}$$

što nam potvrđuje konvergenciju rešenja sa eksplicitnom stopom  $\alpha = \frac{k}{2}$ :

$$(a, b, c) \rightarrow (a_\infty, b_\infty, c_\infty).$$

čime je teorema dokazana. ■

**Napomena 5** Posmatrajmo opet nejednakost (2.13), koju smo dobili primenom Bakri-Emerijevog metoda, računajući prvi izvod funkcije entropijske disipacije:

$$\frac{d}{dt}D(a, b, c) = -(a + b + 1)(ab - c) \log \frac{ab}{c} - (ab - c)^2 \left( \frac{1}{a} + \frac{1}{b} + \frac{1}{c} \right) \quad (2.14)$$

Razlikujemo sledeće slučajeve:

- (a) Koristeći činjenicu da  $a+b+1 \geq 1$  i  $(ab-c)^2 \left( \frac{1}{a} + \frac{1}{b} + \frac{1}{c} \right) \geq 0$ , možemo napraviti grubu ocenu prethodne jednačine. Zanemarujući drugi sabirak u jednačini (2.14), možemo dobiti sledeću ocenu za funkciju entropijske disipacije:

$$\frac{d}{dt}D(a, b, c) \leq -1 \cdot D(a, b, c)$$

Nakon praćenja istih koraka kao i u primeru, zaključujemo da će naša stopa konvergencije rešenja sada biti  $k = \frac{1}{2}$ .

- (b) Posmatrajmo sada slučaj u okolini tačke ravnoteže. Koristeći Tejlorov razvoj logaritamske funkcije u okolini ravnotežne tačke, moći ćemo da vidimo poboljšanje prethodno dobijene stope konvergencije rešenja.

$$c = ab + \gamma, \quad \gamma \in \mathbb{R},$$

$$\log(c) = \log(ab + \gamma) = \log(ab) + \frac{1}{ab} \cdot \gamma - \frac{1}{\Theta^2} \cdot \frac{\gamma^2}{2}, \quad \Theta \in [ab, c].$$

Ako se vratimo na jednačinu (2.14), u koju uvrštavamo prethodni izraz, dobijamo sledeće:

$$\frac{d}{dt}D(a, b, c) = -D(a, b, c) \left( a + b + 1 + \Theta \left( \frac{1}{a} + \frac{1}{b} + \frac{1}{c} \right) \right), \quad \Theta \geq \min\{ab, c\}, \quad (2.15)$$

gde izraz  $\min\{ab, c\}$  nema donje ograničenje. Kako onda znamo da u tom slučaju važi da  $(a, b, c) \rightarrow (a_\infty, b_\infty, c_\infty)$ , sledi da važi i  $\Theta \sim a_\infty b_\infty = c_\infty$ , koristeći osobinu (1.20). U tom slučaju, jednačina (2.15) postaje:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}D(a, b, c) &\leq -D(a, b, c) \left( a_\infty + b_\infty + 1 + a_\infty b_\infty \left( \frac{1}{a_\infty} + \frac{1}{b_\infty} + \frac{1}{c_\infty} \right) \right) \\ &= -2(a_\infty + b_\infty + 1) D(a, b, c) \end{aligned}$$

Prateći gore opisanu proceduru iz primera, zaključujemo da važi  $E(a, b, c) \rightarrow E(a_\infty, b_\infty, c_\infty)$  sa stopom  $2(a_\infty + b_\infty + 1)$ , tačnije važi  $(a, b, c) \rightarrow (a_\infty, b_\infty, c_\infty)$  sa stopom konvergencije  $a_\infty + b_\infty + 1$ .

Možemo videti da oba dela sa leve i desne strane plus znaka jednačine (2.14) podjednako utiču na dobijenu stopu. Odbacivanjem jednog dela kao i u prethodnom slučaju, značajno je oslabljena stopa konvergencije rešenja.

U jednoj od narednih napomena ćemo videti rezultat dobijen primenom metoda linearizacije na isti primer, jer znamo da nam on daje najbolju moguću ocenu rešenja. Tada ćemo uporediti dobijeni rezultat sa onim koji nam daje sistem nakon primene entropijskog metoda.

- (c) Neka je zadovoljena pretpostavka o uslovu za stanje ravnoteže,  $a \cdot b = c$ . U tom slučaju, drugi deo jednačine (2.13) teži nuli, pa nam preostaje sledeće:

$$\frac{d}{dt}D(a, b, c) = -(1 + a_\infty + b_\infty) \cdot D(a, b, c)$$

Jasno je da, nakon ponavljanja postupka sprovedenog u primeru, važi da funkcija entropije  $E(a, b, c)$  teži svom paru u tački ravnoteže  $E(a_\infty, b_\infty, c_\infty)$  sa stopom  $1 + a_\infty + b_\infty$ , što usled primene CKP nejednakosti imamo da važi konvergencija  $(a, b, c)$  ka stanju  $(a_\infty, b_\infty, c_\infty)$  sa stopom konvergencije  $\frac{1+a_\infty+b_\infty}{2}$ , kada  $t \rightarrow +\infty$ .

**Napomena 6** Za isti primer možemo pratiti kako se sistem ponaša u okolini tačke ravnoteže. Za to ćemo koristiti postupak linearizacije jer na jednostavan način možemo izračunati stopu konvergencije u okolini tačke ravnoteže  $(a_\infty, b_\infty, c_\infty)$ . Označimo nove promenljive na sledeći način:

$$x = a - a_\infty, \quad y = b - b_\infty, \quad z = c - c_\infty.$$

Linearizacijom u okolini tačke  $(x, y, z) = (0, 0, 0)$  dobijamo sledeći sistem ODJ:

$$\partial_t \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -b_\infty & -a_\infty & 1 \\ -b_\infty & -a_\infty & 1 \\ b_\infty & a_\infty & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Sada možemo lako da odredimo stopu konvergencije računajući karakteristične ko-  
rene matrice sistema:

$$\lambda_1 = \lambda_2 = 0, \quad \lambda_3 = -1 - a_\infty - b_\infty,$$

gde prvi i drugi karatkeristični koreni predstavljaju posledični rezultat zakona održanja  
mase, dok treći predstavlja stopu konvergencije.

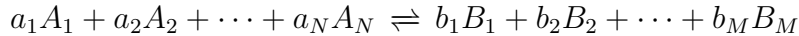
Kako ne postoji bolji način za rešavanje sistema i dobijanje najbolje ocene  
rešenja od tehnike linearizacije, naša najbolja ocena za stopu konvergencije rešenja  
će svakako biti  $|\lambda_3|$ . To će biti najbrži način da sistem dodje u stanje ravnoteže.

Takođe, možemo primetiti da za veoma male vrednosti  $a_\infty, b_\infty \ll 1$ , stopa postaje  
približno jednaka 1, baš kao i kod entropijskog metoda. Vršeći poređenje prethodno  
pomenuta dva metoda za rešavanje sistema ODJ, možemo uočiti sličnosti. Naime,  
uzimajući u obzir kod primene entropijskog metoda tačku ravnoteže, gde znamo da  
je zadovoljen uslov (2.13), jednačina (2.14) postaje:

$$\frac{d}{dt}D(a, b, c) = -(a_\infty + b_\infty + 1) \cdot D(a, b, c).$$

Praćenje istih koraka koji vode do rešenja sistema, dolazimo do zaključka da je stopa  
konvergencije ista kao i u slučaju linearizovanog sistema, i to  $1 + a_\infty + b_\infty$ .

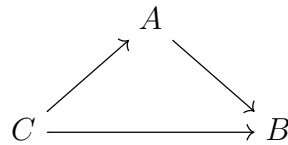
**Napomena 7** Pažljivim računanjem možemo uočiti da entropijski metod može  
uspešno da se primeni i na uopšteni tip hemijske reakcije:



za bilo koji broj supstanci  $N$  i  $M$ .

**Primer 4** *Sistem sa tri hemijske reakcije.*

Posmatrajmo sada hemijsku reakciju sa 3 veze, gde su stope reakcije jednake  
jedinici. Datu situaciju predstavljamo sledećim dijagramom:



Modelovanjem date reakcije uz pomoc zakona dejstva masa, gde zanemarujemo di-  
fuzioni deo, dolazimo do sledećeg sistema ODJ:

$$\begin{aligned} \dot{a}(t) &= -a(t) + c(t), \\ \dot{b}(t) &= -b(t) + a(t), \\ \dot{c}(t) &= -c(t) + b(t), \end{aligned} \tag{2.16}$$

sa početnim uslovima  $a(0) = a_0 > 0$ ,  $b(0) = b_0 > 0$  i  $c(0) = c_0 > 0$ . Sistem (2.16)  
zadovoljava zakon održanja mase:

$$a(t) + b(t) + c(t) = a(0) + b(0) + c(0) = M > 0 \tag{2.17}$$

gde  $M$  predstavlja nenegativnu početnu masu sistema, koju možemo skalirati na 1, što će biti predstavljeno u završnom odeljku. Takođe, imamo i jedinstveno određeno stanje ravnoteže  $(a_\infty, b_\infty, c_\infty)$  koje zadovoljava uslove:

$$a_\infty = b_\infty = c_\infty,$$

$$a_\infty + b_\infty + c_\infty = 1,$$

odakle direktno sledi da je  $a_\infty = b_\infty = c_\infty = \frac{1}{3}$ .

Kao i u prethodnim primerima, korišćemo Teoremu 3 koja nam daje konvergenciju sistema rešenja ka ravnotežnom stanju. Koristeći ideju iz prethodnih primera, množimo sistem jednačina logaritamskim funkcijama  $\log a$ ,  $\log b$  i  $\log c$ , respektivno, posle čega dobijamo:

$$\begin{aligned}(a \log a - a)_t &= (c - a) \log a, \\ (b \log b - b)_t &= (a - b) \log b, \\ (a \log a - a)_t &= (b - c) \log c.\end{aligned}$$

Sumirajući dobijene tri jednačine dolazimo do sledećeg izraza:

$$\begin{aligned}(a \log a - a + b \log b - b + c \log c - c)_t &= \\ &= -((c - a) \log a + (a - b) \log b + (b - c) \log c),\end{aligned}$$

na osnovu čega možemo definisati:

- *Entropijsku funkciju*:  $E(a, b, c) = a \log a - a + b \log b - b + c \log c - c$  i
- *Entropijsku disipaciju*:  $D(a, b, c) = (c - a) \log a + (a - b) \log b + (b - c) \log c$ .

Kao što znamo, entropijska disipacija mora biti nenegativna, a to ćemo dokazati na sledeći način. Koristeći poznatu nejednakost:

$$\psi(x, y) := x \log \frac{x}{y} - x + y \geq 0, \quad \forall x, y \geq 0,$$

i formalnim dodavanjem „nula izraza”  $\pm a \pm b \pm c$  funkciji entropijske disipacije, dolazimo do sledećeg:

$$\begin{aligned}D(a, b, c) &= a \log \frac{a}{b} - a + b + b \log \frac{b}{c} - b + c + c \log \frac{c}{a} - c + a \\ &= \psi(a, b) + \psi(b, c) + \psi(c, a) \geq 0.\end{aligned}$$

Sada možemo da uspostavimo odnos između logaritamske funkcije entropije i entropijske disipacije:

$$-\frac{d}{dt}E(a, b, c) = D(a, b, c) \leq 0.$$

Kao i u prethodnim slučajevima, potrebno je da uspostavimo i odnos između relativnih logaritamskih funkcija entropije:

$$1. \quad E(a, b, c) - E(a_\infty, b_\infty, c_\infty) = a \log \frac{a}{a_\infty} - a + a_\infty + b \log \frac{b}{b_\infty} - b + b_\infty + c \log \frac{c}{c_\infty} - c + c_\infty,$$



$$2. E(a, b, c) - E(a_\infty, b_\infty, c_\infty) \geq C(|a - a_\infty|^2 + |b - b_\infty|^2 + |c - c_\infty|^2),$$

što je mogućen zbog zakona održanja mase i poznate nejednakosti  $x \log \frac{x}{y} - x + y \geq (\sqrt{x} - \sqrt{y})^2$ . Podsetimo se da nam je glavni cilj da dokažemo, tačnije formiramo entropijsku nejednakost, koja će nas posle lako odvesti do rešenja, odnosno stope konvergencije rešenja. I ovde ćemo koristiti Bakri-Emerijev metod da dokažemo entropijsku nejednakost. Računajući tako prvi izvod entropijske disipacije, dolazimo do sledećeg izraza:

$$\frac{d}{dt}D(a, b, c) = -D(a, b, c) + A(a, b, c) - B(a, b, c) \quad (2.18)$$

iz čega želimo da dobijemo sledeću relaciju:

$$\frac{d}{dt}D(a, b, c) \leq \tilde{k} D(a, b, c) \quad (2.19)$$

tačnije:

$$\tilde{k} \leq \frac{D(a, b, c) - A(a, b, c) + B(a, b, c)}{D(a, b, c)} \quad (2.20)$$

gde su:

$$\begin{aligned} D(a, b, c) &= -a \log \frac{a}{b} - b \log \frac{b}{c} - c \log \frac{c}{a}, \\ A(a, b, c) &= c \log \frac{a}{b} + a \log \frac{b}{c} + b \log \frac{c}{a}, \\ B(a, b, c) &= \frac{(a-b)^2}{a} + \frac{(b-c)^2}{b} + \frac{(c-a)^2}{c} \geq 0, \end{aligned}$$

pri čemu funkciji  $A(a, b, c)$  ne znamo znak.

Kako  $\tilde{k}$  predstavlja stopu konvergencije rešenja, želimo da ona bude maksimalna moguća. U programskom paketu *Mathematica* tražimo maksimum funkcije izraza (2.20). On je dostignut pri vrednosti  $\tilde{k} = 2.70226$  posle uzimanja u obzir i zakona održanja mase.

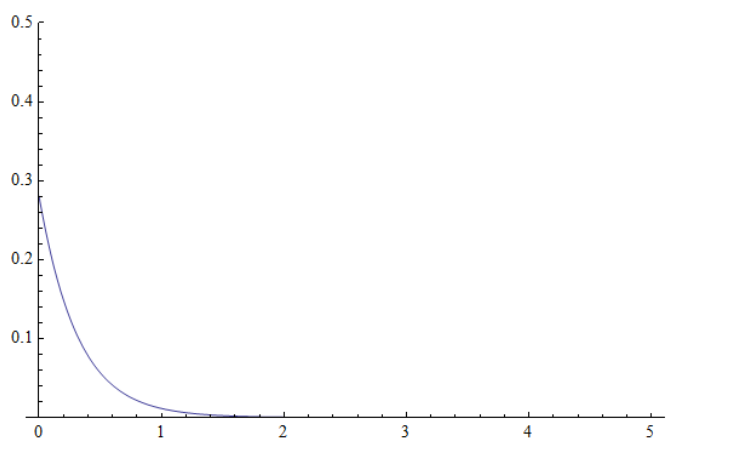
Prateći proceduru iz prethodnih primera, dolazimo do zaključka da je eksplicitna stopa konvergencije rešenja data konstantom  $\tilde{k}$ , tačnije da važi:

$$(a, b, c) \rightarrow (a_\infty, b_\infty, c_\infty).$$

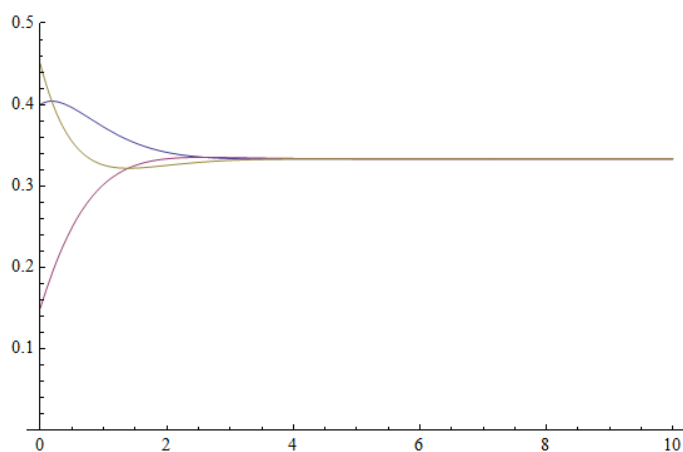
Kao ilustrativni prikaz, predstaviceo dobijene grafike u programskom paketu *Mathematica*. Naime, u mogućnosti smo da vidimo ponašanje funkcije entropijske disipacije, kao i ponašanje rešenja na duži vremenski period. Funkcija entropijske disipacije je oblika:

$$D(a, b, c) = (c - a) \log a + (a - b) \log b + (b - c) \log c,$$

koju grafički predstavljamo:



Zatim ćemo predstaviti slikovito i konvergenciju rešenja, počevši od početnih u uslova vrednosti ka kojoj rešenje konvergira. Na grafiku su prikazana rešenja sistema (2.16) sve tri funkcije,  $a(t)$  – plavo,  $b(t)$  – ljubičasto i  $c(t)$  – zeleno, dobijena za početne uslove  $a(0) = 0,40$ ,  $b(0) = 0,15$  i  $c(0) = 0,45$ .



Možemo uočiti ono što smo već dokazali, a to je da zaista rešenje ide u ravnotežno stanje počevši od vrednosti  $\tilde{k} = 2.70226$ .

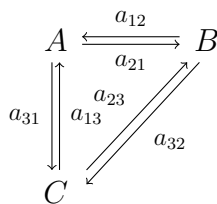
## Glava 3

# Teorema Geršgorina i sistemi reakcije difuzije

Za sisteme jednačina reakcije difuzije, dobijene opisivanjem određene hemijske reakcije zakonom dejstva masa, nismo uvek u stanju da dođemo do eksplicitnog rešenja. Tada se traži veza sa rezultatima iz drugih oblasti koji bi omogućili da dođemo do neke približne ocene i dali nam predstavu o potencijalnom stanju. Iako nije potpuno precizna u smislu koji smo videli u prethodnoj Glavi, takva vrsta rešenja može da nam pomogne u nekoj daljoj analizi.

Posle rada na sistemima reda 2, kao u primeru (1.17), mogli smo da određenim matematičkim alatom dođemo do najvećeg karakterističnog korena matrice sistema, koji predstavlja najbolju stopu konvergencije sistema ka ravnotežnom stanju. U pokušaju da istu tehniku primenimo na sisteme višeg reda, suočili smo se sa velikim teškoćama. Nismo mogli da dođemo do karakterističnih korena matrice sistema, a ni da primenimo Bakri-Emerijev metod za dokazivanje entropijske nejednakosti. Usmeravajući se na karakteristične korene, dolazimo do teoreme Geršgorina koja nam daje njihovu okvirnu poziciju na realnom grafiku. U nastavku ćemo ilustrovati ovu ideju.

Posmatrajmo sledeći sistem reakcije: koji je predstavljen sledećim sistemom jed-



načina reakcije difuzije:

$$\begin{aligned}\partial_t u_1 - d_1 \Delta u_1 &= -(a_{21} + a_{31})u_1 + a_{12}u_2 + a_{13}u_3 \\ \partial_t u_2 - d_2 \Delta u_2 &= a_{12}u_1 - (a_{12} + a_{32})u_2 + a_{23}u_3 \\ \partial_t u_3 - d_3 \Delta u_3 &= a_{31}u_1 + a_{32}u_2 - (a_{13} + a_{23})u_3\end{aligned}\tag{3.1}$$

Teoremi Geršgorina je veoma značajna u svakoj oblasti koja se bavi karakterističnim korenima i funkcijama određenog sistema. Ona može lako da ograniči spektar

kvadratne matrice sistema, odnosno oblast u kojoj se koreni nalaze. Sada ćemo je ukratko i predstaviti, a za opširniju analizu pogledati [15].

**Teorema 4** *Za svaku matricu  $A = [a_{ij}] \in \mathbb{C}^{n \times n}$  i za svaku karakterističnu vrednost  $\lambda \in \sigma(A)$ , postoji indeks  $k$  takav da važi:*

$$|\lambda - a_{kk}| \leq r_k(A) := \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|, \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, n\}$$

gde  $\sigma(A)$  predstavlja sprektar matrice  $A$ . Stoga je  $\lambda \in \Gamma_k(A)$ , odakle sledi da je  $\lambda \in \Gamma(A)$ . Kako ovo važi za svaki karakteristični koren  $\lambda$ , važi i:

$$\sigma(A) \subseteq \Gamma(A).$$

$\Gamma_i(A)$  nazivamo  $i$ -ti Geršgorinov krug, a  $\Gamma(A)$  Geršgorinov skup za matricu  $A$ .

Jedino ograničenje koje nam je postavljeno Geršgorinovom teoremom je to da matrica na koju je primenjujemo mora biti kvadratna. Kako opisivanjem reakcija zakonom dejstva masa dolazimo upravo do takvih matrica sistema, možemo da primenimo teoremu Geršgorina na dati sistem (3.1).

Sistem (3.1) možemo rešavati po istom šablonu kao i sistem (1.17). Linearizacijom u okolini tačke ravnoteže, pa zatim upotrebom Furijeovog metoda, za tada dobijeni Laplasov problem, dolazimo do matrice sistema:

$$A_k = \begin{pmatrix} d_a \lambda_k - a_{21} - a_{31} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & d_b \lambda_k - a_{12} - a_{32} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & d_c \lambda_k - a_{13} - a_{23} \end{pmatrix}$$

Ova matrica zavisi od parametra  $k$  u izrazu  $\lambda_k$ , karakteristične vrednosti Laplasovog problema, koje je za  $k > 0$  teško izračunati u uporediti. Znamo da će najveće rešenje datog sistema biti dostignuto za  $\lambda_0 = 0$ .

Koristeći teoremu Geršgorina i razmatrajući matricu sistema za  $\lambda_0 = 0$ :

$$A_0 = \begin{pmatrix} -a_{21} - a_{31} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & -a_{12} - a_{32} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & -a_{13} - a_{23} \end{pmatrix}$$

dolazimo do sledećih karakterističnih vrednosti:

$$\begin{aligned} \mu_1 &= 0 \\ \mu_2 &= -\frac{\tau}{2} + \sqrt{\frac{\tau^2}{4} - \Delta} \\ \mu_3 &= -\frac{\tau}{2} - \sqrt{\frac{\tau^2}{4} - \Delta} \end{aligned}$$

gde su korišćene oznake:

$$\begin{aligned} \tau &:= a_{12} + a_{13} + a_{21} + a_{23} + a_{31} + a_{32} \\ \Delta &:= a_{12}a_{13} + a_{13}a_{21} + a_{12}a_{23} + a_{21}a_{23} \\ &\quad + a_{12}a_{31} + a_{23}a_{31} + a_{13}a_{32} + a_{21}a_{32} + a_{31}a_{32}. \end{aligned}$$

Možemo se lako uveriti da važi poredak:

$$\mu_3 < \mu_2 < \mu_1 = 0,$$

a takođe i:

$$|\mu_2| < |\mu_3|,$$

pa je najbliži koren nuli sa negativne strane  $\mu_2(0)$ , koji predstavlja najolju moguću ocenu za stopu konvergencije rešenja.

Iako nismo u mogućnosti da izračunamo i uporedimo karakteristične vrednosti početne matrice sistema za sve parametre  $k$  u izrazu  $\lambda_k$ , postavljamo ograničenja koja će zanemariti korene manje od  $\mu_2(0)$ , jer nam oni ne mogu dati poboljšanje u vidu brže konvergencije. Upotrebom teoreme Geršgorina možemo odrediti dovoljno velike parametre difuzije  $d_a$ ,  $d_b$  i  $d_c$ , odnosno utvrditi njihove donje granice, posle kojih ne možemo poboljšati stopu konvergencije rešenja. Posmatrajući opet početnu matricu sistema  $A_k$ , za  $k > 0$ :

$$A_k = \begin{pmatrix} d_1\lambda_k - a_{21} - a_{31} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & d_2\lambda_k - a_{12} - a_{32} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & d_3\lambda_k - a_{13} - a_{23} \end{pmatrix}$$

postavljamo sledeći skup uslova:

$$d_1\lambda_k - a_{21} - a_{31} + a_{12} + a_{13} \leq \mu_2(0),$$

$$d_2\lambda_k - a_{12} - a_{32} + a_{21} + a_{23} \leq \mu_2(0),$$

$$d_1\lambda_k - a_{13} - a_{23} + a_{31} + a_{32} \leq \mu_2(0).$$

Time smo obezbedili da Geršgorinovi krugovi za rešenja matrice  $A_k$ , koji uključuju sve karakteristične korene, ne mogu dostići oblast veću od  $\mu_2$ , odnosno:

$$d_1 \geq \frac{1}{|\lambda_k|} (-\mu_2(0) - a_{21} - a_{31} + a_{12} + a_{13}),$$

$$d_2 \geq \frac{1}{|\lambda_k|} (-\mu_2(0) - a_{12} - a_{32} + a_{21} + a_{23}),$$

$$d_3 \geq \frac{1}{|\lambda_k|} (-\mu_2(0) - a_{13} - a_{23} + a_{31} + a_{32}).$$

Datim ograničenjima na konstante difuzije, obezbedili smo da je najveća stopa konvergencije rešenja za sistem (3.1) vrednost  $|\mu_2(0)|$ .

Iako ovde prikazanim postupkom nismo mogli neposredno da izračunamo stopu konvergencije rešenja polaznog sistema, uspeali smo da damo njenu ocenu pod određenim uslovima. Teorema Geršgorina nam je omogućila da lokalizujemo najveće korene i da kažemo da, pod određenim ograničenjima na konstante difuzije, stopa konvergencije ne može biti poboljšana.



# Glava 4

## Skaliranje (bezdimezionisanje) sistema

U ovom delu rada fokusiraćemo se na upotrebu dimenzijske analize – bezdimezionisanja jednačina – u cilju obezbeđivanja jednostavnije analize problema. Bezdimenzionisanjem se redukuje broj parametara, promenljivih od kojih dati sistem zavisi. Demonstriraćemo upotrebu dimenzijske analize kroz njenu aplikaciju na primere koje smo obradili u ovom radu.

### 4.1 Dimenzija i osnovne jedinice

Postoji 7 fundamentalnih (osnovnih) fizičkih dimenzija i njihovih jedinica mere, koje čine međunarodni sistem jedinica i to:

Dimenzija	Jedinica mere
Dužina $[L]$	m – metar
Vreme $[T]$	s – sekund
Masa $[M]$	kg – kilogram
Temperatura $[\Theta]$	K – Kelvin
Električna struja $[I]$	A – Amper
Količina supstance $[N]$	mol – mol
Jačina svetlosti $[J]$	cd – kandela

Kako imamo primarne dimenzije, možemo izvesti sve ostale sekundarne iz njih. Ali pre toga, potrebno je predstaviti veoma bitnu osobinu svake jednačine, dimenzijsku homogenost.

### 4.2 Dimenzijska homogenost

Osnovno pravilo dimenzijske analize jeste dimenzijska homogenost. Samo složene količine (fizičke veličine koje imaju iste dimenzije) mogu biti poređene, izjednačavane, dodavane jedna drugoj. Na primer, nema smisla zapitati se da li je jedan sat veći (duži), jednak ili manji od jednog kilograma, niti da li ih možemo sabirati, zato što oni imaju različite dimenzije. Međutim, savršeno ima smisla upitati se da

li je jedna milja duža, jednaka ili kraća od jednog kilometra, zbog postojanja iste dimenzije fizičkih veličina, iako su jedinice različite.

### 4.3 Proces bezdimenzionisanja

Bezdimenzionisanje je parcijalno ili potpuno uklanjanje jedinica iz jednačine koja uključuje fizičke veličine i to odgovarajućom smenom promenljivih. Ova tehnika može da uprosti i parametrizuje problem gde ima merljivih jedinica. Takođe, proces bezdimenzionisanja je blisko povezan sa dimenzijskom analizom. Celokupan metod je veoma koristan, posebno u sistemima koji su opisani diferencijalnim jednacina.

Glavna ideja procesa bezdimenzionisanja jeste da se sistem redukuje na jednostavniji oblik, kako bi bio potpuno nezavisan od parametara koji uključuju merne jedinice, ili barem imao najmanji mogući broj parametara.

Kako bismo bezdimenzionisali sistem jednačina, moramo uraditi sledeće:

1. Identifikovati sve nezavisne i zavisne promenljive.
2. Zameniti svaku od njih veličinom koja je skalirana u skladu sa određenim mernim jedinicama.
3. Podeliti sa koeficijentom najvišeg reda polinoma ili izvoda funkcije.
4. Izorno odlučiti o definiciji karakteristične jedinice za svaku od promenljivih, tako da što više koeficijenata uz promenljive ima vrednost 1.
5. Ponovo ispisati sistem jednačina koristeći nove bezdimenzijske veličine.

Poslednja tri koraka su obično specifična za problem bezdimenzionisanja. Međutim, skoro svi sistemi zahtevaju da se izvrše i prva dva koraka.

Kao ilustrativni primer, posmatrajmo diferencijalnu jednačinu prvog reda sa konstantnim koeficijentima:

$$a \frac{dx}{dt} + bx = Af(t).$$

1. U ovoj jednačini, nezavisna promenljiva je  $t$ , a zavisna je data promenljivom  $x$ .
2. Postaviti  $x = \chi \tilde{x}$ ,  $t = \tau \tilde{t}$ . Ovo vodi ka jednačini:

$$a \frac{\tilde{x}}{\tilde{t}} \frac{d\chi}{d\tau} + b\chi \tilde{x} = Af(\tau \tilde{t}) := F(\tau).$$

3. Koeficijent najvišeg reda je ispred izraza za prvi izvod. Deljenjem celog izraza njime dobijamo:

$$\frac{d\chi}{d\tau} + \frac{b\tilde{t}}{a} \chi = \frac{A\tilde{t}}{a\tilde{x}} F(\tau).$$

4. Koeficijent ispred izraza  $\chi$  sadrži jedino karakterističnu veličinu  $\tilde{t}$ , koju možemo izabrati na sledeći način:

$$\frac{b\tilde{t}}{a} = 1 \implies \tilde{t} = \frac{a}{b}.$$



Tada za karakterističnu veličinu  $\tilde{x}$  imamo:

$$\frac{A\tilde{t}}{a\tilde{x}} = \frac{A}{b\tilde{x}} = 1 \implies \tilde{x} = \frac{A}{b}.$$

5. Finalna bezdimenzijska jednačina u ovom slučaju postaje kompletno nezavisna od bilo kog parametra sa mernim jedinicama:

$$\frac{d\chi}{d\tau} + \chi = F(\tau).$$

## 4.4 Primena na sisteme reakcije difuzije

### 4.4.1 Primena na primer iz dela 1.5

Sada ćemo koristeći prethodno definisanu notaciju, objasniti proceduru od koraka (1.21) do koraka (1.22), gde je po prvi put spomenut pojam skaliranja. Posmatrajmo opet sistem jednačina (1.21):

$$\begin{pmatrix} \partial_t u - d_a \cdot \partial_{xx} u \\ \partial_t v - d_b \cdot \partial_{xx} v \end{pmatrix} = la_\infty^\alpha \cdot \begin{pmatrix} -\alpha^2 & \alpha\beta \\ \alpha\beta & -\beta^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{1}{a_\infty} & 0 \\ 0 & \frac{1}{b_\infty} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

Prvo će biti potrebno da skaliramo (zedimenzionišemo) sistem promenljivih, a u našem slučaju su to promenljive  $u, v$ , kao i vremenska promenljiva  $t$ , i to na sledeći način:

$$\begin{aligned} u &= a_\infty \cdot \tilde{u} \\ v &= b_\infty \cdot \tilde{v} \\ t &= T \cdot \tilde{t} \end{aligned}$$

Posle uvođenja novih promenljivih u sistem dobijamo:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{T} a_\infty \partial_{\tilde{t}} \tilde{u} - a_\infty d_a \partial_{xx} \tilde{u} \\ \frac{1}{T} b_\infty \partial_{\tilde{t}} \tilde{v} - b_\infty d_b \partial_{xx} \tilde{v} \end{pmatrix} = la_\infty^\alpha \cdot \begin{pmatrix} -\alpha^2 & \alpha\beta \\ \alpha\beta & -\beta^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{1}{a_\infty} & 0 \\ 0 & \frac{1}{b_\infty} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_\infty \tilde{u} \\ b_\infty \tilde{v} \end{pmatrix}$$

Množeći obe strane parametrom  $T$  i postavljajući  $a_\infty, b_\infty$  ispred čitavog izraza, imamo:

$$\begin{pmatrix} a_\infty & 0 \\ 0 & b_\infty \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \partial_{\tilde{t}} \tilde{u} - T d_a \partial_{xx} \tilde{u} \\ \partial_{\tilde{t}} \tilde{v} - T d_b \partial_{xx} \tilde{v} \end{pmatrix} = T \cdot la_\infty^\alpha \cdot \begin{pmatrix} -\alpha^2 & \alpha\beta \\ \alpha\beta & -\beta^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix}$$

Takođe, i parametre difuzije možemo množiti izrazom  $T$  bez umanjena opštosti, pa tako uvodimo notaciju  $d'_a = T \cdot d_a$  i  $d'_b = T \cdot d_b$ . Tada nakon skaliranja znamo da je ravnotežno stanje polaznog sistema  $(a_\infty, b_\infty) = (1, 1)$  i matrica sistema postaje jedinična matrica. Na samom kraju, za parametar skaliranja  $T$  biramo da bude  $T = \frac{1}{F}$ , za koje kao što znamo od početka, funkcija  $F$  je data sa  $F(a_\infty, b_\infty) = la_\infty^\alpha = kb_\infty^\beta$ . U tom slučaju, polazni sistem (1.21) je uprošćen i dobijamo novi, sa novim ravnotežnim stanjem, ali istim karakteristikama:

$$\begin{pmatrix} \partial_{\tilde{t}} \tilde{u} - d'_a \partial_{xx} \tilde{u} \\ \partial_{\tilde{t}} \tilde{v} - d'_b \partial_{xx} \tilde{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\alpha^2 & \alpha\beta \\ \alpha\beta & -\beta^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix}.$$

Kao što možemo videti, bez umanjena opštosti koristimo notaciju kao na početku, pa tako konačno imamo sistem:

$$\begin{pmatrix} \partial_t u - d_a \partial_{xx} u \\ \partial_t v - d_b \partial_{xx} v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\alpha^2 & \alpha\beta \\ \alpha\beta & -\beta^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

Ovim postupkom smo objasnili korake koji su izostavljeni u delu 1.5. Pokazali smo kako jednostavnim skaliranjem sistema, možemo doći do mnogo prostijeg sa kojim je lakše raditi. U nastavku ćemo se vratiti na Primer 4, gde je predstavljeno skaliranje u odnosu na početnu masu sistema.

#### 4.4.2 Primena na Primer 4

Primenimo sada metod skaliranja na Primer 4, koji je opisan sledećim sistemom jednačina:

$$\begin{aligned} \dot{a}(t) &= -ka(t) + kc(t) \\ \dot{b}(t) &= -kb(t) + ka(t) \\ \dot{c}(t) &= -kc(t) + kb(t) \end{aligned}$$

gde parametar  $k$  ima dimenziju  $k = [T]^{-1}$ . Dati sistem možemo predstaviti i u matričnom obliku:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k & 0 & k \\ k & -k & 0 \\ 0 & k & -k \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

sa početnim uslovima  $a(0) = a_0 > 0$ ,  $b(0) = b_0 > 0$ ,  $c(0) = c_0 > 0$ . Sistem poseduje ravnotežno stanje  $(a_\infty, b_\infty, c_\infty)$  i zadovoljava zakon održanja mase:

$$a(t) + b(t) + c(t) = a(0) + b(0) + c(0) = M > 0$$

$$a_\infty = b_\infty = c_\infty = \frac{M}{3}$$

$$a_\infty + b_\infty + c_\infty = M$$

U ovom slučaju skaliraćemo sistem u odnosu na početnu masu  $M$ . Uvodimo smenu promenljivih koje predstavljaju koncentracije datih supstanci  $A$ ,  $B$  i  $C$ :

$$\tilde{a} = \frac{a}{M}, \quad \tilde{b} = \frac{b}{M}, \quad \tilde{c} = \frac{c}{M},$$

kao i smenu vremenske promenljive  $t$ :

$$\tilde{t} = kt.$$

Koristeći izvod složene funkcije imamo da važi:

$$\frac{d}{dt} = \frac{d\tilde{t}}{dt} \frac{d}{d\tilde{t}} = k \frac{d}{d\tilde{t}}.$$

Na osnovu ove jednačine možemo odrediti i izvode skaliranih promenljivih  $\tilde{a}$ ,  $\tilde{b}$  i  $\tilde{c}$ , tačnije do novog sistema jednačina:

$$\frac{d\tilde{a}}{d\tilde{t}} = -\tilde{a} + \tilde{c},$$

$$\frac{d\tilde{b}}{d\tilde{t}} = -\tilde{b} + \tilde{a},$$

$$\frac{d\tilde{c}}{d\tilde{t}} = -\tilde{c} + \tilde{b},$$

sa uslovima za održanje mase i postojanja ravnotežnog stanja:

$$\tilde{a}(t) + \tilde{b}(t) + \tilde{c}(t) = 1,$$

$$\tilde{a}_\infty = \tilde{b}_\infty = \tilde{c}_\infty = \frac{1}{3}.$$

Bez umanjenja opštosti, sistem možemo pisati i sa početnim oznakama za funkcije  $a$ ,  $b$  i  $c$  i na taj način dobijamo sistem (2.16), tačnije:

$$\dot{a}(t) = -a(t) + c(t)$$

$$\dot{b}(t) = -b(t) + a(t)$$

$$\dot{c}(t) = -c(t) + b(t)$$

Skaliranjem smo uprostiti sistem, oslobodili se parametara, i daljom analizom došli do univerzalne ocene stope konvergencije.

U prethodna dva primera pokazali smo koliko je postupak skaliranja jedan veoma moćan matematički alat. Bez obzira da li želimo da uprostimo sistem i njegovu kalkulaciju ili da ga bezdimenzionišemo i skaliramo početnu masu, uvek je analiza posle toga znatno olakšana.



# Literatura

- [1] L.C. Evans (2010) *Partial differential equations, 2nd Edition*, American Mathematical Society
- [2] W. A. Strauss (2008) *Partial differential equations - An Introduction, 2nd Edition*, John Wiley & Sons
- [3] A. Jungel (2016) *Entropy method for diffusive partial differential equations*, Springer Briefs in Mathematics
- [4] K. Fellner, B. Q. Tang (2017) *Explicit exponential convergence to equilibrium for nonlinear reaction-diffusion systems with detailed balance condition*, Nonlinear Analysis, Theory, Methods and Applications, 159, pp. 145-180.
- [5] L. Desvillettes, K. Fellner, B. Q. Tang *Trend to equilibrium for reaction-diffusion systems arising from complex balanced chemical reaction networks*, SIAM Journal on Mathematical Analysis, 49 (4), pp. 2666-2709
- [6] M. Di Francesco, K. Fellner, P. Markowich (2008) *The entropy dissipation method for spatially inhomogeneous reaction-diffusion type system*, Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 464 (2100), pp. 3273-3300.
- [7] K. Fellner, W. Prager, B. Q. Tang *The entropy method for reaction-diffusion systems without detailed balance condition: First order chemical reaction networks*, Kinetic and Related Models, 10 (4), pp. 1055-1087.
- [8] L. Desvillettes, K. Fellner *Exponential decay toward equilibrium via entropy methods for reaction-diffusion equations*, Journal of Mathematical Analysis and Applications, 319 (1), pp. 157-176.
- [9] L. Desvillettes, K. Fellner *Entropy methods for reaction-diffusion equations: Slowly growing a-priori bounds*, Revista Matematica Iberoamericana, 24 (2), pp. 407-431.
- [10] B. Q. Tang <https://baotangquoc.wordpress.com/category/entropy/>
- [11] Reinhard Illner, C. Sean Bohun, Samantha McCollum, Thea van Roode *Mathematical modelling (A case studies approach)*
- [12] S. Howison (2005) *Practical Applied Mathematics*, Cambridge University Press

- [13] T. Witelski, M. Bowen *Methods of Mathematical Modelling*, Springer
- [14] P. Atkins, J. de Paula (2014) *Physical chemistry - thermodynamics, structure and change*, Freeman & Co.
- [15] Lj. Cvetković (2015) *Numela 1*, Fakultet tehničkih nauka

**UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA  
INFORMACIJA**

Redni broj:

**RBR**

Identifikacioni broj:

**IBR**

Tip dokumentacije: Monografska dokumentacija

**TD**

Tip zapisa: Tekstualni štampani materija

**TZ**

Vrsta rada: Master rad

**VR**

Autor: Vanja Marinović

**AU**

Mentor: dr Srboljub Simić

**MN**

Naslov rada: O entropijskom metodu i eksponencijalnim ocenama rešenja za sisteme hemijskih reakcija

**NR**

Jezik publikacije: srpski (latinica)

**JP**

Jezik izvoda: engleski

**JI**

Zemlja publikovanja: Republika Srbija

**ZP**

Uže geografsko područje: Vojvodina

**UGP**

Godina: 2018.

**GO**

Izdavač: Autorski reprint

**IZ**

Mesto i adresa: Univerzitet u Novom Sadu, Prirodno-matematički fakultet, Trg  
Dositeja Obradovića 4

**MA**

Fizički opis rada: (5/54/15/1/2/2/0)

(broj poglavlja/strana/lit citata/tabela/slika/grafika/priloga)

**FO**

Naučna oblast: Matematika

**NO**

Naučna disciplina: Parcijalne diferencijalne jednačine

**ND**

Predmetna odrednica/Ključne reči: Entropijski metod, hemijska reakcije, zakon održanja mase, entropijska funkcija, entropijska disipacija, entropijska nejednakost, Bakri-Emerijev metod, teorema Geršgorina, bezdiomenzionisanje.

**PO**

**UDK**

Čuva se: u biblioteci Departmana za matematiku i informatiku, Novi Sad

**CU**

Važna napomena:

**VN**

Izvod: U ovom radu je predstavljen entropijski metod i njegova primena u analizi i rešavanju sistema parcijalnih diferencijalnih jednačina (PDJ). Predmet rada su jednačine koje opisuju sisteme hemijskih reakcija, reverzibilnih i ireverzibilnih. One su modelovane primenom zakona dejstva masa i transformisane u sistem PDJ na koji je potom primenjen entropijski metod. Dobijeni sistem jednačina po pravilu se svodi na sistem jednačina reakcije difuzije, sa svojim specifičnim oblikom. U primeni entropijskog metoda ključnu ulogu igraju sledeća 3 elementa: entropijska funkcija, entropijska disipacija i entropijska nejednakost. Prvi korak predstavlja pronalaženje odgovarajuće entropijske funkcije. Ona mora biti konveksna i nenegativna, a u literaturi je poznata i kao funkcija (funkcional) Ljapunova. Njen oblik je uslovljen strukturom jednačina na koje se primenjuje. U zavisnosti od tipa i oblika hemijske reakcije, dobijamo linearni ili nelinearni sistem difuzionih jednačina. Zatim, prateći uobičajeni postupak, određujemo entropijsku disipaciju kao negativnu vrednost prvog izvoda entropijske funkcije. Finalni deo predstavlja dokazivanje entropijske nejednakosti iz koje direktno određujemo stopu konvergencije koja nas dovodi do rešenja – ravnotežnog stanja (ravnotežne tačke, tačke ekvilibrijuma)



datog sistema. Za sisteme višeg reda veoma je teško primeniti entropijski metod, pa se u drugom delu rada bavimo oslabljenim jednačinama, reakcijama koje daju sistem difuzionih jednačina, izuzimajući difuzioni faktor. To, ustvari, predstavlja sistem običnih diferencijalnih jednačina (ODJ) na koji primenjujemo nedavno razvijen Bakri-Emerijev (Bakry-Emery) metod. On nam olakšava formiranje entropijske nejednakosti iz koje direktno određujemo rešenje. Naime, Bakri-Emerijev metod nam prostim izračunavanjem prvog izvoda entropijske disipacije daje traženu nejednakost. U radu je obrađeno nekoliko takvih primera gde je pokazana sličnost rešenja sa rešenjem koje se dobija primenom drugih metoda za rešavanje sistema PDJ i ODJ. Kako na određene sisteme ne možemo primeniti ni Bakri-Emerijev metod, ni entropijski metod, uočeno je da se primenom Geršgorinove (Gershgorin) teoreme o karakternističnim korenima može doći do lokalizacije rešenja sistema difuzionih jednačina. To nam daje približnu indikaciju kada bi se moglo doći do ravnotežne tačke, što je i glavni cilj. Na samom kraju rada objašnjen je proces bezdimenzionisanja, koji je korišćen u par navrata na određenim primerima u radu.

**IZ**

Datum prihvatanja teme od strane NN veća: 03.09.2018.

**DP**

Datum odbrane: 28.09.2018.

**DO**

Članovi komisije:

**KO**

Predsednik: dr Danijela Rajter-Ćirić, redovni profesor, Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Novom Sadu

Član: dr Marko Nedeljkov, redovni profesor, Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Novom Sadu

Mentor: dr Srboljub Simić, redovni profesor, Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Novom Sadu

**UNIVERSITY OF NOVI SAD  
FACULTY OF SCIENCES  
KEY WORDS DOCUMENTATION**

Accession number:

**ANO**

Identification number:

**INO**

Document type: Monograph type

**DT**

Type of record: Printed text

**TR**

Contents Code: Master's thesis

**CC**

Author: Vanja Marinović

**AU**

Mentor: Srboljub Simić, Ph.D.

**MN**

Title: On Entropy Method and Exponential Decay Estimates for Chemical Reaction Networks

**TI**

Language of text: Serbian

**LT**

Language of abstract: English

**LA**

Country of publication: Serbia

**CP**

Locality of publication: Vojvodina

**LP**

Publication year: 2018.

**PY**

Publ. place: Novi Sad, Department of Mathematics and Informatics, Faculty of

Sciences, University of Novi Sad, Trg Dositeja Obradovića 4

**PP**

Physical description: (5/54/15/1/2/2/0)

(number of sections/pages/references/tables/pictures/graphs/appendices)

**PD**

Scientific field: Mathematics

**SF**

Scientific discipline: Partial Differential Equations

**SD**

Subject/Key words: Entropy method, chemical reaction network, mass conservation law, entropy function, entropy dissipation, entropy-entropy dissipation inequality Bakry-Emery method, Gershgorin theorem, nondimensionalization.

**UC:**

Holding data: The Library of the Department of Mathematics and Informatics, Faculty of Sciences and Mathematics, University of Novi Sad

**HD**

Note:

**N**

Abstract: In this work it has been presented entropy method and its application in the analysis of solving systems of partial differential equations (PDE). The subject are equations that describe chemical reaction network. They are modelled by applying the mass action law and transformed into PDE system to which we apply the entropy method afterwards. In application of the entropy method, we use 3 main elements: entropy function, entropy dissipation and entropy-entropy dissipation inequality (EED). The first step is to find suitable entropy function, that has to be nonnegative and convex, also known as a Lyapunov functional. Its form depends on the structure of the obtained system, that can be linear or nonlinear. Then, following the standard procedure, determination of entropy function, entropy dissipation, we get to the point where we need to establish the entropy-entropy dissipation inequality. From that part, we are able to determine the explicit solution convergence rate, that leads us to the equilibrium point of the system. As for the higher order system is hard to establish mentioned inequality, in the second part we deal with weakened systems, excluding a diffusion part. That basically represents system of ordinary differential equations (ODE). Here we can apply recently developed Bakry-Emery method (BE), that makes easier to establish EED inequality for the obtained system. BE method idea consists of finding first derivative of entropy dissipation and relating it with entropy dissipation, what leads us to the EED inequality. As on many systems we can not apply BE method, either entropy

method, it turned out that Gershgorin theorem of eigenvalues can help us in locating potential system solution. It gives us an approximate indication how we could reach the equilibrium point, which represents the main goal. At the end, the process of nondimensionalization is explained, as a powerful mathematical tool, that was used in solving a couple of examples in this work.

**AB**

Accepted by the Scientific Board on: 03.09.2018.

**ASB**

Defended: 28.09.2018.

**DE**

Thesis defend board:

**DB**

President: Danijela Rajter-Ćirić, PhD, full professor, Faculty of Sciences, University of Novi Sad

Member: Marko Nedeljkov, PhD, full professor, Faculty of Sciences, University of Novi Sad

Mentor: Srboljub Simić, PhD, full professor, Faculty of Sciences, University of Novi Sad