Matematika 2 za kemičare

Franka Miriam Brückler
Igor Pažanin

Zagreb, 2016.

Sadržaj

Poglavlje 1

Sustavi linearnih jednadžbi

1.1 Linearne jednadžbe

Definicija 1 (Linearna jednadžba s jednom nepoznanicom)**.** *Linearna jednadžba s jednom nepoznanicom x je jednadžba koja se može zapisati u obliku*

$$ax = b$$

gdje su a i b zadani brojevi. Rješenje jednadžbe je svaki broj čije uvrštavanje u jednadžbu na mjesto nepoznanice x daje istinitu numeričku jednakost.

Primjer 1. *Jednadžba $8x - 3(x - 4) = -2x - 6$ je linearna jer ju možemo svesti na oblik $ax = b$:*

$$\begin{aligned} 8x - 3(x - 4) &= -2x - 6, \\ 8x - 3x + 12 &= -2x - 6, \\ 7x &= -18. \end{aligned}$$

Rješenje jednadžbe $ax = b$ je nultočka funkcije $f(x) = ax - b$, tj. sjecište grafa te funkcije s osi apscisa. Moguća su tri slučaja:

- Jedinstveno rješenje (ako $a \neq 0$): pravac $y = ax - b$ siječe os apscisa u nultočki $x = \frac{b}{a}$ koja je rješenje naše jednadžbe.
- Nema rješenja (ako $a = 0$ i $b \neq 0$): pravac $y = ax - b$ je paralelan s osi apscisa.
- Beskonačno mnogo rješenja (ako $a = b = 0$): pravac $y = ax - b$ se podudara s osi apscisa pa je svaki realan broj x rješenje naše jednadžbe.

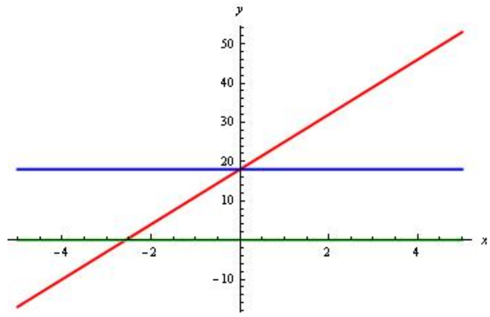
Primjer 2. *Jednadžbe*

$$\begin{aligned} 8x - 3(x - 4) &= -2x - 6, \\ 8x - 3(x - 4) &= 5x - 6 \end{aligned}$$

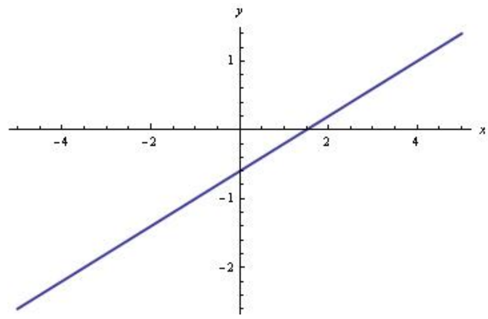
i

$$8x - 3(x - 4) = 5x + 12$$

su redom primjeri za tri gore navedena slučaja. Grafovi odgovarajućih afinih funkcija za koje te jednadžbe predstavljaju traženje nultočki prikazani su slikom 1.1.



Slika 1.1: Linearne jednadžbe s jednom nepoznanicom mogu imati jedinstveno rješenje (crveni graf), nemati rješenja (plavi graf) ili imati beskonačno mnogo rješenja (zeleni graf).



Slika 1.2: Pravac $2x - 5y = 3$.

Definicija 2 (Linearna jednadžba s dvije nepoznanice)**.** *Linearna jednadžba s dvije nepoznanice x i y je jednadžba koja se može zapisati u obliku*

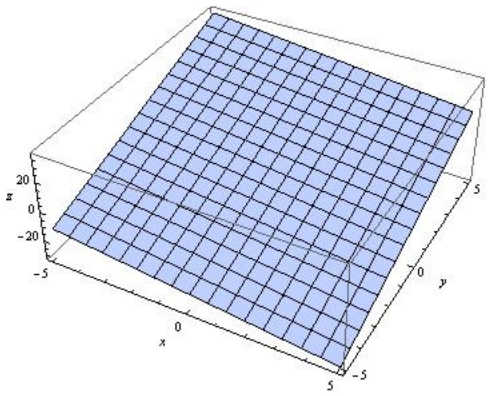
$$ax + by = c$$

gdje su a, b i c zadani brojevi. Broj c zove se slobodni član, a a i b su koeficijenti jednadžbe. Rješenje jednadžbe je svaki uređeni par brojeva čije uvrštavanje u jednadžbu na mjesto brojeca x i y daje istinitu numeričku jednakost.

Primjer 3. *Jednadžba $2x - 5y = 3$ je linearna jednadžba s dvije nepoznanice. Uređeni par $(4, 1)$ je jedno njeno rješenje, a par $(1, 1)$ nije rješenje te jednadžbe.*

Geometrijski, linearnu jednadžbu s dvije nepoznanice (točnije: skup njenih rješenja) možemo interpretirati kao pravac u ravnini (tj. kao njegovu implicitnu jednadžbu). Pravac je skup od beskonačno točaka te svaka linearna jednadžba s dvije nepoznanice ima beskonačno mnogo rješenja. Ako je $a = 0$, pravac $ax + by = c$ je paralelan s x-osi, ako je $b = 0$ paralelan je s y-osi.

Primjer 4. *Jednadžbi $2x - 5y = 3$ odgovara pravac kojem je to implicitna jednadžba, tj. pravac kroz točke $\left(0, -\frac{3}{5}\right)$ i $\left(\frac{3}{2}, 0\right)$; to je pravac s eksplicitnom jednadžbom $y = \frac{2}{5}x - \frac{3}{5}$ (vidi sliku 1.2).*



Slika 1.3: Ravnina $2x - 5y + z = 3$.

Definicija 3 (Linearna jednadžba s tri nepoznanice). *Linearna jednadžba s tri nepoznanice x, y, z je jednadžba koja se može zapisati u obliku*

$$ax + by + cz = d$$

gdje su a, b, c i d zadani brojevi. Broj d zove se slobodni član, a a, b i c su koeficijenti jednadžbe. Rješenje jednadžbe je svaka uređena trojka brojeva čije uvrštavanje u jednadžbu na mjesto nepoznanica x, y i z daje istinitu numeričku jednakost.

Primjer 5. *Jednadžba $2x - 5y + z = 3$ je linearna jednadžba s tri nepoznanice. Trojka $(4, 1, 0)$ je jedno njeno rješenje, a trojka $(1, 2, 1)$ nije rješenje te jednadžbe.*

Geometrijski, skup rješenja linearne jednadžbe s tri nepoznanice možemo interpretirati kao ravninu u prostoru, dakle svaka linearna jednadžba s tri nepoznanice ima beskonačno mnogo rješenja (vidi sliku 1.3).

Definicija 4 (Linearna jednadžba s n nepoznanica). *Linearna jednadžba s n nepoznanica x_1, x_2, ..., x_n je jednadžba koja se može zapisati u obliku*

$$a_1x_1 + a_2x_2 + \ldots + a_nx_n = b$$

gdje su $a_1, a_2, \ldots, a_n, b$ zadani brojevi. Broj b zove se slobodni član, a $a_1, a_2, \ldots, a_n$ su koeficijenti jednadžbe. Rješenje jednadžbe je svaka uređena n-torka brojeva čije uvrštavanje u jednadžbu na mjesto napoznanicâ x_i daje istinitu numeričku jednakost.

Primjer 6. *Jednadžba $2x_1 + x_2 - 5x_3 - 4x_4 + x_5 = 0$ je linearna jednadžba s pet nepoznanica. Uređene petorke $(1, 1, 1, 0, 2)$ i $(0, 0, 0, 0, 0)$ su dva od njenih rješenja, a petorka $(1, 2, 1, 2, 1)$ nije rješenje te jednadžbe.*

Zadatak 1. *Koliko najviše nepoznanicia može imati jedna linearna jednadžba koja ima jedinstveno rješenje?*

Ako linearna jednadžba s 2 ili više nepoznanica ima sve koeficijente osim jednog jednake nuli, opišite skup njenih rješenja!

Možemo ukratko reći da je linearna jednadžba s određenim nepoznanicama jednadžba kojom iskazujemo da određena linearna kombinacija tih nepoznanica ima određenu vrijednost (jednaku slobodnom članu). Pritom, nije dobro reći da je slobodni član „onaj broj desno od jednakosti u jednadžbi”. Naime, iako je u sređenom obliku uobičajeno slobodni član pisati desno od znaka jednakosti, bolje je naglasiti njegov smisao: to je konstantni član jednadžbe, tj. član koji ne sadrži nijednu od nepoznanica (gdje pod članom izraza mislimo na aditivni član, tj. podizraz koji je pribrojen ostatku promatranog izraza).

☼ **Ponovimo bitno...** Linearne jednadžbe s određenim brojem nepoznanica su jednadžbe koje se mogu zapisati u obliku u kom je zbroj tih nepoznanica pomnoženih s nekim (konstantnim) koeficijentima jednak određenog konstantnoj vrijednosti (slobodnom članu). Rješenje linearne jednadžbe s n nepoznanica je svaka uređena n-torka brojeva čije uvrštavanje na mjesto nepoznanica daje istinitu numeričku jednakost. Linearne jednadžbe s jednom, dvije ili tri nepoznanice možemo geometrijski predočiti kao točku na pravcu, pravac u ravnini odnosno ravninu u prostoru. ☺

1.2 Sustavi linearnih jednadžbi

Definicija 5 (Sustav linearnih jednadžbi)**.** *Sustav linearnih jednadžbi je skup od konačno mnogo linearnih jednadžbi s istim nepoznanicama za koje tražimo zajedničko rješenje. Rješenje sustava je svaka uređena n-torka brojeva koja zadovoljava* sve *jednadžbe sustava.*

Ako sustav ima m jednadžbi s n nepoznanica, zovemo ga $m \times n$-sustavom. Sustavi kod kojih su svi slobodni članovi jednaki nuli zovu se homogeni sustavi, a ostali se zovu nehomogeni sustavi.

Primjer 7. *Primjer (homogenog) sustava s dvije jednadžbe i tri nepoznanice je sustav*

$$x + y + z = 0,$$

$$-2x + y = 0.$$

Njegovo rješenje je npr. trojka $(0, 0, 0)$ jer zadovoljava obje jednadžbe, a trojka $(1, -1, 0)$ nije rješenje sustava jer zadovoljava samo prvu jednadžbu.

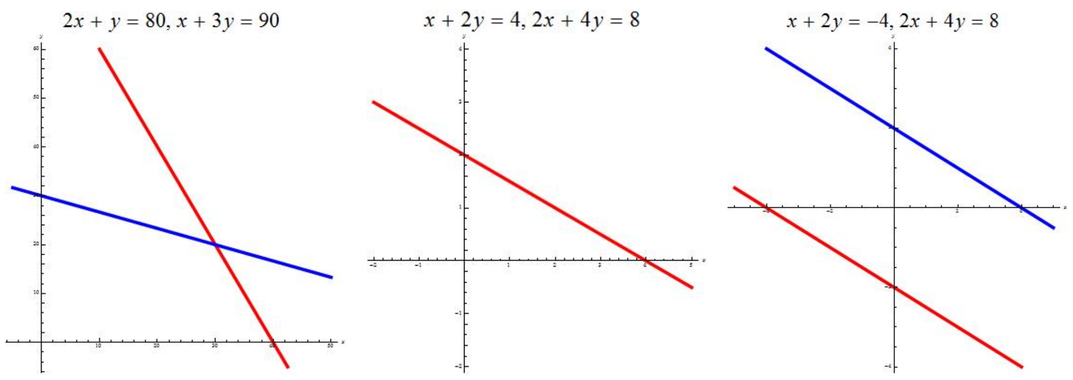
Sustavi linearnih jednadžbi česti su u primjenama, primjerice u stehiometrijskim zadacima:

Primjer 8. *U vodi je otopljeno 0,6190 grama smjese natrijeva klorida i kalijeva klorida te je dodan srebrov nitrat. Istaložilo je 1,3211 grama srebrova klorida. Treba odrediti masene udjele natrijeva i kalijeva klorida u polaznoj smjesi.*

Molarna masa NaCl je 58,45 g mol^{-1}, molarna masa KCl je 74,56 g mol^{-1}, a molarna masa AgCl je 143,34 g mol^{-1}. Neka je x masa NaCl u smjesi, a y masa KCl u smjesi. Iz uvjeta zadatka proizlazi sustav od dvije linearne jednadžbe s dvije nepoznanice:

$$x + y = 0{,}6190\,\mathrm{g}$$

$$\frac{143{,}34}{58{,}45}x + \frac{143{,}34}{74{,}56}y = 1{,}3211\,\mathrm{g}.$$



(a) (b) (c)

Slika 1.4: 2×2-sustavi s jedinstvenim rješenjem(lijevo), s beskonačno mnogo rješenja (sredina) i bez rješenja (desno).

Zadatak 2. *Postavite sustav linearnih jednadžbi za sljedeći problem: neka smjesa se sastoji od tri sastojka, od kojih svaki sadrži dušik i sumpor. Analitičkim metodama je utvrđeno da je maseni udio dušika u smjesi* 4,38%*, a sumpora* 1,06%*. Nadalje, utvrđeno je da je maseni udio dušika u prvom sastojku* 8,20%*, maseni udio sumpora u drugom sastojku* 2,40%*, a treći sastojak smjese sadrži* 2, 80% *dušika i* 1,00% *sumpora. Odredite masene udjele sastojaka u smjesi.*

Kao što smo rekli, jedna linearna jednadžba s dvije nepoznanice predstavlja pravac u ravnini, dakle dvije takve jednadžbe predstavljaju dva pravca. Kako tražimo zajednička rješenja jednadžbi, slijedi da u slučaju 2×2-sustava tražimo presjek dva pravca u ravnini. Rješenja 2×2-sustava su točke sjecišta tih pravaca zapisana koordinatno.

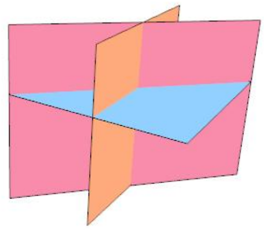
Iz geometrije ravnine jasno je da imamo tri mogućnosti:

- Pravci se sijeku u jednoj točki (x, y) — sustav ima jedinstveno rješenje;
- Pravci su podudarni — sustav ima beskonačno rješenja (sve točke tog jednog pravca su rješenja).
- Pravci su paralelni i različiti — sustav nema rješenja;

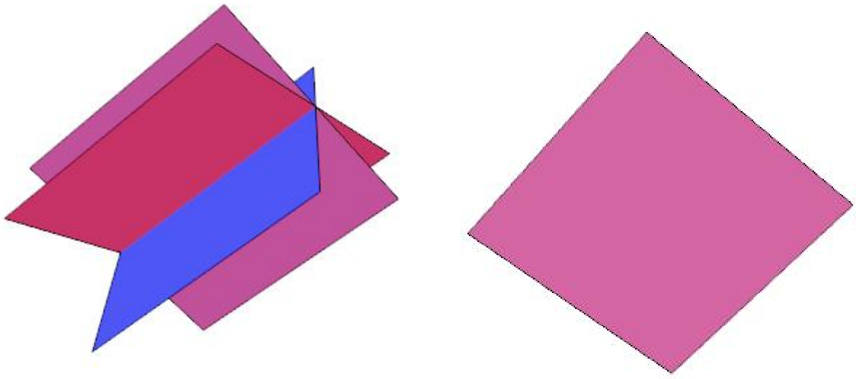
Te tri situacije ilustrirane su slikom 1.2.

U slučaju više jednadžbi s dvije nepoznanice imamo više pravaca u ravnini kojima tražimo zajedničke točke, no opet imamo iste tri mogućnosti za ukupni broj rješenja sustava:

- Svi pravci idu kroz jednu točku (X, Y) — sustav ima jedinstveno rješenje (X, Y);
- Svi pravci su podudarni — sustav ima beskonačno rješenja (sve točke tog jednog pravca su rješenja).
- U ostalim slučajevima nema točke koja bi bila zajednička svim pravcima — sustav nema rješenja.



Slika 1.5: 3×3-sustavi s jedinstvenim rješenjem.



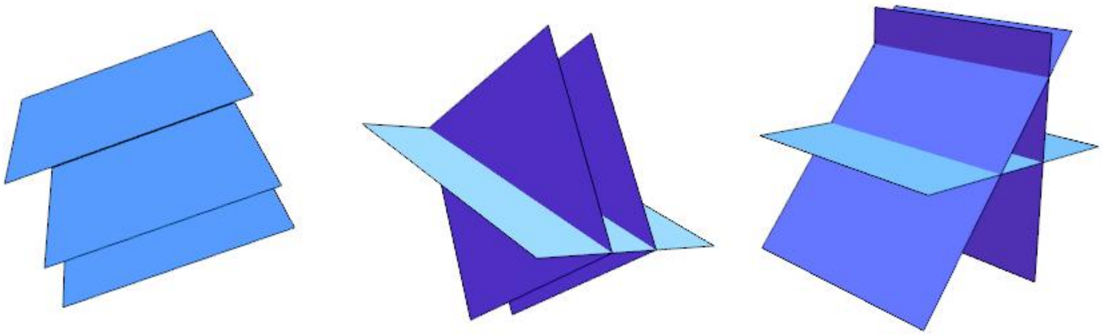
(a) (b)

Slika 1.6: 3×3-sustavi s beskonačno mnogo rješenja: tri travnine koje se sijeku u pravcu (moguće je i da se neke dvije od njih podudaraju) ili tri ravnine koje se podudaraju.

S druge strane, jedna linearna jednadžba s tri nepoznanice predstavlja ravninu u prostoru, dakle tri takve jednadžbe predstavljaju tri ravnine. Kako tražimo zajednička rješenja jednadžbi, slijedi da u slučaju 3×3-sustava tražimo presjek tri ravnine u prostoru. Rješenja 3×3-sustava su točke sjecišta tih ravnina zapisana koordinatno. Opet imamo tri mogućnosti:

- Ravnine se sijeku u jednoj točki (x, y, z) — sustav ima jedinstveno rješenje;
- Sve tri ravnine se podudaraju ili se dvije ravnine podudaraju i treća ih siječe ili sve tri prolaze istim pravcem — sustav ima beskonačno rješenja (u prvom slučaju sve točke te jedne ravnine su rješenja, a u drugom i trećem su rješenja točke presječnog pravca).
- U ostalim slučajevima (npr. tri različite paralelne ravnine) nema rješenja.

Sustavi s tri nepoznanice mogu imati npr. dvije jednadžbe — u tom slučaju geometrijski ekvivalent su dvije ravnine u prostoru (možemo li tada dobiti jedinstveno



Slika 1.7: 3×3-sustavi bez rješenja: tri međusobno paralelne ravnine (od kojih se eventualno dvije mogu podudarati), dvije paralelne ravnine koje treća siječe, po dvije ravnine se sijeku u pravcu koji nije zajednički svima trima.

rješenje?). Općenito, sustav m jednadžbi s 3 nepoznanice interpretiramo kao traženje presjeka m ravnina u prostoru. No, što se tiče mogućeg broja rješenja, nema ništa novoga. Općenito vrijedi:

Teorem 1. *Svaki sustav linearnih jednadžbi ima ili jedinstveno rješenje ili nema rješenja ili ima beskonačno mnogo rješenja.*

☼ **Ponovimo bitno. . .** Sustavi linearnih jednadžbi sastoje se od više linearnih jednadžbi kojima tražimo zajednička rješenja. Homogeni sustavi su oni u kojima sve jednadžbe imaju slobodne članove jednake nuli. Sustavi linearnih jednadžbi ili nemaju rješenja ili im je rješenje jedinstveno ili imaju beskonačno mnogo rješenja. ☺

1.3 Metoda supstitucije

Metoda supstitucije primjenjuje se i za druge, a ne samo za linearne, sustave jednadžbi. Ona se sastoji u tome da iz jedne jednadžbe izrazimo jednu od nepoznanica i uvrstimo dobiveni izraz na mjesto te nepoznanice u ostalim jednadžbama. Time smo smanjili broj jednadžbi i broj nepoznanica za jedan. Nastavljamo s daljnjim supstitucijama sve dok ne dođemo do samo jedne jednadžbe (ili pak kontradikcije). Metoda je vrlo zgodna za male sustave, osobito za 2×2-sustave. Kod sustava većih od 3×3 postaje jako nepregledna te su uobičajene druge metode.

Primjer 9. *Riješimo sustav iz primjera 8 metodom supstitucije. Iz prve jednadžbe je* $y = 0{,}6190\,\mathrm{g} - x$ *pa uvrštavanje u drugu jednadžbu daje*

$$2{,}452x + 1{,}922(0{,}6190\,\mathrm{g} - x) = 1{,}3211\,\mathrm{g}$$

iz čega dobijemo

$$x = 0{,}2479\,\mathrm{g}$$

te

$$y = 0{,}3711\,\text{g}.$$

Kako su bili traženi maseni udjeli, dobivamo

$$w(\text{NaCl}) = \frac{0{,}2479}{0{,}6190} = 0{,}4005 = 40{,}05\%$$

i

$$w(\text{KCl}) = \frac{0{,}3711}{0{,}6190} = 0{,}5995 = 59{,}95\%.$$

Primjer 10. *Riješimo sustav*

$$x + y = 7,$$
$$675x + 300y = 2850$$

metodom supstitucije. Iz prve jednadžbe je $y = 7 - x$ *pa uvrštavanjem u drugu jednadžbu dobivamo redom*

$$675x + 300(7 - x) = 2850,$$
$$375x = 750,$$
$$x = 2.$$

Kako je sustav imao dvije nepoznanice, rješenje mora biti uređen par. Drugu vrijednost odredimo iz formule supstitucije tj.

$$y = 7 - x = 7 - 2 = 5.$$

Dakle, rješenje sustava je $(2, 5)$.

Primjer 11. *Sustav*

$$x + 2y = -4,$$
$$2x + 4y = 0$$

rješavamo metodom supstitucije. Iz prve jednadžbe je $x = -4 - 2y$ *što daje*

$$2(-4 - 2y) + 4y = 0,$$

tj. $-8 = 0$. *Slijedi da sustav nema rješenja.*

Primjer 12. *Sustav*

$$4x + 2y = 6,$$
$$-8x - 4y = -12$$

rješavamo metodom supstitucije. Iz prve jednadžbe je $y = 3 - 2x$ *što daje*

$$-8x - 4(3 - 2x) = -12$$

tj. $-12 = -12$. *Ta jednakost sigurno vrijedi, dakle je druga jednadžba bila suvišna. Preostaje nam samo jednadžbe* $y = 3 - 2x$, *dakle sustav ima beskonačno mnogo rješenja oblika* $(x, 3 - 2x)$ *s proizvoljnim* $x \in \mathbb{R}$.

☼ **Ponovimo bitno...** Metoda supstitucije sastoji se u izražavanju jedne od nepoznanica iz jedne jednadžbe sustava i njenom uvrštavanju u ostale jednadžbe sustava. ☺

1.4 Gaussova metoda eliminacija

Gaussova metoda eliminacija sastoji se u postepenom poništavanju (eliminiranju) većine koeficijenata sustava koristeći određene operacije zvane elementarne transformacije. Kako se nepoznanice tokom rješavanja sustava ne mijenjaju, sam postupak možemo učiniti preglednijim ako ga izvodimo tablično, tj. tako da pišemo samo tablicu koeficijenata i slobodnih članova, a pamtimo koji koeficijenti idu uz koje nepoznanice.

Uvodimo sljedeće oznake:

- koeficijent uz nepoznanicu x_j u i-toj po redu jednadžbi označavamo s a_{ij};
- slobodni član u i-toj po redu jednadžbi označavamo s b_i;
- broj jednadžbi označavamo s m, a broj nepoznanica s n.

Definicija 6 (Matrica sustava linearnih jednadžbi)**.** *Matrica sustava*

$$\begin{array}{cccccc}
a_{11}x_1 & +a_{12}x_2 & +a_{13}x_3 & +\cdots & +a_{1n}x_n & = & b_1\\
a_{21}x_1 & +a_{22}x_2 & +a_{23}x_3 & +\cdots & +a_{2n}x_n & = & b_2\\
a_{31}x_1 & +a_{32}x_2 & +a_{33}x_3 & +\cdots & +a_{3n}x_n & = & b_3\\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & = & \vdots\\
a_{m1}x_1 & +a_{m2}x_2 & +a_{m3}x_3 & +\cdots & +a_{mn}x_n & = & b_m
\end{array}$$

je tablica oblika[1]

$$\left(\begin{array}{ccccc|c}
a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} & b_1\\
a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} & b_2\\
a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} & b_3\\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\
a_{m1} & a_{m2} & a_{m3} & \cdots & a_{mn} & b_m
\end{array}\right).$$

Primijetimo:

- retci matrice sustava odgovaraju pojedinim jednadžbama;
- stupci matrice sustava (osim zadnjeg) odgovaraju nepoznanicama;
- zadnji stupac matrice sustava odgovara slobodnim članovima;
- okomita crta odvaja taj stupac od ostalih i predstavlja niz znakova jednakosti;
- ako je sustav tipa $m \times n$, njegova matrica ima m redaka i $n+1$ stupac.

Primjer 13. *Matrica*

$$\left(\begin{array}{rrr|r}
1 & -1 & 2 & 2\\
0 & 1 & -3 & 1\\
8 & -24 & 10 & 0\\
2 & 1 & 1 & 7
\end{array}\right)$$

[1] Formalno, matrica sustava je samo dio ovako definirane matrice lijevo od okomite crte, a matrica koja je ovdje nazvana matricom sustava pravilno se zove proširenom matricom sustava.

predstavlja sustav s četiri jednadžbe i tri nepoznanice:

$$\begin{array}{rrrcl} x_1 & -x_2 & +2x_3 & = & 2, \\ & x_2 & -3x_3 & = & 1, \\ 8x_1 & -24x_2 & +10x_3 & = & 0, \\ 2x_1 & +x_2 & +x_3 & = & 7. \end{array}$$

Cilj Gaussove metode eliminacija je matricu sustava svesti na oblik iz kojeg je lako očitati rješenje. Kako je najlakše očitati rješenje sustava oblika

$$\begin{aligned} x_1 &= X_1, \\ x_2 &= X_2, \\ &\vdots \\ x_n &= X_n \end{aligned}$$

kojemu pripada matrica sustava

$$\left(\begin{array}{ccccc|c} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & X_1 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & X_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & X_n \end{array}\right),$$

cilj nam je dobiti matricu što sličniju posljednjoj: u dijelu lijevo od okomite crte na dijagonali (pozicijama kojima su jednaki redni broj retka i stupca) jedinice, a iznad i ispod dijagonale nule.

Kako želimo pojednostaviti sustav u oblik što sličniji gornjem, ali tako da ne promijenimo skup njegovih rješenja, očito ne možemo primjenjivati sasvim proizvoljne operacije.

Definicija 7 (Elementarne transformacije)**.** *Dozvoljene operacije koje u Gaussovoj metodi eliminacija smijemo primijeniti na matricu sustava zovu se elementarne transformacije. Ima ih tri:*

- *Zamjena dva retka (član po član);*
- *Množenje nekog retka brojem koji nije nula (množenje svih članova retka tim brojem);*
- *Pribrajanje jednog retka drugom (član po član).*

Tim operacijama se doduše mijenja matrica sustava, ali ne i skup rješenja. Između uzastopnih matrica koje dobivamo u Gaussovoj metodi eliminacija pišemo znak $\sim$ (i govorimo o ekvivalentnim matricama sustava).

Zamjena redaka matrice sustava je dozvoljena jer odgovara zamjeni redoslijeda jednadžbi, što očigledno ne mijenja rješenje sustava.

Primjer 14.

$$\left(\begin{array}{rrr|l} 1 & -1 & 2 & 2 \\ 0 & 1 & -3 & 1 \\ 8 & -24 & 10 & 0 \\ 2 & 1 & 1 & 7 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{rrr|l} 1 & -1 & 2 & 2 \\ 0 & 1 & -3 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 7 \\ 8 & -24 & 10 & 0 \end{array}\right).$$

Lako je zaključiti i zašto su druge dvije operacije dozvoljene: ako su neka dva broja jednaka ($L = D$), onda su jednaki i njihovi umnošci s nekim trećim brojem ($La = Da$); ako su dvaput po dva broja jednaka ($L_1 = D_1$ i $L_2 = D_2$), onda su jednaki i njihovi zbrojevi i razlike ($L_1 \pm L_2 = D_1 \pm D_2$).

Kako množenje retka brojem različitim od nule odgovara množenju jednadžbe tim brojem, to također ne mijenja rješenja te jednadžbe pa time ni cijelog sustava. Kako je dijeljenje brojem $\alpha \neq 0$ isto što i množenje brojem $\beta = \frac{1}{\alpha}$, slijedi da ova elementarna transformacija dozvoljava i dijeljenje retka brojem koji nije nula.

Primjer 15.

$$\left(\begin{array}{rrr|l} 1 & -1 & 2 & 2 \\ 0 & 1 & -3 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 7 \\ 8 & -24 & 10 & 0 \end{array}\right) \begin{array}{l} \\ \\ \\ \cdot\frac{1}{2} \end{array} \sim \left(\begin{array}{rrr|l} 1 & -1 & 2 & 2 \\ 0 & 1 & -3 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 7 \\ 4 & -12 & 5 & 0 \end{array}\right).$$

Pribrajanje jednog retka drugom odgovara zbrajanju dvije jednadžbe sustava, što također ne mijenja skup rješenja.

Primjer 16.

$$\left(\begin{array}{rrr|l} 1 & -1 & 2 & 2 \\ 0 & 1 & -3 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 7 \\ 4 & -12 & 5 & 0 \end{array}\right) \begin{array}{l} +\text{drugi redak} \\ \\ \\ \\ \end{array} \sim \left(\begin{array}{rrr|l} 1 & 0 & -1 & 3 \\ 0 & 1 & -3 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 7 \\ 4 & -12 & 5 & 0 \end{array}\right).$$

Budući je oduzimanje nekog retka od nekog drugog isto što i množenje jednog retka s -1 te zatim pribrajanje tom drugom retku, slijedi da kombinacija ove i prethodne elementarne transformacije dozvoljava i oduzimanje jednog retka od drugog. Nadalje, primijetimo da elementarne transformacije dozvoljavaju dodavanje i oduzimanje proizvoljnog višekratnika jednog retka nekom drugom retku.

Primjer 17. *Želimo li recimo trostruki drugi redak oduzeti od četvrtog, to je dozvoljeno jer je ekvivalentno sljedećem redoslijedu elementarnih transformacija:*

1. Drugi redak pomnožimo s -3.

2. Tako izračunati novi drugi redak dodamo četvrtom retku.

3. Drugi redak podijelimo s -3, čime ga vraćamo u oblik prije prvog koraka.

Na konkretnom primjeru to bi izgledalo ovako:

$$\left(\begin{array}{rrr|r} 0 & -1 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \\ 3 & -12 & 5 & 0 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{rrr|l} 0 & -1 & 2 & 2 \\ -3 & -3 & -3 & 3 \\ 3 & -12 & 5 & 0 \end{array}\right) \sim$$

$$\sim \left(\begin{array}{rrr|r} 0 & -1 & 2 & 2 \\ -3 & -3 & -3 & 3 \\ 0 & -15 & 2 & 3 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{rrr|r} 0 & -1 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \\ 0 & -15 & 2 & 3 \end{array}\right).$$

U Gaussovoj metodi eliminacija sustav s jedinstvenim rješenjem prepoznat ćemo po tome što ćemo matricu sustava elementarnim transformacijama uspjeti svesti na oblik

$$\left(\begin{array}{ccccc|c} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & X_1 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & X_2 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & X_3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & X_n \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{array}\right).$$

Nulretci (retci u kojima su samo nule) ne moraju postojati. Oni odgovaraju suvišnim jednadžbama, tj. jednakostima $0 = 0$. U ovom slučaju rješenje polaznog sustava je n-torka $(x_1, x_2, \dots, x_n) = (X_1, X_2, \dots, X_n)$.

Napomena 1. *Cramerov sustav je sustav s jedinstvenim rješenjem koji je tipa $n \times n$ (dakle, ima onoliko jednadžbi koliko ima nepoznanica).*

Primjer 18. *Elementarnim transformacijama se sustav*

$$\left(\begin{array}{rrr|r} 1 & -1 & 2 & 2 \\ 0 & 1 & -3 & 1 \\ 8 & -24 & 10 & 0 \\ 2 & 1 & 1 & 7 \end{array}\right)$$

može svesti na oblik

$$\left(\begin{array}{rrr|r} 1 & 0 & 0 & 3 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right)$$

te taj sustav ima samo jedno rješenje: $(3, 1, 0)$ *tj.* $x_1 = 3$, $x_2 = 1$, $x_3 = 0$.

Primijetimo da sustavi koji imaju manje jednadžbi nego nepoznanica ne mogu imati jedinstveno rješenje — ili ga uopće nemaju ili ih je beskonačno mnogo.

Sustave bez rješenja uvijek prepoznajemo po tome što se u nekom trenutku rješavanja pojavi kontradiktorna jednadžba, tj. jednakost oblika $\spadesuit = 0$ gdje je $\spadesuit$ broj različit od nule. U Gaussovoj metodi eliminacija to je vidljivo tako što se u nekom trenutku postupka kao neki od redaka matrice sustava dobije redak oblika

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 0 & 0 & \dots & 0 & \spadesuit \end{array}\right)$$

s $\spadesuit \neq 0$. Taj redak odgovara kontradiktornoj jednadžbi

$$0x_1 + 0x_2 + \cdots + 0x_n = \spadesuit.$$

Homogeni sustavi uvijek imaju bar jedno rješenje (sve nepoznanice jednake 0) te je ova situacija nemoguća za homogene sustave. Spomenuto rješenje homogenog sustava $(0, 0, \dots, 0)$ zove se trivijalno rješenje.

Primjer 19. *Ako na matricu sustava*

$$\left(\begin{array}{ccccc|c} 1 & 0 & -3 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 3 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & -7 & 7 & 3 & 5 \end{array}\right)$$

primijenimo elementarne transformacije (prvi redak pomnožimo s 2 *i zatim prvi i drugi oduzmemo od trećeg), dobit ćemo*

$$\left(\begin{array}{ccccc|c} 2 & 0 & -6 & 4 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 3 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{array}\right)$$

te sustav nema rješenja.

U Gaussovoj metodi eliminacija sustav s beskonačno mnogo rješenja prepoznat ćemo po konačnoj matrici koja je oblika

$$\left(\begin{array}{cccccccc|c} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \heartsuit & \cdots & \heartsuit & X_1 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & \heartsuit & \cdots & \heartsuit & X_2 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & \heartsuit & \cdots & \heartsuit & X_3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \heartsuit & \cdots & \heartsuit & X_k \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{array}\right).$$

Pritom su sa $\heartsuit$ i $X_1, \dots, X_k$ označeni bilo kakvi brojevi. Broj k (broj jedinica na dijagonali koji nam je na kraju preostao) je manji od broja nepoznanica n (tj. imamo bar jedan stupac tipa $\heartsuit$ — takve stupce zvat ćemo „umetnuti stupci”). Naravno, k ne može biti veći od broja jednadžbi polaznog sustava niti od broja nepoznanica. I ovdje nulretci ne moraju postojati.

U slučaju završne matrice koja ukazuje na postojanje beskonačno mnogo rješenja, rješenje očitavamo na sljedeći način: nepoznanicama koje odgovaraju umetnutim stupcima pridružujemo slobodne parametre (svakoj svoj) — te varijable mogu poprimati proizvoljne vrijednosti. Vrijednosti nepoznanica koje odgovaraju stupcima lijevo od umetnutih (prvih k nepoznanica) ovise o tim parametrima; tu ovisnost zapisujemo tako da konačnu matricu ponovno prevedemo u oblik jednadžbi.

Primjer 20. *Sustav*

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & -1 & 2 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & -3 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & -5 & 6 & 7 \end{array}\right)$$

se elementarnim transformacijama može svesti na oblik

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & -1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & -3 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & -1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & -3 & 2 & 1 \end{array}\right).$$

Treći i četvrti stupac su „umetnuti" pa vrijednosti x_3 i x_4 mogu biti proizvoljne. Pišemo: $x_3 = t \in \mathbb{R}$, $x_4 = s \in \mathbb{R}$. Završna matrica odgovara sustavu

$$x_1 - x_3 + 2x_4 = 3,$$

$$x_2 - 3x_3 + 4x_4 = 1$$

te je rješenje sustava

$$x_1 = 3 + t - 2s,\ x_2 = 1 + 3t - 2s,\ x_3 = t \in \mathbb{R},\ x_4 = s \in \mathbb{R}.$$

Iako je načelno dozvoljeno provođenje elementarnih transformacija u bilo kojem redoslijedu, postoji algoritam koji daje redoslijed koji je za većinu sustava najefikasniji. Taj algoritam zove se[2] Gaussova metoda eliminacija. Pritom pozicije matrice sustava označavamo s (i, j): i-ti redak, j-ti stupac. Nadalje, iako time mijenjamo broj jednadžbi sustava, ali ne i njegova rješenja, dozvolit ćemo brisanje nulredaka iz matrice sustava.

1. Uzmi sljedeći po redu (i-ti) stupac. Ako je ovo početni korak, uzmi prvi stupac ($i = 1$). Ako bi trebalo uzeti stupac slobodnih članova, STOP — gotovo je.

2. Ako je na dijagonalnoj poziciji (i, i) nula, zamjenom i-tog retka s nekim retkom ispod njega dovedi broj različit od nule na tu poziciju. Ako to ne možeš postići, STOP — gotovo je.

3. Pomoću „ključnog elementa" (broja na poziciji (i, i)) poništi ostatak stupca: svakom retku u kojem iznad/ispod ključnog elementa nije nula, dodaj odgovarajući višekratnik i-tog retka.

4. Ukoliko si dobio kontradiktornu jednadžbu, STOP! Sustav nema rješenja.

5. Ukoliko si dobio nulredak, možeš ga pobrisati iz matrice sustava.

6. Vrati se na prvi korak.

Ukoliko je postupak stao iz razloga navedenih u prva dva koraka, sve retke u kojima je na poziciji (i, i) broj različit od 1 podijelimo tim brojem i na kraju očitamo rješenje.

Napomena 2. *Ako tokom rješavanja naiđemo na nulstupac (stupac u kojem su samo nule), ignoriramo ga, a pripadna nepoznanica sigurno ima proizvoljnu vrijednost, koja pritom nije povezana ni s jednom od vrijednosti drugih nepoznanica.*

[2] Ovdje opisani algoritam zapravo se zove Gauss-Jordanova metoda eliminacija. Razlika između Gaussove i Gauss-Jordanove metode je u tome što se u Gaussovoj metodi poništavaju samo elementi ispod dijagonale, dok se u Gauss-Jordanovoj metodi poništavaju elementi ispod i iznad dijagonale matrice sustava.

	p-ksilen	m-ksilen	o-ksilen	etilbenzen	A_{uk}
λ / μm	εl / L mol^{-1}	εl / L mol^{-1}	εl / L mol^{-1}	εl / L mol^{-1}	
$12,5$	$1,502$	$0,0514$	0	$0,0408$	$0,1013$
$13,0$	$0,0261$	$1,1516$	0	$0,0820$	$0,09943$
$13,4$	$0,0342$	$0,0355$	$2,532$	$0,2933$	$0,2194$
$14,3$	$0,0340$	$0,0684$	0	$0,3470$	$0,03396$

Tablica 1.1: Tablica uz primjer 21.

Primjer 21. *Beer-Lambertov zakon za sustav s više komponenti koji se spektroskopski analizira glasi:*

$$A = \sum_{i=1}^{k} \varepsilon_i c_i l,$$

gdje je A apsorbancija, l je duljina puta, ε_i je molarni apsorpcijski koeficijent, a c_i je množinska koncentracija pojedine komponente (sumira se po svim komponentama). Pri nekoj spektroskopskoj analizi dobiveni su podaci prikazani tablicom [3] 21.

Beer-Lambertov zakon nam daje sustav iz kojeg možemo odrediti nepoznate koncentracije komponenti:

$$1{,}502c_1 + 0{,}0514c_2 + 0{,}0408c_4 = 0{,}1013\,\mathrm{M},$$

$$0{,}0261c_1 + 1{,}1516c_2 + 0{,}0820c_4 = 0{,}09943\,\mathrm{M}$$
$$0{,}0342c_1 + 0{,}0355c_2 + 2{,}532c_3 + 0{,}2933c_4 = 0{,}2194\,\mathrm{M}$$
$$0{,}0340c_1 + 0{,}0684c_2 + 0{,}3470c_4 = 0{,}03396\,\mathrm{M}.$$

Očigledno bi bilo mukotrpno „ručno” rješavati takav sustav. Za ovakve realistične primjere koriste se gotovi programi (primjerice Mathematica) u koje je ugrađena neka varijanta Gaussove metode eliminacija.

☼ **Ponovimo bitno...** Dozvoljene operacije u Gaussovoj metodi eliminacija su elementarne transformacije koje primjenjujemo na matricu sustava. Matrica sustava je tablični zapis koeficijenata jednadžbi sustava i slobodnih članova u kojem retci odgovaraju pojedinim jednadžbama, a stupci pojedinim nepoznanicama. Postoje tri vrste elementarnih transformacija: zamjena dva retka matrice sustava, množenje retka matrice sustava brojem različitim od nule i pribrajanje jednog retka matrice sustava drugom. Cilj Gaussove metode je na dijagonali matrice sustava dobiti jedinice, a ispod i iznad dijagonale nule. Nulretke koji se pojave u algoritmu možemo brisati jer predstavljaju jednadžbe $0 = 0$. Ako se tokom eliminacija pojavi redak u kojem su svi koeficijenti osim onog u zadnjem stupcu nula, taj redak predstavlja kontradiktornu jednadžbu i sustav nema rješenja. Ako je konačna matrica sustava potpuno eliminirana, tj. do na stupac slobodnih članova sadrži na dijagonali samo jedinice, a izvan dijagonale samo nule, sustav ima jedinstveno rješenje. Ako ne nastupi nijedan od prethodna dva slučaja, sustav ima beskonačno mnogo rješenja. ☺

[3] Izvor: `http://www.ch.ic.ac.uk/harrison/Teaching/Sheet1.pdf`

1.5 Izjednačavanje kemijskih reakcija pomoću sustava linearnih jednadžbi

Kao što znamo, kemijske jednadžbe se pišu u obliku R $\longrightarrow$ P (reaktanti $\longrightarrow$ produkti). Uz svaki reaktant i produkt zapisuje se broj zvan stehiometrijski koeficijent; stehiometrijski koeficijenti u danoj kemijskoj jednadžbi opisuju omjere množina pojedinih reaktanata i produkata. Primjerice, jednadžba $\mathrm{CH_4(g)} + 2\,\mathrm{O_2(g)} \longrightarrow \mathrm{CO_2(g)} + 2\,\mathrm{H_2O(g)}$ nam, među ostalim, kaže da pri gorenju metana za svaki 1 mol metana i 2 mola kisika nastaje 1 mol ugljikova dioksida i 2 mola vode. Po dogovoru, stehiometrijski koeficijenti reaktanata uzimaju se s negativnim, a stehiometrijski koeficijenti produkata s pozitivnim predznakom. Tako su u gornjem primjeru stehiometrijski koeficijenti metana, kisika, ugljikovog dioksida i vode redom -1, -2, 1 i 2.

Ukoliko samo znamo reaktante i produkte, jednadžba reakcije nije izjednačena dok ne odredimo stehiometrijske koeficijente svih reaktanata i produkata. Pritom mora vrijediti da za svaku vrstu atoma ili iona broj jedinki s lijeve strane jednadžbe mora biti jednak broju jedinki s desne strane. Postoje razni načini izjednačavanja kemijskih jednadžbi. U slučaju da su poznati svi reaktanti i svi produkti, problem se može svesti na rješavanje sustava linearnih jednadžbi.

Recimo da promatramo gorenje etanola $\mathrm{C_2H_5OH(l)}$, dakle reakciju etanola s kisikom. Poznato je da u toj reakciji nastaju ugljikov dioksid i voda (vodena para). Potrebno je stoga odrediti stehiometrijske koeficijente u jednadžbi

$$\mathrm{C_2H_5OH(l)} + \mathrm{O_2(g)} \longrightarrow \mathrm{CO_2(g)} + \mathrm{H_2O(g)}.$$

Za svaki od elemenata $\mathrm{E} \in \{\ \mathrm{C},\ \mathrm{H},\ \mathrm{O}\}$ u reakciji postavlja se po jedna linearna jednadžba u kojoj se odgovarajući nepoznati koeficijent x_i množi s brojem E-ova u odgovarajućem reaktantu/produktu:

$$\begin{array}{ll} \mathrm{C}: & 2x_1 + x_3 = 0 \\ \mathrm{H}: & 6x_1 + 2x_4 = 0 \\ \mathrm{O}: & x_1 + 2x_2 + 2x_3 + x_4 = 0 \end{array} .$$

Prva jednadžba izražava da je ukupna promjena broja atoma ugljika u reakciji jednaka nuli — nisu niti nestali niti nastali novi atomi ugljika. Pritom je $2x_1 < 0$ jer x_1 opisuje broj jedinki etanola koje ulaze u reakciju i u njoj se troše pa je $x_1 < 0$, dok je $x_3 > 0$ jer opisuje koliko jedinku ugljikova dioksida je nastalo u reakciji. Slično druga i treća jednadžba izražavaju da se broj atoma vodika odnosno kisika ne mijenja.

Uočimo: problem izjednačavanja kemijskih jednadžbi se svodi na homogeni sustav linearnih jednadžbi (objasnite zašto sustav mora biti homogen!). Za takve sustave znamo da imaju bar jedno rješenje: svi $x_i = 0$ (tj. svaku zamišljenu reakciju je moguće uravnotežiti na trivijalan način: tako da nijednog sudionika nema ☺). Broj jednadžbi sustava jednak je broju elemenata (ili drugih odabranih osnovnih komponenti, primjerice iona) koji se pojavljuju u reakciji. Broj nepoznanica jednak je broju sudionika reakcije.

Obično je cilj odrediti točno jedno netrivijalno rješenje s pozitivnim cjelobrojnim[4] komponentama, i to obično ono koje ima svojstvo da su x_i-ovi relativno prosti (tj. najmanji mogući).

Rješenje gornjeg sustava dano je s $x_1 = -\frac{1}{3}t$, $x_2 = -t$, $x_3 = \frac{2}{3}t$, $x_4 = t$, $t \in \mathbb{R}$. Da bi svi x_i bili prirodni brojevi, potrebno je da je $t \in \mathbb{N}$ višekratnik od 3. Najmanji takav je $t = 3$ koji daje rješenje $x_1 = -1$, $x_2 = -3$, $x_3 = 2$, $x_4 = 3$. Izjednačena jednadžba je stoga

$$\mathrm{C_2H_5OH(l) + 3O_2(g) \longrightarrow 2CO_2(g) + 3H_2O(g)}.$$

☼ **Ponovimo bitno...** Izjednačavanje kemijske jednadžbe svodi se na rješavanje homogenog sustava linearnih jednadžbi u kojem su nepoznanice stehiometrijski koeficijenti sudionika reakcije. Broj jednadžbi sustava jednak je broju elemenata ili drugih odabranih osnovnih jedinki (primjerice iona) od kojih su sastavljeni sudionici reakcije. ☺

1.6 Zadaci za vježbu

1. Metodom supstitucije riješite sustave linearnih jednadžbi:

   (a)
   $$\begin{aligned} 2x + y &= 3\ , \\ -3x + 4y &= 1\ . \end{aligned}$$

   (b)
   $$\begin{aligned} x - 3y &= 4\ , \\ 2x - 6y &= -2\ . \end{aligned}$$

   (c)
   $$\begin{aligned} x + 2y + 3z &= 1\ , \\ -2x \qquad + z &= 0\ , \\ x + 2y - z &= 0\ . \end{aligned}$$

   Rješenje: (a) $(x, y) = (1, 1)$; (b) sustav nema rješenja; (c) $(x, y, z) = \left(\frac{1}{8}, \frac{1}{16}, \frac{1}{4}\right)$.

2. Geometrijski interpretirajte sustave iz Zadatka 1. i njihova rješenja.
   Rješenje: (a) dva pravca u ravnini sijeku se u točki $(1, 1)$;
   (b) pravci su paralelni i različiti;
   (c) tri ravnine u prostoru sijeku se u točki $\left(\frac{1}{8}, \frac{1}{16}, \frac{1}{4}\right)$.

3. U kojem omjeru treba pomiješati 78%-tnu otopinu s 48%-tnom otopinom tvari A da bismo dobili 66%-tnu otopinu?

   Rješenje: $3 : 2$.

[4]Ponekad, vezano za konvencije o standarnim oblicima nekih vrsta reakcija, dozvoljavamo racionalne koeficijente. U takvim slučajevima obično je odgovarajućom konvencijom propisano da neki od reaktanata ima stehiometrijski koeficijent -1 odnosno da neki od produkata ima stehiometrijski koeficijent 1.

4. Gaussovom metodom eliminacija riješite sustave linearnih jednadžbi

(a)

$$\begin{aligned} x_1 + 2x_2 + 3x_3 &= 3 \ , \\ -2x_1 \qquad + x_3 &= -2 \ , \\ x_1 + 2x_2 - x_3 &= 3 \ , \\ -x_1 + 2x_2 + 12x_3 &= 1 \ . \end{aligned}$$

(b)

$$\begin{aligned} 2x_1 + 3x_2 + 11x_3 + 5x_4 &= 2 \ , \\ x_1 + x_2 + 5x_3 + 2x_4 &= 1 \ , \\ 2x_1 + x_2 + 3x_3 + 2x_4 &= -3 \ , \\ x_1 + x_2 + 3x_3 + 4x_4 &= -3 \ . \end{aligned}$$

(c)

$$\begin{aligned} x_1 - 5x_2 - 8x_3 + x_4 &= 3 \ , \\ 3x_1 + x_2 - 3x_3 - 5x_4 &= 1 \ , \\ x_1 \qquad - 7x_3 + 2x_4 &= -5 \ , \\ 11x_2 + 20x_3 - 9x_4 &= 2 \ . \end{aligned}$$

(d)

$$\begin{aligned} x_2 + x_3 &= 1 \ , \\ 2x_1 + x_2 \qquad &= 2 \ , \\ 2x_1 + 2x_2 + x_3 &= 3 \ , \\ 4x_1 + 3x_2 + x_3 &= 5 \ , \\ 2x_1 + 3x_2 + 2x_3 &= 4 \ . \end{aligned}$$

(e)

$$\begin{aligned} 3x_1 + 4x_2 + x_3 - x_4 &= 2 \ , \\ x_1 - x_2 + 2x_3 + x_4 &= 0 \ , \\ 2x_1 - 3x_2 - x_3 - x_4 &= -1 \ , \\ 5x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 2x_4 &= 13 \ . \end{aligned}$$

(f)

$$\begin{aligned} 7x_1 - 5x_2 - 2x_3 - 4x_4 &= 8 \ , \\ -3x_1 + 2x_2 + x_3 + 2x_4 &= -3 \ , \\ 2x_1 - x_2 - x_3 + 2x_4 &= 1 \ , \\ -x_1 \qquad + x_3 + 2x_4 &= -1 \ , \\ -x_2 + x_3 + 2x_4 &= 3 \ . \end{aligned}$$

(g)

$$\begin{aligned} 3x_1 + 3x_2 - 6x_3 - 2x_4 &= -1 \ , \\ 6x_1 + x_2 \qquad\quad - 2x_4 &= -2 \ , \\ 6x_1 - 7x_2 + 21x_3 + 4x_4 &= 3 \ , \\ 9x_1 + 4x_2 \qquad\quad + 2x_4 &= 3 \ , \\ 12x_1 - 6x_2 + 21x_3 + 2x_4 &= 1 \ . \end{aligned}$$

(h)

$$\begin{aligned} 2x_1 - x_2 + 2x_3 - 12x_4 &= -1 \ , \\ 4x_1 - 2x_2 - x_3 + x_4 &= 5 \ , \\ 6x_1 - 3x_2 - x_3 - x_4 &= 9 \ , \\ 2x_1 - x_2 - x_3 + 3x_4 &= 1 \ . \end{aligned}$$

(i)

$$\begin{aligned} 2x_1 + x_2 + 4x_3 + x_4 &= 0 \ , \\ 3x_1 + 2x_2 - x_3 - 6x_4 &= 0 \ , \\ 7x_1 + 4x_2 + 6x_3 - 5x_4 &= 0 \ , \\ x_1 \qquad\quad + 8x_3 + 7x_4 &= 0 \ . \end{aligned}$$

(j)

$$\begin{aligned} x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 2x_4 + x_5 &= 3 \ , \\ -2x_1 \qquad\quad + x_3 + x_4 - 5x_5 &= -2 \ , \\ x_1 + 2x_2 - x_3 + 6x_4 + 5x_5 &= 3 \ , \\ -x_1 + 2x_2 + 12x_3 - 5x_4 - 12x_5 &= 1 \ . \end{aligned}$$

Rješenje: (a) $x_1 = x_2 = 1,\ x_3 = 0$. (b) $x_1 = -2,\ x_2 = 0,\ x_3 = 1,\ x_4 = -1$.
(c) sustav nema rješenja. (d) $x_1 = \frac{1}{2}(1+t),\ x_2 = 1-t,\ x_3 = t \in \mathbb{R}$.
(e) $x_1 = 2,\ x_2 = 1,\ x_3 = -3,\ x_4 = 5$. (f) $x_1 = -1+t,\ x_2 = -3+t,$
$x_3 = t \in \mathbb{R},\ x_4 = 0$. (g) $x_1 = \frac{7}{5},\ x_2 = -4,\ x_3 = -\frac{11}{5},\ x_4 = \frac{16}{5}$.
(h) sustav nema rješenja. (i) $x_1 = x_2 = x_4 = t \in \mathbb{R},\ x_3 = -t$.
(j) $x_1 = 1 + t - 2s,\ x_2 = 1 - 3t - s,\ x_3 = t + s,\ x_4 = t \in \mathbb{R},\ x_5 = s \in \mathbb{R}$.

5. U ovisnosti o parametru $\lambda \in \mathbb{R}$ riješite sustave linearnih jednadžbi

(a)

$$\begin{aligned} 3x_1 + 2x_2 + x_3 &= -1 \ , \\ 7x_1 + 6x_2 + 5x_3 &= \lambda \ , \\ 5x_1 + 4x_2 + 3x_3 &= 2 \ . \end{aligned}$$

(b)

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 + \lambda x_3 &= 2 \ , \\ 3x_1 + 4x_2 + 2x_3 &= \lambda \ , \\ 2x_1 + 3x_2 - x_3 &= 1 \ . \end{aligned}$$

(c)

$$\begin{aligned} x_1 \qquad + 3x_3 &= -3 \ , \\ 2x_1 + \lambda x_2 + x_3 &= -2 \ , \\ x_1 + 2x_2 - \lambda x_3 &= 1 \ . \end{aligned}$$

(d)

$$\begin{aligned} \lambda x_1 + x_2 + x_3 &= 1 \ , \\ x_1 + \lambda x_2 + x_3 &= 1 \ , \\ x_1 + x_2 + \lambda x_3 &= 1 \ . \end{aligned}$$

(e)

$$\begin{aligned} 2x_1 + 3x_2 + x_3 + 2x_4 &= 3 \ , \\ 8x_1 + 12x_2 + 7x_3 + \lambda x_4 &= 9 \ , \\ 4x_1 + 6x_2 + 3x_3 + 4x_4 &= 5 \ , \\ 6x_1 + 9x_2 + 5x_3 + 6x_4 &= 7 \ . \end{aligned}$$

Rješenje: (a) $\lambda = 5 \ \Rightarrow \ x_1 = 4 - t,\ x_2 = \frac{1}{2}(11 - 4t),\ x_3 = t \in \mathbb{R};\ \ \lambda \neq 5 \ \Rightarrow$ sustav nema rješenja. (b) $\lambda = 3 \ \Rightarrow \ x_1 = 5 - 10t,\ x_2 = -3 + 7t,\ x_3 = t \in \mathbb{R};$ $\lambda \neq 3 \ \Rightarrow \ x_1 = 3k + 6,\ x_2 = -2k - 4,\ x_3 = -1$.
(c) $\lambda = -5 \ \Rightarrow$ sustav nema rješenja; $\lambda = 2 \ \Rightarrow \ x_1 = -3-3t,\ x_2 = 2+\frac{5}{2}t,\ x_3 = t \in \mathbb{R};\ \ \lambda \neq -5,\ \lambda \neq 2 \ \Rightarrow \ x_1 = -\frac{3(\lambda+1)}{\lambda+5},\ x_2 = \frac{4}{\lambda+5},\ x_3 = -\frac{4}{\lambda+5}$. (d) $\lambda = -2 \ \Rightarrow$ sustav nema rješenja; $\lambda = 1 \ \Rightarrow \ x_1 = 1 - t - s,\ x_2 = t \in \mathbb{R},\ x_3 = s \in \mathbb{R};$ $\lambda \neq -2,\ \lambda \neq 1 \ \Rightarrow \ x_1 = x_2 = x_3 = \frac{1}{\lambda+2}$.
(e) $\lambda = 8 \ \Rightarrow \ x_1 = t \in \mathbb{R},\ x_2 = s \in \mathbb{R},\ x_3 = -1,\ x_4 = 2 - t - \frac{3}{2}s;$ $\lambda \neq 8 \ \Rightarrow \ x_1 = t \in \mathbb{R},\ x_2 = \frac{1}{3}(4 - 2t),\ x_3 = -1,\ x_4 = 0$.

6. Pomoću sustava linearnih jednadžbi izjednačite kemijske jednadžbe

   (a) $CO_2 + H_2O \longrightarrow O_2 + C_6H_{12}O_6$
   (b) $Mg(OH)_2 + HCl \longrightarrow H_2O + MgCl_2$
   (c) $NaHCO_3 \longrightarrow Na_2CO_3 + CO_2 + H_2O$
   (d) $HNO_3 + I_2 \longrightarrow HIO_3 + NO + H_2O$
   (e) $K_4Fe(CN)_6 + H_2SO_4 + H_2O \longrightarrow K_2SO_4 + FeSO_4 + (NH_4)_2SO_4 + CO$

   Rješenje:

   (a) $6\,CO_2 + 6\,H_2O \longrightarrow 6\,O_2 + C_6H_{12}O_6$

(b) $Mg(OH)_2 + 2\,HCl \longrightarrow 2\,H_2O + MgCl_2$

(c) $2\,NaHCO_3 \longrightarrow Na_2CO_3 + CO_2 + H_2O$

(d) $10\,HNO_3 + 3\,I_2 \longrightarrow 6\,HIO_3 + 10\,NO + 2\,H_2O$

(e) $K_4Fe(CN)_6 + 6\,H_2SO_4 + 6\,H_2O \longrightarrow 2\,K_2SO_4 + FeSO_4 + 3\,(NH_4)_2SO_4 + 6\,CO$

Poglavlje 2

Matrice

2.1 Vrste matrica

Matrica sustava je posebni slučaj matrice koji koristimo za pregledan zapis sustava linearnih jednadžbi, no opći pojam matrice je bitno širi.

Definicija 8 (Matrica)**.** *Matrica je svaka pravokutna tablica realnih ili kompleksnih brojeva. Brojevi u matrici zovu se njenim elementima. Matrice čiji elementi su realni brojevi zovemo realnim matricama, a one s kompleksnim elementima su kompleksne matrice. Matrica je reda (tipa) $m \times n$ ako ima m redaka i n stupaca.*

Matrice ograničavamo okruglim ili uglatim zagradama, a označavamo ih velikim slovima latinske abecede. Ako je A realna matrica tipa $m \times n$ pišemo:

$$A \in M_{m,n}$$

ili $A \in M_{m,n}(\mathbb{R})$. Dakle, $M_{m,n} = M_{m,n}(\mathbb{R})$ je skup svih realnih matrica tipa $m \times n$. Skup svih kompleksnih matrica tipa $m \times n$ se označava s $M_{m,n}(\mathbb{C})$.

Primjer 22. *Matrica* $A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$ *je tipa* 2×3*:* $A \in M_{2,3}$.

Ako je matrica označena slovom A, broj (element matrice) koji se nalazi u i-tom retku i j-tom stupcu označavamo s a_{ij}. Piše se $A = [a_{ij}]$. Uvijek se prvo navodi indeks retka, a onda indeks stupca. Matrice A i B su jednake matrice ako su istog tipa i $a_{ij} = b_{ij}$ za sve i, j.

Primjer 23. *Ako je* $A \in M_{2,3}$ *matrica iz primjera 22, onda je* $a_{12} = 1$, $a_{23} = 2$, *a* a_{32} *ne postoji jer matrica nema trećeg retka.*

Definicija 9 (Dijagonala matrice)**.** *Dijagonalu matrice čine brojevi kojima je indeks retka jednak indeksu stupca, tj. elementi* a_{ii}.

Definicija 10 (Vrste matrica)**.** *Matrice koje imaju jednako mnogo redaka i stupaca* $(m = n)$ *zovu se kvadratne matrice. Za kvadratnu matricu s* n *redaka i stupaca kažemo* *da je reda (tipa) n. Skup svih kvadratnih matrica reda n označava se s $M_n = M_n(\mathbb{R})$ odnosno u kompleksnom slučaju s $M_n(\mathbb{C})$.*

Matrice koje imaju jedan stupac ($n = 1$) zovu se matrice-stupci (stupčane matrice). Matrice koje imaju jedan redak ($m = 1$) zovu se matrice-retci (retčane matrice).

Nulmatrice su matrice kojima su svi elementi nule. U svakom skupu $M_{m,n}$ (odnosno $M_{m,n}(\mathbb{C})$) postoji po jedna nulmatrica, koju ćemo označavati s $0_{m,n}$.

Jedinične matrice su kvadratne matrice kojima su elementi na dijagonali jedinice, a ostali nule. Jediničnu matricu reda n označavat ćemo s I_n.

Dijagonalna matrica je svaka kvadratna matrica kojoj su svi elementi izvan dijagonale nule ($a_{ij} = 0$ za $i \neq j$).

Gornjetrokutasta matrica je kvadratna matrica kojoj su svi elementi ispod dijagonale nule ($a_{ij} = 0$ za $i > j$), a donjetrokutasta matrica je kvadratna matrica kojoj su svi elementi iznad dijagonale nule ($a_{ij} = 0$ za $i < j$).

Primjer 24. *Matrica*

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -3 \\ 0 & 5 \end{pmatrix} \in M_2$$

je kvadratna matrica reda 2, matrica

$$B = \begin{pmatrix} 1 \\ 89 \\ -34 \end{pmatrix} \in M_{3,1}$$

je stupčana matrica, a

$$C = \begin{pmatrix} 2 & -4 & 5+i & -2i & 0 \end{pmatrix} \in M_{1,5}(\mathbb{C})$$

je kompleksna matrica-redak.

Primjer 25. *Matrica*

$$I_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \in M_3$$

je jedinična matrica reda 3, a matrica

$$0_{2,4} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \in M_{2,4}$$

je nulmatrica tipa 2×4.

Primjer 26. *Matrica*

$$A = \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -3 \end{pmatrix} \in M_3$$

je dijagonalna, a matrica

$$B = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 & 0 \\ 9 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 4 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \in M_4$$

je donjetrokutasta.

Primijetimo da su dijagonalne matrice istovremeno gornje- i donjetrokutaste.
☼ **Ponovimo bitno...** Pravokutne tablice brojeva zovemo matricama. Skup svih realnih matrica s m redaka i n stupaca označavamo s $M_{m,n}$. Element matrice A koji je u i-tom retku i j-tom stupcu označavamo s a_{ij}. Elementi $a_{11}, a_{22}, \ldots$ čine dijagonalu matrice. U svakom skupu $M_{m,n}$ je s $0_{m,n}$ označena matrica kojoj su svi elementi nule i koju zovemo nulmatricom tipa $m \times n$. Matrice kojima je broj redaka jednak broju stupaca zovu se kvadratne matrice. U svakom skupu M_n kvadratnih matrica s n redaka i n stupaca s I_n je označena jedinična matrica; to je matrica koja na dijagonali ima jedinice, a ostali elementi su joj nule. ☺

2.2 Algebra matrica

Ako matrici A zamijenimo retke i stupce („preklopimo ju preko dijagonale"), dobivamo njenu transponiranu matricu A^t. Preciznije:

Definicija 11 (Transponirana matrica)**.** *Transponirana matrica matrice $A = [a_{ij}] \in M_{m,n}$ je matrica $A^t \in M_{n,m}$ koja na poziciji (i, j) ima a_{ji}. Ista definicija vrijedi i za $A \in M_{m,n}(\mathbb{C})$.*

Primjer 27.

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}^t = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 1 & -1 \\ 3 & 2 \end{pmatrix}.$$

Vrijedi:

$$(A^t)^t = A.$$

Definicija 12 (Simetrična matrica)**.** *Realnu matricu zovemo simetričnom ako je jednaka svojoj transponiranoj matrici, tj. ako je $a_{ij} = a_{ji}$ za sve i, j.*

Kako transponiranje zamjenjuje broj redaka i stupaca, vidimo da simetrične matrice moraju biti kvadratne.

Primjer 28. *Matrica*

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 3 \\ 1 & -1 & 2 \\ 3 & 2 & 5 \end{pmatrix}$$

je simetrična.

Kod kompleksnih matrica simetričnost obično nije zanimljiva, već srodno svojstvo hermitske konjugiranosti:

Definicija 13 (Hermitska matrica)**.** *Za matricu $A \in M_{m,n}(\mathbb{C})$ njena hermitski konjugirana matrica je matrica $A^* \in M_{n,m}(\mathbb{C})$ koju iz A dobijemo tako da ju transponiramo i sve elemente kompleksno konjugiramo (tj. na poziciji (i, j) u A^* je $\overline{a_{ji}}$).*

Kompleksna matrica je hermitska ako je jednaka svojoj hermitski konjugiranoj matrici (dakle, ako je $A = A^*$).

I hermitske matrice moraju biti kvadratne. Pritom za dijagonalne elemente vidimo da mora vrijediti $a_{ii} = \overline{a_{ii}}$, tj. svaki dijagonalni element mora sam sebi biti kompleksno konjugiran; to znači da dijagonalni elementi hermitske matrice moraju biti realni.

Primjer 29. *Matrica*

$$A = \begin{pmatrix} 12 & 1+i & i \\ 1-i & -3 & 2+3i \\ -i & 2-3i & 0 \end{pmatrix}$$

je hermitska.

Ponekad se koriste i antisimetrične matrice (matrice sa svojstvom $A^t = -A$) i antihermitske matrice (kompleksne matrice sa svojstvom $A^* = -A$).

Zadatak 3. *Provjerite da antisimetrične i antihermitske matrice moraju biti kvadratne, da na dijagonali antisimetrične matrice moraju biti nule i da na dijagonali antihermitske matrice moraju biti čisto imaginarni brojevi.*

Matrice su matematički objekti koji imaju mnoge sličnosti s brojevima. Uz određene uvjete, one se mogu zbrajati i oduzimati, množiti brojem, množiti međusobno. Ipak, postoje i mnoge razlike. Tako, primjerice, nije moguće jednu matricu dijeliti s drugom, a i operacije koje se mogu izvoditi često su kompliciranije ili imaju neka druga svojstva nego odgovarajuće operacije s brojevima.

2.2.1 Zbrajanje matrica i množenje matrica skalarom

Matrice se mogu zbrajati i oduzimati ako su istog tipa. To se radi tako da se zbrajaju odnosno oduzimaju elementi na istim pozicijama:

$$[a_{ij}] + [b_{ij}] = [a_{ij} + b_{ij}].$$

$$[a_{ij}] - [b_{ij}] = [a_{ij} - b_{ij}].$$

Rezultat zbrajanja odnosno oduzimanja matrica tipa $m \times n$ je matrica istog tipa.

Primjer 30. *Ako je* $A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$ *i* $B = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -3 \\ 2 & 1 & 1 \end{pmatrix}$, *onda je* $A + B = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 3 \end{pmatrix}$, $A - B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 6 \\ -2 & -2 & 1 \end{pmatrix}$.

Svojstva zbrajanja matrica slična su svojstvima zbrajanja brojeva međusobno. Tako za sve matrice $A, B, C \in \mathbb{M}_{m,n}$ (odnosno $A, B, C \in \mathbb{M}_{m,n}(\mathbb{C})$) vrijedi

- komutativnost: $A + B = B + A$,
- asocijativnost: $(A + B) + C = A + (B + C)$,
- nulmatrica istog tipa je neutralni element za zbrajanje: $A + 0_{m,n} = 0_{m,n} + A = A$,

- svaka matrica ima suprotnu matricu: $A + (-A) = -A + A = 0_{m,n}$ (suprotna matrica je matrica $-A$ koju iz A dobijemo tako da svim elementima promijenimo predznak).

Vrijedi i $A - B = A + (-B)$: to je zapravo definicija oduzimanja matrica.

Svaka matrica može se množiti brojem (skalarom). To se radi tako da se svaki njen element pomnoži tim brojem:

$$\alpha[a_{ij}] = [\alpha a_{ij}].$$

Množenje matrice skalarom ne mijenja tip matrice. Pritom, za realne matrice pod skalarima podrazumijevamo realne brojeve, a za kompleksne matrice se kao skalari uzimaju kompleksni brojevi.

Primjer 31. *Ako je* $A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$, *onda je* $-3A = \begin{pmatrix} -6 & -3 & -9 \\ 0 & 3 & -6 \end{pmatrix}$.

Svojstva množenja matrica skalarom slična su svojstvima množenja brojeva međusobno. Tako za sve skalare $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ i matrice $A, B \in \mathbb{M}_{m,n}$ (odnosno $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ i matrice $A, B \in \mathbb{M}_{m,n}(\mathbb{C})$) vrijedi

- $1 \cdot A = A$,
- $0 \cdot A = 0_{m,n}$ (nulmatrica),
- distributivnost: $(\alpha + \beta)A = \alpha A + \beta A$ i $\alpha(A + B) = \alpha A + \alpha B$,
- kvaziasocijativnost: $\alpha(\beta A) = (\alpha\beta)A$.

Usporedimo li gore navedena svojstva sa svojstvima zbrajanja vektora i množenja vektora skalarom (vidi poglavlje o klasičnoj algebri vektora) vidi se da su jedine razlike u tome što se ovdje svojstva odnose na matrice A, B, C istog tipa, a tamo su se odnosila na „vektore-strelice" $\vec{v}, \vec{w}, \vec{u}$. Kažemo da svaki skup $M_{m,n}$ čini po jedan (realni) vektorski prostor, a skup $M_{m,n}(\mathbb{C})$ čini (kompleksni) vektorski prostor.

2.2.2 Množenje matrica

Množenje matrica međusobno je kompliciranija operacija od zbrajanja i množenja skalarom, a i uvjet kad možemo množiti dvije matrice je neobičniji. Razlog takvom relativno kompliciranom pravilu množenja vezan je za primjene matrica — drugačije definirano množenje ne bi omogućavalo nijednu od uobičajenih primjena matrica.

Upozorimo prvo da kod množenja matrica osim na sam uvjet mogu li se dvije matrice pomnožiti svakako treba paziti na redoslijed.

Matrica-redak $A \in M_{1,n}$ i matrica-stupac $B \in M_{m,1}$ mogu se množiti u redoslijedu $A \cdot B$ samo ako je $m = n$ (matrica-redak A je široka koliko je matrica-stupac B visoka). Rezultat takvog množenja je matrica iz M_1. Pravilo za množenje takvih matrica je dano s

$$(a_1\, a_2\, \ldots\, a_n) \cdot \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = (a_1 b_1 + a_2 b_2 + \ldots a_n b_n).$$

To će nam biti opće pravilo za množenje retka sa stupcem: redom množimo odgovarajuće članove te dobivene produkte zbrojimo.

Primjer 32.

$$\begin{pmatrix} 1 & 5 & -3 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 6 \\ -2 \end{pmatrix} = (1 \cdot 2 + 5 \cdot 1 + (-3) \cdot 6 + 0 \cdot (-2)) = (-11).$$

U slučaju da je prva matrica u poretku $A \cdot B$ matrica-stupac ($A \in M_{m,1}$), a druga matrica-redak ($B \in M_{1,n}$), izračunavanje produkta $A \cdot B$ je moguće neovisno o tom jesu li m i n jednaki ili ne. Rezultat će biti matrica tipa $m \times n$ (tj. imat će redaka koliko prva, a stupaca koliko druga matrica produkta). Pravilo za množenje takvih matrica je dano s

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} \cdot (b_1\, b_2 \ldots b_n) = \begin{pmatrix} a_1 b_1 & a_1 b_2 & \ldots & a_1 b_n \\ a_2 b_1 & a_2 b_2 & \ldots & a_2 b_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_m b_1 & a_m b_2 & \ldots & a_m b_n \end{pmatrix}.$$

Primjer 33.

$$\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 6 \\ -2 \end{pmatrix} \cdot (1\ \ 5) = \begin{pmatrix} 2 & 10 \\ 1 & 5 \\ 6 & 30 \\ -2 & -10 \end{pmatrix}.$$

Općenito, dvije matrice A i B možemo množiti u redoslijedu $A \cdot B$ ako su ulančane: to znači da prva mora imati onoliko stupaca koliko druga ima redaka. Drugačije rečeno: produkt $A \cdot B$ matrice $A \in M_{m,k}$ s $B \in M_{p,n}$ je smislen ako je $k = p$. U tom slučaju rezultat je matrica tipa $m \times n$ ($A \cdot B \in M_{m,n}$) kojoj element na poziciji (i, j) računamo množenjem i-tog retka od A s j-tim stupcem od B (po pravilu opisanom za množenje matrice-retka s matricom-stupcem). Formalno: ako je c_{ij} element na poziciji (i, j) matrice $A \cdot B$, on je jednak

$$c_{ij} = \sum_{l=1}^{k} a_{il} b_{lj}.$$

U prethodnom smo pravila množenja pisali za matrice s realnim elementima, no pravila za množenje kompleksnih matrica su ista.

Neka, ali ne i sva, svojstva množenja matrica međusobno slična su svojstvima množenja brojeva. Tako vrijedi

- asocijativnost: $A \cdot (B \cdot C) = (A \cdot B) \cdot C$ za matrice A tipa[1] $m \times p$, B tipa $p \times q$ i C tipa $q \times n$;

[1] Umjesto da svuda precizno pišemo tipove matrica možemo reći: formule vrijede kad god su matrice koje se u formuli množe odgovarajuće ulančane.

- množenje nulmatricom daje nulmatricu: $A \cdot 0_{n,k} = 0_{m,k}$ i $0_{k,m} \cdot A = 0_{k,n}$ za A tipa $m \times n$;
- množenje jediničnom matricom ne mijenja matricu: $A \cdot I_n = I_m \cdot A = A$ za A tipa $m \times n$;
- kvaziasocijativnost: $(\alpha A) \cdot B = \alpha(A \cdot B)$ za $\alpha \in \mathbb{R}$, A tipa $m \times k$ i B tipa $k \times n$;
- distributivnost prema zbrajanju: $A \cdot (B + C) = A \cdot B + A \cdot C$ i $(B + C) \cdot D = B \cdot D + C \cdot D$ za matrice A tipa $m \times p$, B i C tipa $p \times n$ i D tipa $n \times k$.

Za množenje kompleksnih matrica vrijede ista svojstva, samo su skalari α kompleksni.

Primjer 34. $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 6 \\ -1 & -3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1 & -3 \\ -2 & -6 \end{pmatrix}$, *a* $\begin{pmatrix} 2 & 6 \\ -1 & -3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ *nema smisla.*

Primjer 35. *Produkt*

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 6 \\ -1 & 3 \end{pmatrix}$$

nema smisla, kao ni

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 6 \\ -1 & 3 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Primjer 36.

$$\begin{pmatrix} 2 & 6 \\ -1 & 3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 20 \\ -1 & 8 \end{pmatrix}$$

je različito od

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 6 \\ -1 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 9 \\ -3 & 9 \end{pmatrix}.$$

Primjer 37.

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 6 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 6 \\ -1 & -3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Iz prethodnih primjera vidljive su dvije bitne razlike množenja matrica i množenja brojeva:

- Kod množenja brojeva ne treba paziti na redoslijed, dok je kod množenja matrica to potrebno. **Množenje matrica nije komutativno**, tj. ne mora vrijediti $A \cdot B = B \cdot A$ (moguće je da od produkata $A \cdot B$ i $B \cdot A$ samo jedan ima smisla, a čak i ako su oba smislena, općenito je $A \cdot B \neq B \cdot A$).

- Ako množimo nenul brojeve uvijek dobivamo broj različit od nule tj. kod brojeva iz $xy = 0$ možemo zaključiti da je bar jedan od brojeva x i y jednak nuli. Kod množenja matrica **može se dogoditi da množimo dvije matrice koje nisu nulmatrice i dobijemo nulmatricu**, tj. iz $A \cdot B = 0_{m,n}$ ne možemo zaključiti da je bar jedna od matrica A i B nulmatrica.

☼ **Ponovimo bitno**... Osnovne algebarske operacije s matricama su zbrajanje i oduzimanje matrica, množenje skalarom i množenje matrica međusobno. Dvije matrice istog tipa zbrajamo odnosno oduzimamo tako da zbrojimo odnosno oduzmemo elemente na istim pozicijama. Matricu množimo skalarom tako da joj sve elemente pomnožimo tim skalarom. Dvije ulančane matrice A i B (A ima stupaca koliko B ima redaka) možemo množiti u redoslijedu $A \cdot B$; rezultat je matrica koja ima redaka koliko i A, stupaca koliko i B, a na poziciji (i, j) u $A \cdot B$ je rezultat množenja i-tog retka od A s j-tim stupcem od B. Pritom redak množimo sa stupcem da redom množimo prvi element retka s prvim elementom stupca, drugi s drugim itd., a zatim te umnoške pozbrajamo. Množenje matrica nije komutativno i moguće je umnožak dvije matrice od kojih nijedna nije nulmatrica bude nulmatrica. ☺

2.3 Inverz matrice

Kod množenja realnih brojeva vrijedi

$$1 \cdot x = x \cdot 1 = x,$$

tj. 1 je neutralni element za množenje brojeva. Svojstvo $A \cdot I_n = I_m \cdot A = A$ za matricu A tipa $m \times n$ upućuje na to da bi jedinična matrica trebala biti analogon broja 1 u kontekstu matrica.

Drugo bitno svojstvo broja 1 vezano za množenje brojeva je da za svaki broj $x \neq 0$ postoji broj x^{-1} (kojeg računamo kao $1/x$) takav da je

$$x \cdot x^{-1} = x^{-1} \cdot x = 1.$$

Postavlja se pitanje možemo li sličnu jednakost napisati za matrice, tj. možemo li reći da za matrice A koje nisu nulmatrice postoji neka matrica koju bismo mogli označiti s A^{-1} takva da produkti $A \cdot A^{-1}$ i $A^{-1} \cdot A$ daju jediničnu matricu? Ako to nije moguće napraviti za sve matrice A, za koje jest?

Prema prethodnom, želimo imati dva svojstva:

$$A \cdot I = I \cdot A = A$$

i

$$A \cdot A^{-1} = A^{-1} \cdot A = I$$

gdje je u sve četiri jednakosti I *ista* jedinična matrica, dakle recimo reda n ($I = I_n$). Ako je A tipa $m \times n$, da bismo mogli izračunati $A \cdot A^{-1}$ mora A^{-1} imati n redaka, a da bismo mogli izračunati $A^{-1} \cdot A$ mora A^{-1} imati m stupaca, dakle da bi oba produkta imala smisla, A^{-1} mora biti tipa $n \times m$. Rezultat prvog od ta dva produkta je tipa

$m \times m$, a rezultat drugog je tipa $n \times n$. Želimo li da vrijedi $A \cdot A^{-1} = A^{-1} \cdot A$ slijedi da mora biti $m = n$, tj. A i A^{-1} moraju biti kvadratne istog reda.

Zaključujemo: jednakosti $A \cdot I = I \cdot A = A$ i $A \cdot A^{-1} = A^{-1} \cdot A = I$ dolaze u obzir samo za kvadratne matrice. Stoga jedinične matrice možemo shvatiti kao poopćenje broja 1 na matrice, ali samo na kvadratne.

Definicija 14 (Inverzna matrica). *Za* kvadratnu *matricu $A \in M_n$ njen inverz (inverzna matrica od A) je, ako postoji, kvadratna matrica $B \in M_n$ (dakle, istog reda) takva da vrijedi*

$$A \cdot B = B \cdot A = I_n.$$

Ako takva matrica B postoji, jedinstveno je određena te se označava s A^{-1} (a matricu A zovemo invertibilnom ili regularnom matricom).

Može se dokazati da je u definiciji dovoljna samo jedna od jednakosti $A \cdot B = I_n$ ili $B \cdot A = I_n$, tj. može se dokazati da ako vrijedi jedna, onda vrijede obje.

Budući da nulmatrice imaju svojstvo da pomnožene s bilo kojom matricom (s kojom su ulančane) daju nulmatricu, očito nulmatrice nisu invertibilne.

Bismo li mogli definirati dijeljenje $B : A$ kvadratnih matrica istog reda kao $B \cdot A^{-1}$ ako A nije nulmatrica? Imalo bi smisla kad bi svaka kvadratna matrica koja nije nulmatrica imala inverz.

Primjer 38. *Matrica $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 6 \end{pmatrix}$ je kvadratna i nije nulmatrica. Pretpostavimo da je invertibilna. Tada možemo naći matricu B takvu da je $B = \begin{pmatrix} x & z \\ y & v \end{pmatrix}$ i $AB = BA = I_2$. Pogledajmo jednakost $AB = I_2$:*

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 6 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x & z \\ y & v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x+2y & z+2v \\ 3x+6y & 3z+6v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Trebalo bi dakle riješiti sustav s četiri nepoznanice (elementi matrice B)

$$x + 2y = 1,$$

$$3x + 6y = 0,$$

$$z + 2v = 0,$$

$$3z + 6v = 1.$$

Rješavanjem ćemo dobiti kontradiktorne jednakosti, dakle sustav nije rješiv. Znači da ne možemo odrediti elemente matrice B te matrica A nije invertibilna!

Nažalost, osim nulmatrica postoji još mnogo — beskonačno mnogo! — kvadratnih matrica koje nisu invertibilne. Stoga nije moguće definirati dijeljenje matrica.

Primijetimo da smo u prethodnom primjeru imali zadanu matricu A, pretpostavili smo da je invertibilna, elemente njenog inverza B proglasili smo nepoznanicama te izjednačavanjem AB s I smo dobili sustav linearnih jednadžbi za određivanje elemenata matrice B. Matrice A i B su bile reda 2 te smo dobili sustav tipa 4×4. To će vrijediti i općenito: za određivanje inverza matrice $A \in M_n$ potrebno je riješiti sustav od n^2 linearnih jednadžbi s n^2 nepoznanica, koje su elementi inverza B. Sustav se postavlja izjednačavanjem $AB = I_n$. Ako taj sustav ima jedinstveno rješenje, matrica A je invertibilna, a ako taj sustav nema rješenja nije[2].

Zadatak 4. *Postavite sustav za određivanje inverza matrice* $A = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 4 & 2 & 1 \end{pmatrix}$.

Ako još bolje pogledamo primjer 38, primijetit ćemo da smo sustav 4×4 mogli rastaviti na dva 2×2 sustava (jedan za prvi stupac matrice B, drugi za drugi stupac). Pritom su ti sustavi imali iste koeficijente (i to točno elemente matrice A), ali različite stupce slobodnih članova. Nadalje, sustav za određivanje prvog stupca od B kao slobodne članove imao je prvi stupac jedinične matrice, a sustav za određivanje drugog stupca od B kao slobodne članove imao je drugi stupac jedinične matrice.

Primjer 39. *Sustav za određivanje* A^{-1} *iz zadatka 4 rastavlja se na tri* 3×3 *sustava kojima su matrice sustava oblika*

$$\left(\begin{array}{ccc|c} -2 & 0 & 1 & a \\ 1 & 0 & -1 & b \\ 4 & 2 & 1 & c \end{array}\right),$$

gdje je $\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$ *kod određivanja prvog stupca od* A^{-1} *jednak* $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$*, za drugi je to* $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$*, a za treći* $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Dakle: određivanje A^{-1} ekvivalentno je rješavanju n sustava tipa $n \times n$ (po jedan za svaki stupac od A^{-1}), pri čemu su lijeve strane (koeficijenti) svih tih sustava iste (to su točno elementi matrice A), a stupci slobodnih članova su redom stupci jedinične matrice. Sustav za određivanje j-tog stupca od A^{-1} kao stupac slobodnih članova ima j-ti stupac od I_n. Kako u Gaussovoj metodi eliminacija redoslijed operacija ne ovisi o stupcu slobodnih članova, znači da je za svaki od tih sustava račun jednak osim u stupcu slobodnih članova. Stoga se ti sustavi mogu rješavati paralelno.

Postupak određivanja inverza je prema prethodnom sljedeći: postavimo matricu sustava

$$(A|I_n).$$

Na nju primjenjujemo Gaussovu metodu eliminacija za rješavanje sustava sve dok ne dobijemo oblik

$$(I_n|B).$$

U tom slučaju je $A^{-1} = B$. Ako u toku postupka na lijevoj strani (lijevo od okomite crte) dobijemo redak u kom su samo nule, postupak staje i A nema inverza.

[2]Kod sustavâ za određivanje inverza ne može se dogoditi da imaju beskonačno mnogo rješenja.

Primjer 40. *Inverz matrice A iz zadatka 4 dobivamo eliminacijom*

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc} -2 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 4 & 2 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right) \sim \ldots \sim \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 5/2 & 3 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & -2 & 0 \end{array}\right)$$

te je $A^{-1} = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 5/2 & 3 & 1/2 \\ -1 & -2 & 0 \end{pmatrix}$. *Točnost računa provjeravamo preko definicije:* $AA^{-1} = I_3$.

Za kvadratne matrice reda 2 postoji jednostavna formula za računanje inverza:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{ad-bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}.$$

Provjerite sami da je formula točna. Iz formule je vidljivo: $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ je invertibilna točno ako je $ad - bc \neq 0$.

Primjer 41.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 5 & 7 \end{pmatrix} = \frac{1}{7-0} \cdot \begin{pmatrix} 7 & 0 \\ -5 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -5/7 & 1/7 \end{pmatrix}.$$

U primjenama se često pojavljuju matrice kojima su inverzne matrice jednake njihovoj transponiranoj ili hermitski konjugiranoj matrici:

Definicija 15 (Ortogonalne i unitarne matrice)**.** *Realna kvadratna matrica zove se ortogonalna matrica ako joj je inverz jednak transponiranoj matrici, tj. ako vrijedi* $A \cdot A^t = I$.

Kompleksna kvadratna matrica zove se unitarna matrica ako joj je inverz jednak hermitski konjugiranoj matrici, tj. ako vrijedi $A \cdot A^* = I$.

Primjer 42. *Matrica* $\begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ *je ortogonalna.*

☼ **Ponovimo bitno**... Za kvadratnu matricu njoj inverzna matrica je, ako postoji, kvadratna matrica istog reda koja pomnožena s polaznom matricom daje jediničnu matricu. Matrice koje posjeduju inverznu matricu zovu se regularne. Određivanje inverzne matrice matrici A svodi se na rješavanje sustavâ linearnih jednadžbi u kojima su koeficijenti elementi matrice A, a stupci slobodnih članova su redom stupci jedinične matrice. ☺

2.4 Determinante

Vidjeli smo da je matrica $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ je invertibilna točno ako je broj $ad-bc$ različit od nule. Taj broj zove se njenom determinantom. Piše se:

$$\det A = ad - bc,$$

odnosno

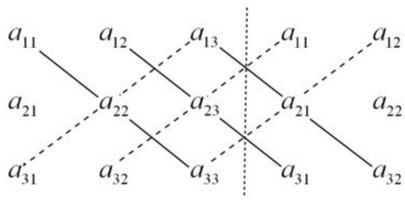
$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - bc.$$

Primjer 43.

$$\begin{vmatrix} 2 & 5 \\ -1 & 3 \end{vmatrix} = 2 \cdot 3 - (-1) \cdot 5 = 11.$$

Kako $11 \neq 0$, *matrica* $\begin{pmatrix} 2 & 5 \\ -1 & 3 \end{pmatrix}$ *je invertibilna. Determinanta matrice* $\begin{pmatrix} 2 & 6 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$ *je nula pa ona nije invertibilna.*

Determinanta matrice 3 je također broj, ali se drugačije računa nego za matrice reda 2. Jedno popularno pravilo za računanje determinanti matrica reda 3 (vrijedi samo za takve matrice!) je Sarrusovo pravilo:



$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22}a_{33}+a_{12}a_{23}a_{31}+a_{13}a_{21}a_{32}-a_{31}a_{22}a_{13}-a_{32}a_{23}a_{11}-a_{33}a_{21}a_{12}$$

Primjer 44.

$$\begin{vmatrix} -2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 4 & 2 & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 4 & 2 & 1 \end{vmatrix} \begin{matrix} -2 & 0 \\ 1 & 0 \\ 4 & 2 \end{matrix} =$$

$$= -2 \cdot 0 \cdot 1 + 0 \cdot (-1) \cdot 4 + 1 \cdot 1 \cdot 2 - 1 \cdot 0 \cdot 4 - (-2) \cdot (-1) \cdot 2 - 0 \cdot 1 \cdot 1 = -2.$$

Determinante se mogu računati samo za kvadratne matrice. Ako se radi o kvadratnoj matrici A, njena determinanta se označava s $\det A$ odnosno kao

$$\begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix}.$$

Općenito, determinanta kvadratne matrice $A \in M_n$ se definira kao zbroj svih izraza oblika $(-1)^{i(\sigma)} a_{1j_1} a_{2j_2} \cdots a_{nj_n}$, gdje je $\sigma : \{1, \dots, n\} \to \{1, \dots, n\}$ permutacija (tj. preraspored) brojeva $1, \dots, n$ u redoslijed $j_1, \dots, j_n$. S $i(\sigma)$ se označava broj inverzija u permutaciji, tj. koliko puta se pojavi situacija da se manji broj nađe iza većeg u redoslijedu $j_1, \ldots, j_n$. Iako se uz malo truda vidi da se u definiciji determinante sumiraju i oduzimaju svi mogući produkti elemenata matrice takvi da nikoja dva elementa nisu uzeta iz istog stupca ili retka, očigledno je ta definicija vrlo neoperativna. Stoga ćemo kao definiciju uzeti[3] sljedeću: determinanta kvadratne matrice je broj $\det A$ koji se temeljem Laplace-ovog razvoja pridružuje toj matrici. Laplaceov razvoj determinante može se računati po nekom (i-tom) retku:

$$\det A = \sum_{j=1}^{n} (-1)^{i+j} a_{ij} \det A_{ij},$$

ili po nekom (j-tom) stupcu:

$$\det A = \sum_{i=1}^{n} (-1)^{i+j} a_{ij} \det A_{ij}.$$

Pritom je s A_{ij} označena matrica koju iz A dobijemo brisanjem i-tog retka i j-tog stupca. Primjerice, A_{12} je matrica koju iz A dobijemo brisanjem prvog retka i drugog stupca. Iz formula je vidljivo da se Laplaceovim razvojem računanje determinante matrice svodi na računanje determinanti manjih matrica. Smisao gornjih formula može se izreći i riječima:

Laplaceov razvoj po nekom retku/stupcu izračunava determinantu matrice $A \in M_n$ tako da svaki element tog retka/stupca pomnoži s determinantom matrice koju bismo iz A dobili tako da iz nje pobrišemo redak i stupac promatranog elementa. Tako dobijemo n brojeva, koje zatim naizmjenično zbrojimo i oduzmemo. Kod razvoja po neparnim retcima/stupcima alterniranje zbrajanja i oduzimanja je $+-+-+-\ldots$, tj. uzmemo prvi od dobivenih n brojeva, oduzmemo mu drugi, dodamo treći itd. Kod razvoja po parnim retcima/stupcima alterniranje zbrajanja i oduzimanja je $-+-+-+\ldots$, tj. uzmemo prvi od dobivenih n brojeva i promijenimo mu predznak, dodamo mu drugi, oduzmemo treći itd. Redoslijed za pravilno alterniranje predznaka možemo zapamtiti i preko sheme

$$\begin{matrix} + & - & + & - & \cdots \\ - & + & - & + & \cdots \\ + & - & + & - & \cdots \\ - & + & - & + & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{matrix}.$$

Konkretno, za matricu reda 3 njenu determinantu razvojem po prvom retku računamo ovako:

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11} \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} - a_{12} \begin{vmatrix} a_{21} & a_{23} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} + a_{13} \begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix}.$$

[3]Zapravo se radi o teoremu: iz permutacijske definicije determinate se dokazuje da se ona može računati Laplaceovim razvojem.

Primjer 45.

$$\begin{vmatrix} 5 & -1 & -3 \\ 2 & 1 & 1 \\ 0 & -2 & 4 \end{vmatrix} = 5\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ -2 & 4 \end{vmatrix} - (-1)\begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 4 \end{vmatrix} + (-3)\begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 0 & -2 \end{vmatrix} =$$

$$= 5 \cdot (1 \cdot 4 - (-2) \cdot 1) + 1 \cdot (2 \cdot 4 - 1 \cdot 0) - 3 \cdot (2 \cdot (-2) - 1 \cdot 0) = 50.$$

Primjer 46. *Za*

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 7 & 0 & 1 \\ 2 & -1 & 0 & 5 \\ 0 & -1 & -1 & -1 \\ 3 & 2 & -3 & 4 \end{pmatrix}$$

izračunajmo $\det A$ *razvojem po prvom stupcu. Imamo*

$$\det A = 2 \cdot \det A_{11} - 2 \cdot \det A_{21} + 0 \cdot \det A_{31} - 3 \cdot \det A_{41} =$$

$$= 2 \det A_{11} - 2 \det A_{21} - 3 \det A_{41}.$$

Dalje je $\det A_{11} = \begin{vmatrix} -1 & 0 & 5 \\ -1 & -1 & -1 \\ 2 & -3 & 4 \end{vmatrix} = 32$, $\det A_{21} = \begin{vmatrix} 7 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & -1 \\ 2 & -3 & 4 \end{vmatrix} = -44$ *i* $\det A_{41} = \begin{vmatrix} 7 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 5 \\ -1 & -1 & -1 \end{vmatrix} = 36$ *pa je*

$$\det A = 2 \cdot 32 - 2 \cdot (-44) - 3 \cdot 36 = 44.$$

Kako se iz prethodnog primjera može vidjeti, količina računa se smanjuje ako je u retku (ili stupcu) po kojemu razvijamo poneka nula. Stoga se preporuča da se determinanta matrice računa razvojem po onom retku ili stupcu u kojem je najviše nula.

Primjer 47.

$$\begin{vmatrix} 2 & 5 & 0 & 2 \\ -1 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & -5 & 2 \\ 3 & 1 & -1 & 0 \end{vmatrix} =$$

(razvoj po trećem stupcu)

$$= (-5)\begin{vmatrix} 2 & 5 & 2 \\ -1 & 1 & 2 \\ 3 & 1 & 0 \end{vmatrix} - (-1)\begin{vmatrix} 2 & 5 & 2 \\ -1 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 2 \end{vmatrix} =$$

(razvoji po trećim retcima)

$$= -5 \cdot \left(3\begin{vmatrix} 5 & 2 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 2 & 2 \\ -1 & 2 \end{vmatrix}\right) + \left(-\begin{vmatrix} 2 & 2 \\ -1 & 2 \end{vmatrix} + 2\begin{vmatrix} 2 & 5 \\ -1 & 1 \end{vmatrix}\right) =$$

$$= -5 \cdot (24 - 6) + (-6 + 14) = -82.$$

Iz definicije Laplaceovog razvoja odmah se vidi: **Ako se u kvadratnoj matrici neki redak ili stupac sastoji samo od nula, onda joj je determinanta nula.** Specijalno vrijedi:

$$\det(0_n) = 0.$$

Uzastopnim razvojem po prvom retku odnosno stupcu dobije se i sljedeće: **Determinanta gornjetrokutaste, donjetrokutaste ili dijagonalne matrice jednaka je produktu elemenata na dijagonali.** Specijalno, vrijedi:

$$\det(I_n) = 1.$$

Vrijedi i: **Ako su u matrici dva retka proporcionalna (ili dva stupca), determinanta joj je nula.**

Primjer 48.

$$\begin{vmatrix} 2 & 0 & 5 & 123 \\ 0 & 1 & 1234 & 2 \\ 0 & 0 & -5 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{vmatrix} = 2 \cdot 1 \cdot (-5) \cdot 3 = -30, \quad \begin{vmatrix} 8 & 9 & 10 & 2 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 9 & 1 & -5 & 2 & 7 \\ 3 & 1 & -1 & 19 & 4 \\ 2 & 4 & 54 & -4 & -9 \end{vmatrix} = 0.$$

Iz Laplaceovog razvoja se vidi da vrijedi i

Teorem 2. *Determinanta transponirane matrice jednaka je determinanti polazne matrice, tj.* $\det(A^t) = \det A$*. Determinanta hermitski konjugirane matrice jednaka je kompleksno konjugiranoj determinanti polazne matrice, tj.* $\det(A^*) = \overline{\det A}$*.*

Efekti elementarnih transformacija na determinante su sljedeći:

Teorem 3. *Zamjena dva retka (ili dva stupca) mijenja predznak determinante. Ako matrici neki redak (ili stupac) pomnožimo nekim brojem* α*, determinanta dobivene matrice je* α *puta determinanta matrice prije tog množenja. Ako jedan redak pribrojimo nekom drugom (ili jedan stupac drugom stupcu), determinanta se ne mijenja.*

Posljedično, determinanta se ne mijenja niti kad višekratnik nekog retka dodamo drugom (ili višekratnik nekog stupca dodamo drugom stupcu). Napomenimo ovdje da ne vrijedi $\det(\alpha A) = \alpha \det A$ (kažemo da determinanta nije homogena). Iz gornjeg teorema može se dokazati da vrijedi $\det(\alpha A) = \alpha^n \det A$.

Prethodni teorem se može iskoristiti za pojednostavljivanje izračunavanja determinanti velikih matrica.

Primjer 49.

$$\begin{vmatrix} \mathbf{3} & \mathbf{9} & \mathbf{10} & \mathbf{2} & \mathbf{5} \\ 4 & 1 & 5 & 2 & -1 \\ \mathbf{1} & \mathbf{1} & \mathbf{-5} & \mathbf{2} & \mathbf{7} \\ 3 & 1 & -1 & 5 & 4 \\ 2 & 4 & 2 & -4 & -9 \end{vmatrix} = - \begin{vmatrix} 1 & 1 & -5 & 2 & 7 \\ 4 & 1 & 5 & 2 & -1 \\ 3 & 9 & 10 & 2 & 5 \\ 3 & 1 & -1 & 5 & 4 \\ 2 & 4 & 2 & -4 & -9 \end{vmatrix} =$$

$$= -\begin{vmatrix} 1 & 1 & -5 & 2 & 7 \\ 0 & -3 & 25 & -6 & -29 \\ 0 & 6 & 25 & -4 & -16 \\ 0 & -2 & 14 & -1 & -17 \\ 0 & 2 & 12 & -8 & -23 \end{vmatrix} = -\begin{vmatrix} -3 & 25 & -6 & -29 \\ 6 & 25 & -4 & -16 \\ -2 & 14 & -1 & -17 \\ 2 & 12 & -8 & -23 \end{vmatrix} =$$

(zadnji korak bio je razvoj po prvom stupcu, a sad dvostruki prvi red dodan drugom, četvrti dodan trećem)

$$= -\begin{vmatrix} -3 & 25 & -6 & -29 \\ 0 & 75 & -16 & -74 \\ 0 & 26 & -9 & -40 \\ 2 & 12 & -8 & -23 \end{vmatrix} =$$

(prvi red puta 2, četvrti puta 3)

$$= -\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{3}\begin{vmatrix} -6 & 50 & -12 & -58 \\ 0 & 75 & -16 & -74 \\ 0 & 26 & -9 & -40 \\ 6 & 36 & -24 & -69 \end{vmatrix} =$$

(prvi red dodan četvrtom)

$$= -\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{3}\begin{vmatrix} -6 & 50 & -12 & -58 \\ 0 & 75 & -16 & -74 \\ 0 & 26 & -9 & -40 \\ 0 & 86 & -36 & -127 \end{vmatrix} = -(-6)\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{3}\begin{vmatrix} 75 & -16 & -74 \\ 26 & -9 & -40 \\ 86 & -36 & -127 \end{vmatrix} =$$

(prvi stupac dodan trećem)

$$= \begin{vmatrix} 75 & -16 & 1 \\ 26 & -9 & -14 \\ 86 & -36 & -41 \end{vmatrix} =$$

(prvi red oduzet od trećeg)

$$= \begin{vmatrix} 75 & -16 & 1 \\ 26 & -9 & -14 \\ 11 & -20 & -42 \end{vmatrix} = \ldots = -8079.$$

Svojstvo da determinanta promijeni predznak pri zamjeni redaka ili stupaca iskorišteno je pri formalizaciji Paulijevog principa u kvantnoj mehanici.

Primjer 50 (Slaterova determinanta)**.** *Paulijev princip glasi: Ukupna elektronska valna funkcija, koja uključuje i spin, mora biti antisimetrična na izmjenu bilo kojeg para elektrona. Jednostavnija formulacija je: nikoja dva elektrona u istom atomu ne mogu imati iste sve kvantne brojeve. To svojstvo se izvodi iz nemogućnosti razlikovanja elektronâ.*

Valne funkcije su funkcije koje indirektno opisuju vjerojatnost da se neki elektron nađe u nekoj točki prostora. Ako atom ima n elektrona, svaki od njih je opisan po *jednom valnom funkcijom*[4] $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$. *Želimo li opisati ukupnu valnu funkciju koja opisuje svih n elektrona istovremeno, najjednostavnija ideja bila bi definirati ju kao produkt svih valnih funkcija pojedinih elektrona, no tako definirana ukupna valna funkcija omogućavala bi razlikovanje elektronâ pa nije prihvatljiva. Primjerice, za slučaj dva elektrona $\mathbb{1}$ i $\mathbb{2}$ (možemo ih poistovjetiti primjerice s njihovim pozicijama, tj. radij-vektorima), moguće su dvije valne funkcije sustava: $\psi_1(\mathbb{1})\psi_2(\mathbb{2})$ i $\psi_1(\mathbb{2})\psi_2(\mathbb{1})$. Zbog nemogućnosti razlikovanja elektronâ slijedi da ne možemo dati prednost jednoj od te dvije funkcije, pa se kao ukupna valna funkcija uzima jedna od dvije funkcije $\psi_1(\mathbb{1})\psi_2(\mathbb{2}) \pm \psi_1(\mathbb{2})\psi_2(\mathbb{1})$. Čestice kojima odgovara opis pomoću antisimetrične varijante (promjena redoslijeda mijenja predznak valne funkcije) $\psi_1(\mathbb{1})\psi_2(\mathbb{2}) - \psi_1(\mathbb{2})\psi_2(\mathbb{1}) = \begin{vmatrix} \psi_1(\mathbb{1}) & \psi_1(\mathbb{2}) \\ \psi_2(\mathbb{1}) & \psi_2(\mathbb{2}) \end{vmatrix}$ zovu se fermioni (to su primjerice elektroni), a one kojima odgovara simetrična varijanta $\psi_1(\mathbb{1})\psi_2(\mathbb{2}) + \psi_1(\mathbb{2})\psi_2(\mathbb{1})$ zovu se bosoni (primjerice fotoni).*

Poopćenjem gornje ideje dobiva se da je za sustav od n elektrona (ili općenitije fermiona) ukupna valna funkcija dana tzv. Slaterovom determinantom

$$\psi(\mathbb{1}, \mathbb{2}, \dots, \mathbb{n}) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\mathbb{1}) & \psi_1(\mathbb{2}) & \dots & \psi_1(\mathbb{n}) \\ \psi_2(\mathbb{1}) & \psi_2(\mathbb{2}) & \dots & \psi_2(\mathbb{n}) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_n(\mathbb{1}) & \psi_n(\mathbb{2}) & \dots & \psi_n(\mathbb{n}) \end{vmatrix}.$$

Slijede dva važna teorema o determinantama.

Teorem 4 (Binet-Cauchy)**.** *Determinanta produkta matrica jednaka je produktu determinanti:*

$$\det(A \cdot B) = \det(A) \cdot \det(B).$$

Napomenimo ovdje da ne vrijedi $\det(A + B) = \det(A) + \det(B)$ (kažemo da determinanta nije aditivna).

Posljedica Binet-Cauchyjevog teorema je da je determinanta inverzne matrice recipročna determinanti polazne matrice. Naime, iz $A \cdot A^{-1} = I_n$ slijedi $\det(A \cdot A^{-1}) = \det(I_n) = 1$. Po Binet-Cauchyjevom teoremu lijeva strana zadnje jednakosti je $\det(A) \cdot \det(A^{-1})$ pa je

$$\det(A^{-1}) = \frac{1}{\det A}.$$

Iz toga se vidi da vrijedi:

Teorem 5. *Ako je matrica regularna, determinanta joj je različita od nule i obrnuto: ako je $\det A \neq 0$, onda je A invertibilna.*

Kako je za ortogonalne matrice $A^t = A^{-1}$, a znamo $\det(A^t) = \det A$, zaključujemo da za ortogonalne matrice vrijedi

$$\det A = \det(A^t) = \det(A^{-1}) = \frac{1}{\det A}$$

[4] Ovdje podrazumijevamo da je u valnu funkciju uključen podatak o spinu, tj. da se radi o produktu orbitale i spinske valne funkcije.

tj.

$$(\det A)^2 = 1.$$

Kako su elementi ortogonalne matrice realni, slijedi da joj je i determinanta realan broj pa dobivamo: determinanta ortogonalne matrice je uvijek ili 1 ili -1. Slično se može provjeriti da je determinanta unitarne matrice uvijek kompleksan broj apsolutne vrijednosti 1.

Kako smo vidjeli neke slučajeve kad je lako vidljivo da je determinanta matrice jednaka nuli, zaključujemo: matrice koje imaju nul-redak, nul-stupac, dva proporcionalna retka ili dva proporcionalna stupca nisu invertibilne.

☼ **Ponovimo bitno...** Determinanta je broj koji se po određenim pravilima pridružuje kvadratnoj matrici. Može se računati Laplaceovim razvojem po proizvoljnom retku ili stupcu matrice. Kvadratna matrica je invertibilna točno ako joj determinanta nije nula. Zamjena dvaju redaka (ili stupaca) matrice mijenja predznak determinante, pribrajanje višekratnika jednog retka (ili stupca) drugom retku (stupcu) ne mijenja determinantu, a množenje retka ili stupca matrice nekim brojem daje matricu čija determinanta je jednaka determinanti polazne matrice pomnožene tim brojem. Determinanta produkta matrica jednaka je produktu njihovih determinanti. Determinanta svake nulmatrice je 0, a determinanta dijagonalne matrice jednaka je produktu njenih dijagonalnih elemenata. Determinanta ortogonalne ili unitarne matrice ima apsolutnu vrijednost 1. ☺

2.4.1 Cramerovo pravilo za rješavanje sustava

Cramerov sustav je $n \times n$ sustav s jedinstvenim rješenjem. Komponente rješenja takvog sustava lako se opisuju preko determinanti: ako su nepoznanice $x_1, x_2, \ldots, x_n$, onda je

$$x_i = \frac{D_i}{D}$$

za sve i, gdje je D determinanta matrice koeficijenata sustava (matrice $A = [a_{ij}]$), a D_i je determinanta matrice koju iz A dobijemo tako da joj i-ti stupac zamijenimo stupcem slobodnih članova. Kako smo već vidjeli kod primjena inverza na rješavanje sustava, vidi se i ovdje: $n \times n$ sustav je Cramerov točno ako mu je matrica koeficijenata invertibilna, tj. determinanta joj nije nula.

Ove formule imaju dosta nedostataka. Praktične su samo za 2×2 i 3×3 sustave jer za veće $n \times n$ sustave zahtijevaju mnogo više računanja nego Gaussova metoda eliminacija. Nadalje, u slučaju da je $D = 0$, nije vidljivo ima li beskonačno mnogo rješenja ili ih uopće nema. Uz to, te formule nisu primjenjive na sustave kod kojih broj nepoznanica nije jednak broju jednadžbi.

Primjer 51. *Riješimo sustav*

$$2x - y + z = 2,$$

$$-x - y + 3z = 0,$$

$$x + 2y - 5z = 1$$

Cramerovim pravilom. Imamo:

$$D = \begin{vmatrix} 2 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 3 \\ 1 & 2 & -5 \end{vmatrix} = -1, \quad D_1 = \begin{vmatrix} 2 & -1 & 1 \\ 0 & -1 & 3 \\ 1 & 2 & -5 \end{vmatrix} = -4,$$

$$D_2 = \begin{vmatrix} 2 & 2 & 1 \\ -1 & 0 & 3 \\ 1 & 1 & -5 \end{vmatrix} = -11, \quad D_3 = \begin{vmatrix} 2 & -1 & 2 \\ -1 & -1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \end{vmatrix} = -5,$$

pa je $x = (-4)/(-1) = 4$, $y = (-11)/(-1) = 11$ *i* $z = (-5)/(-1) = 5$.

2.5 Trag matrice

Kvadratnim matricama se često pridružuje još jedan broj osim determinante. To je trag matrice.

Definicija 16 (Trag matrice)**.** *Trag kvadratne matrice je zbroj njenih dijagonalnih elemenata:*

$$\operatorname{tr} A = a_{11} + a_{22} + \ldots + a_{nn}.$$

Primjer 52. *Trag matrice* $A = \begin{pmatrix} 2 & 7 & 0 & 1 \\ 2 & -1 & 0 & 5 \\ 0 & -1 & -1 & -1 \\ 3 & 2 & -3 & 4 \end{pmatrix}$ *je* $\operatorname{tr} A = 2+(-1)+(-1)+4 = 4$.

Glavna svojstva traga matrice su:

$$\operatorname{tr}(A + B) = \operatorname{tr} A + \operatorname{tr} B$$

(aditivnost),

$$\operatorname{tr}(\alpha A) = \alpha \operatorname{tr} A$$

(homogenost) te

$$\operatorname{tr}(AB) = \operatorname{tr}(BA),$$

$$\operatorname{tr}(A^t) = \operatorname{tr} A.$$

Pokažimo primjerice aditivnost:

$$\operatorname{tr}(A + B) = (a_{11} + b_{11}) + (a_{22} + b_{22}) + \ldots + (a_{nn} + b_{nn}) =$$

$$= (a_{11} + a_{22} + \ldots + a_{nn}) + (b_{11} + b_{22} + \ldots + b_{nn}) = \operatorname{tr} A + \operatorname{tr} B.$$

Zadatak 5. *Dokažite svojstvo homogenosti traga.*

Trag se ponajviše koristi u primjenama koje koriste analizu simetrija nekog objekta.

☼ **Ponovimo bitno...** Trag kvadratne matrice je zbroj njenih dijagonalnih elemenata. ☺

2.6 Matrični pristup rješavanju sustavâ linearnih jednadžbi

Za sustav linearnih jednadžbi

$$\begin{array}{cccccccc} a_{11}x_1 & +a_{12}x_2 & +a_{13}x_3 & +\cdots & +a_{1n}x_n & = & b_1 \\ a_{21}x_1 & +a_{22}x_2 & +a_{23}x_3 & +\cdots & +a_{2n}x_n & = & b_2 \\ a_{31}x_1 & +a_{32}x_2 & +a_{33}x_3 & +\cdots & +a_{3n}x_n & = & b_3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & = & \vdots \\ a_{m1}x_1 & +a_{m2}x_2 & +a_{m3}x_3 & +\cdots & +a_{mn}x_n & = & b_m \end{array}$$

označimo $A = [a_{ij}] \in M_{m,n}$ (matrica koeficijenata sustava) i $B = [b_i] \in M_{m,1}$ (stupac slobodnih članova). Matricu sustava[5] sad kratko možemo zapisati kao

$$(A|B).$$

Označimo još $X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \in M_{n,1}$ (stupac nepoznanica). Sad naš sustav možemo zapisati u obliku

$$A \cdot X = B.$$

Primjer 53. *Sustav*

$$x_1 - x_2 = 1,$$

$$x_1 + 2x_2 = 0$$

ima matricu koeficijenata $A = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$, *stupac slobodnih članova* $B = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ *i stupac nepoznanica* $X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$. *Imamo*

$$AX = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 - x_2 \\ x_1 + 2x_2 \end{pmatrix},$$

što je jednako B *točno ako je zadovoljen sustav* $x_1 - x_2 = 1$, $x_1 + 2x_2 = 0$.

Sustav $AX = B$ (tipa $n \times n$) ima jedinstveno rješenje točno ako je A invertibilna. Tada je rješenje dano formulom

$$X = A^{-1}B.$$

Gornju tvrdnju nije teško dokazati:

$$AX = B$$

[5] Strogo matematički, zapravo se A zove matricom sustava, a $(A|B)$ proširenom matricom sustava.

slijeva pomnožimo s A^{-1} i dobijemo

$$A^{-1}AX = A^{-1}B.$$

Kako je po definiciji $A^{-1}A = I$ i vrijedi $IX = X$ (svojstvo množenja matrica), gornja je formula ekvivalentna formuli

$$X = A^{-1}B.$$

Iako zgodna, ta formula je praktična samo ako je brže izračunati inverz (Gaussove eliminacije s n stupaca slobodnih članova) nego riješiti sustav (Gaussove eliminacije iste matrice koeficijenata, ali sa samo jednim stupcem slobodnih članova). Dakle, korisna je samo ako imamo bar n sustava s istom A i različitim b-ovima.

No, kratki zapis sustava u matričnom obliku $AX = B$ može omogućiti dodatne uvide u rješavanje sustava linearnih jednadžbi. Primjerice, za homogene sustave je $B = 0_{m,1}$ pa je iz svojstava množenja matrica vidljivo da ako imamo dva rješenja X i Y našeg sustava (uređene n-torke smo poistovjetili s matricama-stupcima tipa $n \times 1$), tj. ako je $AX = AY = 0_{m,1}$, onda je i $A(X+Y) = 0_{m,1}$ i $A(\alpha X) = 0_{m,n}$. Zaključujemo: zbroj dva rješenja homogenog sustava je rješenje istog sustava i umnožak jednog rješenja homogenog sustava s proizvoljnim skalarom je također rješenje istog sustava. Kako smo rješenja predstavili matricama tipa $m \times 1$, koje (kao i svaki drugi skup matrica $M_{m,n}$) čine vektorski prostor, zaključujemo: skup rješenja homogenog sustava linearnih jednadžbi je vektorski prostor (potprostor od $M_{m,1}$).

Kod nehomogenih sustava to svojstvo ne vrijedi, ali se iz matričnog prikaza može zaključiti: ako je $AX = B$ neki sustav linearnih jednadžbi te ako njegovim pripadnim homogenim sustavom zovemo sustav $AX = 0_{m,1}$, onda se svako rješenje sustava $AX = B$ može dobiti kao zbroj nekog rješenja X_H pripadnog homogenog sustava i jednog (uvijek istog) konkretnog— tzv. partikularnog—rješenja X_P polaznog sustava:

$$A(X_H + X_P) = AX_H + AX_P = 0_{m,1} + B = B.$$

Posljedica ovog je da ako sustav ima više od jednog rješenja, ima ih beskonačno mnogo. Naime, kao što ćemo vidjeti u odgovarajućem poglavlju, vektorski prostori (bilo realni bilo kompleksni) koji sadrže više od jednog elementa uvijek ih imaju beskonačno mnogo.

☼ **Ponovimo bitno...** Sustav linearnih jednadžbi možemo zapisati u obliku $AX = B$, gdje je $(A|B)$ matrica sustava (A je matrica koeficijenata, a B matrica-stupac slobodnih članova), a X matrica-stupac nepoznanica. Ako je sustav tipa $n \times n$ i A invertibilna, onda je rješenje dano formulom $X = A^{-1}B$. Svako rješenje sustava $AX = B$ može se zapisati kao zbroj jednog partikularnog rješenja tog sustava s nekim rješenjem pripadnog homogenog sustava $AX = 0$. ☺

2.7 Zadaci za vježbu

1. Odredite red i vrstu matrica:

   (a) $A = \begin{pmatrix} 4 & 3 \\ -1 & 2 \\ 2 & 5 \end{pmatrix}$.

(b) $B = \begin{pmatrix} 4 & -1 & -3 \\ 2 & 1 & 4 \\ 0 & -5 & 6 \end{pmatrix}$.

(c) $C = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix}$.

(d) $D = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 & 5 \\ 2 & 3 & -2 & -1 \\ 4 & -2 & 0 & 3 \\ 5 & -1 & 3 & 7 \end{pmatrix}$.

(e) $E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$.

(f) $F = \begin{pmatrix} 3 & -1 & 2 \\ 0 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$.

(g) $G = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -5 \end{pmatrix}$.

(h) $H = \begin{pmatrix} 2 & \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2}i & 3i & 2+i \\ \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2}i & -4 & 2-i & \sqrt{3}+i \\ -3i & 2+i & 0 & 5-4i \\ 2-i & \sqrt{3}-i & 5+4i & 10 \end{pmatrix}$.

Rješenje: (a) $A \in M_{3,2}$ pravokutna. (b) $B \in M_3$ kvadratna.
(c) $C \in M_{3,1}$ stupčana. (d) $D \in M_4$ simetrična.
(e) $E = I_2 \in M_2$ jedinična. (f) $F \in M_3$ gornjetrokutasta.
(g) $G \in M_4$ dijagonalna. (f) $H \in M_4(\mathbb{C})$ hermitska.

2. Ispišite matrice

(a) $A = [a_{ij}] \in M_{2,3}$, $a_{ij} = 2i - j$.

(b) $B = [b_{ij}] \in M_2$, $b_{ij} = 0$ za $i \neq j$, $b_{ii} = (-1)^i$.

(c) $C = [c_{ij}] \in M_3$, $c_{ij} = 0$ za $i < j$, $c_{ij} = (i+j)^2$ za $i \geq j$.

Rješenje: (a) $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}$. (b) $B = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$. (c) $C = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 9 & 16 & 0 \\ 16 & 25 & 81 \end{pmatrix}$.

3. Zadana je matrica

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 2 & -3 \\ -2 & 0 & 5 \\ 3 & -5 & 0 \end{pmatrix}.$$

Provjerite da je $A^t = -A$. Kako nazivamo takvu matricu?
Rješenje: Antisimetrična matrica.

4. Izračunajte

(a) $\begin{pmatrix} 1 & -3 & 2 \\ 2 & 4 & 0 \end{pmatrix} + 2\begin{pmatrix} 2 & 5 & 0 \\ 1 & -2 & -3 \end{pmatrix}$.

(b) $\frac{1}{4}\begin{pmatrix} 2 & 0 & 4 \\ -1 & 8 & 6 \\ 0 & 12 & 4 \end{pmatrix} - 2I_3$.

(c) $\begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 3 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 2 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$.

(d) $\begin{pmatrix} 1 & -2 & 4 & 5 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ -3 \\ 2 \end{pmatrix}$.

(e) $\begin{pmatrix} 5 & 8 & -4 \\ 6 & 9 & -5 \\ 4 & -7 & 3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 3 & -1 & 5 \\ 2 & 1 & 0 \\ 6 & 4 & 5 \end{pmatrix}$.

(f) $\begin{pmatrix} -1 & 2 \\ -3 & 1 \end{pmatrix}^3$.

Rješenje: (a) $\begin{pmatrix} 5 & 7 & 2 \\ 4 & 0 & -6 \end{pmatrix}$. (b) $\begin{pmatrix} -\frac{3}{2} & 0 & 1 \\ -\frac{1}{4} & 0 & \frac{3}{2} \\ 0 & 3 & -3 \end{pmatrix}$. (c) $\begin{pmatrix} 9 & 3 \\ 10 & 3 \end{pmatrix}$.
(d) (-2). (e) $\begin{pmatrix} 7 & -13 & 5 \\ 6 & -17 & 5 \\ 16 & 1 & 35 \end{pmatrix}$. (f) $\begin{pmatrix} 5 & -10 \\ 15 & -5 \end{pmatrix}$.

5. Zadane su matrice

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -2 & 3 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 2 & -4 \end{pmatrix}.$$

Pokažite da matrice A i B čine komutativni par u odnosu na množenje, a B i C ne čine (tj. da vrijedi $A \cdot B = B \cdot A$ i $B \cdot C \neq C \cdot B$).

6. Zadane su matrice

$$A = \begin{pmatrix} \alpha & 2\beta \\ 3 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}.$$

Odredite parametre $\alpha,\ \beta \in \mathbb{R}$ tako da umnožak matrica A i B bude komutativan.
Rješenje: $\alpha = -5,\ \beta = 0$.

7. Riješite matrične jednadžbe

(a) $A \cdot X = B$, $A = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 3 & 4 \\ -2 & 5 \end{pmatrix}$, $B = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \\ -9 \end{pmatrix}$.

(b) $X \cdot C = D$, $C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 2 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$, $D = \begin{pmatrix} -1 & -3 & 1 \end{pmatrix}$.

Rješenje: (a) $X = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix} \in M_{2,1}$. (b) $X = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 \end{pmatrix} \in M_{1,3}$.

8. Odredite A^{-1} (ukoliko postoji), ako je

(a) $A = \begin{pmatrix} 3 & -2 \\ 2 & -1 \end{pmatrix}$.

(b) $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -3 & -6 \end{pmatrix}$.

(c) $A = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 4 & 2 & 1 \end{pmatrix}$.

(d) $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 0 \\ 2 & 1 & 1 \end{pmatrix}$.

(e) $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 2 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$.

Rješenje: (a) $A^{-1} = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ -2 & 3 \end{pmatrix}$. (b) Ne postoji A^{-1}. (c) $A^{-1} = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ \frac{5}{2} & 3 & \frac{1}{2} \\ -1 & -2 & 0 \end{pmatrix}$.
(d) $A^{-1} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 1 & \frac{1}{2} & -1 \\ 1 & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}$. (e) Ne postoji A^{-1}.

9. Izračunajte

(a) $\begin{vmatrix} 3 & 5 \\ 2 & 4 \end{vmatrix}$.

(b) $\begin{vmatrix} -1 & \log_2 10 \\ \log_{10} 2 & -1 \end{vmatrix}$.

(c) $\begin{vmatrix} 1 & -2 & -3 \\ 0 & 1 & 2 \\ -4 & 3 & -2 \end{vmatrix}$.

(d) $\begin{vmatrix} 4 & -8 & 12 \\ 2 & 0 & -3 \\ -20 & 30 & 60 \end{vmatrix}$.

(e) $\begin{vmatrix} 2 & -4 & 6 & 3 \\ 0 & 3 & 0 & 5 \\ 0 & 0 & -1 & 7 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \end{vmatrix}$.

(f) $\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 2 & 1 \end{vmatrix}$.

(g) $\begin{vmatrix} 2 & 1 & 0 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & -1 & -1 & -1 \end{vmatrix}$.

(h) $\begin{vmatrix} 2 & -3 & 1 & 0 & 5 \\ 1 & -3 & -2 & -1 & 0 \\ 7 & 6 & 0 & 3 & 2 \\ 8 & -7 & 5 & 4 & 3 \\ -3 & 9 & 6 & 2 & 0 \end{vmatrix}$.

Rješenje: (a) 2. (b) 0. (c) -4. (d) 1560. (e) -24. (f) -2. (g) -9. (e) 0.

10. Koristeći tvrdnje teorema 3 izračunajte

(a) $\begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 3 & 2 & 1 \end{vmatrix}$.

(b) $\begin{vmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 0 & 0 & 4 \\ 3 & 0 & 0 & 7 \\ 4 & 8 & 2 & 5 \end{vmatrix}$.

(c) $\begin{vmatrix} 2 & 1 & 4 & 3 & 5 \\ 3 & 4 & 0 & 5 & 0 \\ 3 & 4 & 5 & 2 & 1 \\ 1 & 5 & 2 & 4 & 3 \\ 4 & 6 & 0 & 7 & 0 \end{vmatrix}$.

Rješenje: (a) 0. (b) 100. (c) -4.

11. Neka za matricu $C \in M_4$ vrijedi $\det(\frac{1}{2}C) = \frac{1}{8}$. Izračunajte $\det C$.
Rješenje: $\det C = 2$.

12. Zadane su matrice

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 2 & 8 & 16 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

i neka vrijedi $X \cdot A = B$. Koristeći teorem 4 izračunajte $\det X$.
Rješenje: $\det X = 2$.

13. Odredite parametar $\alpha \in \mathbb{R}$ tako da matrica A bude invertibilna, ako je

(a) $A = \begin{pmatrix} \alpha & 7 & 2 \\ 1 & \alpha & 1 \\ 2 & -4 & \alpha \end{pmatrix}$.

(b) $A = \begin{pmatrix} 2\alpha & 1 & 1 \\ 2 & \alpha & 1 \\ 2 & 1 & \alpha \end{pmatrix}$.

Rješenje: (a) $\alpha \in \mathbb{R} \setminus \{-3, 1, 2\}$. (b) $\alpha \in \mathbb{R} \setminus \{-2, 1\}$.

14. Koristeći Cramerovo pravilo riješite sustave linearnih jednadžbi

(a)

$$\begin{aligned} 3x_1 - 2x_2 &= 5 \, , \\ -2x_1 + x_2 &= -2 \, . \end{aligned}$$

(b)

$$\begin{aligned} 3x_1 - 2x_2 \qquad &= 2 \, , \\ -2x_1 + x_2 - x_3 &= -3 \, , \\ -x_2 + 3x_3 &= 7 \, . \end{aligned}$$

(c)

$$\begin{aligned} 2x_1 - 5x_2 + 4x_3 + 3x_4 &= 4 \, , \\ 3x_1 - 4x_2 + 7x_3 + 5x_4 &= 11 \, , \\ 4x_1 - 9x_2 + 8x_3 + 5x_4 &= 8 \, , \\ -3x_1 + 2x_2 - 5x_3 + 3x_4 &= -3 \, . \end{aligned}$$

Rješenje: (a) $x_1 = -1, \ x_2 = -4$. (b) $x_1 = 0, \ x_2 = -1, \ x_3 = 2$.
(c) $x_1 = x_2 = x_3 = x_4 = 1$.

15. Izračunajte $\operatorname{tr} A$ za matricu A iz zadatka 8.
Rješenje: (a) $\operatorname{tr} A = 2$. (b) $\operatorname{tr} A = -5$. (c) $\operatorname{tr} A = -1$. (d) $\operatorname{tr} A = 4$. (e) $\operatorname{tr} A = 1$.

16. Pokažite da vrijedi $\operatorname{tr}(AA^t) \geq 0$, za proizvoljnu matricu $A \in M_n$.

17. Matričnim pristupom riješite sustave linearnih jednadžbi

(a)

$$2x_1 - 3x_2 = -4 \;,$$
$$-3x_1 + 5x_2 = 5 \;.$$

(b)

$$2x_1 + 3x_2 + 5x_3 = 10 \;,$$
$$3x_1 + 7x_2 + 4x_3 = 3 \;,$$
$$x_1 + 2x_2 + 2x_3 = 3 \;.$$

(c)

$$x_1 + 2x_2 - x_3 + x_4 = -1 \;,$$
$$2x_1 + 5x_2 - x_3 + 2x_4 = -2 \;,$$
$$3x_1 - x_2 - 2x_3 + x_4 = 5 \;,$$
$$x_1 - x_2 + 3x_3 - 5x_4 = 6 \;.$$

Rješenje: (a) $x_1 = -5,\; x_2 = -2$. (b) $x_1 = 3,\; x_2 = -2,\; x_3 = 2$.
(c) $x_1 = 2,\; x_2 = -1,\; x_3 = 1,\; x_4 = 0$.

18. Odredite parametar $\lambda \in \mathbb{R}$ tako da homogeni sustav

$$x_1 + x_2 - x_3 = 0 \;,$$
$$2x_1 - x_2 + x_3 = 0 \;,$$
$$x_1 - x_2 + \lambda x_3 = 0 \;.$$

ima i netrivijalno rješenje.
Rješenje: $\lambda = 1$.

19. Za koju vrijednost parametra $\lambda \in \mathbb{R}$ nehomogeni sustav

$$x_1 - x_2 + 2x_3 + x_4 = 1 \;,$$
$$x_1 \qquad - x_3 + x_4 = 2 \;,$$
$$2x_1 - x_2 - 5x_3 + \lambda x_4 = 3 \;,$$
$$x_2 + \lambda x_3 + x_4 = 1 \;.$$

ima jedinstveno rješenje?
Rješenje: $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{-1, 0\}$.

20. Riješite matrične jednadžbe

(a) $AX + B = 3X + 2A$, $A = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$, $B = \begin{pmatrix} 2 & -2 \\ 3 & 5 \end{pmatrix}$.

(b) $AX + C = XB$, $A = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$, $B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, $C = \begin{pmatrix} -1 & -6 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$.

(c) $XA + 3I_3 = A - 2X$, $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 2 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -2 \end{pmatrix}$.

Rješenje: (a) $X = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$. (b) $X = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ t & 1 \end{pmatrix}$, $t \in \mathbb{R}$. (c) $X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -5 \\ 0 & -4 & 10 \\ 5 & -5 & 1 \end{pmatrix}$.

Poglavlje 3

Vektorski prostori i linearni operatori

3.1 Vektorski i unitarni prostori

Većina nematematičara pod vektorskim prostorima podrazumijeva skupove „vektora-strelica" uz uobičajena pravila računanja s tim vektorima, a pod vektorima se obično podrazumijevaju objekti koji imaju iznos (duljinu), smjer i orijentaciju. Iako tako shvaćeni vektori svakako predstavljaju jednu zanimljivu i u primjenama izuzetno važnu vrstu vektora, ograničavanje na tako usko shvaćanje vektora onemogućava razumijevanje nekih naprednijih primjena linearne algebre, primjerice u kvantnoj fizici ili analizi simetrija molekula i kristalâ.

Pojednostavljeno rečeno, skup čije objekte znamo zbrajati i množiti brojevima (skalarima) tako da dobijemo istovrsne objekte i tako da vrijede uobičajena svojstva tih računskih operacija zovemo vektorskim prostorom, a njegove elemente vektorima. Ukoliko za te vektore još možemo smisliti i operaciju množenja koja bi po dvama vektorima pridruživala skalar (i to tako da vrijede sva uobičajena svojstva skalarnog produkta), onda naš vektorski prostor zovemo unitarnim prostorom.

Ono što je bitno za vektore i vektorske prostore su dakle dvije operacije: zbrajanje vektora i množenje vektora sa skalarima. Kako se u daljnjem nećemo ograničiti na „vektore-strelice", objekte koje u nekom kontekstu gledamo kao vektore označavat ćemo jednostavno $v, w, u, \ldots$.

Uzmimo da je V neki (naravno: neprazan) skup čije elemente želimo zvati vektorima. Ovisno o kontekstu, to može biti neki od skupova V^3, V^2, skup[1] $\mathbb{R}^n$ ili $\mathbb{C}^n$ (za n prirodan broj), neki od skupova $M_{m,n}(\mathbb{R})$ ili $M_{m,n}(\mathbb{C})$, neki skup realnih funkcija s istom domenom, ... Nadalje, ovisno o tome kakav vektorski prostor trebamo, potrebno je utvrditi (odlučiti se) koju vrstu brojeva ćemo uzeti za skalare: realne ili kompleksne brojeve. Vektori su elementi vektorskog prostora.

Da bismo V zvali vektorskim prostorom, moraju biti definirane dvije operacije: zbrajanje vektorâ i množenje vektora skalarom. Pritom, one moraju imati sljedeća

[1]Za skup A skup A^n se sastoji od svih uređenih n-torki elemenata iz A. Primjerice, $\mathbb{C}^3$ se sastoji od svih uređenih trojki kompleksnih brojeva.

svojstva: zbroj dva elementa iz V (dva vektora) mora opet biti element iz V (tj. vektor), a umnožak elementa iz V (vektora) sa skalarom mora biti element iz V (dakle, vektor), te moraju vrijedi svojstva koja smo u poglavlju o klasičnoj algebri vektora naveli kao tipična svojstva tih operacija. Preciznije:

Definicija 17 (Vektorski prostor)**.** *Odabrani skup V s odabranim skupom skalara ($\mathbb{R}$ ili $\mathbb{C}$) zove se vektorski prostor ako su definirane operacije $+$ i $\cdot$ (zbrajanje vektorâ i množenje vektora skalarom) tako da za sve elemente v, w, u iz V i sve skalare α, β vrijede sljedeća svojstva:*

$v + w \in V$	$\alpha v \in V$	*zatvorenost operacija $+$ i $\cdot$*
$v + w = w + v$		*komutativnost zbrajanja*
	$1 \cdot v = v$	*množenje jedinicom*
$(v + w) + u = v + (w + u)$	$(\alpha\beta)v = \alpha(\beta v)$	*asocijativnost i kvaziasocijativnost*
$v + \mathbf{0} = \mathbf{0} + v = v$		*postoji neutralni element za zbrajanje*
$v + (-v) = (-v) + v = \mathbf{0}$		*svaki element ima suprotni element*
$\alpha(v + w) = \alpha v + \alpha w$	$(\alpha + \beta)v = \alpha v + \beta w$	*distributivnost*

.

Neutralni element za zbrajanje, označen s $\mathbf{0} \in V$, zove se nulvektor.
Vektorski prostor je realan ako su skalari realni brojevi, a kompleksan ako su skalari kompleksni brojevi.

Iz gornjih svojstava mogu se izvesti i druga očekivana svojstva, primjerice da je $0 \cdot v = \mathbf{0}$ (množenje s nulom daje nulvektor), $-v = (-1) \cdot v$, $\ldots$. Preko suprotnog vektora definira se i oduzimanje vektora: $v - w = v + (-w)$.

Primjer 54. *Skupovi V^2, V^3, $V^2(O)$ i $V^3(O)$ su primjeri realnih vektorskih prostora.*

Primjer 55. *U poglavlju o matricama smo vidjeli da svaki od skupova $M_{m,n}(\mathbb{R})$ odnosno $M_{m,n}(\mathbb{C})$ čini realni odnosno kompleksni vektorski prostor uz zbrajanje i množenje skalarom kako je u tom poglavlju definirano. Posebno, skupovi $M_{m,1}$ stupčanih matrica čine vektorske prostore.*

Primjer 56. *Promotrimo skup $\mathbb{R}^4$. Njegovi elementi su oblika (x, y, z, w), gdje su x, y, z, w realni brojevi. Uzmimo realne brojeve kao skalare i definirajmo:*

$$(x, y, z, w) + (x', y', z', w') = (x + x', y + y', z + z', w + w'),$$

$$\alpha \cdot (x, y, z, w) = (\alpha x, \alpha y, \alpha z, \alpha w).$$

Dakle, primjerice je $(1, 2, 3, 4) + (0, \pi, e, -1) = (1, 2 + \pi, 3 + e, 3)$, a $4 \cdot (0, 1, -1, 2) = (0, 4, -4, 8)$. Obzirom na tako definirane operacije $+$ i $\cdot$ skup $\mathbb{R}^4$ je realni vektorski prostor.

Potpuno analogno se definiraju zbrajanje i množenje skalarom za elemente iz $\mathbb{R}^n$ i $\mathbb{C}^n$: zbraja se po koordinatama, a skalarom množi tako da svaku koordinatu pomnožimo tim skalarom. Uz tako definirane operacije svi $\mathbb{R}^n$ i $\mathbb{C}^n$ su vektorski prostori.

Primjer 57. *Uzmimo skup svih neprekidnih funkcija s nekog intervala I u skup*[2] $\mathbb{R}$. *Definirajmo da zbroj dviju takvih funkcija f i g na varijablu $x \in I$ djeluje po pravilu*

$$(f+g)(x) = f(x) + g(x),$$

a da umnožak funkcije f skalarom $\alpha \in \mathbb{R}$ na varijablu $x \in I$ djeluje po pravilu

$$(\alpha \cdot f)(x) = \alpha \cdot f(x).$$

Uz tako definirane operacije skup svih neprekidnih realnih funkcija kojima je domena I čini realni vektorski prostor. Analogno bi se definirao vektorski prostor realnih funkcija koje su na I derivabilne ili integrabilne.

Gotovo sva terminologija vezana za „vektore-strelice" nepromijenjeno se prenosi na ovako općenitije shvaćene vektore.

Definicija 18 (Linearna kombinacija)**.** *Linearna kombinacija (konačno mnogo) vektora $v, w, u, \ldots$ je svaki izraz (vektor) oblika $\alpha v + \beta w + \gamma u + \ldots$. Skalare u linearnim kombinacijama zovemo koeficijentima.*

Jednočlane linearne kombinacije su višekratnici nekog vektora v, tj. vektori αv.

Primjer 58. *Linearne kombinacije vektora* $(1, 2, 3, 4)$ *i* $(0, 1, 0, 1)$ *iz* $\mathbb{R}^4$ *su oblika*

$$\alpha \cdot (1,2,3,4) + \beta \cdot (0,1,0,1) = (\alpha, 2\alpha + \beta, 3\alpha, 4\alpha + \beta).$$

Primjer 59. *Polinomi su linearne kombinacije monoma (u prostoru svih funkcija s $\mathbb{R}$ u $\mathbb{R}$).*

Napomena 3. *Uz određena dodefiniranja, koja nećemo ovdje razrađivati, za operacije koje se rade pri izjednačavanju redoks-reakcija preko polujednadžbi oksidacije i redukcije može se reći: računa se određena linearna kombinacija polujednadžbi oksidacije i redukcije.*

Slično, Hessov zakon možemo formulirati i ovako: ako se neka reakcija može zapisati kao linearna kombinacija nekih drugih reakcija, onda je reakcijski gradijent bilo koje ekstenzivne veličine stanja (primjerice, reakcijska entalpija ili reakcijska Gibbsova energija) jednak linearnoj kombinaciji reakcijskih gradijenata te iste veličine pojedinih reakcija, i to s istim koeficijentima: ako je reakciju R *moguće zapisati kao* $\sum_i \alpha_i \mathrm{R}_i$, *onda je* $\Delta_r Y = \sum_i \alpha_i \Delta_{r,i} Y$ *za* $Y = H, G, \ldots$.

Koje god vektore uzeli, uvijek je moguće naći njihovu linearnu kombinaciju koja daje nulvektor. To je tzv. trivijalna linearna kombinacija u kojoj su svi koeficijenti jednaki nuli. Je li to jedini način kako nulvektor zapisati kao linearnu kombinaciju nekih vektora? To ovisi o tome jesu li ti vektori linearno zavisni ili ne.

Definicija 19 (Linearna (ne)zavisnost)**.** *Konačan skup vektora $\{v, w, u, \ldots\}$ je linearno zavisan skup ako se (bar) jedan od vektora tog skupa može zapisati kao linearna kombinacija ostalih vektora. Skup vektora koji nije linearno zavisan zove se linearno nezavisan skup.*

[2] Analogne definicije se mogu preuzeti i za kompleksne funkcije, tj. funkcije s kodomenom $\mathbb{C}$: sve kompleksne funkcije s istom domenom čine kompleksan vektorski prostor.

Iz definicije vidimo: svaki skup vektora koji sadrži nulvektor je linearno zavisan. Naime, ako gledamo skup $\{\mathbf{0}, v, w, \ldots\}$, odmah vidimo da se jedan od tih vektora, nulvektor, može napisati kao linearna kombinacija ostalih: $\mathbf{0} = 0 \cdot v + 0 \cdot w + \ldots$. Nadalje, svaki jednočlan skup $\{v\}$ s $v \neq \mathbf{0}$ je linearno nezavisan.

Primjer 60. *Svaka dva proporcionalna vektora su linearno zavisna. Primjerice, vektori* $(1, 2, 3, 4)$ *te* $i(1, 2, 3, 4) = (i, 2i, 3i, 4i)$ *su linearno zavisni u* $\mathbb{C}^4$.

Ako je skup $\{v, w, \ldots\}$ linearno zavisan, primjerice jer se v može zapisati kao linearna kombinacija ostalih vektora ($v = \alpha w + \ldots$), onda se nulvektor može na još jedan (osim trivijalnog) način zapisati kao linearna kombinacija tih vektora: $\mathbf{0} = 1 \cdot v - \alpha w - \ldots$. Dakle, možemo reći: skup vektora je linearno zavisan ako se osim na trivijalan način ($0 \cdot v + 0 \cdot w + \ldots$) nulvektor može zapisati kao linearna kombinacija tih vektora na bar još jedan način.

Kako provjeriti linearnu (ne)zavisnost nekog skupa vektora iz $\mathbb{R}^n$ (ili $\mathbb{C}^n$, $M_{m,n}$ i sl.)? Najjednostavniji način je preko ranga matrice.

Primjer 61. *U matrici* $A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$ *možemo njene retke shvatiti kao dva vektora* $(2, 1, 3)$ *i* $(0, -1, 2)$ *u* $\mathbb{R}^3$, *a njene stupce kao tri vektora* $(2, 0)$, $(1, -1)$ *i* $(3, 2)$ *u* $\mathbb{R}^2$.

Definicija 20 (Rang matrice)**.** *Ako retke matrice (ili njene stupce) shvatimo kao vektore, rang matrice je broj linearno nezavisnih redaka (odnosno stupaca) te matrice.*

Napomena 4. *Nije očito, ali može se dokazati da ćemo istu vrijednost ranga dobiti ako u gornjoj definiciji uzimamo retke ili stupce.*

Rang matrice određujemo tako da matricu podvrgnemo elementarnim transformacijama[3] sve dok ne postignemo da su u njoj svi elementi nule osim eventualno na dijagonalnim mjestima. Broj nenul elemenata na dijagonali je rang matrice.

Primjer 62. *Rang matrice* $A = \begin{pmatrix} 2 & -2 & 3 \\ 4 & -4 & 6 \\ -3 & 3 & 1 \end{pmatrix}$ *je 2 (provjerite!) odnosno svaka dva njena retka i svaka dva njena stupca su linearno nezavisna.*

Ako je matrica tipa $m \times n$ njen rang ne može biti veći od manjeg od brojeva m i n. Primjerice, matrica iz $M_{7,15}$ ne može imati rang veći od 7.

Želimo li za neke vektore utvrditi jesu li linearno zavisni ili ne, ukoliko su dani u koordinatnom obliku, dovoljno je zapisati ih kao stupce matrice i odrediti joj rang.

Primjer 63. *Ispitajmo jesu li vektori* $(1, -1, 0, 1)$, $(2, 1, 1, 1)$ *i* $(0, 1, 0, 1)$ *linearno nezavisni vektori iz* $\mathbb{R}^4$. *Dakle, treba odrediti rang matrice*

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ -1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

[3] Kod određivanja ranga matrice elementarne transformacije smiju se izvoditi i sa stupcima.

Elementarnim transformacijama dobivamo:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ -1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

te je rang matrice 3 (tj. onoliko koliko smo imali vektora). Stoga su zadani vektori linearno nezavisni.

Definicija 21 (Dimenzija). *Najveći broj elemenata koje u danom vektorskom prostoru može imati neki linearno nezavisan skup vektora zove se dimenzija prostora. Ako se takav broj ne može odrediti govorimo o beskonačnodimenzionalnom vektorskom prostoru, a inače o konačnodimenzionalnom.*

Primjer 64. *Realni vektorski prostori $\mathbb{R}^n$ su n-dimenzionalni realni vektorski prostori. Slično, vektorski prostori $\mathbb{C}^n$ su n-dimenzionalni kompleksni vektorski prostori.*

Primjer 65. *Realni vektorski prostori $M_{m,n}$ su $(m \cdot n)$-dimenzionalni realni vektorski prostori. Slično, vektorski prostori $M_{m,n}(\mathbb{C})$ su $(m \cdot n)$-dimenzionalni kompleksni vektorski prostori.*

Primjer 66. *Vektorski prostori realnih neprekidnih/derivabilnih/integrabilnih funkcija s istom domenom su beskonačnodimenzionalni: ma koliko velik linearno nezavisan skup vektora (funkcija) uzeli, uvijek je moguće naći još neku funkciju koju možemo dodati u taj skup, a da on ostane linearno nezavisan.*

Korisno je zapamtiti: svaki skup vektora koji sadrži više elemenata nego što je dimenzija prostora sigurno je linearno zavisan.

Primjer 67. *Matrice* $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} 5 & 11 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} 20 & -3 \\ 5 & 4 \end{pmatrix}$ *i* $\begin{pmatrix} -1 & -1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}$ *su linearno zavisne jer se radi o pet matrica iz prostora M_2 koji ima dimenziju $2 \cdot 2 = 4$.*

Definicija 22 (Baza). *Baza prostora je bilo koji linearno nezavisan skup vektora koji ima onoliko elemenata kolika je dimenzija prostora.*

Primjer 68. *Kanonska baza za $\mathbb{R}^n$ je skup $\{e_1, e_2, \ldots, e_n\}$ vektora iz tog prostora koji su oblika: e_i na i-toj poziciji ima broj 1, a na svim ostalim nule. Da je to baza vidi se po tome što je prikaz*

$$(x_1, x_2, \ldots, x_n) = x_1(1, 0, 0, \ldots, 0, 0) + x_2(0, 1, 0, \ldots, 0, 0) + \ldots + x_n(0, 0, 0, \ldots, 0, 1) =$$

$$= x_1 e_1 + x_2 e_2 + \ldots + x_n e_n$$

moguć i jedinstven za svaki vektor $(x_1, x_2, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ odnosno $(x_1, x_2, \ldots, x_n) \in \mathbb{C}^n$.

U V^3 smo primjerice odabirom neka tri vektora kao baze (recimo, kristalografske baze) definirali što su koordinate svih ostalih vektora te smo ih prikazivali uređenim trojkama koordinata, a vektori baze su onda imali koordinate $[1, 0, 0]$, $[0, 1, 0]$ i $[0, 0, 1]$. U prostorima tipa $\mathbb{R}^n$ i $\mathbb{C}^n$ pak prvo imamo n-torke, pa bazu koja se sastoji od elemenata uz koje će koordinate biti baš brojevi od kojih se n-torke sastoje zovemo kanonskom.

Primjer 69. *Matrice $E_{ij} \in M_{m,n}$ koje na svim pozicijama osim (i,j) imaju nule, a na toj poziciji imaju 1, čine kanonsku bazu od $M_{m,n}$.*

Osnovno svojstvo baze prostora je da se svaki vektor može prikazati kao linearna kombinacija vektora baze, i to na jedinstven način. Takav zapis zovemo prikaz vektora u bazi. Želimo li odrediti koeficijente u takvom prikazu, potrebno je riješiti sustav linearnih jednadžbi koji proizlazi iz te definicije.

Primjer 70. *Vektori $(2,-1,0,1)$, $(1,2,3,4)$, $(1,1,1,0)$ i $(0,1,0,0)$ su baza za $\mathbb{R}^4$ jer su linearno nezavisni (provjerite to preko ranga matrice!). Prikaz proizvoljnog vektora (x,y,z,w) u toj bazi je po definiciji oblika*

$$(x,y,z,w) = \alpha(2,-1,0,1) + \beta(1,2,3,4) + \gamma(1,1,1,0) + \delta(0,1,0,0) =$$

$$= (2\alpha+\beta+\gamma, -\alpha+2\beta+\gamma+\delta, 3\beta+\gamma, \alpha+4\beta).$$

Želimo li recimo $(1,0,0,0)$ zapisati u toj bazi, trebamo naći $\alpha,\beta,\gamma,\delta$ takve da je

$$(1,0,0,0) = (2\alpha+\beta+\gamma, -\alpha+2\beta+\gamma+\delta, 3\beta+\gamma, \alpha+4\beta),$$

tj. riješiti sustav

$$2\alpha+\beta+\gamma = 1,$$

$$-\alpha+2\beta+\gamma+\delta = 0,$$

$$3\beta+\gamma = 0,$$

$$\alpha+4\beta = 0.$$

Budući znamo da se radi o bazi, sigurno je da taj sustav ima jedinstveno rješenje. Ono iznosi

$$\alpha = \frac{2}{5},\ \beta = -\frac{1}{10},\ \gamma = \frac{3}{10},\ \delta = \frac{3}{10}.$$

Dakle, vektor $(1,0,0,0)$ koji u kanonskoj bazi ima koordinate $[1,0,0,0]$, obzirom na novu bazu ima koordinate $\left[\frac{2}{5}, -\frac{1}{10}, \frac{3}{10}, \frac{3}{10}\right]$.

Dimenziju studenti i druga bića ponekad miješaju s brojem elemenata. U svakom vektorskom prostoru vrijedi: ako prostor sadrži bar još jedan vektor osim nulvektora, onda taj prostor sadrži beskonačno mnogo elemenata. To je lako vidjeti: ako je $v \neq \mathbf{0}$ onda su za svaki skalar α (a njih ima beskonačno mnogo) vektori αv različiti. Stoga svaki vektorski prostor osim $V = \{\mathbf{0}\}$ sadrži beskonačno mnogo elemenata, neovisno o tom je li konačne ili beskonačne dimenzije. Dimenzija je pak najmanji broj vektora potreban da kao njihove linearne kombinacije možemo zapisati *sve* vektore — njih beskonačno mnogo.

Dva vektorska prostora su izomorfna ako do na smisao/vrstu vektora i operacija s njima nema razlika među njima. Smisao je sličan kemijskom: izomorfnost znači jednakost struktura, ali dopušta različitost sadržaja.

Primjer 71. *Vektorski prostori* $\mathbb{R}^3$, $M_{3,1}(\mathbb{R})$, V^3 *i* $V^3(0)$ *su izomorfni. Prva dva su izomorfni jer iako su elementi prvog oblika* (x, y, z)*, a elementi drugog oblika* $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$*, operacije se izvode po istim pravilima — razlika je samo u stilu zapisa. Putem koordinatizacije* V^3 *odnosno* $V^3(0)$ *može se provjeriti da su i oni izomorfni s* $\mathbb{R}^3$*.*

Općenito, vektorski prostori $\mathbb{R}^n$ *i* $M_{n,1}(\mathbb{R})$ *odnosno* $\mathbb{C}^n$ *i* $M_{n,1}(\mathbb{C})$ *su izomorfni.*

Primjer 72. *Svaki* $M_{m,n}$ *je izomorfan s* $\mathbb{R}^{mn}$ *— to se vidi tako da matricu shvatimo kao* $(m \cdot n)$*-torku jednostavnim nabrajanjem njenih elemenata po retcima. Primjerice, matrice* $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ *možemo shvatiti i kao uređene četvorke* (a, b, c, d) *bez da ima bitnih promjena u zbrajanju i množenju skalarom (zbroju dviju matrica odgovara zbroj odgovarajućih četvorki, a produktu matrice skalarom odgovara produkt odgovarajuće četvorke s tim skalarom), pa su* M_2 *i* $\mathbb{R}^4$ *izomorfni.*

Zapravo: svi realni vektorski prostori iste (konačne) dimenzije su izomorfni pa stoga prostore $\mathbb{R}^n$ ili $M_{n,1}(\mathbb{R})$ (ovisno o tom s kojim nam je trenutno jednostavnije raditi) možemo smatrati prototipovima realnih n-dimenzionalnih prostora.

Primjer 73. *Recimo da nas zanima jesu li matrice* $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} 5 & 11 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ *i* $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ *linearno zavisne. Kako je* M_2 *izomorfan s* $\mathbb{R}^{2 \cdot 2} = \mathbb{R}^4$*, zapravo treba ispitati linearnu nezavisnost vektora* $(0, 1, -1, 2)$, $(5, 11, 0, 0)$ *i* $(1, 0, 0, 0)$*.*

Definicija 23 (Unitarni prostori)**.** *Vektorski prostor* V *je unitaran ako je na njemu definirana još jedna operacija (skalarni produkt vektora, u oznaci* $\langle v, w \rangle$*) sa svojstvima*

$$\langle v, v \rangle \geq 0; \quad \langle v, v \rangle = 0 \Leftrightarrow v = \mathbf{0},$$

$$\langle v, w \rangle = \overline{\langle w, v \rangle},$$

$$\langle u, v + w \rangle = \langle u, v \rangle + \langle u, w \rangle,$$

$$\langle v, \alpha \cdot w \rangle = \alpha \langle v, w \rangle.$$

Pritom naravno ta svojstva moraju vrijediti za sve vektore $v, w, u \in V$ *i skalare* α*.*

Za realne vektorske prostore drugo svojstvo svodi se na komutativnost skalarnog produkta:

$$\langle v, w \rangle = \langle w, v \rangle.$$

Uz ranije opisan „standarni” skalarni produkt vektora-strelica (koji je bio definiran s $\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle = |\vec{v}| \cdot |\vec{w}| \cos \phi$), dva u primjenama najčešće korištena skalarna produkta opisana su sljedećim primjerima.

Primjer 74. *Na* $\mathbb{R}^n$ *i* $\mathbb{C}^n$ *uobičajeno je skalarni produkt definirati s*

$$\langle (x_1, \ldots, x_n), (y_1, \ldots, y_n) \rangle = x_1 y_1 + \ldots + x_n y_n.$$

Primjer 75. *Na vektorskom prostoru realnih funkcija integrabilnih na $[a, b]$ (gdje neki ili oba od a i b može biti i beskonačan) uobičajeno je skalarni produkt definirati s*

$$\langle f, g\rangle = \int_a^b f(x)g(x)\,\mathrm{d}x.$$

Ako promatramo funkcije kojima je kodomena $\mathbb{C}$ (kompleksne funkcije), odgovarajući skalarni produkt definira se s

$$\langle f, g\rangle = \int_a^b f^*(x)g(x)\,\mathrm{d}x,$$

gdje je s f^* označena funkcija koja je dana s $f^*(x) = \overline{f(x)}$. Ovaj skalarni produkt je vrlo čest u kvantnoj fizici i kemiji.

Primjer 76. *U poglavlju o algebri vektora vidjeli smo da u slučaju vektora koji su zadani koordinatama obzirom na ortonormiranu bazu njihov skalarni produkt računamo po pravilu $[x, y, z] \cdot [x', y', z'] = xx' + yy' + zz'$. Primjerice, skalarni produkt vektora $2\vec{i} - 5\vec{k}$ s vektorom $-\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}$ je $[2, 0, -5] \cdot [-1, 1, -1] = -2 + 0 + 5 = 3$.*

Koristeći izomorfnost prostora $V^3(O)$ (s ortonormiranom bazom $\{\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}\}$) i $M_{3,1}$, vidimo da za vektore $v = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$ i $v' = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}$ njihov skalarni produkt možemo izračunati kao

$$\langle v, v'\rangle = v^t \cdot v'.$$

Zadatak 6. *Nađite sve primjere korištenja skalarnog produkta integrabilnih funkcija u poglavlju o primjenama integralâ.*

U svakom unitarnom prostoru može se definirati norma (duljina) vektora preko jednakosti:

$$||v|| = \sqrt{\langle v, v\rangle}.$$

Primjer 77. *U $\mathbb{R}^n$ i $\mathbb{C}^n$ norma vektora se računa formulom*

$$||(x_1, \ldots, x_n)|| = \sqrt{x_1^2 + \ldots + x_n^2}.$$

Primjer 78. *U vektorskom prostoru realnih funkcija integrabilnih na $[a, b]$ norma vektora (dakle, funkcije $f : [a, b] \to \mathbb{R}$) se računa formulom*

$$||f|| = \sqrt{\int_a^b f^2(x)\,\mathrm{d}x},$$

a u vektorskom prostoru kompleksnih funkcija integrabilnih na $[a, b]$ norma vektora (dakle, funkcije $f : [a, b] \to \mathbb{R}$) se računa formulom

$$||f|| = \sqrt{\int_a^b f^*(x)f(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b |f(x)|^2\,\mathrm{d}x}.$$

Dva vektora unitarnog prostora zovu se ortogonalnim ako im je skalarni produkt nula. Svaki skup vektora unitarnog prostora u kojem su svaka dva vektora ortogonalna je linearno nezavisan.

Primjer 79. *Vektori* $(1, -1, 2, 0, 3)$ *i* $(0, 2, 1, 4, 0)$ *su ortogonalni u* $\mathbb{R}^5$ *jer im je skalarni produkt* $1 \cdot 0 + (-1) \cdot 2 + 2 \cdot 1 + 0 \cdot 4 + 3 \cdot 0 = 0$.

Primjer 80. *Retci (stupci) ortogonalne matrice, shvaćeni kao vektori, su svaki na svakog ortogonalni.*

Primjer 81. *Vodikove* $1s$ *i* $2s$ *orbitale su ortogonalne. Naime,* $1s$ *orbitala je valna funkcija*

$$\psi_{1s} = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0},$$

a $2s$ *orbitala je valna funkcija*

$$\psi_{2s} = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{1}{8\pi a_0^3}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/(2a_0)}.$$

Pritom su formule za obje valne funkcije dane u sfernim koordinatama. Njihov skalarni produkt je zapravo trostruki integral (o tom više kasnije), no kako su s *orbitale sferno simetrične (ovise samo o udaljenosti* r *do jezgre), uvjet ortogonalnosti tih valnih funkcija se pojednostavljuje na oblik*

$$\int_0^{+\infty} 4\pi r^2 \psi_{1,0,0}(r) \psi_{2,0,0}(r) \, \mathrm{d}r = 0.$$

Faktor $4\pi r^2$ *potječe od višestrukog integrala u sfernim koordinatama. Kako obje funkcije sadrže multiplikativne konstante koje ne mogu utjecati na to je li gornji integral nula, dovoljno je provjeriti da je*

$$\int_0^{+\infty} r^2 e^{-r/a_0} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/(2a_0)} \, \mathrm{d}r = 0.$$

Računamo:

$$\int_0^{+\infty} r^2 \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-3r/(2a_0)} \, \mathrm{d}r = 2 \int_0^{+\infty} r^2 e^{-3r/(2a_0)} \, \mathrm{d}r - \frac{1}{a_0} \int_0^{+\infty} r^3 e^{-3r/(2a_0)} \, \mathrm{d}r =$$

$$= 2 \cdot \frac{2!}{(3/(2a_0))^3} - \frac{1}{a_0} \cdot \frac{3!}{(3/(2a_0))^4} = 0.$$

Tu smo koristili formulu $\int_0^{+\infty} r^n e^{-ar} \, \mathrm{d}r = \frac{n!}{a^{n+1}}$.

Zadatak 7. *Pokažite da su funkcije* f_n *i* g_m *definirane s*

$$f_n(x) = \cos(nx),$$

$$g_m(x) = \sin(mx)$$

ortogonalne nad intervalom $[-\pi, \pi]$ *za sve vrijednosti* $m, n \in \mathbb{N}$.

Baza unitarnog prostora zove se ortonormirana baza ako su svi vektori u njoj norme 1 i međusobno ortogonalni. Kanonske baze za $\mathbb{R}^n$ i $\mathbb{C}^n$ su ortonormirane. U unitarnim prostorima uvijek vrijedi i nejednakost[4]:

$$|\langle v, w\rangle| \leq ||v|| \cdot ||w||.$$

Jednakost vrijedi ako i samo ako su vektori v i w kolinearni (tj. skup $\{v, w\}$ je linearno zavisan).

Za kraj, spomenimo i pojam potprostora. Potprostor je podskup S nekog vektorskog prostora takav da je zbroj svaka dva vektora iz S ponovno u S i takav da je produkt skalara s vektorom iz S ponovno iz S.

Primjer 82. *Skup svih rješenja homogenog sustava linearnih jednadžbi s n nepoznanica može se shvatiti kao potprostor od $\mathbb{R}^n$ (vidi prethodno poglavlje).*

☼ **Ponovimo bitno...** Vektorski prostori su skupovi na kojima su definirane operacije zbrajanja njihovih elemenata te množenja njihovih elemenata skalarima (realnim ili kompleksnim brojevima); pritom te operacije moraju zadovoljavati uobičajena svojstva. Elementi vektorskog prostora zovu se vektori. Neutralni element obzirom na zbrajanje vektora zove se nulvektor. Unitarni prostor je vektorski prostor na kojem je definirana operacija skalarnog produkta koja po dvama vektorima pridružuje skalar i ima uobičajena svojstva skalarnog produkta. Linearna kombinacija nekih vektora je zbroj njihovih umnožaka s nekim skalarima. Skup vektora je linearno nezavisan ako se nijedan element tog skupa ne može zapisati kao linearna kombinacija drugih vektora iz tog skupa. Maksimalni broj elemenata kojeg može imati linearno nezavisan skup u promatranom vektorskom prostoru zove se dimenzijom prostora, a linearno nezavisan skup koji ima elemenata kolika je dimenzija prostora zove se baza. Za danu bazu prostora, svaki vektor iz tog prostora ima jedinstveno određene koordinate obzirom na tu bazu, tj. može se na jedinstven način zapisati kao linearna kombinacija elemenata te baze, a koeficijenti u toj linearnoj kombinaciji zovu se koordinatama vektora obzirom na bazu. Prostor $\mathbb{R}^n$ je n-dimenzionalan realan vektorski prostor i svi drugi realni n-dimenzionalni vektorski prostori su mu izomorfni. Prostor $\mathbb{R}^n$ se često promatra kao unitaran obzirom na standardni skalarni produkt definiran ovako: dvije n-torke množimo tako da im pomnožimo odgovarajuće koordinate i onda te umnoške zbrojimo. Kanonska baza u $\mathbb{R}^n$ ili $M_{m,n}$ sastoji se od vektora kojima je točno po jedna koordinata jednaka 1, a ostale su 0. ☺

3.2 Linearni operatori

Kako ste već primjetili, vektorski prostori su posebna vrsta skupova. Stoga se među funkcijama kojima su domene i kodomene vektorski prostori ističu one koje „poštivaju tu posebnost".

[4]Nejednakost Cauchy-Schwarz-Bunjakovskog.

Definicija 24 (Linearan operator). *Linearan operator*[5] *je funkcija* $\hat{A}: V \to W$ *(*V *i* W *su vektorski prostori, oba realni ili oba kompleksni) koja ima sljedeća dva svojstva:*

$$\hat{A}(v+w) = \hat{A}(v) + \hat{A}(w) \quad \textit{(aditivnost)},$$

$$\hat{A}(\lambda v) = \lambda \hat{A}(v) \quad \textit{(homogenost)}$$

za sve $v, w \in V$ *i skalare* λ. *Ako je* $W = \mathbb{R}$ *odnosno* $W = \mathbb{C}$, *linearan operator zovemo linearnim funkcionalom.*

Kod linearnih operatora nije uobičajeno pisati $\hat{A}(v)$ već se piše $\hat{A}v$; glavni razlog je što su linearni operatori poopćenje množenja vektora fiksnim brojem.

Primjer 83. *Za svaki vektorski prostor* V *funkcija* $\hat{I}: V \to V$ *koja „ništa ne radi"* ($\hat{I}(v) = v$) *i funkcija* $\hat{0}: V \to V$ *koja svim vektorima pridružuje nulvektor* ($\hat{0}(v) = \mathbf{0}$) *su linearni operatori — tzv. jedinični i nuloperator.*

Primjer 84. *Neodređeni integral* $\int \mathrm{d}x$ *je linearan operator, kao i operator deriviranja* $' = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$.

Primjer 85. *Trag je linearan funkcional na* M_n.

Primjer 86. *Pridruživanje koje svim funkcijama* f *derivabilnim u* $c = 1$ *pridružuje* $f'(1)$ *je linearan funkcional jer je* $(f+g)'(1) = f'(1) + g'(1)$ *i* $(\alpha f)'(1) = \alpha \cdot f'(1)$.

Primjer 87. *U kvantnoj mehanici se dinamičke veličine klasične mehanike (primjerice, koordinata, brzina, kinetička energija, potencijalna energija, količina gibanja) predstavljaju linearnim operatorima koji djeluju na prostoru valnih funkcija. Tako je kvantna količina gibanja (za gibanje po* x*-osi) operator* $\hat{p}_x$ *koji valnoj funkciji* ψ *pridružuje njenu derivaciju po poziciji* x *pomnoženu s* $-i\hbar$ *(piše se* $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$*). Dakle,* $\hat{p}_x$ *valnoj funkciji* ψ *pridružuje valnu funkciju* $\hat{p}_x\psi$ *koja na svoju varijablu* x *djeluje po pravilu* $\hat{p}_x\psi(x) = -i\hbar\psi'(x)$.

Potencijalnoj energiji V *u kvantnoj mehanici odgovara operator* $\hat{V}$ *koji na valnu funkciju djeluje tako da jednostavno pomnožimo potencijalnu energiju s valnom funkcijom:* $\hat{V}\psi(x) = V(x) \cdot \psi(x)$.

Slične formule vrijede i u slučajevima ovisnosti valnih funkcija o dvije ili tri koordinate.

Osobito važan među kvantnomehaničkim linearnim operatorima je Hamiltonijan (koji je kvantnomehanička verzija ukupne energije). Prema gornjem, Hamiltonijan $\hat{H}$ *djeluje između vektorskih prostora valnih funkcija i linearan je operator, tj.* $\hat{H}(\psi+\phi) = \hat{H}\psi + \hat{H}\phi$ *i* $\hat{H}(\alpha\psi) = \alpha\hat{H}\psi$ *za sve valne funkcije* ψ *i* ϕ *i sve kompleksne brojeve* α.

Zadatak 8. *Neka je zadan operator* $\hat{A} = \hat{x} + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ *koji djeluje na prostoru derivabilnih funkcija (s istom domenom i varijablom* x*). Pritom je s* $\hat{x}$ *označen operator koji funkciji pridružuje njen produkt s* x. *Dakle,* $\hat{A}f(x) = \left(\hat{x} + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right) f(x) = x \cdot f(x) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} f(x) = xf(x) + f'(x)$. *Primjerice,* $\hat{A}(a\sin(bx)) = ax\sin(bx) + ab\cos(bx)$.

---

[5] Sâm izraz „operator" obično se koristi za bilo kakvu funkciju kojoj su domena i kodomena vektorski prostori.

Za primjene u kemiji, osobito kristalografiji, izuzetno su bitni operatori simetrije: linearni operatori $\hat{A} : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ za koje vrijedi dodatno svojstvo da neki dio prostora — molekulu ili kristal — preslikavaju na samu sebe. Drugim riječima, ne vidi se razlika između te molekule ili kristala prije i poslije djelovanja operatora. Najvažniji takvi operatori su jedinični operator, centralna simetrija (inverzija) koja svakom vektoru pridružuje suprotni ($\iota(v) = -v$), zrcaljenje σ obzirom na neku ravninu i rotacija ρ za neki kut oko nekog pravca. Kad se oni koriste prirodno se poistovjećuju radij-vektori točaka sa samim točkama prostora (tj. operator djeluje na radij-vektor $[x, y, z]$, a dobiveni novi radij-vektor daje koordinate točke gdje je nakon djelovanja operatora „završila" točka (x, y, z)). Matematički rečeno, prešutno se koristi izomorfnost vektorskih prostora $V^3(0)$ i $\mathbb{R}^3$.

Primjer 88. *Svejedno je zbrojimo li prvo dva vektora pa onda njihov zbroj rotiramo oko z-osi za pravi kut u pozitivnom smjeru*[6] *ili prvo svakog od njih zarotiramo oko z-osi za pravi kut u pozitivnom smjeru te dobivene vektore zbrojimo (aditivnost). Također, svejedno je da li prvo zarotiramo vektor pa dobiveni vektor produljimo/skratimo za neki faktor ili prvo produljimo/skratimo vektor pa onda zarotiramo (homogenost).*

Primjer 89. *Zrcaljenje σ_h obzirom na (x, y)-ravninu ne mijenja x i y koordinatu, a z koordinati mijenja predznak. Dakle,*

$$\sigma_h(x, y, z) = (x, y, -z).$$

Linearni operatori se uz uobičajene uvjete na domenu/kodomenu mogu komponirati (kompozicija linearnih operatora je linearan operator), s tim da je uobičajeno umjesto $\hat{A} \circ \hat{B}$ pisati $\hat{A}\hat{B}$. Kao i kod drugih funkcija, komponiranje nije komutativno, tj. osim u rijetkim slučajevima ne vrijedi $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. U analizi simetrija molekula i kristala česti su sljedeći komponirani operatori: rotoinverzije (kompozicije rotacija s inverzijama) i rotorefleksije (kompozicije rotacija sa zrcaljenjem obzirom na ravninu okomitu na os rotacije).

Primjer 90. *U kvantnoj mehanici često je potrebno računati komutatore. Komutator operatorâ $\hat{A}$ i $\hat{B}$ je operator $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Komutator je nuloperator točno kad operatori $\hat{A}$ i $\hat{B}$ komutiraju (kad je $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$).*

Primjerice, komutator operatora $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ i $\hat{x}$ je jedinični operator $\hat{I}$ jer vrijedi

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, \hat{x}\right] f(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\hat{x} f(x) - \hat{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} f(x) = (xf(x))' - xf'(x) = f(x) + xf'(x) - xf'(x) = f(x).$$

Dakle, za svaku funkciju (vektor) f vrijedi

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, \hat{x}\right] f = f = \hat{I} f,$$

tj. $\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, \hat{x}\right] = \hat{I}$.

[6] Pozitivni smjer je smjer suprotan smjeru kazaljke na satu.

Neki linearni operatori su invertibilne funkcije. Takve linearne operatore zovemo izomorfizimima (vektorskih prostora). Inverzna funkcija linearnog operatora je uvijek linearni operator. Taj inverzni linearni operator od $\hat{A}$ označavamo s $\hat{A}^{-1}$. Definicija inverzne funkcije u kontekstu linearnih operatora poprima oblik $\hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{I}$.

Korisno je zapamtiti i jedno zajedničko svojstvo svih linearnih operatora: linearni operator nulvektor domene preslikava u nulvektor kodomene[7].

3.2.1 Matrica linearnog operatora

Kad baratamo funkcijama koje djeluju između skupova brojeva, uobičajeni su kratki formalni zapisi pravila pridruživanja koji nam omogućuju efikasno računanje vrijednosti funkcije. Tako primjerice, umjesto da kažemo da neka funkcija računa kvocijente brojeva s njihovim prirodnim logaritmima, kratko pišemo $f(x) = \frac{x}{\ln x}$.

Primjer 91. *Funkcija koja svim realnim brojevima pridružuje njihov dvostruki broj može se zapisati kao $f(x) = 2x$. Ona je linearan operator: $f(x + x') = 2(x + x') = 2x + 2x' = f(x) + f(x')$ i $f(\alpha x) = 2(\alpha x) = \alpha(2x) = \alpha f(x)$. Zato se funkcije oblika $f(x) = ax$ zovu linearnim funkcijama, a kratko ih opisujemo kao množenje s brojem a.*

Ako su V i W realni[8] prostori dimenzije n odnosno m, linearan operator $\hat{A} : V \to W$ može se zamisliti kao množenje vektora iz $M_{n,1}$ *slijeva* s matricom $A \in M_{m,n}$, čime dobivamo vektor iz $M_{m,1}$:

$$\hat{A}v = A \cdot v.$$

Ako znamo koju matricu uzeti u gornjoj jednakosti, onda računanje rezultata djelovanja operatora $\hat{A}$ na razne vektore postaje jednostavno. No, postoji jedan problem: svakom operatoru odgovara beskonačno mnogo različitih matrica. Koju matricu ćemo odabrati, ovisi o tome koju smo bazu odabrali za prikaz vektorâ iz V i koju smo odabrali za vektore iz W. Naime, V i W se mogu shvatiti kao $M_{n,1}$ i $M_{m,1}$, ali tek ako odaberemo njihove baze i onda njihove vektore zapisujemo koordinatno u tim bazama.

Primjer 92. *Neka je za $V^3(O)$ odabrana baza $\vec{a} = \vec{i} - \vec{k}$, $\vec{b} = \vec{j}$ i $\vec{c} = 2\vec{i} + \vec{k}$. Uz taj odabir, vektor $\vec{v}$ koji u standardnoj bazi $\{\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}\}$ ima koordinate $[5, 4, -2]$ u novoj bazi $\{\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}\}$ ima koordinate $[3, 4, 1]$:*

$$5\vec{i} + 4\vec{j} - 2\vec{k} = \alpha\vec{i} - \alpha\vec{k} + \beta\vec{j} + 2\gamma\vec{i} + \gamma\vec{k} = (\alpha + 2\gamma)\vec{i} + \beta\vec{j} + (-\alpha + \gamma)\vec{k} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \alpha + 2\gamma = 5, \gamma - \alpha = -2, \beta = 4 \Rightarrow \gamma = 1, \beta = 4, \alpha = 3.$$

Dakle, ako nam je baza $\{\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}\}$ iz nekog razloga pogodnija za rad (primjerice, jer nam je potrebna kao kristalografska baza za neki kristal monoklinskog sustava), onda ćemo vektore iz $V^3(0)$ shvaćati kao matrice iz $M_{3,1}$ koje su im koordinate obzirom na tu bazu. Dakle, za vektor $\vec{v}$ ćemo pisati $\begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ 1 \end{pmatrix}$, a ne $\begin{pmatrix} 5 \\ 4 \\ -2 \end{pmatrix}$.

[7] Dokaz je lagan i slijedi iz aditivnosti i homogenosti linearnih operatora: $\hat{A}\mathbf{0} = \hat{A}(v - v) = \hat{A}v - \hat{A}v = \mathbf{0}$.

[8] Analogna pravila vrijede za kompleksni slučaj, samo tada dobivamo kompleksne matrice.

Za matrice $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \in M_{3,1}$ (i slično za ostale matrice-stupce) u daljnjem ćemo koristiti zgodniji zapis $[x\,y\,z]^t$.

Ako smo odabrali baze B_V domene i B_W kodomene (dakle, ako znamo na koji način smo V poistovjetili s $M_{n,1}$, a W s $M_{m,1}$), onda je matrica A u jednakosti $\hat{A}v = A \cdot v$ jedinstveno određena — ako je v opisan koordinatama obzirom na bazu B_V i tako shvaćen kao matrica-stupac, rezultat množenja $A \cdot v$ biti će koordinatni zapis (u bazi B_W) vektora kojeg operator $\hat{A}$ „napravi" iz v. Kraće: ako je v zadan koordinatama obzirom na bazu u V, onda $A \cdot v$ predstavlja $\hat{A}(v)$ u koordinatama obzirom na bazu u W.

Napomena 5. *Operatori na beskonačnodimenzionalnim prostorima ne mogu se prikazati matricama. Primjerice, ne postoji matrica operatora deriviranja. Stoga u nastavku ovog poglavlja o matricama linearnih operatora podrazumijevamo da se bavimo samo konačnodimenzionalnim prostorima.*

Napomena 6. *Ako znamo da operator $\hat{A}$ preslikava vektore baze domene u neke vektore kodomene, čije koordinate u bazi kodomene znamo, onda su elementi matrice od $\hat{A}$ obzirom na te odabrane baze točno po stupcima poredane koordinate slika vektora baze domene.*

Primjerice, ako matrica

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 7 \\ -5 & 2 & 4 \end{pmatrix}$$

predstavlja neki linearan operator s $\mathbb{R}^3$ u $\mathbb{R}^3$ gdje smo i za domenu i za kodomenu odabrali istu bazu $\{a, b, c\}$, onda je $a = (1,0,0)^t$, $b = (0,1,0)^t$ i $c = (0,0,1)^t$ i

$$\hat{A}a = A \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ -5 \end{pmatrix} = 2a - 5c,$$

$$\hat{A}b = A \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} = a + 2c,$$

$$\hat{A}c = A \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 7 \\ 4 \end{pmatrix} = 7b + 4c.$$

Zanimljivo je da ipak postoji veza između svih mogućih matrica jednog te istog operatora: sve su one slične, tj. jedna iz druge se mogu dobiti primjenom elementarnih transformacija. Preciznije[9], ako su A i B dvije matrice istog operatora, obzirom na različite baze, onda postoji invertibilna matrica X takva da je $B = X^{-1}AX$.

---

[9] Slično, ali notacijski kompliciranije vrijedi i za operatore između prostora koji su različite dimenzije, no ovdje dajemo samo varijantu za operatore između dva prostora iste (konačne) dimenzije.

Primjer 93. *Jedinični operator $\hat{I} : V \to V$ obzirom na bilo koju bazu uvijek kao matricu ima jediničnu matricu (to je jedina matrica koja množenjem s bilo kakvom matricom-stupcem odgovarajuće veličine ne mijenja brojeve u njoj). Naravno, ako je dimenzija od V jednaka n, onda je matrica koja predstavlja $\hat{I}$ matrica I_n.*

Nuloperator $\hat{0} : V \to W$ obzirom na bilo koji odabir baza ima nulmatricu (tipa $m \times n$ ako je V dimenzije n i W dimenzije n).

Primjer 94. *Linearni funkcionali kao kodomenu imaju skup skalara, tj. jednodimenzionalan prostor. Stoga su matrice linearnih funkcionala matrice-retci. Primjerice, matrica traga kvadratnih matrica reda 3 (linearnog funkcionala $\mathrm{tr} : M_3 \to \mathbb{R}$) je*

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

s tim da, pri korištenju te matrice za izračunavanje traga, matricu $A \in M_3$ moramo shvatiti kao matricu-stupac iz $M_{9,1}$ dobivenu nabrajanjem njenih elemenata po retcima (koristimo izomorfnost deveterodimenzionalnih prostora M_3 i $M_{9,1}$):

$$\mathrm{tr}\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 7 \\ -5 & 2 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 7 \\ -5 \\ 2 \\ 4 \end{pmatrix} = (6).$$

Primjer 95. *Kako neovisno o odabiru baze inverzija mijenja predznak svih koordinata vektora, slijedi da inverzija $\hat{\imath} : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ obzirom na sve moguće[10] odabire baza ima matricu $-I_3$.*

Primjer 96. *Zrcaljenje obzirom na (x, y)-ravninu s obzirom na standardnu bazu ima matricu*

$$S_{x,y} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Prema tome, želimo li izračunati koordinate točki $(2, -5, -9)$ obzirom na (x, y)-ravninu zrcalnosimetrične točke samo trebamo izračunati

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ -5 \\ -9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -5 \\ 9 \end{pmatrix}.$$

Primijetimo da je to bilo očekivano: samo se promijenio predznak z-koordinate.

Razmislite: kako bi izgledale matrice zrcaljenjâ obzirom na (x, z) i (y, z)-ravninu (uz odabir standardne baze)?

[10]Podrazumijevat ćemo da ukoliko je domena jednaka kodomeni biramo istu bazu za domenu i kodomenu. Matematički to nije nužno, ali u primjenama su izuzetno rijetke situacije kad odabir nije takav.

Primjer 97. *Rotacija oko z-osi za kut α u pozitivnom smjeru (obzirom na standardnu bazu) ima matricu*

$$R_{z,\alpha} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Želimo li znati gdje se nakon rotacije za kut α nalazi točka s početnim koordinatama (x, y, z), samo treba pomnožiti matricu $R_{z,\alpha}$ s matricom $[x\, y\, z]^t$.

Razmislite: kako bi izgledale matrice rotacija za dani kut α oko x i y osi (uz odabir standardne baze)? Izračunajte za $60°$ oko x-osi zarotirani položaj točke $(1, 2, 3)$.

Kako vidimo, korist od znanja matrice operatora je da ako znamo koordinate vektora na kojeg operator djeluje običnim množenjem matrica možemo izračunati rezultat tog djelovanja — jedini uvjet je da su baze u kojima zapisujemo vektore usklađene s odabirom matrice. Štaviše, kompoziciji operatora odgovara produkt matrica, a inverznom operatoru odgovara inverzna matrica.

Primjer 98. *Želimo li izračunati poziciju točke (s radij-vektorom r) nakon što ju prvo zarotiramo za $45°$ oko z-osi i zatim zrcalimo obzirom na (y, z)-ravninu, dovoljno je izračunati produkt $S_{y,z} \cdot R_{z,45°} \cdot r$.*

Svaka rotacija (oko bilo koje osi kroz ishodište i obzirom na bilo koju bazu) uvijek je predstavljena ortogonalnom matricom s determinantom 1, a rotoinverzija je predstavljena ortogonalnom matricom s determinantom -1. Stoga, želimo li provjeriti predstavlja li kvadratna matrica $A \in M_3$ neku rotaciju oko neke osi, treba provjeriti je li joj determinanta 1 i je li $AA^t = I_3$.

Primjer 99. *Matrica* $A = \begin{pmatrix} 0{,}36 & 0{,}48 & -0{,}8 \\ -0{,}8 & 0{,}6 & 0 \\ 0{,}48 & 0{,}64 & 0{,}6 \end{pmatrix}$ *je matrica neke rotacije (konkretno, za približno $74°$ oko pravca kroz ishodište s vektorom smjera $[-1, 2, 2]$, no to nije bitno).*

Stoga je njena inverzna, a ujedno i transponirana matrica, matrica rotacije za isti kut oko iste osi, ali u suprotnom smjeru.

Neke veličine iste su za sve matrice jednog operatora. One se zovu invarijante sličnosti ili invarijante operatora. Dvije najvažnije takve invarijante su determinanta i trag: sve matrice istog operatora imaju jednake determinante i jednake tragove.

Teorem 6 (Kristalografska restrikcija)**.** *Rotacije koje točkama rešetke pridružuju isključivo točke rešetke mogu biti samo rotacije redova[11] 1, 2, 3, 4 ili 6 (tj. za kuteve $360°, 180°, 120°, 90°$ ili $60°$).*

Dokaz: Po definiciji rešetke, sve njene točke obzirom na odabranu bazu imaju cjelobrojne koordinate. Rotacija oko nekog pravca p mora biti predstavljena ortogonalnom

[11] Red rotacije za kut α koji se može zapisati kao $\frac{360°}{n}$ s cijelim brojem n je n. Primjerice, rotacija reda 5 je isto što i rotacija za $\frac{360°}{5} = 72°$.

matricom $A \in M_3$. Ako je ta matrica odabrana obzirom na bazu rešetke, budući rotacija preslikava točke rešetke samo u točke rešetke, slijedi da su elementi matrice A cijeli brojevi, dakle je i trag matrice A cijeli broj. S druge strane, odaberemo li neku drugu bazu tako da z-os leži na pravcu p, matrica naše rotacije imat će oblik $R_{z,\alpha}$ iz primjera 97. Ta matrica ima trag $1 + 2\cos\alpha$. Kako trag ne ovisi o odabiru baze, slijedi da je $1 + 2\cos\alpha$ cijeli broj. Kako je $\cos\alpha$ broj između -1 i 1, jedine mogućnosti da $1 + 2\cos\alpha$ bude cijeli broj su $\cos\alpha = 0, 1, -1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$, tj. $\alpha = 90°, 360°, 180°, 60°, 120°$.

☼ **Ponovimo bitno...** Među funkcijama koje preslikavaju vektore u vektore posebno su bitni linearni operatori; to su funkcije kojima su domena i kodomena vektorski prostori i koje su aditivne i homogene. Aditivnost linearnog operatora znači da je svejedno zbrojimo li prvo dva vektora (u domeni) pa na njih djelujemo tim operatorom ili prvo svakog od njih preslikamo u kodomenu pa njihove slike zbrojimo. Homogenost linearnog operatora znači da je svejedno pomnnožimo li prvo vektor skalarom pa ga onda preslikamo operatorom ili prvo preslikamo vektor pa mu sliku pomnožimo tim skalarom. Ako su domena i kodomena konačnodimenzionalni prostori s odabranim bazama, linearan operator možemo prikazati matricom (matrica linearnog operatora ovisi o odabranim bazama, ali za dani odabir baza je jedinstveno određena). Ako je dimenzija domene jednaka dimenziji kodomene, matrica linearnog operatora je kvadratna. Ako je operator $\hat{A}$ prikazan matricom A onda lako računamo sliku bilo kojeg vektora: ako je vektor x iz domene zapisan koordinatno (kao matrica-stupac) obzirom na bazu koju smo pri formiranju matrice A odabrali za domenu, onda je produkt $A \cdot x$ vektor koji je rezultat djelovanja operatora $\hat{A}$ na vektor x; pritom je $A \cdot x$ matrica-stupac čiji elementi su koordinate vektora $\hat{A}(x)$ obzirom na bazu koju smo pri formiranju matrice A odabrali za kodomenu. Za dani linearni operator svi njegovi matrični prikazi imaju istu determinantu i isti trag. ☺

3.2.2 Svojstveni vektori i svojstvene vrijednosti

Od posebnog značaja u primjenama su vektori koje promatrani linearni operator preslikava u njima proporcionalne (kolinearne). Primjerice, kod rotacija oko osi koja prolazi kroz ishodište samo vektori kojima je smjer jednak smjeru osi nakon rotiranja ne promijene smjer. Takvi vektori zovu se svojstveni vektori, a koeficijent proporcionalnosti između svojstvenog vektora i njegove slike nakon djelovanja operatora zove se svojstvena vrijednost. Preciznije:

Definicija 25 (Svojstveni vektori i svojstvene vrijednosti). *Neka je $\hat{A} : V \to V$ linearan operator*[12]*. Vektor $v \neq \mathbf{0}$ zove se svojstveni vektor operatora $\hat{A}$ ako za neki skalar λ vrijedi*

$$\hat{A}v = \lambda v.$$

U tom slučaju skalar λ zovemo svojstvenom vrijednosti operatora $\hat{A}$ (koja pripada svojstvenom vektoru v).

Primjer 100. *Schrödingerova jednadžba $\hat{H}\psi = E\psi$ je problem svojstvenih vrijednosti Hamiltonijana: svojstveni vektori su valne funkcije, a pripadne svojstvene vrijednosti su energije sustava.*

[12] Ovdje je jako važno da su domena i kodomena isti vektorski prostor.

Zadatak 9. *Koji vektori su svojstveni jediničnom operatoru $\hat{I} : V \to V$? Koje su mu svojstvene vrijednosti?*

Zašto smo u definiciji zabranili nulvektor kao svojstveni vektor? Zato jer bi onda svaki skalar bio svojstvena vrijednost:

$$\hat{A}\mathbf{0} = \mathbf{0} = \lambda\mathbf{0}$$

za sve skalare λ. Primijetimo: ako je vektor v svojstveni vektor operatora $\hat{A}$, onda su svi njemu proporcionalni vektori $w = \mu v$ također svojstveni za $\hat{A}$:

$$\hat{A}(\mu v) = \mu\hat{A}v = \mu\lambda v = \lambda(\mu v).$$

Dakle, ako operator ima svojstveni vektor koji pripada nekoj svojstvenoj vrijednosti λ, ima ih beskonačno mnogo. Štaviše, skup svih svojstvenih vektora linearnog operatora (koji pripadaju istoj svojstvenoj vrijednosti λ) kad mu dodamo nulvektor čini vektorski prostor (tzv. svojstveni potprostor od V), tj. za danu svojstvenu vrijednost zbroj dva svojstvena vektora je svojstveni vektor i skalar puta svojstveni vektor je svojstveni vektor.

Skup svih svojstvenih vrijednosti linearnog operatora zove se spektar. Kako odrediti svojstvene vektore i vrijednosti? Za linearne operatore na konačnodimenzionalnim prostorima to nije teško: neka je $\hat{A}V \to V$ prikazan matricom A obzirom na neku bazu od V. Definicijska jednakost sad poprima matrični oblik $Av = \lambda v$ tj. $(A - \lambda I_n)v = 0_{n,1}$ (ako je n dimenzija prostora). Pitamo se dakle: ima li homogeni sustav opisan matricom $[A - \lambda I_n|0]$ rješenja (osim trivijalnog koje odgovara nulvektoru)? Ako da, ta rješenja su koordinate svojstvenih vektora. Očigledno odgovor ovisi o λ. Zbog veze između invertibilnosti i determinante slijedi:

Teorem 7. *Ako je $A \in M_n$, svojstvene vrijednosti bilo kojeg operatora opisanog matricom A su nultočke polinoma $k_A(\lambda)$ kojeg dobijemo izračunavanjem $\det(A - \lambda I_n)$. Taj polinom zove se karakteristični polinom matrice A (odnosno operatora prikazanog matricom A).*

Napomena 7. *Svojstveni vektori, spektar i karakteristični polinom su invarijante operatora , tj. u gornjem postupku uvijek dobivamo iste rezultate, neovisno o tome obzirom na koju bazu smo odabrali matricu operatora.*

Kako je svakom matricom $A \in M_n$ definiran linearan operator $\hat{A} : M_{n,1} \to M_{n,1}$, $\hat{A}(x) = A \cdot x$, često se govori o svojstvenim vrijednostima kvadratne matrice (misleći na svosjtvene vrijednosti upravo definiranog operatora). Zgodno je zapamtiti: matrica je invertibilna (regularna) točno ako njen spektar ne sadrži nulu.

Primjer 101. *Odredimo spektar linearnog operatora $R_{z,\alpha}$:*

$$R_{z,\alpha} = \begin{vmatrix} \cos\alpha - \lambda & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \lambda \end{vmatrix} = (1-\lambda)(1 - 2\lambda\cos\alpha + \lambda^2) = 0$$

daje

$$\lambda_1 = 1,$$

dok su druge dvije svojstvene vrijednosti kompleksne oblika $\cos\alpha \pm i \sin\alpha$ *(za* $\alpha = 0$ *one obje iznose 1, no za taj kut rotacija je jednostavno jedinični operator).*

Primjer 102. *Odredimo spektar i svojstvene vektore operatora* $\hat{A} : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$ *koji je obzirom na neku bazu od* $\mathbb{R}^2$ *prikazan matricom*

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -4 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Karakteristični polinom je

$$\begin{vmatrix} 2-\lambda & -4 \\ -1 & -1-\lambda \end{vmatrix} = (\lambda+2)(\lambda-3).$$

Njegove nultočke su $\lambda_1 = -2$ *i* $\lambda_2 = 3$*, dakle spektar našeg operatora je skup* $\{-2, 3\}$*.*

Svojstvene vektore koji odgovaraju svojstvenoj vrijednosti 3 *dobijemo rješavanjem homogenog sustava kojem je matrica koeficijenata* $A - 3I$*:*

$$\left(\begin{array}{cc|c} -1 & -4 & 0 \\ -1 & -4 & 0 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{array}\right)$$

pa je $x_1 + 4x_2 = 0$*, tj.* $x_1 = -4t$*,* $x_2 = t \in \mathbb{R}$*. Rješenja (svojstveni vektori matrice, tj. operatora* A *koji pripadaju svojstvenoj vrijednosti* 3*) su vektori iz* $\mathbb{R}^2$ *oblika*

$$(x_1, x_2) = (-4t, t) = t(-4, 1).$$

Zadatak 10. *Odredite svojstvene vektore operatora iz prethodnog primjera koji pripadaju svojstvenoj vrijednosti* -2*.*

Primjer 103. *Svojstvene vrijednosti dijagonalne matrice su brojevi na njenoj dijagonali.*

Primjerice, ako je

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

onda je

$$\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} -\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 4-\lambda & 0 \\ 0 & 0 & -1-\lambda \end{vmatrix} = -\lambda(4-\lambda)(-1-\lambda)$$

pa je spektar te matrice $\{0, 4, -1\}$*.*

Jedna od važnosti svojstvenih vektora i svojstvenih vrijednosti vezana je za pitanje dijagonalizacije: linearan operator može se dijagonalizirati ako mu je obzirom na neki odabir baze domene i kodomene matrica dijagonalna. Pritom će se ta baza uvijek sastojati od svojstvenih vektora koji odgovaraju svojstvenim vrijednostima na dijagonali (u odgovarajućem redoslijedu).

Primjer 104. *U modelu krutog rotora koji se koristi za objašnjenje rotacijskih spektara molekula, molekula se gleda kao skup jezgri na fiksnim međusobnim položajima određenim prosječnom geometrijom molekule u određenom elektronskom i vibracijskom stanju. Kinetička energija T rotacije krutog tijela može se izračunati formulom*

$$T = \frac{1}{2}\omega^t I\omega,$$

gdje je ω vektor kutne brzine, a I tzv. tenzor inercije (kvadratna matrica reda 3 na čijoj dijagonali su momenti inercije obzirom na odabrane koordinatne osi, a izvan dijagonale su tzv. produkti inercije).

Matrica I se uvijek može dijagonalizirati u nekoj bazi $\{a, b, c\}$ — ti dijagonalni elementi (svojstvene vrijednosti $I_a \leq I_b \leq I_c$) zovu se glavni momenti inercije, a vektori baze $\{a, b, c\}$ (odnosno odgovarajuće koordinatne osi) zovu se glavne osi inercije. Vrijedi:

$$T = \frac{1}{2}(I_a\omega_a^2 + I_b\omega_b^2 + I_c\omega_c^2),$$

gdje su $\omega_a, \omega_b, \omega_c$ koordinate od ω obzirom na bazu $\{a, b, c\}$.

Temeljem te dijagonalizacije rotori se klasificiraju na linearne ($I_a = 0$, $I_b = I_c$), sferne ($I_a = I_b = I_c$), simetrične (dva jednaka glavna momenta inercije, treći različit) i asimetrične (sva tri glavna momenta inercije različita).

Definicija 26 (Simetrični i hermitski linearni operatori)**.** *Ako je V realan (kompleksan) unitaran prostor, linearan operator $\hat{A} : V \to V$ je simetričan (hermitski) ako vrijedi: $\langle \hat{A}v, w\rangle = \langle v, \hat{A}w\rangle$ za sve vektore $v, w \in V$.*

Simetrični i hermitski operatori imaju isključivo realne svojstvene vrijednosti. Za slučaj konačnodimenzionalnih V vrijedi: Sve matrice simetričnog operatora su simetrične, odnosno sve matrice hermitskog operatora su hermitske. Simetrične i hermitske matrice se mogu dijagonalizirati (tj. postoji neka baza od V takva da je u njoj matrica promatranog simetričnog odnosno hermitskog operatora dijagonalna, sa svojstvenim vrijednostima na dijagonali).

Primjer 105. *Jedan od postulata kvantne mehanike je ne samo da se dinamičke veličine Ω klasične fizike u kvantnoj mehanici opisuju linearnim operatorima $\hat{\Omega}$ (na prostorima valnih funkcija), nego i da se mjerenjem veličine Ω za rezultat mogu dobiti samo svojstvene vrijednosti operatora $\hat{\Omega}$. Primjerice, kad bismo mjerili energiju sustava, dobivali bismo svojstvene vrijednosti Hamiltonijana.*

Da bismo se osigurali da mjerne veličine budu realne, postavlja se zahtjev: dinamičke veličine Ω klasične fizike se u kvantnoj mehanici opisuju hermitskim linearnim operatorima $\hat{\Omega}$.

U slučaju da istoj svojstvenoj vrijednosti odgovaraju dva ili više linearno nezavisnih svojstvenih vektora (tj. svojstveni potprostor ima dimenziju veću od 1), tu svojstvenu vrijednost zovemo degeneriranom.

Primjer 106. *Promotrimo linearan operator na* $\mathbb{R}^3$ *koji obzirom na neku bazu ima matricu*

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Njegov karakteristični polinom je

$$k_A(\lambda) = -\lambda(2-\lambda)^2$$

pa su mu svojstvene vrijednosti $\lambda = 0$ *i* $\lambda = 2$. *Odredimo svojstvene vektore za svojstvenu vrijednost 2, tj. riješimo homogeni sustav s matricom* $A - 2I$*:*

$$\left(\begin{array}{ccc|c} -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{ccc|c} -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & -1 & 0 \end{array}\right).$$

Rješenje sustava su sve trojke (x_1, x_2, x_3) *sa svojstvom* $x_1 - x_3 = 0$, $x_2 = t \in \mathbb{R}$ *i* $x_3 = s \in \mathbb{R}$, *tj. trojke oblika* $(s,t,s) = s(1,0,1)+t(0,1,0)$. *Za* $t = 0$ *dobivamo svojstveni vektor* $(1,0,1)$, *a za* $s = 0$ *svojstveni vektor* $(0,1,0)$. *Vektori* $(1,0,1)$ *i* $(0,1,0)$ *nisu proporcionalni, dakle su linearno nezavisni, pa svojstvenoj vrijednosti* 2 *odgovaraju dva linearno nezavisna svojstvena vektora. Prema tome,* $\lambda = 2$ *je degenerirana svojstvena vrijednost operatora prikazanog matricom* A.

Primjer 107. *U kvantnoj mehanici u slučaju degeneriranih svojstvenih vrijednosti govorimo o degeneriranom stanju sustava. Primjerice, za energetske nivoe (svojstvene vrijednosti Hamiltonijana) opisane glavnim kvantnim brojem* $n > 1$ *i azimutnim kvantnim brojem* $0 < l < n$ *dolazi do degeneracija, tj. postoji više neproporcionalnih valnih funkcija (različitih orbitala, primjerice za* $l = 1$ *i* $n = 2$ *imamo 3 tzv.* 2p*-orbitale, koje opisuju elektrone s istom energijom).*

☼ **Ponovimo bitno...** Svojstveni vektor linearnog operatora (kojem su domena i kodomena isti vektorski prostor) je svaki vektor (koji nije nulvektor) kojeg taj operator preslika u njemu proporcionalan; koeficijent proporcionalnosti se tada zove svojstvenom vrijednosti operatora. Svi skalari koji su svojstvene vrijednosti za neki svojstveni vektor čine skup koji zovemo spektar. Ako operator djeluje na konačnodimenzionalnom prostoru, spektar mu je skup svih nultočki karakterističnog polinoma. Karakteristični polinom operatora $\hat{A}$ je determinanta matrice koju dobijemo oduzimanjem matrice λI (λ je varijabla karakterističnog polinoma) od bilo koje matrice operatora $\hat{A}$. Ako postoji baza za koju je matrica operatora dijagonalna (ta se baza sastoji od svojstvenih vektora) kažemo da se operator može dijagonalizirati; u tom slučaju su elementi pripadne dijagonalne matrice točno sve svojstvene vrijednosti tog operatora. ☺

3.3 Zadaci za vježbu

1. Zadani su vektori $v = (1,-2,3)$, $w = (0,1,-3)$ i $u = (-2,4,-5)$. Izračunajte $v - 2w + 2u$.

   Rješenje. $(-3,4,-1)$.

2. (a) Prikažite vektor $v = (4, -11)$ kao linearnu kombinaciju vektora $w = (2, -1)$ i $u = (1, 4)$.

   (b) Prikažite vektor $v = (1, 2, 3)$ kao linearnu kombinaciju vektora $w = (\frac{1}{2}, 1, 1)$ i $u = (0, 0, -1)$.

   Rješenje.
   (a) $v = 3w - 2u$. (b) $v = 2w - u$.

3. Ispitajte linearnu (ne)zavisnost vektora:

   (a) $v = (1, -2, 1)$, $w = (-1, 0, -2)$, $u = (2, -2, 3)$.

   (b) $v = (6, 2, 3, 4)$, $w = (0, 5, -3, 1)$, $u = (0, 0, 7, -2)$.

   Rješenje.
   (a) linearno zavisni. (b) linearno nezavisni.

4. Za koju vrijednost parametra $\alpha \in \mathbb{R}$ su vektori $v = (0, 2, 0)$, $w = (-1, 0, \alpha)$ i $u = (2, 0, 1)$ linearno nezavisni?
   Rješenje. $\alpha \neq -\frac{1}{2}$.

5. Pokažite da su vektori $v = (1, i)$, $w = (1 + 3i, -3 + i) \in \mathbb{C}^2$ linearno nezavisni, promatramo li $\mathbb{C}^2$ kao vektorski prostor nad $\mathbb{R}$, a linearno zavisni, promatramo li $\mathbb{C}^2$ kao vektorski prostor nad $\mathbb{C}$.

6. Odredite rang matrice A, ako je

   (a) $A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 \\ 1 & -2 & -1 \\ 0 & 3 & 3 \end{pmatrix}$.

   (b) $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 3 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 3 \end{pmatrix}$.

   Rješenje.
   (a) $r(A) = 2$. (b) $r(A) = 3$.

7. Odredite parametre $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ tako da je $r(A) = 2$, ako je

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 6 & -3 & -4 \\ 1 & 3 & 1 & -2 \\ \alpha & \beta & 6 & -2 \end{pmatrix}.$$

   Rješenje. $\alpha = 1,\ \beta = 3$.

8. Ispitajte čine li sljedeći skupovi vektora bazu za $\mathbb{R}^3$:

   (a) $B_1 = \{(1, 1, 0), (0, 1, 1), (1, 0, 1)\}$.

(b) $B_2 = \{(2,0,2),(0,2,0),(2,2,2)\}$.

(c) $B_3 = \{(2,-1,0),(3,2,4),(5,-1,3),(-3,-1,0)\}$.

Rješenje. Jedino je skup B_1 baza za $\mathbb{R}^3$.

9. Neka je V skup svih rješenja homogenog sustava linearnih jednadžbi

$$2x_1 + 3x_2 - 7x_3 = 0 \ ,$$

$$-x_1 + 4x_2 + x_3 = 0 \ .$$

Pokažite da je V vektorski prostor i odredite mu dimenziju.
Rješenje. $\dim V = 1$.

10. Ispitajte linearnu (ne)zavisnost sljedećih skupova u $M_2(\mathbb{R})$:

(a) $\left\{ \begin{pmatrix} 0 & 3 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 4 & 3 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -2 & 0 \\ 3 & 0 \end{pmatrix} \right\}$.

(b) $\left\{ \begin{pmatrix} 0 & 3 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 4 & 3 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -2 & 0 \\ 3 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 8 & -1 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \right\}$.

Rješenje.
(a) linearno nezavisan skup. (b) linearno zavisan skup.

11. Dokažite da su skupovi

$$V = \{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 \ : \ -x_1 + 4x_2 - +x_3 = 0\}$$

i

$$W = \{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 \ : \ x_1 + x_2 + x_3 = 0, \ 4x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 0\}$$

potprostori od $\mathbb{R}^3$.

12. Ispitajte jesu li sljedeća preslikavanja linearni operatori:

(a) $f : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}, \ \ f(x,y,z) = y$.

(b) $g : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}, \ \ g(x,y) = xz$.

(c) $h : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3, \ \ h(x,y,z) = (3x - y + 2z, x + z, -y + 4z)$.

(d) $k : M_2(\mathbb{R}) \to M_2(\mathbb{R}), \ \ k(X) = XA, \ \ A = \begin{pmatrix} -1 & 3 \\ -1 & 3 \end{pmatrix}$.

(e) $t : M_2(\mathbb{R}) \to M_2(\mathbb{R}), \ \ t(X) = X^t$.

Rješenje. Jedino preslikavanje g nije linearni operator.

13. Dokažite da je zrcaljenje obzirom na $y - z$-ravninu linearni operator.

14. Neka su $B_V = \{e_1, e_2, e_3\}$ i $B_W = \{f_1, f_2\}$ kanonske baze za $\mathbb{R}^3$ i $\mathbb{R}^2$. Odredite prikaz linearnog operatora $h : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^2$ zadanog sa $h(e_1) = 3f_1 + f_2$, $h(e_2) = f_1 + f_2$, $h(e_3) = 2f_1 + 3f_2$ u paru tih baza.
    Rješenje. $\begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 3 \end{pmatrix}$.

15. Neka je linearni operator $h : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ dan matricom
$$A = \begin{pmatrix} 4 & 4 & 4 \\ 8 & 8 & 8 \\ -3 & -2 & -5 \end{pmatrix}.$$
    u kanonskoj bazi. Odredite mu prikaz u bazi $B = \{(2,3,4), (1,1,1), (-2,3,2)\}$.
    Rješenje. $\begin{pmatrix} -\frac{242}{3} & -\frac{79}{3} & -\frac{79}{3} \\ 244 & 80 & 80 \\ \frac{70}{3} & \frac{23}{3} & \frac{23}{3} \end{pmatrix}$.

16. Odredite karakteristični polinom, spektar i svojstvene vektore linearnog operatora koji je u nekoj bazi od $\mathbb{R}^3$ prikazan matricom
$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ -1 & 3 & -1 \\ -1 & 2 & 0 \end{pmatrix}.$$
    Rješenje. $k_A(\lambda) = -\lambda^3 + 4\lambda^2 - 5\lambda + 2$, $\sigma(A) = \{1, 2\}$, $(x_1, x_2, x_3) = t(1,1,1)$ za $\lambda_1 = 1$, $(x_1, x_2, x_3) = u(0,1,1)$ za $\lambda_2 = 2$ $(t, u \in \mathbb{R})$.

17. Odredite karakteristični polinom, spektar i svojstvene vektore linearnog operatora koji je u nekoj bazi od $\mathbb{R}^4$ prikazan matricom
$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$
    Rješenje. $k_A(\lambda) = \lambda^4 - 4\lambda^3$, $\sigma(A) = \{0, 4\}$, $(x_1, x_2, x_3, x_4) = t_1(-1,1,0,0) + t_2(-1,0,1,0) + t_3(-1,0,0,1)$ za $\lambda_1 = 0$, $(x_1, x_2, x_3, x_4) = u(1,1,1,1)$ za $\lambda_2 = 4$ $(t_i, u \in \mathbb{R})$.

Poglavlje 4

Funkcije više varijabli

4.1 Skalarne i vektorske funkcije više varijabli

Primjer 108. *Jednadžbu stanja idealnog plina $p = \frac{nRT}{V}$ dosad smo promatrali kao ovisnost tlaka ili o temperaturi ili o množini ili o volumenu, pretpostavivši da su ostale veličine u jednadžbi konstantne. Ipak, u nekim situacijama razumno je dozvoliti istovremeno variranje dviju ili čak svih triju od veličina n, T i V, čime tlak više ne ovisi samo o jednoj od njih (nije više funkcija jedne varijable), nego o dvjema ili o trima (tada kažemo da je tlak funkcija dvije odnosno tri varijable). Pritom je rezultat izračunavanja tlaka iz zadanih n, T i V (do na jedinicu) broj, dakle je ta funkcija realna (podsjetimo se: realne funkcije su one kojima je kodomena podskup skupa realnih brojeva).*

Funkcije poput gornje ovisnosti tlaka o volumenu, množini i temperaturi poznate su kao skalarne funkcije više varijabli. Preciznije:

Definicija 27 (Skalarne funkcije više varijabli)**.** *Skalarna (ili realna) funkcija od n varijabli je funkcija koja uređenim n-torkama[1] brojeva pridružuje realne brojeve, tj. funkcija čija domena je podskup od $\mathbb{R}^n$, a kodomena je podskup od $\mathbb{R}$.*

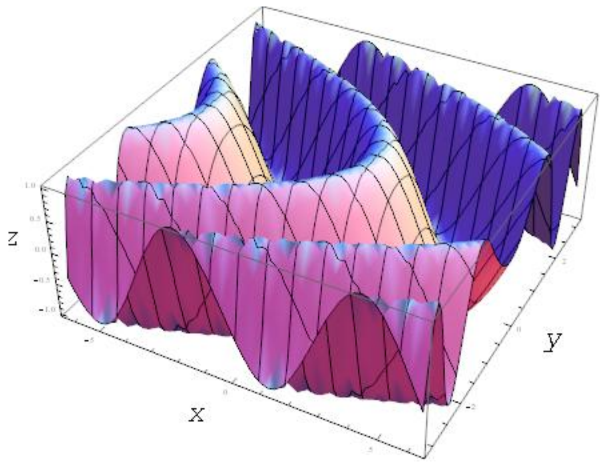
Smisao uvjeta da su u domeni funkcije n varijabli *uređene* n-torke brojeva je u tome da temeljem redoslijeda možemo razlikovati značenje varijabli.

Primjer 109. *Formulom $f(x, y) = 2x - 5y^2 \ln x$ zadana je skalarna funkcija od dvije varijable. Njena prirodna domena je skup svih uređenih parova brojeva (x, y) za koje je $x > 0$, a kao kodomenu možemo uzeti cijeli skup $\mathbb{R}$.*

Njena vrijednost za $x = e$ i $y = 1$ iznosi $f(e, 1) = 2e - 5 \ln e = 2e - 5$, a za $x = 1$ i $y = e$ iznosi $f(1, e) = 2 - 5e^2 \ln 1 = 2$.

Podsjetimo se: graf funkcije f je skup svih uređenih parova oblika $(X, f(X))$ gdje je X element domene. Dakle, ako funkcija ima n varijabli, graf funkcije se sastoji od uređenih $(n + 1)$-torki brojeva oblika $(x_1, x_2, \ldots, x_n, f(x_1, x_2, \ldots, x_n))$, pri čemu su $(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ u domeni od f. Za realne funkcije jedne varijable graf se sastojao

[1] Podsjetimo se: uređena n-torka brojeva je skup od n brojeva kojima smo definirali redoslijed.



Slika 4.1: Graf skalarne funkcije dvije varijable zadane formulom $f(x, y) = \sin(x + y^2)$.

od uređenih parova brojeva pa se mogao prikazivati u koordinatnoj ravnini. Graf skalarne funkcije od dvije varijable se sastoji od uređenih trojki brojeva u kojima su prva dva člana koordinate elementa domene, a treći je tom elementu pridružena vrijednost funkcije. Stoga se graf skalarne funkcije od dvije varijable može prikazati samo u prostornom koordinatnom sustavu u kojemu u (x, y)-ravnini nanosimo elemente domene, a na aplikatu pridružene rezultate.

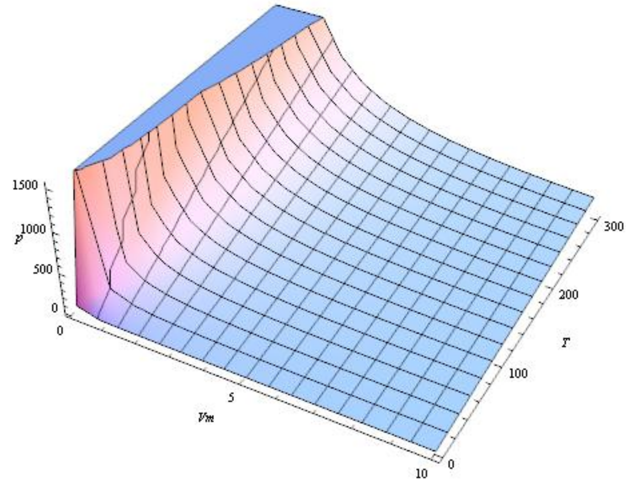
Primjer 110. *Graf funkcije iz primjera 109 među ostalim sadrži dvije točke:* $(e, 1, 2e-5)$ *i* $(1, e, 2)$.

Graf skalarne funkcije dvije varijable uvijek će biti ploha u prostoru tj. dvodimenzionalni objekt u trodimenzionalnom prostoru. Tako je na slici 4.1 prikazan graf funkcije $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ zadane s $f(x, y) = \sin(x + y^2)$.

Za skalarne funkcije tri varijable ispada da bismo trebali četverodimenzionalni koordinatni sustav da bismo vizualizirali njihov graf, što je očigledno nemoguće. Stoga se za funkcije s više od dvije varijable, a često i za njih, u slučaju potrebe za vizualizacijom pribjegava svođenju takve funkcije na više funkcija jedne varijable: crtaju se grafovi funkcija jedne varijable koje se dobivaju fiksiranjem različitih vrijednosti za sve ostale varijable.

Primjer 111. *Umjesto da se ovisnost tlaka idealnog plina o množini, temperaturi i volumenu prikaže kao graf u četverodimenzionalnom prostoru, može ju se svesti na graf u trodimenzionalnom prostoru ako izmijenimo funkciju tri varijable* $p(n, T, V) = \frac{nRT}{V}$ *u funkciju od dvije varijable* $p(V_m, T) = \frac{RT}{V_m}$. *Grafički prikaz te ovisnosti prikazan je slikom 4.2.*

Iako vizualno lijep, takav prikaz je od slabe koristi za očitavanje vrijednosti tlaka o molarnom volumenu i temperaturi. Stoga je uobičajeni prikaz preko dva niza grafova. Jedan takav niz su izoterme — grafovi funkcija $p(V_m) = \frac{RT}{V_m}$ *za različite fiksne vrijednosti temperature odnosno paralelni presjeci plohe sa slike 4.2 okomiti na* T*-os, gledani duž nje. Recimo, za temperaturu od* 100 K *gledamo funkciju* $p(V_m) = \frac{831{,}45\,\mathrm{J\,mol^{-1}}}{V_m}$.



Slika 4.2: Graf ovisnosti tlaka idealnog plina o njegovom molarnom volumenu i temperaturi.

Drugi niz su grafovi funkcija $p(T) = \frac{RT}{V_m}$ *za različite fiksne vrijednosti molarnog volumna odnosno paralelni presjeci plohe sa slike 4.2 okomiti na* V_m*-os, gledani duž nje. Primjerice, za molarni volumen od* 0,2 L mol^{-1} *gledamo funkciju* $p(T) = 0{,}00415725$ Pa K^{-1} T.

Dobiveni nizovi grafova prikazani su na slici 4.3.

Nešto rjeđe, ali ipak često se u primjenama pojavljuju i funkcije više varijabli čiji rezultati nisu brojevi, nego kao i originali imaju više koordinata. Broj koordinata originala (elemenata domene) može i ne mora biti jednak broju koordinata njima pridruženih rezultata (elemenata kodomene).

Definicija 28 (Vektorske funkcije više varijabli)**.** *Vektorska funkcija od* n *varijabli je funkcija koja uređenim* n*-torkama brojeva pridružuje uređene* m*-torke brojeva, tj. funkcija čija domena je podskup od* $\mathbb{R}^n$*, a kodomena je podskup od* $\mathbb{R}^m$*. Pritom su* m *i* n *prirodni brojevi veći od* 1.

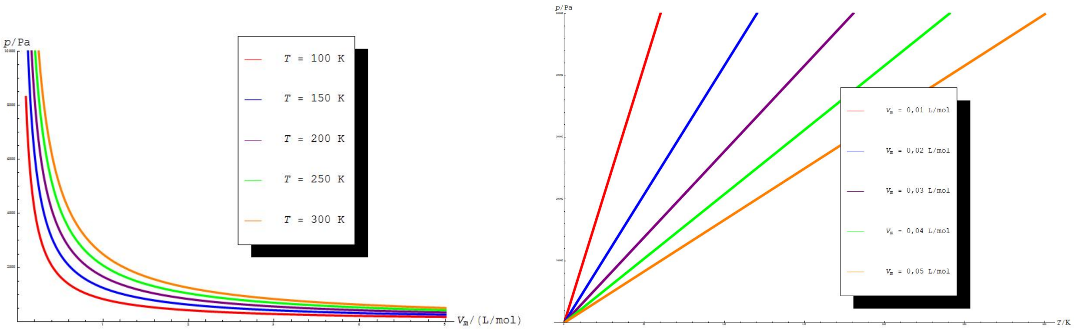
Primjer 112. *Funkcija zadana s*

$$f(x, y, z) = (x + y, xyz)$$

je primjer vektorske funkcije s domenom $\mathbb{R}^3$ *i kodomenom* $\mathbb{R}^2$*. Ona primjerice trojci* $(1, 2, 3)$ *pridružuje par* $(1 + 2, 1 \cdot 2 \cdot 3) = (3, 6)$.

Iako u teoriji smisleni, grafovi vektorskih funkcija se obično ne crtaju. Koncept vektorske funkcije je naizgled bitno kompliciraniji, ali mnoga njihova svojstva se mogu analizirati tako da ih shvatimo kao više skalarnih funkcija. Naime, svaku funkciju f od n varijabli čija kodomena je $\mathbb{R}^m$ možemo shvatiti kao m skalarnih funkcija koje elementima domene pridružuju po jednu koordinatu pridruženog im elementa kodomene. Formalnije, za takvu vektorsku funkciju f možemo pisati:

$$f(X) = (f_1(X), f_2(X), \ldots, f_m(X))$$



(a) (b)

Slika 4.3: Izoterme idealnog plina (lijevo) i grafovi ovisnosti tlaka o temperaturi pri fiksiranim molarnim volumenima (desno).

ili kraće $f = (f_1, f_2, \ldots, f_m)$, gdje smo s X kratko označili elemente $X = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ domene od f. Funkcije $f_1, f_2, \ldots, f_m$ zovemo koordinatnim funkcijama od f i ponekad kažemo da je vektorska funkcija uređena m-torka svojih koordinatnih funkcija. Koordinatne funkcije imaju istu domenu kao i f, ali im je kodomena $\mathbb{R}$.

Primjer 113. *Funkcija f iz primjera 112 ima kodomenu $\mathbb{R}^2$, dakle može se prikazati kao uređeni par svoje dvije koordinatne funkcije. One su*

$$f_1(x, y, z) = x + y$$

i

$$f_2(x, y, z) = xyz.$$

☼ **Ponovimo bitno...** Skalarne i vektorske funkcije više varijabli kao domenu imaju neki podskup od $\mathbb{R}^n$ (za neki n). Kodomena svake skalarne funkcije je neki podskup od $\mathbb{R}$, dok je kodomena vektorske funkcije podskup od nekog $\mathbb{R}^m$ ($m > 1$); drugačije rečeno, rezultat djelovanja skalarne funkcije je broj, a rezultat djelovanja vektorske funkcije je uređena m-torka brojeva. Svaku vektorsku funkciju $f : D \to K \subseteq \mathbb{R}^m$ možemo shvatiti kao uređenu m-torku skalarnih funkcija tako da svaka od tih skalarnih funkcija elementu X iz D pridružuje po jednu koordinatu od $f(X)$. Graf skalarne funkcije dviju varijabli može se prikazati kao ploha u trodimenzionalnom prostoru. ☺

4.2 Parcijalne derivacije

Podsjetimo se definicije derivacije funkcije f jedne varijable u točki c:

$$f'(c) = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(c) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta f}{\Delta x} = \lim_{x \to c} \frac{f(x) - f(c)}{x - c}.$$

Smisao derivacije bio je aproksimacija relativne promjene vrijednosti funkcije pri maloj promjeni varijable. U slučaju funkcija više varijabli koriste se parcijalne derivacije. One se definiraju za skalarne (realne) funkcije. Parcijalne derivacije aproksimiraju relativnu promjenu vrijednosti funkcije pri maloj promjeni *samo jedne* od varijabli, dok se druge drže konstantnim. Preciznije:

Definicija 29 (Parcijalne derivacije prvog reda)**.** *Neka je* $f : \Omega \to \mathbb{R}$, $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ *skalarna funkcija s* n *varijabli* $x_1, x_2, \ldots, x_n$. *Parcijalna derivacija (prvog reda) od* f *po varijabli* x_i *u točki* $X \in \Omega$ *je, ako postoji, limes*

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(X) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(X + e_i \Delta x) - f(X)}{\Delta x}.$$

U definiciji je s e_i označen i-ti vektor kanonske baze (e_i ima sve koordinate 0, osim i-te koja je 1), a zbrajanje točaka je zbrajanje u vektorskom prostoru $\mathbb{R}^n$. Primjerice, za parcijalnu derivaciju po varijabli x_2 varijabla $X + e_2\Delta x$ ima koordinate koje se iz koordinata od X dobiju tako da na drugo mjesto dodamo Δx, a ostale koordinate ne mijenjamo. Općenito, $X + e_i\Delta x$ je točka koja ima sve koordinate iste kao X osim i-te koja je povećana za Δx. Kako stoga limes iz definicije opisuje graničnu vrijednost relativne promjene funkcije kad se samo jedna (i-ta) varijabla mijenja, a ostale ne, možemo reći: parcijalna derivacija funkcije po nekoj varijabli dobije se tako da funkciju deriviramo kao da joj je to jedina varijabla.

Radi veće jasnoće, raspišimo prethodnu definiciju za neke posebne slučajeve. U slučaju funkcije f s dvije varijable x i y njene parcijalne derivacije po x i y u točki $X = (x_0, y_0)$ su definirane limesima

$$\frac{\partial f}{\partial x}(X) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0 + \Delta x, y_0) - f(x_0, y_0)}{\Delta x},$$

$$\frac{\partial f}{\partial y}(X) = \lim_{\Delta y \to 0} \frac{f(x_0, y_0 + \Delta y) - f(x_0, y_0)}{\Delta y}.$$

U slučaju funkcije f s tri varijable x, y i z njene parcijalne derivacije u točki $X = (x_0, y_0, z_0)$ su definirane limesima

$$\frac{\partial f}{\partial x}(X) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0 + \Delta x, y_0, z_0) - f(x_0, y_0, z_0)}{\Delta x},$$

$$\frac{\partial f}{\partial y}(X) = \lim_{\Delta y \to 0} \frac{f(x_0, y_0 + \Delta y, z_0) - f(x_0, y_0, z_0)}{\Delta y},$$

$$\frac{\partial f}{\partial z}(X) = \lim_{\Delta z \to 0} \frac{f(x_0, y_0, z_0 + \Delta z) - f(x_0, y_0, z_0)}{\Delta z}.$$

Iz prethodnog je vidljivo da funkcija ima onoliko parcijalnih derivacija prvog reda koliko ima varijabli (naravno, ako odgovarajući limesi postoje, no to ćemo u daljnjem podrazumijevati jer za većinu funkcija koje se koriste u primjenama ti limesi postoje). Uobičajeno je umjesto $\frac{\partial f}{\partial x_i}(X)$ pisati jednostavno $\frac{\partial f}{\partial x_i}$, no treba biti svjestan da ta oznaka označava funkciju koja točkama $X \in \Omega$ pridružuje brojeve (usporedite: $f'(c)$ je broj, a f' je funkcija).

Primjer 114. *Uzmimo funkciju definiranu formulom*

$$f(x,y,z) = \frac{x+yz^2}{e^x}.$$

Njene parcijalne derivacije prvog reda su:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(xe^{-x} + yz^2e^{-x}) = e^{-x} - xe^{-x} - yz^2e^{-x} = \frac{1-x-yz^2}{e^x},$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}(xe^{-x} + z^2e^{-x}y) = 0 + z^2e^{-x} = \frac{z^2}{e^x},$$

$$\frac{\partial f}{\partial z} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}(xe^{-x} + ye^{-x}z^2) = 0 + 2ye^{-x}z = \frac{2yz}{e^x}.$$

Zanimljiva je geometrijska interpretacija parcijalnih derivacija funkcije f dviju varijabli x i y. Znamo da je graf takve funkcije ploha u trodimenzionalnom prostoru, pri čemu su u (x,y)-ravnini točke njene domene, a u smjeru z-osi su nanesene vrijednosti funkcije. Vidjeli smo i da se umjesto plohe taj graf često prikazaje dvjema serijama grafova funkcija jedne varijable. Prvu seriju grafova dobijemo tako da crtamo grafove funkcija f_y, $f_y(x) = f(x,y)$, za razne fiksirane vrijednosti y, a a drugu tako da crtamo grafove funkcija f_x, $f_x(y) = f(x,y)$, za razne fiksirane vrijednosti x. Iz geometrijske interpretacije derivacije funkcije jedne varijable slijedi da se parcijalne derivacije funkcije f mogu interpretirati kao koeficijenti smjerova tangenti na prvu odnosno drugu seriju grafova, pri čemu se gledaju tangente u onim točkama koje odgovaraju odabranoj točki X u kojoj tražimo parcijalne derivacije.

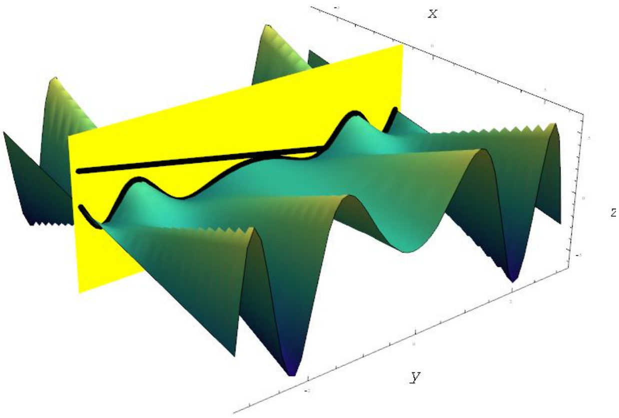
Primjer 115. *Gledamo li ovisnost tlaka idealnog plina kao funkciju dvije varijable (molarnog volumena i temperature), slikama 4.3 (a) i (b) prikazane su odgovarajuće serije grafova koje se dobiju fiksiranjem temperature odnosno fiksiranjem molarnog volumena. Zanima li nas parcijalna derivacija* $\frac{\partial p}{\partial V_m}$ *funkcije tlaka po molarnom volumenu pri recimo* 250 K *i* 0,5 L mol^{-1}*, onda trebamo pogledati izoterme (jer je kod njih varijabla po kojoj deriviramo i dalje varijabla), i to tangentu na izotermu koja odgovara temperaturi* 250 K *u točki koja ima apscisu* 0,5 L mol^{-1}*. Sa slike je vidljivo da je za sve parove* (V_m, T)*, a ne samo za* 250 K *i* 0,5 L mol^{-1}*, iznos* $\frac{\partial p}{\partial V_m}(V_m, T)$ *negativan (zašto?).*

Prethodni pristup ukazuje da kad promatramo graf funkcije dvije varijable u cjelini (tj. kao plohu), za danu točku domene X ucrtanu u (x,y)-ravnini parcijalne derivacije po varijablama x i y predstavljaju koeficijente smjerova tangenti na krivulje koje se na plohi dobiju tako da tu plohu presiječemo po jednom ravninom okomitom na x-os i y-os (naravno, kroz točku plohe $(X, f(X))$) — vidi sliku 4.4.

Dok deriviramo samo po jednoj varijabli, standardno se mogu primjenjivati uobičajena pravila za deriviranje zbroja, razlike, produkta i kvocijenta funkcija. U slučaju kompozicije imamo općenitiji oblik lančanog pravila. Iz diferencijalnog računa funkcija jedne varijable znamo da vrijedi $(f \circ g)(x) = f'(y)g'(x)$ gdje je $y = g(x)$ odnosno

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}y}\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}.$$

Prije nego navedemo poopćenje ovog pravila, promotrimo sljedeći primjer:



Slika 4.4: Geometrijska interpretacija parcijalne derivacije.

Primjer 116. *Uzmimo funkciju $f(x,y) = x^2+2x-xy+y^2$. Njene parcijalne derivacije po x i y su $\frac{\partial f}{\partial x} = 2x+2-y$ i $\frac{\partial f}{\partial y} = -x+2y$.*

Recimo da znamo da varijable x i y ovise o trećoj varijabli t po pravilima $x(t) = t^2+1$ i $y(t) = t^3-t^2$ (recimo, znamo da ćemo u funkciju f uvrštavati samo one parove (x,y) koji predstavljaju točke na krivulji zadanoj parametarski jednadžbama $x(t), y(t)$). Kako odrediti derivaciju od f po t?

Možemo supstituirati $x(t)$ i $y(t)$ u jednadžbu funkcije f i dobiti njenu ovisnost o t. Time dobijemo $f(t) = (t^2+1)^2 + 2(t^2+1) - (t^2+1)(t^3-t^2) + (t^3-t^2)^2$, što je jednostavno derivirati po t.

No, možda u funkciju f želimo uvrštavati točke s različitih krivulja. Postoji li način da izbjegnemo stalno uvrštavanje njihovih parametarskih jednadžbi u f (ako nas zanima samo $f'(t)$)? Postoji.

Kad želimo iskazati $f(t)$ temeljem poznavanja formule $f(x,y)$ i $x = x(t)$, $y = y(t)$, mi zapravo računamo kompoziciju[2] $f(x(t), y(t))$. Derivacija f po t onda se može dobiti formulom

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} + \frac{\partial f}{\partial y} \cdot \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}.$$

Općenitije vrijedi: ako je $f : \Omega \to \mathbb{R}$ skalarna funkcija n varijabli $x_1, \ldots, x_n$ i ako su $x_i = x_i(t)$ realne funkcije jedne varijable t, onda je

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i} \cdot \frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t}.$$

Primjer 117. *Za funkciju iz prethodnog primjera imamo*

$$\frac{\partial f}{\partial t} = (2x+2-y) \cdot 2t + (-x+2y) \cdot (3t^2-2t) =$$

(koristeći formule za $x(t)$ i $y(t)$)

$$= 2t(2t^2+2+2-t^3+t^2) + (2t^3-2t^2-t^2-1)(3t^2-2t) = 6t^5-15t^4+12t^3+8t-3t^2+2t.$$

[2] Radi se o kompoziciji skalarne funkcije f s vektorskom funkcijom (x,y).

Za slučaj kompozicije s funkcijom više varijabli formula se dalje komplicira, te ćemo ju navesti samo za slučaj kompozicije skalarne funkcije dviju varijabli $f = f(x, y)$ s vektorskom funkcijom dviju varijabli $(x, y) = (x(u, v), y(u, v))$:

$$\frac{\partial f}{\partial u} = \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial u} + \frac{\partial f}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial u},$$

$$\frac{\partial f}{\partial v} = \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial v} + \frac{\partial f}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial v}.$$

Primjer 118. *Promotrimo $f(x, y) = \sqrt{x^2 + y^2}$ uz $x(u, v) = \sin u$ i $y(u, v) = u + 1$. Tada je*

$$\frac{\partial f}{\partial u} = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} \cdot \cos u + \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} \cdot 1 = \frac{x \cos u + y}{\sqrt{x^2 + y^2}} = \frac{\sin u \cos u + u + 1}{\sqrt{\sin^2 u + u^2 + 2u + 1}}.$$

Uz gornje varijante lančanog pravila, često su korisne i sljedeće dvije formule za parcijalne derivacije prvog reda. Prva je poopćenje formule za deriviranje inverzne funkcije:

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{1}{\frac{\partial x}{\partial y}}.$$

Druga je poznata kao Eulerovo cikličko pravilo:

$$\frac{\partial x}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial z} \cdot \frac{\partial z}{\partial x} = -1.$$

Primjer 119. *Promotrimo formulu $yz = e^x$ koja iskazuje vezu između tri varijable x, y, z. Imamo $x = \ln(yz)$ pa je $\frac{\partial x}{\partial y} = \frac{1}{y}$. Nadalje, $y = \frac{e^x}{z}$ pa je $\frac{\partial y}{\partial z} = -\frac{e^x}{z^2}$, a iz $z = \frac{e^x}{y}$ dobivamo $\frac{\partial z}{\partial x} = \frac{e^x}{y}$. Stoga imamo*

$$\frac{\partial x}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial z} \cdot \frac{\partial z}{\partial x} = -\frac{1}{y} \cdot \frac{e^x}{z^2} \cdot \frac{e^x}{y} = -\frac{e^{2x}}{y^2 z^2} = -\frac{e^{2x}}{(e^x)^2} = -1.$$

Osim parcijalnih derivacija prvog reda, moguće je promatrati i parcijalne derivacije viših redova. Pritom, budući da je svaka parcijalna derivacija prvog reda skalarne funkcije također skalarna funkcija istih varijabli (njih n), imamo po n parcijalnih derivacija drugog reda koje se računaju iz svake od parcijalnih derivacija prvog reda, dakle ukupno n^2 parcijalnih derivacija drugog reda. Primjerice, ako je polazna funkcija f ovisila o dvije varijable x i y, njene dvije parcijalne derivacije $\frac{\partial f}{\partial x}$ i $\frac{\partial f}{\partial y}$ možemo ponovno derivirati po x i po y čime dobivamo četiri parcijalne derivacije drugog reda. To su $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$ (funkciju f deriviramo po x i zatim njenu parcijalnu derivaciju $\frac{\partial f}{\partial x}$ ponovno po x), $\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}$ (funkciju f deriviramo po x i zatim njenu parcijalnu derivaciju $\frac{\partial f}{\partial x}$ po y), $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$ (funkciju f deriviramo po y i zatim njenu parcijalnu derivaciju $\frac{\partial f}{\partial y}$ po x), $\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}$ (funkciju f deriviramo po y i zatim njenu parcijalnu derivaciju $\frac{\partial f}{\partial y}$ ponovno po y). Općenito definiramo:

Definicija 30 (Parcijalne derivacije drugog reda). *Neka je $f : \Omega \to \mathbb{R}$, $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ skalarna funkcija s n varijabli koja posjeduje*[3] *parcijalnu derivaciju prvog reda $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ po varijabli x_i. Parcijalna derivacija drugog reda od f po varijabli x_i pa po x_j u točki $X \in \Omega$ je, ako postoji, limes*

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}(X) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)(X).$$

Iz definicije je vidljivo i zašto redoslijed deriviranja kod parcijalnih derivacija drugog reda pišemo zdesna ulijevo: oznaka $\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}$ je kratica za $\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)$. Time se ističe da je $\frac{\partial}{\partial y}$ (deriviranje po nekoj varijabli y) linearan operator.

Primjer 120. *Odredimo parcijalne derivacije drugog reda za funkciju iz primjera 114. Kako se radi o funkciji tri varijable, dobit ćemo devet parcijalnih derivacija drugog reda:*

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{-2 + x + yz^2}{e^x}, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} = -\frac{z^2}{e^x}, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial z \partial x} = -\frac{2yz}{e^x},$$
$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = -\frac{z^2}{e^x}, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 0, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial z \partial y} = \frac{2z}{e^x},$$
$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial z} = -\frac{2yz}{e^x}, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial z} = \frac{2z}{e^x}, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} = \frac{2y}{e^x}.$$

U prethodnom primjeru može se primijetiti da vrijedi $\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} = \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$, $\frac{\partial^2 f}{\partial z \partial x} = \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial z}$ i $\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial z} = \frac{\partial^2 f}{\partial z \partial y}$. To nije slučajno — u većini „normalnih" slučajeva kod određivanja parcijalnih derivacija drugog reda nije potrebno paziti na redoslijed jer vrijedi

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}.$$

Preciznije, vrijedi

Teorem 8 (Schwarz). *Ako u točki $X \in \Omega$ postoje i neprekidne*[4] *su parcijalne derivacije $\frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}$ i $\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$, onda su one jednake (u točki X).*

Posljedično u većini slučajeva za funkciju od n varijabli nije potrebno računati n^2 već samo $\frac{n(n+1)}{2}$ parcijalnu derivaciju drugog reda (usporedite primjer 120 u kojem vidimo da je od $n^2 = 9$ parcijalnih derivacija drugog reda samo njih $\frac{n(n+1)}{2} = 6$ različito).

Radi preglednog zapisa, a s obzirom na kasnije korištenje za određivanje lokalnih ekstrema skalarnih funkcija, ovdje uvodimo zapis parcijalnih derivacija drugog reda u matricu poznatu kao Hesseova matrica.

---

[3] Kad kažemo da funkcija posjeduje parcijalnu derivaciju mislimo: na odgovarajućem dijelu domene, u pravilu na cijeloj domeni, postoji limes iz definicije.

[4] Pojam neprekidnosti nismo definirali za funkcije više varijabli. Kao i u slučaju jedne varijable vrijedi: funkcija je neprekidna ako male promjene njenih varijabli mogu izazvati samo male promjene vrijednosti funkcije. I ovdje vrijedi: funkcije koje su opisane formulom koja je oblika elementarne funkcije su neprekidne na svojoj domeni, neovisno o broju varijabli koje su uvrštene.

Definicija 31 (Hesseova matrica)**.** *Za skalarnu funkciju f od n varijabli koja posjeduje sve parcijalne derivacije drugog reda (u točki X iz svoje domene) njena Hesseova matrica (u toj točki) je matrica $H = H(f)(X)$ koja na poziciji (i, j) ima iznos $\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}(X)$.*

Zbog Schwarzovog teorema, za funkcije s neprekidnim parcijalnim derivacijama drugog reda (a to su gotovo sve koje se mogu susresti u primjenama) Hesseova matrica je simetrična.

Primjer 121. *Hesseova matrica funkcije iz primjera 115 i 120 u svakoj točki (x, y, z) ima oblik*

$$H = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial z} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial z} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial z \partial x} & \frac{\partial^2 f}{\partial z \partial y} & \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{-2+x+yz^2)}{e^x} & -\frac{z^2}{e^x} & -\frac{2yz}{e^x} \\ -\frac{z^2}{e^x} & 0 & \frac{2z}{e^x} \\ -\frac{2yz}{e^x} & \frac{2z}{e^x} & \frac{2y}{e^x} \end{pmatrix}.$$

☼ **Ponovimo bitno...** Parcijalne derivacije prvog reda skalarne funkcije f više varijabli definiraju se kao derivacije funkcija jedne varijable, koje iz f dobijemo tako da sve varijable osim one po kojoj deriviramo „proglasimo" konstantama. Oznaka za parcijalnu derivaciju prvog reda funkcije f po njenoj varijabli x_i je $\frac{\partial f}{\partial x_i}$. Svaka parcijalna derivacija prvog reda ovisi o istim varijablama o kojima ovisi polazna funkcija f. Ponovnim parcijalnim deriviranjem parcijalne derivacije prvog reda $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ po nekoj varijabli x_j dobivamo parcijalne derivacije drugog reda, koje označavamo s $\frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}$. Za većinu funkcija koje se pojavljuju u praksi vrijedi Schwarzov teorem, koji kaže da nije bitan redoslijed deriviranja tj. da je $\frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$. Posljedično je Hesseova matrica $H = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}\right)$ simetrična. ☺

4.3 Gradijent, plohe i lokalni ekstremi skalarnih funkcija

Gradijent se definira za skalarne funkcije. Gradijent skalarne funkcije f koja posjeduje sve parcijalne derivacije prvog reda je

$$\operatorname{grad} f = \nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n}\right)^t.$$

Pritom se znak ∇ zove nabla.

Gradijent skalarne funkcije n varijabli je prema tome vektorska funkcija (tih istih varijabli) kojoj su koordinatne funkcije pojedine parcijalne derivacije polazne funkcije. Ako je $f : \Omega \to \mathbb{R}$ diferencijabilna[5] i $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$, onda je $\nabla f : \Omega \to \mathbb{R}^n$.

Za u primjenama najčešći slučaj funkcije tri varijable uobičajena notacija za gradijent je

$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}\right)^t.$$

[5] Pravu definiciju diferencijabilnosti funkcije dat ćemo kasnije. Ovdje je dovoljno znati: ako funkcija ima sve parcijalne derivacije prvog reda i neprekidne su, onda je diferencijabilna.

Zbog linearnosti (parcijalnog) deriviranja za sve diferencijabilne funkcije f i g s istom domenom i sve skalare α vrijedi

$$\nabla(f+g) = \nabla f + \nabla g,$$
$$\nabla(\alpha f) = \alpha \nabla f.$$

Primjer 122. *Gradijent funkcije zadane formulom $f(x,y) = xy^3$ je vektorska funkcija zadana s*

$$\nabla f(x,y) = \begin{pmatrix} y^3 \\ 3xy^2 \end{pmatrix}.$$

Definicija 32 (Ploha u $\mathbb{R}^3$). *Ploha zadana funkcijom $F : \Omega \subseteq \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ je svaki skup $S = \{(x,y,z) : F(x,y,z) = c\}$ gdje je c konstanta, ukoliko vrijedi da je $\nabla F(x,y,z) \neq (0,0,0)^t$ za svaku točku $(x,y,z) \in S$.*

Dakle, plohe su „nivo-linije” skalarnih funkcija triju varijabli — podskupovi njihove domene (koja je podskup prostora $\mathbb{R}^3$) sa svojstvom da dotična funkcija svim točkama plohe pridružuje istu vrijednost. Pritom se zahtijeva da gradijent te funkcije ni u jednoj točki plohe nije nulvektor.

Primjer 123. *Znamo da je s $2x - y + 5z = 3$ zadana ravnina u prostoru. Uzmimo $F(x,y,z) = 2x - y + 5z$ i $c = 3$. Tada s „$2x - y + 5z = 3$ je jednadžba ravnine” mislimo reći da toj ravnini pripadaju točno one točke (x,y,z) koje zadovoljavaju jednadžbu $2x - y + 5z = 3$, tj. naša ravnina je skup $S = \{(x,y,z) : F(x,y,z) = 3\}$. Gradijent od F je konstantna vektorska funkcija $\nabla F = (2,-1,5)^t$, dakle nigdje (specijalno, niti u točkama iz S) ne postaje nulvektorom. Stoga je ova ravnina ploha. Analogno se vidi da je svaka ravnina ploha u prostoru.*

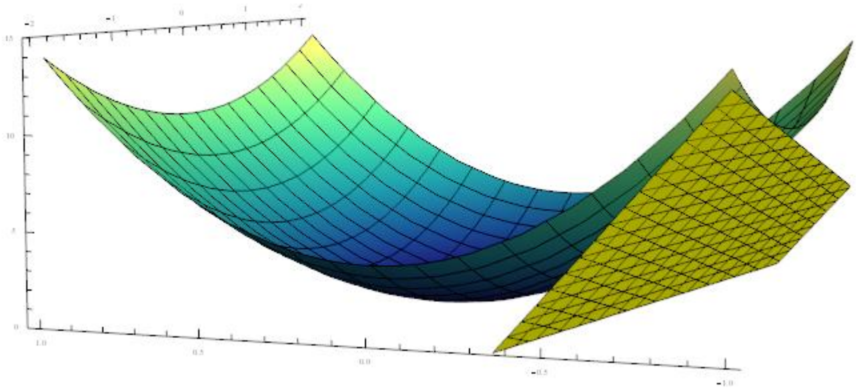
Primjer 124. *Promotrimo jednadžbu $x^2+y^2+z^2 = 1$. Uzmimo $F(x,y,z) = x^2+y^2+z^2$. Tada je $\nabla F = (2x, 2y, 2z)^t = 2(x,y,z)^t$. Jedini slučaj kad bi taj vektor bio nulvektor je ako ga računamo u ishodištu $(0,0,0)$: $\nabla F(0,0,0) = (0,0,0)^t$. Kako ishodište očigledno ne zadovoljava jednadžbu $x^2 + y^2 + z^2 = 1$, vidimo da jednadžba predstavlja plohu u prostoru $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ (jediničnu sferu).*

Gradijent (njegov smjer i orijentacija) u točki plohe pokazuje smjer pomakom u kojem dolazi do najvećeg porasta vrijednosti funkcije F. Kako je ploha skup točaka kojima F pridružuje vrijednost c, znači da se u smjeru kojeg pokazuje gradijent nalazi ploha $F(x,y,z) = c'$ s $c' > c$.

Rekli smo da su grafovi skalarnih funkcija dviju varijabli plohe u prostoru — provjerimo je li to u skladu s gornjom definicijom. Neka je f funkcija dviju varijabli x i y. Njen graf je po definiciji skup $\Gamma_f = \{(x,y,z) : z = f(x,y)\}$. Definirajmo funkciju F jednadžbom $F(x,y,z) = f(x,y) - z$. Njen gradijent je

$$\nabla F = \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, -1\right)^t.$$

Kako je treća koordinata tog gradijenta uvijek -1, slijedi da on ni za koji odabir x i y ne može biti nulvektor. Stoga za svaku funkciju f dviju varijabli (koja posjeduje prve parcijalne derivacije po tim varijablama) vrijedi da je njen graf ploha u prostoru.



Slika 4.5: Tangencijalna ravnina na graf skalarne funkcije dvije varijable.

Definicija 33 (Tangencijalna ravnina na plohu). *Tangencijalna ravnina na plohu $F(x, y, z) = 0$ u nekoj njenoj točki $X = (x_0, y_0, z_0)$ je ravnina kroz tu točku kojoj je $\nabla F(X)$ vektor normale, tj. ravnina zadana jednadžbom*

$$\frac{\partial F}{\partial x}(X) \cdot (x - x_0) + \frac{\partial F}{\partial y}(X) \cdot (y - y_0) + \frac{\partial F}{\partial z}(X) \cdot (z - z_0) = 0.$$

Dakle, ako je s $F(x, y, z) = c$ opisana neka ploha u $\mathbb{R}^3$, gradijent od F u svakoj točki plohe predstavlja vektor okomit na tangencijalnu ravninu u toj točki. Pritom tangencijalnu ravninu zamišljamo kao onu ravninu koja se u toj točki najbolje priljubljuje uz plohu.

Primjer 125. *Odredimo jednadžbu tangencijalne ravnine na jediničnu sferu $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ u točki $(1, 0, 0)$. Odgovarajući gradijent $2(x, y, z)^t$ treba izračunati u toj točki kako bi se dobio vektor normale, dakle vektor normale na tangencijalnu ravninu je $(2, 0, 0)^t$. Stoga je jednadžba tražene tangencijalne ravnine dana s $2(x-1)+0(y-0)+0(z-0) = 0$, tj. $x = 0$.*

Jednadžba tangencijalne ravnine na graf funkcije f u točki domene (x_0, y_0) je prema prethodnom

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0) \cdot (x - x_0) + \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) \cdot (y - y_0) - (z - z_0) = 0,$$

gdje je po definiciji grafa $z_0 = f(x_0, y_0)$.

Primjer 126. *Odredimo jednadžbu tangencijalne ravnine na graf funkcije $f(x, y) = x^2 - y^2$ u točki domene $(1, 2)$. Imamo $\frac{\partial f}{\partial x} = 2x$ i $\frac{\partial f}{\partial y} = 2y$. Nadalje, $x_0 = 1$, $y_0 = 2$, $z_0 = f(1, 2) = -3$. Stoga je $\frac{\partial f}{\partial x}(1, 2) = 2$ i $\frac{\partial f}{\partial y}(1, 2) = -4$ i dobivamo traženu jednadžbu tangencijalne ravnine:*

$$2(x - 1) - 4(y - 2) - (z - (-3)) = 2x - 4y - z + 3 = 0.$$

Za skalarne funkcije imaju smisla pojmovi lokalnih i globalnih ekstrema:

Definicija 34 (Lokalni i globalni ekstremi skalarnih funkcija). *Za skalarnu funkciju $f : \Omega \to \mathbb{R}$ točku $X_0 \in \Omega$ zovemo*

- *točkom lokalnog minimuma funkcije f ako za sve $X \in \Omega$ iz neke okoline*[6] *od X_0 vrijedi $f(X) \geq f(X_0)$;*
- *točkom lokalnog maksimuma funkcije f ako za sve $X \in \Omega$ iz neke okoline od X_0 vrijedi $f(X) \leq f(X_0)$;*
- *točkom globalnog minimuma funkcije f ako za sve $X \in \Omega$ vrijedi $f(X) \geq f(X_0)$;*
- *točkom globalnog maksimuma funkcije f ako za sve $X \in \Omega$ vrijedi $f(X) \leq f(X_0)$.*

Kod funkcija dviju varijabli, grafovi nam omogućuju vizualizaciju gore definiranih pojmova: lokalni ekstremi su dna udolina ili vrhovi bregova na plohi koja je graf funkcije, dok su globalni ekstremi najviše odnosno najniže točke na čitavoj plohi. Pritom vrijedi kao i ranije: jedinstvenost lokalnog ekstrema ne mora značiti da je on globalni ekstrem. Metode određivanja globalnih ekstrema funkcija više varijabli su komplicirane i nećemo ih ovdje opisivati. S druge strane, postupak određivanja lokalnih ekstrema za funkcije koje posjeduju sve parcijalne derivacije prvog i drugog reda je relativno jednostavan i analogan postupku za funkcije jedne varijable: prvo se (pomoću derivacija prvog reda) odrede „kandidati” za točke lokalnog ekstrema, a zatim se (pomoću derivacija drugog reda) provjeri radi li se o točki lokalnog ekstrema i ako da, radi li se o minimumu ili maksimumu. Ipak, osim više računanja postoji jedna moguća komplikacija koje nema kod funkcija jedne varijable — eventualno postojanje sedlastih (sedlenih) točaka.

Prvi korak određivanja lokalnih ekstrema skalarnih funkcija je određivanje kritičnih točaka. To su točke u kojima funkcija nije diferencijabilna i stacionarne točke. U gotovo svim primjenama jedine kritične točke su stacionarne pa ćemo se ograničiti na takve situacije.

Definicija 35 (Stacionarna točka). *Za skalarnu funkciju $f : \Omega \to \mathbb{R}$ točku $X_0 \in \Omega$ zovemo njenom stacionarnom točkom ako je $\nabla f(X_0)$ nulvektor.*

Dakle, stacionarna točka je zajednička nultočka svih parcijalnih derivacija prvog reda, odnosno dobiva se rješavanjem sustava

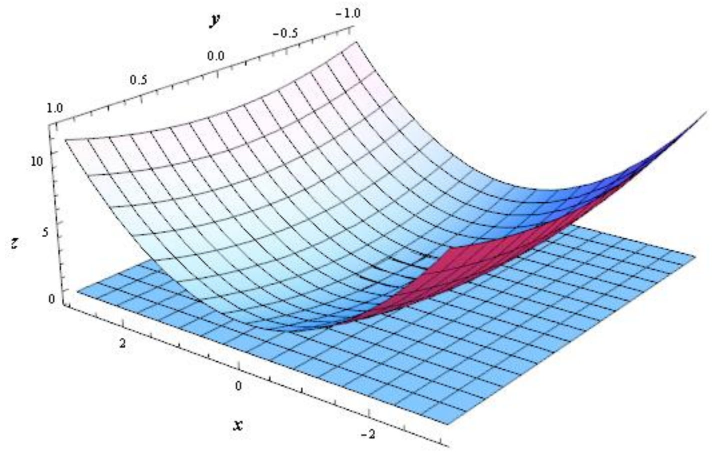
$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial x_2} = 0, \quad \dots \quad , \frac{\partial f}{\partial x_n} = 0.$$

U slučaju funkcija dviju varijabli stacionarnu točku zamišljamo kao element domene takav da je tangencijalna ravnina u odgovarajućoj točki na grafu horizontalna.

Primjer 127. *Promotrimo funkciju zadanu formulom $f(x, y) = x^2 + 2y^2$. Njene stacionarne točke su rješenja sustava*

$$2x = 0,$$

[6] Okolinu točke $X \in \mathbb{R}^n$ čini svaki otvoren skup oko X; otvoreni skupovi su malo kompliciraniji pojam, no možemo ih zamišljati kao skupove koji ne sadrže svoje rubove. Npr. u ravnini $\mathbb{R}^2$ primjer otvorenog skupa je nutrina bilo kojeg kruga, poligona, ...



Slika 4.6: Tangencijalna ravnina u stacionarnoj točki (koja je točka lokalnog minimuma).

$$4y = 0,$$

tj. jedina stacionarna točka ove funkcije (i time jedini kandidat za točku lokalnog ekstrema jer je funkcija f očito svuda diferencijabilna) je $(0,0)$. Graf te funkcije s tangencijalnom ravninom u stacionarnoj točki prikazan je slikom 4.6. Sa slike je vidljivo da se radi o točki lokalnog minimuma. Zapravo, kako je $f(0,0) = 0$, a po definiciji funkcije f ona ne može poprimiti negativne vrijednosti, slijedi da se radi o točki globalnog minimuma.

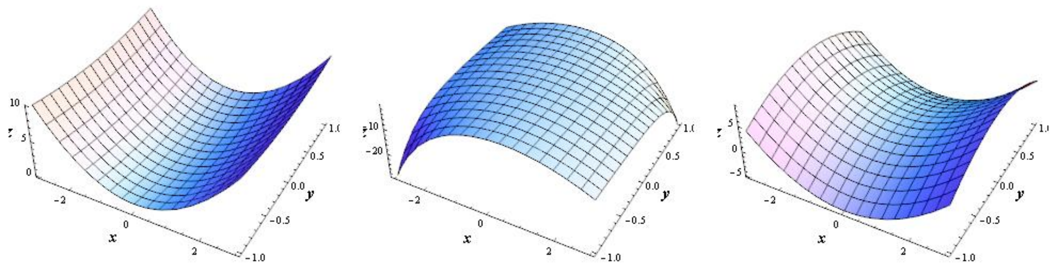
Napomenimo ovdje da iako se prvi korak u određivanju lokalnih ekstrema, tj. određivanje stacionarnih točakal, čini jednostavnim, u mnogim (osobito primijenjenim) slučajevima on to nije jer dobiveni sustav može biti vrlo teško ili čak nemoguće egzaktno riješiti. Za takve slučajeve koriste se razni programi koji omogućuju aproksimativno rješavanje tog sustava.

U drugom koraku određivanja lokalnih ekstrema potrebno je za svaku stacionarnu točku provjeriti radi li se o točki lokalnog ekstrema. Odgovarajući uvjeti opisuju se Hesseovom matricom i njenim minorama.

Definicija 36 (Minore kvadratne matrice)**.** *Za kvadratnu matricu $A \in M_n$ njene (glavne) minore su determinante kvadratnih matrica $A_1, A_2, \ldots, A_{n-1}, A_n = A$, gdje je A_k matrica koja se iz A dobije tako da uzmemo njenih prvih k redaka i k stupaca (tj. $A_i = (a_{ij}) \in M_k$).*

Primjer 128. *Glavne minore matrice*

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -5 & 2 & 7 \\ 4 & 1 & 5 & 2 & -1 \\ 3 & 9 & 10 & 2 & 5 \\ 3 & 1 & -1 & 5 & 4 \\ 2 & 4 & 2 & -4 & -9 \end{pmatrix}$$



Slika 4.7: Grafovi funkcija s lokalnim minimumom, lokalnim maksimumom i sedlastom točkom.

su determinante

$$|1|, \quad \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 4 & 1 \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} 1 & 1 & -5 \\ 4 & 1 & 5 \\ 3 & 9 & 10 \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} 1 & 1 & -5 & 2 \\ 4 & 1 & 5 & 2 \\ 3 & 9 & 10 & 2 \\ 3 & 1 & -1 & 5 \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} 1 & 1 & -5 & 2 & 7 \\ 4 & 1 & 5 & 2 & -1 \\ 3 & 9 & 10 & 2 & 5 \\ 3 & 1 & -1 & 5 & 4 \\ 2 & 4 & 2 & -4 & -9 \end{vmatrix}.$$

Uvjet za lokalne ekstreme skalarnih funkcija više varijabli glasi: Funkcija f u stacionarnoj točki X_0 ima lokalni minimum ako su sve minore Hesseove matrice $H(f)(X_0)$ pozitivne. Funkcija f u stacionarnoj točki X_0 ima lokalni maksimum ako predznaci minora Hesseove matrice $H(f)(X_0)$ alterniraju počevši s negativnim (tj. gornji lijevi kut u $H(f)(X_0)$ je negativan, a zatim je druga minora pozitivna, treća negativna itd.). U slučaju da uvjet na predznake ne vrijedi strogo, tj. neke od minora su nula, ali nema negativnih ili pak alterniraju tako da neparne po redu nisu pozitivne, a parne nisu negativne, potrebno je drugim metodama provjeriti radi li se o točki lokalnog ekstrema (usporedite sa slučajem kod funkcija jedne varijable kad je u stacionarnoj točki i druga derivacija ponovno nula). U preostalim slučajevima govorimo o sedlastoj točki. Preciznije,

Definicija 37 (Sedlasta točka)**.** *Sedlasta točka je stacionarna točka koja nije točka ekstrema.*

U slučaju funkcija jedne varijable primjer sedlaste točke je 0 za funkciju $f(x) = x^3$. Ipak, tu je situacija bitno jednostavnija nego kod funkcija više varijabli jer su jedine moguće sedlaste točke realne funkcije jedne varijable one stacionarne točke za koje funkcija u njihovoj okolini ili raste ili pada. Kod funkcija dviju varijabli osim takvih sedlastih točaka moguće su i one koje ovisno o perspektivi gledanja na graf s (bar) jedne strane izgledaju kao lokalni minimumi i s (bar) jedne strane kao lokalni maksimumi (vidi sliku 4.7).

Primjer 129. *Provjerimo da funkcija iz primjera 127 stvarno ima lokalni minimum* *u stacionarnoj točki* $(0,0)$*. Hesseova matrica te funkcije je*

$$H(f)(x,y) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}$$

pa u stacionarnoj točki imamo

$$H(f)(0,0) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}.$$

Minore su $\det(H_1) = 2 > 0$ *i* $\det(H_2) = \det(H(f)(0,0)) = 8 > 0$ *pa su obje pozitivne tj. u stacionarnoj točki naša funkcija ima lokalni minimum.*

Primjer 130. *Odredimo lokalne ekstreme funkcije zadane formulom*

$$f(x,y) = x^3 + x^2y - y^2 - 4y.$$

Njen gradijent je

$$\nabla f(x,y) = \begin{pmatrix} 3x^2 + 2xy \\ x^2 - 2y - 4 \end{pmatrix},$$

a Hesseova matrica je

$$H(f)(x,y) = \begin{pmatrix} 6x + 2y & 2x \\ 2x & -2 \end{pmatrix}.$$

Stacionarne točke od f *su rješenja sustava*

$$3x^2 + 2xy = 0,$$
$$x^2 - 2y - 4 = 0.$$

Supstitucija y *iz druge jednadžbe u prvu daje* $3x^2 + 2x\left(\frac{x^2}{2} - 2\right) = 0$ *tj.*

$$x^3 + 3x^2 - 4x = x(x^2 + 3x - 4) = 0.$$

Rješenja te jednadžbe su $x_1 = 0$ *i* $x_{2,3} = \frac{-3\pm\sqrt{9+16}}{2}$ *tj.* $x_2 = 1$ *i* $x_3 = -4$*. Odgovarajuće vrijednosti* $y = \frac{x^2}{2} - 2$ *su redom* $y_1 = -2$, $y_2 = -\frac{3}{2}$ *i* $y_3 = 6$ *tj. imamo tri stacionarne točke* $(0,-2)$, $(1,-3/2)$ *i* $(-4,6)$.

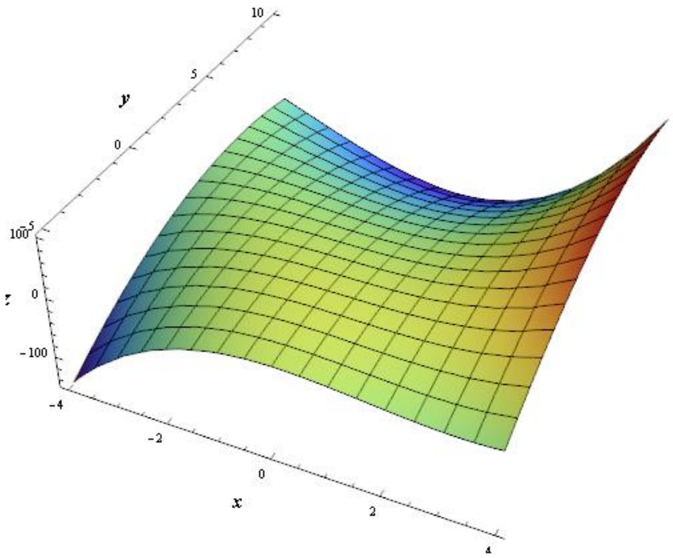
Za svaku od njih računamo minore Hesseove matrice:

$$H(f)(0,-2) = \begin{pmatrix} -4 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix} \Rightarrow \det(H_1) = -4 < 0, \det(H_2) = 8 > 0,$$

$$H(f)(1,-3/2) = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 2 & -2 \end{pmatrix} \Rightarrow \det(H_1) = 3 > 0, \det(H_2) = -10 < 0,$$

$$H(f)(-4,6) = \begin{pmatrix} -12 & -8 \\ -8 & -2 \end{pmatrix} \Rightarrow \det(H_1) = -12 < 0, \det(H_2) = -40 < 0.$$

Zaključujemo da je $(0,-2)$ *točka lokalnog maksimuma, a druge dvije stacionarne točke su sedlaste. Odgovarajući graf prikazan je slikom 4.8.*



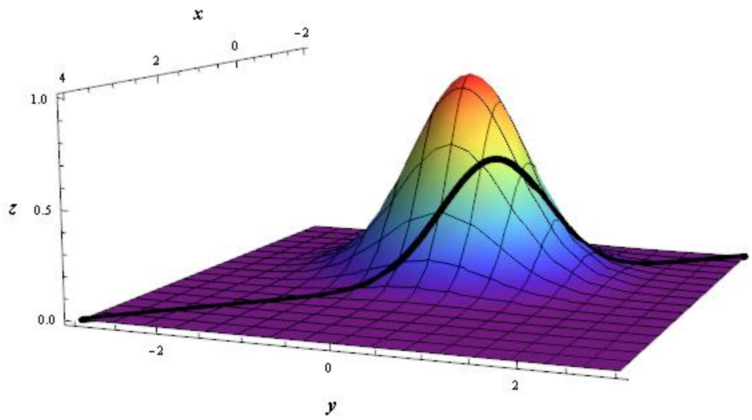
Slika 4.8: Graf funkcije s dvije sedlaste točke i jednom točkom lokalnog maksimuma ($f(x,y) = x^3 + x^2y - y^2 - 4y$).

☼ **Ponovimo bitno...** Gradijent skalarne funkcije F je vektorska funkcija čije koordinatne funkcije su parcijalne derivacije prvog reda funkcije F. Ploha u prostoru je skup svih točaka prostora koje zadovoljavaju jednadžbu oblika $F(x,y,z,) = 0$, pri čemu za svaku točku plohe (tj. točku $X_0 = (x_0, y_0, z_0)$ koja zadovoljava jednadžbu plohe) gradijent od F u toj točki mora biti različit od nulvektora. Gradijent $\nabla F(X_0)$ je vektor normale tangencijalne ravnine na plohu $F(x,y,z) = 0$ u njenoj točki X_0. Ako je $F(x,y,z) = f(x,y) - z$, tj. ako je ploha graf funkcije dviju varijable, smjer i orijentacija gradijenta od F ukazuju na smjer najvećeg porasta funkcije f. Stacionarna točka skalarne funkcije je element domene te funkcije u kojem je gradijent nulvektor. Stacionarna točka može biti točka lokalnog ekstrema ili sedlasta točka. Za stacionarnu točku X_0 funkcije f provjera radi li se o točki lokalnog ekstrema provodi se korištenjem minora Hesseove matrice $Hf(X_0)$. (Glavne) minore kvadratne matrice A su determinante kvadratnih podmatrica od A kojima je gornji lijevi kut zajednički s A. ☺

4.4 Uvjetni ekstremi

Ponekad je potrebno odrediti točku ekstrema neke funkcije uz neki uvjet kojim se ograničava skup točaka domene koje želimo uzeti u obzir.

Primjer 131. *Funkcija $f(x,y) = e^{-x^2-y^2}$ je definirana na cijelom $\mathbb{R}^2$. Postupak određivanja lokalnih ekstrema dao bi da ona postiže lokalni maksimum u $(0,0)$ (na slici 4.9 odgovarajuća točka grafa je crveni vrh i vidi se da se čak radi o globalnom maksimumu). No, što ako nas zanimaju samo one točke (x,y) koje su na pravcu $x + y = 1$? Preciznije, za koje točke tog pravca uvrštavanje u funkciju f daje (lokalno) maksimalne ili minimalne vrijednosti? Takav problem iskazujemo ovako: odredi lokalne ekstreme*



Slika 4.9: Uvjetni ekstremi: ograničavanjem domene na pravac $x + y = 1$ ekstreme tražimo samo na onom dijelu grafa funkcije $f(x, y) = e^{-x^2-y^2}$ koji je iznad tog pravca.

funkcije f uz uvjet $x + y = 1$. Vizualno (vidi sliku 4.9) radi se o promatranju dijela plohe koja predstvlja graf funkcije f koji je iznad pravca $x + y = 1$ (kao podskupa domene, tj. (x, y)-ravnine), dakle tražimo ekstreme samo na crno označenoj krivulji sa slike.

U ovom slučaju, moguće je problem riješiti supstitucijom: budući nas zanimaju samo (x, y) sa svojstvom $x + y = 1$ tj. $y = 1 - x$, možemo to supstituirati u f čime dobivamo funkciju jedne varijable $f_x(x) = e^{-2x^2+2x-1}$. Njen lokalni maksimum postiže se za $x = 1/2$, dakle se uvjetni lokalni maksimum funkcije f uz uvjet $x + y = 1$ postiže u $(x, y) = (x, 1 - x) = (1/2, 1 - 1/2) = (1/2, 1/2)$.

Kao i u prethodnom primjeru, uvjeti su najčešće oblika jedne ili više jednadžbi. U mnogim slučajevima te probleme nije moguće supstitucijom svesti na probleme određivanja bezuvjetnih ekstrema. Općenita metoda za rješavanje takvih problema poznata je kao Lagrangeova metoda. Problem koji želimo riješiti je određivanje ekstrema funkcije zadane formulom $f(x, y, \ldots)$ uz jedan ili više uvjeta[7] oblika $g(x, y, \ldots) = 0$. Za svaki od uvjeta uvodi se po jedna nova varijabla, tzv. Lagrangeov multiplikator λ. Zatim se formira nova funkcija koja ovisi o polaznim varijablama $x, y, \ldots$ i Lagrangeovim multiplikatorima $\lambda, \ldots$ koja je oblika

$$F(x, y, \ldots, \lambda, \ldots) = f(x, y, \ldots) - \lambda g(x, y, \ldots) - \ldots$$

tj. polaznoj funkciji f oduzeti su članovi oblika „Lagrangeov multiplikator puta lijeva strana odgovarajućeg uvjeta". Ta nova funkcija zove se Lagrangeova funkcija.

Primjer 132. *Pretpostavimo da želimo odrediti dimenzije kutije maksimalnog volumena koja ima oplošje $64\,\mathrm{cm}^2$. Ako su x, y i z tražene duljine bridova te kutije (u centimetrima), zadatak se svodi na određivanje maksimuma funkcije*

$$f(x, y, z) = xyz$$

[7]Uvjeti moraju biti takvi da je ∇g različit od nulvektora za sve točke koje zadovoljavaju uvjet.

uz uvjet

$$2(xy + xz + yz) = 64.$$

Uvjet zapisujemo u obliku $g(x, y, z) = 0$, *tj.* $xy + yz + xz - 32 = 0$. *Odgovarajuća Lagrangeova funkcija je*

$$F(x, y, z, \lambda) = xyz - \lambda(xy + yz + xz - 32).$$

Ako polazna funkcija postiže tražene uvjetne ekstreme, njihove koordinate su uvijek dane stacionarnim točkama Lagrangeove funkcije. Stoga se u sljedećem koraku odrede stacionarne točke Lagrangeove funkcije. Primijetimo da izjednačavanje njene derivacije po nekom Lagrangeovom multiplikatoru λ daju točno pripadni uvjet:

$$0 = \frac{\partial F}{\partial \lambda} = -g(x, y, \ldots),$$

što je ekvivalentno s $g(x, y, \ldots) = 0$.

Primjer 133. *Nastavimo prethodni primjer. Stacionarna točka od* F *je svako rješenje sustava*

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F}{\partial x} &= yz + \lambda(y + z) = 0,\\
\frac{\partial F}{\partial y} &= xz + \lambda(x + z) = 0,\\
\frac{\partial F}{\partial z} &= xy + \lambda(x + y) = 0,\\
\frac{\partial F}{\partial \lambda} &= -xy - yz - xz + 32 = 0.
\end{aligned}$$

Pomnožimo prvu od jednadžbi s x, *drugu s* y *i treću sa* z. *Time dobivamo*

$$xyz = -\lambda x(y + z) = -\lambda y(x + z) = -\lambda z(x + y).$$

To može vrijediti za $\lambda = 0$, *no to rješenje nas ne zanima (povlačilo bi da je bar jedan od bridova duljine nula, a time bismo dobili kontradikciju sa četvrtom jednadžbom). Stoga se dobiva da mora biti* $xz = yz = xy$. *Kako* $x, y, z \neq 0$, *slijedi* $x = y = z$. *To uvrstimo u četvrtu jednadžbu i dobivamo* $3x^2 = 32$ *odnosno* $x = y = z = +\sqrt{\frac{32}{3}}$. *Napomenimo ovdje da vrijednosti Lagrangeovih multiplikatora nije potrebno izračunavati osim ako nam to olakšava dobivanje vrijednosti* $x, y, \ldots$.

I u praksi i u teoriji najkompliciraniji dio Lagrangeove metode je utvrđivanje koje od dobivenih stacionarnih točaka su točke minimuma ili maksimuma. U pravilu je to moguće utvrditi uvrštavanjem dobivenih koordinata stacionarnih točaka u polaznu funkciju i razmatranjem svojstava te funkcije. Vrijedi: ako postoji traženi uvjetni ekstrem, točka tog ekstrema je među onima koje se dobiju odbacivanjem koordinata Lagrangeovih multiplikatora iz stacionarnih točaka Lagrangeove funkcije.

Primjer 134. *Završimo prethodni primjer. Dobivena stacionarna točka kojoj su x, y i z koordinata jednake $\sqrt{\frac{32}{3}}$ možda je točka lokalnog minimuma, a možda točka lokalnog maksimuma. Razmotrimo li postavku problema (tražimo ekstremne vrijednosti volumena uz fiksirano oplošje) jasno je da bismo mogli dobiti bitno manje volumene. Tako primjerice uz $x = 1$, $y = 2$ i $z = 10$ dobije se volumen od 20 cm^3, dok je za našu stacionarnu točku volumen $\left(\sqrt{\frac{32}{3}}\right)^3 = \frac{128}{3}\sqrt{\frac{2}{3}} \approx 34,8$ cm^3. Stoga zaključujemo da za dano oplošje od 64 cm^2 maksimalni volumen ima kocka brida $\sqrt{\frac{32}{3}}$.*

☼ **Ponovimo bitno...** O uvjetnim ekstremima skalarne funkcije f govorimo ako smo se pri određivanju ekstrema te funkcije ograničili na one točke domene koje zadovoljavaju jednu ili više jednadži. Točke uvjetnih ekstrema nalaze se među stacionarnim točkama Lagrangeove funkcije, koju dobijemo tako da od funkcije f za svaki uvjet oduzmemo produkt jedne nove varijable (Lagrangeovog multiplikatora) s lijevom stranom jednadžbe koja opisuje taj uvjet (podrazumijevamo da su svi nenul članovi jednadžbe zapisani na lijevoj strani). ☺

4.5 Višestruki integrali

Kod određenog integrala realne funkcije jedne varijable, u oznaci $\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$, područje integriranja je dužina (tj. segment $[a, b]$). Drugačije gledano: područje integriranja je jednodimenzionalno, a funkcija koju integriramo ima jednu varijablu. Ukoliko integriramo jediničnu funkciju dobijemo duljinu područja integriranja:

$$\int_a^b \mathrm{d}x = b - a,$$

a općenito (ako pretpostavimo da je f na $[a, b]$ nenegativna) $\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$ predstavlja površinu između grafa funkcije f i područja integriranja.

Kod dvostrukih integrala područje integriranja A je dvodimenzionalno (neki podskup ravnine), a realna funkcija koju integriramo ima dvije varijable. Pišemo:

$$\iint_A f(x, y)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y$$

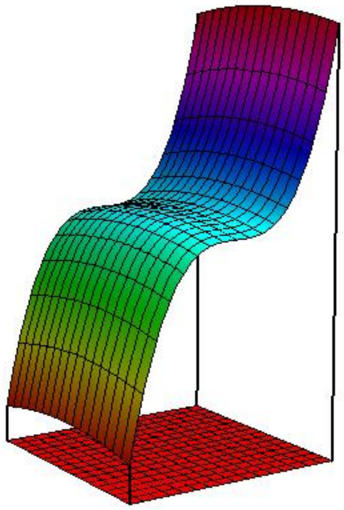
ili

$$\iint_A f(x, y)\,\mathrm{d}A.$$

Naravno, pritom mora A biti podskup domene funkcije f. U interpretaciji se sad dimenzija također povećava za jedan: dvostruki integral jedinične funkcije daje površinu područja integriranja

$$\iint_A \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = P_A,$$

a općenito dvostruki integral neke (nenegativne) funkcije iznad područja A predstavlja volumen između grafa (plohe $z = f(x, y)$) i područja integriranja.



Slika 4.10: Dvostruki integral pozitivne skalarne funkcije dviju varijabli f na području A (crveni pravokutnik na slici) predstavlja volumen omeđen plohom grafa te funkcije, površinom i vertikalama koje rubne točke od A povezuju s odgovarajućim točkama na grafu funkcije.

Primjer 135. *Recimo da nas zanima volumen sa slike 4.10. Ploha na slici je graf funkcije* $f(x,y) = 2x^3 - y^2 + 20$. *Područje integriranja je pravokutnik* $A = [-2,2] \times [-1,1]$. *U tom slučaju potrebno je izračunati*

$$\iint\limits_A (2x^3 - y^2 + 20)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y.$$

Za dvostruke integrale kao i za jednostruke vrijedi linearnost:

$$\iint\limits_A (f(x,y) + g(x,y))\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = \iint\limits_A f(x,y)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y + \iint\limits_A g(x,y)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y,$$

$$\iint\limits_A Cf(x,y)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = C\iint\limits_A f(x,y)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y$$

za sve funkcije f i g koje su integrabilne na A i svaku konstantu C.

Najlakše je računati dvostruke integrale za koje je područje integriranja pravokutnik:

$$A = [a,b] \times [c,d].$$

Tada za neprekidne funkcije f vrijedi Fubinijev teorem:

$$\iint\limits_A f(x,y)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = \int_a^b \left(\int_c^d f(x,y)\,\mathrm{d}y \right) \mathrm{d}x = \int_c^d \left(\int_a^b f(x,y)\,\mathrm{d}x \right) \mathrm{d}y.$$

Primjer 136. *Temeljem Fubinijevog teorema i linearnosti integrala, integral iz prethodnog primjera može se izračunati kao*

$$\int_{x=-2}^{2}\int_{y=-1}^{1}(2x^3-y^2+20)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y =$$

$$= \int_{x=-2}^{2}\int_{y=-1}^{1}2x^3\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y - \int_{x=-2}^{2}\int_{y=-1}^{1}y^2\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y + \int_{x=-2}^{2}\int_{y=-1}^{1}20\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y =$$

$$= 2\int_{y=-1}^{1}\left(\int_{x=-2}^{2}x^3\,\mathrm{d}x\right)\mathrm{d}y - \int_{x=-2}^{2}\left(\int_{y=-1}^{1}y^2\,\mathrm{d}y\right)\mathrm{d}x + 20\int_{x=-2}^{2}\left(\int_{y=-1}^{1}\mathrm{d}y\right)\mathrm{d}x =$$

$$= 2\int_{y=-1}^{1}\left.\frac{x^4}{4}\right|_{x=-2}^{2}\mathrm{d}y - \int_{x=-2}^{2}\left.\frac{y^3}{3}\right|_{y=-1}^{1}\mathrm{d}x + 20\int_{x=-2}^{2}2\,\mathrm{d}x =$$

$$= 2\int_{y=-1}^{1}0\,\mathrm{d}y - \int_{x=-2}^{2}\frac{2}{3}\,\mathrm{d}x + 20\int_{x=-2}^{2}2\,\mathrm{d}x =$$

$$= 0 - \frac{2}{3}\cdot 4 + 40\cdot 4 = \frac{472}{3}.$$

Najlakši je račun dvostrukih integrala ako je funkciju f moguće faktorizirati na funkcije od x i od y, tj. ako f možemo zapisati u obliku $f(x,y) = g(x)h(y)$. Za integriranje po pravokutniku $A = [a,b]\times[c,d]$ tada vrijedi

$$\iint_A f(x,y)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = \left(\int_a^b g(x)\,\mathrm{d}x\right)\cdot\left(\int_c^d h(y)\,\mathrm{d}y\right).$$

Primjer 137.

$$\int_1^2\int_1^2 xy^2\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = \left(\int_1^2 x\,\mathrm{d}x\right)\cdot\left(\int_1^2 y^2\,\mathrm{d}y\right) = \frac{3}{2}\cdot\frac{7}{3} = \frac{7}{2}.$$

Povećanjem dimenzije za još jedan dobivamo trostruke integrale u kojima se integrira skalarna funkcija tri varijable po trodimenzionalnom skupu V. Pišemo:

$$\iiint_V f(x,y,z)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$$

ili

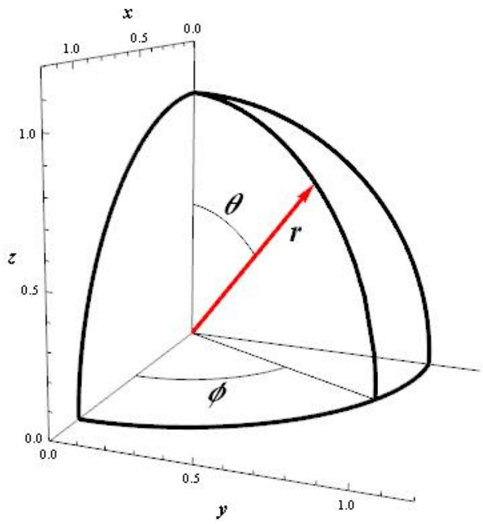
$$\iiint_V f(x,y,z)\,\mathrm{d}V.$$

Trostruki integral jedinične funkcije $\iiint_V \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$ daje volumen područja integriranja. Slično kao kod dvostrukih, najlakše je računati trostruke integrale za koje je područje integriranja kvadar:

$$V = [a,b]\times[c,d]\times[p,q].$$

Tada za integriranje neprekidnih funkcija vrijedi Fubinijev teorem:

$$\iiint_V f(x,y,z)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z = \int_a^b\left(\int_c^d\left(\int_p^q f(x,y,z)\,\mathrm{d}z\right)\mathrm{d}y\right)\mathrm{d}x.$$



Slika 4.11: Sferne koordinate.

ili slično za neki drugi odabir redoslijeda integriranja. Nadalje, kao i kod dvostrukih integrala, još lakši je račun ako je funkciju f moguće faktorizirati na funkcije od x, y i z, tj. ako f možemo zapisati u obliku $f(x, y, z) = g(x)h(y)k(z)$. Za integriranje po kvadru tada vrijedi

$$\iiint\limits_V f(x, y, z)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z = \left(\int_a^b g(x)\,\mathrm{d}x\right) \cdot \left(\int_c^d h(y)\,\mathrm{d}y\right) \cdot \left(\int_p^q k(z)\,\mathrm{d}z\right).$$

U primjenama, osobito u kvantnoj teoriji, česte su varijante višestrukih integrala koji spadaju u neprave integrale (integrali kod kojih područje integriranja nije ograničeno ili pak podintegralna funkcija nije ograničena na području integriranja). U slučaju da se područje integriranja može zapisati kao Cartesiusov produkt tri intervala, makar neki bio neograničen, gornje formule su i dalje primjenjive i pojedini integrali obzirom na jednu varijablu računaju se na uobičajen način. Najčešći su slučajevi integriranja po čitavom prostoru $\mathbb{R}^3$ koji se obzirom na Cartesiusove koordinate može zapisati kao $\langle -\infty, +\infty\rangle \times \langle -\infty, +\infty\rangle \times \langle -\infty, +\infty\rangle$.

Sferni koordinatni sustav je onaj u kojem se točka prostora opisuje s tri koordinate (r, ϕ, θ), gdje je $0 \le r < +\infty$ udaljenost točke od ishodišta, $0 \le \phi < 2\pi$ je polarni kut (azimut), tj. kut između pozitivnog dijela x-osi i projekcije točke na (x, y)-ravninu, a $0 \le \theta \le \pi$ je kut koji opisuje otklon radij vektora točke od z-osi (vidi sliku 4.11). Stoga se obzirom na sferne koordinate $\mathbb{R}^3$ može zapisati kao $[0, +\infty\rangle \times [0, 2\pi\rangle \times [0, \pi]$.

Većinu funkcija koje se pojavljuju u kvantnoj teoriji lakše je integrirati ako se iskažu u sfernim, a ne u Cartesiusovim koordinatama. Radi se dakle o zamjeni varijabli (supstituciji) u integralu. Kod funkcija jedne varijable odgovarajuća formula pri zamjeni varijable x varijablom y tako da je $y = \phi(x)$ bila je

$$\int_{\phi(a)}^{\phi(b)} f(y)\,\mathrm{d}y = \int_a^b f(\phi(x))\phi'(x)\,\mathrm{d}x.$$

Vidimo da se pri zamjeni pojavio faktor vezan za derivaciju funkcije kojom je ta zamjena izvršena.

Po analogiji, sličan faktor bi se trebao pojaviti pri zamjeni varijabli u višestrukim integralima. Dosad smo kao analog prve derivacije funkcije vidjeli pojedine parcijalne derivacije prvog reda te gradijent. Ovdje će to biti Jakobijan. U nastavku ćemo pravila zamjene varijabli u višestrukim integralima detaljno opisati samo za slučaj funkcija triju varijabli odnosno trostrukih integrala jer su najčešće u primjenama, no analogni postupci vrijede i za dvostruke integrale.

Recimo da želimo polazne varijable x, y, z (u pravilu Cartesiusove) zamijeniti nekim novim varijablama x', y' i z' za koje znamo pravila transformacije u Cartesiusove, izražena formulama

$$x = u(x', y', z'),$$

$$y = v(x', y', z'),$$

$$z = w(x', y', z').$$

Tako je veza između Cartesiusovih koordinata (x, y, z) i sfernih (r, ϕ, θ) dana jednadžbama

$$x = r\cos\phi\sin\theta,$$

$$y = r\sin\phi\sin\theta,$$

$$z = r\cos\theta.$$

Zamjenu koordinata stoga možemo shvatiti kao vektorsku funkciju koja trojkama koordinata (x', y', z') pridružuje trojke (x, y, z), a kojoj su skalarne funkcije u, v, w koordinatne funkcije: $F(x', y', z') = (u(x', y', z'),\ v(x', y', z'),\ w(x', y', z'))$. Kratko ćemo pisati $F = (u, v, w)$. Za dvodimenzionalni slučaj imat ćemo slično: $F = (u, v)$ uz $x = u(x', y')$ i $y = v(x', y')$.

Za vektorske funkcije $F = (f_1, \ldots, f_n) : \Omega \to \mathbb{R}^n$ gdje je $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ (tj. broj varijabli u domeni jednak je broju koordinata u kodomeni) definira se Jakobijan kao determinanta matrice kojoj su u svakom retku sve parcijalne derivacije pojedine koordinatne funkcije redom po svim varijablama:

$$JF = \det\left(\frac{\partial F_i}{\partial x_j}\right).$$

Tako za slučaj vektorske funkcije s podskupa od $\mathbb{R}^3$ u $\mathbb{R}^3$, kakva je funkcija $F = (u, v, w)$ u slučaju promjene koordinata, dobivamo njen Jakobijan

$$JF = \begin{vmatrix} \frac{\partial u}{\partial x'} & \frac{\partial u}{\partial y'} & \frac{\partial u}{\partial z'} \\ \frac{\partial v}{\partial x'} & \frac{\partial v}{\partial y'} & \frac{\partial v}{\partial z'} \\ \frac{\partial w}{\partial x'} & \frac{\partial w}{\partial y'} & \frac{\partial w}{\partial z'} \end{vmatrix}.$$

Za sferne koordinate dobivamo Jakobijan

$$JF == \begin{vmatrix} \cos\varphi\sin\theta & r\cos\varphi\cos\theta & -r\sin\varphi\sin\theta \\ \sin\varphi\sin\theta & r\sin\varphi\cos\theta & r\cos\varphi\sin\theta \\ \cos\theta & -r\sin\theta & 0 \end{vmatrix} =$$

$$= \cos\theta(r^2\sin^2\varphi\sin\theta\cos\theta + r^2\cos^2\varphi\sin\theta\cos\theta) - r\sin\theta(r\cos^2\varphi\sin^2\theta + r\sin^2\varphi\sin^2\theta) =$$

$$= r^2\sin\theta\cos^2\theta(\sin^2\varphi+\cos^2\varphi) + r^2\sin^3\theta(\sin^2\varphi+\cos^2\varphi) = r^2\sin\theta(\sin^2\theta+\cos^2\theta) =$$

$$= r^2\sin\theta.$$

Pri zamjeni varijabli u integriranju koristi se apsolutna vrijednost Jakobijana, za koju se često koristi oznaka $\left|\frac{\partial(F_1,\ldots,F_n)}{\partial(x_1,\ldots,x_n)}\right|$. Specijalno, u slučaju zamjene varijabli kao gore apsolutnu vrijednost Jakobijana označavamo s $\left|\frac{\partial(x,y,z)}{\partial(x',y',z')}\right|$, što u slučaju prijelaza s Cartesiusovih u sferene koordinate poprima oblik $\left|\frac{\partial(x,y,z)}{\partial(r,\theta,\varphi)}\right|$.

U slučaju trostrukih integrala, ukoliko je zadana veza između koordinata (x,y,z) i (x',y',z'), formula za zamjenu varijabli je

$$\iiint\limits_W f(x',y',z')\left|\frac{\partial(x,y,z)}{\partial(x',y',z')}\right| \mathrm{d}u\,\mathrm{d}v\,\mathrm{d}w = \iiint\limits_V f(x,y,z)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z.$$

Pritom su granice (opisi) područja integriranja općenito različiti u dvama setovima koordinata, što je naznačeno različitim oznakama (V i W) za područje integriranja prije i poslije zamjene varijabli. Specijalno, formula za promjenu iz Cartesiusovih u sferne koordinate u trostrukom integralu dana s

$$\iiint\limits_W f(r,\varphi,z)r^2\sin\theta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi = \iiint\limits_V f(x,y,z)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z.$$

Za slučaj integrala po čitavom prostoru dobivamo formulu koja se često koristi u kvantnoj teoriji:

$$\int_{r=0}^{+\infty}\int_{\phi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi} f(r,\varphi,z)r^2\sin\theta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi = \int_{x=-\infty}^{+\infty}\int_{y=-\infty}^{+\infty}\int_{z=-\infty}^{+\infty} f(x,y,z)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z.$$

Primjer 138. *Recimo da želimo odrediti prosječnu (očekivanu) udaljenost elektrona do jezgre atoma vodika za slučaj da je atom vodika u najnižem energijskom stanju. Najniže energijsko stanje je opisano kvantnim brojevima $n=1$, $l=0$ i $m_l=0$ (tj. 1s-orbitalom). Ta orbitala u sfernim koordinatama ima formulu*

$$\psi_{1,0,0}(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0},$$

gdje je $a_0 = 52{,}9$ pm Bohrov radijus. Prema Bornovoj interpretaciji, kvadrat od $\psi_{1,0,0}$ je funkcija gustoće vjerojatnosti za nalaženje 1s elektrona u nekoj točki prostora. Prosječna vrijednost veličine opisane operatorom $\hat{\Omega}$ dobiva se trostrukim integralom

$$\langle\Omega\rangle = \iiint\limits_{\mathbb{R}^3} \psi^*\hat{\Omega}\psi\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z.$$

Za slučaj prosječnog radijusa i realne valne funkcije (a takva je naša $\psi_{1,0,0}$) gornja se formula svodi na

$$\langle r\rangle = \iiint\limits_{\mathbb{R}^3} r\cdot\psi^2\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z = \iiint\limits_{\mathbb{R}^3} r\psi^2\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z.$$

Prijelazom na sferne koordinate dobivamo

$$\langle r\rangle = \int_{\phi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{r=0}^{+\infty}\frac{1}{\pi a_0^3}re^{-2r/a_0}\cdot r^2\sin\theta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi =$$

$$= \frac{1}{\pi a_0^3}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\int_0^{+\infty}r^3e^{-2r/a_0}\,\mathrm{d}r = \frac{1}{\pi a_0^3}\cdot 2\pi\cdot 2\cdot\frac{3!}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^4} = \frac{3}{2}a_0.$$

Pritom je korištena formula $\int_0^{+\infty}x^ne^{-ax}\,\mathrm{d}x = \frac{n!}{a^{n+1}}$.

Primjer 139. *Pokažimo da su vodikove 1s i 2s orbitale ortogonalne. Odgovarajuće valne funkcije su:*

$$\psi_{1,0,0}(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0},$$

$$\psi_{2,0,0}(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}.$$

U kontekstu funkcija definiranih i integrabilnih na istom skupu S (ovdje: na $\mathbb{R}^3$), skalarni produkt se obično definira s

$$\langle f,g\rangle = \int_S f^*g\,\mathrm{d}S.$$

Stoga treba provjeriti da je

$$\langle\psi_{1,0,0},\psi_{2,0,0}\rangle = 0.$$

Kako su obje valne funkcije realne, imamo $\psi_{1,0,0}^* = \psi_{1,0,0}$ pa slijedi

$$\langle\psi_{1,0,0},\psi_{2,0,0}\rangle = \int_{\phi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{r=0}^{+\infty}\psi_{1,0,0}\psi_{2,0,0}\cdot r^2\sin^2\theta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\cdot\frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\int_0^{+\infty}r^2e^{-r/a_0}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}\,\mathrm{d}r.$$

Vidimo da se radi o produktu tri jednostruka integrala (i nenul konstante) te je dovoljno da jedan od ta tri integrala bude nula. Najjednostavniji integral $\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi = 2\pi$ nije nula, a srednji iznosi $\int_0^{\pi}\sin\theta\,\mathrm{d}\theta = -\cos\theta|_0^{\pi} = -(\cos\pi-\cos 0) = 2$. Stoga moramo računati zadnji:

$$\int_0^{+\infty}r^2e^{-r/a_0}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}\,\mathrm{d}r = \left(2\cdot\frac{2^3a_0^3\cdot 2!}{3^3}-\frac{1}{a_0}\cdot\frac{2^4a_0^4\cdot 3!}{3^4}\right) =$$

$$= \frac{2^4}{\sqrt{2}}\left(\frac{2!}{3^3}-\frac{3!}{3^4}\right) = 0.$$

Zaključujemo da je ukupni integral jednak konstanta puta 2π puta 2 puta 0, dakle iznosi 0.

Primjer 140. *Za cilindričke koordinate veza s Cartesiusovim dana je formulama* $x = r\cos\varphi$, $y = r\sin\varphi$, $z = z$. *Stoga* (x, y, z) *možemo shvatiti kao funkciju* $F(r, \varphi, z)$. *Njen Jakobijan je*

$$JF = \left|\frac{\partial(x,y,z)}{\partial(r,\varphi,z)}\right| = \begin{vmatrix} \cos\varphi & -r\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & r\cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = r.$$

Stoga je formula za promjenu iz Cartesiusovih u cilindričke koordinate u trostrukom integralu dana s

$$\int\int\int_W f(r,\varphi,z) r \,\mathrm{d}r \,\mathrm{d}\varphi \,\mathrm{d}z = \int\int_V f(x,y,z) \,\mathrm{d}x \,\mathrm{d}y \,\mathrm{d}z.$$

Primjer 141. *Za zamjenu varijabli u dvostrukim integralima vrijedi formula*

$$\iint\limits_S f(x', y') \left|\frac{\partial(u,v)}{\partial(x',y')}\right| \mathrm{d}x' \,\mathrm{d}y' = \iint\limits_A f(x,y) \,\mathrm{d}x \,\mathrm{d}y,$$

gdje je S *skup u koji se promjenom varijabli transformira skup* A. *Za polarne koordinate u ravnini veza s Cartesiusovim dana je formulama* $x = r\cos\varphi$, $y = r\sin\varphi$. *Stoga* (x, y) *možemo shvatiti kao funkciju* $F(r, \varphi)$, *a njen Jakobijan je*

$$JF = \left|\frac{\partial(x,y)}{\partial(r,\varphi)}\right| = \begin{vmatrix} \cos\varphi & -r\sin\varphi \\ \sin\varphi & r\cos\varphi \end{vmatrix} = r\cos^2\varphi + r\sin^2\varphi = r.$$

Slijedi da je formula za promjenu iz Cartesiusovih u polarne koordinate u dvostrukom integralu dana s

$$\int\int_S f(r,\varphi) r \,\mathrm{d}r \,\mathrm{d}\varphi = \int\int_A f(x,y) \,\mathrm{d}x \,\mathrm{d}y.$$

Neka je A *krug polumjera* 1 *sa središtem u ishodištu. Znamo da mu je površina dana s* $\int\int_A \mathrm{d}x \,\mathrm{d}y$, *no u Cartesiusovim koordinatama krug ne možemo zapisati kao pravokutnik pa ne znamo izračunati taj integral tj. nije ga lako računati direktno. Funkcija koju integriramo je* $1(x, y) = 1$, *odnosno uz* $x = r\cos\varphi$ *i* $y = r\sin\varphi$ *to je* $1(r, \varphi) = 1$. *U polarnim koordinatama krug* A *čine sve točke s* $r \in [0, 1]$ *i* $\varphi \in [0, 2\pi\rangle$ *tj. u polarnim koordinatama krug je „pravokutnik"* $S = [0, 1] \times [0, 2\pi\rangle$. *Stoga je*

$$P = \int\int_A \mathrm{d}x \,\mathrm{d}y = \int\int_S r \,\mathrm{d}r \,\mathrm{d}\varphi = \int_0^1 r \,\mathrm{d}r \cdot \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi = \left.\frac{r^2}{2}\right|_0^1 \cdot 2\pi = \pi.$$

☼ **Ponovimo bitno...** Višestruki integrali skalarnih funkcija više varijabli su poopćenje određenih integrala funkcija jedne varijable, u kojima se za područje integriranja uzima neki podskup domene funkcije koju integriramo. Dakle, dvostruki integrali se računaju od funkcija dviju varijabli po nekom podskupu ravnine, a trostruki se računaju za funkcije tri varijable po nekom podskupu prostora. Dvostruki integral jedinične funkcije po području A je površina od A, a trostruki integral jedinične funkcije po području V je volumen od V. Dvostruki integral nenegativne funkcije f po području integriranja A jednak je volumenu određenom grafom funkcije f, skupom A u (x, y)-ravnini te vertikalama povučenim u svim točkama ruba od A. Pri zamjeni varijabli u višestrukim integralima potrebno je uključiti kao faktor iznos Jakobijana, tj. determinante matrice koja sadrži sve parcijalne derivacije prvog reda svih koordinatnih funkcija vektorske funkcije koja opisuje promjenu varijabli. Sferne koordinate su prostorne koordinate koje točke prostora opisuju kao uređene trojke (r, ϕ, θ), gdje je $0 \leq r < +\infty$ udaljenost točke od ishodišta, $0 \leq \phi < 2\pi$ je polarni kut (azimut) tj. kut između pozitivnog dijela x-osi i projekcije točke na (x, y)-ravninu, a $0 \leq \theta \leq \pi$ je kut koji opisuje otklon radij vektora točke od z-osi. Ako u trostrukom integralu prelazimo iz Cartesiusovih koordinata u sferne, potrebno je dodati faktor (Jakobijan) $r^2 \sin\theta$. ☺

4.6 Nabla-operator

Oznakom ∇ označava se takozvani nabla-operator. Za prostor tipa $\mathbb{R}^n$ možemo ga zamišljati kao vektor kojemu su komponente operatori parcijalnog deriviranja po varijablama koje su koordinate u $\mathbb{R}^n$:

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \ldots, \frac{\partial}{\partial x_n}\right)^t.$$

Najčešće se primjenjuje na funkcije tri varijable x, y, z te se tada piše

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)^t$$

ili (pretpostavljamo kanonsku bazu, tj. korištenje Cartesiusovih koordinata)

$$\nabla = \vec{i}\,\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\,\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\,\frac{\partial}{\partial y}.$$

Ovisno o načinu djelovanja i vrsti funkcije na koju djeluje, rezultati djelovanja nabla-operatorom zovu se gradijent, divergencija i rotacija. U svim kontekstima djelovanje nabla-operatora na funkcije je linearno.

Gradijent skalarne funkcije možemo shvatiti kao nabla-operator pomnožen tom funkcijom (analogija: množenje vektora skalarom):

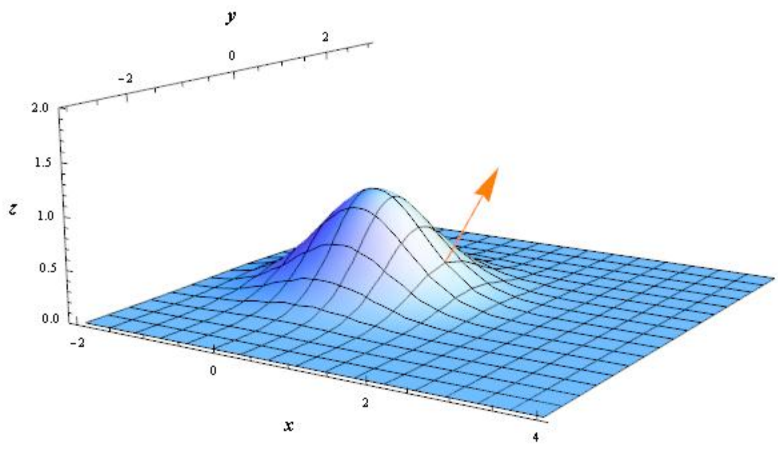
$$\operatorname{grad} f(X) = \nabla f(X) = \underbrace{\nabla}_{\text{vektor}}\underbrace{f(X)}_{\text{broj}} = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n}\right)^t.$$

Linearnost nabla-operatora u kontekstu gradijenta izražena je formulama

$$\nabla(f + g) = \nabla f + \nabla g,$$

$$\nabla(\alpha f) = \alpha \nabla f$$

(za sve diferencijabilne skalarne funkcije f, g s istom domenom i sve skalare α).



Slika 4.12: Gradijent pokazuje smjer najbržeg rasta funkcije.

Primjer 142. *Znamo da se $\nabla f(X_0)$ može interpretirati kao vektor normale na plohu definiranu jednadžbom $f(X) = 0$, i to u točki X_0 te plohe. Orijentacija tog vektora pokazuje smjer najbržeg rasta funkcije f — vidi sliku 4.12. Smisao te činjenice možemo opisati i ovako: ako je f funkcija koja određuje temperaturu na pojedinoj poziciji X, onda vektor $\nabla f(X)$ pokazuje u kojem smjeru se objekt na poziciji X treba pomaknuti tako da mu bude što toplije.*

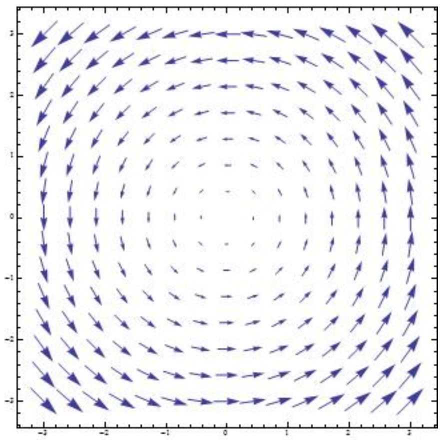
Divergencija i rotacija se definiraju za vektorske funkcije za koje je broj koordinata u domeni jednak broju koordinata u kodomeni: $F : \Omega \to \mathbb{R}^n$ uz $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$. Takve funkcije se zovu vektorska polja.

Primjer 143. *Promotrimo funkciju $F : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$ definiranu s $F(x, y) = (-y, x)$. Uz uobičajeno shvaćanje koordinata kao Cartesiusovih, možemo ju opisati i formulom $F(x\vec{i} + y\vec{j}) = -y\vec{i} + x\vec{j}$. Ta funkcija svakom vektoru u ravnini pridružuje drugi vektor. Izračunajmo nekoliko rezultata njenog djelovanja: $F\left(\frac{1}{2}\vec{i} + \frac{1}{2}\vec{j}\right) = -\frac{1}{2}\vec{i} + \frac{1}{2}\vec{j}$, $F\left(\frac{1}{2}\vec{i} - \frac{1}{2}\vec{j}\right) = \frac{1}{2}\vec{i} + \frac{1}{2}\vec{j}$, $F\left(\frac{3}{2}\vec{i} + \frac{1}{4}\vec{j}\right) = -\frac{1}{4}\vec{i} + \frac{3}{2}\vec{j}$, itd. Ako ju želimo prikazati grafički, to činimo tako da u svakoj točki (x, y) ucrtamo orijentiranu dužinu koja prikazuje radij-vektoru te točke pridruženi vektor $F(x, y)$. Dobiva se slika 4.13.*

Divergencija vektorskog polja F je skalarni produkt nabla-operatora s F:

$$\operatorname{div} F(X) = \underbrace{\nabla}_{\text{vektor}} \cdot \underbrace{F(X)}_{\text{vektor}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x_n} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} F_1(X) \\ F_2(X) \\ \vdots \\ F_n(X) \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial F_i}{\partial x_i}(X).$$

Divergencija vektorskog polja ovisnog o n varijabli je stoga skalarna funkcija (tih istih varijabli) koja se dobije kao zbroj parcijalnih derivacija i-te koordinatne funkcije od F



Slika 4.13: Grafički prikaz vektorskog polja $F(x, y) = (-y, x)$.

po i-toj varijabli. Za najčešći slučaj vektorskih polja tri varijable $F = (F_x, F_y, F_z) = F_x \overrightarrow{i} + F_y \overrightarrow{j} + F_z \overrightarrow{k}$ uobičajena notacija za divergenciju je

$$\nabla \cdot F = \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z}.$$

Primjer 144. *Divergencija vektorskog polja iz primjera 143 je*

$$\operatorname{div} F = \frac{\partial(-y)}{\partial x} + \frac{\partial x}{\partial y} = 0$$

(nulfunkcija).

Linearnost nabla-operatora u kontekstu divergencije izražena je formulama

$$\nabla \cdot (F + G) = \nabla \cdot F + \nabla \cdot G,$$

$$\nabla \cdot (\alpha F) = \alpha \nabla \cdot F$$

(za sva diferencijabilna vektorska polja F, G s istom domenom i sve skalare α).

Primjer 145. *Divergencija se može shvatiti kao mjera koliko se vektorsko polje u nekoj točki ponaša kao izvor ili ponor. Recimo da promatramo brzinu stlačivog fluida u svakoj njegovoj točki. Linije strujanja sastoje se od slijeda pozicija pojedine čestice fluida. U područjima u kojima se te linije šire u smjeru toka, gustoća fluida se smanjuje i divergencija brzine je pozitivna. Divergencija je u tom kontekstu mjera širenja linija strujanja. Jednadžba koja opisuje stlačivi fluid obzirom na taj efekt je*

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = -\frac{\partial \rho}{\partial t},$$

gdje je ρ gustoća fluida, $\mathbf{v}$ brzina (obje su funkcije pozicije) i t vrijeme.

Primjer 146. *Gaussov zakon za magnetsko polje* $\mathbf{B}$ *ima oblik* $\nabla \cdot \mathbf{B} = \mathbf{0}$. *Ta formula iskazuje da nema točkastih izvora magnetskog polja.*

Rotacija vektorskog polja se definira samo za vektorska polja $F = (F_x, F_y, F_z) : \Omega \to \mathbb{R}^3$, $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$. Radi se o vektorskom produktu nabla-operatora s F:

$$\operatorname{rot} F(X) = \nabla \times F(X) = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ F_x & F_y & F_z \end{vmatrix}.$$

Rotacija vektorskog polja s tri varijable je stoga vektorsko polje (ovisno o tim istim varijablama). Linearnost nabla-operatora u kontekstu rotacije izražena je formulama

$$\nabla \times (F + G) = \nabla \times F + \nabla \times G,$$

$$\nabla \times (\alpha F) = \alpha \nabla \times F$$

za sva vektorska polja $F, G : \Omega \to \mathbb{R}^3$ i sve skalare α.

Primjer 147. *Ako je* $F(x, y, z) = (y, z, x) = y\vec{i} + z\vec{j} + x\vec{k}$, *onda je*

$$\operatorname{rot} F = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ y & z & x \end{vmatrix} = (0 - 1)\vec{i} - (1 - 0)\vec{j} + (0 - 1)\vec{k} = -\vec{i} - \vec{j} - \vec{k}.$$

Primjer 148. *Ako je* $\mathbf{v}$ *vektorsko polje koje opisuje brzinu fluida, onda njegova rotacija* $\nabla \times \mathbf{v}$ *u svakoj točki* (x, y, z) *opisuje sklonost čestica fluida da rotiraju oko osi definirane vektorom* $\nabla \times \mathbf{v}(x, y, z)$.

Za diferencijabilne skalarne funkcije f, g i vektorska polja F, G (uz uvjet da izrazi u formulama imaju smisla) vrijede formule

$$\nabla(fg) = f\nabla g + g\nabla f,$$
$$\nabla \times (fF) = (\nabla f) \times F + f(\nabla \times F),$$
$$\nabla \times (F \times G) = (\nabla \cdot G)F + (G \cdot \nabla)F - (\nabla \cdot F)G - (F \cdot \nabla)G,$$
$$\nabla \cdot (fF) = (\nabla f) \cdot F + f(\nabla \cdot F),$$
$$\nabla \cdot (F \times G) = (\nabla \times F) \cdot G - F \cdot (\nabla \times G),$$
$$\nabla(F \cdot G) = F \times (\nabla \times G) + G \times (\nabla \times F) + (F \cdot \nabla)G + (G \cdot \nabla)F.$$

Ako skalarna funkcija triju varijabli f ima neprekidne parcijalne derivacije drugog reda, onda vrijedi

$$\nabla \times (\nabla f) = \vec{0}$$

(rotacija gradijenta skalarne funkcije je vektorska nulfunkcija). Slično, ako komponente vektorskog polja F s tri varijable imaju neprekidne parcijalne derivacije po svim varijablama vrijedi

$$\nabla \cdot (\nabla \times F) = 0$$

(divergencija rotacije vektorskog polja je nulfunkcija).

Primjer 149. *Konzervativna vektorska polja su ona koja se mogu dobiti kao gradijenti skalarnih potencijala tj. koja su oblika $F = \nabla f$. Ako se radi o vektorskim poljima s tri varijable, njihova rotacija u svakoj točki je nulvektor: $\nabla \times F(X) = \vec{0}$ (uz pretpostavku da su sve potrebne parcijalne derivacije postojeće i neprekidne). To nije teško pokazati i slijedi iz Schwarzovog teorema:*

$$\nabla \times \nabla f = \nabla \times \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial y} \\ \frac{\partial f}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial f}{\partial x} & \frac{\partial f}{\partial y} & \frac{\partial f}{\partial z} \end{vmatrix} =$$

$$= \left(\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial z} - \frac{\partial^2 f}{\partial z \partial y}\right)\vec{i} - \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial z} - \frac{\partial^2 f}{\partial z \partial x}\right)\vec{j} + \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}\right)\vec{k} = \vec{0}.$$

Osim rotacije gradijenta i divergencije rotacije, postoji još jedna mogća varijanta dvostruke primjene nabla-operatora. Laplaceov operator je definiran kao divergencija gradijenta, tj. kao

$$\nabla \cdot \nabla = \nabla^2 = \sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}.$$

Laplaceov operator djeluje na skalarne funkcije (koje su dvaput diferencijabilne). Za slučaj skalarne funkcije triju varijabli imamo

$$\nabla^2 f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}.$$

Laplaceov operator se pojavljuje u mnogim važnim jednadžbama u fizici:

- Laplaceova jednadžba $\nabla^2 \phi = 0$,
- Helmholtzova jednadžba $\nabla^2 \phi + k^2 \phi = 0$,
- valna jednadžba $\nabla^2 \phi = \frac{1}{v}\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}$,
- Schrödingerova jednadžba (za stacionarna stanja): $\hat{H}\psi = E\psi$, $\hat{H} = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 + V$.

Primjer 150. *Za $f(x, y, z) = A \sin(ax) \sin(by) \sin(cz)$ je*

$$\nabla^2 f(x, y, z) = -(a^2 + b^2 + c^2) f(x, y, z),$$

tj. funkcija f je svojstveni vektor Laplaceovog operatora koji odgovara svojstvenoj vrijednosti $-a^2 - b^2 - c^2$.

Napomena 8. *Za račune s gradijentima, divergencijama, rotacijama i Laplaceovim operatorom često su potrebne zamjene koordinata (osobito u kvantnoj teoriji iz Cartesiusovih u sferne). Odgovarajuće formule se izvode pomoću lančanog pravila. Tako su primjerice gradijent i Laplaceov operator skalarne funkcije izražene preko sfernih koordinata dani kao*

$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial r}, \frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial \theta}, \frac{1}{r \sin \theta}\frac{\partial f}{\partial \phi}\right),$$

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial f}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial f}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial f}{\partial\phi^2},$$

a divergencija i rotacija vektorskog polja u sfernim koordinatama ($F = (F_r, F_\phi, F_\theta)$) se računaju formulama

$$\nabla\cdot F = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2F_r) + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta F_\theta) + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial F_\phi}{\partial\phi}$$

i

$$\nabla\times F = \frac{1}{r\sin\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\phi}(\sin\phi F_\theta) - \frac{\partial F_\phi}{\partial\theta}\right)\hat{r} + \frac{1}{r}\left(\frac{1}{\sin\phi}\frac{\partial F_r}{\partial\theta} - \frac{\partial}{\partial r}(rF_\theta)\right)\hat{\phi} +$$
$$+\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}(rF_\phi) - \frac{\partial F_r}{\partial\phi}\right)\hat{\theta}.$$

U zadnjoj formuli su $\hat{r}, \hat{\phi}$ i $\hat{\theta}$ jedinični vektori baze sfernog koordinatnog sustava ($\hat{r} = \cos\theta\sin\phi\,\overrightarrow{i} + \sin\theta\sin\phi\,\overrightarrow{j} + \cos\phi\,\overrightarrow{k}$, $\hat{\theta} = -\sin\theta\,\overrightarrow{i} + \cos\theta\,\overrightarrow{j}$, $\hat{\phi} = \cos\theta\cos\phi\,\overrightarrow{i} + \sin\theta\cos\phi\,\overrightarrow{j} - \sin\phi\,\overrightarrow{k}$).

☼ **Ponovimo bitno...** Nabla-operator ∇ je linearan operator koji djeluje na skalarne ili vektorske funkcije više varijabli. Njegovo djelovanje na pojedinu funkciju možemo zamisliti kao množenje vektora $\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}\ \frac{\partial}{\partial x_2}\ \cdots\ \frac{\partial}{\partial x_n}\right)^t$ s funkcijom. Ako je funkcija skalarna dobivamo vektorsku funkciju: gradijent $\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\ \frac{\partial f}{\partial x_2}\ \cdots\ \frac{\partial f}{\partial x_n}\right)^t$. Ako je funkcija vektorska imamo dva načina „množenja": skalarno i vektorsko. „Skalarnim" množenjem ∇ s vektorskom funkcijom $F = (F_1, F_2, \ldots, F_n)$ dobivamo skalarnu funkciju: divergenciju $\nabla\cdot F = \sum_i \frac{\partial F_i}{\partial x_i}$. „Vektorsko" množenje je izvedivo samo u trodimenzionalnom prostoru te je rotacija $\nabla\times F$ vektorska funkcija koja je definirana samo za vektorska polja $F = (F_x, F_y, F_z) : \Omega \subseteq \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$. Laplaceov operator ∇^2 djeluje na skalarne funkcije f (i pridružuje im skalarne funkcije $\nabla^2 F = \sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$. ☺

4.7 Diferencijali

Svaki konkretan vektor može se shvatiti kao linearan funkcional na $\mathbb{R}^n$ tako da elementima iz $\mathbb{R}^n$ pridružujemo njihov skalarni produkt s tim vektorom.

Primjer 151. *Pretpostavimo da smo u $\mathbb{R}^4$ odabrali vektor $a = (1, 3, -9, 6)$. Definiramo funkciju f_a koja proizvoljnom vektoru $v = (x, y, z, w)$ pridružuje njegov skalarni produkt s a:*

$$f_a(v) = a\cdot v = x + 3y - 9z + 6t.$$

Očito je rezultat djelovanja te funkcije broj (skalar), a svojstva aditivnosti i homogenosti se lako provjere te je f_a linearan funkcional i tako smo vektor a „pretvorili" u linearan funkcional.

Kako je gradijent $\nabla f(X)$ skalarne funkcije f (od n varijabli) u točki X iz njene domene konkretan vektor, on definira linearni funkcional na $\mathbb{R}^n$ tako da svaki vektor iz $\mathbb{R}^n$ skalarno pomnožimo s $\nabla f(X)$.

Primjer 152. *Uzmimo* $f(x,y,z) = \ln x + y^2 z$. *Tada je*

$$\nabla f(x,y,z) = \left(1/x,\ 2yz,\ y^2\right),$$

pa je

$$\nabla f(1,2,-1) = (1,-4,4).$$

Skalarni produkt proizvoljnog $Y = (x,y,z) \in \mathbb{R}^3$ *s tim vektorom jednak je*

$$\nabla f(1,2,-1) \cdot Y = x - 4y + 4z.$$

Dakle, skalarno množenje proizvoljnog elementa $X \in \mathbb{R}^3$ *s gradijentom od* f *izračunatim u točki* $(1,2,-1)$ *je ekvivalentno skalarnoj funkciji (linearnom funkcionalu) koja trojci* (x,y,z) *pridružuje broj* $x - 4y + 4z$.

Linearni funkcional koji skalarno množi vektore iz $\mathbb{R}^n$ s gradijentom funkcije f izračunatim u nekoj konkretnoj točki X zove se diferencijal skalarne funkcije f u točki X i označava s $\mathrm{d}f(X)$. Gore opisan način njegova djelovanja možemo zapisati ovako:

$$\mathrm{d}f(X)(Y) = \nabla f(X) \cdot Y = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i}(X) y_i.$$

Raspisano po koordinatama za (u primjenama najčešći) slučaj funkcija s tri varijable dobivamo

$$\mathrm{d}f(X)(x,y,z) = \frac{\partial f}{\partial x}(X) \cdot x + \frac{\partial f}{\partial y}(X) \cdot y + \frac{\partial f}{\partial z}(X) \cdot z,$$

gdje je X fiksirani element domene od f.

Primjer 153. *Za funkciju iz prethodnog primjera možemo pisati*

$$\mathrm{d}f(1,2,-1)(x,y,z) = x - 4y + 4z.$$

Zapamtimo: diferencijal skalarne funkcije f u nekoj točki X iz njene domene je linearan funkcional $\mathrm{d}f(X)$ (na $\mathbb{R}^n$, tj. u njega možemo uvrstiti bilo koju n-torku brojeva Y), a $\mathrm{d}f(X)(Y)$ je broj koji ovisi o funkciji f te odabranoj točki X iz domene od f i Y iz $\mathbb{R}^n$. Također, parcijalna derivacija funkcije u nekoj točki $\frac{\partial f}{\partial x_i}(X)$ je broj koji možemo shvatiti kao koordinatu matrice funkcionala $\mathrm{d}f(X)$ (obzirom na kanonsku bazu prostora).

Primjer 154. *Diferencijal konstantnog preslikavanja* $f(x,y,z) = C$ *je nulfunkcional:* $\nabla f(X) = (0,0,0)$ *u svakoj točki* X*, pa je* $\mathrm{d}f(Y) = \nabla f(X) \cdot (Y) = (0,0,0) \cdot (x_Y, y_Y, z_Y) = 0$.

Napomena 9. *Gornja definicija diferencijala funkcije nije precizna. Diferencijal skalarne funkcije u nekoj točki se pravilnije definira kao linearan funkcional koji zadovoljava svojstvo iskazano limesom sličnim limesu iz definicije derivacije funkcije jedne varijable. Temeljem te definicije se dokazuje da za slučaj funkcija koje posjeduju sve parcijalne derivacije prvog reda, ako su one neprekidne, diferencijal kao matricu ima gradijent. Funkcija je diferencijabilna u točki* X *ako posjeduje diferencijal* $\mathrm{d}f(X)$. *Stoga smo za funkcije koje imaju neprekidne sve parcijalne derivacije prvog reda (kakve su gotovo sve koje se pojavljuju u primjenama) s pravom i ranije govorili da su diferencijabilne.*

Umjesto $\mathrm{d}f(X)(Y) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i}(X) y_i$ piše se i

$$\mathrm{d}f(X) = \sum_{i=1}^{n} \underbrace{\frac{\partial f}{\partial x_i}(X)}_{\text{broj}} \cdot \overbrace{\mathrm{d}x_i}^{\text{operator}} .$$

Tu je s $\mathrm{d}x_i$ označen linearni funkcional koji n-torci brojeva (elementu od $\mathbb{R}^n$) pridružuje njenu i-tu koordinatu, tj. $\mathrm{d}x_i(y_1, y_2, \ldots, y_n) = y_i$. Funkcional $\mathrm{d}x_i$ se zove diferencijalom varijable x_i. Daljnje skraćivanje zapisa poprima oblik

$$\mathrm{d}f = \sum_{i=1}^{n} \underbrace{\frac{\partial f}{\partial x_i}}_{\text{skalarna funkcija}} \cdot \overbrace{\mathrm{d}x_i}^{\text{operator}} .$$

Oznaku $\mathrm{d}f$ treba shvatiti kao funkciju koja točkama X iz domene od f pridružuje linearne funkcionale $\mathrm{d}f(X)$ (dakle, za svaki X je $\mathrm{d}f(X)$ linearan funkcional, ali $\mathrm{d}f$ nije linearan funkcional).

Primjer 155. *Diferencijal iz primjera 153 u skladu s prethodnim možemo opisati i formulom*

$$\mathrm{d}f(1, 2, -1) = 1\,\mathrm{d}x - 4\,\mathrm{d}y + 4\,\mathrm{d}z.$$

Ako odustanemo od fiksiranja točke $(1, 2, -1)$ *i dozvolimo umjesto nje točku* (x, y, z) *s proizvoljnim koordinatama imamo*

$$\mathrm{d}f(x, y, z) = \frac{1}{x}\,\mathrm{d}x + 2yz\,\mathrm{d}y + y^2\,\mathrm{d}z.$$

jer su $\frac{1}{x}$, $2yz$ *i* y^2 *redom parcijalne derivacije funkcije* f *po varijablama* x, y, z. *Potpuno skraćeni zapis poprima oblik*

$$\mathrm{d}f = \frac{1}{x}\,\mathrm{d}x + 2yz\,\mathrm{d}y + y^2\,\mathrm{d}z.$$

U primjenama se $\mathrm{d}f$ često poistovjećuje s procjenom promjene f za male promjene svih njenih varijabli. Kako nema smisla govoriti o promjeni vrijednosti funkcije bez da se specificira u odnosu na koju vrijednost to gledamo, tu se zapravo misli na poistovjećenje $\mathrm{d}f$ s $\mathrm{d}f(X)(Y)$ za neki konkretan element domene X u odnosu na koji dolazi do promjene u vrijednostima varijabli koja izaziva promjenu vrijednosti funkcije i za Y koji je n-torka promjena pojedinih varijabli, tj. $Y = (\Delta x_1, \Delta x_2, \ldots, \Delta x_n)$. Provjerimo to:

$$\mathrm{d}f(X)(Y) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i}(X) \cdot \mathrm{d}x_i(Y) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i}(X)\Delta x_i,$$

jer je po definiciji $\mathrm{d}x_i(y_1, \ldots, y_n) = y_i$. Kako parcijalne derivacije $\frac{\partial f}{\partial x_i}(X)$ po definiciji procjenjuju relativnu promjernu $\frac{\Delta f}{\Delta x_i}$ za male promjene Δx_i, vidimo da je svaki član u gornjoj sumi procjena promjene vrijednosti funkcije kad se samo jedna od varijabli malo promijeni u odnosu na vrijednost koju ima u X, pa stoga cijela suma procjenjuje ukupnu promjenu funkcije kad se svaka od tih varijabli malo promijeni.

Primjer 156. *Uzmimo da je f neka funkcija samo jedne varijable x, recimo $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $f(x) = x^2$.*

Njena parcijalna derivacija jednaka je običnoj, tj. $\frac{\partial f}{\partial x}(c) = f'(c) = 2c$ za sve elemente c iz domene. Nadalje, prema gornjem je $\mathrm{d}f(c) = \frac{\partial f}{\partial x}(c)\,\mathrm{d}x = 2c\,\mathrm{d}x$.

Recimo da je $c = 1$ odabrani element domene i želimo procijeniti promjenu f u odnosu na $f(1)$ ako vrijednost varijable promijenimo za neki iznos Δx. Za $c = 1$ imamo $f'(1) = 2$ i stoga $\mathrm{d}f(1) = 2\,\mathrm{d}x$. Pritom je po definiciji $\mathrm{d}x(y) = y$ za sve realne brojeve y.

Kako je $f'(1)$ po definiciji derivacije približno jednak omjeru $\Delta f/\Delta x$, slijedi da je $\Delta f \approx f'(1)\Delta x = 2\Delta x = 2\,\mathrm{d}x(\Delta x) = \mathrm{d}f(1)(\Delta x)$.

Promotrimo sad samo desne strane diferencijala, tj. linearne funkcionale oblika $\sum_i F_i(x)\,\mathrm{d}x_i = \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i}(X)\,\mathrm{d}x_i$. Radi se o sumama u kojima je svaki član određen po jednom skalarnom funkcijom $F_i = \frac{\partial f}{\partial x_i}$, a sve te skalarne funkcije „potječu" od parcijalnog deriviranja jedne te iste funkcije f. No, izrazi oblika $\sum_i F_i(x)\,\mathrm{d}x_i$ imaju i za slučaj da su F_i bilo kakve skalarne funkcije sa zajedničkom domenom. Za svaki odabrani x iz te zajedničke domene, $\sum_i F_i(x)\,\mathrm{d}x_i$ će i dalje biti linearan funkcional. Stoga je smisleno definirati funkciju koja elementima x pridružuje linearne funkcionale $\sum_i F_i(x)\,\mathrm{d}x_i$. Ta funkcija označava se s

$$\omega = \sum_i F_i\,\mathrm{d}x_i,$$

i zove diferencijali[8] (ne diferencijali neke funkcije f, nego jednostavno diferencijali!).

Primjer 157. *Izraz $2xy\,\mathrm{d}x - z^2\,\mathrm{d}y + \frac{x}{y}\,\mathrm{d}z$ je primjer diferencijala. Za taj diferencijal ne znamo je li diferencijal neke funkcije ili ne.*

Nasuprot toga, izraz $\frac{1}{x}\,\mathrm{d}x + 2yz\,\mathrm{d}y + y^2\,\mathrm{d}z$ je ne samo diferencijal, nego i diferencijal funkcije (kako smo vidjeli u primjeru 155).

Dakle, diferencijali su funkcije definirani kao zbroj članova oblika „neka skalarna funkcija puta diferencijal neke varijable". Pritom su sve funkcije u diferencijalu ω funkcije onih varijabli čiji diferencijali se pojavljuju u ω. Ako su sve te funkcije parcijalne derivacije *iste* funkcije f po varijablama uz čije diferencijale se nalaze (tj. ako možemo naći funkciju f takvu da je $\frac{\partial f}{\partial x_i} = F_i$ za sve i), onda je taj diferencijal ujedno diferencijal funkcije f. Dakle: neki diferencijali jesu diferencijali skalarnih funkcija, a neki to nisu.

Korisno je uočiti i sljedeće: Diferencijal $\omega = M\,\mathrm{d}x + N\,\mathrm{d}y + \ldots$ (gdje su M, M, ... skalarne funkcije varijabli x, y, ...) možemo shvatiti kao skalarni produkt vektorske funkcije $(M, N, \ldots)$ i vektora operatorâ $(\mathrm{d}x, \mathrm{d}y, \ldots)$:

$$\omega(X) = (M(X), N(X), \ldots) \cdot (\mathrm{d}x, \mathrm{d}y, \ldots).$$

Ako je $(M(X), N(X), \ldots)$ gradijent neke funkcije f izračunat u X, tj. ako je $(M(X), N(X), \ldots) = \nabla f(X)$, onda je $\omega(X) = \mathrm{d}f(X)$ diferencijal te funkcije f u točki X.

[8] Pravilniji naziv bio bi diferencijalna 1-forma, no taj se naziv rijetko koristi u primijenjenoj literaturi.

☼ **Ponovimo bitno...** Na $\mathbb{R}^n$ se definiraju diferencijali varijabli kao linearni funkcionali $\mathrm{d}x_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ $(i = 1, \ldots, n)$ koji točkama iz $\mathbb{R}^n$ pridružuju njihove koordinate ($\mathrm{d}x_i(X)$ je i-ta koordinata točke X). Diferencijali su funkcije oblika $\omega = M\,\mathrm{d}x + N\,\mathrm{d}y + \ldots$, gdje su M, N , ... skalarne funkcije varijabli $x, y, \ldots$, a $\mathrm{d}x$, $\mathrm{d}y$, ... su diferencijali varijabli. Ako su sve funkcije M, N, ... parcijalne derivacije iste skalarne funkcije f redom po varijablama s čijim diferencijalom su pomnožene, kažemo da je ω diferencijal funkcije f i pišemo $\mathrm{d}f$ umjesto ω. Dakle, $\mathrm{d}f = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i} \cdot \mathrm{d}x_i$, što je funkcija koja elementima X iz domene od f pridružuje linearne funkcionale $\mathrm{d}f(X) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i}(X) \cdot \mathrm{d}x_i$, koji pak točkama $Y \in \mathbb{R}^n$ pridružuju brojeve $\mathrm{d}f(X)(Y) = \nabla f(X) \cdot Y = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i}(X) y_i$. Ako je $Y = (\Delta x_1, \ldots, \Delta x_n)$, onda iznos $\mathrm{d}f(X)(Y)$ procjenjuje promjenu funkcije f u odnosu na vrijednost $f(X)$ ako se koordinate od X redom promijene za Δx_1, ..., Δx_n. ☺

4.8 Krivuljni integrali

Već smo se susretali s parametarski definiranim funkcijama. One su zapravo vrsta vektorskih funkcija. Primjerice, parametarski definirane funkcije koje smo spominjali u poglavlju o deriviranju funkcija jedne varijable i koje su bile zadane formulama oblika $x = x(t)$, $y = y(t)$, $t \in I$ (gdje je I neki interval u skupu realnih brojeva) zapravo su vektorske funkcije $\gamma : I \to \mathbb{R}^2$, $\gamma(t) = (x(t), y(t))$. Sliku[9] parametarski definirane funkcije jedne varijable kojoj je domena segment zovemo krivuljom[10].

Definicija 38 (Krivulja). *Krivulja u $\mathbb{R}^n$ je skup svih točaka oblika $\gamma(t) \in \mathbb{R}^n$ za $a \leq t \leq b$, gdje je $\gamma : [a, b] \to \mathbb{R}^n$ neprekidna funkcija.*

Kad govorimo o funkciji γ također ćemo ju nazivati krivuljom.

Napomena 10. *Formalno točnije bilo bi reći: neprekidna funkcija $\gamma : [a, b] \to \mathbb{R}^n$ se zove put, a skup svih točaka u $\mathbb{R}^n$ koje su oblika $\gamma(t)$ za $t \in [a, b]$ (tj. slika $\hat{\gamma} = \gamma([a, b])$ puta γ) se zove krivuljom u $\mathbb{R}^n$. Dakle: put je funkcija koja jednoj varijabli pridružuje točke u $\mathbb{R}^n$, a krivulja je skup tih pridruženih točaka. No, jednostavnosti radi nećemo dalje inzistirati na toj razlici.*

Specijalno, krivulje u ravnini se sastoje od točaka oblika

$$\gamma(t) = (x(t), y(t))$$

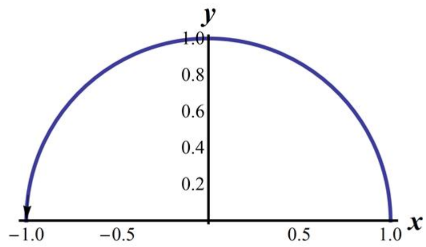
gdje je $\gamma : [a, b] \to \mathbb{R}^2$ neprekidna funkcija, a krivulje u prostoru se sastoje od točaka

$$\gamma(t) = (x(t), y(t), z(t))$$

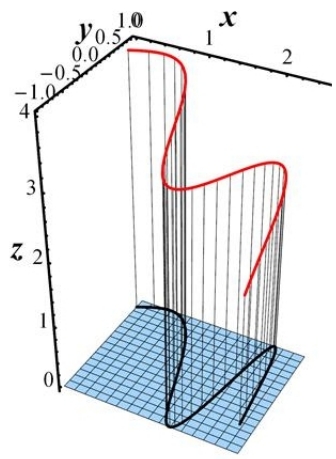
gdje je $\gamma : [a, b] \to \mathbb{R}^3$ neprekidna funkcija. Uvjet neprekidnosti znači da promatramo samo krivulje koje su „u jednom komadu". Krivulje ćemo označavati imenom pripadne funkcije, tj. s γ.

[9] Podsjećamo, slika funkcije $f : D \to K$ je skup $f(D) = \{f(x) : x \in D\} \subseteq K$, tj. to je skup svih vrijednosti u kodomeni koje funkcija stvarno postiže.

[10] Usporedite sljedeću definiciju s njenim pojednostavljenim specijalnim slučajem danim na str. **??** i **??**.



Slika 4.14: Orijentirana krivulja određena s $\gamma(t) = (\cos t, \sin t)$, $0 \leq t \leq \pi$.



Slika 4.15: Krivuljni integral prve vrste kao površina (crna krivulja leži u $x-y-$ravnini, a crvena je na grafu podintegralne funkcije).

Točka $A = \gamma(a)$ je početak, a $B = \gamma(b)$ je kraj krivulje γ. Ako je $A = B$ govorimo o zatvorenoj krivulji. Ako se sve točke krivulje nalaze na nekoj plohi, tj. ako je slika funkcije koja određuje krivulju podskup plohe, govorimo o krivulji na toj plohi. Krivulje su prirodno orijentirane, tj. postoji prirodan smjer obilaska krivulje, a to je u smjeru porasta varijable t.

Primjer 158. *Uzmimo funkciju* $\gamma : [0, \pi] \to \mathbb{R}^2$ *definiranu s* $\gamma(t) = (\cos t, \sin t) \in \mathbb{R}^2$. *Ta funkcija određuje krivulju kojoj je početak točka* $\gamma(0) = (\cos 0, \sin 0) = (1, 0)$*, a kraj joj je* $\gamma(\pi) = (\cos \pi, \sin \pi) = (-1, 0)$*. Ova krivulja nije zatvorena.*

Kad bismo crtali točke točke $(\cos t, \sin t)$ *za* t *iz domene, tj.* t *između* 0 *i* π *dobili bismo krivulju u ravnini: polukružnicu polumjera* 1 *sa središtem u ishodištu. Pritom je obilazimo od* $\gamma(0)$ *prema* $\gamma(\pi)$*, tj. orijentirana je kako je naznačeno na slici 4.14.*

Poput višestrukih integrala, krivuljni integrali su poopćenje jednostrukih određenih integrala. Pritom se ne povećava dimenzija područja integriranja: kod krivuljnih integrala područje integriranja je krivulja koja je podskup domene podintegralne funkcije, dakle je područje integriranja jednodimenzionalno. Krivuljni integrali mogu se računati za skalarne funkcije (krivuljni integrali prve vrste) i za vektorske funkcije (krivuljni integrali druge vrste). Krivuljni integral skalarne funkcije s dvije varijable po nekoj krivulji u ravnini možemo zamišljati kao površinu omeđenu grafom te funkcije, krivuljom koja je područje integriranja te vertikalama povučenim iz točaka te krivulje do grafa funkcije.

Definicija 39 (Krivuljni integral skalarne funkcije)**.** *Neka je $f:\Omega\to\mathbb{R}$ neka neprekidna skalarna funkcija od n varijabli te neka je γ krivulja u Ω (dakle, $\gamma:[a,b]\to\Omega$). Tada je integral od f (poznat i kao krivuljni integral prve vrste skalarne funkcije f) duž γ definiran s*

$$\int_\gamma f\,\mathrm{d}s = \int_a^b f(\gamma(t))\cdot||\gamma'(t)||\,\mathrm{d}t.$$

Pritom je $||\gamma'(t)||$ (pozitivni) drugi korijen sume kvadrata koordinata od $\gamma'(t)$.

Za krivulje u $\mathbb{R}^2$ i $\mathbb{R}^3$ gornja definicija poprima oblike

$$\int_\gamma f\,\mathrm{d}s = \int_a^b f(x(t),y(t))\sqrt{(x'(t))^2+(y'(t))^2}\,\mathrm{d}t,$$

odnosno

$$\int_\gamma f\,\mathrm{d}s = \int_a^b f(x(t),y(t),z(t))\sqrt{(x'(t))^2+(y'(t))^2+(z'(t))^2}\,\mathrm{d}t.$$

Posebno, duljina krivulje dobiva se integriranjem jedinične funkcije duž krivulje, tj.

$$l(\gamma) = \int_\gamma \mathrm{d}s = \int_a^b \sqrt{(x'(t))^2+(y'(t))^2}\,\mathrm{d}t$$

za ravninske krivulje γ i slično za prostorne.

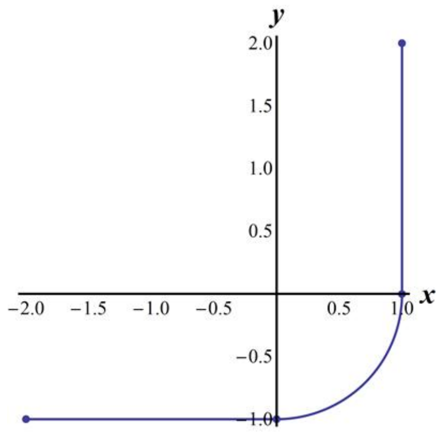
Primjer 159. *Izračunajmo integral $\int_\gamma xy^4\,\mathrm{d}s$ ako je γ desna polovina kružnice $x^2+y^2=1$ i obilazi se u smjeru suprotnom od kazaljke na satu. Parametarski γ možemo opisati s*

$$x(t) = \cos t,$$
$$y(t) = \sin t,$$
$$-\frac{\pi}{2}\le t\le\frac{\pi}{2}$$

pa je naš integral

$$\int_\gamma xy^4\,\mathrm{d}s = \int_{-\pi/2}^{\pi/2}\cos t\sin^4 t\sqrt{(-\sin t)^2+(\cos t)^2}\,\mathrm{d}t =$$

$$= \int_{-\pi/2}^{\pi/2}\cos t\sin^4 t\,\mathrm{d}t = \frac{\sin^5 t}{5}\bigg|_{-\pi/2}^{\pi/2} = 2.$$



Slika 4.16: Krivulja koja je po dijelovima glatka.

Primjer 160. *Krivuljni integral funkcije $f(x, y, z) = xyz$ po spirali zadanoj parametarski s $x(t) = \cos t$, $y(t) = \sin t$, $z(t) = 3t$ za $0 \leq t \leq 4\pi$ je*

$$\int_\gamma xyz\,\mathrm{d}s = \int_0^{4\pi} 3t\cos t\sin t\sqrt{(-\sin t)^2 + (\cos t)^2 + 3^2}\,\mathrm{d}t = -3\sqrt{10}\pi.$$

Ukoliko krivulju obilazimo obrnutim smjerom (tj. promijenimo joj orijentaciju), to neće promijeniti iznos krivuljnog integrala prve vrste. Pišemo:

$$\int_{-\gamma} f\,\mathrm{d}s = \int_\gamma f\,\mathrm{d}s.$$

Pritom je $-\gamma$ definirana s $-\gamma(t) = \gamma(-t)$, $a \leq t \leq b$.

Primjer 161. *Kružnicu zadanu parametarski s $x(t) = \cos t$, $y(t) = \sin t$, $0 \leq t \leq 2\pi$ obilazimo u smjeru suprotnom kazaljki na satu, a kružnicu zadanu parametarski s $x(t) = \cos(-t) = \cos t$, $y(t) = \sin(-t) = \sin t$, $0 \leq t \leq 2\pi$ obilazimo u smjeru kazaljke na satu.*

Ako je krivulja $\gamma = \gamma_1 \cup \gamma_2$ nastala spajanjem dvije krivulje γ_1 i γ_2 (formalno: $\gamma(t) = \gamma_1(t)$ za $a \leq t \leq c$ i $\gamma(t) = \gamma_2(t)$ za $c \leq t \leq b$), onda je integral skalarne funkcije duž γ jednak zbroju integrala te funkcije duž γ_1 i γ_2:

$$\int_{\gamma_1\cup\gamma_2} f\,\mathrm{d}s = \int_{\gamma_1} f\,\mathrm{d}s + \int_{\gamma_2} f\,\mathrm{d}s.$$

Primjer 162. *Izračunajmo integral funkcije $f(x, y) = x^2 + y$ po putu $\gamma = ABCD$, gdje je $A = (-2, -1)$, $B = (0, -1)$, $C = (1, 0)$ i $D = (1, 2)$, pri čemu su dijelovi krivulje od A do B i od C do D dužine, a dio krivulje od B do C je četvrtina jedinične kružnice.*

Prema gornjoj formuli vrijedi:

$$\int_\gamma f\,\mathrm{d}s = \int_{AB} f\,\mathrm{d}s + \int_{BC} f\,\mathrm{d}s + \int_{CD} f\,\mathrm{d}s.$$

Da bismo izračunali tri potrebna integrala trebaju nam parametarske jednadžbe odgovarajućih dijelova puta. Skiciramo li sliku 4.16, vidimo:

$$AB: \quad x(t) = t,\ y(t) = -1,\ -2 \le t \le 0; \quad x'(t) = 1,\ y'(t) = 0,$$

$$BC: \quad x(t) = \cos t,\ y(t) = \sin t,\ -\frac{\pi}{2} \le t \le 0; \quad x'(t) = -\sin t,$$

$$CD: \quad x(t) = 1,\ y(t) = t,\ 0 \le t \le 2; \quad x'(t) = 0,\ y'(t) = 1.$$

Vidimo da je u sva tri slučaja $\sqrt{x'(t)^2 + y'(t)^2} = 1$. *Stoga je*

$$\int_{AB} f\,\mathrm{d}s = \int_{-2}^{0} (t^2 + (-1)) \cdot 1\,\mathrm{d}t = \frac{2}{3},$$

$$\int_{BC} f\,\mathrm{d}s = \int_{-\pi/2}^{0} (\cos^2 t + \sin t) \cdot 1\,\mathrm{d}t = \frac{\pi}{4},$$

$$\int_{CD} f\,\mathrm{d}s = \int_{0}^{2} (1 + t) \cdot 1\,\mathrm{d}t = 4$$

pa je ukupni integral

$$\int_\gamma (x + y)\,\mathrm{d}s = \frac{2}{3} + \frac{\pi}{4} + 4 = \frac{14}{3} + \frac{\pi}{4}.$$

U primjenama su češći krivuljni integrali druge vrste.

Definicija 40 (Krivuljni integral vektorskog polja). *Neka je* $F = (F_1, \ldots, F_n) : \Omega \to \mathbb{R}^n$ *neka vektorska funkcija od* n *varijabli (vektorsko polje) te neka je* $\omega = \sum_{i=1}^n F_i\,\mathrm{d}x_i$ *diferencijal i* γ *krivulja u* Ω. *Tada je integral od* ω *(poznat i kao krivuljni integral druge vrste vektorskog polja* $F = (F_1, \ldots, F_n)$*) duž* γ *definiran s*

$$\int_\gamma \omega = \int_a^b F(\gamma(t)) \cdot \gamma'(t)\,\mathrm{d}t,$$

gdje je s $\cdot$ *označen uobičajeni skalarni produkt u* $\mathbb{R}^n$.

U definiciji je $F(\gamma(t))$ oznaka za $(F_1(\gamma(t)), F_2(\gamma(t)), \ldots, F_n(\gamma(t)))$, a ako je $\gamma(t) = (x_1(t), x_2(t), \ldots, x_n(t))$ onda je $\gamma'(t) = (x_1'(t), x_2'(t), \ldots, x_n'(t))$.

Posebno, za slučaj $n = 2$ uz standardne oznake koordinata imamo

$$\int_\gamma M(x, y)\,\mathrm{d}x + N(x, y)\,\mathrm{d}y = \int_a^b (M(x(t), y(t))x'(t) + N(x(t), y(t))y'(t))\,\mathrm{d}t.$$

Prijelaz u integriranje po parametru t možemo zamišljati kao uvrštavanje parametarskih jednadžbi krivulje na mjesto x i y, pri čemu $\mathrm{d}x$ postaje $x'(t)\,\mathrm{d}t$, a $\mathrm{d}y$ postaje $y'(t)\,\mathrm{d}t$.

Primjer 163. *Izračunajmo integral*

$$\int_\gamma x\,\mathrm{d}x + xy^2\,\mathrm{d}y$$

po dijelu pravca $y = 2x + 1$ za x između 0 i 1.

Ovdje je γ opisana s[11]

$$\gamma(t) = (t, 2t + 1), \quad 0 \le t \le 1.$$

Stoga je

$$\int_\gamma x\,\mathrm{d}x + xy^2\,\mathrm{d}y = \int_0^1 (t \cdot 1 + t(2t+1)^2 \cdot 2)\,\mathrm{d}t = \frac{37}{6}.$$

Oznaka $\oint$ umjesto $\int$ koristi se kad se želi naglasiti da se integrira po zatvorenoj krivulji.

Primjer 164. *Krivuljni integral diferencijala $\omega = e^x\,\mathrm{d}x + xy\,\mathrm{d}y$ po jediničnoj kružnici u ravnini je*

$$\oint \omega = \int_0^{2\pi} (e^{\cos t} \cdot (-\sin t) + \cos t \sin t \cdot \cos t)\,\mathrm{d}t = e^\pi \mathrm{sh}\,\pi.$$

Primjer 165. *Izračunajmo krivuljni integral vektorskog polja $F(x, y, z) = 8x^2yz\,\overrightarrow{i} + 5z\,\overrightarrow{j} - 4xy\,\overrightarrow{k}$ po krivulji γ zadanoj parametarski s $x(t) = t$, $y(t) = t^2$, $z(t) = t^3$, $0 \le t \le 1$. Po definiciji imamo*

$$\omega = 8x^2yz\,\mathrm{d}x + 5z\,\mathrm{d}y - 4xy\,\mathrm{d}z,$$

$$\int_\gamma \omega = \int_0^1 8t^2t^2t^3 \cdot 1 + 5t^3 \cdot 2t - 4t \cdot t^2 \cdot 3t^2\,\mathrm{d}t = \int_0^1 8t^7 + 10t^4 - 12t^5\,\mathrm{d}t = 1.$$

Za krivuljne integrale druge vrste također vrijedi da integriranje po uniji krivulja odgovara zbroju integrala:

$$\int_{\gamma_1 \cup \gamma_2} \omega = \int_{\gamma_1} \omega + \int_{\gamma_2} \omega.$$

Primjer 166. *Izračunajmo krivulni integral diferencijala $y^2\,\mathrm{d}x + xy\,\mathrm{d}y$ po krivulji ABC koja je unija dvije dužine $\overline{AB}$ i $\overline{BC}$ gdje je $A = (-1, 1)$, $B = (0, 0)$ i $C = (2, 2)$, s tim da se krivulja obilazi od A preko B do C. Koliko taj integral iznosi ako se krivulja obiđe obrnutim smjerom?*

Dužina $\overline{AB}$ je parametrizirana s $x(t) = t$, $y(t) = -t$ za $-1 \le t \le 0$, a dužina $\overline{BC}$ je parametrizirana s $x(t) = t$, $y(t) = t$ za $0 \le t \le 2$. Stoga je

$$\int_{ABC} y^2\,\mathrm{d}x + xy\,\mathrm{d}y = \int_{-1}^0 (-t)^2 \cdot 1 + t \cdot (-t) \cdot (-1)\,\mathrm{d}t + \int_0^2 (-t)^2 \cdot 1 + t \cdot t \cdot 1\,\mathrm{d}t =$$

[11] Podsjetimo se: Ako je krivulja u ravnini γ zadana eksplicitnom jednadžbom funkcije $y = f(x)$ za $x \in I$, njen parametarski opis se dobiva uz supstituciju $x = t$, tj. $\gamma(t) = (t, f(t))$ za $t \in I$.

$$= \int_{-1}^{0} 2t^2 \,\mathrm{d}t + \int_{0}^{2} 2t^2 \,\mathrm{d}t = \int_{-1}^{2} 2t^2 \,\mathrm{d}t = 6.$$

Za obilazak u suprotnom smjeru imamo: $\overline{CB}$ je $x(t) = -t$, $y(t) = -t$ za $0 \leq t \leq 2$, a $\overline{BA}$ je $x(t) = -t$, $y(t) = t$ za $-1 \leq t \leq 0$. Slijedi

$$\int_{CBA} y^2 \,\mathrm{d}x + xy \,\mathrm{d}y = \int_0^2 (-t)^2 \cdot (-1) + (-t) \cdot (-t) \cdot (-1) \,\mathrm{d}t + \int_{-1}^{0} t^2 \cdot (-1) + (-t) \cdot t \cdot 1 \,\mathrm{d}t =$$

$$= \int_0^2 -2t^2 \,\mathrm{d}t + \int_{-1}^{0} -2t^2 \,\mathrm{d}t = -6 = -\int_{ABC} y^2 \,\mathrm{d}x + xy \,\mathrm{d}y.$$

U prethodnom smo primjeru vidjeli da je promjena smjera obilaska (tj. orijentacije) krivulje promijenila predznak krivuljnog integrala druge vrste. To vrijedi i općenito:

$$\int_{-\gamma} \omega = -\int_{\gamma} \omega.$$

Dakle: krivuljni integrali prve vrste ne ovise o orijentaciji krivulje, a krivuljni integrali druge vrste ovise.

Napomena 11. *Iz definicija je vidljivo da su krivuljni integrali prve i druge vrste linearni.*

U mnogim za primjene važnim slučajevima se izračunavanje krivuljnih integrala druge vrste bitno pojednostavljuje. To se događa ako iznos integrala ovisi samo o početku i kraju krivulje duž koje integriramo, a ne i o samoj krivulji koja spaja te dvije točke. Kako znati koje diferencijale možemo na takav jednostavniji način integrirati? Preciznije, za kakve ω je $\int_\gamma \omega = f(B) - f(A)$ za svaku krivulju γ kojoj je A početak, a B kraj? Odgovor je jednostavan: točno za one diferencijale koji su diferencijali neke skalarne funkcije.

Definicija 41 (Egzaktan diferencijal)**.** *Diferencijal ω zovemo egzaktnim (ili potpunim) diferencijalom ako postoji skalarna funkcija f takva da je ω njen diferencijal (tj. $\omega = \mathrm{d}f = \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} \,\mathrm{d}x_i$.).*

Vrijedi:

Teorem 9. *Za diferencijal ω ekvivalentne su tvrdnje:*

(i) Integral od ω ne ovisi o putu, tj. $\int_{\gamma_1} \omega = \int_{\gamma_2} \omega$ za svake dvije krivulje γ_1 i γ_2 koje imaju zajedničke početke i zajedničke krajeve.

(ii) $\oint_\gamma \omega = 0$ za sve zatvorene krivulje.

(iii) ω je egzaktan diferencijal.

To znači: krivuljni integrali druge vrste po zatvorenim krivuljama od egzaktnih diferencijala uvijek su jednaki nula i obrnuto, ako su svi krivuljni integrali druge vrste po svim mogućim zatvorenim krivuljama nekog diferencijala jednaki nula, onda je taj diferencijal egzaktan. Posebno, za egzaktne diferencijale vrijedi slijedeća generalizacija Newton-Leibnizove formule:

$$\int_\gamma \mathrm{d}f = \int_\gamma \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i}\,\mathrm{d}x_i = f(B) - f(A),$$

gdje je γ bilo koja krivulja od A do B. Treba imati na umu: ako je f zadana (poznate formule) i diferencijabilna, onda je po definiciji $\mathrm{d}f$ egzaktan.

Napomena 12. *Kao oznaka integrala u zadnjoj formuli često se koristi i* $\int_\gamma \nabla f \cdot \mathrm{d}\overrightarrow{r}$*, što je u skladu s ranijom definicijom diferencijala skalarne funkcije* f *ako se koristi oznaka* $\mathrm{d}\overrightarrow{r}$ *kao kratica za* $(\mathrm{d}x_1, \mathrm{d}x_2, \ldots, \mathrm{d}x_n)^t$.

Napomena 13. *Već smo rekli da je* F *konzervativno vektorsko polje ako postoji skalarna funkcija* f *takva da je* $\nabla f = F$*. Drugačiji način da kažemo istu stvar je:* F *je konzervativno točno ako je diferencijal* $\sum_i F_i\,\mathrm{d}x_i$ *egzaktan. Stoga krivuljni integrali konzervativnih vektorskih polja ne ovise krivulji integriranja, već samo o početnoj i krajnjoj točki krivulje.*

Primjer 167. *Integrirajmo diferencijal funkcije* $f(x,y,z) = 2x - e^y z$ *po bilo kojoj krivulji od ishodišta do točke* $(1,2,3)$*:*

$$\int_\gamma \mathrm{d}f = f(1,2,3) - f(0,0,0) = 2 - 3e^2.$$

Očigledno je nemoguće ispitivanjem svih mogućih integrala po zatvorenim krivuljama ispitati je li diferencijal egzaktan, štoviše: u praksi bismo to rado znali prije računanja krivuljnih integralâ jer nam to pojednostavljuje njihovo izračunavanje. Pitanje na koje stoga treba odgovoriti je: kako iz formule diferencijala saznati je li egzaktan? Odgovor daje:

Teorem 10. *Neka su sve* F_i *glatke fukcije (diferencijabilne funkcije s neprekidnim diferencijalom) s domenom koja je oblika*[12] $\langle a_1, b_1\rangle \times \langle a_2, b_2\rangle \times \ldots \times \langle a_n, b_n\rangle$ *(tzv. otvoreni paralelepiped). Diferencijal* $\omega = \sum_i F_i\,\mathrm{d}x_i$ *je egzaktan ako i samo ako je*

$$\frac{\partial F_i}{\partial x_j} = \frac{\partial F_j}{\partial x_i}$$

za sve $i, j = 1, \ldots, n$.

Posebno, za slučaj $n = 2$ imamo: diferencijal $M\,\mathrm{d}x + N\,\mathrm{d}y$ je egzaktan točno ako vrijedi

$$\frac{\partial M}{\partial y} = \frac{\partial N}{\partial x}$$

(uz uvjet da je zajednička domena od M i N otvoreni pravokutnik $\langle a,b\rangle \times \langle c,d\rangle$, primjerice cijela ravnina ili pak prvi kvadrant). Uvjet $\frac{\partial M}{\partial y} = \frac{\partial N}{\partial x}$ poznat je kao Eulerov uvjet egzaktnosti diferencijala.

[12] Teorem vrijedi i za neke druge oblike domena.

Napomena 14. *Ako je funkcija f dvaput diferencijabilna, Schwarzov teorem nam daje $\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial f}{\partial x}$. Egzaktnost diferencijala $M\,\mathrm{d}x + N\,\mathrm{d}y$ znači da postoji f takva da je $\frac{\partial f}{\partial x} = M$ i $\frac{\partial f}{\partial y} = N$, tj. ako je (kako je to gotovo u svim primjenama) f dvaput diferencijabilna, Eulerov uvjet dobivamo uvrštavanjem zadnje dvije jednakosti u Schwarzovu.*

Primjer 168. *Diferencijal $y^2\,\mathrm{d}x + 2xy\,\mathrm{d}y$ je egzaktan jer je $\frac{\partial y^2}{\partial y} = 2y = \frac{\partial 2xy}{\partial x}$. Stoga je $\oint y^2\,\mathrm{d}x + 2xy\,\mathrm{d}y = 0$ za integriranje po bilo kojoj zatvorenoj krivulji. Nadalje, znamo da postoji f (iako joj ne znamo formulu) takva da je $\mathrm{d}f = y^2\,\mathrm{d}x + 2xy\,\mathrm{d}y$, tj. da je $\frac{\partial f}{\partial x} = y^2$ i $\frac{\partial f}{\partial y} = 2xy$.*

S druge strane, diferencijal $3x^2y\,\mathrm{d}x + y\,\mathrm{d}y$ nije egzaktan jer je $\frac{\partial 3x^2y}{\partial y} = 3x^2 \neq 0 = \frac{\partial y}{\partial x}$. Stoga bismo pri računu integrale $\oint 3x^2y\,\mathrm{d}x + y\,\mathrm{d}y$ morali raspisivati koristeći odgovarajuće parametarske jednadžbe krivulja po kojima integriramo i ne postoji funkcija takva da je $\frac{\partial f}{\partial x} = 3x^2y$ i $\frac{\partial f}{\partial y} = y$.

☼ **Ponovimo bitno...** Krivulja u $\mathbb{R}^n$ je funkcija $\gamma : [a, b] \to \mathbb{R}^n$, $\gamma(t) = (x(t), y(t), \ldots)$, odnosno slika te funkcije koja se sastoji od svih točaka $\gamma(t)$, $a \le t \le b$. Krivuljni integral skalarne funkcije f od n varijabli po krivulji γ u $\mathbb{R}^n$ je broj

$$\int_\gamma f\,\mathrm{d}s = \int f(x(t), y(t), \ldots)\sqrt{x'(t)^2 + y'(t)^2 + \ldots}\,\mathrm{d}t.$$

Krivuljni integral vektorskog polja $F = (M, N, \ldots)$ po krivulji γ je broj

$$\int_\gamma M\,\mathrm{d}x + N\,\mathrm{d}y + \ldots = \int_a^b (M(x(t), y(t), \ldots)x'(t) + N(x(t), y(t), \ldots)y'(t) + \ldots)\,\mathrm{d}t.$$

Promjenom smjera obilaska krivulje, krivuljni integral druge vrste mijenja predznak.

Krivuljni integral vektorskog polja F ne ovisi o putu integracije točno ako je $M\,\mathrm{d}x + N\,\mathrm{d}y + \ldots$ egzaktan diferencijal; ako je to diferencijal funkcije f onda vrijedi $\int_\gamma M\,\mathrm{d}x + N\,\mathrm{d}y + \ldots = \int_\gamma \mathrm{d}f = f(\gamma(b)) - f(\gamma(a))$, tj. iznos tog integrala je razlika vrijednosti funkcije f na kraju i na početku krivulje γ. Diferencijal ω je egzaktan ako i samo ako za svaki izbor dvije varijable x_i i x_j vrijedi: ako je uz $\mathrm{d}x_i$ u ω funkcija M, a uz $\mathrm{d}x_j$ funkcija N, onda je parcijalna derivacija od M po x_j jednaka parcijalnoj derivaciji od N po x_i. ☺

4.9 Primjene funkcija više varijabli u fenomenološkoj kemijskoj termodinamici

Stanje (termodinamičkog) sustava opisuje se preko svojstava, tj. putem nekih mjerljivih osobina (dakle, svojstva kao iznose imaju realne brojeve). Ako je stanje sustava opisano sa m svojstava, možemo ga poistovjetiti s uređenom m-torkom brojeva $(x_1, \ldots, x_m)$, tj. točkom X u $\mathbb{R}^m$, pa sva moguća stanja promatranog sustava (i time sam sustav) možemo poistovjetiti s nekim (otvorenim[13]) podskupom $\Omega \subseteq \mathbb{R}^m$. Svako (mjerljivo)

[13] Skup je otvoren ako se oko svake točke u njemu može opisati interval, krug, kugla, ... tako da cijela — izuzev ruba — leži u tom skupu. Otvoreni interval i cijeli $\mathbb{R}^n$ su najjednostavniji primjeri otvorenih skupova.

svojstvo sustava možemo shvatiti kao skalarnu funkciju f definiranu na Ω. Vrijednosti $f(X)$ su iznosi tog svojstva u stanju X.

Primjer 169. *Recimo da smo kao sustav koji proučavamo odabrali neki plin stalnog sastava. Tada su nam za opis stanja tog sustava dovoljni podaci o tlaku, volumenu i temperaturi, tj. možemo sustav promatrati kao $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$, pri čemu elemente od Ω (pojedina moguća stanja) označavamo (p, V, T) ili, preciznije, $\left(\frac{p}{p^\ominus}, \frac{V}{1\,\mathrm{L}}, \frac{T}{1\,\mathrm{K}}\right)$. Pritom je s $p^\ominus$ označen standardni tlak koji iznosi 1* bar*. Sustav osim navedena tri svojstva, temeljem kojih identificiramo njegovo stanje, ima i mnoga druga, primjerice koncentraciju c. U svakom stanju $\left(\frac{p}{p^\ominus}, \frac{V}{1\,\mathrm{L}}, \frac{T}{1\,\mathrm{K}}\right)$ promatrani plin ima određenu koncentraciju. Ako je primjerice plin idealan, onda je $\frac{c}{c^\ominus} = f\left(\frac{p}{p^\ominus}, \frac{V}{1\,\mathrm{L}}, \frac{T}{1\,\mathrm{K}}\right) = \frac{p}{RTc^\ominus}$, dakle je $c/c^\ominus$ funkcija definirana na Ω koja svakom stanju (tlaku u barima, volumenu u litrama i temperaturi u kelvinima) pridružuje odgovarajuću koncentraciju (u molima po litri).*

Procesi su promjene stanja sustava. Ukoliko se u nekom procesu svojstva mijenjaju za određen konačni iznos, govorimo o konačnim procesima, a ako se radi o promjeni za beskonačno malen iznos, govorimo o infinitezimalnim procesima. Reverzibilan proces je onaj čiji smjer možemo obrnuti infinitezimalnom promjenom nekog od svojstava. Svaki infinitezimalni proces može se vizualizirati kao glatka krivulja γ u skupu Ω; točke na toj krivulji predstavljaju sva moguća stanja tokom procesa. Promjena Δf nekog svojstva f u procesu γ se može poistovjetiti s krivuljnim integralom druge vrste $\int_\gamma \omega_f$, gdje je ω_f diferencijal (ne nužno egzaktan) kojim je opisana infinitezimalna promjena svojstva f. Među svojstvima sustava neka su istaknuta i zovu se funkcije stanja.

Definicija 42 (Funkcija stanja)**.** *Funkcija stanja je svojstvo sustava za koje vrijedi: promjena iznosa tog svojstva tokom bilo kojeg procesa ne ovisi o samom procesu, nego samo o početnom i konačnom stanju.*

Koristeći definiciju egzaktnog diferencijala i krivuljnog integrala druge vrste vidimo: funkcije stanja su točno ona svojstva f za koja $\int_\gamma \omega_f$ ovisi samo o početnoj i krajnjoj točki krivulje γ, a ne i o samoj krivulji, tj. ona svojstva za koje je diferencijal $\omega_f = \mathrm{d}f$ egzaktan: f je funkcija stanja ako i samo ako je ω_f egzaktan diferencijal. Kako je uz poznavanje formule za f uvijek $\mathrm{d}f$ egzaktan, funkcije stanja su sva svojstva koja su odrediva na tzv. apsolutnoj ljestvici. To su npr. volumen, tlak, temperatura, množina, ...

Primjer 170. *Idealni plin opisan je jednadžbom $pV = nRT$, tj. $p = \frac{nRT}{V}$. Ako dozvoljavamo promjene svih vrijednosti osim R, možemo pisati*

$$\mathrm{d}p(n,T,V) = \frac{\partial p}{\partial n}(n,T,V)\,\mathrm{d}n + \frac{\partial p}{\partial T}(n,T,V)\,\mathrm{d}T + \frac{\partial p}{\partial V}(n,T,V)\,\mathrm{d}V =$$

$$= \frac{RT}{V}\,\mathrm{d}n + \frac{nR}{V}\,\mathrm{d}T - \frac{nRT}{V^2}\,\mathrm{d}V.$$

Zanimljivija je situacija sa svojstvima koja se mogu mjeriti samo na tzv. intervalnoj ljestvici, tj. ona za koja su opisive samo promjene njihovih iznosa između dva stanja, a ne i apsolutni iznosi tih svojstava. Za takva svojstva f stoga možemo određivati samo $\Delta f = \int_\gamma \omega_f$, gdje je ω_f diferencijal koji indirektno opisuje svojstvo f, točnije njegove infinitezimalno male promjene.

Prije nastavka, ponovimo kako se matematički predstavljaju osnovni termodinamički pojmovi:

- Sustav je skup Ω u $\mathbb{R}^m$;
- Stanje sustava je točka $X \in \Omega$ čije koordinate se mogu interpretirati kao (osnovna) svojstva;
- Svojstvo je skalarna funkcija na Ω (osnovna svojstva, tj. koordinate točaka iz Ω možemo shvatiti kao funkcije koje stanju $X \in \Omega$ pridružuju pojedine njegove koordinate);
- Proces je krivulja γ u Ω (početak krivulje odgovara početnom stanju sustava, a kraj krivulje odgovara stanju nakon procesa);
- Promjena svojstva f tokom procesa γ je $\Delta f = \int_\gamma \omega_f$; specijalno za funkcije stanja f vrijedi $\Delta f = \int_\gamma \mathrm{d}f = f(B) - f(A)$, gdje je A početno, a B konačno stanje procesa γ.

Za rad i toplinu poznato je da iznos promjene (tj. izvršeni rad odnosno razmijenjena toplina) ovisi o načinu na koji je ta promjena postignuta. Stoga odgovarajući diferencijali nisu egzaktni. Usprkos tome, uobičajeno ih je označavati s $\mathrm{d}w$ i $\mathrm{d}q$.

Napomena 15. *Oznake* $\mathrm{d}w$ *i* $\mathrm{d}q$ *su uobičajene, no nažalost zbunjujuće jer u standardnoj matematičkoj notaciji je svaki diferencijal oblika* $\mathrm{d}f$ *po definiciji egzaktan. Sretnije oznake za te diferencijale bile bi primjerice* ω_w *i* ω_q*, no one nisu uobičajene te ih nećemo koristiti.*

Pomoću diferencijala mogu se zapisati precizni oblici prvog i drugog glavnog stavka termodinamike.

Prvi glavni stavak kaže da se energija sustava može promijeniti samo radom ili prijenosom topline. No, ovaj stavak je ujedno i definicija unutrašnje energije. Prvi stavak glasi: (za svaki sustav) postoji jedinstveno, jednoznačno, neprekidno i ekstenzivno svojstvo stanja (funkcija stanja) sustava koje zovemo unutrašnja energija sustava, u oznaci U; ona je u izoliranom sustavu konstantna, a u svim neadiabatnim procesima njezina promjena jednaka je zbroju izvršenog rada i prenesene topline. U nediferencijalnom obliku ovaj se zakon može zapisati kao $\Delta U = w + q$, a za infinitezimalne procese on poprima diferencijalni oblik

$$\mathrm{d}U = \mathrm{d}w + \mathrm{d}q.$$

Drugi glavni stavak definira entropiju i glasi: (za svaki sustav) postoji jedinstveno, jednoznačno, neprekidno i ekstenzivno svojstvo stanja (funkcija stanja) sustava koje

zovemo entropija, u oznaci S; to je svojstvo karakterizirano time da za reverzibilne procese vrijedi
$$\mathrm{d}S = \frac{\mathrm{d}q}{T}.$$
Pritom, termodinamička temperatura T zapravo predstavlja tzv. Eulerov multiplikator koji neegzaktni diferencijal $\mathrm{d}q$ pretvara u egzaktni $\mathrm{d}S$. Općenito, za sve infinitezimalne procese infinitezimalna promjena entropije iznosi bar koliko i reverzibilno preneseni infinitezimalni iznos topline podijeljen s termodinamičkom temperaturom. To se često bilježi formulom $\mathrm{d}S \geq \frac{\mathrm{d}q_{\mathrm{rev}}}{T}$, gdje je q_{rev} toplina prenesena reverzibilno, no zapravo je ta formula matematički gledano besmislena jer se radi o nejednakosti koja uspoređuje dva linearna funkcionala, a ne postoji definiran uređaj među linearnim funkcionalima. Tu se zapravo misli na nejednakost $\mathrm{d}S(X)(\Delta X) \geq \frac{\mathrm{d}q_{\mathrm{rev}}}{T}(X)(\Delta X)$ za sve $X \in \gamma$, gdje je γ krivulja koja opisuje proces, a ΔX je n-torka malih promjena svih temeljnih svojstava sustava. Nediferencijalni oblik drugog stavka za konačne procese poprima oblik $\Delta S \geq \frac{q}{T}$.

Primjer 171. *Ukoliko je jedini mogući rad u nekom sustavu volumni, definiran diferencijalom $\mathrm{d}w = -p\,\mathrm{d}V$, te ako se odvija reverzibilni proces, prema prvom i drugom glavnom stavku termodinamike vrijedi*

$$\mathrm{d}U(X) = \mathrm{d}w(X) + \mathrm{d}q(X) = -p(X)\,\mathrm{d}V + T(X)\,\mathrm{d}S$$

u svakom stanju sustava X, $X = (V, S)$. Obično se kraće piše

$$\mathrm{d}U = -p\,\mathrm{d}V + T\,\mathrm{d}S.$$

Termodinamički potencijal je svojstvo stanja koje ima (lokalni) minimum u ravnotežnom stanju. Ovisno o uvjetima, kao termodinamički potencijal pogodno je neko od svojstava U, $H = U + pV$ (entalpija), $A = U - TS$ (Helmholtzova energija) ili $G = H - TS = U + pV - TS$ (Gibbsova energija). U svim slučajevima se utvrđivanje da je pojedino svojstvo pogodno kao termodinamički potencijal temelji na prvom i drugom stavku termodinamike te na karakterizaciji termodinamičkog potencijala Φ formulom[14] $\mathrm{d}\Phi = 0$ (ako je jedini mogući rad volumni). Primjerice, termodinamički potencijal za izobarne izotermne uvjete je Gibbsova energija. Naime, uz takve uvjete su $\mathrm{d}p$ i $\mathrm{d}T$ nulfunkcionali te za reverzibilne procese u kojima nema nevolumnog rada imamo

$$\mathrm{d}G = \mathrm{d}(U + pV - TS) = \mathrm{d}w + \mathrm{d}q + p\,\mathrm{d}V + V\,\mathrm{d}p - T\,\mathrm{d}S - S\,\mathrm{d}T =$$

$$= -p\,\mathrm{d}V + T\,\mathrm{d}S + p\,\mathrm{d}V - T\,\mathrm{d}S = 0.$$

Općenito (ako uvjeti možda nisu izotermni i/ili izobarni) je $\mathrm{d}G = V\,\mathrm{d}p - S\,\mathrm{d}T$.

Zadatak 11. *Dokažite da je unutrašnja energija U termodinamički potencijal za izohorne adiabatne sustave (konstantan V i S, tj. $\mathrm{d}V$ i $\mathrm{d}S$ su nulfunkcionali).*

[14] Precizniji uvjet je oblika $\mathrm{d}\Phi = X\,\mathrm{d}x$ gdje $X\,\mathrm{d}x$ predstavlja poopćeni rad (sve oblike nevolumnog rada).

Pri rješavanju prethodnog zadatka kombiniranjem prvog i drugog stavka termodinamike dobit ćete korisnu jednakost linearnih funkcionala koja vrijedi za reverzibilne procese u kojima je jedini mogući rad volumni:

$$\mathrm{d}U = T\,\mathrm{d}S - p\,\mathrm{d}V.$$

Zadatak 12. *Dokažite da je entalpija $H = U + pV$ termodinamički potencijal za izobarne adiabatne sustave (konstantan p i S, tj. $\mathrm{d}p$ i $\mathrm{d}S$ su nulfunkcionali).*

Pri rješavanju prethodnog zadatka dobije se sljedeća jednakost diferencijala (koja vrijedi za reverzibilne procese u kojima je jedini mogući rad volumni):

$$\mathrm{d}H = \mathrm{d}q + V\,\mathrm{d}p.$$

Vidimo: u (infinitezimalnim) izobarnim procesima promjena entalpije jednaka je toplini prenesenoj između sustava i okoline.

Zadatak 13. *Dokažite da je Helmholtzova energija $A = H - TS$ termodinamički potencijal za izohorne izotermne sustave (konstantan V i T, tj. $\mathrm{d}V$ i $\mathrm{d}T$ su nulfunkcionali). U tu svrhu prvo izvedite formulu*

$$\mathrm{d}A = -p\,\mathrm{d}V - S\,\mathrm{d}T.$$

Po definicijama danim prvim i drugim stavkom su unutrašnja energija U i entropija S funkcije stanja. Funkcije stanja su i Gibbsova energija $G = U + pV - TS$, entalpija $H = U + pV$ te Helmholtzova energija $A = U - TS$ jer su razlike odnosno zbrojevi funkcija stanja. Stoga su (iako ne znamo formule za njih pa ne znamo direktno izračunati njihove diferencijale) njihovi diferencijali egzaktni te za sve njih vrijedi

$$\oint \mathrm{d}Y = 0,$$

$$\Delta Y = \int_A^B \mathrm{d}Y,$$

gdje je Y bilo koje od svojstava U, G, H, A, S. Pritom su A i B bilo koja dva stanja sustava, a $\int_A^B$ označava krivuljni integral po bilo kojoj krivulji od A do B.

U kemijskoj termodinamici česte su oznake poput $\left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T$ kojima se želi istaknuti da nas zanima promjena Gibbsove energije G obzirom na promjenu tlaka u izotermnim uvjetima. Strogo matematički gledano, takve oznake su besmislene jer su po definiciji pri određivanju parcijalne derivacije sve varijable funkcije, ma koliko ih bilo, izuzev varijable po kojoj deriviramo smatraju se konstantnim. Ipak, kako se u kemijskoj termodinamici rijetko na početku ističe o kojim varijablama svojstvo ovisi (nije uobičajeno pisati $G = G(T, p)$) jer se isto svojstvo može promatrati u različitim okolnostima, oznaka $\left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T$ ističe da funkcija G u promatranom kontekstu ovisi samo o dvije varijable T i p. Nadalje, u duljim računima za različite uvjete takva oznaka olakšava shvaćanje koja svojstva se trenutno razmatraju. Označeno kako bilo, $\left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T$ ili $\frac{\partial G}{\partial p}$ ima isti smisao: procjenu promjene vrijednosti svojstva G ako je promjena svojstva p infinitezimalno mala, a sva ostala svojstva se ne mijenjaju.

Iskoristimo to za dobivanje Gibbs-Helmholtzove relacije za Gibbsovu energiju i entalpiju (tzv. druga Gibbs-Helmholtzova relacija). Ona se dobiva iz definicije egzaktnog diferencijala. Kako je $G = H - TS$, bez pretpostavke o konstantnosti nekog od svojstava imamo (vidi stranu 124)

$$\mathrm{d}G = V\,\mathrm{d}p - S\,\mathrm{d}T.$$

Kako je Gibbsova energija funkcija stanja, $\mathrm{d}G$ je egzaktan, tj. oblika

$$\mathrm{d}G = \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T \mathrm{d}p + \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p \mathrm{d}T.$$

Slijedi:

$$\left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T = V, \quad \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p = -S.$$

Uvrštavanje posljednje jednakosti u definiciju $G = H - TS$ daje Gibbs-Helmholtzovu relaciju

$$G = H + T\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p$$

odnosno

$$H = G - T\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p.$$

Zadatak 14. *Prva Gibbs-Helmholtzova relacija na sličan način povezuje unutrašnju i Helmholtz-ovu energiju:*

$$U = A - T\left(\frac{\partial A}{\partial T}\right)_V.$$

Izvedite prvu Gibbs-Helmholtz-ovu relaciju.

I četiri Maxwellove formule se mogu dobiti direktno iz definicije egzaktnog diferencijala, koristeći Eulerov kriterij egzaktnosti. Svaka od Maxwellovih formula dobiva se iz egzaktnosti jednog od diferencijalâ $\mathrm{d}U$, $\mathrm{d}H$, $\mathrm{d}A$ i $\mathrm{d}G$. Primjerice, kako je

$$\mathrm{d}G = -S\,\mathrm{d}T + V\,\mathrm{d}p,$$

budući je $\mathrm{d}G$ egzaktan, mora zadovoljavati Eulerov kriterij pa je

$$-\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p.$$

To je jedna od Maxwellovih formula.

Zadatak 15. *Iz egzaktnosti* $\mathrm{d}U = T\,\mathrm{d}S - p\,\mathrm{d}V$, $\mathrm{d}H = T\,\mathrm{d}S + V\,\mathrm{d}p$ *i* $\mathrm{d}A = -S\,\mathrm{d}T - p\,\mathrm{d}V$ *izvedite ostale tri Maxwellove formule.*

Napomena 16. *Općenito se parcijalne derivacije jedne termodinamičke funkcije stanja po drugoj zovu termodinamički koeficijenti.*

Parcijalne molarne veličine $\tilde{Y}_\mathrm{J}$ opisuju promjenu ekstenzivnog (dakle o veličini sustava ovisnog) svojstva obzirom na male promjene množine jednog sastojka J sustava. Preciznije:

$$\tilde{Y}_\mathrm{J} = \frac{\partial Y}{\partial n_\mathrm{J}}.$$

Jedna od najvažnijih parcijalnih molarnih veličina je kemijski potencijal koji se u izobarno izotermnim uvjetima definira s

$$\mu_\mathrm{J} = \tilde{G}_\mathrm{J} = \left(\frac{\partial G}{\partial n_\mathrm{J}}\right)_{p,T}$$

(podrazumijevamo da su u gornjoj formuli i sve množine ostalih u sustavu prisutnih sastojaka konstantne). Ukoliko se u sustavu mogu dogoditi i promjene sastava, uz volumni, moguć je i kemijski rad opisan diferencijalom $\sum_\mathrm{J} \mu_\mathrm{J}\,\mathrm{d}n_\mathrm{J}$. U tom slučaju se taj rad treba dodati u odgovarajući izraz za kemijski potencijal G:

$$\mathrm{d}G = -S\,\mathrm{d}T + V\,\mathrm{d}p + \sum_\mathrm{J} \mu_\mathrm{J}\,\mathrm{d}n_\mathrm{J},$$

odnosno u izobarno izotermnim uvjetima

$$\mathrm{d}G = \sum_\mathrm{J} \mu_\mathrm{J}\,\mathrm{d}n_\mathrm{J}.$$

To se moglo dobiti i direktno iz definicije μ_J kao parcijalne molarne veličine jer je $\mathrm{d}G$ egzaktan pa (ako su tlak i temperatura konstantne, preostaje samo mogućnost promjene kemijskog sastava, tj. promjene množina sastojaka) mora vrijediti

$$\mathrm{d}G = \sum_\mathrm{J} \left(\frac{\partial G}{\partial n_\mathrm{J}}\right)_{p,T} \mathrm{d}n_\mathrm{J} = \sum_\mathrm{J} \mu_\mathrm{J}\,\mathrm{d}n_\mathrm{J}.$$

Reakcijski gradijenti ekstenzivnih svojstava opisuju njihove promjene obzirom na malu promjenu dosega reakcije:

$$\Delta_r Y = \frac{\partial Y}{\partial \xi},$$

gdje je doseg ξ definiran sa $\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}n_\mathrm{J}} = \frac{1}{\nu_\mathrm{J}}$, a J bilo koji sastojak sustava. Osobito često se koristi reakcijski gradijent Gibbsove energije, zvan reakcijska Gibbsova energija. Imamo dakle

$$\Delta_r G = \frac{\partial G}{\partial \xi}.$$

Iz izraza $\mathrm{d}G = \sum_\mathrm{J} \mu_\mathrm{J}\,\mathrm{d}n_\mathrm{J}$ dobivamo da je

$$\frac{\partial G}{\partial \xi} = \sum_\mathrm{J} \mu_\mathrm{J} \frac{\partial n_\mathrm{J}}{\partial \xi} = \sum_\mathrm{J} \nu_\mathrm{J}\mu_\mathrm{J}.$$

Pritom smo koristili formulu $\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{1}{\frac{\partial x}{\partial y}}$. Dakle, ako znamo jednadžbu reakcije i kemijske potencijale svih sudionika reakcija (u izobarno izotermnim okolnostima) reakcijska

Gibbsova energija je linearna kombinacija kemijskih potencijala sudionika reakcije u kojoj su koeficijenti točno pripadni stehiometrijski koeficijenti.

Iako se prethodni računi zasigurno mnogima čine formalni i bez puno veze sa stvarnošću, ipak daju bitne informacije o stvarnosti. Naime, gornji matematički izvodi daju neke zaključke koje bismo mogli iskustveno, ali bez potpune pouzdanosti, uočiti te nam matematički izvod garantira točnost zaključaka uz uvjet da su pretpostavke točne. Sam izvod pak zapravo i nije nužno znati, ali kako su sve gornje formule relativno teško pamtljive, uglavnom je lakše zapamtiti par osnovnih pretpostavki (prvi i drugi glavni stavak, egzaktnost diferencijala funkcija stanja, definiciju kemijskog potencijala i reakcijskog gradijenta), a konačne formule zatim izvesti iz tih pretpostavki. Bilo da se kemičar ograniči na gledanje konačnih formula svakog izvoda ili na samostalno izvođenje istih, u oba slučaja jedina korist od dobivenih formula je ako ih znade interpretirati u realnijem kontekstu. Tako recimo formula $\mathrm{d}G = -S\,\mathrm{d}T + V\,\mathrm{d}p$ znači da se (ako nema nevolumnog rada i ako je proces reverzibilan) svaka (infinitezimalna) promjena Gibbsove energije sustava sastoji od doprinosa promjene temperature (koji iznosi aproksimativno $-S\Delta T$, tj. jednak je suprotnoj vrijednosti produkta entropije sustava i promjene temperature) i doprinosa promjene tlaka (koji približno iznosi $V\Delta p$, tj. jednak je produktu volumena sustava i promjene tlaka sustava).

Primjer 172. *U sustavu u kojem se mogu mijenjati temperatura, tlak i množine sastojaka* A *i* B *imamo*

$$\mathrm{d}H = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_{p,n_{\mathrm{A}},n_{\mathrm{B}}} \mathrm{d}T + \left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_{T,n_{\mathrm{A}},n_{\mathrm{B}}} \mathrm{d}p + \left(\frac{\partial H}{\partial n_{\mathrm{A}}}\right)_{p,T,n_{\mathrm{B}}} \mathrm{d}n_{\mathrm{A}} + \left(\frac{\partial H}{\partial n_{\mathrm{B}}}\right)_{p,T,n_{\mathrm{A}}} \mathrm{d}n_{\mathrm{B}}.$$

Ta formula znači da se inifinitezimalna promjena entalpije može postići infinitezimalnim, pojedinačnim, promjenama temperature, tlaka i množina sastojaka. No, ona daje i mnogo više. Budući da nije moguće napisati formulu za H, tj. izraz oblika $H = H(p, T, n_{\mathrm{A}}, n_{\mathrm{B}})$, ona omogućuje aproksimativno izračunavanje promjene entalpije ako su poznate promjene temperature, tlaka i množina sastojaka te relativne promjene entalpije pri (malim) pojedinačnim promjenama tih parametara, a te se promjene mogu mjeriti eksperimentalno. Odgovarajuća formula za aproksimativno izračunavanje promjene entalpije je

$$\Delta H = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_{p,n_{\mathrm{A}},n_{\mathrm{B}}} \Delta T + \left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_{T,n_{\mathrm{A}},n_{\mathrm{B}}} \Delta p + \left(\frac{\partial H}{\partial n_{\mathrm{A}}}\right)_{p,T,n_{\mathrm{B}}} \Delta n_{\mathrm{A}} + \left(\frac{\partial H}{\partial n_{\mathrm{B}}}\right)_{p,T,n_{\mathrm{A}}} \Delta n_{\mathrm{B}}.$$

Primjer 173. *Lančano pravilo može se iskoristiti za dobivanje formule za funkciju stanja, recimo unutrašnju energiju U, ukoliko promijenimo temeljne varijable koje opisuju stanje sustava. Primjerice, ako stanje plina identificiramo s uređenom trojkom (T, V, n) (recimo jer su uvjeti izobarni), imamo $U = U(T, V, n)$ i*

$$\mathrm{d}U = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{V,n} \mathrm{d}T + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_{T,n} \mathrm{d}V + \left(\frac{\partial U}{\partial n}\right)_{T,V} \mathrm{d}n.$$

S druge strane, u izohornim okolnostima pogodnije je stanje plina opisati trojkom (T, p, n) te je tada

$$\mathrm{d}U = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{p,n} \mathrm{d}T + \left(\frac{\partial U}{\partial p}\right)_{T,n} \mathrm{d}p + \left(\frac{\partial U}{\partial n}\right)_{T,p} \mathrm{d}n.$$

Razumno je postaviti pitanje kolika je razlika između relativnih promjena unutrašnje energije obzirom na promjenu temperature (iskazanih parcijalnim derivacijama $\frac{\partial U}{\partial T}$) u ova dva slučaja:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{V,n} = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{p,n} + ?.$$

Lančano pravilo nam daje mogućnost da tu razliku izračunamo. Računamo:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{V,n} = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{p,n}\left(\frac{\partial T}{\partial T}\right)_{V,n} + \left(\frac{\partial U}{\partial p}\right)_{T,n}\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V,n} + \left(\frac{\partial U}{\partial n}\right)_{T,p}\left(\frac{\partial n}{\partial T}\right)_{V,n}.$$

Kako je $\frac{\partial T}{\partial T}$ u svim okolnostima jednako 1, a $\left(\frac{\partial n}{\partial T}\right)_{V,n} = 0$ (promjena množine pri konstantnoj množini je nula) dobivamo traženu vezu

$$\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{V,n} = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{p,n} + \left(\frac{\partial U}{\partial p}\right)_{T,n}\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V,n}.$$

Primjer 174. *U izohornim okolnostima možemo govoriti o izohornom toplinskom kapacitetu*

$$C_V = \left(\frac{\partial q}{\partial T}\right)_{V,n} = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{V,n},$$

a u izobarnim okolnostima možemo govoriti o izobarnom toplinskom kapacitetu

$$C_p = \left(\frac{\partial q}{\partial T}\right)_{p,n} = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{p,n}.$$

Nadalje, u izotermnim okolnostima definirana je izotermna kompresibilnost (stlačivost)

$$\kappa_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_{T,n},$$

a u izoentropijskim uvjetima adijabatska kompresibilnost

$$\kappa_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_{S,n}.$$

Vrijedi:

$$\frac{C_p}{C_V} = \frac{\kappa_T}{\kappa_S}.$$

Izvedimo tu jednakost:

$$\frac{C_p}{C_V} = \frac{\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{p,n}}{\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{V,n}}.$$

Korištenjem Eulerovog cikličkog pravila u brojniku i u nazivniku dobije se da je prethodni kvocijent dalje jednak

$$\frac{-\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_{T,n}\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{S,n}}{-\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{T,n}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{S,n}} = \frac{\left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_{T,n}\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_{T,n}}{\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{S,n}\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_{S,n}} = \frac{\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_{T,n}}{\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_{S,n}} = \frac{\kappa_T}{\kappa_S}.$$

U zadnjem redu smo za dobivanje prve jednakosti koristili formulu $\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{1}{\frac{\partial x}{\partial y}}$, *za dobivanje druge lančano pravilo, a za dobivanje zadnje smo razlomak proširili faktorom* $-\frac{1}{V}$.

Napomena 17. *Kao u prethodnom primjeru, često se u kemijskoj termodinamici pojavljuje parcijalno deriviranje po množini* n*, koja je zapravo diskretna varijabla. Ipak, računanje* $\frac{\partial}{\partial n}$ *može se opravdati, i to na više načina. Uobičajeni argument je da racionalni broj* n *zapravo opisuje brojnost* $N \in \mathbb{N}$ *koja je uvijek vrlo velik broj i čija diskretna promjena za primjerice 1 je ekvivalentna infinitezimalnoj promjeni* n*. Taj argument je intuitivan, ali očigledno neprecizan.*

Istu stvar mogli bismo argumentirati i ovako: n *dozvolimo da bude kontinuirana varijabla koja se kreće unutar intervala* $[0, +\infty\rangle$*, ali pri uvrštavanju nikad ne uvrštavamo njene ne-prirodne vrijednosti (ne radimo li slično i u većini matematičkih zadataka?). Moguće je reći i ovako: ako je* f *derivabilna i ovisi o* n*, onda je po definiciji*

$$f'(n_0) = \lim_{x\to 0} \frac{f(n_0+x) - f(n_0)}{x} = \lim_{n\to+\infty} n\left(f\left(n_0 + \frac{1}{n}\right) - f(n_0)\right),$$

gdje smo koristili neprekidnost funkcije f *zbog koje je* $\lim\limits_{x\to 0} f(n_0+x) = \lim\limits_{n\to+\infty} f(n_0+1/n)$.

☼ **Ponovimo bitno...** U fenomenološkoj kemijskoj termodinamici diferencijali se koriste kao indirektni opisi pojedinih svojstava sustava, odnosno njihovih infinitezimalnih promjena. Promjena nekog svojsta tokom nekog procesa može se računati kao krivuljni integral odgovarajućeg diferencijala duž krivulje koja opisuje proces. Funkcije stanja su točno ona termodinamička svojstva za koja iznos te promjene ne ovisi o načinu na koji je promjena postignuta, dakle ona koja su opisana egzaktnim diferencijalima. Najvažnije funkcije stanja su one koje se mogu mjeriti na apsolutnoj ljestvici, primjerice p, V i T, te unutrašnja energija U (definirana prvim glavnim stavkom termodinamike, tj. s $\mathrm{d}U = \mathrm{d}w + \mathrm{d}q$)), entropija S (definirana drugim glavnim stavkom termodinamike, tj. s $T\,\mathrm{d}S = \mathrm{d}q$), entalpija $H = U + pV$ i Gibbsova energija $G = H - TS$. Rad w i toplina q nisu funkcije stanja, dakle njihovi diferencijali $\mathrm{d}w$ i $\mathrm{d}q$ nisu egzaktni. ☺

4.10 Zadaci za vježbu

1. (a) Ako je $f(x,y) = \frac{4x+y}{3x-2y}$, pokažite da je $f(a, 2a) = -6,\ a \neq 0$.

   (b) Ako je
   $$f(x,y) = \frac{3xy^2 - 2\sqrt{x^6 - 3x^3y^3 + 2y^6}}{x+2y},$$
   pokažite da je $f(tx, ty) = t^2 f(x,y),\ t \neq 0$.

2. Odredite prirodnu domenu funkcija

   (a) $f(x,y) = 3\sqrt{x-2y} + \frac{5xy}{\sqrt{4-x^2}}$.

   (b) $f(x,y) = \ln(4 - x^2 - y)$.

(c) $f(x,y) = \sqrt{x^2 + y^2 - 2x - 4y}$.

(d) $f(x,y) = \ln(x \ln(x-y))$.

(e) $f(x,y) = \arccos \frac{y}{x} + \sqrt{xy}$.

(f) $f(x,y,z) = \arcsin\left(3 - \frac{4z}{x^2+y^2}\right)$.

Rješenje.
(a) $D = \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 : x \in \langle -2, 2\rangle,\ y \le \frac{1}{2}x\}$.
(b) $D = \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 : y < 4 - x^2\}$.
(c) $D = \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 : (x-1)^2 + (y-2)^2 \ge 5\}$.
(d) $D = \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 : x > 0,\ y < x - 1\} \cup \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 : x < 0,\ x - 1 < y < x\}$.
(e) $D = \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 : x > 0,\ 0 \le y \le x\} \cup \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 : x < 0,\ x \le y \le 0\}$.
(f) $D = \{(x,y,z) \in \mathbb{R}^3 : \frac{1}{2}(x^2+y^2) \le z \le x^2 + y^2\}$.

3. Odredite sve parcijalne derivacije prvog reda za funkcije

(a) $f(x,y) = \frac{x^2}{2} + \frac{3y^2}{2} + 2x^2y^2$.

(b) $f(x,y) = \ln\left(1 + \frac{x}{y}\right)$.

(c) $f(x,y) = \operatorname{arctg} \frac{y}{x}$.

(d) $f(x,y) = x^y$.

(e) $f(x,y,z) = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.

(f) $f(x,y,z) = \operatorname{arctg} \frac{xy}{\sqrt{z}}$.

Rješenje.
(a) $\frac{\partial f}{\partial x} = x + 4xy^2,\ \frac{\partial f}{\partial y} = 3y + 4x^2y$. (b) $\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{1}{x+y},\ \frac{\partial f}{\partial y} = -\frac{x}{y(x+y)}$.
(c) $\frac{\partial f}{\partial x} = -\frac{y}{x^2+y^2},\ \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{x}{x^2+y^2}$. (d) $\frac{\partial f}{\partial x} = yx^{y-1},\ \frac{\partial f}{\partial y} = x^y \ln x$.
(e) $\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}},\ \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{y}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}},\ \frac{\partial f}{\partial z} = \frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$.
(f) $\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{y\sqrt{z}}{x^2y^2+z},\ \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{x\sqrt{z}}{x^2y^2+z},\ \frac{\partial f}{\partial z} = -\frac{1}{2\sqrt{z}}\frac{xy}{x^2y^2+z}$.

4. Izračunajte vrijednosti parcijalnih derivacija prvog reda u zadanim točkama

(a) $f(x,y) = \sqrt{xy + \frac{x}{y}},\quad X = (2,1)$.

(b) $f(x,y) = xy + xe^{\frac{y}{x}},\quad X = (-2,0)$.

(c) $f(x,y,z) = \ln(xy + \frac{z^2}{x}),\quad X = (1,2,0)$.

Rješenje.
(a) $\frac{\partial f}{\partial x}(X) = \frac{1}{2},\ \frac{\partial f}{\partial y}(X) = 0$. (b) $\frac{\partial f}{\partial x}(X) = 1,\ \frac{\partial f}{\partial y}(X) = -1$.
(c) $\frac{\partial f}{\partial x}(X) = 1,\ \frac{\partial f}{\partial y}(X) = \frac{1}{2},\ \frac{\partial f}{\partial z}(X) = 0$.

5. (a) Pokažite da funkcija $u(x,y) = \ln(x^2 + xy + y^2)$ zadovoljava parcijalnu diferencijalnu jednadžbu

$$x\frac{\partial u}{\partial x} + y\frac{\partial u}{\partial y} = 2 .$$

(b) Pokažite da funkcija $u(x,y,z) = x + \frac{x-y}{y-z}$ zadovoljava parcijalnu diferencijalnu jednadžbu

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial z} = 1 \ .$$

6. Odredite $f(x,y)$ ako vrijedi

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{2\sqrt{x} + y^2}{x} \ , \qquad f(1,y) = \cos y \ .$$

Rješenje. $f(x,y) = 4\sqrt{x} + y^2 \ln x + \cos y - 4$.

7. Koristeći lančano pravilo odredite $\frac{df}{dt}$, ako je

(a) $f(x,y) = \frac{y}{x}$, $\quad x(t) = \ln t, \ \ y(t) = e^t$.

(b) $f(x,y,z) = \frac{z}{\sqrt{x^2+y^2}}$, $\quad x(t) = 4\cos t, \ \ y(t) = 4\sin t, \ \ z(t) = t$.

Rješenje.
(a) $\frac{df}{dt} = \frac{(t\ln t - 1)e^t}{t\ln^2 t}$. (b) $\frac{df}{dt} = \frac{1}{4}$.

8. Koristeći lančano pravilo odredite $\frac{\partial f}{\partial u}$ i $\frac{\partial f}{\partial v}$, ako je

$$f(x,y) = \operatorname{arctg} \frac{y}{x} \ , \quad x(u,v) = u^2 - v^2, \ \ y(u,v) = 2uv \ .$$

Rješenje. $\frac{\partial f}{\partial u} = \frac{2v}{u^2+v^2}$, $\frac{\partial f}{\partial v} = -\frac{2u}{u^2+v^2}$.

9. Odredite sve parcijalne derivacije drugog reda za funkcije

(a) $f(x,y) = \frac{x^2}{2} + \frac{3y^2}{2} - 2x^2y^2$.

(b) $f(x,y) = (2xy + y^2)^{3/2}$.

(c) $f(x,y) = \operatorname{arctg} \frac{x+y}{1-xy}$.

Rješenje.
(a) $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 1 - 4y^2$, $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} = -8xy$, $\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 3 - 4x^2$.
(b) $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{3y^2}{\sqrt{2xy+y^2}}$, $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} = \frac{3(3xy+2y^2)}{\sqrt{2xy+y^2}}$, $\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = \frac{3(x^2+4xy+2y^2)}{\sqrt{2xy+y^2}}$.
(c) $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = -\frac{2x}{(1+x^2)^2}$, $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} = 0$, $\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = -\frac{2y}{(1+y^2)^2}$.

10. (a) Pokažite da funkcija $u(x,y) = \sin x \sin 2y$ zadovoljava parcijalnu diferencijalnu jednadžbu

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 4\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \ .$$

(b) Pokažite da funkcija $u(x,y) = \operatorname{arctg}\frac{y}{x}$ zadovoljava parcijalnu diferencijalnu jednadžbu

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \ .$$

11. Odredite $\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}$, $\frac{\partial^3 f}{\partial x^2 \partial y}$ i $\frac{\partial^3 f}{\partial x \partial y \partial z}$, ako je

$$f(x,y,z) = x^4 y^3 z^2 \ .$$

Rješenje. $\frac{\partial^3 f}{\partial x^3} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right) = 24xy^3z^2$, $\frac{\partial^3 f}{\partial x^2 \partial y} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}\right) = 36x^2y^2z^2$,
$\frac{\partial^3 f}{\partial x \partial y \partial z} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial z}\right) = 24x^3y^2z$.

12. Odredite ∇f te izračunajte $\nabla f(X)$, ako je

   (a) $f(x,y) = \frac{1}{2}\ln(x^2+y^2), \quad X = (1,2)$.

   (b) $f(x,y,z) = x^2+y^2+z^2, \quad X = (-1, \frac{1}{2}, 3)$.

   (c) $f(x,y,z) = \frac{1}{3}x^3 - \frac{1}{2}y^2 + 4xz + z^2, \quad X = (0,2,1)$.

   Rješenje.
   (a) $\nabla f = \left(\frac{x}{x^2+y^2}, \frac{y}{x^2+y^2}\right)^t$, $\nabla f(1,2) = \left(\frac{1}{5}, \frac{2}{5}\right)^t$.
   (b) $\nabla f = \left(2x, 2y, 2z\right)^t$, $\nabla f(-1, \frac{1}{2}, 3) = (-2,1,6)^t$.
   (c) $\nabla f = \left(x^2+4z, -y, 4x+2z\right)^t$, $\nabla f(0,2,1) = (4,-2,2)^t$.

13. Odredite jednadžbu tangencijalne ravnine na zadane plohe u navedenim točkama:

   (a) na rotacioni paraboloid $z = x^2 + y^2$ u točki $(1,2,6)$.

   (b) na čunj $z^2 = \frac{x^2}{4} + y^2$ u točki $(8,3,-5)$.

   Rješenje.
   (a) $2x + 4y - z = 4$. (b) $2x + 3y + 5z = 0$.

14. Odredite jednadžbu tangencijalne ravnine na plohu $x^2 + 2y^2 + 3z^2 = 21$ koja je paralelna ravnini $x + 4y + 6z = 0$.
   Rješenje. $2x + 8y + 6z = 21$.

15. Odredite lokalne ekstreme funkcija

   (a) $f(x,y) = x\sqrt{y} - x^2 - y + 6x - 8$.

   (b) $f(x,y) = x^4 + y^4 - 2x^2 + 4xy - 2y^2 + 8$.

   (c) $f(x,y) = \ln\frac{x}{3} + 2\ln y + \ln(4-x-y)$.

   (d) $f(x,y,z) = x^2 + y^2 + z^2 - xy - x - 2z$.

   Rješenje.
   (a) $(4,4)$ točka lokalnog maksimuma.
   (b) $(\pm\sqrt{2}, \mp\sqrt{2})$ točke lokalnog minimuma, $(0,0)$ sedlasta točka.
   (c) $(1,2)$ točka lokalnog maksimuma.
   (d) $\left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 1\right)$ točka lokalnog minimuma.

16. Zadane su točke $A(0,0)$, $B(1,0)$ i $C(0,1)$. Odredite točku T u trokutu ABC tako da je zbroj udaljenosti te točke od vrhova trokuta najmanji.
    Rješenje. $T = \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right)$.

17. Odredite lokalne ekstreme funkcija uz zadane uvjete
    (a) $f(x,y) = 2x + y + 10$, uz uvjet $xy = 8$.
    (b) $f(x,y) = e^{xy}$, uz uvjet $x + y = 4$.
    (c) $f(x,y) = -x - y$, uz uvjet $x^2 + y^2 = 2$.
    (d) $f(x,y) = 3x + 4y$, uz uvjet $x^2 + y^2 = 4$.

    Rješenje.
    (a) $(2,4)$ točka lokalnog minimuma.
    (b) $(2,2)$ točka lokalnog maksimuma.
    (c) $(-1,-1)$ točka lokalnog maksimuma, $(1,1)$ točka lokalnog minimuma.
    (d) $(\frac{6}{5}, \frac{8}{5})$ točka lokalnog maksimuma, $(-\frac{6}{5}, -\frac{8}{5})$ točka lokalnog minimuma.

18. Od svih pravokutnih paralelepipeda volumena 8 odredite dimenzije onog kojemu je oplošje najmanje.
    Rješenje. $x = y = z = 2$ (kocka).

19. Na elipsoidu $\frac{x^2}{96} + y^2 + z^2 = 1$ nađite točku koja je najudaljenija od ravnine $3x + 4y + 12z = 288$.
    Rješenje. $\left(9, \frac{1}{8}, \frac{3}{8}\right)$.

20. Izračunajte dvostruke integrale
    (a) $\int_0^2 \int_0^1 (x^2 + 2y)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y$.
    (b) $\int_0^1 \int_0^2 \frac{3x^2+5}{4+y^2}\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}x$.
    (c) $\int_1^2 \int_{\frac{1}{x}}^x \frac{x^2}{y^2}\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}x$.

    Rješenje.
    (a) $\frac{14}{3}$. (b) π . (c) $\frac{9}{4}$.

21. Zamijenite poredak integracije u dvostrukim integralima
    (a) $\int_0^2 \left(\int_{2y}^4 f(x,y)\,\mathrm{d}x \right) \mathrm{d}y$.
    (b) $\int_0^1 \left(\int_{-\sqrt{1-x}}^{x^2} f(x,y)\,\mathrm{d}y \right) \mathrm{d}x$.
    (c) $\int_{-2}^0 \left(\int_0^{\sqrt{4-x^2}} f(x,y)\,\mathrm{d}y \right) \mathrm{d}x + \int_0^2 \left(\int_0^{2-x} f(x,y)\,\mathrm{d}y \right) \mathrm{d}x$.

    Rješenje.
    (a) $\int_0^4 \left(\int_0^{\frac{1}{2}x} f(x,y)\,\mathrm{d}y \right) \mathrm{d}x$.
    (b) $\int_{-1}^0 \left(\int_0^{1-y^2} f(x,y)\,\mathrm{d}x \right) \mathrm{d}y + \int_0^1 \left(\int_{\sqrt{y}}^1 f(x,y)\,\mathrm{d}x \right) \mathrm{d}y$.
    (c) $\int_0^2 \left(\int_{-\sqrt{4-y^2}}^{2-y} f(x,y)\,\mathrm{d}x \right) \mathrm{d}y$.

22. Izračunajte površinu $P_A = \int\int_A \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y$, ako je

    (a) A pravokutnik sa vrhovima $(1,0),\ (5,0),\ (5,3)$ i $(1,3)$.

    (b) A trokut sa vrhovima $(0,0),\ (3,0)$ i $(3,4)$.

    (c) A lik omeđen parabolom $y = 2x^2$ i pravcem $y = 2$.

    Rješenje.

    (a) $P_A = \int_0^3 \int_1^5 \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = 12$. (b) $P_A = \int_0^3 \int_0^{\frac{4}{3}x} \mathrm{d}y\,\mathrm{d}x = 6$.
    (c) $P_A = \int_{-1}^1 \int_{2x^2}^2 \mathrm{d}y\,\mathrm{d}x = \frac{8}{3}$.

23. Prijelazom na polarne koordinate izračunajte

    (a) $\int\int_A \sqrt{4 - x^2 - y^2}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y$, A polukrug $x^2 + y^2 \leq 4,\ y \geq 0$.

    (b) $\int\int_A \sqrt{x^2 + y^2}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y$, A krug $x^2 + y^2 \leq 4x$.

    Rješenje.
    (a) $\int_0^\pi \int_0^2 \sqrt{4 - r^2}\, r\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi = \frac{8\pi}{3}$. (b) $\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \int_0^{4\cos\varphi} r^2\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi = \frac{256}{9}$.

24. Izračunajte volumen $V = \int\int_A f(x,y)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y$ između plohe $z = f(x,y)$ i područja integriranja A, ako je

    (a) $f(x,y) = x^2 + y^2 + 1,\ A = [0,1] \times [0,2]$.

    (b) $f(x,y) = 1 + x + y$, A trokut sa vrhovima $(0,0),\ (1,0)$ i $(0,1)$.

    Rješenje.
    (a) $V = \int_0^1 \int_0^2 (x^2 + y^2 + 1)\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}x = \frac{16}{3}$.
    (b) $V = \int_0^1 \int_0^{1-x} (1 + x + y)\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}x = \frac{5}{6}$.

25. Prijelazom na polarne koordinate izračunajte volumen tijela omeđenog paraboloidom $z = 4 - x^2 - y^2$ te ravninom $z = 0$.
    Rješenje.
    $\int\int_{x^2+y^2\leq 4} (4 - x^2 - y^2)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = 8\pi$.

26. Izračunajte trostruke integrale

    (a) $\int_{-2}^2 \int_{x^2/2}^2 \int_0^3 (1 + z)\,\mathrm{d}z\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}x$.

    (b) $\int_0^1 \int_0^{1-x} \int_0^{1-x-y} (1 - x)yz\,\mathrm{d}z\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}x$.

    Rješenje.
    (a) 50 . (b) $\frac{1}{144}$.

27. Izračunajte trostruki integral

$$\int\int\int_V \frac{\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z}{(x + y + z + 1)^3},$$

    pri čemu je V područje omeđeno plohama $x = 0,\ y = 0,\ z = 0$ i $x + y + z = 1$.
    Rješenje. $\int_0^1 \mathrm{d}x \int_0^{1-x} \mathrm{d}y \int_0^{1-x-y} \frac{\mathrm{d}z}{(x+y+z+1)^3} = \frac{1}{2}\ln 2 - \frac{5}{16}$.

28. Prijelazom na cilindrične koordinate izračunajte

    (a) $\int_0^2 \int_0^{\sqrt{2x-x^2}} \int_0^3 z\sqrt{x^2+y^2}\,\mathrm{d}z\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}x$.
    (b) $\int\int\int_V \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$, $V = \{(x,y,z) \in \mathbb{R}^3 : x^2+y^2+z^2 \leq 2z,\ x^2+y^2 \leq z^2\}$.

    Rješenje.
    (a) $\int_0^{\pi/2} \int_0^{2\cos\varphi} \int_0^3 zr^2\,\mathrm{d}z\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi = 8$. (b) $\int_0^{2\pi} \int_0^1 \int_r^{1+\sqrt{1-r^2}} r\,\mathrm{d}z\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi = \pi$.

29. Prijelazom na sferne koordinate izračunajte

    (a) $\int_{-4}^4 \int_{-\sqrt{4-x^2}}^{\sqrt{4-x^2}} \int_0^{\sqrt{4-x^2-y^2}} (x^2+y^2)\,\mathrm{d}z\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}x$.
    (b) $\int\int\int_V \sqrt{1+(x^2+y^2+z^2)^{3/2}}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$, V kugla $x^2+y^2+z^2 \leq 1$.

    Rješenje.
    (a) $\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \int_0^2 r^4 \sin^3\theta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi = \frac{128}{15}\pi$.
    (b) $\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^1 \sqrt{1+r^3}\, r^2 \sin\theta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi = \frac{8\pi}{9}(2\sqrt{2}-1)$.

30. Koristeći formulu $\int\int\int_V \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$, izračunajte volumen

    (a) tijela određenog sa $y^2 = 4-3x,\ y^2 = x,\ 0 \leq z \leq 2$.
    (b) dijela valjka $x^2+y^2 = 4x$ između ravnine $z = 0$ i paraboloida $z = x^2+y^2$.
    (c) tijela omeđenog plohama $x^2+y^2+z^2 = 2z$ i $x^2+y^2 = z^2$.

    Rješenje.
    (a) $\int_{-1}^1 \int_{y^2}^{\frac{1}{3}(4-y^2)} \int_0^2 \mathrm{d}z\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = \frac{32}{9}$. (b) $2\int_0^{\pi/2} \int_0^{4\cos\varphi} \int_0^{r^2} r\,\mathrm{d}z\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi = 24\pi$.
    (c) $\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/4} \int_0^{2\cos\theta} r^2 \sin\theta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi = \pi$.

31. Zadana je skalarna funkcija $f(x,y,z) = 4x^2y - y^3z^2$. Odredite ∇f i $\nabla^2 f$.
    Rješenje. $\nabla f = 8xy\vec{i} + (4x^2 - 3y^2z^2)\vec{j} - 2y^3z\vec{k}$, $\nabla^2 f = 8y - 6yz^2 - 2y^3$.

32. Zadana je vektorska funkcija $F(x,y,z) = x^2\vec{i} + y^2\vec{j} + xyz\vec{k}$. Odredite div F i rot F.
    Rješenje. div $F = 2x + 2y + xy$, rot $F = xz\vec{i} - yz\vec{j}$.

33. Neka je $\vec{r} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k}$ i $r = |\vec{r}| = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$. Pokažite da je

$$\nabla r = \frac{\vec{r}}{r}\,, \qquad \nabla\left(\frac{1}{r}\right) = -\frac{\vec{r}}{r^3}\,, \qquad \mathrm{div}\,\vec{r} = 3\,, \qquad \mathrm{rot}\,\vec{r} = \vec{0}\,.$$

34. Pokažite da je vektorsko polje

$$F(x,y,z) = (y+z)\vec{i} + (x+z)\vec{j} + (x+y)\vec{k}$$

    potencijalno tj. da vrijedi rot $F = \vec{0}$. Nadalje, pokažite da je sa $f(x,y,z) = xy + xz + yz$ dan njegov potencijal.
    Rješenje. rot $F = \vec{0}$, $\nabla f = F$.

35. Odredite konstante $a, b, c \in \mathbb{R}$ tako da vektorsko polje

$$F(x,y,z) = (x + 2y + az)\vec{i} + (bx - 3y - z)\vec{j} + (4x + cy + 2z)\vec{k}$$

bude potencijalno.
Rješenje. $\operatorname{rot} F = \vec{0} \;\Rightarrow\; a = 4,\; b = 2,\; c = -1.$

36. Pokažite da je vektorsko polje

$$F(x,y,z) = \frac{3x}{1+x^2}\vec{i} + \frac{6x^2y}{(1+x^2)^2}\vec{j} - \frac{3z}{1+x^2}\vec{k}$$

solenoidalno tj. da vrijedi $\operatorname{div} F = 0$.

37. Odredite diferencijal funkcija

(a) $f(x,y) = x^3 + y^3 - 3xy$.
(b) $f(x,y) = \operatorname{arctg} \frac{x}{y}$ u točki $(1,1)$.
(c) $f(x,y,z) = xyz$.
(d) $f(x,y,z) = \frac{z}{\sqrt{x^2+y^2}}$ u točki $(3,-4,5)$.

Rješenje.
(a) $\mathrm{d}f(x,y) = 3(x^2 - y)\,\mathrm{d}x + 3(y^2 - x)\,\mathrm{d}y$.
(b) $\mathrm{d}f(1,1) = \frac{1}{2}(\,\mathrm{d}x - \,\mathrm{d}y)$.
(c) $\mathrm{d}f(x,y,z) = yz\,\mathrm{d}x + xz\,\mathrm{d}y + xy\,\mathrm{d}z$.
(d) $\mathrm{d}f(3,-4,5) = \frac{1}{25}(-3\,\mathrm{d}x + 4\,\mathrm{d}y + 5\,\mathrm{d}z)$.

38. Izračunajte krivuljne integrale prve vrste

(a) $\int_\gamma \frac{\mathrm{d}s}{\sqrt{x^2+y^2+5}}$, ako je $\gamma = \overrightarrow{OA}$ usmjerena dužina od $O(0,0)$ do $A(1,2)$.
(b) $\int_\gamma y\,\mathrm{d}s$, ako je γ dio luka parabole $y^2 = 2x$ od $O(0,0)$ do $B(4, 2\sqrt{2})$.
(c) $\int_\gamma y^2\,\mathrm{d}s$, ako je $\gamma \;:\; [0,2\pi] \to \mathbb{R}^2,\; \gamma(t) = (t - \sin t, 1 - \cos t)$.
(d) $\int_\gamma xyz\,\mathrm{d}s$, ako je $\gamma \;:\; [0,1] \to \mathbb{R}^3,\; \gamma(t) = \big(t, \sqrt{2t^3}, \frac{t^2}{2}\big)$.
(e) $\int_\gamma (x+y)\,\mathrm{d}s$, ako je γ trokut OAB sa vrhovima $O(0,0)$, $A(1,0)$ i $B(0,1)$.

Rješenje.
(a) $\ln(1+\sqrt{2})$. (b) $\frac{26}{3}$. (c) $\frac{256}{15}$. (d) $\frac{16\sqrt{2}}{143}$. (e) $1 + \sqrt{2}$.

39. Izračunajte duljinu luka čunjaste zavojnice

$$x(t) = e^{-t}\cos t\,, \qquad y(t) = e^{-t}\sin t\,, \qquad z(t) = e^{-t}$$

od točke $O(0,0,0)$ do točke $A(1,0,1)$.
Rješenje. $l = \sqrt{3}$.

40. Izračunajte krivuljne integrale druge vrste

(a) $\int_\gamma y^2\,\mathrm{d}x - x^2\,\mathrm{d}y$, ako je $\gamma = \overrightarrow{AB}$ usmjerena dužina od $A(0,1)$ do $B(1,0)$.

(b) $\int_\gamma 6x^2y\,\mathrm{d}x + 10xy^2\,\mathrm{d}y$, ako je γ dio krivulje $y = x^3$ od $C(1,1)$ do $D(2,8)$.

(c) $\int_\gamma y\,\mathrm{d}x - x\,\mathrm{d}y$, ako je $\gamma\ :\ [0,4\pi] \to \mathbb{R}^2,\ \gamma(t) = (2(t-\sin t), 2(1-\cos t))$.

(d) $\int_\gamma (y-z)\,\mathrm{d}x + (z-x)\,\mathrm{d}y + (x-y)\,\mathrm{d}z$, ako je $\gamma\ :\ [0,2\pi] \to \mathbb{R}^3,\ \gamma(t) = \big(2\cos t, 2\sin t, 3t\big)$.

(e) $\int_\gamma x^3\,\mathrm{d}x + 3zy^2\,\mathrm{d}y - x^2y\,\mathrm{d}z$, ako je $\gamma = \overrightarrow{MO}$ usmjerena dužina od $M(3,2,1)$ do $O(0,0,0)$.

Rješenje.
(a) $-\frac{2}{3}$. (b) 3132 . (c) 48π . (d) -20π . (e) $-\frac{87}{4}$.

41. Odredite opće rješenje egzaktnih diferencijalnih jednadžbi

(a) $(x^3 + 3xy^2)\,\mathrm{d}x + (y^3 + 3x^2y)\,\mathrm{d}y = 0$.

(b) $e^y\,\mathrm{d}x + (xe^y - 2y)\,\mathrm{d}y = 0$.

(c) $\big(x + e^{\frac{x}{y}}\big)\,\mathrm{d}x + \big(1 - \frac{x}{y}\big)e^{\frac{x}{y}}\,\mathrm{d}y = 0$.

(d) $\big(\frac{2x}{y} + \frac{y}{x}\big)\,\mathrm{d}x + \big(\ln x - \frac{x^2}{y^2}\big)\,\mathrm{d}y = 0$.

(e) $yx^{y-1}\,\mathrm{d}x + x^y \ln x\,\mathrm{d}y = 0$.

Rješenje.
(a) $\frac{x^4}{4} + \frac{3}{2}x^2y^2 + \frac{y^4}{4} = C,\ C \in \mathbb{R}$. (b) $xe^y - y^2 = C,\ C \in \mathbb{R}$.
(c) $\frac{x^2}{2} + ye^{\frac{x}{y}} = C,\ C \in \mathbb{R}$. (d) $\frac{x^2}{y} + y\ln x = C,\ C \in \mathbb{R}$. (e) $x^y = C,\ C \in \mathbb{R}$.

Poglavlje 5

Metoda najmanjih kvadrata

Jedna od najvažnijih metoda za obradu eksperimentalnih podataka je metoda najmanjih kvadrata. Osnovni problem koji rješava ova metoda je: kako iz dobivenih eksperimentalnih podataka dobiti funkcionalnu ovisnost. Malo konkretnije,

Problem 1: Za zadani niz parova brojeva (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, n$, traži se funkcija $y = f(x)$ takva da je ukupna greška aproksimacije što manja.

Primjer 175. *Pri eksperimentu dobivene su za razne temperature iduće vrijednosti tlaka para etanola kad su faze u ravnoteži*[1]*:*

$t/°\mathrm{C}$	T/K	p/torr
25	298,15	55,900
30	303,15	70,000
35	308,15	93,800
40	313,15	117,50
45	318,15	154,10
50	323,15	190,70
55	328,15	241,90
60	333,15	304,15
65	338,15	377,90

Kako procijeniti koliki je tlak pri temperaturi 28°C*? Da bismo to procijenili, potrebno je procijeniti funkciju* $y = f(x)$ $(x = t/°\mathrm{C}$ *ili* $x = t/\mathrm{K}$, $y = p/\mathrm{torr})$*. Ako je ona dobro određena, tlak pri* 28°C *moći ćemo odrediti uvrštavanjem u funkciju* f*.*

U pravilu pri mjerenjima očekujemo da točke (x_i, y_i) zapravo nisu egzaktno na grafu funkcije ovisnoti y o x, tj. očekujemo da postoji eksperimentalna greška. Stoga tražimo funkciju čiji graf ne mora prolaziti točno kroz te točke (ne zahtijevamo $y_i = f(x_i)$ za sve i), nego tražimo funkciju tako da je ukupno „rasipanje” zadanih točaka oko njenog grafa što manje: $f(x_i) \approx y_i$ za sve i.

[1] Dvije faze su u ravnoteži ako su im kemijski potencijali jednaki.

Problem 2: Kako za danu funkciju $y = f(x)$ opisati ukupnu grešku obzirom na zadane parove (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, n$?

Obično podrazumijevamo da nema greške u apscisama[2], pa je razumno gledati samo vertikalna odstupanja od vrijednosti funkcije: $y_i - f(x_i)$ odnosno $f(x_i) - y_i$. Budući je obično nebitno je li rezultat manji ili veći od točnog, kao mjeru greške za pojedinu točku mogli bismo uzeti $|f(x_i) - y_i|$. No, kao što ćemo uskoro vidjeti, biti će nam potrebna derivabilnost ovih grešaka te je uobičajeno grešku aproksimacije funkcijom f u točki (x_i, y_i) mjeriti izrazom $E_i = (f(x_i) - y_i)^2$. **Ukupna greška aproksimacije** u tom slučaju opisuje se kao zbroj takvih lokalnih grešaka:

$$E = \sum_{i=1}^{n} E_i = \sum_{i=1}^{n} (f(x_i) - y_i)^2.$$

Kako minimizirati E? Da bi bilo moguće odgovoriti na to pitanje mora se pretpostaviti oblik funkcije f kojom ćemo aproksimirati podatke. Najčešće se koriste afine funkcije $f(x) = ax+b$ i kvadratne funkcije $f(x) = ax^2+bx+c$. Stvarni problem je sada:

Problem 3: Ako smo pretpostavili oblik funkcije f, s nepoznatim parametrima a, b, c, ..., kako minimizirati E?

Konkretno, u navedena dva slučaja aproksimacije afinom odnosno kvadratnom funkcijom imamo redom

$$E = \sum_{i=1}^{n} (ax_i + b - y_i)^2,$$

$$E = \sum_{i=1}^{n} (ax_i^2 + bx_i + c - y_i)^2.$$

U svim ovakvim slučajevima poznate su vrijednosti (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, n$, a nepoznati su parametri $a, b, c, \ldots$. Stoga u svrhu minimizacije od E možemo uzeti da je E funkcija nepoznatih parametara funkcije f, tj. tražimo (globalni) minimum funkcije oblika $E(a, b, c, \ldots)$. Vidimo da se radi o problemu određivanja ekstrema diferencijabilne realne funkcije više varijabli. Kako su jedine kritične točke takve funkcije stacionarne točke, mogući koeficijenti $a, b, c, \ldots$ dobiju se rješavanjem sustava

$$\nabla E = 0,$$

tj.

$$\frac{\partial E}{\partial a} = \frac{\partial E}{\partial b} = \frac{\partial E}{\partial c} = \ldots = 0.$$

Kod **aproksimacije afinom funkcijom** imamo

$$E(a, b) = \sum_{i=1}^{n} (ax_i + b - y_i)^2,$$

[2]Možemo to reći i ovako: uzima se da je sva greška akumulirana u ordinatama.

$$\frac{\partial E}{\partial a} = 2\sum_{i=1}^{n}(ax_i + b - y_i)x_i = 2\sum_{i=1}^{n} x_i^2 a + 2\sum_{i=1}^{n} x_i b - 2\sum_{i=1}^{n} x_i y_i = 0,$$

$$\frac{\partial E}{\partial b} = 2\sum_{i=1}^{n}(ax_i + b - y_i) = 2\sum_{i=1}^{n} x_i a + 2nb - 2\sum_{i=1}^{n} y_i = 0.$$

Stacionarna točka (a, b) za funkciju ukupne greške E bit će stoga rješenje sustava dvije linearne jednadžbe s dvije nepoznanice a i b:

$$s_{x^2} \cdot a + s_x \cdot b = s_{xy}$$

$$s_x \cdot a + n \cdot b = s_y$$

pri čemu je

$$s_{x^2} = \sum_{i=1}^{n} x_i^2$$

(zbroj kvadrata apscisa),

$$s_x = \sum_{i=1}^{n} x_i$$

(zbroj apscisa),

$$s_{xy} = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

(zbroj produkata apscisa s odgovarajućim ordinatama),

$$s_y = \sum_{i=1}^{n} y_i$$

(zbroj ordinata), a n je broj parova podataka (u pravilu to je broj mjerenja). Cramerovo pravilo za rješavanje sustava daje formule za nepoznati koeficijent smjera pravca

$$a = \frac{ns_{xy} - s_x s_y}{ns_{x^2} - s_x^2}$$

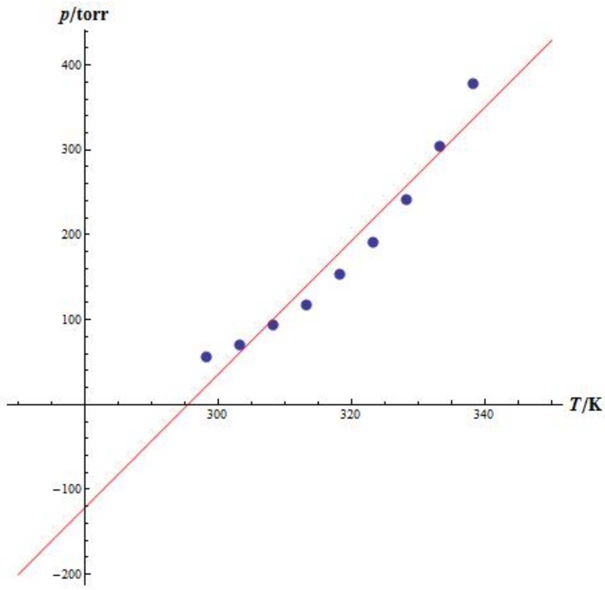
i slobodni član

$$b = \frac{s_{x^2} s_y - s_x s_{xy}}{ns_{x^2} - s_x^2}.$$

Za slučaj **aproksimacije kvadratnom funkcijom** na analogan način dobivamo sustav tri linearne jednadžbe s tri nepoznanice a, b i c:

$$(\sum_{i=1}^{n} x_i^4)a + (\sum_{i=1}^{n} x_i^3)b + (\sum_{i=1}^{n} x_i^2)c = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i,$$

$$(\sum_{i=1}^{n} x_i^3)a + (\sum_{i=1}^{n} x_i^2)b + (\sum_{i=1}^{n} x_i)c = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i,$$



Slika 5.1: Aproksimacija pravcem pomoću metode najmanjih kvadrata.

$$(vx_i^2)a + (\sum_{i=1}^{n} x_i)b + nc = \sum_{i=1}^{n} y_i.$$

Iz prethodnog vidimo da bismo za konkretnu tablicu (x_i, y_i)-ova lako izračunali koeficijente sustava i riješili sustav. Time bismo dobili stacionarnu točku za ukupnu grešku E. Radi li se o točki minimuma? Da. Intuitivni razlog za to je da je E „u bîti" kvadratna funkcija s pozitivnim vodećim koeficijentom (odnosno, zbroj takvih funkcija) pa očekujemo da ima točno jedan ekstrem koji je ujedno globalni minimum. Precizniji dokaz dobivamo pomoću Hesseove matrice.

Ostanimo pri aproksimaciji afinom funkcijom, tj. pravcem. Izračunati koeficijenti a i b precizno nam opisuju pravac u ravnini koji najbolje opisuje ovisnost koju smo eksperimentalno dobili u obliku n točaka. Pritom „najbolje" znači da se radi o pravcu koji (u pravilu) ne prolazi tim točkama, ali je to među svim pravcima u ravnini onaj oko kojeg su te točke najmanje rasute (ima najmanji zbroj odstupanja pojedinih točaka). Primjer takvog pravca prikazan je slikom 5.1.

Primjer 176. *Kad bismo metodom najmanjih kvadrata odredili afinu funkciju koja najbolje opisuje podatke iz primjera 175, dobili bismo* $\frac{p}{1\,\mathrm{torr}} = 7{,}8662\frac{T}{1\,\mathrm{K}} - 2324{,}2$. *To bi dalo tlak pri temperaturi* $28°\mathrm{C}$, *tj.* $301{,}15$ K, *iznosa* $p(301{,}15\ \mathrm{K}) = 44{,}714$ torr.

Pogledamo li bolje pripadnu sliku 5.1, podaci iz prvog primjera dosta očigledno odstupaju od afine ovisnosti. Problem je moguće preoblikovati korištenjem Clausius-Clapeyronove jednadžbe

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}T} = \frac{\Delta_{\mathrm{trs}} H}{T\Delta_{trs} V}.$$

S Δ_{trs} *označeni su reakcijski gradijenti pri faznom prijelazu. Pretpostavimo da je reakcijska entalpija faznog prijelaza* $\Delta_{\mathrm{trs}} H = \Delta_{\mathrm{vap}} H$ *konstantna. Nadalje,* $\Delta_{\mathrm{trs}} V =$

$\Delta_{\text{vap}}V \approx \Delta V_m = V_m(g) - V_m(l) \approx V_m(g) \approx RT/p$ *(pretpostavili smo da je molarni volumen tekuće faze zanemariv u odnosu na plinsku te da je plinska aproksimativno idealna). Time dobivamo sljedeći aproksimativni oblik Clausius-Clapeyronove jednadžbe*

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}T} = \frac{p\Delta_{\text{vap}}H}{RT^2}.$$

Separiramo varijable

$$\frac{\mathrm{d}p}{p} = \frac{\Delta_{\text{vap}}H}{R} \cdot \frac{\mathrm{d}T}{T^2}$$

pa integriramo:

$$\ln\frac{p}{1\,\text{torr}} = -\frac{\Delta_{\text{vap}}H}{R} \cdot \frac{1}{T} + C,$$

pri čemu je C konstanta integriranja i ovisi o promatranoj tvari i sustavu. Vidimo dakle da je $y = \ln\frac{p}{1\,\text{torr}}$ uz navedene pretpostavke afina funkcija od $x = \frac{1\,\text{K}}{T}$, s koeficijentom smjera $a = -\frac{\Delta_{\text{vap}}H}{R\cdot 1\,\text{K}}$ i slobodnim članom $b = C$.

Odgovarajuća tablica parova (x_i, y_i) je

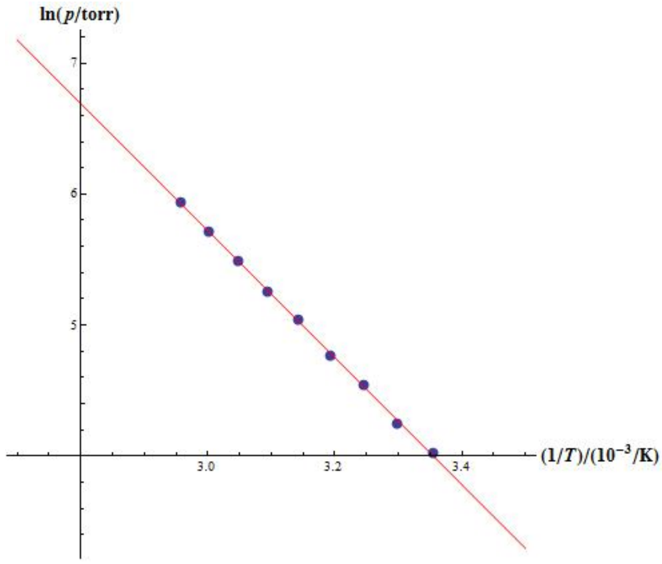
$1/T\,/10^{-3}K^{-1}$	$\ln\frac{p}{1\,\text{torr}}$
3,3540	4,0236
3,2987	4,2485
3,2452	4,5412
3,1934	4,7664
3,1432	5,0376
3,0945	5,2507
3,0474	5,4885
3,0017	5,7175
2,9573	5,9346

Prema izvedenom, podatke iz gornje tablice ima smisla aproksimirati afinom funkcijom. Metoda najmanjih kvadrata daje

$$y = 20{,}280 - 4853{,}1\,\text{K} \cdot x.$$

Podaci iz tablice i izračunati pravac prikazani su na slici 5.2. Za pitanje iz početnog primjera (koliki je tlak pri temperaturi $301{,}15$ K?) imali bismo $x = \frac{1}{301{,}15\,\text{K}}$ i $y = 4{,}16505$, tj. $p = 64{,}396$ torr. Da smo željeli izračunati entalpiju isparavanja, imali bismo $-\frac{\Delta_{vap}H}{R} = a = -4853{,}1$ K, pa uvrštavanje plinske konstante $R = 8{,}3145\ \text{J}\,\text{K}^{-1}\,\text{mol}^{-1}$ daje $\Delta_{\text{vap}}H = 40{,}351\ \text{kJ}\,\text{mol}^{-1}$.

Kao što vidimo iz prethodnog primjera, vrlo je bitno imati neki argument za korištenje određenog tipa aproksimacijske funkcije. Konkretno, Clausius-Clapeyronova jednadžba je bila argument da $\ln\frac{p}{1\,\text{torr}}$ aproksimiramo afinom funkcijom od $1/T$. Često ne postoji takav teorijski argument, nego eventualno skica parova podataka može sugerirati odgovarajući tip funkcije. Često je nužno isprobati i više mogućih aproksimacija.



Slika 5.2: Procjena tlaka temeljem metode najmanjih kvadrata.

Primjer 177. *Recimo da smo pri nekoj kemijskoj reakciji mjerili koncentracije (jedinog) reaktanta i želimo odrediti kojeg je reda reakcija. Imamo osnove za pretpostavku da je reakcija reda bar* 1 *i najviše* 3. *Reakcije s jednim reaktantom koje su prvog reda opisane su integriranim zakonom brzine*

$$\ln\frac{[\mathrm{A}]}{c^{\ominus}} = \ln\frac{[\mathrm{A}]_0}{c^{\ominus}} - k_1\nu_{\mathrm{A}}t,$$

reakcije drugog reda zakonom

$$\frac{1}{[\mathrm{A}]} = \frac{1}{[\mathrm{A}]_0} - k_2\nu_{\mathrm{A}}t,$$

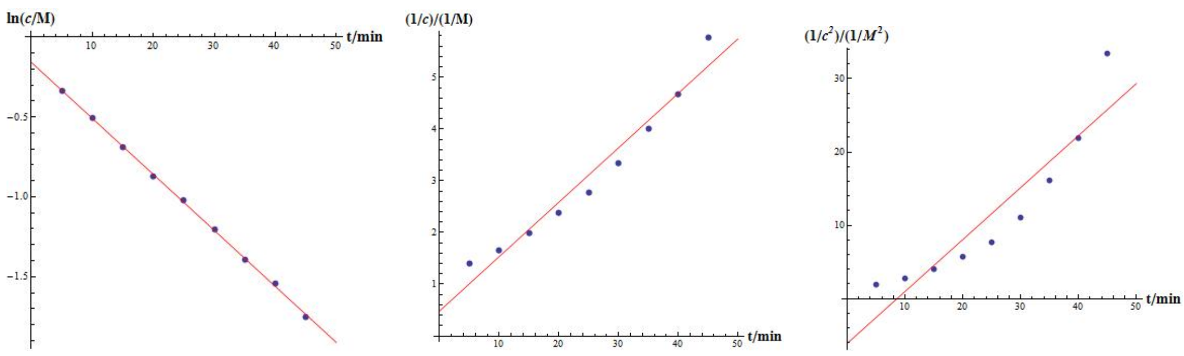
a reakcije trećeg reda s

$$\frac{1}{[\mathrm{A}]^2} = \frac{1}{[\mathrm{A}]_0^2} - 2k_3\nu_{\mathrm{A}}t.$$

Za dane podatke, ako ne znamo kojeg reda je reakcija, možemo isprobati tri aproksimacije afinom funkcijom i vidjeti koja daje najmanje greške $e_i = |f(x_i) - y_i|$.

Konkretno, neka su dani podaci

t/min	$[\mathrm{A}]/\mathrm{mol\,L^{-1}}$	$\ln\frac{[\mathrm{A}]}{c^{\ominus}}$	$1/[\mathrm{A}]/\mathrm{L\,mol^{-1}}$	$1/[\mathrm{A}]^2/\mathrm{L^2\,mol^{-2}}$
5	0,715	−0,33547	1,39860	1,95609
10	0,602	−0,50750	1,66113	2,75935
15	0,501	−0,69115	1,99601	3,98405
20	0,419	−0,86988	2,38663	5,69603
25	0,360	−1,02165	2,77778	7,71605
30	0,300	−1,20397	3,33333	11,11111
35	0,249	−1,39030	4,01606	16,12877
40	0,214	−1,54178	4,67289	21,83597
45	0,173	−1,75446	5,78035	33,41241



(a) (b) (c)

Slika 5.3: Usporedba podataka s pretpostavkama da je reakcija prvog (lijevo), drugog (sredina) ili trećeg reda (desno).

Pretpostavimo li da je reakcija prvog reda ($y = \ln \frac{[\mathrm{A}]}{c^{\ominus}}$, $x = \frac{t}{1\,\mathrm{min}}$, $a = -k_1\nu_\mathrm{A} \cdot 1\,\mathrm{min}$, $b = \ln \frac{[\mathrm{A}]_0}{c^{\ominus}}$) *dobijemo* $\ln \frac{[\mathrm{A}]}{c^{\ominus}} = -0{,}0350\,\mathrm{min}^{-1} \cdot t - 0{,}159$ *i pritom imamo greške*[3] *redom* $-0{,}00077921$, $0{,}0012463$, $-0{,}00321276$, $-0{,}00418592$, $0{,}00481993$, $0{,}00189726$, $-0{,}00119771$, $0{,}00400898$, $-0{,}00324552$ *Zadane točke i izračunati pravac prikazani su slikom 5.3 lijevo.*

Pretpostavka da je reakcija drugog reda ($y = 1\,\mathrm{mol\,L^{-1}}/[\mathrm{A}]$, $x = t/\mathrm{min}$, $a = -k_2\nu_\mathrm{A} \cdot 1\,\mathrm{mol\,min/L}$, $b = 1\,\mathrm{mol\,L^{-1}}/[\mathrm{A}]_0$) *daje* $\frac{1}{[\mathrm{A}]} = 0{,}105\frac{\mathrm{L}}{\mathrm{mol\,min}}t + 0{,}485\frac{\mathrm{L}}{\mathrm{mol}}$ *i pritom imamo greške*[4] *redom* $0{,}562624$, $-0{,}430326$, $0{,}452274$, $0{,}403668$, $0{,}352597$, $0{,}295654$, $0{,}246145$, $0{,}211982$, $0{,}171498$. *Pripadna slika je srednja od slika 5.3.*

Pretpostavka da je reakcija trećeg reda ($y = 1\,\mathrm{mol^2\,L^2}/[\mathrm{A}]^2$, $x = t/\mathrm{min}$, $a = -2k_3\nu_\mathrm{A} \cdot 1\,\mathrm{mol^2\,min/L^2}$, $b = 1\,\mathrm{mol^2\,L^2}/[\mathrm{A}]_0^2$) *daje* $\frac{1}{[\mathrm{A}]^2} = 0{,}709\frac{\mathrm{L^2}}{\mathrm{mol^2}}\,\mathrm{min} \cdot t - 6{,}11\frac{\mathrm{L^2}}{\mathrm{mol^2}}$ *i pritom imamo greške*[5] *redom* $2{,}259$; $0{,}888$; $0{,}263$; $1{,}19$; $1{,}953$; $2{,}029$; $1{,}293$; $0{,}212$; $3{,}803$. *Ovaj slučaj ilustriran je slikom 5.3 desno.*

Očito smo u prvom slučaju dobili najmanje greške (što je vidljivo i sa slike) te zaključujemo da je reakcija prvog reda, a koeficijent brzine reakcije je $k_1 = 0{,}0350$ min^{-1}.

Primjer 178. *Molarna provodnost kloroctene kiseline određena je pri nekoliko različitih koncentracija (uz konstantnu temperaturu). Dobiveni su podaci:*

$10^3 c$ / $\mathrm{mol\,dm^{-3}}$	$10^2 \Lambda$ / $\mathrm{S\,m^2\,mol^{-1}}$
0,110	3,621
0,303	3,289
0,590	2,956
2,82	1,971

[3] Ove greške su računate kao $c_i - (e^{y(x_i)}\ \mathrm{mol/L})$.

[4] Ove greške su računate kao $c_i - \frac{\mathrm{mol/L}}{y(x_i)}$.

[5] Ove greške su računate kao $c_i - \frac{\mathrm{mol^2/L^2}}{y(x_i)^2}$.

Za otopine slabih elektrolita primjenjiv je Ostwaldov zakon

$$\frac{1}{\Lambda} = \frac{1}{\Lambda_0} + \frac{c\Lambda}{K(\Lambda_0)^2},$$

gdje je Λ *molarna provodnost elektrolita (u* $\mathrm{S\,cm^2\,mol^{-1}}$*),* Λ_0 *molarna provodnost pri beskonačnom razrjeđenju (konstanta za promatrani elektrolit pri fiksnoj temperaturi),* K *je konstanta ravnoteže disocijacije slabog elektrolita (u* $\mathrm{mol\,cm^{-3}}$*), a* c *je množinska koncentracija (u* $\mathrm{mol\,dm^{-3}}$*).*

Pomoću metode najmanjih kvadrata odredit ćemo molarnu provodnost kloroctene kiseline pri beskonačnom razrjeđenju te konstantu ravnoteže disocijacije te kiseline.

Prvo je Ostwaldov zakon interpretiramo kao afinu funkciju $y = ax + b$ *stavljajući*

$$y = \frac{1\,\mathrm{S\,m^2\,mol^{-1}}}{\Lambda}, \quad x = \frac{c\Lambda}{10^{-3}\,\mathrm{S\,m^{-1}}},$$

$$a = \frac{1\,\mathrm{S^2\,m\,mol^{-1}}}{K(\Lambda_0)^2}, \quad b = \frac{1\,\mathrm{S\,m^2\,mol^{-1}}}{\Lambda_0}.$$

U drugom koraku potrebno je prilagoditi tablicu (x_i, y_i)*-ova gornjem obliku.*

$x_i = c_i\Lambda_i \;/\; \mathrm{S\,m^{-1}}$	$y_i = \Lambda_i^{-1} \;/\; \mathrm{mol\,S^{-1}\,m^{-2}}$
$3{,}9831 \cdot 10^{-6}$	27,6167
$9{,}96567 \cdot 10^{-6}$	30,4044
$17{,}4404 \cdot 10^{-6}$	33,8295
$55{,}5822 \cdot 10^{-6}$	50,7357

Sad se metodom najmanjih kvadrata mogu odrediti koeficijenti a i b:

x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
$3{,}9831 \cdot 10^{-6}$	27,6167	$1{,}58651 \cdot 10^{-11}$	0,00011
$9{,}96567 \cdot 10^{-6}$	30,4044	$9{,}93146 \cdot 10^{-11}$	0,000303
$17{,}4404 \cdot 10^{-6}$	33,8295	$3{,}04168 \cdot 10^{-10}$	0,00059
$55{,}5822 \cdot 10^{-6}$	50,7357	$3{,}08938 \cdot 10^{-9}$	0,00282
$s_x = 86{,}9714 \cdot 10^{-6}$	$s_y = 142{,}586$	$s_{x^2} = 3{,}50873 \cdot 10^{-9}$	$s_{xy} = 0{,}003823$

Dobivamo

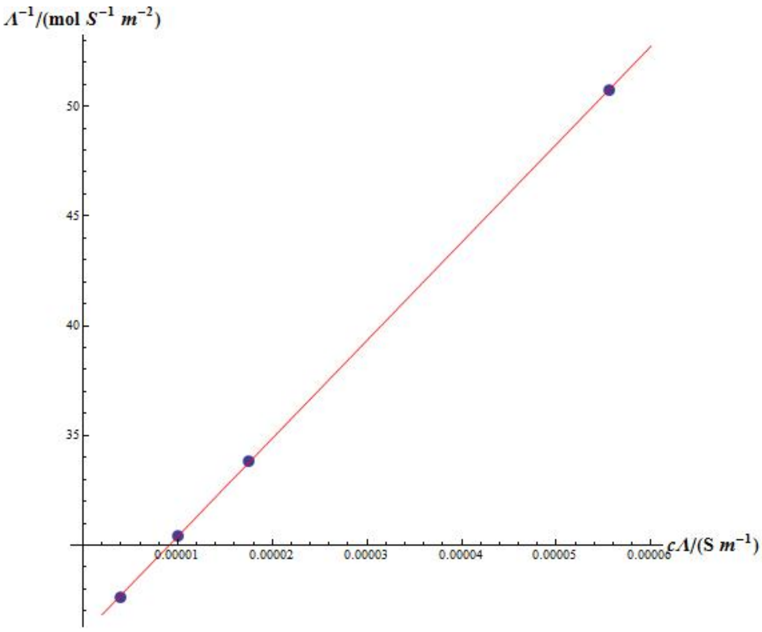
$$a = 446782{,}0\ \mathrm{mol\,S^{-2}\,m^{-1}},$$

$$b = \frac{1{,}67805 \cdot 10^{-7}}{6{,}47089 \cdot 10^{-9}} = 25{,}9322\ \mathrm{mol\,S^{-1}\,m^{-2}}.$$

Tražilo se određivanje Λ_0 *i* K*. Iz početnog povezivanja Ostwaldovog zakona s jednadžbom pravca slijedi da je*

$$\Lambda_0 = \frac{1}{b} = 0{,}038562\ \mathrm{S\,m^2\,mol^{-1}},$$

$$K = \frac{1}{a(\Lambda_0)^2} = \frac{b^2}{a} = 0{,}00150517\ \mathrm{mol\,m^{-3}}.$$



Slika 5.4: Graf uz primjer 178.

☼ **Ponovimo bitno...** Metoda najmanjih kvadrata služi određivanju one funkcije zadanog tipa (afine, kvadratne, ...) čija greška u odnosu na zadane podatke je najmanja; takvu funkciju zovemo najboljom aproksimacijom danih podataka. Ako su zadani podaci uređeni parovi realnih brojeva, greška funkcije f u odnosu na njih se definira kao zbroj kvadrata razlika između ordinata koje su poznate i ordinata koje dobijemo uvrštavanjem odgovarajuće apscise u funkciju f. Ako smo odabrali tip funkcije, onda greška E ovisi o dva ili više parametara koji određuju konkretnu funkciju (primjerice, ako funkcija treba biti afina, greška ovisi o koeficijentu smjera i slobodnom članu). Formule za određivanje nepoznatih koeficijenata tražene najbolje aproksimacije dobijemo sređivanjem formula dobivenih traženjem stacionarne točke greške E. ☺

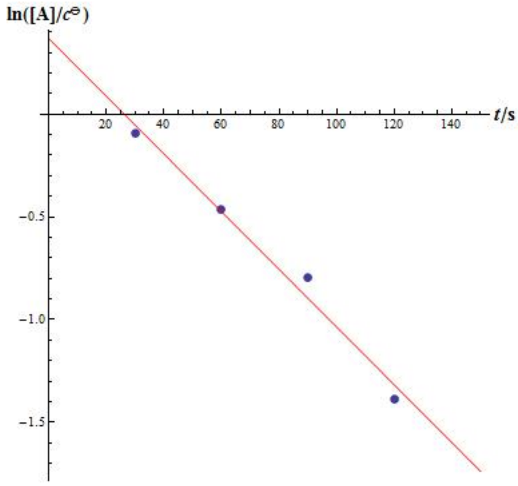
5.1 Zadaci za vježbu

1. Tokom reakcije prvog reda u četiri trenutka t zabilježene su iduće koncentracije jedinog reaktanta A (radi lakšeg računanja, zaokružene su na jednu decimalu):

t/s	30	60	90	120
[A]/mol L^{-1}	0,91	0,63	0,45	0,25

Poznato je da je vremenska ovisnost koncentracije za reakciju prvog reda dana s $[\mathrm{A}]=[\mathrm{A}]_0 e^{-k_1 t}$. Metodom najmanjih kvadrata (za aproksimaciju pravcem) odredite koeficijent k_1 brzine reakcije i početnu koncentraciju. Skicirajte rezultate mjerenja i dobiveni pravac u prikladnom koordinatnom sustavu.

Rješenje. $y = \ln\frac{[\mathrm{A}]}{c^{\ominus}}$, $x = \frac{t}{1\,\mathrm{s}}$, $a = -k_1 \cdot 1\,\mathrm{s}$, $b = \ln\frac{[\mathrm{A}]_0}{c^{\ominus}}$, $y = -0{,}014x + 0{,}37$,



Slika 5.5: Graf uz prvi zadatak.

$k_1 = 0{,}014\,\mathrm{s}^{-1}$.

2. Tokom reakcije drugog reda čija brzina ovisi samo o jednom reaktantu A u četiri trenutka t zabilježene su iduće koncentracije tog reaktanta:

t/min	2,0	4,0	6,0	8,0
[A]/mol L^{-1}	0,062	0,044	0,031	0,025

Poznato je da je vremenska ovisnost koncentracije u reakcijama drugog reda zadana s $\frac{1}{[\mathrm{A}]} = \frac{1}{[\mathrm{A}]_0} + k_2 t$. Metodom najmanjih kvadrata (za aproksimaciju pravcem) odredite koeficijent k_2 brzine reakcije i početnu koncentraciju. Skicirajte rezultate mjerenja i dobiveni pravac u prikladnom koordinatnom sustavu.

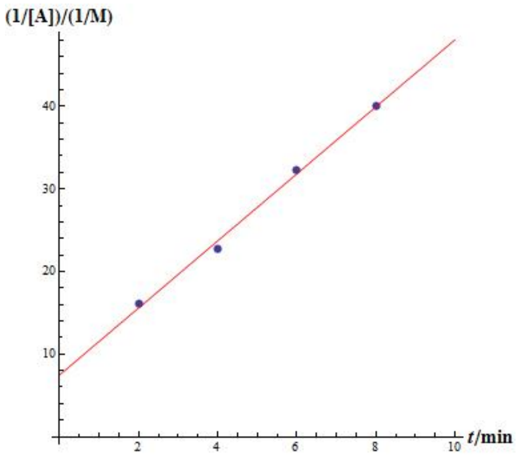
Rješenje. $y = \frac{1}{[\mathrm{A}]} \cdot 1\,\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}$, $x = \frac{t}{1\,\mathrm{min}}$, $a = k_2 \cdot 1\,\frac{\mathrm{mol\,min}}{\mathrm{L}}$, $b\frac{1}{[\mathrm{A}]_0} \cdot 1\,\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}$, $y = 4{,}1x + 7{,}5$, $k_2 = 4{,}1\,\frac{\mathrm{L}}{\mathrm{mol\,min}}$, $[\mathrm{A}]_0 = 0{,}13$ mol L^{-1}.

3. U kemijskoj termodinamici se veza standardne konstante ravnoteže i temperature može iskazati van't Hoff-ovom jednadžbom, čiji jedan oblik je

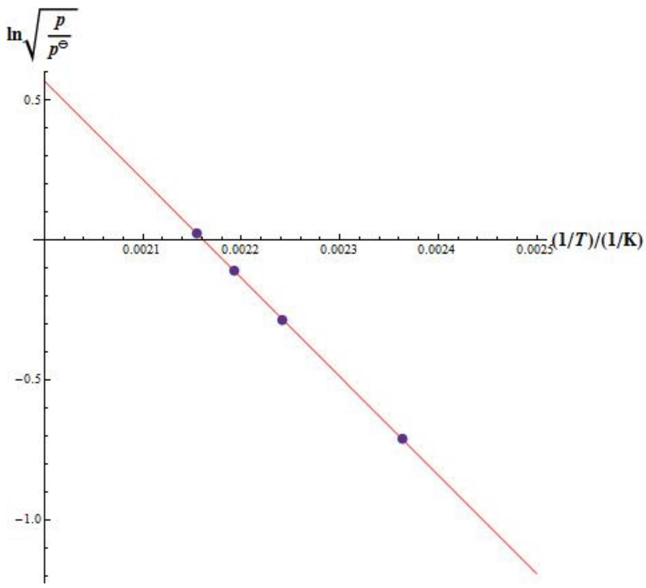
$$RT \ln K^{\ominus} = T\Delta_r S^{\ominus} - \Delta_r H^{\ominus}.$$

Interpretirajte tu jednadžbu kao jednadžbu pravca $y = ax + b$ u koordinatnom sustavu. Za reakciju $\mathrm{Ag_2O(s)} \rightleftharpoons 2\,\mathrm{Ag(s)} + \frac{1}{2}\mathrm{O_2(g)}$ izmjereni su ravnotežni tlakovi kisika pri različitim temperaturama:

t / °C	p / mmHg
150	182
173	422
183	605
191	790



Slika 5.6: Graf uz drugi zadatak.



Slika 5.7: Graf uz treći zadatak.

Veza između standardne konstante ravnoteže i parcijalnog tlaka kisika za ovaj slučaj opisana je jednadžbom

$$K^\ominus = \sqrt{\frac{p(\mathrm{O_2})}{p^\ominus}},$$

pri čemu je standardni tlak $p^\ominus = 10^5$ Pa $\approx 750,1$ mmHg. U koordinatni sustav (u skladu s ranije odabranom interpretacijom x- i y-osi) ucrtajte točke koje odgovaraju zadanim podacima. Metodom najmanjih kvadrata izračunajte koeficijente pravca koji aproksimira zadane podatke. Nacrtajte taj pravac i odredite reakcijsku entalpiju $\Delta_r H^\ominus$ za zadanu reakciju.

Rješenje. $y = \ln K^\ominus = \ln \sqrt{\frac{p(\mathrm{O_2})}{p^\ominus}}$, $x = 1\,\mathrm{K}/T$, $a = -\Delta_r H^\ominus/(R{\cdot}1\,\mathrm{K})$, $b = \Delta_r S^\ominus/R$, $y = 7{,}59966 - 3516{,}33x$, $\Delta_r H^\ominus = -Ra = 29{,}2365$ kJ/mol.

Poglavlje 6

Obične diferencijalne jednadžbe

6.1 Što su obične diferencijalne jednadžbe?

Mnogi fizikalni ili kemijski modeli svode se na traženje funkcija koje zadovoljavaju određene uvjete koji se mogu izraziti u obliku jednadžbe ili sustava jednadžbi. Osobito česte su jednadžbe koje iskazuju vezu između tražene funkcije i njenih derivacija.

Definicija 43 (Obična diferencijalna jednadžba)**.** *Obična diferencijalna jednadžba je jednadžba u kojoj je nepoznanica funkcija jedne varijable, a koja opisuje vezu između te funkcije i njenih derivacija (za proizvoljne vrijednosti nezavisne varijable t). Dakle, to je jednadžba oblika*

$$F(t, y, y', \ldots, y^{(n)}) = 0,$$

gdje je F neka skalarna funkcija (od $n+2$ varijable).

Red (stupanj) diferencijalne jednadžbe je red najviše derivacije nepoznate funkcije koja se u njoj pojavljuje: red jednadžbe $F(t, y, y', \ldots, y^{(n)}) = 0$ je n.

Rješenje (integral) takve jednadžbe na intervalu I je funkcija $y : I \to \mathbb{R}$ čije uvrštavanje u jednadžbu daje istinitu jednakost za svaku vrijednost varijable $t \in I$.

Možda nekoga zbunjuje riječ „obična” u nazivu: kad govorimo o običnim diferencijalnim jednadžbama, mislimo na one u kojima nepoznata funkcija ovisi samo o jednoj (realnoj) nezavisnoj varijabli, dok u slučaju funkcija više varijabli imamo parcijalne diferencijalne jednadžbe. U nastavku ćemo pod diferencijalnim jednadžbama podrazumijevati obične diferencijalne jednadžbe.

Primjer 179. *Jednadžba $\sin \frac{y}{y'} = e^t$ je diferencijalna jednadžba prvog reda, $y'y'' = y$ je diferencijalna jednadžba drugog, a $y''' - 3y' = 2e^y - t$ je diferencijalna jednadžba trećeg reda.*

Primjer 180. *Funkcija $y : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $y(t) = e^t$ je rješenje diferencijalne jednadžbe $y' = y$ jer uvrštavanje daje $e^t = e^t$, što vrijedi za sve t. Možete li pogoditi još koje rješenje iste diferencijalne jednadžbe?*

Osnovna tehnika u pozadini rješavanja diferencijalnih jednadžbi je integriranje. Najjednostavnije diferencijalne jednadžbe su oblika $y' = f(t)$ i one se mogu riješiti direktnim integriranjem.

Primjer 181. *Jednadžba*

$$y' = \sin x$$

je diferencijalna, i to takva da ju možemo riješiti direktnim integriranjem:

$$\int y' \, \mathrm{d}x = \int \sin x \, \mathrm{d}x,$$

$$y(x) = -\cos x + C.$$

Postoje mnoge podvrste diferencijalnih jednadžbi, razni postupci za njihovo rješavanje, a neke nisu egzaktno rješive. Mi ćemo se baviti onim vrstama koje su egzaktno rješive, a česte su kao modeli kemijskih i fizikalnih problema. Da bismo znali koje su to, potrebno je definirati neke vrste diferencijalnih jednadžbi.

Kako su u primjenama najčešće diferencijalne jednadžbe one u kojima je varijabla nepoznate funkcije vrijeme t, a same jednadžbe iskazuju vezu između nepoznate funkcije (pozicije, koncentracije, ...) i brzine njene promjene te eventualno ubrzanja, slijedi da su za primjene najbitnije diferencijalne jednadžbe prvog i drugog reda, te ćemo se baviti (gotovo) isključivo s njima. U kemiji, diferencijalne jednadžbe se najviše pojavljuju u kemijskoj kinetici. Toj temi će biti posvećen zadnji odjeljak ovog poglavlja.

Primjer 182. *Kretanje čestice mase m po pravcu (opisano pozicijom $x(t)$ u trenutku t) pod utjecajem sile $F(t)$ opisano je drugim Newtonovim zakonom, koji je diferencijalna jednadžba drugog reda:*

$$F(t) = m\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2}.$$

Ovisno o formuli koja opisuje silu koja djeluje na česticu, ta jednadžba može poprimiti niz različitih konkretnih oblika.

Diferencijalne jednadžbe u pravilu imaju beskonačno mnogo rješenja, koja se razlikuju do na jednu ili više konstanti.

Primjer 183. *Svaka funkcija oblika $y(x) = Ce^x$ (za svaku konstantu C) je rješenje diferencijalne jednadžbe $y' = y$.*

Definicija 44 (Opće, partikularno i singularno rješenje)**.** *Opće rješenje diferencijalne jednadžbe reda n je njeno rješenje koje sadrži n neodređenih konstanti. Partikularno rješenje je ono koje odgovara uvrštavanju konkretnih vrijednosti konstanti u opće rješenje. Singularno rješenje diferencijalne jednadžbe je njeno rješenje koje se ne može dobiti uvrštavanjem nikojih vrijednosti u konstante općeg rješenja.*

Primjer 184. *Opće rješenje diferencijalne jednadžbe $y' = y$ je $y(x) = Ce^x$. Primjer partikularnog rješenja te jednadžbe je $y(x) = 0$ koje se dobije za $C = 0$.*

Primjer 185. *Može se pokazati da je opće rješenje Clairautove jednadžbe*

$$y = xy' + (y')^2$$

oblika $y(x) = Cx + C^2$. No, i funkcija $y(x) = -\frac{1}{4}x^2$ je također rješenje: $-\frac{1}{4}x^2 = -\frac{1}{2}x \cdot x + \left(-\frac{1}{2}x\right)^2$. Očito ni za koji C ne možemo iz općeg rješenja dobiti $y(x) = -\frac{1}{4}x^2$, dakle je to singularno rješenje Clairautove jednadžbe.

U primjenama se u pravilu uz samu diferencijalnu jednadžbu pojavljuje i početni uvjet koji omogućuje odabir partikularnog rješenja koje odgovara postavljenom problemu.

Primjer 186. *Slobodni pad tijela mase* m *opisan je diferencijalnom jednadžbom* $mz''(t) = -mg$*, odnosno*

$$z''(t) = -g.$$

Ukoliko ishodište stavimo u mjesto otkud je tijelo počelo padati i pretpostavimo da je samo ispušteno, onda su nam poznata i dva dodatna podatka koja čine početni uvjet za gornju jednadžbu:

$$z(0\,\mathrm{s}) = 0\,\mathrm{m},$$
$$z'(0\,\mathrm{s}) = 0\,\mathrm{m\,s^{-1}}.$$

Definicija 45 (Početni uvjet)**.** *Diferencijalna jednadžba* $F(t, y, y', \ldots, y^{(n)}) = 0$ *je zadana s početnim uvjetom ako su poznate vrijednosti* $y(t_0)$, $y'(t_0)$, $\ldots$, $y^{(n-1)}(t_0)$ *za neku konkretnu vrijednost varijable* t_0.

Primjer 187. *Za slobodni pad integriranje daje* $z'(t) = -gt + C_1$ *pa* $z(t) = -\frac{g}{2}t^2 + C_1 t + C_2$*. Prema zadanim podacima o trenutku* $t = 0\,\mathrm{s}$ *slijedi*

$$z(0\,\mathrm{s}) = C_2 = 0\,\mathrm{m},$$
$$z'(0\,\mathrm{s}) = C_1 = 0\,\mathrm{m\,s^{-1}}.$$

Dakle, partikularno rješenje koje opisuje poziciju tijela koje je ispušteno s pozicije $z(0\,\mathrm{s}) = 0\,\mathrm{m}$ *je*

$$z(t) = -\frac{g}{2}t^2.$$

Početni uvjeti se uvijek „iskorištavaju” na kraju, tj. tek kad je određen potpun oblik općeg rješenja diferencijalne jednadžbe: oni služe odabiru partikularnog rješenja, a to ima smisla tek kad je određeno opće rješenje.

Napomena 18. *Strogo matematički, osnovno pitanje oko diferencijalnih jednadžbi je pitanje uz koje uvjete postoje njihova rješenja, odnosno kad su jedinstvena. Mi ćemo ovdje podrazumijevati da su za sve razmatrane tipove jednadžbi odgovarajući teoremi o postojanju i po potrebi o jedinstvenosti rješenja dokazani. Zainteresirani student može potrebnu matematičku teoriju naći u bilo kojem udžbeniku o običnim diferencijalnim jednadžbama za studij matematike.*

☼ **Ponovimo bitno...** Obične diferencijalne jednadžbe su jednadžbe koje opisuju nepoznatu funkciju jedne varijable preko veze između varijable, te funkcije i njenih derivacija. Najviša derivacija koja se u jednadžbi pojavljuje je red diferencijalne jednadžbe. Opće rješenje diferencijalne jednadžbe je njeno rješenje koje sadrži onoliko neodređenih konstanti koliki je red jednadžbe; uvrštavanjem konkretnih vrijednosti za te konstante dobivamo partikularno rješenje. Rješenja koja se ne mogu dobiti kao partikularna zovu se singularna. Ukoliko su uz diferencijalnu jednadžbu zadane vrijednosti nepoznate funkcije i njenih derivacija (do reda za jedan manjeg od reda jednadžbe) u nekoj konkretnoj vrijednosti varijable, kažemo da je jednadžba zadana s početnim uvjetom; početni uvjet omogućuje odabir vrijednosti konstanti u općem rješenju tako da dobijemo partikularno rješenje koje odgovara tom uvjetu. ☺

6.2 Metoda separacije varijabli

Mnoge diferencijalne jednadžbe prvog reda se mogu svesti na oblik

$$y' = f(t)g(y).$$

Primjerice, jednadžba $y' = y$ je oblika $y' = 1 \cdot y$, tj. $f(t) = 1$ i $g(y) = y$.

Takve diferencijalne jednadžbe (jednadžbe sa separiranim varijablama) rješavaju se sljedećim postupkom separacije varijabli:

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = f(t)g(y),$$

$$\frac{\mathrm{d}y}{g(y)} = f(t)\,\mathrm{d}t,$$

$$\int \frac{\mathrm{d}y}{g(y)} = \int f(t)\,\mathrm{d}t.$$

Načelno, svaki od dva integrala u prethodnom koraku sa sobom nosi svoju konstantu integriranja. No, ako je $G(y)+C_y$ neodređeni integral od $1/g(y)$, a $F(t)+C_t$ neodređeni integral od $f(t)$, dobili bismo $G(y)+C_y = F(t)+C_t$, tj. $G(y) = F(t)+C_y-C_t$. Kako je razlika konstanti konstanta, možemo to kraće pisati $G(y) = F(t)+C$, tj. pri integriranju jednadžbe sa separiranim varijablama konstantu integriranja pišemo samo na desnoj strani.

Primjer 188. *Riješimo jednadžbu*

$$xy' = y.$$

Imamo

$$x\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = y,$$

$$\frac{\mathrm{d}y}{y} = \frac{\mathrm{d}x}{x},$$

pa integriranje daje

$$\ln|y| = \ln|x| + C_0.$$

Kako nas zanima funkcija y, a ne $\ln|y|$, ako na prethodnu jednadžbu djelujemo s inverznom funkcijom (eksponencijalnom s bazom e) dobivamo

$$|y| = e^{C_0}|x|.$$

Kako je C_0 konstanta, i e^{C_0} je konstanta pa ćemo ju zvati C:

$$|y| = C|x|.$$

Kako je $|y|$ jednak y ili $-y$ i analogno za $|x|$, možemo smatrati da je odgovarajuće kombinacija predznaka uključena u konstantu C te je konačni oblik rješenja

$$y = Cx.$$

Više primjera jednadžbi rješivih separacijom varijabli možete naći u poglavlju o primjenama običnih diferencijalnih jednadžbi u kemijskoj kinetici.

Često se također događa da sama jednadžba nije rješiva separacijom varijabli, ali uz jednostavnu supstituciju postaje takva. Primjer su homogene jednadžbe o kojima govorimo u sljedećem poglavlju.

☼ **Ponovimo bitno...** Separacijom varijabli možemo riješiti one diferencijalne jednadže prvog reda koje se mogu zapisati u obliku u kojem su svi članovi s nepoznatom funkcijom na jednoj, a svi članovi s njenom varijablom na drugoj strani jednakosti. U tom slučaju za dobivanje općeg rješenja potrebno je integrirati obje strane jednadžbe. ☺

6.3 Homogene diferencijalne jednadžbe

Homogene diferencijalne jednadžbe su jednadžbe koje se mogu zapisati u obliku

$$y' = f\left(\frac{y}{t}\right).$$

Ne valja ih miješati s homogenim linearnim jednadžbama, o kojima ćemo govoriti u sljedećem odjeljku. Homogene diferencijalne jednadžbe rješavaju se supstitucijom

$$u = \frac{y}{t}.$$

Dakle, $u' = \frac{ty'-y}{t^2} = \frac{y'}{t} - \frac{u}{t}$, iz čega slijedi $tu' = y' - u$, tj.

$$y' = tu' + u.$$

Time naša jednadžba poprima oblik

$$tu' + u = F(u),$$

a ona se može riješiti separacijom varijabli.

Primjer 189. *Jednadžba $ty' = 5t + 2y$ je homogena: dijeljenjem s t poprima oblik*

$$y' = 5 + 2\frac{y}{t}.$$

Supstitucija $u = \frac{y}{t}$ daje $tu' + u = 5 + 2u$, tj. $tu' = 5 + u$. Separacija varijabli prevodi ju u oblik

$$\frac{\mathrm{d}u}{5+u} = \frac{\mathrm{d}t}{t}.$$

Integriranje daje $\ln|5+u| = \ln|t| + C_0$, odnosno

$$5 + \frac{y}{t} = Ct.$$

Stoga je opće rješenje polazne jednadžbe

$$y = Ct^2 - 5t.$$

Napomena 19. *Postoji mnogo vrsta diferencijalnih jednadžbi koje se, poput homogenih, pogodnom supstitucijom mogu svesti na diferencijalne jednadžbe sa separiranim varijablama.*

☼ **Ponovimo bitno...** Homogene diferencijalne jednadžbe su prvog reda koje se mogu svesti na oblik u kojem je derivacija nepoznate funkcije y izjednačena s izrazom koji se može zapisati kao funkcija od u gdje je $u = y/t$ (t je varijabla nepoznate funkcije y). Supstitucijom $u = y/t$ one se svode na oblik rješiv separacijom varijabli.☺

6.4 Egzaktne diferencijalne jednadžbe

Egzaktne diferencijalne jednadžbe su one koje se mogu zapisati u obliku „egzaktan diferencijal dviju varijabli jednako nula", tj. koje su oblika

$$M\,\mathrm{d}x + N\,\mathrm{d}y = 0$$

uz uvjet

$$\frac{\partial M}{\partial y} = \frac{\partial N}{\partial x}.$$

Prema prethodnom postoji funkcija dviju varijabli f (potencijal konzervativnog vektorskog polja (M, N)) takva da je $\mathrm{d}f = M\,\mathrm{d}x + N\,\mathrm{d}y = 0$. Kako je diferencijal konstantne funkcije nulfunkcional, a za slučaj glatkih funkcija i pogodnih domena vrijedi i obrat, slijedi da se takva jednadžba može integrirati čime dobijemo rješenje u implicitnom obliku $f(x, y) = 0$.

Primjer 190. *Vidjeli smo da je diferencijal $y^2\,\mathrm{d}x + 2xy\,\mathrm{d}y$ egzaktan te je diferencijalna jednadžba*

$$y^2 + 2xyy' = 0$$

egzaktna. Zbog egzaktnosti znamo da postoji f takva da je da je $\frac{\partial f}{\partial x} = y^2$ i $\frac{\partial f}{\partial y} = 2xy$. Integrirajmo prvu jednakost po x. Time dobijemo

$$f(x, y) = y^2x + C(y)$$

(jer deriviranje po x bilo koje funkcije $C(y)$ koja ovisi o y, a ne i o x daje nulu). Deriviramo posljednju jednakost po y (onoj varijabli po kojoj još nismo integrirali) i dobijemo

$$\frac{\partial f}{\partial y} = 2xy + C'(y).$$

Znamo $\frac{\partial f}{\partial y} = 2xy$ pa slijedi $C'(y) = 0$ tj. C je konstanta. Sve skupa daje:

$$f(x, y) = y^2x + C$$

odnosno opće rješenje diferencijalne jednadžbe je svaka krivulja zadana implicitnom jednadžbom oblika

$$y^2x + C = 0.$$

Ako bismo još imali i početni uvjet $y(0) = 1$, uvrštavanje $x = 0$ i $y = 1$ u opće rješenje dobivamo

$$0 = C$$

tj. partikularno rješenje koje zadovoljava $y(0) = 1$ je

$$y^2 x = 0.$$

Kako ga vizualizirati? Produkt dva broja je nula ako i samo ako je bar jedan od njih nula te je stoga $y^2 x = 0$ isto kao reći: x je nula ili y je nula. Stoga je ovo partikularno rješenje diferencijalne jednadžbe unija pravaca $x = 0$ i $y = 0$ (tj. koordinatni sustav).

Ponekad se iz neegzaktnog diferencijala $M\,\mathrm{d}x + N\,\mathrm{d}y$ množenjem s pogodnom funkcijom μ istih varijabli x i y dobije egzaktan diferencijal $\mu M\,\mathrm{d}x + \mu M\,\mathrm{d}y$. U tom slučaju μ zovemo Euler-ovim multiplikatorom. Iz Euler-ovog kriterija egzaktnosti primijenjenog na diferencijal $\mu M\,\mathrm{d}x + \mu M\,\mathrm{d}y$ dobije se parcijalna diferencijalna jednadžba za μ. No, u nekim slučajevima $\mu = \mu(x)$ (ili $\mu = \mu(y)$). U takvim slučajevima μ je rješenje diferencijalne jednadžbe oblika

$$-N\mu'(x) + \left(\frac{\partial M}{\partial y} - \frac{\partial N}{\partial x}\right)\mu(x) = 0$$

odnosno

$$M\mu'(y) + \left(\frac{\partial M}{\partial y} - \frac{\partial N}{\partial x}\right)\mu(y) = 0$$

Primjer 191.

$$y - xy' = 0, \quad \mu'(x) = -\frac{2}{x}\mu(x), \quad \mu(x) = \pm\frac{1}{x^2}$$

Provjera egzaktnosti daje da treba odabrati „− varijantu”.

☼ **Ponovimo bitno...** Egzaktna diferencijalna jednadžba je ona koja se dobije izjednačavanjem egzaktnog diferencijala dviju varijabli s nulom. Ako je taj diferencijal diferencijal funkcije f, rješenje diferencijalne jednadžbe je implicitno zadana funkcija $f(x, y) = 0$. ☺

6.5 Linearne diferencijalne jednadžbe s konstantnim koeficijentima

Linearna diferencijalna jednadžba je jednadžba čiji se oblik može opisati kao „linearna kombinacija nepoznate funkcije i njenih derivacija jednaka je nekoj funkciji osnovne varijable”; pritom koeficijenti u toj linearnoj kombinaciji mogu ovisiti o osnovnoj varijabli. Linearna diferencijalna jednadžba je homogena ako nema člana koji ovisi samo o osnovnoj varijabli, a ne i o nepoznatoj funkciji. Formalnije:

Definicija 46 (Linearne diferencijalne jednadžbe). *Linearna diferencijalna jednadžba reda n je diferencijalna jednadžba oblika*

$$a_n(t)y^{(n)} + \ldots + a_2(t)y'' + a_1(t)y' + a_0(x)y = f(t).$$

Ukoliko je f nulfunkcija govorimo o homogenoj linearnoj jednadžbi. U slučaju nehomogene jednadžbe $a_n(t)y^{(n)} + \ldots + a_2(t)y'' + a_1(t)y' + a_0(t)y = f(t)$, homogenu jednadžbu $a_n(t)y^{(n)} + \ldots + a_2(t)y'' + a_1(t)y' + a_0(t)y = 0$ zovemo pripadnom homogenom jednadžbom.

Ako su sve funkcije $a_n, \ldots, a_0$ konstantne, govorimo o linearnoj diferencijalnoj jednadžbi s konstantnim koeficijentima (homogenoj ili nehomogenoj).

Primjer 192. *Jednadžbe $\sin \frac{y}{y'} = e^t$ i $y'y'' = y$ nisu linearne, a $y''' - 3y' = 2e^y - t$ je nehomogena linearna diferencijalna jednadžba s konstantnim koeficijentima.*

Za primjene su najbitnije linearne diferencijalne jednadžbe prvog reda i linearne diferencijalne jednadžbe drugog reda s konstantnim koeficijentima te ćemo samo njih detaljnije obraditi. Stoga ponovimo opću definiciju za ta dva važna posebna slučaja. Linearna diferencijalna jednadžba prvog reda je diferencijalna jednadžba koja se može zapisati u obliku

$$y' + f(t)y = g(t).$$

Linearna diferencijalna jednadžba drugog reda s konstantnim koeficijentima je diferencijalna jednadžba koja se može zapisati u obliku

$$a_2y'' + a_1y' + a_0y = f(t).$$

Primjer 193. *Diferencijalna jednadžba $y'' - 5y' + 4y = e^t$ je (nehomogena) linearna diferencijalna jednadžba drugog reda s konstantnim koeficijentima, a $y' - y\cos t = 2$ je linearna diferencijalna jednadžba prvog reda, no nije s konstantnim koeficijentima. Jednadžba $y' - 5y = 0$ je homogena linearna diferencijalna jednadžba prvog reda s konstantnim koeficijentima.*

Zajedničko rješavanju svih tipova linearnih diferencijalnih jednadžbi je da se prvo određuje rješenje pripadne homogene jednadže (to je jednadžba koja se iz polazne dobiva zamjenom nehomogenog člana nulfunkcijom). Ako polazna jednadžba nije homogena, onda se određenim postupcima iz rješenja pripadne homogene jednadžbe određuje opće rješenje i ono je uvijek zbroj općeg rješenja pripadne homogene jednadžbe s jednim partikularnim rješenjem polazne, nehomogene jednadžbe. Posvetimo se prvo linearnim jednadžbama prvog reda. Ukoliko je takva jednadžba homogena, ona je oblika

$$y' + f(t)y = 0$$

i može se riješiti separacijom varijabli:

$$\frac{\mathrm{d}y}{y} = -f(t)\,\mathrm{d}t,$$

$$\ln|y| = -F(t) + C_0,$$

(s F je označena neka antiderivacija od f),

$$y = Ce^{-F(t)}.$$

Primjer 194. *U primjenama su vrlo česte jednadžbe koje opisuju situaciju kad je brzina promjene neke fizikalne veličine u svakom trenutku proporcionalna trenutnom iznosu te veličine. Takav kontekst opisiv je homogenom linearnom diferencijalnom jednadžbom prvog reda*

$$y' = ky.$$

Njeno opće rješenje je

$$y = Ce^{kt}.$$

Tako je recimo radioaktivni raspad opisan jednadžbom koja iskazuje zakonitost da je u svakom trenutku brzina radioaktivnog raspada (promjena brojnosti radioaktivnih atoma u vremenu) proporcionalna trenutnom broju prisutnih atoma:

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} = -\lambda N,$$

gdje je $\lambda > 0$ konstanta radioaktivnog raspada, a predznak minus dolazi jer broj radioaktivnih atoma pada s vremenom pa derivacija $\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t}$ mora biti negativna. Gore opisanim postupkom dobivamo integrirani oblik zakona radioaktivnog raspada

$$N(t) = Ce^{-\lambda t}.$$

Ako smo u početnom trenutku imali N_0 atoma, uvrštavanje $t = 0\,\mathrm{s}$ u prethodnu jednadžbu povlači da je

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}.$$

Zadatak 16. *U poglavlju o deriviranju, u primjerima* **??** *i* **??***, susreli smo se s primjerom u kojem je temperatura patke koja se peče u pećnici opisana diferencijalnom jednadžbom oblika*

$$\frac{\mathrm{d}\vartheta}{\mathrm{d}t} = k(200^\circ\mathrm{C} - \vartheta)$$

s početnim uvjetom $\vartheta(0\,\mathrm{min}) = 2^\circ\,\mathrm{C}$. Tamo je bilo navedeno rješenje. Provjerite točnost tog rješenja, tj. riješite gornju diferencijalnu jednadžbu uz navedeni početni uvjet.

Ako imamo nehomogenu linearnu diferencijalnu jednadžbu prvog reda

$$y' + f(t)y = g(t),$$

prvo se odredi opće rješenje $y_H = Ce^{-F(t)}$ pripadne homogene jednadžbe $y' + f(t)y = 0$. Opće rješenje polazne jednadžbe može se odrediti na više načina, od kojih ćemo ovdje opisati samo jedan: metodu varijacije konstante. Ona se sastoji u tome da neodređenu konstantu C u y_H proglasimo funkcijom varijable t te tako shvaćeni y_H uvrstimo u polaznu jednadžbu, čime ćemo dobiti diferencijalnu jednažbu za C. Preciznije, ako je $y_H = Ce^{-F(t)}$ rješenje pripadne homogene jednadžbe, u $y' + f(t)y = g(t)$ uvrstimo $C(t)e^{-F(t)}$ na mjesto y (sjetimo se: $F'(t) = f(t)!$):

$$C'(t)e^{-F(t)} + C(t)e^{-F(t)}(-f(t)) + f(t)C(t)e^{-F(t)} = g(t),$$

$$C'(t) = g(t)e^{F(t)}.$$

Integriranjem prethodnog izraza dobivamo C, čije uvrštavanje u $y(t) = C(t)e^{-F(t)}$ daje opće rješenje jednadžbe $y' + f(t)y = g(t)$.

Primjer 195. *Riješimo jednadžbu $xy' - y + x^2 = 0$. U standardnom obliku ona izgleda ovako:*

$$y' - \frac{1}{x}y = -x.$$

Pripadna homogena jednadžba je

$$y' - \frac{1}{x}y = 0$$

i njeno rješenje je

$$y_H(x) = Cx.$$

Ako C shvatimo kao funkciju od x dobijemo $y' = C'(x)x + C(x)$, što uvrštavanjem u polaznu jednadžbu daje

$$C'(x)x + C(x) - \frac{C(x)x}{x} = -x,$$

tj.

$$C'(x) = -1.$$

Integriranjem dobijemo

$$C(x) = -x + C$$

pa je konačno rješenje polazne diferencijalne jednadžbe

$$y(x) = (C - x)x.$$

Primjer 196. *Objekt mase m izbačen je iz helikoptera. Potrebno je odrediti njegovu brzinu u proizvoljnom trenutku ako se pretpostavi da je u svakom trenutku otpor zraka proporcionalan trenutnoj brzini.*

Nepoznata funkcija je funkcija v (kojoj je varijabla vrijeme t). Prema drugom Newtonovom zakonu je

$$mv' = mg - kv$$

gdje je k konstanta proporcionalnosti između otpora zraka i brzine. Prebacivanje člana $-kv$ na lijevu stranu i dijeljenje s m daje jednadžbu

$$v' + \frac{k}{m}v = g,$$

što je linearna diferencijalna jednadžba prvog reda za funkciju v. Pripadna homogena jednadžba je

$$v' + \frac{k}{m}v = 0$$

i njeno rješenje je

$$v_H(t) = Ce^{-\frac{k}{m}t}.$$

Metodom varijacije konstante C dobivamo jednadžbu za C oblika

$$C'(t) = ge^{\frac{k}{m}t}$$

iz čega integriranjem dobijemo

$$C(t) = \frac{mg}{k} e^{\frac{k}{m}t} + C.$$

Stoga je ovisnost brzine objekta izbačenog iz helikoptera dana s

$$v(t) = \left(\frac{mg}{k} e^{\frac{k}{m}t} + C \right) e^{-\frac{k}{m}t} = \frac{mg}{k} + Ce^{-\frac{k}{m}t}.$$

Primijetimo da je to rješenje primjenjivo samo za slučajeve kad ima otpora zraka jer nije definirano za slučaj $k = 0\,\mathrm{kg\,s^{-1}}$. Odredite rješenje kad nema otpora zraka!

Posvetimo se se sad linearnim diferencijalnim jednadžbama drugog reda s konstantnim koeficijentima. I one se rješavaju preko pripadne homogene jednadžbe pa ćemo prvo opisati postupak rješavanja jednadžbi

$$a_2 y'' + a_1 y' + a_0 y = 0.$$

Ideja rješavanja ovakve jednadžbe je da pretpostavimo da je neko od rješenja oblika $y(t) = e^{xt}$ za neku konstantu x (tzv. test-rješenje). Uvrštavanjem u diferencijalnu jednadžbu ($y'(t) = xe^{xt}$, $y''(t) = x^2 e^{xt}$) daje

$$a_2 x^2 e^{xt} + a_1 x e^{xt} + a_0 e^{xt} = 0.$$

Kako je $e^{xt} \neq 0$ za sve x i t slijedi da je test-rješenje stvarno rješenje ako x zadovoljava kvadratnu jednadžbu $a_2 x^2 + a_1 x + a_0 = 0$.

Napomena 20. *Analogno bi se za homogenu linearnu diferencijalnu jednadžbu n-tog reda s konstantnim koeficijentima $a_n y^{(n)} + \ldots + a_2 y'' + a_1 y' + a_0 y = 0$ uvrštavanjem test-rješenja $y(t) = e^{xt}$ dobio uvjet da x mora zadovoljavati $a_n x^n + \ldots + a_2 x^2 + a_1 x + a_0 = 0$.*

Definicija 47 (Karakteristična jednadžba)**.** *Karakteristična jednadžba linearne diferencijalne jednadžbe s konstantnim koeficijentima $a_n y^{(n)} + \ldots + a_2 y'' + a_1 y' + a_0 y = f(t)$ je polinomijalna jednadžba*

$$a_n x^n + \ldots + a_2 x^2 + a_1 x + a_0 = 0.$$

Dakle, karakterističnu jednadžbu za linearnu diferencijalnu jednadžbu s konstantnim koeficijentima dobijemo tako da u pripadnoj homogenoj jednadžbi redom zamijenimo y s 1, y' s x, y'' s x^2 itd.

Primijetimo da, ako je $y(t) = e^{xt}$ rješenje, onda je (zbog linearnosti deriviranja i same jednadžbe) za svaku konstantu C također $y(t) = Ce^{xt}$ rješenje polazne diferencijalne jednadžbe. Stoga svako rješenje karakteristične jednadžbe x doprinosi po jednim članom oblika Ce^{xt} općem rješenju jednadžbe $a_n y^{(n)} + \ldots + a_2 y'' + a_1 y' + a_0 y = 0$. Nadalje, za različite x_i funkcije $y(t) = Ce^{x_i t}$ su linearno nezavisne.

Primjer 197. *Funkcije $f(t) = e^{2t}$ i $g(t) = e^{-5t}$ su linearno nezavisne jer bi inače postojao skalar (konstanta) α takav da je $e^{2t} = \alpha e^{-5t}$ za sve vrijednosti t (dvije funkcije su jednake ako i samo ako imaju istu domenu i kodomenu i za sve vrijednosti varijable poprimaju iste vrijednosti). Dakle, trebalo bi biti $e^{7t} = \alpha =$ konstanta za sve t, tj. funkcija e^{7t} bi trebala biti konstantna, što nije.*

Ključna činjenica za rješavanje homogenih linearnih diferencijalnih jednadžbi s konstantnim koeficijentima[1] je sljedeći teorem:

Teorem 11. *Skup svih rješenja homogene linearne diferencijalne jednadžbe (n-tog reda) s konstantnim koeficijentima čini (n-dimenzionalni) vektorski prostor, tj. zbroj bilo koja dva rješenja jednadžbe i svaki skalarni višekratnik nekog rješenja jednadžbe su ponovno rješenja iste jednadžbe, a svako rješenje je linearna kombinacija n odabranih linearno nezavisnih rješenjâ.*

Dio gornjeg teorema koji tvrdi da je skup rješenja homogene linearne diferencijalne jednadžbe vektorski prostor se lako dokaže, te ćemo to i učiniti za jednadžbe drugog reda. Ako su y_1 i y_2 dva rješenja jednadžbe $a_2y'' + a_1y' + a_0y = 0$ te C_1 i C_2 dvije konstante (skalari), onda je $a_2(C_1y_1 + C_2y_2)'' + a_1(C_1y_1 + C_2y_2)' + a_0(C_1y_1 + C_2y_2) = C_1(a_2y_1'' + a_1y_1' + a_0y_1) + C_2(a_2y_2'' + a_1y_2' + a_0y_2) = 0$, dakle je i $C_1y_1 + C_2y_2$ rješenje iste jednadžbe.

Iz gornjeg zaključujemo: karakteristična jednadžba jednadžbe $a_2y'' + a_1y' + a_0y = 0$ je kvadratna jednadžba, koja može imati dva različita rješenja (realna ili kompleksna) x_1 i x_2 te je u tom slučaju opće rješenje polazne diferencijalne jednadžbe oblika

$$y(t) = C_1e^{x_1t} + C_2e^{x_2t}.$$

Primjer 198. *Za jednadžbu $y'' - 4y' + 5y = 0$ karakteristična jednadžba $x^2 - 4x - 5 = 0$ ima dva rješenja: $x_1 = 5$ i $x_2 = -1$ pa je rješenje $y(t) = C_1e^{5t} + C_2e^{-t}$.*

Mali problemi nastaju ako karakteristična jednadžba nema dva različita (realna ili kompleksna) rješenja, nego samo jedno (dvostruko) realno rješenje x. Tada bi pisanje $x_1 = x_2 = x$ dalo rješenje $C_1e^{xt} + C_2e^{xt} = Ce^{xt}$ (za $C = C_1 + C_2$), koje nije opće (opće rješenje jednadžbe drugog reda sadrži dvije slobodne konstante). To je posljedica činjenice da u slučaju jedinstvenog rješenja karakteristične jednadžbe imamo degeneraciju (pripadna rješenja diferencijalne jednadžbe su linearno zavisna). Stoga nam u tom slučaju treba još jedno, s e^{xt} linearno nezavisno, rješenje. Ono se dobiva pokušajem s test-funkcijom $y(t) = te^{xt}$ te u slučaju jedinstvenog rješenja x karakteristične jednadžbe opće rješenje jednadžbe $a_2y'' + a_1y' + a_0y = 0$ poprima oblik

$$y(t) = C_1e^{xt} + C_2te^{xt}.$$

Primjer 199. *Rješenje diferencijalne jednadžbe $y'' + 4y' + 4y = 0$ je $y(t) = C_1e^{-2t} + C_2te^{-2t}$.*

Napomena 21. *Opće rješenje homogene linearne diferencijalne jednadžbe n-tog reda je linearna kombinacija od ukupno n članova koji su oblika Ct^ke^{xt}, gdje su x-evi rješenja karakteristične jednadžbe. Pritom za svaki takav x eksponent k poprima vrijednosti $0, 1, \ldots,$ i to onoliko njih kolika je kratnost x kao rješenja karakteristične jednadžbe.*

---

[1] Isti teorem vrijedi i općenitije, za sve homogene linearne diferencijalne jednadžbe, ne samo za one s konstantnim koeficijentima.

Ovdje se treba osvrnuti i na slučaj kompleksnih rješenja karakteristične jednadžbe. Podsjetimo se: ako kvadratna jednadžba ima kompleksna rješenja, ona su međusobno kompleksno konjugirana (dakle i različita). Za kvadratnu jednadžbu $a_2x^2 + a_1 + a_0 = 0$ imamo

$$x_{1,2} = \frac{-a_1 \pm \sqrt{a_1^2 - 4a_0a_2}}{2a_0}.$$

Ako je diskriminanta $D = a_1^2 - 4a_0a_2$ negativna, onda je $-D > 0$ pa je

$$x_{1,2} = \frac{-a_1}{2a_0} \pm i\frac{\sqrt{-D}}{2a_0}.$$

Realni dio ta dva rješenja je $a = -\frac{a_1}{2a_0}$, a imaginarni je plus odnosno minus $\frac{\sqrt{-D}}{2a_0}$. Uvrštavanje u formulu za opće rješenje $y(t) = c_1e^{x_1t}+c_2e^{x_2t}$ daje (uz korištenje Eulerove formule, parnosti kosinusa i neparnosti sinusa):

$$y(t) = c_1e^{x_1t} + c_2e^{x_2t} = c_1e^{at+ibt} + c_2e^{at-ibt} = e^{at}(c_1e^{ibt} + c_2e^{-ibt}) =$$

$$= e^{at}(c_1\cos(bt) + ic_1\sin(bt) + c_2\cos(bt) - ic_2\sin(bt)) =$$

$$= e^{at}((c_1 + c_2)\cos(bt) + i(c_1 - c_2)\sin(bt)).$$

Ako nas zanimaju samo realne funkcije y, brojevi $C_1 = c_1 + c_2$ i $C_2 = i(c_1 - c_2)$ moraju biti realni, što je uvijek moguće postići pogodnim odabirom kompleksnih konstanti c_1 i c_2. Stoga je u slučaju kompleksnih rješenja karakteristične jednadžbe uobičajeno opće rješenje od $a_2y'' + a_1y' + a_0y = 0$ pisati u obliku

$$y(t) = e^{at}(C_1\cos(bt) + C_2\sin(bt)),$$

gdje je a realni, a b imaginarni dio jednog od dva kompleksna rješenja karakteristične jednadžbe.

Primjer 200. *Riješimo diferencijalnu jednadžbu*

$$2y'' + y' + 5y = 0.$$

Karakteristična jednadžba je

$$2x^2 + x + 5 = 0$$

i ona nema realnih rješenja. Računamo:

$$a = -\frac{1}{2\cdot 2} = -\frac{1}{4}, \quad b = \frac{\sqrt{4\cdot 5\cdot 2 - 1^2}}{2\cdot 2} = \frac{\sqrt{39}}{4}.$$

Slijedi da je

$$y(t) = e^{-t/4}\left(C_1\cos\left(\frac{\sqrt{39}}{4}t\right) + C_2\sin\left(\frac{\sqrt{39}}{4}t\right)\right).$$

Primjer 201. *Riješimo jednadžbu* $3y'' + 4y' + 12y = 0$ *uz početne uvjete* $y(0) = 1$ *i* $y'(0) = 2$. *Imamo redom:*

$$3x^2 + 4x + 12 = 0 \Rightarrow x \notin \mathbb{R} \Rightarrow a = -\frac{2}{3}, b = \frac{4\sqrt{2}}{3} \Rightarrow$$

$$y(t) = e^{-2t/3}\left(C_1 \cos\left(\frac{4\sqrt{2}}{3}t\right) + C_2 \sin\left(\frac{4\sqrt{2}}{3}t\right)\right) \Rightarrow$$

$$y(0) = C_1, y'(0) = -\frac{2}{3}C_1 + \frac{4\sqrt{2}}{3}C_2 \Rightarrow C_1 = 1 \Rightarrow C_2 = \sqrt{2} \Rightarrow$$

$$y(t) = e^{-2t/3}\left(\cos\left(\frac{4\sqrt{2}}{3}t\right) + \sqrt{2}\sin\left(\frac{4\sqrt{2}}{3}t\right)\right).$$

Već smo rekli da je prvi korak rješavanja nehomogene linearne diferencijalne jednadžbe $a_2y'' + a_1y' + a_0y = f(t)$ rješavanje pripadne homogene jednadžbe $a_2y'' + a_1y' + a_0y = 0$. Neka je rješenje te jednadžbe, dobiveno gore opisanom metodom, označeno s y_H. Glavni teorem o linearnim diferencijalnim jednadžbama s konstantnim koeficijentima glasi:

Teorem 12. *Opće rješenje svake linearne diferencijalne jednadžbe s konstantnim koeficijentima je zbroj općeg rješenja pripadne homogene jednadžbe i jednog partikularnog rješenja polazne jednadžbe (koje je nulfunkcija ako je polazna jednadžba homogena).*

Zaključujemo: potrebno je naći neko partikularno rješenje y_P od $a_2y'' + a_1y' + a_0y = f(t)$, te će opće rješenje te jednadžbe biti oblika $y = y_H + y_P$. Partikularno rješenje nehomogene jednadžbe određuje se jednom od dvije metode: metodom varijacije konstanti i metodom pogađanja.

Metoda pogađanja, poznata kao metoda neodređenih koeficijenata, je vrlo zgodna i efikasna u slučajevima određenih tipova nehomogenog člana $f(t)$. Ona se sastoji u tome da ovisno o $f(t)$ pretpostavimo određeni oblik y_P, koji će sadržavati jednu ili više neodređenih konstanti, uvrstimo ga u jednadžbu i odredimo te konstante. Ta metoda je primjenjiva ako je $f(t)$ produkt nekog polinoma, eksponencijalne funkcije (zapisane u obliku e^{at}) i linearne kombinacije sinusa i kosinusa od bt; tada se za y_P pretpostavlja isti oblik s neodređenim koeficijentima. Kako opisani oblik sadrži više posebnih slučajeva, opisati ćemo pretpostavljene oblike y_P po tim slučajevima:

- Ako je $f(t)$ polinom[2] stupnja n pretpostavlja se da je y_P polinom istog stupnja, ali s neodređenim koeficijentima.
- Ako je $f(t)$ oblika e^{at}, pretpostavlja se da je y_P oblika Ae^{at} s nepoznatim A.
- Ako je $f(t)$ oblika e^{at} pomnožen s polinomom stupnja n, pretpostavlja se da je y_P oblika Ae^{at} pomnožen s polinomom stupnja n s nepoznatim A i koeficijentima polinoma.

[2] Konstantnu funkciju smatramo polinomom stupnja nula.

- Ako je $f(t)$ oblika $e^{at}(\alpha \sin(bt) + \beta \sin(bt))$ (što uključuje oblike $\sin(bt)$, $\cos(bt)$, $e^{at}\sin(bt)$ i $e^{at}\cos(bt)$), pretpostavlja se da je $y_P = e^{at}(A\sin(bt) + B\sin(bt))$ s neodređenim A i B.

U svim navedenim slučajevima postoji poneka iznimka: ako je pretpostavljeni y_P već uključen u y_H. U takvom slučaju potrebno je prvotno pretpostavljeni y_P pomnožiti s t.

Primjer 202. *Ako je $f(t)$ polinom, do iznimke dolazi u slučaju da je jedno od rješenja karakteristične jednadžbe nula (tj. kad u diferencijalnoj jednadžbi nema člana s y). Tada se za y_P uzima polinom stupnja n pomnožen s t.*

Recimo, pri rješavanju jednadžbe $y'' - y' = t$ imamo karakterističnu jednadžbu $x^2 - x = 0$ čija rješenja su $x_1 = 0$ i $x_2 = 1$ pa je $y_H = C_1e^{0t} + C_2e^{1t} = C_1 + C_2e^t$. Pretpostavka da je y_P polinom stupnja 1 jer je $f(t) = t$ značila bi da je $y_P = A + Bt$, $y_P' = B$, $y_P'' = 0$ pa uvrštavanje u polaznu jednadžbu daje $0 - B = t$ iz čega nije odrediv ni B ni A. Uzmemo li pak $y_P = t(A + Bt) = At + Bt^2$, $y_P' = A + 2Bt$, $y_P'' = 2B$, dobivamo $2B - (A + 2Bt) = t$, tj. $2B - A - 2Bt = t$, te je $-2B = 1$ i $2B - A = 0$ odnosno $A = -1$ i $B = -1/2$, dakle je $y_P = -1 - \frac{t}{2}$ i ukupno rješenje je $y = y_H + y_P = C_1 + C_2e^t - 1 - \frac{t}{2}$.

Gornja metoda funkcionira i ako je $f(t)$ zbroj više članova navedenih oblika. Tada se tom metodom odredi po jedan y_P za svaki od tih članova, a ukupni y_P je zbroj dobivenih y_P-ova. Vrijedi naime: ako je $f(t) = f_1(t) + f_2(t) + \dots$ te ako je $y_{P,1}$ rješenje od $a_2y'' + a_1y' + a_0y = f_1(t)$, $y_{P,2}$ rješenje od $a_2y'' + a_1y' + a_0y = f_2(t)$ itd., onda je $y_P = y_{P,1} + y_{P,2} + \dots$ rješenje od $a_2y'' + a_1y' + a_0y = f(t)$.

Primjer 203. *Riješimo jednadžbu*

$$y'' - 4y = te^t + \cos 2t.$$

Pripadna karakteristična jednadžba je $x^2 - 4 = 0$ s rješenjima $x_1 = 2$ i $x_2 = -2$. Stoga je

$$y_H(t) = C_1e^{2t} + C_2e^{-2t}.$$

Nehomogeni član je suma dva člana koji su svaki za sebe oblika koji je pogodan za korištenje metode neodređenih koeficijenata. Stoga pretpostavljamo da je ukupno rješenje oblika $y = y_H + y_{P,1} + y_{P,2}$, gdje je $y_{P,1}$ partikularno rješenje jednadžbe $y'' - 4y = te^t$, a $y_{P,2}$ partikularno rješenje jednadžbe $y'' - 4y = \cos 2t$.

Odredimo $y_{P,1}$. Kako je odgovarajući nehomogeni član produkt polinoma stupnja 1 i eksponencijalne funkcije, pretpostavljamo oblik

$$y_{P,1} = (At + B)e^t.$$

Tada je $y_{P,1}' = (At + A + B)e^t$ i $y_{P,1}'' = (At + 2A + B)e^t$, što uvrštavanjem u jednadžbu $y'' - 4y = te^t$ daje

$$(At + 2A + B)e^t - 4(At + B)e^t = te^t$$

odnosno

$$At + 2A + B - 4At - 4B = t.$$

Kako su dva polinoma jednaka točno ako imaju iste koeficijente slijedi da treba vrijediti

$$A - 4A = 1,$$

$$2A + B - 4B = 0$$

tj. $A = -\frac{1}{3}$ *i* $B = -\frac{2}{9}$. *Dakle,*

$$y_{P,1} = \left(-\frac{1}{3}t - \frac{2}{9}\right)e^t.$$

Odredimo sad $y_{P,2}$. *Kako je odgovarajući nehomogeni član produkt konstantne funkcije i funkcije koja je oblika linearne kombinacije sinusa i kosinusa s istim argumentom* ($2t$) *pretpostavljamo oblik*

$$y_{P,2} = A\cos 2t + B\sin 2t.$$

Tada je $y'_{P,2} = -2A\sin 2t + 2B\cos 2t$ *i* $y''_{P,2} = -4A\cos 2t - 4B\sin 2t$, *što uvrštavanjem u jednadžbu* $y'' - 4y = \cos 2t$ *daje*

$$-4A\cos 2t - 4B\sin 2t - 4(A\cos 2t + B\sin 2t) = \cos 2t.$$

Kako su funkcije sinus i kosinus linearno nezavisne, slijedi da mora vrijediti

$$-8A = 1,$$

$$-8B = 0$$

tj. $A = -\frac{1}{8}$ *i* $B = 0$. *Dakle,*

$$y_{P,2} = -\frac{1}{8}t\cos 2t.$$

Sveukupno rješenje je dakle

$$y = y_H + y_{P,1} + y_{P,2} = C_1e^{2t} + C_2e^{-2t} - \left(\frac{1}{3}t + \frac{2}{9}\right)e^t - \frac{1}{8}t\cos 2t.$$

Druga metoda određivanja ukupnog rješenja nehomogene jednadžbe $a_2y'' + a_1y' + a_0y = f(t)$ je metoda varijacije konstanti. Slično kao i kod linearnih jednadžbi prvog reda, odredi se rješenje y_H, a zatim se za konstante C_1 i C_2 pretpostavi da ovise o t te se tako izmijenjeni y_H uvrštava u diferencijalnu jednadžbu. Time se dobiva linearni sustav od dvije jednadžbe s dvije nepoznanice (C'_1 i C'_2).

Ako je $y_H = C_1y_1 + C_2y_2$ rješenje[3] jednadžbe $a_2y'' + a_1y' + a_0y = f(t)$ pripadne homogene jednadžbe, pretpostavljamo

$$y(t) = C_1(t)y_1(t) + C_2(t)y_2(t).$$

Tada je

$$y' = C'_1y_1 + C_1y'_1 + C'_2y_2 + C_2y'_2.$$

[3]Tu su y_1 i y_2 dva linearno nezavisna rješenja, dakle e^{x_1t} i e^{x_2t} ili e^{xt} i te^{xt} ili $e^{at}\cos(bt)$ i $e^{at}\sin(bt)$, ovisno o rješenjima karakteristične jednadžbe.

Kako nam odgovaraju bilo koje funkcije C_1 i C_2 kojima ćemo dobiti partikularno rješenje, uz taj uvjet možemo postaviti i još jedan uvjet na njih, koji će olakšati račun. To je uvjet

$$C_1'y_1 + C_2'y_2 = 0.$$

Dakle, sad je $y' = C_1y_1' + C_2y_2'$ pa je

$$y'' = C_1'y_1' + C_1y_1'' + C_2'y_2' + C_2y_2''.$$

Uvrštavanje y, y', y'' u $a_2y'' + a_1y' + a_0y = f(t)$ daje

$$a_2(C_1'y_1' + C_1y_1'' + C_2'y_2' + C_2y_2'') + a_1(C_1y_1' + C_2y_2') + a_0(C_1y_1 + C_2y_2) =$$

$$= C_1(a_2y_1'' + a_1y_1' + a_0y_1) + C_2(a_2y_2'' + a_1y_2' + a_0y_2) + a_2(C_1'y_1' + C_2'y_2') =$$
$$= a_2(C_1'y_1' + C_2'y_2') = f(t).$$

Dakle, C_1' i C_2' se mogu odrediti iz sustava

$$C_1'y_1 + C_2'y_2 = 0,$$

$$a_2(C_1'y_1' + C_2'y_2') = f(t).$$

Nakon toga se dobivene formule za C_1' i C_2' integriraju i dobiveni C_1 i C_2 uvrste u $y(t) = C_1(t)y_1(t) + C_2(t)y_2(t)$.

Primjer 204. *Jednadžba*

$$y'' + y = \operatorname{tg} t$$

ne može se riješiti metodom neodređenih koeficijenata. Pripadno rješenje homogene jednadžbe je

$$y_H(t) = C_1 \sin t + C_2 \cos t.$$

Pretpostavimo

$$y(t) = C_1(t) \sin t + C_2(t) \cos t$$

pri čemu su C_1 i C_2 nepoznate funkcije koje ćemo odrediti iz sustava

$$C_1'(t) \sin t + C_2'(t) \cos t = 0,$$

$$C_1'(t) \cos t - C_2'(t) \sin t = \operatorname{tg} t.$$

Množeći prvu jednadžbu sa $\sin t$, a drugu sa $\cos t$ te zbrajanjem tako dobivenih jednadžbi dobivamo

$$C_1'(t) = \sin t,$$

tj

$$C_1(t) = -\cos t + C_1,$$

gdje je C_1 proizvoljna konstanta. Sada iz prve jednadžbe slijedi

$$C_2'(t) = -\frac{\sin^2 t}{\cos t}$$

odakle integriranjem nalazimo

$$C_2(t) = \int \frac{\cos^2 t - 1}{\cos t}\,\mathrm{d}t = \sin t - \ln\left|\operatorname{tg}\left(\frac{t}{2} + \frac{\pi}{4}\right)\right| + C_2.$$

Dakle, opće rješenje zadane nehomogene diferencijalne jednadžbe dano je s

$$y(t) = (-\cos t + C_1)\sin t + \left(\sin t - \ln\left|\operatorname{tg}\left(\frac{t}{2} + \frac{\pi}{4}\right)\right| + C_2\right)\cos t,$$

pri čemu su C_1, C_2 proizvoljne konstante.

Napomena 22. *Ako rješavamo nehomogenu jednadžbu s početnim uvjetima, njih uvrštavamo tek nakon što smo odredili ukupni oblik rješenja (zbroj rješenja pripadne homogene jednadžbe i partikularnog rješenja).*

☼ **Ponovimo bitno...** Linearne diferencijalne jednadžbe su one koje se mogu svesti na oblik u kojem je linearna kombinacija nepoznate funkcije i njenih derivacija izjednačena s nekom funkcijom osnovne varijable. Ako je ta funkcija nulfunkcija, govorimo o homogenoj linearnoj diferencijalnoj jednadžbi, a inače zamjenom te funkcije s nulfunkcijom dobivamo pripadnu homogenu jednadžbu. Koeficijenti linearne kombinacije nepoznate funkcije i njenih derivacija mogu ovisiti o osnovnoj varijabli, a ako ne ovise, govorimo o linearnoj diferencijalnoj jednadžbi s konstantnim koeficijentima. Skup svih rješenja homogene linearne diferencijalne jednadžbe reda n je n-dimenzionalni vektorski prostor. Svako rješenje linearne diferencijalne jednadžbe je zbroj nekog rješenja pripadne homogene jednadžbe i jednog partikularnog rješenja (dobivenog metodom neodređenih koeficijenata ili metodom varijacije konstantni). Homogene linearne diferencijalne jednadžbe s konstantnim koeficijentima za opće rješenje imaju linearnu kombinaciju funkcija oblika e^{xt}, gdje su x-evi rješenja karakteristične jednadže. Karakteristična jednadžba je polinomijalna jednadžba (stupnja koliki je red promatrane diferencijalne jednadžbe) koju iz diferencijalne jednadžbe dobijemo zamjenom nepoznate funkcije s 1, prve derivacije nepoznate funkcije s x, druge derivacije s x^2 itd. Ukoliko karakteristična jednadžba ima višestruko rješenje x, u općem rješenju diferencijalne jednadžbe se osim e^{xt} pojavljuju i članovi oblika te^{xt}, t^3e^{xt}, ... (ukupno onoliko članova s tim x kolika je kratnost x kao rješenja karakteristične jednadžbe). ☺

6.6 Harmonijski oscilator

Već smo rekli da ovisno o sili koja djeluje na tijelo, drugi Newtonov zakon poprima različite oblike diferencijalnih jednadžbi, i to drugog reda (ako se radi o jednadžbi za određivanje funkcije pozicije) ili prvog (ako se radi o jednadžbi za određivanje funkcije brzine).

Harmonijski oscilator je fizički sustav koji se sastoji od tijela koje *periodički* titra oko ravnotežnog položaja. Ekvivalentno, radi se o tijelu koje oscilira oko ravnotežnog položaja pod utjecajem sile koja je po iznosu proporcionalna odmaku iz ravnotežnog položaja. Najjednostavniji je jednodimenzionalni slučaj u kojem je za opis položaja tijela dovoljna jedna koordinata x. Kao ravnotežni položaj uzet ćemo 0 (metara, centimetara, ...). Kako smo s x označili poziciju, za nepoznanicu u karakterističnoj jednadžbi u ovom ćemo poglavlju koristiti oznaku ω.

Po definiciji harmonijskog oscilatora, na tijelo (mase m) na poziciji $x(t)$ djeluje sila

$$F(t) = -kx(t),$$

gdje je k konstanta (u slučaju titranja na opruzi, to je konstanta opruge, a gornji izraz je Hookeov zakon). Stoga drugi Newtonov zakon povlači:

$$mx'' = -kx$$

odnosno

$$mx'' + kx = 0.$$

Dakle, u slučaju jednodimenzionalnog harmoničkog oscilatora kod kojeg na objekt djeluje samo sila $F = -kx$, ovisnost položaja tijela o vremenu dana je homogenom linearnom diferencijalnom jednadžbom drugog reda s konstantnim koeficijentima. Pripadna karakteristična jednadžba je

$$m\omega^2 + k = 0.$$

Njena rješenja su uvijek kompleksna: $\omega_{1,2} = \pm i\sqrt{\frac{k}{m}}$, pa je pozicija tijela opisana s

$$x(t) = C_1 \cos(\omega t) + C_2 \sin(\omega t),$$

uz

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

To rješenje karakteristične jednadžbe zove se kutna frekvencija. Vidimo da kad god na objekt na svakoj poziciji djeluje samo sila oblika $F = -kx$ (s pozitivnom konstantom k), rezultat je periodičko gibanje tijela. Gornji izraz za $x(t)$ se često zapisuje u kraćem, a ekvivalentnom, obliku $x(t) = A\cos(\omega t + \delta)$, gdje je A amplituda gibanja, a δ fazni pomak.

Zadatak 17. *Koristeći trigonometrijske formule nađite vezu A i δ s C_1 i C_2 u gornjim izrazima. Koliki je period gibanja opisanog gornjim formulama?*

Kako se ovdje radi o fizikalnom problemu, uobičajeno je zadavanje početnih uvjeta:

$$x(0\,\mathrm{s}) = x_0,$$

$$x'(0\,\mathrm{s}) = v_0.$$

Deriviranjem $x(t) = C_1 \cos(\omega t) + C_2 \sin(\omega t)$ dobivamo $x'(t) = -C_1\omega \sin(\omega t) + C_2\omega \cos(\omega t)$ pa uvrštavanje početnih uvjeta daje

$$C_1 = x_0,$$

$$C_2\omega = v_0.$$

Stoga je konačno rješenje

$$x(t) = x_0 \cos(\omega t) + \frac{v_0}{\omega} \sin(\omega t).$$

U slučaju da uz silu $F = -kx$ na tijelo koje oscilira djeluje još neka sila opisana formulom $f(t)$, drugi Newtonov zakon daje nehomogenu linearnu diferencijalnu jednadžbu drugog reda s konstantnim koeficijentima

$$mx'' + kx = f(t).$$

Prema prethodnoj teoriji, slijedi da je sad pozicija opisana formulom

$$x(t) = C_1 \cos(\omega t) + C_2 \sin(\omega t) + x_P(t),$$

gdje je x_P partikularno rješenje jednadžbe $mx'' + kx = f(t)$. Konačni oblik očigledno ovisi o obliku te sile.

Jedan važan poseban slučaj dobivamo kad na tijelo uz silu $F = -kx$ djeluje i sila trenja $-fx'$ (f je konstanta trenja). U tom slučaju drugi Newtonov zakon poprima oblik homogene linearne diferencijalne jednadžbe drugog reda s konstantnim koeficijentima:

$$mx'' + fx' + kx = 0.$$

Njena karakteristična jednadžba je

$$m\omega^2 + f\omega + k = 0.$$

Diskriminanta te jednadžbe je $D = f^2 - 4mk$ pa vidimo da će opis gibanja tijela u ovakvom slučaju imati tri moguća oblika. Ako je $D > 0$ (tj. $f > 2\sqrt{mk}$) karakteristična jednadžba će imati dva različita realna rješenja $\omega_{1,2} = \frac{-f \pm \sqrt{f^2 - 4mk}}{2m}$ i oba će biti negativna $(-f - \sqrt{f^2 - 4mk} < -f + \sqrt{f^2 - 4mk} < -f + \sqrt{f^2} = 0)$. Dakle, u slučaju $f > 2\sqrt{mk}$ gibanje tijela je opisano s

$$x(t) = C_1 e^{\omega_1 t} + C_2 e^{\omega_2 t}$$

i zbog negativnosti $\omega_{1,2}$ vrijedi $\lim_{t \to +\infty} x(t) = 0$. Ako je $D = 0$, tj. $f = 2\sqrt{mk}$ dobivamo $\omega = -\frac{f}{2m} < 0$ i

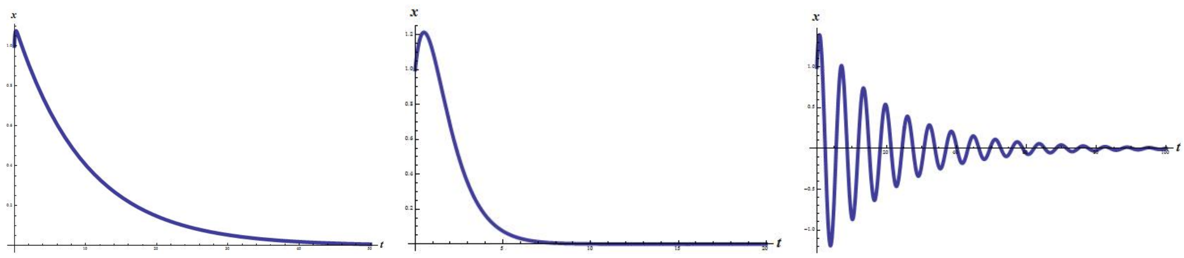
$$x(t) = C_1 e^{\omega t} + C_2 t e^{\omega t}.$$

Kako padajuća eksponencijalna funkcija pada brže od svakog polinoma, specijalno $\lim\limits_{t \to +\infty} t e^{\omega t} = 0$ za svaki negativan ω, slijedi da i u ovom slučaju vrijedi $\lim\limits_{t \to +\infty} x(t) = 0$. Dakle, ako je $f \geq 2\sqrt{mk}$, s vremenom će se gibanje zaustaviti u ravnotežnoj poziciji.

S druge strane, u slučaju $f < 2\sqrt{mk}$, tj. $D < 0$ rješenja karakteristične jednadžbe su kompleksno konjugirana oblika $a \pm ib$, gdje je $a = -\frac{f}{2m} < 0$ i $b = \frac{\sqrt{4mk - f^2}}{2m}$. Stoga je u ovom slučaju gibanje opisano jednadžbom

$$x(t) = e^{at}(C_1 \cos(bt) + C_2 \sin(bt)).$$

Zbog negativnosti a i u ovom slučaju s vremenom gibanje staje ($\lim\limits_{t \to +\infty} x(t) = 0$), ali do prigušenja gibanja sad dolazi oscilatorno — govorimo o prigušenim oscilacijama.



(a) (b) (c)

Slika 6.1: Rješenja diferencijalne jednadžbe za harmonijski oscilator s trenjem za slučajeve kad je diskriminanta karakteristične jednadžbe pozitivna (lijevo), nula (sredina) i negativna (desno).

Primjer 205. *Jednadžba harmonijskog oscilatora pojavljuje se i u elektrici. Promotrimo strujni krug koji se sastoji od izvora napona E, otpornika otpora R, kondenzatora kapaciteta C, zavojnice induktivnosti L i sklopke koja se zatvara u početnom trenutku (te je početna struja $I(0\,\mathrm{s}) = 0$ A).*

Po definiciji je jakost struje količina naboja koji prođe kroz vodič u nekom vremenskom intervalu odnosno preciznije $I(t) = \frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}t}$. Prema Ohmovom zakonu, pad napona na otporniku je $U = RI = R\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}t}$. Pad napona na zavojnici iznosi $L\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}t} = L\frac{\mathrm{d}^2Q}{\mathrm{d}t^2}$, a na kondenzatoru Q/C. Prema drugom Kirchhoffovom zakonu pak mora vrijediti

$$E = R\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}t} + L\frac{\mathrm{d}^2Q}{\mathrm{d}t^2} + \frac{1}{C}Q.$$

Imamo dakle nehomogenu linarnu diferencijalnu jednadžbu drugog reda s konstantnim koeficijentima[4]

$$L\frac{\mathrm{d}^2Q}{\mathrm{d}t^2} + R\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}t} + \frac{1}{C}Q = E.$$

Uočimo da je za slučaj da nema otpora ovo isti tip diferencijalne jednadžbe kao za jednodimenzijski harmonijski oscilator uz dodatnu konstantnu vanjsku silu.

Karakteristična jednadžba je

$$Lx^2 + Rx + \frac{1}{C} = 0,$$

temeljem čijih rješenja možemo odrediti Q_H (rješenje pripadne homogene jednadžbe). Za Q_P pretpostavljamo konstantnu funkciju (jer smo pretpostavili da je E konstantan, inače traženje Q_P prilagodimo obliku od E) jer 0 ne može biti rješenje karakteristične jednadžbe (vidite li to?). Dobivamo da je

$$Q_P = CE,$$

odnosno

$$Q(t) = Q_H(t) + CE.$$

[4] Ako bi otpornik imao promjenjiv otpor, zavojnica promjenjiv induktivitet ili pak kondenzator promjenjiv kapacitet, jednadžba bi imala isti oblik, samo ne bi bila s konstantnim koeficijentima.

Zanimljiv je i kvantnomehanički harmonijski oscilator, čija jednadžba je specijalni slučaj Schrödingerove jednadžbe. Kvantna verzija kinetičke energije jednodimenzijskog gibanja opisana je linearnim operatorom

$$\hat{T} = -\frac{\hbar}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}.$$

Potencijalna energija harmonijskog oscilatora, koju dobivamo integriranjem jednadžbe $-F = kx$, je $V(x) = \frac{k}{2}x^2$. Kvantnomehanička verzija potencijalne energije je operator $\hat{V}$ množenja valne funkcije s gornjim izrazom za $V(x)$. Stoga je djelovanje Hamiltonijana, koji odgovara ukupnoj energiji sustava, na valnu funkciju ψ koja opisuje stanje sustava dano s

$$\hat{H}\psi = \hat{T}\psi + \hat{V}\psi = -\frac{\hbar}{2m}\psi''(x) + \frac{k}{2}x^2\psi(x).$$

Uvrštavanje u Schrödingerovu jednadžbu $\hat{H}\psi = E\psi$ daje

$$-\frac{\hbar}{2m}\psi'' + \frac{k}{2}x^2\psi = E\psi.$$

No, ovdje treba primijetiti da ne samo da ne znamo valnu funkciju ψ (koja ovisi o poziciji tijela), nego ni energije E (tj. ne znamo ni svojstvene vrijednosti ni svojstvene vektore Hamiltonijana). Ipak, za svaki zamišljeni iznos energije E imamo homogenu linearnu diferencijalnu jednadžbu drugog reda, no ona nije s konstantnim koeficijentima. Jedan od načina njenog rješavanja je uvrštavanjem test-funkcija oblika e^{-ax^2}, iz čega se dobivaju $a = \pm\frac{1}{2\hbar}\sqrt{km}$. Jedan od uvjeta kvantne mehanike na valne funkcije je da „trnu u beskonačnosti"[5], tj. $\lim\limits_{x\to\pm\infty}\psi(x) = 0$, pa otpada negativni a. Dobivamo da je jedno rješenje Schrödingerove jednadžbe za jednodimenzionalni harmonijski oscilator oblika

$$\psi_0(t) = \exp\left(-\frac{1}{2\hbar}\sqrt{km}x^2\right).$$

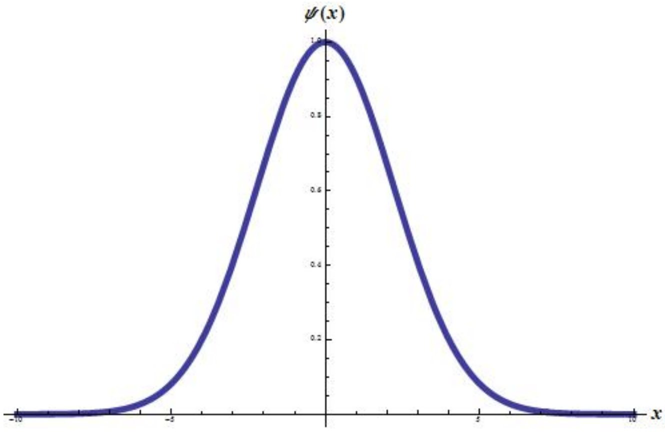
Uvrštavanje tog rješenja natrag u jednadžbu dobivamo da je odgovarajuća energija

$$E_0 = \frac{\hbar}{2m}\sqrt{km}.$$

Dakle, za svojstvenu vrijednost Hamiltonijana $E = \frac{\hbar}{2m}\sqrt{km}$ jedan svojstveni vektor je valna funkcija $\psi(x) = \exp\left(-\frac{1}{2\hbar}\sqrt{km}x^2\right)$. Ovo je samo jedno od beskonačno mnogo rješenja[6] Schrödingerove jednadžbe za jednodimenzionalni harmonijski oscilator; energija $E_0 = \frac{\hbar}{2m}\sqrt{km}$ je najniža moguća i zove se energija nulte točke, a samo stanje harmonijskog oscilatora koje ima tu energiju opisano je navedenom valnom funkcijom.

[5]Kako $\psi^*\psi$ treba biti funkcija gustoće vjerojatnosti, imamo uvjet da moraju konvergirati nepravi integrali tipa $\int_0^\infty \psi^*\psi\,\mathrm{d}x$, što je moguće samo ako $\lim_{x\to\pm\infty}\psi(x) = 0$.

[6]Svojstveni vektori Hamiltonijana jednodimenzionalnog harmonijskog oscilator, tj. valne funkcije koje opisuju stanje oscilatora, su oblika $\psi_v(x) = N_v H_v(x)\psi_0(x)$, gdje je N_v konstanta normiranja, a H_v-ovi su tzv. Hermiteovi polinomi. Broj $v \in \mathbb{N}_0$ je kvantni broj koji opisuje kojem po redu od mogućih iznosa energije E_v odgovara konkretna valna funkcija.



Slika 6.2: Valna funkcija koja odgovara energiji nulte točke jednodimenzijskog harmonijskog oscilatora.

☼ **Ponovimo bitno**... Harmonijski oscilator je fizikalni sustav koji se sastoji od tijela koje oscilira oko ravnotežnog položaja pod utjecajem sile koja je po iznosu proporcionalna odmaku iz ravnotežnog položaja. Jednodimenzionalni harmonijski oscilator je i u klasičnoj i u kvantnoj fizici opisan homogenom linearnom diferencijalnom jednadžbom drugog reda, s tim da je ona u klasičom slučaju s konstantnim koeficijentima, a u kvantnom ima nekonstantne koeficijente od kojih jedan ovisi o nepoznatoj vrijednosti energije (koja je svojstvena vrijednost Hamiltonijana). Rješenje u klasičnom slučaju je periodička funkcija pozicije u ovisnosti o vremenu, dok su u kvantnom slučaju rješenja koja odgovaraju različitim energijama valne funkcije (svojstveni vektori Hamiltonijana) koje ovise o poziciji (ne direktno o vremenu!!!) i posredno opisuju stanje sustava koje odgovara pojedinoj vrijednosti energije; najniža energija za koju postoji odgovarajuća valna funkcija zove se energijom nulte točke. U klasičnom slučaju eventualni utjecaj dodatne vanjske sile očituje se u nehomogenom članu jednadžbe, a odgovarajuća rješenja imaju svojstvo da im je limes kad vrijeme teži u beskonačnost jednak nuli, tj. odmak tijela od ravnotežnog položaja se s vremenom smanjuje. ☺

6.7 Sustavi diferencijalnih jednadžbi

Sustavi običnih diferencijalnih jednadžbi sastoje se od više običnih diferencijalnih jednadžbi koje opisuju vezu između nekoliko nepoznatih funkcija $y, z, \ldots$ s istom varijablom t i njihovih prvih (i eventualno viših) derivacija $y', z', \ldots$. Neki sustavi diferencijalnih jednadžbi mogu se riješiti supstitucijom.

Primjer 206. *Harmonijski oscilator mogli smo opisati i kao sustav diferencijalnih jednadžbi za poziciju* i *brzinu:*

$$x'(t) = v(t),$$

$$mv'(t) = -kx(t).$$

Supstitucijom prve u drugu jednadžbu dobivamo jednu diferencijalnu jednadžbu za poziciju ($mx'' + kx = 0$).

U primjenama su najčešći sustavi linearnih diferencijalnih jednadžbi prvog reda (sve jednadžbe su linearne obzirom na nepoznate funkcije i njihove derivacije, koeficijenti mogu ovisiti o osnovnoj varijabli t). Formalno, sustav linearnih diferencijalnih jednadžbi prvog reda (s nepoznatim funkcijama $y_1, y_2, \ldots, y_n$) je sustav oblika

$$\begin{aligned} y_1' &= a_{11}(t)y_1 + a_{12}(t)y_2 + \ldots + a_{1n}(t)y_n + b_1(t), \\ y_2' &= a_{21}(t)y_1 + a_{22}(t)y_2 + \ldots + a_{2n}(t)y_n + b_2(t), \\ &\vdots \\ y_n' &= a_{n1}(t)y_1 + a_{n2}(t)y_2 + \ldots + a_{nn}(t)y_n + b_n(t). \end{aligned}$$

Kratko ga možemo zapisati u obliku

$$Y' = A \cdot Y + B,$$

gdje je

$$Y' = \begin{pmatrix} y_1' \\ y_2' \\ \vdots \\ y_n' \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_1(t) \\ b_2(t) \\ \vdots \\ b_n(t) \end{pmatrix},$$

$$A = \left(a_{ij}(t) \right)_{i,j}.$$

Kažemo da se radi o sustavu s konstantnim koeficijentima ako su sve a_{ij} konstantne funkcije, tj. ako je A matrica brojeva ($A \in M_n$). Sustav je homogen ako je B nulmatrica. Homogeni sustavi sigurno imaju trivijalno rješenje u kojem su svi y_i nulfunkcije.

Primjer 207. *Sustav linearnih diferencijalnih jednadžbi prvog reda s konstantnim koeficijentima, s nepoznatim funkcijama y i z je primjerice sustav*

$$\begin{aligned} y' &= 2y - z + e^t, \\ z' &= -y + 3z - t. \end{aligned}$$

Deriviranje prve jednadžbe daje

$$y'' = 2y' - z' + e^t.$$

Uvrstimo li tu na desnu stranu z' iz polazne druge jednadžbe i z izražen iz polazne prve dobijemo

$$\begin{aligned} y'' &= 2y' - (-y + 3z - t) + e^t = 2y' + y - 3z + t + e^t = \\ &= 2y' + y - 3(2y - y' + e^t) + t + e^t = 5y' + 6y + t - 2e^t, \end{aligned}$$

što je jedna linearna diferencijalna jednadžba drugog *reda s konstantnim koeficijentima. Odredimo li njeno rješenje y, funkciju z možemo dobiti iz druge diferencijalne jednadžbe polaznog sustava.*

Kao i u prethodnom primjeru, općenito se svaki sustav linearnih diferencijalnih jednadžbi prvog reda s n nepoznatih funkcija može svesti na jednu linearnu diferencijalnu jednadžbu reda n. Stoga je očekivano da vrijede analogni teoremi (zapravo su ekvivalentni). Tako se iz matričnog zapisa ovakvih sustava odmah dobije

Teorem 13. *Skup svih rješenja Y homogenog sustava $Y' = AY$ linearnih diferencijalnih jednadžbi prvog reda je vektorski prostor, tj. zbroj dva rješenja je rješenje istog sustava i skalar puta rješenje je rješenje istog sustava. Dimenzija tog vektorskog prostora je n.*

Dakle, potrebno je naći n linearno nezavisnih rješenja sustava (bazu prostora), a opće rješenje je njihova linearna kombinacija. Za nehomogene sustave vrijedi kao i ranije:

Teorem 14. *Opće rješenje nehomogenog sustava $Y' = AY + B$ je zbroj općeg rješenja pripadnog homogenog sustava $Y' = AY$ i jednog partikularnog rješenja.*

Iako je načelno moguće svesti sustav linearnih diferencijalnih jednadžbi prvog reda na linearnu diferencijalnu jednadžbu n-tog reda, to općenito nije praktičan način rješavanja takvih sustava. Za slučaj homogenog sustava s konstantnim koeficijentima postoji postupak kojim direktno možemo odrediti rješenje, i to preko svojstvenih vrijednosti matrice A. Naime, pretpostavka da je rješenje tog sustava opisivo u obliku $Y = e^{\lambda t}Y_0$, gdje je Y_0 vektor (sve koordinate su mu konstantne), a λ neki broj (dakle, svaki $y_i(t)$ je oblika $e^{xt}y_{0,i}$) deriviranjem na svakoj poziciji od Y daje

$$Y' = \lambda e^{\lambda t}Y_0 = \lambda Y$$

pa iz $Y' = AY$ dobivamo da λ i Y_0 moraju biti takvi da vrijedi

$$AY_0 = \lambda Y_0,$$

tj. λ mora biti svojstvena vrijednost, a Y_0 pripadni svojstveni vektor matrice A. Dakle, ako imamo sustav $Y' = AY$ s matricom A u kojoj su svi unosi konstantni, odredimo njen spektar $\{\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n\}$. Za svaku svojstvenu vrijednost odredimo njen svojstven vektor (podsjetimo se: ako je neka svojstvena vrijednost višestruka, odgovarat će joj više linearno nezavisnih svojstvenih vektora). Neka smo tako dobili skup od n linearno nezavisnih svojstvenih vektora $Y_{0,1}, \ldots, Y_{0,n}$. Tada je opće rješenje našeg sustava dano s

$$Y = C_1 e^{\lambda_1 t} Y_{0,1} + \ldots + C_n e^{\lambda_n t} Y_{0,n}.$$

Primjer 208. *Zadan je sustav*

$$y' = 3y + 2z,$$

$$z' = 4y + z.$$

Pripadna matrica A je onda

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}$$

te je odgovarajući karakteristični polinom

$$\begin{vmatrix} 3-\lambda & 2 \\ 4 & 1-\lambda \end{vmatrix} = -5 - 4\lambda + \lambda^2.$$

Svojstvene vrijednosti od A *su nultočke karakterističnog polinoma, dakle* $\lambda_1 = 5$ *i* $\lambda_2 = -1$*. Svojstvene vektore za* λ_1 *dobivamo rješavanjem sustava* $(A - 5I)X = 0$*:*

$$\begin{pmatrix} -2 & 2 \\ 4 & -4 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

, tj. $(x_1, x_2) = (t, t) = t(1, 1)$, $t \in \mathbb{R}$*. Odgovarajući svojstveni vektor je stoga*

$$Y_{0,1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

(ili bilo koji njemu proporcionalan). Slično, svojstvene vektore za λ_2 *dobivamo rješavanjem sustava* $(A + I)X = 0$*:*

$$\begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 4 & 2 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

, tj. $(x_1, x_2) = (t, -2t) = t(1, -2)$, $t \in \mathbb{R}$*. Odgovarajući svojstveni vektor je stoga*

$$Y_{0,2} = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix}$$

(ili bilo koji njemu proporcionalan). Rješenje polaznog sustava diferencijalnih jednadžbi je

$$Y = C_1 e^{\lambda_1 t} Y_{0,1} + C_2 e^{\lambda_2 t} Y_{0,2} = C_1 e^{5t} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + C_2 e^{-t} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_1 e^{5t} + C_2 e^{-t} \\ C_1 e^{5t} - 2C_2 e^{-t} \end{pmatrix}$$

odnosno $y(t) = C_1 e^{5t} + C_2 e^{-t}$, $z(t) = C_1 e^{5t} - 2C_2 e^{-t}$.

☼ **Ponovimo bitno**... Sustavi linearnih diferencijalnih jednadžbi prvog reda s nepoznatim funkcijama $y_1, y_2, \ldots, y_n$ su oblika

$$Y' = A \cdot Y + B,$$

gdje je

$$Y' = \begin{pmatrix} y_1' & y_2' & \ldots & y_n' \end{pmatrix}^t, \quad Y = \begin{pmatrix} y_1 & y_2 & \ldots & y_n \end{pmatrix}^t,$$
$$A = \left(a_{ij}(t) \right)_{i,j}, \quad B = \begin{pmatrix} b_1(t) & b_2(t) & \ldots & b_n(t) \end{pmatrix}^t.$$

O sustavu s konstantnim koeficijentima govorimo ako su sve a_{ij} konstantne, a o homogenom sustavu ako su sve b_i nulfunkcije. Skup svih rješenja Y homogenog sustava $Y' = AY$ linearnih diferencijalnih jednadžbi prvog reda je vektorski prostor (dimenzije n). Opće rješenje nehomogenog sustava $Y' = AY + B$ je zbroj općeg rješenja pripadnog homogenog sustava i jednog partikularnog rješenja. Za slučaj homogenog sustava s konstantnim koeficijentima $Y' = AY$, jedna metoda rješavanja je da odredimo sve svojstvene vrijednosti od A i za svaku svojstvenu vrijednost λ_i odredimo njen svojstven vektor Y_i. Tada je opće rješenje sustava dano linearna kombinacija Y_i-ova. ☺

6.8 Diferencijalne jednadžbe u kemijskoj kinetici

Kemijska kinetika se bavi brzinama kemijskih reakcija te faktorima koji na nju utječu (iz čega se dalje izvode zaključci o tome *kako* se reakcija odvija). Pretpostavimo da je odabrana kemijska jednadžba koja opisuje jediničnu kemijsku pretvorbu. Podsjetimo se: stehiometrijski koeficijent sudionika reakcije J definira se kao

$$\nu_\mathrm{J} = \frac{\Delta N_\mathrm{J}}{N_r},$$

gdje je N_r broj izvedenih jediničnih kemijskih pretvorbi u reakciji. Obzirom da se tokom reakcije brojnost reaktanata smanjuje, a produkata povećava, slijedi da su stehiometrijski koeficijenti reaktanata po definiciji negativni, a stehiometrijski koeficijenti produkata pozitivni. Analogno množini kemijske tvari može se definirati i „množina izvedenih jediničnih pretvorbi”, tj. doseg reakcije

$$\xi = \frac{N_r}{N_\mathrm{A}}.$$

U diferencijalnom obliku doseg je definiran s

$$\mathrm{d}\xi = \frac{1}{\nu_\mathrm{J}}\,\mathrm{d}n_\mathrm{J}$$

gdje je J proizvoljni[7] sudionik reakcije. Primijetimo da budući da se tokom reakcije mijenjaju množine reaktanata, one te stoga i doseg su u kemijskoj kinetici funkcije vremena. Pomoću dosega definira se brzina konverzije $\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\nu_\mathrm{J}} \cdot \frac{\mathrm{d}n_\mathrm{J}}{\mathrm{d}t}$. Kako ta definicija ovisi o volumenu (u smislu: u većem sustavu sigurno je više pretvorbi) uobičajenije je koristiti brzinu reakcije

$$v = \frac{1}{V} \cdot \frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}$$

gdje je

$$x = \frac{\xi}{V}.$$

Veličina x se zove koncentracija izvedenih pretvorbi. Jasno je da je početni uvjet dan s $x(0\,\mathrm{s}) = 0$ mol L^{-1} (jer se u nultom trenutku još nije dogodila nijedna pretvorba). Pretpostavljamo da je volumen V (npr. otopine u kojoj se odvija reakcija) konstantan.

Kako je lakše baratati s koncentracijom nego množinom, u praksi se koristi formula

$$v = \frac{1}{\nu_\mathrm{J}} \cdot \frac{\mathrm{d}[\mathrm{J}]}{\mathrm{d}t}.$$

Pritom je [J] množinska koncentracija sudionika J. Gornja formula se lako izvede iz definicije brzine reakcije i definicije dosega. Često se brzina promjene koncentracije $\frac{\mathrm{d}[\mathrm{J}]}{\mathrm{d}t}$ gleda odvojeno obzirom na to promatra li se reaktant ili produkt[8] pa se govori o

[7] Definicija je neovisna o odabiru J.

[8] Promatranje obzirom na reaktante znači da je brzina negativna pa kemičari rado pišu $v = -\frac{1}{|\nu_R|} \cdot \frac{\mathrm{d}c_R}{\mathrm{d}t}$ umjesto formule identičnog značenja $v = \frac{1}{\nu_R} \cdot \frac{\mathrm{d}c_R}{\mathrm{d}t}$.

brzini trošenja $v_R = -\frac{\mathrm{d[J]}}{\mathrm{d}t}$ reaktanta J, odnosno o brzini nastajanja $v_P = \frac{\mathrm{d[J]}}{\mathrm{d}t}$ produkta J. Primijetite da su i brzina trošenja i brzina nastajanja nenegativne veličine (zapravo: funkcije).

U daljnjem će nam koristiti i formula

$$(\heartsuit) \quad [\mathrm{J}] = [\mathrm{J}]_0 + \nu_\mathrm{J} \cdot x$$

koja vrijedi za sve sudionike reakcije. Ta se formula dobije integriranjem jednakosti

$$\mathrm{d}[\mathrm{J}] = \nu_\mathrm{J}\, \mathrm{d}x$$

koja pak slijedi iz definicija množinske koncentracije i koncentracije izvedenih pretvorbi. Indeks 0 označava početnu vrijednost u trenutku $t = 0$ s. Uočite da množinska koncentracija bilo kojeg sudionika reakcije afino ovisi o koncentraciji izvedenih pretvorbi.

Zakon brzine reakcije opisuje brzinu reakcije kao produkt potencija koncentracija reaktanata J_1, J_2, ...:

$$v = k_n \cdot [\mathrm{J}_1]^{n_1} \cdot [\mathrm{J}_2]^{n_2} \cdot \ldots$$

Ovdje n nije množina, nego broj $n = \sum n_i$ (koji se zove red reakcije, a brojevi n_i se zovu parcijalni redovi reakcije obzirom na reaktante J_i). Napomenimo da su parcijalni redovi i ukupni red reakcije najčešće prirodni brojevi, ali mogu biti i negativni cijeli brojevi i razlomci. Veličina k_n (ovisna o temperaturi, ali konstantna pri danoj temperaturi) zove se konstanta ili koeficijent brzine reakcije. Uvrštavanjem definicije brzine reakcije, zakon brzine reakcije postaje diferencijalna jednadžba čije rješenje zovemo integriranim oblikom zakona brzine reakcije. Napomenimo da se zakon brzine reakcije ne može odrediti iz stehiometrije reakcije, već se određuje eksperimentalno.

6.8.1 Reakcije nultog reda

Reakcije nultog reda su reakcije s konstantnom brzinom, tj. brzinom neovisnom o trenutnim koncentracijama sudionika. Kad ponestane reaktanata, reakcija staje. Zakon brzine reakcije nultog reda $v = k_0$ u obliku diferencijalne jednadžbe ima oblik

$$v = \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\nu_\mathrm{J}} \cdot \frac{\mathrm{d}[\mathrm{J}]}{\mathrm{d}t} = k_0$$

s početnim uvjetom $x(0\,\mathrm{s}) = 0 \text{ mol L}^{-1}$. Direktnim integriranjem dobivamo integrirani oblik zakona brzine reakcije nultog reda: $x = x(t) = k_0 t$ odnosno

$$[\mathrm{J}] = [\mathrm{J}]_0 + \nu_\mathrm{J} k_0 t$$

(koncentracija reaktanta afino pada s vremenom jer je stehiometrijski koeficijent reaktanta negativan).

6.8.2 Reakcije prvog reda

Najjednostavnije reakcije prvog reda su one kod kojih je brzina reakcije u svakom trenutku proporcionalna koncentraciji samo jednog reaktanta J, tj. one za koje zakon brzine glasi

$$v = k_1[\mathrm{J}].$$

Po definiciji brzine reakcije dobivamo linearnu diferencijalnu jednadžbu

$$\frac{1}{\nu_\mathrm{J}} \cdot \frac{\mathrm{d[J]}}{\mathrm{d}t} = k_1[\mathrm{J}]$$

(odnosno, koristeći jednakost (♡), $\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = k_1([\mathrm{J}]_0 + \nu_\mathrm{J} x)$). Separacija varijabli daje

$$\frac{\mathrm{d[J]}}{[\mathrm{J}]} = k_1\nu_\mathrm{J}\,\mathrm{d}t$$

pa je

$$\ln\frac{[\mathrm{J}]}{c^\ominus} = k_1\nu_\mathrm{J}t + \ln\frac{[\mathrm{J}]_0}{c^\ominus}$$

odnosno $\ln\frac{[\mathrm{J}]}{[\mathrm{J}]_0} = k_1\nu_\mathrm{J}t$ (logaritam iznosa koncentracije je afina funkcija vremena). Konačno dobivamo integrirani oblik

$$[\mathrm{J}] = [\mathrm{J}]_0 e^{k_1\nu_\mathrm{J}t}$$

(tj. koncentracija eksponencijalno pada s vremenom). Napomenimo da iz [J] možemo odrediti koncentraciju svakog produkta P pomoću formule (♡): $[\mathrm{P}] = [\mathrm{P}]_0 + \nu_\mathrm{P} x = [\mathrm{P}]_0 + \nu_\mathrm{P}\frac{[\mathrm{J}]-[\mathrm{J}]_0}{\nu_\mathrm{J}}$.

Zadatak 18. *Izračunajte ovisnost koncentracije izvedenih pretvorbi $x(t)$ o vremenu, skicirajte pripadni graf i zaključite da reakcija prvog reda postaje sve sporija kako vrijeme teče!*

Napomena 23. *Vrijeme polureakcije $t_{1/2}$, uz fiksirani reaktant kojeg promatramo, je vrijeme potrebno da se početna koncentracija tog reaktanta prepolovi. Iz (npr. eksperimentalno poznatog) $t_{1/2}$ lako se, za reakciju prvog reda, odredi k_1:*

$$k_1 = -\frac{\ln 2}{\nu_\mathrm{J} t_{1/2}}$$

što se dobije uvrštavanjem $t = t_{1/2}$ i $[\mathrm{J}] = [\mathrm{J}]_0/2$ u $[\mathrm{J}] = [\mathrm{J}]_0 exp(k_1\nu_\mathrm{J}t)$.

Napomena 24. *Reakcija pseudo-n-tog reda je ona kod koje se promjene koncentracija svih osim jednog reaktanta J_1 mogu zanemariti pa se dobiva jednadžba oblika $v = k'_n[\mathrm{J}_1]_1^n$. Reakcija je dakle pseudoprvog reda ako npr. imamo reakciju $\mathrm{A} + \mathrm{B} \longrightarrow \mathrm{C}$, pri čemu je $[\mathrm{B}]_0$ puno veća od $[\mathrm{A}]_0$ pa se [B] neznatno mijenja s vremenom, te je brzina reakcije (približno) proporcionalna s [A]. Imamo dakle $v = k'_1[\mathrm{A}]$, koju rješavamo kao gore, a pri čemu je $k'_1 = [\mathrm{B}]_0 k_1$.*

6.8.3 Reakcije drugog i viših redova

Reakcija može biti drugog reda obzirom na samo jedan reaktant ili na njih dva, tj. moguće je da gledamo $\mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{P}$ uz

$$v = k_2[\mathrm{A}]^2$$

(slučaj (♠) — brzina reakcije je u svakom trenutku proporcionalna kvadratu trenutne koncentracije jednog reaktanta) ili pak $\mathrm{A} + \mathrm{B} \longrightarrow \mathrm{P}$ uz

$$v = k_2[\mathrm{A}][\mathrm{B}]$$

(slučaj (♢) — brzina reakcije je u svakom trenutku proporcionalna produktu trenutnih koncentracija dvaju reaktanata).

U slučaju (♠) dobivamo jednadžbu sa separiranim varijablama

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = k_2([\mathrm{A}]_0 + \nu_\mathrm{A} \cdot x)^2$$

s početnim uvjetom $x(0\,\mathrm{s}) = 0$ mol L^{-1}. Kao rješenje dobije se

$$x(t) = \frac{[\mathrm{A}]_0^2 \cdot k_2 \cdot t}{1 - [\mathrm{A}]_0 \cdot \nu_\mathrm{A} \cdot k_2 \cdot t}.$$

Vidimo da je dakle x funkcija vremena oblika $x(t) = \frac{at}{abt-1}$, tj. graf joj je hiperbola. Za koncentraciju od A iz (♡) dobivamo jednadžbu

$$k_2 t = \frac{1}{\nu_\mathrm{A}} \left(\frac{1}{[\mathrm{A}]_0} - \frac{1}{[\mathrm{A}]} \right).$$

Zadatak 19. *Koliko je vrijeme polureakcije za reakciju drugog reda tipa (♠)?*

Općenito u slučaju reakcije koja je n-tog reda obzirom samo na jedan reaktant A dobivamo diferencijalne jednadžbe

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = k_n([\mathrm{A}]_0 + \nu_\mathrm{A} x)^n,$$

dakle, obične diferencijalne jednadžbe prvog reda sa separiranim varijablama oblika

$$y' = a(b + cy)^n.$$

Rješenje (za $n \neq 1$) uz uobičajeni početni uvjet daje vezu vremena i koncentracije oblika

$$k_n t = \frac{1}{(n-1)\nu_\mathrm{A}} \left(\frac{1}{[\mathrm{A}]_0^{n-1}} - \frac{1}{[\mathrm{A}]^{n-1}} \right).$$

Malo kompliciraniji je slučaj (♢) koji se svodi na običnu diferencijalnu jedadžbu

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = k_2([\mathrm{A}]_0 + \nu_\mathrm{A} x)([\mathrm{B}]_0 + \nu_\mathrm{B} x).$$

Radi se o običnoj diferencijalnoj jednadžbi sa separiranim varijablama oblika

$$y' = a(b_1 + c_1 y)(b_2 + c_2 y)$$

(i početnim uvjetom $y(0) = 0$) koja se rješava pomoću rastava na parcijalne razlomke:

$$\int \frac{\mathrm{d}y}{(b_1 + c_1 y)(b_2 + c_2 y)} = \frac{1}{b_2 c_1 - b_1 c_2} \int \left(\frac{c_1}{b_1 + c_1 y} - \frac{c_2}{b_2 + c_2 y} \right) \mathrm{d}y =$$

$$= \frac{1}{b_2c_1 - b_1c_2} \cdot \ln \frac{b_1 + c_1y}{b_2 + c_2y}.$$

Dakle:

$$\ln \frac{b_1 + c_1y}{b_2 + c_2y} = (b_2c_1 - b_1c_2)ax + K$$

Iz početnog uvjeta imamo

$$K = \ln \frac{b_1}{b_2}$$

Dakle, u našem slučaju reakcije drugog reda koja ima parcijalni prvi red obzirom na dva reaktanta A i B dobili smo

$$\ln \left(\frac{[\mathrm{B}]_0}{[\mathrm{A}]_0} \cdot \frac{[\mathrm{A}]_0 + \nu_\mathrm{A}x}{[\mathrm{B}]_0 + \nu_\mathrm{B}x} \right) = ([\mathrm{B}]_0\nu_\mathrm{A} - [\mathrm{A}]_0\nu_\mathrm{B})k_2t.$$

U čestom slučaju kad je $\nu_\mathrm{A} = \nu_\mathrm{B} = -1$ i uz oznake $a = [\mathrm{A}]_0$, $b = [\mathrm{B}]_0$ dobiva se rješenje u obliku u kojem se često nalazi u kemijskoj literaturi:

$$k_2t = \frac{1}{a-b} \cdot \ln \frac{b(a-x)}{a(b-x)}.$$

Primjer 209. *Za neku reakciju tipa* $\mathrm{A}+3\,\mathrm{B} \longrightarrow 2\,\mathrm{C}$ *poznato je da je drugog reda (prvog obzirom na* A *i prvog obzirom na* B*). Početne koncentracije su* $[\mathrm{A}]_0 = 0{,}01\ \mathrm{mol\,L^{-1}}$, $[\mathrm{B}]_0 = 0{,}02\ \mathrm{mol\,L^{-1}}$ *i* $[\mathrm{C}]_0 = 0\ \mathrm{mol\,L^{-1}}$. *Preko pripadne diferencijalne jednadžbe odredite ovisnost koncentracije produkta* C *o vremenu. Kolika će biti koncentracija od* C *nakon* 1 *minute ako je koeficijent brzine reakcije* $0{,}62\ \mathrm{L\,mol^{-1}\,s^{-1}}$*?*

Prema uvjetima zadatka i iz relacije (♡) imamo

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = k_2[\mathrm{A}][\mathrm{B}] = 0{,}62\,\mathrm{M^{-1}\,s^{-1}}\,(0{,}01\,\mathrm{M} - x)(0{,}02\,\mathrm{M} - 3x).$$

Separacijom varijabli, rastavom na parcijalne razlomke i integriranjem dobivamo

$$100 \ln \frac{0{,}01\,\mathrm{M} - x}{0{,}02\,\mathrm{M} - 3x} = 0{,}62t\,\mathrm{s^{-1}} + C.$$

Uzevši u obzir početni uvjet $x(0\,\mathrm{s}) = 0\,\mathrm{mol\,L^{-1}}$ *dobije se*

$$C = 100 \ln \frac{1}{2}$$

pa je

$$0{,}62t\,\mathrm{s^{-1}} = 100 \ln \frac{0{,}02\,\mathrm{M} - 2x}{0{,}02\,\mathrm{M} - 3x},$$

odnosno

$$\frac{0{,}02\,\mathrm{M} - 2x}{0{,}02\,\mathrm{M} - 3x} = e^{0{,}0062t\,\mathrm{s^{-1}}}.$$

Odatle slijedi

$$x(t) = 0{,}02\,\mathrm{M} \cdot \frac{e^{0{,}0062t\,\mathrm{s^{-1}}} - 1}{2 - 3e^{0{,}0062t\,\mathrm{s^{-1}}}}.$$

Iz relacije (♡) sad slijedi da je

$$[\mathrm{C}] = [\mathrm{C}]_0 + 2x = 2x = 0{,}04\,\mathrm{M} \cdot \frac{e^{0{,}0062t\,\mathrm{s^{-1}}} - 1}{2 - 3e^{0{,}0062t\,\mathrm{s^{-1}}}}.$$

6.8.4 Neki reakcijski mehanizmi

Kao što je poznato, kemijske reakcije se najčešće ne odvijaju „direktno” po pravilu iskazanom kemijskom jednadžbom koja ih opisuje. Ukupna kemijska promjena je rezultat više jednostavnijih koraka na molekulskoj razini koje zovemo elementarnim procesima, a njihov niz koji daje ukupnu reakciju zove se mehanizmom reakcije. Postoji samo nekoliko tipova elementarnih procesa i njihovi zakoni reakcija su izvedivi iz njihove stehiometrije:

Elementarni proces	Zakon brzine
$\mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{P}$	$v = k[\mathrm{A}]$
$2\,\mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{P}$	$v = k[\mathrm{A}]^2$
$\mathrm{A} + \mathrm{B} \longrightarrow \mathrm{P}$	$v = k[\mathrm{A}][\mathrm{B}]$
$2\,\mathrm{A} + \mathrm{B} \longrightarrow \mathrm{P}$	$v = k[\mathrm{A}]^2[\mathrm{B}]$
$\mathrm{A} + \mathrm{B} + \mathrm{C} \longrightarrow \mathrm{P}$	$v = k[\mathrm{A}][\mathrm{B}][\mathrm{C}]$

Jedan od najjednostavnijih mehanizama je mehanizam usporednih reakcija

$$\begin{array}{ccc} & & \mathrm{B} \\ & \nearrow & \\ \mathrm{A} & & \\ & \searrow & \\ & & \mathrm{C} \end{array}$$

Taj je mehanizam opisan sustavom sustav običnih diferencijalnih jednadžbi

$$v_1 = k_1^{(1)}[\mathrm{A}],$$

$$v_2 = k_1^{(2)}[\mathrm{A}].$$

Ukupna brzina mehanizma je $v_1 + v_2$, tj.

$$-\frac{\mathrm{d}[\mathrm{A}]}{\mathrm{d}t} = (k_1^{(1)} + k_1^{(2)})[\mathrm{A}].$$

Iz diferencijalnog oblika vidljivo je da je ukupni zakon reakcije $\mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{B} + \mathrm{C}$ ukoliko se njen mehanizam sastoji od dvije usporedne reakcije $\mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{B}$ i $\mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{C}$ tipa reakcije prvog reda (s $k_1 = k_1^{(1)} + k_1^{(2)}$).

Drugi jednostavan reakcijski mehanizam je mehanizam uzastopnih (konsekutivnih) reakcija $\mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{B} \longrightarrow \mathrm{C}$ u kojem dolazi do nastajanja međuprodukta B. Shvatimo li ga kao dva elementarna procesa $\mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{B}$ i $\mathrm{B} \longrightarrow \mathrm{C}$ dobivamo sustav diferencijalnih jednadžbi

$$v_1 = -\frac{\mathrm{d}[\mathrm{A}]}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{\mathrm{d}[\mathrm{B}]}{\mathrm{d}t}\right)_1 = k_1^{(1)}[\mathrm{A}],$$

$$v_2 = \left(-\frac{\mathrm{d}[\mathrm{B}]}{\mathrm{d}t}\right)_2 = \frac{\mathrm{d}[\mathrm{C}]}{\mathrm{d}t} = k_1^{(2)}[\mathrm{B}].$$

Taj sustav možemo napisati u obliku

$$\begin{aligned}\tfrac{\mathrm{d[A]}}{\mathrm{d}t} &= -k_1^{(1)}[\mathrm{A}],\\ \tfrac{\mathrm{d[B]}}{\mathrm{d}t} &= k_1^{(1)}[\mathrm{A}] - k_1^{(2)}[\mathrm{B}], \ .\\ \tfrac{\mathrm{d[C]}}{\mathrm{d}t} &= k_1^{(2)}[\mathrm{B}]\end{aligned}$$

Kao početne uvjete uzet ćemo $[\mathrm{A}](0\,\mathrm{s}) = [\mathrm{A}]_0$, $[\mathrm{B}](0\,\mathrm{s}) = [\mathrm{C}](0\,\mathrm{s}) = 0$ M. Iz sustava vidimo da je

$$[\mathrm{A}] = [\mathrm{A}]_0\exp(-k_1^{(1)}t)$$

pa je

$$\frac{\mathrm{d[B]}}{\mathrm{d}t} = k_1^{(1)}[\mathrm{A}]_0\exp(-k_1^{(1)}t) - k_1^{(2)}[\mathrm{B}].$$

Radi se o diferencijalnoj jednadžbi oblika

$$y' = ae^{bx} + cy,$$

tj. o nehomogenoj linearnoj običnoj diferencijalnoj jednadžbi prvog reda. Rješenje pripadne homogene jednadžbe y_H se dobije iz $y' = cy$, tj. $\ln y_H = ct + C_1$ odnosno $y_H(t) = Ce^{ct}$. Metoda varijacije konstante daje $y(t) = C(t)e^{ct}$, tj. $y' = e^{ct}(C' + Cc)$ pa uvrštavanje u $y' = ae^{bt} + cy$ daje $e^{ct}(C' + Cc) = ae^{bt} + Cce^{ct}$. Slijedi $C' = ae^{(b-c)t}$, tj. $C(t) = \frac{a}{b-c}e^{(b-c)t} + C_2$. Sve skupa daje rješenje $y(t) = \left(\frac{a}{b-c}e^{(b-c)t} + C_2\right)e^{ct}$. U sređenom obliku imamo

$$y(t) = \frac{a}{b-c}e^{bt} + C_2e^{ct}.$$

Početni uvjet $y(0) = 0$ povlači da je

$$y(t) = \frac{a}{b-c}(e^{bt} - e^{ct}).$$

Konkretno, za našu jednadžbu $\frac{\mathrm{d[B]}}{\mathrm{d}t} = k_1^{(1)}[\mathrm{A}]_0\exp(-k_1^{(1)}t) - k_1^{(2)}[\mathrm{B}]$ uz $[\mathrm{B}]_0 = 0$ M dobije se ($y = [\mathrm{B}]$, $a = k_1^{(1)}[\mathrm{A}]_0$, $b = -k_1^{(1)}$ i $c = -k_1^{(2)}$)

$$[\mathrm{B}] = \frac{k_1^{(1)}[\mathrm{A}]_0}{k_1^{(2)} - k_1^{(1)}}(\exp(-k_1^{(1)}t) - \exp(-k_1^{(2)}t)).$$

Još nedostaje [C]. Imamo

$$\frac{\mathrm{d[C]}}{\mathrm{d}t} = \frac{k_1^{(1)}k_1^{(2)}[\mathrm{A}]_0}{k_1^{(2)} - k_1^{(1)}}(\exp(-k_1^{(1)}t) - \exp(-k_1^{(2)}t)).$$

Ovo je diferencijalna jednadžba oblika

$$y' = a(e^{bt} - e^{ct}),$$

čije rješenje dobijemo direktnim integriranjem:

$$y(t) = \frac{a}{b}e^{bt} - \frac{a}{c}e^{ct}.$$

Imamo dakle

$$[\mathrm{C}] = \frac{k_1^{(1)} k_1^{(2)} [\mathrm{A}]_0}{k_1^{(2)} - k_1^{(1)}} \left(\frac{1}{k_1^{(2)}} \exp(-k_1^{(2)} t) - \frac{1}{k_1^{(1)}} \exp(-k_1^{(1)} t) \right).$$

Zadatak 20. *Kod uzastopnih reakcija česta je pretpostavka o ustaljenom stanju (konstantnosti koncentracije međuprodukta):* $\frac{\mathrm{d}[\mathrm{B}]}{\mathrm{d}t} = 0$. *Ona bitno pojednostavljuje sustav. Zapišite tako dobiveni sustav i odredite rješenje koje opisuje ovisnosti koncentracija od* A, B *i* C *o vremenu.*

Mehanizam povrativih (reverzibilnih) reakcija je mehanizam oblika $\mathrm{A} \rightleftharpoons \mathrm{B}$, tj. mehanizam koji se sastoji od dva elementarna procesa $\mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{B}$ i $\mathrm{B} \longrightarrow \mathrm{A}$. Odgovarajući sustav diferencijalnih jednadžbi je dan s

$$\begin{aligned} v_1 &= k_1^{(1)} [\mathrm{A}], \\ v_2 &= k_1^{(-1)} [\mathrm{B}] \end{aligned} .$$

Gledajući ukupnu brzinu dobivamo

$$-\frac{\mathrm{d}[\mathrm{A}]}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}[\mathrm{B}]}{\mathrm{d}t} = k_1^{(1)} [\mathrm{A}] - k_1^{(-1)} [\mathrm{B}],$$

tj. sustav linearnih diferencijalnih jednadžbi s konstantnim koeficijentima koji je oblika

$$y'(x) = -z'(x) = ay(x) + bz(x).$$

Ako u početku nije bilo produkta B, tj. $[\mathrm{B}]_0 = 0$ M, onda je $[\mathrm{B}] = [\mathrm{A}]_0 - [\mathrm{A}]$ pa imamo

$$-\frac{\mathrm{d}[\mathrm{A}]}{\mathrm{d}t} = (k_1^{(1)} + k_1^{(-1)}) [\mathrm{A}] - k_1^{(-1)} [\mathrm{A}]_0.$$

To je linearna jednadžba prvog reda te dobivamo rješenje

$$[\mathrm{A}] = \frac{[\mathrm{A}]_0}{k_1^{(1)} + k_1^{(-1)}} \left(k_1^{(-1)} + k_1^{(1)} \exp(-(k_1^{(1)} + k_1^{(-1)}) t) \right)$$

i iz njega

$$[\mathrm{B}] = \frac{k_1^{(1)} [\mathrm{A}]_0}{k_1^{(1)} + k_1^{(-1)}} \left(1 - \exp(-(k_1^{(1)} + k_1^{(-1)}) t) \right).$$

Primjer 210. *Promotrimo mehanizam* $\mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{B} \rightleftharpoons \mathrm{C}$, *uz pretpostavku da su početne koncentracije od* B *i* C *jednake* 0 M. *Recimo da nas zanima vremenska ovisnost produkta* C.

Odgovarajući sustav diferencijalnih jednadžbi je

$$\begin{aligned} \tfrac{\mathrm{d}[\mathrm{A}]}{\mathrm{d}t} &= -k_1 [\mathrm{A}], \\ \tfrac{\mathrm{d}[\mathrm{B}]}{\mathrm{d}t} &= k_1 [\mathrm{A}] - k_2 [\mathrm{B}] + k_{-2} [\mathrm{C}], \\ \tfrac{\mathrm{d}[\mathrm{C}]}{\mathrm{d}t} &= k_2 [\mathrm{B}] - k_{-2} [\mathrm{C}] \end{aligned} .$$

Radi preglednosti označimo: $y_1 = [\mathrm{A}]$, $y_2 = [\mathrm{B}]$ *i* $y_3 = [\mathrm{C}]$. *Slijedi da smo dobili homogeni sustav linearnih diferencijalnih jednadžbi prvog reda s matricom*

$$A = \begin{pmatrix} -k_1 & 0 & 0 \\ k_1 & -k_2 & k_{-2} \\ 0 & k_2 & -k_{-2} \end{pmatrix}.$$

Odgovarajući karakteristični polinom je

$$(-k_1-\lambda)((-k_2-\lambda)(-k_{-2}-\lambda)-k_2k_{-2}) = -(\lambda+k_1)(\lambda^2+(k_2+k_{-2})\lambda) = -\lambda(\lambda+k_1)((\lambda+k_2+k_{-2}).$$

Vidimo dakle da su svojstvene vrijednosti od A *redom* 0, $-k_1$ *i* $-k_2-k_{-2}$. *Nađimo svojstveni vektor za svojstvenu vrijednost* 0*:*

$$\begin{pmatrix} -k_1 & 0 & 0 \\ k_1 & -k_2 & k_{-2} \\ 0 & k_2 & -k_{-2} \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} -k_1 & 0 & 0 \\ 0 & -k_2 & k_{-2} \\ 0 & k_2 & -k_{-2} \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} -k_1 & 0 & 0 \\ 0 & -k_2 & k_{-2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

tj. $(x_1, x_2, x_3) = (0, k_{-2}t, k_2t) = t(0, k_{-2}, k_2)$. *Dakle, pripadni svojstveni vektor je*

$$Y_{0,1} = \begin{pmatrix} 0 \\ k_{-2} \\ k_2 \end{pmatrix}.$$

Sami provjerite da je

$$Y_{0,2} = \begin{pmatrix} k_1 - k_2 - k_{-2} \\ -k_1 + k_{-2} \\ k_2 \end{pmatrix}$$

svojstveni vektor za svojsvenu vrijednost $-k_1$, *a*

$$Y_{0,3} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

svojstveni vektor za svojsvenu vrijednost $-k_2 - k_{-2}$. *Ukupno rješenje sustava je stoga*

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_2e^{-k_1t}(k_1 - k_2 - k_{-2}) \\ C_1k_{-2} + C_2e^{-k_1t}(k_{-2} - k_1) + C_3e^{-(k_2+k_{-2})t} \\ C_1k_2 + C_2e^{-k_1t}k_2 - C_3e^{-(k_2+k_{-2})t} \end{pmatrix}.$$

U početnom trenutku stoga imamo $[\mathrm{A}]_0 = C_2(k_1 - k_2 - k_{-2})$ *(dakle,* $C_2 = \frac{[\mathrm{A}]_0}{k_1-k_2-k_{-2}}$*),* $[\mathrm{B}]_0 = C_1k_{-2} + C_2(k_{-2} - k_1) + C_3$ *i* $[\mathrm{C}]_0 = C_1k_2 + C_2k_2 - C_3$, *odakle dobivamo da je* $C_1 = \frac{[\mathrm{A}]_0}{k_2+k_{-2}}$ *i* $C_3 = \frac{[\mathrm{A}]_0k_1k_2}{(k_1-k_2-k_{-2})(k_2+k_{-2})}$. *Dakle, vremenska ovisnost koncentracije produkta* C *(tj.* y_3*) je dana s*

$$\mathrm{C} = C_1k_2 + C_2e^{-k_1t}k_2 - C_3e^{-(k_2+k_{-2})t} =$$

$$= [\mathrm{A}]_0k_2\left(\frac{1}{k_2 + k_{-2}} + \frac{1}{k_1 - k_2 - k_{-2}}e^{-k_1t} - \frac{k_1}{(k_1 - k_2 - k_{-2})(k_2 + k_{-2})}e^{-(k_2+k_{-2})t}\right).$$

Primijetimo: dosad je opis svakog reakcijskog mehanizma bio oblika sustava linearnih diferencijalnih jednadžbi prvog reda. Ipak, nisu svi mehanizmi opisivi linearnim sustavima.

Primjer 211. *Mehanizam predravnoteže opisan je jednadžbom* $\mathrm{A} + \mathrm{B} \rightleftharpoons \mathrm{C} \longrightarrow \mathrm{D}$, *dakle se međuprodukt može raspasti natrag na reaktante ili pak dalje prelazi u produkt. Radi se o tri elementarna procesa* $\mathrm{A} + \mathrm{B} \longrightarrow \mathrm{C}$, $\mathrm{C} \longrightarrow \mathrm{A} + \mathrm{B}$ *i* $\mathrm{C} \longrightarrow \mathrm{D}$, *za koje koeficijente brzina označimo redom s* k_1, k_{-1} *i* k_2.

Pripadni sustav diferencijalnih jednadžbi je

$$\begin{aligned} -\tfrac{\mathrm{d}[\mathrm{A}]}{\mathrm{d}t} &= k_1[\mathrm{A}][\mathrm{B}] - k_{-1}[\mathrm{C}], \\ -\tfrac{\mathrm{d}[\mathrm{B}]}{\mathrm{d}t} &= k_1[\mathrm{A}][\mathrm{B}] - k_{-1}[\mathrm{C}], \\ \tfrac{\mathrm{d}[\mathrm{C}]}{\mathrm{d}t} &= k_1[\mathrm{A}][\mathrm{B}] - k_{-1}[\mathrm{C}] - k_2[\mathrm{C}], \\ \tfrac{\mathrm{d}[\mathrm{D}]}{\mathrm{d}t} &= k_2[\mathrm{C}] \end{aligned} .$$

Gornje diferencijalne jednadžbe se pojednostavljuju ako uzmemo pretpostavku ustaljenog stanja, tj. $\frac{\mathrm{d}[\mathrm{C}]}{\mathrm{d}t} = 0\,\mathrm{M\,s^{-1}}$: *iz prve dobijemo*

$$[\mathrm{C}] = \frac{k_1}{k_{-1} + k_2}[\mathrm{A}][\mathrm{B}]$$

što uvršteno u drugu jednadžbu daje

$$\frac{\mathrm{d}[\mathrm{D}]}{\mathrm{d}t} = \frac{k_1 k_2}{k_{-1} + k_2}[\mathrm{A}][\mathrm{B}].$$

☼ **Ponovimo bitno...** Kemijska kinetika se bavi brzinama reakcija. Brzina reakcije se definira kao $v = \frac{1}{V}\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t}$, gdje je ξ doseg definiran s $\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}n_\mathrm{J}} = \frac{1}{\nu_\mathrm{J}}$, $\xi(0\,\mathrm{s}) = 0\,\mathrm{mol}$. Zakon brzine reakcije je izraz koji opisuje ovisnost brzine reakcije o koncentracijama reaktanata (i produkata). Njegov uobičajeni oblik je da je brzina reakcije u svakom trenutku proporcionalna produktu potencija koncentracija reaktanata; koeficijent proporcionalnosti zove se koeficijent brzine reakcije, a zbroj eksponenata koncentracija je red reakcije. Uzimajući u obzir definiciju brzine, zakon brzine reakcije poprima oblik diferencijalne jednadžbe čije rješenje zovemo integriranim oblikom zakona brzine reakcije. U slučaju reakcija reda n obzirom na samo jedan reaktant, tj. reakcija kod kojih je brzina u svakom trenutku proporcionalna potenciji samo jednog reaktanta, integrirani oblik se određuje metodom separacije varijabli. U slučaju razmatranja reakcijskih mehanizama, kod kojih se ukupna reakcija promatra kao slijed jednostavnih koraka zvanih elementarnim procesima, model mehanizma je sustav diferencijalnih jednadžbi. ☺

6.9 Zadaci za vježbu

1. Pokažite da je sa $y(x) = \frac{1}{1-Cx}$ ($C = \text{const.}$) dano opće rješenje diferencijalne jednadžbe
$$xy' + y = y^2 .$$

Ispitajte je li $y(x) = 0$ singularno rješenje te napišite jedno partikularno rješenje dane jednadžbe.

Rješenje. $y(x) = 0$ singularno rješenje, $y(x) = 1$ partikularno rješenje $(C = 0)$.

2. Pokažite da je sa $y(x) = \frac{1}{16}e^{3x} + 3$ dano partikularno rješenje diferencijalne jednadžbe

$$y'' + 2y' + y = e^{3x} + 3 \ .$$

Zadovoljava li to rješenje početni uvjet $y(0) = 3$?

Rješenje. $y(0) = \frac{49}{16} \neq 3$.

3. Metodom separacije varijabli, riješite diferencijalne jednadžbe

   (a) $(x + 1)y' + xy = 0$.
   (b) $2x^2yy' + y^2 = 2$.
   (c) $y' \cdot \operatorname{ctg} x + y = 2$.
   (d) $x^2y^2y' + 1 = y$.
   (e) $(x^2 - 1)y' + 2xy^2 = 0$.
   (f) $y\sqrt{1 - x^2}\, y' + x\sqrt{1 - y^2} = 0.$

   Rješenje.
   (a) $y = Ce^{-x}(x + 1),\ C \in \mathbb{R}.$ (b) $y^2 = Ce^{\frac{1}{x}} + 2,\ C \in \mathbb{R}.$
   (c) $y = 2 - C\cos x,\ C \in \mathbb{R}.$ (d) $\frac{y^2}{2} + y + \ln|y - 1| = -\frac{1}{x} + C,\ C \in \mathbb{R},\ y = 1.$
   (e) $\frac{1}{y} = \ln|x^2 - 1| + C,\ C \in \mathbb{R},\ y = 0.$ (f) $\sqrt{1 - y^2} + \sqrt{1 - x^2} = C,\ C \in \mathbb{R}.$

4. Odredite partikularno rješenje koje zadovoljava zadanu diferencijalnu jednadžbu sa početnim uvjetom

   (a) $2\sqrt{x}\, y' = y\ ,\quad y(1) = 2$.
   (b) $xyy' = y^2 + 1\ ,\quad y(2) = 1$.
   (c) $e^y(y' + 1) = 1\ ,\quad y(0) = \ln 2$.

   Rješenje.
   (a) $y = 2\, e^{\sqrt{x} - 1}$. (b) $y^2 = \frac{x^2}{2} - 1.$ (c) $e^y - 1 = e^{-x}$.

5. Odredite sve krivulje sa svojstvom da u svakoj točki krivulje sjecište tangente sa y-osi raspolavlja spojnicu dirališta tangente i sjecišta tangente s x-osi.

   Rješenje. $y^2 = Cx,\quad C \neq 0.$

6. Odredite krivulju koja prolazi točkom $T(3, 2)$, a diralište bilo koje njene tangente raspolavlja odsječak tangente među koordinatnim osima.

   Rješenje. $y = \frac{6}{x}$.

7. Brzina raspadanja radija proporcionalna je postojećoj masi radija. Odredite koliki se postotak mase radija raspadne nakon 100 godina ako je poznato da je razdoblje poluraspadanja 1600 godina.

   Rješenje. 4.24%.

8. Tijelo se za 20 minuta ohladi sa 100°C na 60°C. Brzina kojom tijelo gubi toplinu, i stoga mijenja temperaturu, proporcionalna je razlici temperature tijela i temperature zraka koji ga okružuje. Nakon koliko vremena će se tijelo ohladiti na 30°C, ako je temperatura zraka koji ga okružuje 20°C?

   Rješenje. 60 minuta.

9. Motorni čamac kreće se na mirnoj vodi brzinom 20 km/h. Ako se motor isključi u trenutku kad se čamac kreće punom brzinom, njegova će se brzina nakon 40 sekundi smanjiti na 8 km/h. Otpor vode proporcionalan je brzini gibanja čamca. Odredite brzinu gibanja čamca 2 minute nakon zaustavljanja motora.

   Rješenje. 1.28 km/h.

10. Pokažite da se diferencijalna jednadžba oblika

$$y' = f(ax + by + c)\ , \quad (a, b, c \in \mathbb{R} \text{ zadani})$$

   supstitucijom $z = ax + by + c$ svodi na jednadžbu sa separiranim varijablama te potom riješite

   (a) $y' - y = 2x - 3$.

   (b) $(x + 2y)\, y' = 1$.

   (c) $y' = \cos(y - x)$.

   Rješenje.
   (a) $y = Ce^x - 2x + 1,\ C \in \mathbb{R}$. (b) $x + 2y + 2 = Ce^y,\ C \in \mathbb{R}$.
   (c) $\operatorname{ctg} \frac{y-x}{2} = x + C,\ C \in \mathbb{R},\ y = x + 2k\pi,\ \ k \in \mathbb{Z}$.

11. Odredite opće rješenje homogenih diferencijalnih jednadžbi

   (a) $xy' - y = x\operatorname{tg} \frac{y}{x}$.

   (b) $x^2 y' + y^2 = 2xy$.

   (c) $(x + y)y' + y = x$.

   (d) $e^{\frac{x}{y}}\left(1 - \frac{x}{y}\right)y' + e^{\frac{x}{y}} + 1 = 0$.

   Rješenje.
   (a) $\sin \frac{y}{x} = Cx,\ C \in \mathbb{R}$. (b) $y = Cx(x - y),\ C \in \mathbb{R},\ y = x$.
   (c) $y^2 + 2xy - x^2 = C,\ C \in \mathbb{R}$. (d) $x + ye^{\frac{x}{y}} = C,\ C \in \mathbb{R}$.

12. Odredite sve krivulje kojima svaka tangenta siječe os ordinatu u točki koja je jednako udaljena od ishodišta i od dirališta tangente.

   Rješenje. $\left(x - \frac{C}{2}\right)^2 + y^2 = \frac{C^2}{4},\ \ C \neq 0$.

13. Odredite opće rješenje linearnih diferencijalnih jednadžbi

    (a) $xy' - 2y = 2x^4$.

    (b) $y = x(y' - x\cos x)$.

    (c) $xy' + (x+1)y = x^2 e^{-x}$.

    (d) $y' + \frac{y}{1-x} = x^2 - x$.

    (e) $y' + y\operatorname{ctg} x = \sin 2x$.

    (f) $y' + 2xy + x = e^{-x^2}$.

    Rješenje.
    (a) $y = x^2(x^2 + C),\ C \in \mathbb{R}$. (b) $y = (\sin x + C)\ x,\ C \in \mathbb{R}$.
    (c) $y = \frac{1}{x}\left(\frac{x^3}{3} + C\right)\ e^{-x}\ C \in \mathbb{R}$. (d) $y = \left(\frac{x^2}{2} + C\right)(x-1),\ C \in \mathbb{R}$.
    (e) $y = \frac{2}{3}\sin^2 x + \frac{C}{\sin x},\ C \in \mathbb{R}$. (f) $y = (x + C)e^{-x^2} - \frac{1}{2},\ C \in \mathbb{R}$.

14. Odredite jednadžbu krivulje koja prolazi točkom $A(a^2, 1)$ $(a > 0)$ i za koju vrijedi da je u svakoj njenoj točki površina trokuta kojeg određuje tangenta u toj točki, os apscisa i radij-vektor te točke konstantna i iznosi a^2.
    Rješenje. $xy = a^2$.

15. Odredite opće rješenje homogenih linearnih diferencijalnih jednadžbi

    (a) $y'' + 4y' + 3y = 0$.

    (b) $y'' - 6y' + 9y = 0$.

    (c) $y'' - 3y' + 2y = 0$.

    (d) $y'' + 9y = 0$.

    (e) $2y'' - y' - y = 0$.

    (f) $y'' + 2y' + 3y = 0$.

    Rješenje.
    (a) $y = C_1 e^{-3x} + C_2 e^{-x},\ C_1, C_2 \in \mathbb{R}$. (b) $y = C_1 e^{3x} + C_2 x e^{3x},\ C_1, C_2 \in \mathbb{R}$.
    (c) $y = C_1 e^{x} + C_2 e^{2x},\ C_1, C_2 \in \mathbb{R}$. (d) $y = C_1 \cos 3x + C_2 \sin 3x,\ C_1, C_2 \in \mathbb{R}$.
    (e) $y = C_1 e^{-\frac{x}{2}} + C_2 e^{x},\ C_1, C_2 \in \mathbb{R}$. (f) $y = e^{-x}(C_1 \cos\sqrt{2}\,x + C_2 \sin\sqrt{2}\,x)$, $C_1, C_2 \in \mathbb{R}$.

16. Metodom neodređenih koeficijenata, riješite diferencijalne jednadžbe

    (a) $y'' + 4y' + 3y = 5e^{2x}$.

    (b) $y'' + 2y = x^2 + 2$.

    (c) $y'' - 3y' + 2y = e^{x}$.

    (d) $y'' - 2y' + y = e^{x}(x-1)$.

    (e) $y'' + y = 2 + e^{-x}$.

    (f) $y'' + 3y' = x + \cos x$.

(g) $y'' + 2y' + 2y = e^{-x}(x + \cos x)$.

Rješenje.
(a) $y = C_1 e^{-3x} + C_2 e^{-x} + \frac{1}{3}e^{2x},\ C_1, C_2 \in \mathbb{R}$.
(b) $y = C_1 \cos\sqrt{2}\,x + C_2 \sin\sqrt{2}\,x + \frac{1}{2}(x^2+1),\ C_1, C_2 \in \mathbb{R}$.
(c) $y = C_1 e^{x} + C_2 e^{2x} + xe^{x},\ C_1, C_2 \in \mathbb{R}$.
(d) $y = C_1 e^{x} + C_2 xe^{x} + \left(\frac{1}{6}x^3 - \frac{1}{2}x^2\right)e^{x},\ C_1, C_2 \in \mathbb{R}$.
(e) $y = C_1 \cos x + C_2 \sin x + \frac{1}{2}e^{-x} + 2,\ C_1, C_2 \in \mathbb{R}$.
(f) $y = C_1 + C_2 e^{-3x} + \frac{1}{6}x^2 - \frac{1}{9}x + \frac{3}{10}\sin x - \frac{1}{10}\cos x,\ C_1, C_2 \in \mathbb{R}$.
(g) $y = e^{-x}(C_1 \cos x + C_2 \sin x) + xe^{-x} + \frac{x}{2}e^{-x}\sin x,\ C_1, C_2 \in \mathbb{R}$.

17. Odredite opće rješenje diferencijalne jednadžbe

$$y'' - 2ay' + (a^2+1)y = a^2 \sin x - 2a\cos x \quad (a \in \mathbb{R} \setminus \{0\}).$$

Za koju vrijednost parametra a opće rješenje ostaje ograničeno kad $x \to +\infty$?
Rješenje. $y = e^{ax}(C_1 \cos x + C_2 \sin x) + \sin x$; $a \leq 0$.

18. Metodom varijacije konstanti, riješite diferencijalne jednadžbe

(a) $y'' + y = \frac{1}{\cos x}$.
(b) $y'' - 6y' + 9y = 36\sqrt{x} - \frac{12x+1}{x\sqrt{x}}$.
(c) $y'' + 4y' + 4y = \frac{e^{-2x}}{x^2}$.
(d) $y'' - 5y' + 6y = \frac{6x^2+17x+13}{(x+1)^3}$.

Rješenje.
(a) $y = C_1 \cos x + C_2 \sin x + x\sin x + \cos x \ln(\cos x),\ C_1, C_2 \in \mathbb{R}$.
(b) $y = C_1 e^{3x} + +C_2 xe^{3x} + 4\sqrt{x},\ C_1, C_2 \in \mathbb{R}$.
(c) $y = e^{-2x}(C_1 + C_2 x - \ln x),\ C_1, C_2 \in \mathbb{R}$.
(d) $y = C_1 e^{2x} + C_2 e^{3x} + \frac{1}{x+1},\ C_1, C_2 \in \mathbb{R}$.

19. Odredite opće rješenje sustava diferencijalnih jednadžbi

(a)
$$x' + y = 0 \ ,$$
$$y' - 2x - 2y = 0 \ .$$

(b)
$$x' + x + y = 0 \ ,$$
$$y' - x + 3y = 0 \ .$$

(c)
$$x' - 2x + y = 0 \ ,$$
$$y' + x - 2y = -5e^{t}\sin t \ .$$

Rješenje.
(a) $x(t) = e^t(C_1 \cos t + C_2 \sin t),\ \ y(t) = -x'(t),\ C_1, C_2 \in \mathbb{R}.$
(b) $y(t) = e^{-2t}(C_1 + C_2 t),\ \ x(t) = y'(t) + 3y(t),\ C_1, C_2 \in \mathbb{R}.$
(c) $x(t) = C_1 e^t + C_2 e^{3t} + e^t(2\cos t - \sin t),\ \ y(t) = 2x(t) - x'(t),\ C_1, C_2 \in \mathbb{R}.$

20. Odredite partikularno rješenje koje zadovoljava sustav diferencijalnih jednadžbi

$$x' + 4x - 8y = 0\ ,$$

$$4y' + 4y + x = 0$$

te početne uvjete $x(0) = 0$, $y(0) = -2$.

Rješenje. $x(t) = 16(e^{-3t} - e^{-2t}),\ \ y(t) = 2(e^{-3t} - 2e^{-2t})\ .$

Poglavlje 7

Nizovi, redovi i redovi potencija

7.1 Nizovi

Nabrajanje brojeva poput

$$1, 2, 3, 4, 5, \ldots$$

ili

$$1, 2, 4, 8, 16, \ldots$$

obično se naziva nizom, bez obzira je li to nabrajanje konačno (do nekog zadnjeg broja, recimo $1, 2, 3, 4, 5$) ili nastavljeno „u beskonačnost" (što naznačavamo s $\ldots$ nakon prvih nekoliko brojeva). Ovakva definicija niza nije dobra, ali nije daleko od smisla prave definicije. Bitne karakteristike nizova su:

- Sastoje se od članova, koji su obično brojevi.
- Za svaki član moguće je utvrditi ne samo je li u nizu, nego i na kojem mjestu u redoslijedu se nalazi. Pritom su mjesta određena prirodnim (u jeziku: odgovarajućim rednim) brojevima: prvi član, drugi član, ..., dvadeset i peti član, ...
- Nizovi u matematici su uvijek beskonačni.

Precizna definicija, koja koncizno izražava sve gore navedene karakteristike niza jest:

Definicija 48 (Niz realnih ili kompleksnih brojeva)**.** *Svaku funkciju kojoj je domena skup prirodnih brojeva $\mathbb{N}$ zovemo nizom. Niz realnih brojeva je funkcija*

$$a : \mathbb{N} \to \mathbb{R},$$

a niz kompleksnih brojeva je funkcija

$$a : \mathbb{N} \to \mathbb{C}.$$

Napomena 25. *Često je zgodnije kao domenu niza uzeti skup $\mathbb{N}_0$, tj. početi s nultim članom.*

Elementi domene niza, tj. skupa $\mathbb{N}$, predstavljaju redne brojeve, tj. pozicije u nizu, a njima pridružene vrijednosti su odgovarajući članovi niza. Primjerice, $a(5)$ je peti član niza. U slučaju nizova uobičajeno je elemente domene (redne brojeve) označavati s n, a njima pridružene elemente kodomene (članove niza) s a_n (a ne kao kod drugih funkcija s $a(n)$). Kad govorimo o čitavom nizu često ga umjesto s a zapisujemo s $(a_n)_{n\in\mathbb{N}}$ ili kraće s $(a_n)_n$, dok je a_n oznaka za n-ti član niza (usporedite s razlikom između oznake f i $f(x)$ općenito kod funkcija). Budući je domena svakog niza cijeli skup $\mathbb{N}$, znači da za svaki prirodni broj n postoji n-ti član tog niza pa je niz uvijek beskonačan ako ga doživljavamo kao „nabrajanje".

Konstantan niz je niz koji je kao funkcija konstantan tj. kojemu su svi članovi jednaki:

$$a_n = c, \quad n \in \mathbb{N},$$

pri čemu je c neki fiksan, tj. o n neovisan, broj.

Primjer 212. *Niz zadan s $a_n = i$, tj. $i, i, i, \ldots$, je konstantan niz kompleksnih brojeva.*

Nizove, kao i druge funkcije, obično zadajemo formulom koja opisuje kako elementu domene pridružiti odgovarajući element kodomene. Kod nizova takvu formulu obično zovemo formulom općeg člana niza.

Primjer 213. *Formulom*

$$a_n = \frac{1}{n}$$

zadan je opći član niza recipročnih prirodnih brojeva $1, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \ldots, \frac{1}{n}, \ldots$.

Primjer 214. *Fibonaccijev niz je niz (F_n) definiran tako da su mu prva dva člana jednaka 1 ($F_1 = F_2 = 1$), a svaki sljedeći je zbroj prethodna dva:*

$$F_3 = F_1 + F_2 = 2,$$
$$F_4 = F_2 + F_3 = 3,$$
$$F_5 = F_3 + F_4 = 5,$$
$$F_6 = F_4 + F_5 = 8,$$
$$\ldots$$
$$F_n = F_{n-2} + F_{n-1}.$$

Za nizove poput ovog, kod kojih je zadan jedan ili nekoliko početnih članova te pravilo kojim se iz prethodnih članova izračunava sljedeći kažemo da su zadani rekurzivno.

Među vrstama nizova posebno su poznati aritmetički i geometrijski nizovi.

Definicija 49 (Aritmetički niz). *Niz realnih ili kompleksnih brojeva sa svojstvom da je razlika svaka dva uzastopna člana niza ista zovemo aritmetičkim nizom. Formalno, niz $(a_n)_n$ je aritmetički ako postoji neki broj d (diferencija aritmetičkog niza) takav da za sve $n \in \mathbb{N}_0$ vrijedi*

$$a_{n+1} - a_n = d.$$

Primjer 215. *Niz s općim članom* $a_n = 2 + 3n$ *(tj.* $2, 5, 8, 11, \ldots$*) je aritmetički jer je razlika svaka dva uzastopna člana* 3*:*

$$a_{n+1} - a_n = 2 + 3(n+1) - (2 + 3n) = 3.$$

Opći član aritmetičkog niza s diferencijom d dan je formulom

$$a_n = a_0 + dn,$$

gdje je a_0 prvi[1] član niza. Dakle, aritmetički niz je potpuno zadan prvim članom i diferencijom.

Definicija 50 (Geometrijski niz)**.** *Niz realnih ili kompleksnih brojeva sa svojstvom da je kvocijent svaka dva uzastopna člana niza isti zovemo geometrijskim nizom. Formalno, niz* $(a_n)_n$ *je geometrijski ako postoji neki broj* q *(kvocijent geometrijskog niza) takav da za sve* $n \in \mathbb{N}_0$ *vrijedi*

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} = q.$$

Primjer 216. *Niz s općim članom* $a_n = 2 \cdot \left(\frac{1}{3}\right)^n$ *(tj.* $2, \frac{2}{3}, \frac{2}{9}, \ldots$*) je geometrijski jer je kvocijent svaka dva uzastopna člana* $\frac{1}{3}$*:*

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} = \frac{2 \cdot \left(\frac{1}{3}\right)^{n+1}}{2 \cdot \left(\frac{1}{3}\right)^n} = \frac{1}{3}.$$

Opći član geometrijskog niza s kvocijentom q dan je formulom

$$a_n = a_0 \cdot q^n,$$

gdje je a_0 prvi član niza. To lako dobijemo iz definicije[2] geometrijskog niza:

$$a_n = a_{n-1}q = a_{n-2}q \cdot q = a_{n-2}q^2 = a_{n-3}q \cdot q^2 = a_{n-3}q^3 = \ldots = a_0 q^n.$$

Dakle, geometrijski niz je potpuno zadan prvim članom i kvocijentom. Zbroj prvih n članova geometrijskog niza dan je formulom

$$S_n = a_0 \frac{1 - q^n}{1 - q}.$$

Primjer 217. *Određenu organsku tvar* O *potrebno je iz vodene otopine ekstrahirati pomoću benzena. Nakon dodatka benzena dobiven je ravnotežni omjer koncentracija te tvari u vodi i u benzenu* $K = \frac{c_1}{c_2} = 0{,}653$*. Koliko puta treba ekstrakciju provesti s* 200 mL *početne otopine da bi se iz otopine izdvojilo* 97% *tvari, ako dodajemo po* 200 mL *odnosno po* 100 mL *benzena?*

Neka je n_0 *množina tvari* O *u vodenoj otopini. Tada nakon dodavanja* V_2 *benzena u* V_1 *vodene otopine vrijedi*

$$n_0 = c_1^{(1)} V_1 + c_2^{(1)} V_2,$$

[1] Kad gledamo nizove s domenom $\mathbb{N}_0$, iako je formalno a_0 nulti član niza, uobičajeno je zvati ga prvim, tj. pozicije brojati od nulte.

[2] Formalni dokaz išao bi matematičkom indukcijom.

odnosno u vodi je otopljeno još $n_1 = c_1^{(1)} V_1$ *tvari* O. *Omjer množina te tvari u vodenoj otopini poslije i prije prve ekstrakcije je stoga*

$$\frac{n_1}{n_0} = \frac{c_1^{(1)} V_1}{c_1^{(1)} V_1 + c_2^{(1)} V_2} = \frac{KV_1}{KV_1 + V_2} = \alpha,$$

tj. $n_1 = n_0 \alpha$. *Očigledno je* $\alpha < 1$.

Slično, ako je trenutna množina tvari koja je još u vodenoj otopini jednaka n_k *(tj. provedeno je* k *ekstrakcija), nakon sljedeće ekstrakcije vrijedit će*

$$n_k = c_1^{(k+1)} V_1 + c_2^{(k+1)} V_2$$

i

$$\frac{n_{k+1}}{n_k} = \frac{c_1^{(k+1)} V_1}{c_1^{(k+1)} V_1 + c_2^{(k+1)} V_2} = \frac{KV_1}{KV_1 + V_2} = \alpha,$$

tj. $n_{k+1} = n_k \alpha$.

Dakle, niz množina promatrane organske tvari tokom uzastopnih ekstrakcija je geometrijski s kvocijentom α *te je nakon* k *ekstrakcija u vodi otopljeno* $n_k = n_0 \alpha^k$ *tvari* O. *Kako želimo ekstrahirati bar* 97% *te tvari, znači da treba ekstrakciju provesti k puta, pri čemu za* k *mora vrijediti* $n_k \leq 0{,}03 n_0$, *tj.* $\alpha^k \leq 0{,}03$. *Potreban broj ekstrakcija je stoga najmanji prirodan broj* k *takav da je*

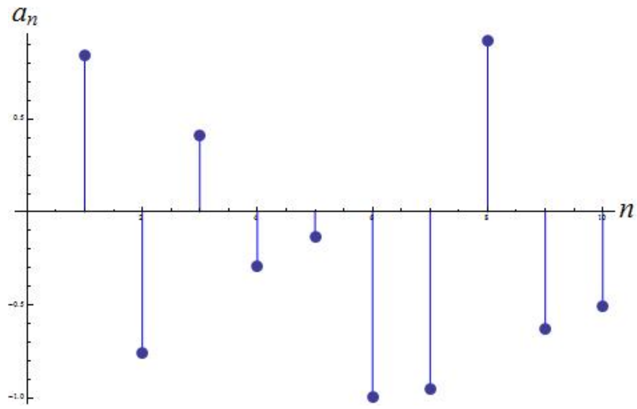
$$k \geq \log_\alpha 0{,}03 = \frac{\ln 0{,}03}{\ln \alpha} = F(\alpha)$$

(kako je $\alpha < 1$, $\log_\alpha$ *pada te je pri logaritmiranju nejednakosti* $\alpha^k \leq 0{,}03$ *potrebno obrnuti znak nejednakosti). Pri takvoj ekstrakciji potrošit će se* kV_2 *volumena benzena.*

Nadalje, $\alpha = \frac{KV_1}{KV_1+V_2} = \frac{0{,}653 \cdot 200}{0{,}653 \cdot 200 + \frac{V_2}{1\,\mathrm{mL}}} = \frac{130{,}6}{130{,}6 + \frac{V_2}{1\,\mathrm{mL}}}$ *je to manji što je* V_2 *veći (jer je funkcija* $f(x) = \frac{a}{a+x}$ *padajuća za pozitivne* x, *a u našem slučaju je* $f = \alpha$, $x = \frac{V_2}{1\,\mathrm{mL}}$ *i* $a = 130{,}6$*). Konkretno, za* $V_2 = 200$ mL *je* $\alpha = 0{,}395$ *i stoga* $k \geq F(0,395) = 3{,}78$ *odnosno* $k = 4$. *Za takve četiri ekstrakcije treba nam* $4 \cdot 200 = 800$ mL *benzena. Za* $V_2 = 100$ mL *je* $\alpha = 0{,}566$ *i* $k \geq F(0{,}566) = 6{,}17$ *pa je za ekstrahiranje* 97% *tvari* O *iz vodene otopine potrebno* 7 *ekstrakcija pri čemu se potroši* $7 \cdot 100 = 700$ mL *benzena.*

Općenito, $F(\alpha)$ *i stoga potrebni broj ekstrakcija* k *je veći kad je* V_2 *manji (što je logično, a ujedno i vidljivo iz gornjih formula). No, ukupna količina potrošenog benzena je* $kV_2 \geq V_2 F(\alpha) = V_2 \frac{\ln 0{,}03}{\ln \alpha} = \frac{V_2 \ln 0{,}03}{\ln \frac{130{,}6}{130{,}6 + \frac{V_2}{1\,\mathrm{mL}}}}$ *što raste*[3] *s porastom* V_2 *pa je tako i matematički potvrđena iskustveno poznata činjenica da se manje sredstva ekstrakcije potroši ako se ekstrahira s manjim volumenima (ali zato češće).*

Nizove realnih brojeva možemo prikazati grafički tako da crtamo njihove grafove u (Cartesiusovom) koordinatnom sustavu. Kako se graf svake funkcije, pa tako i niza, sastoji od uređenih parova oblika $(x, f(x))$ gdje x prolazi domenom, slijedi da se crtež grafa niza sastoji od diskretnih točaka kojima su apscise prirodni brojevi, a ordinate odgovarajuće vrijednosti članova niza. Radi lakšeg očitavanja obično se kao pomoćne linije ucrtavaju spojnice apscisa s odgovarajućim točkama grafa.



Slika 7.1: Grafički prikaz niza $a_n = \sin n^2$.

Primjer 218. *Na slici 7.1 prikazan je graf niza zadanog formulom $a_n = \sin n^2$.*

Niz realnih brojeva $(a_n)_n$ je ograničen odozgo (odozdo) ako postoji realan broj M takav da je $a_n \leq M$ ($a_n \geq M$) za sve članove niza. Ako je niz ograničen i odozgo i odozdo, kažemo da je ograničen.

Ograničenost odozgo i odozdo nemaju smisla za nizove kompleksnih brojeva, jer ne postoji prirodan uređaj među kompleksnim brojevima. No, pojam ograničenosti moguće je definirati tako da definicija bude zajednička za nizove realnih i kompleksnih brojeva:

Definicija 51 (Ograničeni nizovi). *Niz realnih ili kompleksnih brojeva je ograničen ako postoji realan broj M takav da je*

$$|a_n| \leq M$$

za sve n (tj. svi članovi niza imaju apsolutnu vrijednost najviše M).

Primjer 219. *Niz zadan s $a_n = \frac{1}{n}$ je ograničen jer su mu svi članovi između 0 i 1.*

Primjer 220. *Svaki konstantan niz bilo realnih bilo kompleksnih brojeva je ograničen.*

Primjer 221. *Niz prirodnih brojeva je definiran formulom $a_n = n$ i ograničen je odozdo jer je $a_n \geq 1$ za sve $n \in \mathbb{N}$, ali nije ograničen odozgo.*

U skupu realnih brojeva ima smisla uspoređivati brojeve po veličini pa ima smisla reći da je primjerice niz $1, 4, 9, 16, \ldots$ ($a_n = n^2$) rastući, a niz $-1, -2, -3, \ldots$ ($a_n = -n$) padajući. Preciznije:

Definicija 52 (Rastući i padajući nizovi realnih brojeva). *Niz $(a_n)_n$ realnih brojeva zovemo rastućim ako je*

$$a_n \leq a_{n+1}$$

za sve n, a padajućim ako je

$$a_n \geq a_{n+1}$$

za sve n.

[3]Funkcija zadana formulom $f(x) = \frac{x \ln 0{,}03}{\ln \frac{130{,}6}{130{,}6+x}}$ je rastuća, a u našem primjeru imamo $x = \frac{V_2}{1\,\mathrm{mL}}$.

Primjer 222. *Samo konstantan niz je istovremeno rastući i padajući.*

Primjer 223. *Niz iz primjera 218 nije ni rastući ni padajući.*

Primjer 224. *Ako niz $(a_n)_n$ raste, njegov suprotni niz $(-a_n)_n$ pada (i obrnuto). Primjerice, niz zadan s $a_n = \frac{1}{n}$ pada, a niz zadan s $b_n = -\frac{1}{n}$ raste.*

U kontekstu nizova realnih i kompleksnih brojeva imaju smisla govoriti o limesima. Budući da su nizovi vrsta funkcija, pojam limesa nizaje poseban slučaj limesa funkcije. Podsjetimo se: limesi funkcija opisuju kako se ponašaju vrijednosti funkcije (u ovom slučaju članovi niza) kad se varijabla (u ovom slučaju prirodan broj koji je indeks člana niza) sve više približava nekoj vrijednosti. Pritom je oznaka $\lim\limits_{x\to c} f(x)$ podrazumijevala da se s x može doći proizvoljno blizu c *ostajući u domeni* funkcije f. Kako između svaka dva prirodna broja imamo „rupu”, besmisleno je razmatrati pitanja poput „koliki je limes niza kad n teži k 3?” jer se ostajući u prirodnim brojevima n ne možemo proizvoljno približiti broju 3. Također, kako su u domeni samo nenegativni brojevi, nema smisla govoriti o limesima nizova kad n teži u $-\infty$. Ukratko, u kontekstu nizova ima smisla govoriti samo o limesima u pozitivnoj beskonačnosti te se često govori jednostavno o limesu niza, a ne o limesu niza kad n teži u beskonačnost.

Limes ili granična vrijednost niza $(a_n)_n$ kad n teži u beskonačnost je, ako postoji, broj L takav da što je veći n, to su članovi niza a_n bliži L (i pritom mogu doći proizvoljno blizu L). Formalno:

Definicija 53 (Limes niza)**.** *Broj L je limes niza $(a_n)_n$ ako za svaki $\varepsilon > 0$ postoji $n_0 \in \mathbb{N}$ takav da za $n \geq n_0$ vrijedi $|a_n - L| < \varepsilon$. Ako je L limes niza $(a_n)_n$ pišemo*

$$\lim_{n\to+\infty} a_n = L$$

ili kraće $\lim a_n = L$.

Smisao formalne definicije limesa niza je da su počevši od nekog mjesta u nizu svi članovi niza na proizvoljno maloj udaljenosti ε od limesa L.

Ako limes niza postoji, kažemo da je niz konvergentan, a inače je divergentan. Neki divergentni nizovi realnih brojeva poprimaju proizvoljno velike ili male vrijednosti pa imaju smisla oznake $\lim a_n = +\infty$ i $\lim a_n = -\infty$.

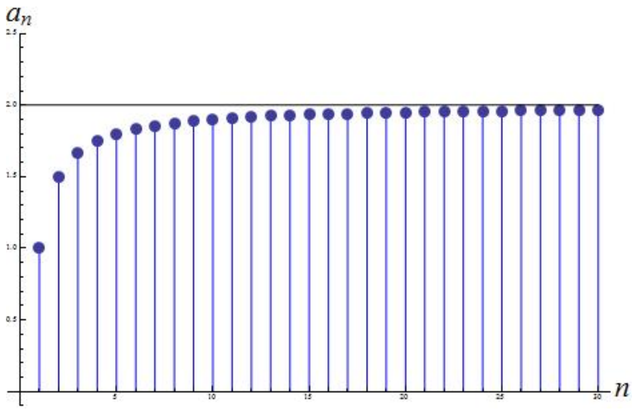
Definicija 54 (Beskonačni limesi nizova)**.** *Ako članovi niza postaju proizvoljno veliki, tj. ako za proizvoljno velik broj M postoji pozicija $n_0 \in \mathbb{N}$ u nizu takva da su za sve daljnje pozicije $n > n_0$ članovi niza veći od M ($a_n > M$), kažemo da niz teži u plus beskonačno i pišemo*

$$\lim_{n\to+\infty} a_n = +\infty.$$

Slično, ako članovi niza postaju proizvoljno mali tj. ako za proizvoljno malen[4] broj m postoji pozicija $n_0 \in \mathbb{N}$ u nizu takva da su za sve daljnje pozicije $n > n_0$ članovi niza manji od m ($a_n < m$), kažemo da niz teži u minus beskonačno i pišemo

$$\lim_{n\to+\infty} a_n = -\infty.$$

[4] Podsjećamo: proizvoljno malen broj znači „jako negativan” broj.



Slika 7.2: Grafički prikaz konvergentnog realnog niza $a_n = 2 - \frac{1}{n}$: $\lim a_n = 2$.

Slika 7.3: Grafički prikaz konvergentnog realnog niza $a_n = 2 - \frac{1}{n}$: $\lim a_n = 2$.

Još jednom napominjemo: kad se govori o konvergenciji ili divergenciji nekog niza, tj. o limesu niza, podrazumijevamo limes kad varijabla n teži u $+\infty$.

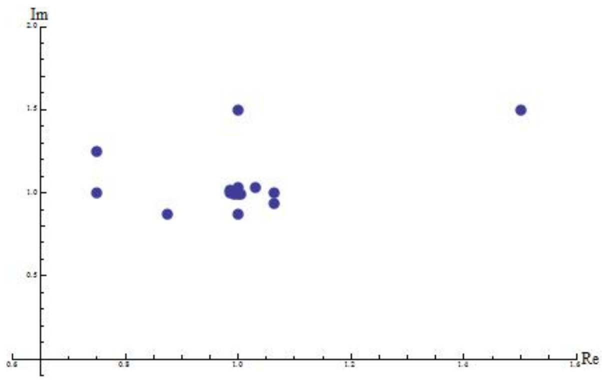
Vizualno konvergenciju niza možemo predočiti na dva načina. Jedan način je specijalni slučaj takvog pristupa za općenite funkcije: niz ima limes ako njegov graf ima horizontalnu asimptotu (vidi sliku 7.2).

Drugačiji način vizualizacije konvergencije primjenjiv je i za nizove kompleksnih brojeva: ucrtavamo redom samo iznose članova niza na brojevni pravac (ako je niz realan) odnosno u koordinatnu ravninu (ako je kompleksan). U slučaju konvergentnih nizova, što više točaka ucrtamo, primijetit ćemo da se grupiraju sve bliže jednoj određenoj točki pravca odnosno ravnine. Ta točka je limes niza. Takvi prikazi vide se na slikama 7.3 i 7.4.

Najjednostavniji primjeri konvergentnih nizova su konstantni nizovi: niz definiran s $a_n = c$ uvijek ima limes c, tj. $\lim_{n\to+\infty} c = c$. Dokaz je jednostavan: ma kako malu udaljenost $\varepsilon > 0$ od limesa c zamislili, za sve članove niza vrijedi $|a_n - c| = |c - c| = 0 < \varepsilon$.

Konvergencija niza tiče se ponašanja njegovih „dalekih članova": bitno je da se počevši od neke pozicije članovi niza grupiraju oko nekog broja. Stoga odabir početnih (konačno mnogo) članova niza ne utječe na njegovu konvergenciju.

Primjer 225. *Nizovi* $2, 2, 2, 2, 2, \ldots, 2, \ldots$ *(konstantan niz), zatim niz* 1235, $i - 45$, i, $2, 2, 2, 2, \ldots, 2, \ldots$ *te niz* $1, 2, 3, \ldots, 5000000, 2, 2, 2, 2, \ldots, 2, \ldots$ *svi imaju limes* 2 *iako se razlikuju u početnim članovima: u prvom nizu su svi članovi proizvoljno blizu* 2*, u drugom nizu su svi članovi počevši od četvrtog proizvoljno blizu* 2*, a u trećem su svi članovi počevši od* 5000001*. člana proizvoljno blizu* 2*.*



Slika 7.4: Grafički prikaz konvergentnog kompleksnog niza $a_n = 1+i+\frac{1}{(1-i)^n}$: $\lim a_n = 1+i$.

Korisno je zapamtiti: aritmetički nizovi divergiraju, osim ako im je diferencija $d = 0$ (takvi aritmetički nizovi su konstantni).

Primjer 226. *Aritmetički niz zadan s $a_n = 1 - 0{,}01n$ poprima proizvoljno male vrijednosti:* $\lim a_n = -\infty$.

Geometrijski nizovi su konvergentni ako su konstantni (kvocijent $q = 1$) ili ako im je kvocijent po apsolutnoj vrijednosti manji od 1 ($|q| < 1$), a inače su divergentni. Za slučaj realnih geometrijskih nizova $a_n = a_0 q^n$ vrijedi:

$$\lim a_n = \begin{cases} 0, & -1 < q < 1, \\ a_0, & q = 1, \\ +\infty, & q > 1,\ a_0 > 0, \\ -\infty, & q > 1,\ a_0 < 0, \\ \text{neodređen}, & q \leq -1 \end{cases}.$$

Primjer 227. *Limes niza iz primjera 217 je*

$$\lim_{k\to+\infty} n_k = \lim_{k\to\infty} n_0 \alpha^k = 0\,\mathrm{mol}$$

jer je α uvijek između 0 i 1. Time je matematički zapisana iskustvena činjenica: ako ekstrakcije provodimo unedogled, u vodi više neće ostati ništa otopljene tvari.

Među konvergentnim nizovima (osim konvergentnih geometrijskih nizova) vrijedi zapamtiti sljedeće nizove i njihove limese:

$$\lim_{n\to+\infty} \frac{1}{n^k} = 0$$

za sve $k > 0$. Broj e se definira kao limes niza:

$$\lim_{n\to+\infty} \left(1+\frac{1}{n}\right)^n = e.$$

Primjer 228.

$$\lim \frac{1}{n^2} = 0.$$

Među divegentnim nizovima (osim aritmetičkih i divergentnih geometrijskih nizova) vrijedi zapamtiti sljedeće nizove i njihove limese:

$$\lim_{n\to+\infty} n^k = +\infty$$

i

$$\lim_{n\to+\infty} k^n = +\infty$$

za sve $k > 0$. Za negativne k je limes $\lim_{n\to+\infty} k^n$ neodređen.

Primjer 229.

$$\lim n^3 = +\infty.$$

Primjer 230. $\lim(-2)^n$ *nije određen: članovi niza su redom* $-2, 4, -8, 16, -32, \ldots,$ *tj. alterniraju po predznaku pa niti se grupiraju oko nekog broja (naprotiv, sve se više udaljavaju od nule) niti su počevši od nekog mjesta proizvoljno veliki (iza svakog velikog broja dođe jedan negativan) niti su počevši od nekog mjesta proizvoljno mali (iza svakog malog, negativnog broja dođe jedan pozitivan).*

Osnovna svojstva limesa nizova su analogna svojstvima limesa realnih funkcija:

Teorem 15. *Ako postoje* $\lim\limits_{n\to+\infty} a_n$ *i* $\lim\limits_{n\to+\infty} b_n$*, onda postoje i limesi* $\lim\limits_{n\to+\infty} (a_n + b_n)$, $\lim\limits_{n\to+\infty} (a_n - b_n)$ *i* $\lim\limits_{n\to+\infty} (a_n b_n)$ *te vrijedi:*

$$\lim_{n\to+\infty} (a_n + b_n) = \lim_{n\to+\infty} a_n + \lim_{n\to+\infty} b_n,$$

$$\lim_{n\to+\infty} (a_n - b_n) = \lim_{n\to+\infty} a_n - \lim_{n\to+\infty} b_n,$$

$$\lim_{n\to+\infty} (a_n \cdot b_n) = \lim_{n\to+\infty} a_n \cdot \lim_{n\to+\infty} b_n.$$

Nadalje, ako je $\lim\limits_{n\to+\infty} b_n \neq 0$*, onda postoji i* $\lim\limits_{n\to+\infty} \dfrac{a_n}{b_n}$ *i jednak je* $\dfrac{\lim_{n\to+\infty} a_n}{\lim_{n\to+\infty} b_n}$.

Primjer 231. *Imamo* $\lim \left(\frac{1}{n} + 3 \cdot \left(\frac{1}{3}\right)^n\right) = \lim \frac{1}{n} + 3 \lim \left(\frac{1}{3}\right)^n = 0 + 0 = 0.$

Korisno je znati i teorem (koji je poznat kao Heineova karakterizacija neprekidnosti):

Teorem 16. *Realna funkcija* f *je neprekidna u točki* c *ako i samo ako za svaki niz* $(a_n)_n$ *koji konvergira k* c*, niz* $(f(a_n))_n$ *konvergira k* $f(c)$.

Ukratko, za neprekidne funkcije f i sve konvergentne nizove $(a_n)_n$ vrijedi

$$\lim_{n\to+\infty} f(a_n) = f(\lim_{n\to+\infty} a_n).$$

Primjer 232. *Kako je sinus neprekidna funkcija, vrijedi*

$$\lim_{n\to+\infty} \sin\frac{1}{n^2} = \sin \lim_{n\to+\infty} \frac{1}{n^2} = \sin 0 = 0.$$

Posljedica gornjeg teorema su sljedeća svojstva limesa koja se često koriste kod računanja limesa nizova:

$$\lim_{n\to+\infty} (c + a_n) = c + \lim_{n\to+\infty} a_n,$$

$$\lim_{n\to+\infty} e^n = +\infty,$$

$$\lim_{n\to+\infty} e^{-n} = 0,$$

$$\lim_{n\to+\infty} \ln a_n = \ln \lim_{n\to+\infty} a_n$$

(za realne nizove (a_n) s pozitivnim članovima),

$$\lim_{n\to+\infty} \sqrt{a_n} = \sqrt{\lim_{n\to+\infty} a_n}$$

(za realne nizove (a_n) se nenegativnim članovima) itd. Sva navedena pravila vrijede za konvergentne realne nizove (a_n).

Za limese nizova koji su racionalne funkcije od n primjenjuju se isti postupci kao za računanje limesa racionalnih funkcija u beskonačnosti (dijeljenje s najvećom potencijom).

Primjer 233.

$$\lim_{n\to+\infty} \frac{n + 2n^2}{1 - 3n^3} = \lim_{n\to+\infty} \frac{\frac{1}{n^2} + 2\frac{1}{n}}{\frac{1}{n^3} - 3} = 0.$$

Slični postupak (dijeljenje s članom koji najbrže raste) može se primijeniti i na izračunavanje mnogih drugih limesa nizova. Ovdje podsjećamo: eksponencijalne funkcije s bazom većom od 1 rastu brže od svih polinoma, a kad međusobno uspoređujemo dvije rastuće eksponencijalne funkcije, brže raste eksponencijalna funkcija s većom bazom.

Primjer 234.

$$\lim_{n\to+\infty} \frac{2n - e^n}{5n^2 + e^n} = \frac{2\frac{n}{e^n} - 1}{5\frac{n^2}{e^n} + 1} = \frac{0 - 1}{0 + 1} = -1.$$

S teorijske strane dobro je znati i sljedeći teorem:

Teorem 17. *Ako je niz realnih brojeva ograničen i rastući ili ograničen i padajući, onda je konvergentan.*

☼ **Ponovimo bitno...** Nizovi realnih odnosno kompleksnih brojeva su realne odnosno kompleksne funkcije kojima je domena skup prirodnih brojeva (evtl. s nulom). Niz $(a_n)_n$ konvergira k broju L ako vrijedi: što je veći n, to je iznos a_n bliži L. Na konvergenciju niza ne utječe bilo koji konačan broj početnih članova. Geometrijski nizovi su nizovi za koje vrijedi da je kvocijent dva uzastopna člana konstantan; oni konvergiraju ako je taj kvocijent po apsolutnoj vrijednosti manji od 1 ili ako su konstantni. ☺

7.2 Redovi

Redovi su beskonačne sume oblika

$$a_0 + a_1 + a_2 + \ldots + a_n + \ldots,$$

tj. svaki niz određuje jedan red. Pritom, ako pokušamo izračunati ukupnu (beskonačnu) sumu jedini razumni način pristupa bio bi da zbrojimo što više članova počevši od prvog i provjerimo pokazuje li se dodavanjem još ponekog člana konvergencija takvih zbrojeva (parcijalnih suma). Formalna definicija je sljedeća:

Definicija 55 (Red). *Red je uređen par niza $(a_n)_n$ i pripadnog niza parcijalnih suma $(S_n)_n$ definiranog s*

$$S_1 = a_1,$$
$$S_n = S_{n-1} + a_n = a_1 + a_2 + \ldots + a_n.$$

Red je konvergentan ako je niz parcijalnih suma (S_n) konvergentan. U tom slučaju $\lim\limits_{n\to\infty} S_n$ zovemo sumom reda i označavamo s $\sum\limits_n a_n$:

$$\sum_n a_n = \lim_n S_n.$$

Dakle, ako imamo niz $a_1, a_2, a_3, \ldots, a_n, \ldots$, iz njega formiramo novi niz parcijalnih suma $a_1, a_1 + a_2, a_1 + a_2 + a_3, \ldots, a_1 + a_2 + \ldots + a_n, \ldots$ i ako taj novi niz konvergira, kažemo da red $\sum_n a_n$ konvergira.

Napomenimo da se u literaturi koja nije strogo matematička oznaka $\sum_n a_n$ rabi kao opća oznaka reda, tj. u smislu $\sum\limits_n a_n = ((a_n)_n, (S_n)_n)$, pa se govori o tome konvergira li $\sum_n a_n$ (u kojem slučaju se tom simbolu pridružuje vrijednost $\lim\limits_{n\to\infty} S_n$) ili ne (u kom slučaju iznos $\sum_n a_n$ nije definiran, s time da se u slučaju da je $\sum_n a_n = \pm\infty$ piše $\sum_n a_n = \pm\infty$). Jednostavnosti radi i mi ćemo u daljnjem koristiti takvo označavanje, dakle pisanjem oznake $\sum_n a_n$ ne impliciramo da se radi o konvergentnom redu.

Primjer 235. *Promotrimo red $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{2^n} = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{8} + \ldots$. Njegove parcijalne sume su oblika*

$$S_n = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{8} + \ldots + \frac{1}{2^n},$$

tj. radi se o sumama prvih n članova geometrijskog niza s početnim članom 1 i kvocijentom $\frac{1}{2}$. Prema odgovarajućoj formuli je

$$S_n = \frac{1 - \left(\frac{1}{2}\right)^{n+1}}{1 - \frac{1}{2}} = 2\left(1 - \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{2}\right)^n\right).$$

Kako je $\lim_n \frac{1}{2^n} = 0$, prema svojstvima limesa nizova slijedi

$$\lim_n S_n = 2 \cdot (1 - \frac{1}{2} \cdot 0) = 2.$$

Stoga je

$$\sum_n \frac{1}{2^n} = 2.$$

Geometrijski red je red dobiven zbrajanjem članova geometrijskog niza, tj. red oblika $\sum_n aq^n = a + aq + aq^2 + \dots$. Taj red konvergira (i suma mu je $\frac{a}{1-q}$) točno ako je $|q| < 1$.

Primjer 236. *Decimalni zapis realnih brojeva zapravo je njihov razvoj u geometrijski red, a svaki konačni decimalni zapis je odabir neke parcijalne sume tog reda. Primjerice, zapis $\frac{1}{3} = 0,3333\dots$ zapravo znači*

$$\frac{1}{3} = \frac{3}{10} + \frac{3}{100} + \frac{3}{1000} + \dots = \sum_{n=1}^{+\infty} 3 \cdot \frac{1}{10^n}.$$

Kad $\frac{1}{3}$ pišemo kao aproksimativno $0,33333$ zapravo smo uzeli petu parcijalnu sumu kao aproksimaciju ukupne sume reda. Pritom treba misliti na to da se radi samo o aproksimaciji poznatog broja $\frac{1}{3}$, koji je različit od broja $0{,}33333 = 0{,}33333000\ldots = \sum_{n=1}^{+\infty} a_n \frac{1}{10^n}$ gdje je $a_n = 3$ za $n \leq 5$ i $a_n = 0$ za $n > 5$.

U tom smislu korektno je (u kemiji i fizici uobičajeno) razlikovanje brojeva $0{,}35$ i $0{,}3500$ jer se u primjenama uvijek radi o aproksimacijama točnih brojeva (nikoje mjerenje ne može dati matematički egzaktnu brojčanu vrijednost) pa se u prvom slučaju radi o broju kod kojeg je iz određenih (praktičnih) razloga kao aproksimacija odabrana druga parcijalna suma, dok se kod drugog broja odabrala četvrta. Pritom u oba slučaja zapravo ne znamo ostatak reda, tj. ti brojevi možda jesu, a možda i nisu jednaki broju $\frac{7}{20} = 0{,}35000\ldots = \sum_{n=1}^{+\infty} a_n \frac{1}{10^n}$, $a_1 = 3$, $a_2 = 5$, $a_n = 0$ za $n > 2$.

Napomena 26. *Poznat je Zenonov[5] paradoks o Ahilu i kornjači. Zenon tvrdi da brzonogi Ahil ne može stići sporu kornjaču. Recimo da je Ahil dvostruko brži od kornjače. Ako je na početku kornjača na nekoj udaljenosti ispred Ahila (recimo 10 metara) i oboje počinju trčati u istom smjeru u istom trenu, onda kad je Ahil prešao početnu udaljenost od 10 metara, kornjača je 5 metara ispred njega. Dok Ahil pređe tih 5 metara, kornjača ih je prešla još $2{,}5$. Dok Ahil pređe tih $2{,}5$ metara, kornjača je opet ispred njega za $1,25$ metara i tako unedogled: kad god Ahil dođe na neku prethodnu kornjačinu poziciju, ona je još malo ispred njega. Ahilov put bismo danas opisali konvergentnim geometrijskim redom $10 + 5 + 2{,}5 + 1{,}25 + \ldots = 10 \sum \frac{1}{2^n} = 20$, a kornjačin je put $5 + 2{,}5 + 1{,}25 + \ldots = 10 \sum \frac{1}{2^n} = 10$. Kako je na početku Ahil bio 10 metara iza kornjače, slijedi da će oboje u beskonačnosti doći na isto mjesto, a za dovoljno velik n udaljenost među njima bit će dovoljno mala da bi si Ahil mogao skuhati juhu od kornjače ☺.*

Primjer 237. *Molekulska particijska funkcija se u statističkoj termodinamici (za molekule bez međudjelovanja) definira sa*

$$z = \sum_j g_j e^{-E_j/(k_B T)},$$

[5] Zenon iz Eleje, grčki filozof, 5. st. pr. Kr.

gdje je k_B Boltzmannova konstanta, T termodinamička temperatura, E_j je energija molekule u j-tom stanju, a g_j je degeneracijski broj j-tog stanja (sumira se po svim mogućim energijskim stanjima jedne molekule). Molekulska particijska funkcija direktno je povezana s mnogim termodinamičkim svojstvima jer je vjerojatnost da se molekula nađe u j-tom energijskom stanju opisana Boltzmannovom raspodjelom, tj. kao

$$p_j = \frac{g_j}{z} e^{-E_j/(k_B T)}.$$

Molekulska particijska funkcija je zapravo faktor normiranja N u uvjetu da zbroj svih vjerojatnosti $p_j = Ne^{-\beta E_j}$ bude jednak 1. Izračunavanjem očekivane vrijednosti energije jedne molekule pokazuje se da je $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

Za vibracije dvoatomnih molekula u približenju harmoničkog oscilatora (za promjene geometrije molekule koje ne odstupaju puno od ravnotežne geometrije) vrijedi

$$E_v = h\nu \left(v + \frac{1}{2} \right)$$

gdje je $v \in \mathbb{N}_0$ vibracijski kvantni broj, a ν je vibracijska frekvencija i h Planckova konstanta.

Za vibraciju dvoatomne molekule stoga imamo (ukoliko nema degeneriranih energijskih stanja)

$$z = \sum_v e^{\frac{-h\nu\left(v+\frac{1}{2}\right)}{kT}} = \sum_v e^{-\frac{h\nu v}{kT}} e^{\frac{h\nu}{2kT}} = e^{\frac{h\nu}{2kT}} \sum_v \left(e^{-\frac{h\nu}{kT}} \right)^v.$$

Kako su h, ν, k, T pozitivni, slijedi da je $q = e^{-\frac{h\nu}{kT}}$ pozitivan broj manji od 1. Stoga je

$$z = \frac{e^{\frac{h\nu}{2kT}}}{1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}}.$$

Uz geometrijski red, najpoznatiji konvergentni redovi su redovi

$$\sum_n \frac{1}{n^s}, \quad s > 1$$

(njihova suma označava se s $\zeta(s)$ i zove Riemannova ζ-funkcija[6].

Napomena 27. *Poznato je da vrijedi $\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}$, tj. $\sum_n \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}$. To je prvi otkrio veliki švicarski matematičar Leonhard Euler u 18. stoljeću.*

Primjer 238. *Redovi s konstantnim članovima ($\sum_{n=1}^{+\infty} c = c + c + c + \ldots$) divergiraju osim ako je $c = 0$ ($\sum_{n=1}^{+\infty} 0 = 0 + 0 + 0 + \ldots = 0$).*

Primjer 239. *Red $1-1+1-1+1-1+\ldots = \sum_{n=0}^{+\infty}(-1)^n$ divergira jer su mu parcijalne sume $S_n = 0$ za parne n i $S_n = 1$ za neparne n pa je niz (S_n) niz $1, 0, 1, 0, 1, 0, \ldots$ koji ne konvergira.*

[6] Zapravo se Riemannova ζ-funkcija definira kao proširenje funkcije definirane s $\zeta(s) = \sum_n \frac{1}{n^s}$ na sve kompleksne brojeve $s \neq 1$.

Među divergentnim redovima, najpoznatiji je harmonijski red

$$\sum_n \frac{1}{n}.$$

On divergira u $+\infty$, ali vrlo sporo. Dokaz da harmonijski red divergira ide direktno iz definicije konvergencije ili pomoću integralnog kriterija (vidi niže).

Primijetimo da intuitivno gledano, red „nema šanse” konvergirati ako mu članovi ne postaju sve bliži nuli. Precizna formulacija te tvrdnje je sljedeći teorem.

Teorem 18 (Nužan uvjet konvergencije reda)**.** *Ako red $\sum_n a_n$ konvergira, onda je $\lim_n a_n = 0$.*

Primijetimo da to što nekom redu $\sum_n a_n$ opći član teži u nulu ($\lim_n a_n = 0$) nije dovoljno za konvergenciju tog reda. Najjednostavniji primjer divergentnog reda kojem opći član teži u nulu je harmonijski red. Ovaj teorem je stoga korisniji za otkrivanje divergentnih redova. Naime, tvrdnji izrečenoj u teoremu ekvivalentna je tvrdnja: ako opći član reda ne teži u nulu, onda je red divergentan.

Primjer 240. *Red $\sum_n \left(1-\frac{1}{n}\right)$ divergira jer je $\lim_n \left(1-\frac{1}{n}\right) = 1 \neq 0$.*

Primjer 241. *Red $\sum_n \cos n$ divergira jer $\lim_n \cos n$ ne postoji, pa nije jednak nuli.*

Da bi se za konkretni red ispitalo konvergira li, postoje razni kriteriji konvergencije. Najvažniji među njima su

- Kriterij uspoređivanja: Ako je $0 \leq a_n \leq b_n$ za sve n (počevši od nekog mjesta) te ako znamo da $\sum_n b_n$ konvergira, onda konvergira i $\sum_n a_n$. Ako je $0 \leq a_n \leq b_n$ za sve n (počevši od nekog mjesta) te ako znamo da $\sum_n a_n$ divergira, onda divegira i $\sum_n b_n$.

- D'Alembertov kriterij: Ako $\lim_n \left|\frac{a_{n+1}}{a_n}\right| < 1$, onda red $\sum_n a_n$ (apsolutno)[7] konvergira, a ako je $\lim_n \left|\frac{a_{n+1}}{a_n}\right| > 1$, onda red divergira. U slučaju da je $\lim_n \left|\frac{a_{n+1}}{a_n}\right| = 1$ ovaj kriterij ne daje odluku.

- Cauchyjev kriterij Ako $\lim_n \sqrt[n]{|a_n|} < 1$, onda red $\sum_n a_n$ (apsolutno) konvergira, a ako je $\lim_n \sqrt[n]{|a_n|} > 1$, onda red divergira. U slučaju da je $\lim_n \sqrt[n]{|a_n|} = 1$ ovaj kriterij ne daje odluku.

- Leibnizov kriterij primjenjuje se za redove kojima članovi alterniraju po predznaku. Red $\sum_n (-1)^n a_n$ (gdje su svi $a_n \geq 0$) konvergira ako je niz (a_n) padajući i konvergira u nulu.

- Integralni kriterij: Ako su svi a_n pozitivni i ako je $f(x)$ definirana tako da u formuli za opći član a_n znak n zamijenimo s x, te ako je tako definirana f neprekidna za $x \geq 1$ i $\lim_{x\to+\infty} f(x) = 0$, onda red $\sum_{n=1}^{+\infty} a_n$ i integral $\int_1^{+\infty} f(x)\,\mathrm{d}x$ ili oba konvergiraju ili oba divergiraju.

[7] Red $\sum_n a_n$ s realnim ili kompleksnim članovima apsolutno konvergira ako konvergira red $\sum_n |a_n|$. Svaki apsolutno konvergentan red je konvergentan.

Primjer 242. *Znamo da konvergira red* $\sum_n \frac{1}{3^n}$ *(geometrijski red s kvocijentom* $1/3$*). Kako je* $3^n < 3^n + n$ *za sve* n*, slijedi da je* $\frac{1}{3^n+n} \leq \frac{1}{3^n}$ *za sve* n*, pa temeljem kriterija uspoređivanja zaključujemo da i red* $\sum_n \frac{1}{3^n+n}$ *konvergira.*

Primjer 243. *Red* $\sum_n \frac{1}{n!}$ *konvergira po d'Alembertovom kriteriju jer je*

$$\lim_n \frac{\frac{1}{(n+1)!}}{\frac{1}{n!}} = \lim_n \frac{1}{n+1} = 0 < 1.$$

Primjer 244. *Red* $\sum_n \left(\frac{5n-7n^2+n^3}{6n^3+6}\right)^n$ *konvergira po Cauchyjevom kriteriju jer je*

$$\lim_n \sqrt[n]{\left(\frac{5n-7n^2+n^3}{6n^3+6}\right)^n} = \lim_n \frac{5n-7n^2+n^3}{6n^3+6} = \lim_n \frac{\frac{5}{n^2} - \frac{7}{n} + 1}{6 + \frac{6}{n^3}} = \frac{1}{6} < 1.$$

Primjer 245. *Red* $\sum_n (-1)^{n+1}\frac{1}{n} = 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \ldots$ *konvergira po Leibnizovom kriteriju jer je* $a_n = \frac{1}{n} > 0$ *za sve* n*, niz* $\left(\frac{1}{n}\right)_n$ *je padajući i* $\lim_n \frac{1}{n} = 0$*.*

Primjer 246. *Integralnim kriterijem može se pokazati divergencija harmonijskog reda* $\sum_n \frac{1}{n}$*. Kako je* $a_n = \frac{1}{n}$*, znači da uzimamo* $f(x) = \frac{1}{x}$ *i* f *ima tražena svojstva (neprekidna za* $x \geq 1$ *i ima* x*-os kao horizontalnu asimptotu). Kako znamo da* $\int_1^{+\infty} \frac{\mathrm{d}x}{x}$ *divergira u* $+\infty$*, zaključujemo da je* $\sum_n \frac{1}{n} = +\infty$*.*

Općenito se integralnim kriterijem može pokazati da među redovima $\sum_n \frac{1}{n^s}$ *konvergiraju točno oni kod kojih je* $s > 1$*.*

☼ **Ponovimo bitno...** Red je ureen par nekog niza i pripadnog niza parcijalnih suma. Parcijalna suma niza je zbroj njegovih početnih članova do nekog mjesta. Elemente niza kojeg zbrajamo zovemo općim članovima reda. Red konvergira ako odgovarajući niz parcijalnih suma konvergira. Ako opći član reda ne konvergira u nulu, red ne može konvergirati. Geometrijski red konvergira točno ako je kvocijent geometrijskog niza kojeg zbrajamo po apsolutnoj vrijednosti manji od 1. Red oblika $\sum_n \frac{1}{n^s}$ konvergira točno ako je $s > 1$. ☺

7.3 Redovi funkcija

Promotrimo sljedećih nekoliko redova:

$$1 + x + x^2 + x^3 + x^4 + \ldots = \sum_{n=0}^{+\infty} x^n,$$

$$1 + (x-2) + \frac{(x-2)^2}{2!} + \frac{(x-2)^3}{3!} + \ldots = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(x-2)^n}{n!},$$

$$\sin(x) + \sin(2x) + \sin(3x) + \ldots = \sum_{n=1}^{+\infty} \sin(nx).$$

Svaki od njih ćemo za konkretan x moći interpretirati kao red koji možda konvergira, a možda ne — to ovisi o tome koji konkretan x uvrstimo. Redove kod kojih opći član osim o indeksu n ovisi i o nekoj varijabli x zovemo redovima funkcija. Općenito ih možemo označiti s

$$\sum_{n=0}^{+\infty} a_n(x).$$

U ovom poglavlju ćemo se ograničiti na realni slučaj, tj. razmatrat ćemo (ako nije drugačije rečeno) samo redove funkcija kod kojih su $x \in \mathbb{R}$ i a_n-ovi realne funkcije. Većina tvrdnji se lako poopćava na kompleksni slučaj.

Osnovno pitanje o redovima funkcija je: koje vrijednosti x možemo uvrstiti, a da dobijemo konvergentan red? Skup svih $x \in \mathbb{R}$ za koje konvergira red $\sum_n a_n(x)$ zove se područje konvergencije tog reda.

Primjer 247. *Područje konvergencije reda $\sum_n x^n$ je $\langle -1, 1\rangle$ jer je to geometrijski red s kvocijentom x.*

Primjer 248. *Područje konvergencije reda $\sum_n \frac{(x-2)^n}{n!}$ možemo dobiti primjerice iz d'Alembertovog kriterija. Po tom kriteriju taj red konvergira ako je*

$$\lim_n \left| \frac{\frac{(x-2)^{n+1}}{(n+1)!}}{\frac{(x-2)^n}{n!}} \right| = \lim_n \left| \frac{x-2}{n+1} \right| < 1.$$

Kako je limes računat po n, obzirom na limes x je konstanta, tj. radi se o limesu tipa $\lim_n \frac{\text{const.}}{n+1} = 0$. Vidimo dakle da red $\sum_n \frac{(x-2)^n}{n!}$ konvergira za sve x, tj. područje konvergencije mu je cijeli skup $\mathbb{R}$.

Za x iz područja konvergencije smisleno je označiti $f(x) = \sum_n a_n(x)$, tj. tom je formulom definirana realna funkcija s domenom jednakom području konvergencije reda na desnoj strani formule.

Primjer 249. *S*

$$f(x) = \sum_n x^n$$

je definirana funkcija

$$f : \langle -1, 1\rangle \to \mathbb{R}.$$

Vrijedi npr.

$$f(0{,}5) = \sum_n 0,5^n = 2,$$

$$f(0{,}25) = \sum_n 0,25^n = 1{,}333\ldots$$

Korisno je razmišljati i obrnuto: za zadanu funkciju f, može li se ona zapisati kao red funkcija? Za primjene je upravo taj redoslijed razmišljanja najbitniji, pri čemu se obično razmatra može li se f zapisati kao red potencija ili kao trigonometrijski red. Stoga ćemo se pobliže upoznati s te dvije vrste redova funkcija.

7.3.1 Redovi potencija

Definicija 56 (Red potencija)**.** *Za niz* (b_n) *i* $c \in \mathbb{R}$ *red funkcija oblika*

$$\sum_n b_n(x-c)^n$$

zove se redom potencija.

Primijetimo da su parcijalne sume reda potencija polinomi. Red potencija konvergira za sve $x \in \langle c-R, c+R\rangle$, gdje je broj R tzv. radijus konvergencije reda potencija, određen formulom[8]

$$R = \frac{1}{\lim_n \sqrt[n]{|b_n|}}.$$

Red potencija $\sum_n b_n(x-c)^n$ može i ne mora konvergirati za $x = c \pm R$; za ta dva slučaja konvergencija se provjerava uvrštavanjem $c+R$ odnosno $c-R$ u red potencija te ispitivanjem konvergencije dobivenih dvaju redova. Primijetimo da radijus konvergencije ne ovisi o c — isti radijus konvergencije imaju redovi $\sum_n b_n x^n$ i $\sum_n b_n(x-1)^n$.

Primjer 250. *Promotrimo red* $\sum_n \frac{(x-3)^n}{n}$*. Radi se o redu potencija s* $b_n = \frac{1}{n}$ *i* $c = 3$*. Stoga taj red ima radijus konvergencije* $R = \frac{1}{\lim_n \sqrt[n]{\frac{1}{n}}} = \lim_n \sqrt[n]{n} = 1$*, gdje smo u posljednjem koraku koristili činjenicu.* $\lim_n \sqrt[n]{n} = 1$*. Stoga red* $\sum_n \frac{(x-3)^n}{n}$ *konvergira za* $x \in \langle 3-1, 3+1\rangle = \langle 2, 4\rangle$*. Za* $x = 2$ *i* $x = 4$ *konvergenciju provjeravamo odvojeno. Za* $x = 2$ *dobivamo red* $\sum (-1)^n \frac{1}{n}$ *koji konvergira, a za* $x = 4$ *dobivamo harmonijski red* $\sum \frac{1}{n}$ *koji divergira. Dakle, područje konvergencije promatranog reda potencija je* $[2, 4\rangle$*.*

Kao što znamo, vrijedi

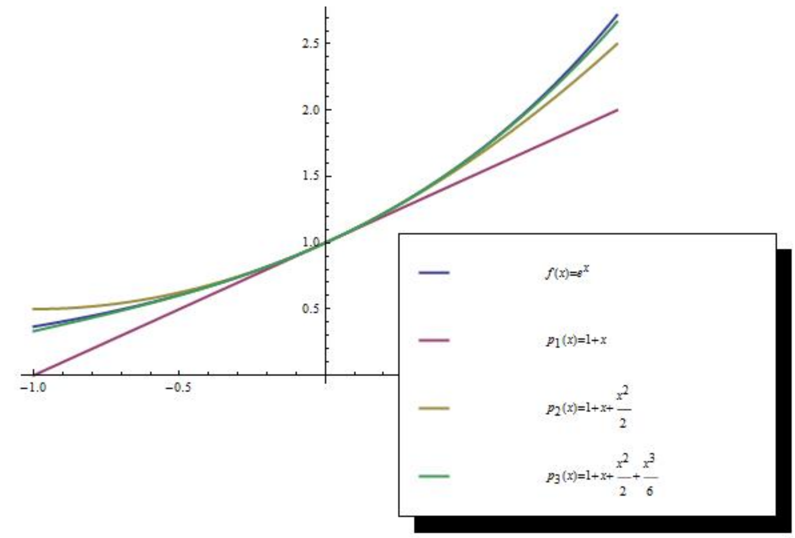
$$\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{+\infty} x^n, \quad x \in \langle -1, 1\rangle$$

(geometrijski red). Taj primjer je inspiracija za sljedeći problem: ako znamo formulu $f(x)$ neke funkcije, može li se naći red potencija koji kao područje konvergencije ima neki interval koji je podskup prirodne domene od $f(x)$ i za x iz tog područja konvergencije ima sumu jednaku $f(x)$? Nekome se to može činiti kao nepotrebno kompliciranje, no svrha pisanja $f(x)$ u obliku reda potencija je zapravo pojednostavljivanje — ako to možemo učiniti, to znači da se $f(x)$ može (za x iz nekog intervala) aproksimirati parcijalnom sumom tog reda potencija, tj. polinomom.

Cilj nam je dakle sljedeći: za danu formulu $f(x)$ za x blizu neke točke c naći polinom $p(x)$ nekog stupnja takav da je $f(x) \approx p(x)$ za x blizu c i da je pritom među svim polinomima odabranog stupnja $p(x)$ najbolja aproksimacija za $f(x)$ (graf od p se u blizini točke $(c, f(c))$ najbolje priljubljuje uz graf od f).

Primjer 251. *Recimo da* $f(x) = e^x$ *želimo za* x *blizu* 0 *što bolje aproksimirati polinomima prvog stupnja.*

[8] Ova definicija radijusa konvergencije nije potpuno točna, ali za većinu situacija je primjenjiva.



Slika 7.5: Aproksimacija $f(x) = e^x$ oko nule polinomima prvog, drugog i trećeg stupnja.

Po definiciji, tangenta na krivulju u nekoj točki je pravac koji se najbolje priljubljuje uz krivulju oko te točke. Dakle, najbolja aproksimacija od e^x oko 0 polinomom prvog stupnja je $p(x) = a_0 + a_1 x$ koji je tangenta na krivulju $y = e^x$ u točki $(0, 1)$. To znači da se polinom prvog stupnja koji najbolje aproksimira e^x oko nule s tom funkcijom podudara u vrijednosti ($f(0) = p(0)$, tj. $1 = e^0 = a_0$) i u vrijednosti prve derivacije ($f'(0) = p'(0)$, tj. $1 = e^0 = a_1$). Zaključujemo: među svim polinomima prvog stupnja polinom $p(x) = 1 + x$ najbolje aproksimira $f(x) = e^x$ za x blizu nule (vidi sliku 7.5).

Ono što je prethodnim primjerom opisano za slučaj aproksimacije polinomom prvog stupnja, vrijedi i za aproksimacije polinomima višeg stupnja: od svih polinoma stupnja n funkciju f oko točke c najbolje aproksimira onaj polinom $p(x)$ kojemu se vrijednosti svih derivacija od nulte do n-te u točki c podudaraju s vrijednostima odgovarajućih po redu derivacija funkcije f:

$$f(c) = p(c),\ f'(c) = p'(c),\ f''(c) = p''(c),\ \dots,\ f^{(n)}(c) = p^{(n)}(c).$$

Primjer 252. *Nastavimo primjer 251. Ako $f(x) = e^x$ oko $c = 0$ želimo aproksimirati polinomom trećeg stupnja $p(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3$, od svih takvih polinoma funkciju će oko nule najbolje aproksimirati onaj za koji vrijedi*

$$\begin{aligned} f(0) = p(0) : &\quad e^0 = a_0, \\ f'(0) = p'(0) : &\quad e^0 = a_1, \\ f''(0) = p''(0) : &\quad e^0 = 2a_2, \\ f'''(0) = p'''(0) : &\quad e^0 = 6a_3. \end{aligned}$$

Dakle, traženi polinom je

$$p(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3}$$

(vidi opet sliku 7.5).

Općenito za aproksimaciju oko $c = 0$ polinomom $p(x) = a_0 + a_1x + \ldots + a_nx^n$ dobivamo redom uvjete:

$$a_0 = f(0),$$

$$p'(x) = a_1 + 2a_2x + 3a_3x^2 + \ldots + na_nx^{n-1} \Rightarrow a_1 = f'(0),$$

$$p''(x) = 2a_2 + 2 \cdot 3a_3x \ldots + n(n-1)a_nx^{n-2} \Rightarrow 2a_2 = f''(0),$$

$$p'''(x) = 2 \cdot 3a_3 + \ldots + n(n-1)a_nx^{n-2} \Rightarrow 2 \cdot 3a_3 = f'''(0),$$

$$\vdots$$

$$p^{(n)}(x) = n!a_n \Rightarrow n!a_n = f^{(n)}(0).$$

odnosno za sve i od 0 do n mora vrijediti

$$a_i = \frac{f^{(i)}(0)}{i!}.$$

Dakle, od svih polinoma stupnja n oko nule funkciju $f(x)$ najbolje aproksimira polinom

$$T_n(x) = f(0) + f'(0)x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \frac{f'''(0)}{3!}x^3 + \ldots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n.$$

Slično se za aproksimaciju oko proizvoljne točke c dobije polinom

$$T_n(x) = f(c) + f'(c)(x-c) + \frac{f''(c)}{2!}(x-c)^2 + \frac{f'''(c)}{3!}(x-c)^3 + \ldots + \frac{f^{(n)}(c)}{n!}(x-c)^n.$$

Taj polinom zove se Taylorov polinom n-tog stupnja funkcije f oko točke c. Taylorov polinom stupnja n naravno ima smisla samo ako funkcija f u točki c posjeduje sve derivacije do n-te. Grešku aproksimacije Taylorovim polinomom stupnja n označit ćemo s R_n odnosno

$$R_n(x) = f(x) - T_n(x)$$

za x iz intervala na kojem razmatramo aproksimaciju Taylorovim polinomom.

Primjer 253. *Greška aproksimacije $f(x) = e^x$ oko nule Taylorovim polinomom $T_3(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3}$ iznosi $R_3(x) = e^x - 1 - x - \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{3}$. Ta greška za primjerice $x = 0{,}1$ iznosi $R_3(0,1) = 4{,}2514 \cdot 10^{-6}$.*

U pravilu povećanjem stupnja n Taylorovog polinoma dobivamo točniju aproksimaciju funkcije f oko c. Stoga se prirodno nameće ideja promatranja reda potencija

$$T(x) = f(c)+f'(c)(x-c)+\frac{f''(c)}{2!}(x-c)^2+\ldots+\frac{f^{(n)}(c)}{n!}(x-c)^n+\ldots = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(c)}{n!}(x-c)^n.$$

Taj red se zove Taylorov red funkcije f oko c. On se definira za funkcije zadane na nekom (otvorenom) intervalu koji sadrži c, a koje posjeduju sve derivacije u c. Ako je $c = 0$ govorimo o Maclaurinovom redu $\sum \frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n$.

Primjer 254. *Kako je za $f(x) = e^x$ i $f^{(n)}(x) = e^x$ i stoga $f^{(n)}(0) = 1$ za sve $n \in \mathbb{N}_0$, slijedi da je Maclaurinov red za e^x dan formulom*

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} x^n.$$

Taylorov red funkcije općenito ne mora biti jednak funkciji f nigdje osim u c, tj. nije uvijek moguće staviti jednakost između $f(x)$ i pripadnog Taylorovog reda $T(x)$. Kako je iz definicije vidljivo da su Taylorovi polinomi parcijalne sume Taylorovog reda, slijedi da je $f(x) = T(x)$ ako s porastom n greške $R_n(x)$ aproksimacije $f(x)$ s $T_n(x)$ postaju sve bliže nuli. Preciznije:

Teorem 19 (Taylor)**.** *Ako funkcija $f : I \to \mathbb{R}$ (I otvoren interval, $c \in I$) posjeduje sve derivacije u c i ako za sve $x \in I$ vrijedi*

$$\lim_{n\to+\infty} R_n(x) = 0,$$

onda se f može na intervalu I razviti u Taylorov red oko c, tj. za $x \in I$ vrijedi

$$f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{f^{(n)}(c)}{n!}(x-c)^n.$$

Primjer 255. *Odredimo Taylorov red oko $c = 2$ za polinom $f(x) = x^3 - 2x + 5$. Imamo: $f'(x) = 3x^2 - 2$, $f''(x) = 6x$, $f'''(x) = 6$ i dalje su sve derivacije od f nulfunkcije. Stoga je $f(2) = 9$, $f'(2) = 10$, $f''(2) = 12$, $f'''(2) = 6$, $f^{(n)}(2) = 0$ za $n > 3$ pa je Taylorov red od f oko 2 jednak $T(x) = 9 + 10(x-2) + \frac{12}{2!}(x-2)^2 + \frac{6}{3!}(x-2)^3 = 9 + 10(x-2) + 6(x-2)^2 + (x-2)^3$. Lako se vidi da je on za sve x jednak $f(x)$, tj. $T(x)$ je razvoj od $f(x)$ oko 2 i konvergira na $\mathbb{R}$.*

Kao i u prethodnom primjeru vrijedi i općenito: Taylorovi redovi polinoma su oni sami, raspisani po potencijama od $(x - c)$.

Od svih Taylorovih redova najčešće se koriste Maclaurinovi. Najvažniji Maclaurinovi redovi su sljedeći (područja konvergencije navedena su uz svaki):

$$\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{+\infty} x^n = 1 + x + x^2 + x^3 + \dots, \quad x \in \langle -1, 1\rangle;$$

$$\frac{1}{1+x} = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n x^n = 1 - x + x^2 - x^3 + \dots, \quad x \in \langle -1, 1\rangle;$$

$$e^x = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots, \quad x \in \mathbb{R};$$

$$\sin x = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{2n+1} = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots, \quad x \in \mathbb{R};$$

$$\cos x = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} x^{2n} = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots, \qquad x \in \mathbb{R};$$

$$\ln(1+x) = \sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^{n+1} \frac{x^n}{n} = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots, \qquad x \in \langle -1, 1].$$

Uz ove česti su i binomni redovi

$$(1+x)^\alpha = \sum_{n=0}^{+\infty} \binom{\alpha}{n} x^n$$

koji konvergira za $x \in \langle -1, 1\rangle$. Eksponent α može biti bilo koji realan broj, a $\binom{\alpha}{n}$ je definiran kao

$$\binom{\alpha}{n} = \frac{\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)\cdot\ldots\cdot(\alpha-n+1)}{n!}, \qquad \binom{\alpha}{0} = 1.$$

Primjerice,

$$\frac{1}{\sqrt{1+x}} = (1+x)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{+\infty} \binom{-\frac{1}{2}}{n} x^n = 1 - \frac{1}{2}x + \frac{3}{8}x^2 - \frac{15}{48}x^3 + \dots$$

Primjer 256. *Iz poznatih razvoja u red lako je dobiti nove. Primjerice,*

$$2^x = e^{x \ln 2} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(\ln 2)^n}{n!} x^n$$

(konvergira na $\mathbb{R}$).

Već smo rekli da je glavna primjena redova potencija u praksi aproksimiranje funkcija. Ako je danu funkciju moguće na nekom intervalu oko c razviti u Taylorov red, onda ju možemo aproksimirati Taylorovim polinomom:

$$f(x) \approx T_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(c)}{k!}(x-c)^k.$$

Pritom je greška aproksimacije $R_n(x) = f(x) - T_n(x)$ i obično je nepoznata, ali kako je poznato da vrijedi $R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(t)}{(n+1)!}(x-c)^{n+1}$ za neki t između[9] x i c, slijedi da greška po apsolutnoj vrijednosti iznosi najviše $\frac{M}{(n+1)!}|x-c|^{n+1}$ gdje je M neka gornja međa za apsolutnu vrijednost od $f^{(n+1)}(t)$ za t-ove između x i c (tj. $|f^{(n+1)}(t)| \leq M$ za sve t između x i c).

[9]Ne znamo gledamo li aproksimaciju u nekom x koji je lijevo od c, kada je $t \in \langle x, c\rangle$, ili desno od c, u kojem slučaju $t \in \langle c, x\rangle$, te je kraće jednostavno reći da je t između x i c.

Primjer 257. *Greška aproksimacije funkcije sinus Taylorovim polinomom stupnja 3 oko nule (tj. aproksimacije* $\sin x \approx x - \frac{x^3}{3!}$*) u nekom* x *iznosi* $\frac{\sin^{(4)}(t)}{4!}x^4 = \frac{\sin t}{4!}x^4$ *za neki* t *između* x *i* 0. *Primjerice, za* $x = 0{,}1$ *greška je* $\frac{\sin t}{4!} \cdot 0{,}1^4 = \frac{1}{24} \cdot 10^{-4} \sin t$. *Kako je* $|\sin t| \leq 1$ *za sve* $t \in \mathbb{R}$ *zaključujemo da je greška po apsolutnoj vrijednosti najviše* $\frac{1}{24} \cdot 10^{-4} \approx 4{,}16667 \cdot 10^{-6}$. *Dakle, ako umjesto* $\sin(0{,}1)$ *izračunamo* $0{,}1 - \frac{0{,}1^3}{3!}$*, greška će biti tek na šestoj decimali. Provjerimo to:* $\sin 0,1 = \mathbf{0{,}099833}41664682815$*, a* $0,1 - \frac{0{,}1^3}{3!} = \mathbf{0{,}099833}33333333334$.

Primjer 258. *U teoriji relativnosti pojavljuje se formula* $m = m(v) = \frac{m_0 c}{\sqrt{c^2 - v^2}}$ *(*m_0 *je masa mirovanja). Pretpostavimo li da je* v *puno manji od* c*, aproksimirajmo formulu s Taylorovim polinomom stupnja dva.*

Prvo napišemo:

$$m(v) = m_0 \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}$$

i stavimo $x = (v/c)^2$ *(sad je* $x \approx 0$ *zbog pretpostavke da je* v *puno manji od* c*) pa imamo*

$$m(x) = \frac{m_0}{\sqrt{1-x}}, \quad m(0) = m_0,$$
$$m'(x) = -\frac{m_0}{2}(1-x)^{-3/2}, \quad m'(0) = -\frac{m_0}{2},$$
$$m''(x) = \frac{3m_0}{4}(1-x)^{-5/2}, \quad m''(0) = \frac{3m_0}{4}$$

pa je

$$m(x) \approx m_0 - \frac{m_0}{2}x + \frac{3m_0}{8}x^2$$

odnosno

$$m \approx m_0 - \frac{m_0}{2} \cdot \left(\frac{v}{c}\right)^2 + \frac{3m_0}{8}\left(\frac{v}{c}\right)^4.$$

Greška za slučaj $v \leq 0{,}1c$ *(*$x \leq 0{,}01$*) je najviše (*$m'''(x) = \frac{15m_0}{8}(1-x)^{-7/2}$*)*

$$\left| \frac{15m_0}{3! \cdot 8} \cdot (1 - 0{,}01)^{-7/2} \cdot 0{,}01^3 \right| = 3{,}237 \cdot 10^{-7} m_0.$$

Primjer 259. *Planckov zakon za zračenje crnog tijela glasi*

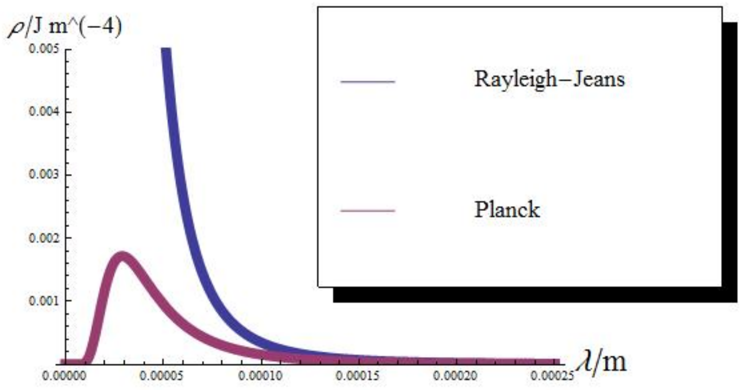
$$\rho(\lambda) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5 \left(e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1\right)}.$$

Tu je $\rho(\lambda)$ *spektralna gustoća energije zračenja valne duljine* λ*,* h *je Planckova konstanta,* k *Boltzmannova konstanta,* c *je brzina svjetlosti, a* T *temperatura (u Kelvinima).*

Prije Plancka Rayleigh i Jeans predložili su jednostavniju formulu

$$\rho(\lambda) = \frac{8\pi kT}{\lambda^4},$$

no kako bi iz te formule slijedilo da ρ *jako raste kako se valne duljine približavaju nuli, i to pri svim temperaturama, slijedilo bi da sva tijela emitiraju kratkovalnu i*



Slika 7.6: Usporedba Planckova i Rayleigh-Jeansova zakona ovisnosti spektralne gustoće energije zračenja o valnoj duljini.

ultraljubičasto zračenje (tu posljedicu Rayleigh-Jeansova zakona nazivamo ultraljubičastom katastrofom). S druge strane, za velike valne duljine Rayleigh-Jeansov zakon pokazuje dobro slaganje s eksperimentalnim rezultatima.

Pokazat ćemo da se s porastom valne duljine Planckov zakon svodi na Rayleigh-Jeansov. Naime, ako je valna duljina λ jako velika, onda je $x = \frac{hc}{\lambda kT}$ blizu nule. Stoga je aproksimacija $e^{\frac{hc}{\lambda kT}}$ s prva dva člana Maclaurinova razvoja $1 + \frac{hc}{\lambda kT}$ dobra (to bolja, tj. ima to manju grešku, što je x bliži nuli, tj. što je λ veća). Slijedi da je za velike valne duljine nazivnik u Planckovom zakonu $\lambda^5 \left(e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1\right) \approx \lambda^5 \frac{hc}{\lambda kT}$ te Planckov zakon za velike λ poprima oblik

$$\rho(\lambda) \approx \frac{8\pi hc}{\lambda^5 \frac{hc}{\lambda kT}} = \frac{8\pi kT}{\lambda^4}$$

što je točno Rayleigh-Jeansova formula. Činjenica da je za velike valne duljine razlika između Rayleigh-Jeansovog i Planckovog zanima može se prikazati i grafički, vidi sliku 7.6.

Primjer 260. *Recimo da $\sin x$ želimo u okolini nule aproksimirati s $T_3(x) = x - \frac{x^3}{3!}$ tako da greška bude najviše reda $0{,}001$. Postavlja se pitanje na kojem intervalu oko nule to možemo postići, tj. za koji $d > 0$ vrijedi da ako je $|x| \leq d$, onda je $|\sin x - T_2(x)| \leq 0{,}001$. Računamo:*

$$|R_3(x)| = \left|\frac{\sin t}{4!} x^4\right| \leq \frac{|x|^4}{24} \leq \frac{d^3}{24} \leq 0{,}001.$$

Slijedi

$$d \leq 0{,}28845,$$

tj. ako umjesto $\sin x$ za $x \in \langle -0{,}28845,\ 0{,}28845 \rangle$ izračunamo $x - \frac{x^3}{3!}$, greška aproksimacije je reda 10^{-4}.

Primjer 261. *Virijalna jednadžba stanja za realni plin ima oblik*

$$pV_m = RT\left(1 + \frac{B}{V_m} + \frac{C}{V_m^2} + \dots\right),$$

tj.

$$p = p(V_m) = \frac{RT}{V_m} + \frac{RTB}{V_m^2} + \frac{RTC}{V_m^3} + \dots$$

ili

$$p(x) = RTx + RTBx^2 + RTCx^3 + \dots$$

Koeficijenti B i C, no uglavnom ne i daljnji koeficijenti, mogu se odrediti za konkretne plinove pri određenim temperaturama, npr. B je za CO_2 pri $273K$ jednak $-149,7$ cm^3 mol^{-1}.

☼ **Ponovimo bitno...** Redovi funkcija su redovi čiji opći članovi ovise o nekoj varijabli. Skup svih vrijednosti varijable za koje promatrani red funkcija konvergira zove se red funkcija. Red potencija je vrsta reda funkcija, čiji opći član je oblika $b_n(x-c)^n$; govorimo o redu potencija oko c. Parcijalne sume redova potencija su polinomi. Red potencija konvergira ako je $|x| < R$, gdje je R radijus konvergencije reda (recipročna vrijednost limesa $\lim_n \sqrt[n]{|b_n|}$). Želimo li funkciju f oko neke točke c aproksimirati polinomom stupnja n kojem se prvih n derivacija u c podudara s vrijednostima prvih n derivacija od f u c (i vrijednost polinoma i funkcije f se u c podudaraju), iz tih uvjeta dobit ćemo da su koeficijenti tog polinoma redom $b_k = \frac{f^{(k)}(c)}{k!}$, $k = 0, 1, \dots, n$. Odgovarajući polinom zove se Taylorov polinom (stupnja n funkcije f oko točke c). Taylorovi polinomi su parcijalne sume Taylorovog reda funkcije oko c, koji se definira za funkcije koje posjeduju sve derivacije u c; ako je $c = 0$ govorimo o Maclaurinovom redu. Ukoliko greška aproksimacije funkcije f Taylorovim polinomom stupnja n teži u nulu kad n teži u beskonačnost, onda se f i pripadni Taylorov red podudaraju na nekom intervalu oko c. Najvažniji Maclaurinovi redovi su $\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{+\infty} x^n$ (za $x \in \langle -1, 1\rangle$), $e^x = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{x^n}{n!}$ (za $x \in \mathbb{R}$), $\sin x = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{2n+1}$ (za $x \in \mathbb{R}$) i $\cos x = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} x^{2n}$ (za $x \in \mathbb{R}$).☺

7.4 Zadaci za vježbu

1. Izračunajte a_3, ako je opći član niza dan sa

   (a) $a_n = (-1)^n$.

   (b) $a_n = \sin \frac{\pi}{n}$.

   (c) $a_n = \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n$.

   Rješenje.
   (a) -1. (b) $\frac{\sqrt{3}}{2}$. (c) $\frac{64}{27}$.

2. Pokažite da je niz s općim članom $a_n = -2 + 5n$ aritmetički. Izračunajte $S_4 = \sum_{i=0}^{3} a_i$.
   Rješenje. $a_{n+1} - a_n = 5$, $S_4 = 22$.

3. Izvedite formulu za zbroj prvih n članova aritmetičkog niza danog sa $a_n = a_0 + dn$, $n \in \mathbb{N}_0$ $(a_0, d$ zadani).

   Rješenje. $S_n = \sum_{i=0}^{n-1} a_i = na_0 + \frac{n(n-1)}{2}d$.

4. Pokažite da je niz s općim članom $a_n = 2 \cdot \left(\frac{1}{5}\right)^n$ geometrijski. Izračunajte $S_4 = \sum_{i=0}^{3} a_i$.

   Rješenje. $\frac{a_{n+1}}{a_n} = \frac{1}{5}$, $S_4 = \frac{312}{125}$.

5. Izvedite formulu za zbroj prvih n članova geometrijskog niza danog sa $a_n = a_0 q^n$, $n \in \mathbb{N}_0$ $(a_0, q$ zadani).

   Rješenje. $S_n = \sum_{i=0}^{n-1} a_i = a_0 \frac{1-q^n}{1-q}$.

6. Ispitajte jesu li sljedeći nizovi ograničeni i monotoni (rastući ili padajući):

   (a) $a_n = \frac{2}{n^2}$.

   (b) $a_n = 3n - 1$.

   (c) $a_n = \cos(n\pi)$.

   Rješenje.

   (a) ograničen, padajući. (b) neograničen, rastući. (c) ograničen, nije monoton.

7. Koristeći definiciju limesa niza, pokažite da je

$$\lim_{n\to+\infty} \frac{1}{n^k} = 0 \ \ (k > 0 \text{ zadan}) .$$

8. Izračunajte

   (a) $\lim_{n\to+\infty} \frac{5n+2}{3n-1}$.

   (b) $\lim_{n\to+\infty} \frac{2n^2+3n-7}{4n^2-n+5}$.

   (c) $\lim_{n\to+\infty} \frac{n^2-8}{3n^3-2n+1}$.

   (d) $\lim_{n\to+\infty} \frac{(3n-1)(4n+3)(n-7)}{n^3}$.

   (e) $\lim_{n\to+\infty} \frac{(n-1)!-(n+1)!}{(n+1)!}$.

   (f) $\lim_{n\to+\infty} \left(\cos(n!) \frac{n}{n^2+1} + \frac{2n^2}{(3n+1)(1-3n)} \right)$.

   (g) $\lim_{n\to+\infty} \frac{2n^2-n-4}{\sqrt{n^4+1}}$.

   (h) $\lim_{n\to+\infty} \frac{\sqrt[3]{n^2+1}+\sqrt{n}}{\sqrt[6]{3n^4+1}+\sqrt[3]{n}+1}$.

   (i) $\lim_{n\to+\infty} \frac{\sqrt[4]{n^5+1}+\sqrt[5]{n^2+1}}{\sqrt[5]{n^4+3}+\sqrt{n^3+1}}$.

   (j) $\lim_{n\to\infty} \left(\frac{1}{n^2} + \frac{2}{n^2} + \ldots + \frac{n-1}{n^2} \right)$.

Rješenje.
(a) $\frac{5}{3}$. (b) $\frac{1}{2}$. (c) 0. (d) 12. (e) -1. (f) $-\frac{2}{9}$. (g) 2. (h) $\frac{1}{\sqrt[6]{3}}$.
(i) 0. (j) $\frac{1}{2}$.

9. Racionalizacijom odredite

   (a) $\lim_{n\to+\infty}(\sqrt{n+1}-\sqrt{n-1})$.
   (b) $\lim_{n\to+\infty}(\sqrt{n^2-5n+6}-n)$.
   (c) $\lim_{n\to+\infty} n(\sqrt{n^2+1}-n)$.
   (d) $\lim_{n\to+\infty}(\sqrt{n(n+7)}-n)$.

   Rješenje.
   (a) 0. (b) $-\frac{5}{2}$. (c) $\frac{1}{2}$. (d) $\frac{7}{2}$.

10. Uzimajući u obzir da je
$$\lim_{n\to+\infty} q^n = 0, \quad |q|<1$$
izračunajte

   (a) $\lim_{n\to+\infty}\frac{4^n+3^n}{5^n+2^n}$.
   (b) $\lim_{n\to+\infty}\frac{4\cdot 3^n+2^{3n}}{3\cdot 8^n+5^n}$.
   (c) $\lim_{n\to\infty}\left(1-\frac{1}{3}+\frac{1}{9}-\frac{1}{27}+\ldots+\frac{(-1)^{n-1}}{3^{n-1}}\right)$.
   (d) $\lim_{n\to\infty}\left(\sqrt{2}\cdot\sqrt[4]{2}\cdot\sqrt[8]{2}\cdots\sqrt[2^n]{2}\right)$.

   Rješenje.
   (a) 0. (b) $\frac{1}{3}$. (c) $\frac{3}{4}$. (d) 2.

11. Uzimajući u obzir da je
$$\lim_{x\to+\infty}\left(1+\frac{1}{n}\right)^n = e$$
izračunajte

   (a) $\lim_{n\to+\infty}\left(1+\frac{2}{n}\right)^n$.
   (b) $\lim_{n\to+\infty}\left(\frac{n+1}{n-2}\right)^{3n}$.
   (c) $\lim_{n\to+\infty}\left(\frac{n^2+1}{2n^2+1}\right)^{n^2}$.
   (d) $\lim_{n\to+\infty}\left(\frac{3n-4}{3n+2}\right)^{\frac{n+1}{3}}$.

   Rješenje.
   (a) e^2. (b) e^9. (c) 0. (d) $e^{-2/3}$.

12. Zadan je niz svojim općim članom

$$a_n = \frac{(1-\alpha)n^2 + 2n + \beta}{\alpha n^2 + n + 1}\ , \quad n \in \mathbb{N}\ .$$

(a) Postoji li $\alpha \in \mathbb{R}$ takav da je $\lim_{n\to+\infty} a_n = 2$? Ako postoji, odredite $\beta \in \mathbb{R}$ tako da je $a_1 = 0$.

(b) Za tako dobiveni niz, nađite $n_0 \in \mathbb{N}$ tako da za $n \geq n_0$ vrijedi $|a_n - 2| < 1$.

Rješenje.
(a) $\alpha = \frac{1}{3}$, $\beta = -\frac{8}{3}$. (b) $n_0 = 3$.

13. Koristeći teorem 17, dokažite da je niz s općim članom

$$a_n = 1 + \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{3}} + \ \ldots + \frac{1}{\sqrt{n}} - 2\sqrt{n}\ , \quad n \in \mathbb{N}$$

konvergentan.

Rješenje. $(a_n)_n$ je niz realnih brojeva koji je odozdo ograničen i padajući.

14. Koristeći definiciju konvergencije reda, dokažite da red $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{n(n+1)}$ konvergira i izračunajte mu sumu.

Rješenje. $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{n(n+1)} = 1$.

15. Pokažite da za geometrijski red vrijedi

$$\sum_{n=0}^{+\infty} aq^n = \frac{a}{1-q}\ , \quad |q| < 1\ .$$

16. Izračunajte

$$\sum_{n=1}^{+\infty} \left(2 \cdot \left(\frac{1}{5}\right)^{n-1} + \frac{3}{n(n+1)} \right)\ .$$

Rješenje. $\frac{11}{2}$.

17. Konvergiraju li redovi

(a) $\sum_{n=1}^{+\infty} 2$

(b) $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{2n-1}{4n+3}$

(c) $\sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{\sqrt[n+1]{10}}$?

Rješenje. Ne, jer $\lim_{n\to+\infty} a_n \neq 0$.

18. Koristeći kriterij uspoređivanja, ispitajte konvergenciju redova

(a) $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{n \cdot 2^n}$.

(b) $\sum_{n=2}^{+\infty} \frac{\ln n}{n}$.

(c) $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{n^2}$.

(d) $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{n}}$.

Rješenje.

(a) konvergira. (b) divergira. (c) konvergira. (d) divergira.

19. Koristeći d'Alambertov kriterij, ispitajte konvergenciju redova

(a) $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{n!}{5^n}$.

(b) $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{2n-1}{(\sqrt{2})^n}$.

(c) $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{e^n}{n}$.

(d) $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{n!}{n^n}$.

Rješenje.

(a) divergira. (b) konvergira. (c) divergira. (d) konvergira.

20. Koristeći Cauchyjev kriterij, ispitajte konvergenciju redova

(a) $\sum_{n=1}^{+\infty} \left(\frac{n}{2n+1}\right)^n$.

(b) $\sum_{n=1}^{+\infty} \left(\frac{5n^2-n}{n+3}\right)^n$.

(c) $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{\left(\frac{n+1}{n}\right)^{n^2}}{3^n}$.

(d) $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{5}{2^n}\left(\frac{3n+2}{n-2}\right)^n$.

Rješenje.

(a) konvergira. (b) divergira. (c) konvergira. (d) divergira.

21. Koristeći Leibnizov odnosno integralni kriterij, ispitajte konvergenciju redova

(a) $\sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^n \frac{1}{\sqrt{n}}$.

(b) $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{n}}$.

(c) $\sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^n \frac{3n+1}{2n^2+n}$.

(d) $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{n}{e^n}$.

Rješenje.

(a) konvergira. (b) divergira. (c) konvergira. (d) konvergira.

22. Koristeći razne kriterije, ispitajte konvergenciju redova

(a) $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{2n}{3n+2}$.

(b) $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(n!)^2}{2^{n^2}}$.

(c) $\sum_{n=1}^{+\infty} 3^{n+1} \left(\frac{n+1}{2n+1} \right)^{2n-1}$.

(d) $\sum_{n=2}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt[n]{\ln n}}$.

(e) $\sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^n \frac{1}{\sqrt[3]{n^4}}$.

(f) $\sum_{n=2}^{+\infty} \left(\sqrt{n^2 - 2n} - n \right)$.

(g) $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{n^5}{2^n + 3^n}$.

(h) $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{n^4+1}}$.

Rješenje.
(a) divergira. (b) konvergira. (c) konvergira. (d) divergira.
(e) konvergira (f) divergira. (g) konvergira. (h) konvergira.

23. Odredite prirodnu domenu funkcija zadanih preko redova

(a) $f(x) = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{3^n}{x^n}$.

(b) $f(x) = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{n(x+2)^n}$.

(c) $f(x) = \sum_{n=1}^{+\infty} \left(\frac{x}{x+1} \right)^n$.

(d) $f(x) = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{2n+1} \left(\frac{x-1}{x+1} \right)^{2n+1}$.

Rješenje.
(a) $D = < -\infty, -3 > \cup < 3, +\infty >$. (b) $D = < -\infty, -3\,] \cup < -1, +\infty >$.
(c) $D = < -\frac{1}{2}, +\infty >$. (d) $D = [\, 0, +\infty >$.

24. Koristeći formulu za radijus konvergencije

$$R = \lim_{n \to +\infty} \left| \frac{b_n}{b_{n+1}} \right| ,$$

odredite područje konvergencije redova potencija

(a) $\sum_{n=0}^{+\infty} (n+1) x^n$.

(b) $\sum_{n=0}^{+\infty} \frac{x^n}{n!}$.

(c) $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n} (x-2)^n$.

(d) $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{2^n}{n^2+1} (x+2)^n$.

Rješenje.
(a) $< -1, 1 >$. (b) $\mathbb{R}$. (c) $< 1, 3\,]$. (d) $< -\frac{5}{2}, -\frac{3}{2} >$.

25. Razvijte funkciju f u Taylorov red oko točke c, ako je

(a) $f(x) = e^x$, $c = 2$

(b) $f(x) = \ln x$, $c = 1$

(c) $f(x) = \frac{1}{x^2}$, $c = -1$

te odredite područja na kojima se redovi podudaraju s navedenim funkcijama.

Rješenje.

(a) $f(x) = e^2 \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(x-2)^n}{n!}$, $x \in \mathbb{R}$.

(b) $f(x) = \sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^{n-1} \frac{(x-1)^n}{n}$, $x \in <0, 2>$.

(c) $f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} (n+1)(x+1)^n$, $x \in <-2, 0>$.

26. Odredite Maclaurinove redove za funkcije

(a) $f(x) = \frac{1}{4+x}$

(b) $f(x) = \frac{1}{8-x^3}$

(c) $f(x) = e^{-x^2}$

(d) $f(x) = \frac{12-5x}{6-5x-x^2}$

(e) $f(x) = \sqrt{1-x}$

(f) $f(x) = \ln(1 + 3x + 2x^2)$

(g) $f(x) = \sin(3x) \cos x$

te područja na kojima se ti redovi podudaraju s navedenim funkcijama.

Rješenje.

(a) $f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{x^n}{4^{n+1}}$, $x \in <-4, 4>$.

(b) $f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{x^{3n}}{8^{n+1}}$, $x \in <-8, 8>$. (c) $f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{x^{2n}}{n!}$, $x \in \mathbb{R}$.

(d) $f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} \left(1 - \frac{(-1)^n}{6^n}\right) x^n$, $x \in <-1, 1>$.

(e) $f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \binom{\frac{1}{2}}{n} x^n$, $x \in <-1, 1>$.

(f) $f(x) = \sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^{n+1} \frac{2^n+1}{n} x^n$, $x \in <-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$.

(g) $f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{4^n(2^{2n+1}+1)}{(2n+1)!} x^{2n+1}$, $x \in \mathbb{R}$.

27. Aproksimacijom odgovarajuće funkcije Taylorovim polinomom stupnja n, približno izračunajte vrijednosti zadanih izraza te ocijenite grešku aproksimacije:

(a) $e^{\frac{1}{2}}$, $n = 4$.

(b) $\sqrt{0.8}$, $n = 5$.

Rješenje.

(a) $e^{\frac{1}{2}} \approx 1.6484$, $|R_4(0.5)| < 0.0004$.

(b) $\sqrt{0.8} \approx 0.8945$, $|R_5(0.2)| < 0.0001$.

Poglavlje 8

Osnove Fourierove analize

8.1 Fourierovi redovi

8.1.1 Trigonometrijski redovi

U ovom poglavlju zanimat će nas periodične funkcije, tj. funkcije $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ sa svojstvom da postoji broj $T > 0$ (period) takav da je $f(x+T) = f(x)$ za sve $x \in \mathbb{R}$. Takve funkcije je dovoljno zadati na segmentu širine T. Kako će nas zanimati svojstva parnosti i neparnosti takvih funkcija, zgodno je odabrati takav segment koji je simetričan obzirom na nulu, tj. segment oblika oblika $[-L, L]$ gdje je $L = \frac{T}{2}$. Stoga ćemo govoriti o funkcijama s periodom $2L$ umjesto s periodom T i takve funkcije ćemo poistovjećivati s realnim funkcijama kojima je domena $[-L, L]$. Najjednostavnije funkcije koje imaju period $2L$ su funkcije oblika

$$f_m(x) = \cos\left(\frac{m\pi x}{L}\right)$$

i

$$g_n(x) = \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

(za $m, n \in \mathbb{N}_0$).

Primjer 262. *Funkcija definirana s $f_2(x) = \cos\dfrac{2\pi x}{e}$ ima period $2e$.*

Primjer 263. *Ako je $L = \pi$, tj. promatramo funkcije perioda 2π, onda je*

$$f_m(x) = \cos(mx), \quad g_n(x) = \sin(nx).$$

Uočimo da im (za $m, n > 1$) 2π nije temeljni (najmanji) period.

Realne funkcije s istom domenom čine vektorski prostor. Nadalje, za realne funkcije jedne varijable koje su neprekidne ili imaju konačno mnogo prekida na nekom segmentu njihov skalarni produkt možemo definirati kao određeni integral njihova produkta po tom segmentu. Dakle, na prostoru svih realnih funkcija s domenom $[-L, L]$ i najviše konačno mnogo prekida njihov skalarni produkt definiramo formulom

$$\langle f, g\rangle = \int_{-L}^{L} f(x)g(x)\,\mathrm{d}x.$$

Zbog gore opisanog poistovjećivanja funkcija s periodom $2L$ s funkcijama kojima je $[-L, L]$ domena, slijedi da gornja formula može poslužiti kao formula skalarnog produkta za funkcije s periodom $2L$.

Svaka funkcija tipa f_m ortogonalna je na svaku funkciju tipa g_n, tj. skalarni produkt im je jednak nuli:

$$\langle f_m, g_n \rangle = \int_{-L}^{L} \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \mathrm{d}x = 0$$

jer je $f_m(x)g_n(x)$ neparna funkcija na $[-L, L]$.

Primjer 264. *Funkcije $f_1(x) = \sin x$ i $g_2(x) = \cos 2x$ su ortogonalne na $[-\pi, \pi]$. Naime,*

$$f_1(-x)g_2(-x) = -\sin x \cos 2x = -f_1(x)g_2(x)$$

pa je $f_1 g_2$ neparna funkcija te je

$$\langle f_1, g_2 \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} \sin x \cos 2x \, \mathrm{d}x = 0.$$

Ako su m i n različiti vrijedi i

$$\langle f_m, f_n \rangle = \langle g_m, g_n \rangle = 0.$$

Nadalje, ako $m = n \neq 0$ vrijedi[1]

$$\langle f_n, f_n \rangle = \langle f_n, f_n \rangle = L.$$

Za slučaj $m = n = 0$ imamo

$$\langle f_0, f_0 \rangle = 2L,$$
$$\langle g_0, g_0 \rangle = 0.$$

Primjer 265. *U gornjem primjeru bi bilo $\langle f_1, f_1 \rangle = \langle g_2, g_2 \rangle = \pi$, a za $f_2(x) = \sin 2x$ dobili bismo $\langle f_1, f_2 \rangle = 0$.*

Slično kako se redovi potencija koriste za aproksimacije neperiodičkih funkcija, za periodičke funkcije se koriste trigonometrijski redovi. Trigonometrijski redovi su redovi funkcija oblika $\sum_{n=0}^{+\infty} (A_n f_n(x) + B_n g_n(x))$. Vidimo da je nulti član konstantna funkcija A_0 (jer je g_0 nulfunkcija). Ostali članovi reda su periodične funkcije s periodom $2L$. Stoga je uobičajenija notacija općeg oblika trigonometrijskog reda

$$\frac{A_0}{2} + \sum_{n=1}^{+\infty} (A_n f_n(x) + B_n g_n(x)).$$

Takvi redovi koriste se primjerice u analizi širenja topline, proučavanju toka struje u elektrotehnici, analizi zvučnih i drugih valova i vibracija, elektroničkom generiranju

[1] Kratko pisano: za slučaj kad m i n nisu oba nula, $\langle f_m, f_n \rangle = \langle g_m, g_n \rangle = L\delta_{mn}$, gdje je δ_{mn} je tzv. Kroneckerov simbol: on ima vrijednost 1 ako $m = n$, a 0 inače.

glazbe, za rješavanje diferencijalnih jednadžbi itd. Glavna primjena u kemiji vezana je za spektroskopiju, a Fourierova transformacija koja je temelj difrakcijske analize uzoraka se najlakše uvodi preko Fourierovih redova (koji su specijalni slučaj trigonometrijskih, kako ćemo uskoro vidjeti).

Podsjetimo se: skup svih x za koje neki red funkcija $\sum_n a_n(x)$ konvergira, zove se područje konvergencije tog reda. Ako je S područje konvergencije reda funkcija, onda je s $f(x) = \sum_n a_n(x)$ definirana funkcija $f : S \to \mathbb{R}$ (ako su a_n realne funkcije) odnosno $f : S \to \mathbb{C}$ (ako su a_n kompleksne funkcije). U slučaju da je red $\sum_n a_n(x)$ trigonometrijski i ako mu područje konvergencije sadrži segment širine temeljnog perioda (tj. područje konvergencije sadrži segment $[-L, L]$) onda je sa

$$f(x) = \frac{A_0}{2} + \sum_{n=1}^{+\infty} (A_n f_n(x) + B_n g_n(x)) = \frac{A_0}{2} + \sum_{n=1}^{+\infty} \left(A_n \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) + B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\right)$$

definirana funkcija na $[-L, L]$, koju možemo smatrati restrikcijom neke periodične funkcije perioda $2L$ na segment $[-L, L]$ (u smislu opisanom na početku ovog poglavlja da funkcije zadane na segmentu možemo poistovjećivati s periodičnim funkcijama kojima je period širine tog segmenta).

8.1.2 Razvoj funkcije u Fourierov red

Problem kojim se bavimo je aproksimacija neke periodične funkcije trigonometrijskim redom. Kako su periodične funkcije potpuno zadane svojim vrijednostima na segmentu širine perioda, možemo se ograničiti na pitanje aproksimacije bilo kakve funkcije zadane na segmentu trigonometrijskim redom. Pitamo se dakle: možemo li naći koeficijente u redu

$$\frac{A_0}{2} + \sum_{n=1}^{+\infty} (A_n f_n(x) + B_n g_n(x))$$

takve da taj red konvergira na $[-L, L]$ i da je na tom segmentu jednak funkciji f s domenom $[-L, L]$ koju želimo aproksimirati? Pojednostavljeno rečeno, trigonometrijski redovi koji mogu poslužiti za aproksimacije periodičkih funkcija zovu se Fourierovi redovi, slično kao što su Taylorovi redovi oni redovi potencija koji mogu poslužiti za aproksimacije funkcija koje posjeduju sve derivacije u nekoj točki. U slučajevima kad neku periodičku funkciju možemo zapisati trigonometrijskim redom govorimo o njenom razvoju u Fourierov red. Jedan način kako možemo zamišljati taj razvoj je ovaj: ako promatramo stojne valove, članovi reda opisuju konstruktivnu i destruktivnu interferenciju valova. Periodična funkcija se tako prikazuje kao zbroj sinusa i kosinusa sa sve manjim valnim duljinama (sve većim temeljnim periodima) i različitim amplitudama koje se podešavaju do korektnog prikaza funkcije. Zbroj takvih članova predstavlja interferenciju.

Rekli smo da želimo moći pisati $f(x) = \frac{A_0}{2} + \sum_{n=1}^{+\infty} (A_n f_n(x) + B_n g_n(x))$. Pretpostavimo da je to moguće. Tada je za bilo koji $m \in \mathbb{N}_0$

$$f(x) f_m(x) = \frac{A_0}{2} f_m(x) + \sum_{n=1}^{+\infty} (A_n f_n(x) f_m(x) + B_n g_n(x) f_m(x)).$$

Integriranjem[2] od $-L$ do L dobivamo da vrijedi

$$\langle f, f_m\rangle = \int_{-L}^{L} \frac{A_0}{2} f_m(x)\,\mathrm{d}x + \sum_{n=1}^{+\infty} \left(A_n\langle f_m, f_n\rangle + B_n\langle f_m, g_n\rangle\right).$$

Kako je f_m ortogonalna na sve f_n i g_n (osim na samu sebe) i kako je $\int_{-L}^{L} \cos\frac{m\pi x}{L}\,\mathrm{d}x = 0$ (osim ako $m = 0$, kad je taj integral jednak $\int_{-L}^{L}\mathrm{d}x = 2L$), za $m \neq 0$ preostaje

$$\langle f, f_m\rangle = A_m\langle f_m, f_m\rangle = A_m L.$$

Za slučaj $m = 0$ imamo

$$\langle f, f_0\rangle = \int_{-L}^{L} \frac{A_0}{2} f_0(x)\,\mathrm{d}x + \sum_{n=1}^{+\infty} \left(A_n\langle f_0, f_n\rangle + B_n\langle f_0, g_n\rangle\right) = \frac{A_0}{2}\cdot 2L = A_0 L.$$

Vidimo dakle da za sve $n \in \mathbb{N}_0$ vrijedi

$$A_n = \frac{1}{L}\langle f, f_n\rangle.$$

Slično se vidi da je

$$B_n = \frac{1}{L}\langle f, g_n\rangle, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Brojevi A_n i B_n određeni gornjim formulama zovu se Fourierovi koeficijenti funkcije f. Kao što je Taylorov red funkcije onaj red potencija u kojemu su koeficijenti određenog oblika ($a_n = \frac{f^{(n)}(c)}{n!}$), tako je i Fourierov red funkcije onaj trigonometrijski red kojem su koeficijenti posebnog oblika, tj. kojemu su koeficijenti Fourierovi koeficijenti. Fourierov red funkcije $f : [-L, L] \to \mathbb{R}$ konvergira na $[-L, L]$ ako f ima najviše konačno mnogo točaka prekida (koje su skokovi) i ako najviše konačno mnogo puta mijenja smjer rast-pad (tj. ima konačno mnogo lokalnih ekstrema). U tom slučaju za sve $x \in [-L, L]$ (osim eventualno u točkama prekida i u $\pm L$) vrijedi

$$f(x) = \frac{A_0}{2} + \sum_{n=1}^{+\infty} \left(A_n f_n(x) + B_n g_n(x)\right).$$

Definicija 57 (Fourierov red funkcije)**.** *Neka je zadana (realna ili kompleksna) funkcija f na segmentu $[-L, L]$. Trigonometrijski red $\frac{A_0}{2} + \sum_{n=1}^{+\infty}(A_n f_n(x) + B_n g_n(x))$ za koji vrijedi*

$$A_n = \frac{1}{L}\langle f, f_n\rangle, \quad n \in \mathbb{N}_0,$$

$$B_n = \frac{1}{L}\langle f, g_n\rangle, \quad n \in \mathbb{N}$$

[2]Ovdje smatramo dokazanim da se red funkcija koji konvergira kao gore može integrirati kao da je polinom, iako se radi o beskonačnoj sumi.

zovemo Fourierovim redom funkcije f. Ako mu područje konvergencije sadrži segment $[-L, L]$ i ako je za x iz tog segmenta

$$f(x) = \frac{A_0}{2} + \sum_{n=1}^{+\infty} (A_n f_n(x) + B_n g_n(x))$$

kažemo da smo f razvili u Fourierov red.

Napomena 28. *Izvod formula za Fourierove koeficijente nije potpuno precizan, ali daje točan rezultat. Napomenimo i da funkcije f_n i g_n možemo shvatiti kao bazu prostora funkcija koje imaju period $2L$ i koje se mogu dvaput neprekidno derivirati te je u tom kontekstu Fourierov red funkcije jednostavno njen zapis kao linearne kombinacije vektora baze.*

Korisno je primijetiti: ako je f parna funkcija, onda su svi B_n jednaki 0, tj. u Fourierovom razvoju pojavljuju se samo kosinusi, a ako je f neparna funkcija, onda su svi A_n jednaki 0, tj. u Fourierovom razvoju pojavljuju se samo sinusi.

Primjer 266. *Odredimo Fourierov red za funkciju definiranu s*

$$f(x) = \begin{cases} -1, & -1 < x < 0 \\ 1, & 0 \leq x < 1 \end{cases}$$

koja je po periodičnosti proširena na $\mathbb{R}$ (dakle, period joj je 2 tj. $L = 1$).

Funkcija je očigledno neparna pa je $A_n = 0$, $n \in \mathbb{N}_0$. Koeficijenti B_n $(n \in \mathbb{N})$ iznose

$$B_n = \frac{1}{1}\int_{-1}^{1} f(x) \sin n\pi x \,\mathrm{d}x = -\int_{-1}^{0} \sin n\pi x \,\mathrm{d}x + \int_{0}^{1} \sin n\pi x \,\mathrm{d}x =$$

$$= \frac{1}{n\pi} \cos n\pi x \Big|_{-1}^{0} - \frac{1}{n\pi} \cos n\pi x \Big|_{0}^{1} = \frac{1}{n\pi}(2 - 2\cos(n\pi)) = \frac{2}{n\pi}(1 - (-1)^n).$$

Stoga je

$$f(x) = \frac{4}{\pi}\left(\sin\frac{\pi x}{L} + \frac{1}{3}\sin\frac{3\pi x}{L} + \frac{1}{5}\sin\frac{5\pi x}{L} + \dots\right)$$

za sve $x \neq kL$, $k \in \mathbb{Z}$.

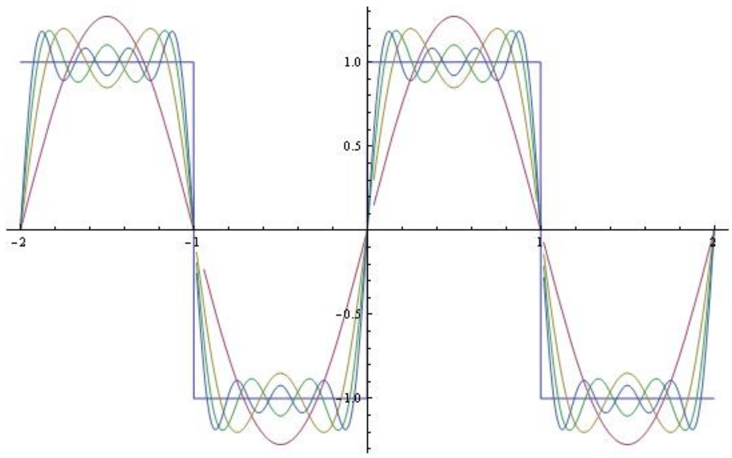
Uzimanjem parcijalnih suma toga reda dobivaju se aproksimacije funkcije f, to bolje što više članova u parcijalnoj sumi uzmemo. Ta je činjenica vizualno ilustrirana slikom 8.1.

Primjer 267. *Ako je f na $[-L, L]$ zadana s $f(x) = \frac{2}{L}x + 1$ za $x < 0$ i $f(x) = -\frac{2}{L}x + 1$ za $x \geq 0$, imamo parnu funkciju. Stoga su svi $B_n = 0$. Račun za A_n daje: za parne n je $A_n = 0$, a za neparne n je $A_n = \frac{8}{\pi^2 n^2}$ za $k \in \mathbb{N}_0$ tj. pripadni Fourierov red glasi*

$$A_1 f_1(x) + A_3 f_3(x) + A_5 f_5(x) + A_7 f_7(x) + \dots =$$

$$= \frac{8}{\pi^2}\left(\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) + \frac{1}{9}\cos\left(\frac{3\pi x}{L}\right) + \frac{1}{25}\cos\left(\frac{5\pi x}{L}\right) + \frac{1}{49}\cos\left(\frac{7\pi x}{L}\right) + \dots\right).$$

Primjer 268. *Ako je f na $[-L, L]$ zadana s $f(x) = \dfrac{1}{L}x$, imamo neparnu funkciju. Stoga su svi $A_n = 0$. Račun za B_n daje: $B_n = (-1)^{n+1}\dfrac{2}{n\pi}$ za $n \in \mathbb{N}$.*



Slika 8.1: Aproksimacija funkcije iz primjera 266 s prvih nekoliko članova pripadnog Fourierovog razvoja.

8.1.3 Kompleksni oblik Fourierovog reda

Često je praktično Fourierove redove koristiti u kompleksnom obliku

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{in\pi x/L}$$

(uočite da se sumira i po negativnim indeksima n). Funkcije $e^{in\pi x/L}$ ćemo kratko označiti s $\phi_n(x)$. Primijetimo prvo da je $\phi_n^*(x) = \overline{\phi_n(x)} = \phi_n(-x)$. Veza kompleksnih Fourierovih koeficijenata c_n s realnim Fourierovim koeficijentima A_n i B_n dana je s

$$c_0 = \frac{A_0}{2}, \quad c_n = \frac{A_n - iB_n}{2}, \quad c_{-n} = \frac{A_n + iB_n}{2}$$

($n \in \mathbb{N}$). Ako je f realna i parna funkcija, svi koeficijenti c_n su realni brojevi (jer su za parne realne funkcije svi $B_n = 0$), a ako je f realna i neparna, svi c_n su čisto imaginarni brojevi (jer su tad svi $A_n = 0$).

Primjer 269. *Za Fourierov red iz primjera 266 imamo*

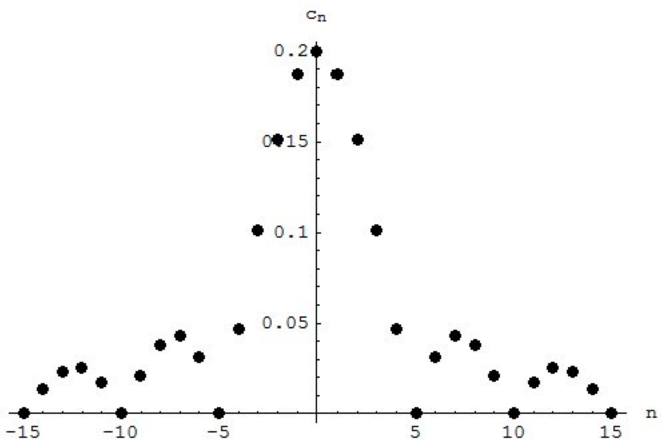
$$c_0 = 0,$$

$$c_n = -i\frac{B_n}{2} = -i\frac{1}{n\pi}\left(1 - (-1)^n\right),$$

$$c_{-n} = i\frac{B_n}{2} = i\frac{1}{n\pi}\left(1 - (-1)^n\right)$$

pa je kompleksni oblik Fourierovog reda za funkciju iz tog primjera

$$\ldots + i\frac{2}{5\pi}e^{-5i\pi x/L} + i\frac{2}{3\pi}e^{-3i\pi x/L} + i\frac{2}{\pi}e^{-i\pi x/L} - i\frac{2}{\pi}e^{i\pi x/L} - i\frac{2}{3\pi}e^{i3\pi x/L} - i\frac{2}{5\pi}e^{i5\pi x/L} - \ldots$$



Slika 8.2: Spektar amplituda za niz impulsa konstantne jačine koji se javljaju u jednakim razmacima.

Ako je f realna funkcija, za sve n vrijedi

$$\overline{c_n} = c_{-n},$$

$$c_n = |c_n| e^{i\varphi_n},$$

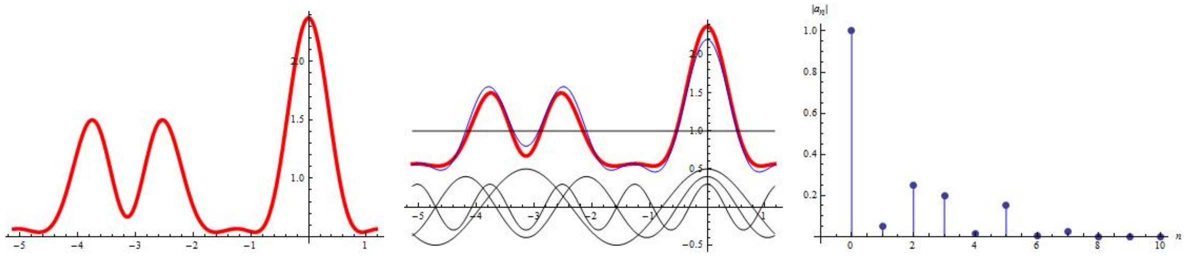
uz amplitudu $|c_n| = \frac{\sqrt{A_n^2+B_n^2}}{2}$ i fazni kut $\varphi_n = \mathrm{arctg}\frac{B_n}{A_n}$. Spektar amplituda periodične funkcije f definira se kao graf ovisnosti $|c_n|$ o kutnoj frekvenciji $\omega_n = \frac{n\pi}{L}$; fazni spektar je graf ovisnosti faznih kuteva φ_n o ω_n. Kako su $n \in \mathbb{Z}$, slijedi da se radi diskretnim funkcijama te se ta dva grafa zovu i diskretni frekvencijski spektri ili linijski spektri. U grafičkom prikazu spektra amplituda i faznog spektra često se na apscisu nanosi n umjesto ω_n. Primijetimo i da je fizikalna dimenzija od ω_n recipročna fizikalnoj dimenziji od L, koja je pak jednaka fizikalnoj dimenziji varijable x funkcije f koju razvijamo u Fourierov red.

Napomena 29. *Formalno gledajući, kompleksni Fourierovi koeficijenti čine kompleksan niz $(c_n)_{n=-\infty}^{+\infty}$, tj. $c : \mathbb{Z} \to \mathbb{C}$ (a c_n je isto što i $c(n)$). Ukoliko definiramo $c(\omega_n) = c_n$ doduše formalno imamo drugu funkciju (domena joj je skup svih cjelobrojnih višekratnika od π/L), no efektivno ništa bitno nismo promijenili.*

Napomena 30. *Kompleksni Fourierovi koeficijenti se mogu dobiti direktno kompleksnim integralom $c_n = \dfrac{1}{2L}\displaystyle\int_{-L}^{L} f(t)e^{-in\pi t/L}\,\mathrm{d}t$.*

Primjer 270. *Uzmimo periodičnu funkciju koja prikazuje niz impulsa jačine $A = 1$ koji traju $d = 1/20$ s, a razmak između početka dva impulsa iznosi $2L = 1/4$ s. Tu funkciju možemo opisati s $f(t) = 1$ za $t/\mathrm{s} \in [-1/40, 1/40]$, $f(t/\mathrm{s}) = 0$ za $ts \in [1/40, 9/40]$, uz proširenje po periodičnosti. Za $n \neq 0$ dobiva se*

$$c_n = \frac{1}{n\pi} \sin\frac{n\pi}{5},$$



(a) (b) (c)

Slika 8.3: Aproksimacija funkcije (a) trima sinusoidalnim krivuljama i konstantnom funkcijom (b) i pripadni spektar amplituda (c).

$$\omega_n = 8n\pi.$$

Za $n = 0$ je $c_0 = \frac{1}{5}$. Kako su svi c_n realni, slijedi da su svi fazni kutevi nula (tj. fazni spektar je nezanimljiv). Spektar amplituda dobijemo kao prikaz ovisnosti $|c_n| = \frac{1}{n\pi}\left|\sin\frac{n\pi}{5}\right|$ o $8n\pi$ ili jednostavnije o n, kako je prikazano slikom 8.2.

Smisao spektra amplituda ilustriran je slikama 8.3: spektar amplituda ukazuje koje od funkcija ϕ_n u sumi najviše doprinose formiranju aproksimacije funkcije f putem Fourierova reda. Tako se iz spektra amplituda na slici 8.3 (c) vidi da u aproksimaciji funkcije s grafom prikazanim na slici 8.3 (a) najviše doprinose nulti, drugi, treći i peti član Fourierovog reda, tj. funkcije čiji grafovi su prikazani crno na slici 8.3 (b). Na toj je slici plavo prikazan zbroj spomenuta četiri člana Fourierovog reda.

☼ **Ponovimo bitno...** Fourierov red koristi se kao aproksimacija periodične funkcije trigonometrijskim redom. Trigonometrijski red perioda $2L$ je red funkcija čiji opći član je oblika $A_n f_n(x) + B_n g_n(x)$, gdje je $f_n(x) = \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ i $g_n(x) = \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$. U Fourierovom redu funkcije f koeficijenti su $A_n = \frac{1}{L}\langle f, f_n\rangle$ i $B_n = \frac{1}{L}\langle f, g_n\rangle$. Ako je f parna, u njenom Fourierovom redu pojavljuju se samo kosinusi, a ako je neparna, samo sinusi. U kompleksnom obliku Fourierov red je oblika $\sum c_n e^{in\pi x/L}$, pri čemu se sumira od $-\infty$ do $+\infty$. Za realne funkcije f vrijedi $c_0 = A_0/2$, $c_n = (A_n - iB_n)/2$ i $c_{-n} = \overline{c_n}$ za sve $n \in \mathbb{N}$. Ovisnosti apsolutnih vrijednosti i argumenata kompleksnih koeficijenata c_n o n (odnosno o kutnoj frekvenciji $n\pi/L$) definiraju funkcije koje se zovu spektar amplituda i fazni spektar funkcije f. ☺

8.2 Fourierova transformacija

Neperiodična funkcija može se zamisliti kao periodična funkcija s periodom $2L$, gdje $L \to +\infty$ (tj. razmak spektralnih linija teži u nulu čime ćemo dobiti kontinuirani spektar). U tom kontekstu, Fourierov transformat može se shvatiti kao granični slučaj niza kompleksnih Fourierovih koeficijenata. Tako ćemo i pristupiti, no napominjemo da se radi samo o ideji izvoda formule, a ne i o matematički preciznom dokazu.

Zamislimo funkciju $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ kao funkciju s jako velikim periodom $2L$, $L \to +\infty$. Niz $c : \mathbb{Z} \to \mathbb{C}$ kompleksnih Fourierovih koeficijenata može se, kao u definiciji spektra amplituda i faznog spektra, shvatiti kao funkcija kutnih frekvencija ω_n. Razmak dvije susjedne varijable ω_n jednak je

$$\Delta\omega = \omega_{n+1} - \omega_n = \frac{\pi}{L} = \omega_1.$$

Uz takve oznake dobivamo da kad $L \to +\infty$, onda $\Delta\omega \to 0+$, tj. razmak varijabli funkcije c postaje sve manji (sve bliži nuli). Možemo to zamisliti i ovako: $\Delta\omega$ prelazi u infinitezimalni $\mathrm{d}\omega$ odnosno varijabla iz diskretne ω_n prelazi u kontinuiranu ω. Ako se f može razviti u Fourierov red, onda prema prethodnome imamo:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{i\omega_n x}.$$

Sumacija po n uz prijelaz na kontinuiranu varijablu postat će nepravi integral od $-\infty$ do $+\infty$ po $\mathrm{d}\omega$, a definicija kompleksnih Fourierovih koeficijenata preko integrala (vidi napomenu 30) koja sadrži integral od $-L$ do L po t također će postati nepravi integral od $-\infty$ do $+\infty$ po $\mathrm{d}t$. Sve skupa dati će sljedeću formulu:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-i\omega t}\,\mathrm{d}t\right)e^{i\omega x}\,\mathrm{d}\omega.$$

Napomena 31. *Ideja izvoda je sljedeća:*

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{i\omega_n x} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2L}\int_{-L}^{L} f(t)e^{i\omega_n(x-t)}\,\mathrm{d}t = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi}\int_{-L}^{L} f(t)e^{i\omega_n(x-t)}\,\mathrm{d}t\Delta\omega,$$

gdje smo za dobivanje prve jednakosti koristili definiciju kompleksnih koeficijenata preko kompleksnog integrala (kako je dano u napomeni 30), a za dobivanje druge jednakosti korišteno je da je $L\Delta\omega = \pi$ (po definiciji $\Delta\omega$). Pretpostavimo sad da n brže teži u $\pm\infty$ nego što $\Delta\omega$ teži u nulu (tj. $\omega_n = n\Delta\omega \to \pm\infty$). Time ω_n prelazi u kontinuiranu varijablu ω kad $n \to \pm\infty$, a sumacija $\sum_{n=-\infty}^{+\infty}$ prelazi u integral $\int_{-\infty}^{+\infty}$ (po $\mathrm{d}\omega = \lim_{n\to\pm\infty}\Delta\omega$). Sažeto: kad $n \to \pm\infty$ imamo da $\Delta\omega \to 0+$, $\omega_n \to \pm\infty$, $L \to +\infty$ i dobivamo $f(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-i\omega t}\,\mathrm{d}t\right)e^{i\omega x}\,\mathrm{d}\omega$.

Definicija 58 (Fourierov transformat)**.** *Ako funkcija $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ ima svojstvo da nepravi integral $\int_{-\infty}^{+\infty} |f(t)|\,\mathrm{d}t$ konvergira, kažemo da je apsolutno integrabilna i pišemo $f \in L^1(\mathbb{R})$. Neka je $f \in L^1(\mathbb{R})$. Tada je s*

$$\mathcal{F}(f)(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-i\omega t}\,\mathrm{d}t$$

dobro definirana funkcija $\mathcal{F}(f) : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ koja se zove Fourierov transformat funkcije f.

Iz prethodnog je vidljivo: kao što je niz Fourierovih koeficijenata $(c_n)_{n=-\infty}^{+\infty}$ funkcija s domenom $\mathbb{Z}$ pridružena periodičnoj funkciji f, tako je $\mathcal{F}(f)$ funkcija s domenom $\mathbb{R}$ pridružena apsolutno integrabilnoj funkciji f. Dakle, Fourierov transformat predstavlja poopćenje niza (kompleksnih) Fourierovih koeficijenata $c : \mathbb{Z} \to \mathbb{C}$ na funkciju s domenom $\mathbb{R}$. Kako je $|e^{-i\omega t}| = 1$ za sve t i ω, intuitivno se vidi (a može se i dokazati) da zahtjev apsolutne integrabilnosti na f povlači konvergenciju integrala kojim je $\mathcal{F}(f)$ definirana.

U primjenama na akustiku i telekomunikacije, varijabla osnovne funkcije f je obično vrijeme t, a varijabla njenog Fourierovog transformata je tada frekvencija ν. U kvantnoj fizici i kemiji često se kao varijabla od f uzima pozicija x, a kao varijabla od $\mathcal{F}(f)$ moment podijeljen Planckovom konstantom, tj. $\frac{p}{\hbar}$. Općenito će fizikalna dimenzija varijable ω Fourierovog transformata neke funkcije f biti recipročna jedinici varijable t od f. To je jednostavno vidljivo iz činjeniceda u definiciji Fourierovog transformata pod integralom u eksponentu od e imamo produkt t i ω.

Fourierov transformat $\mathcal{F}(f)$ realne funkcije f općenito će biti kompleksna funkcija, tj. oblika $\mathcal{F}(f)(\omega) = a(\omega) + ib(\omega)$, gdje su a i b realne funkcije s domenom $\mathbb{R}$. Po definiciji $\mathcal{F}(f)$ imamo

$$a(\omega) + ib(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)(\cos \omega t - i \sin \omega t)\,\mathrm{d}t$$

pa slijedi

$$a(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \cos \omega t\,\mathrm{d}t,$$

$$b(\omega) = -\int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \sin \omega t\,\mathrm{d}t.$$

Iz gornjih formula vidljive su sljedeće korisne činjenice: Ako je f realna, a je parna, a b je neparna realna funkcija. Ako je f parna i realna slijedi da je $\mathcal{F}(f)$ realna, a ako je f neparna i realna, $\mathcal{F}(f)$ je čisto imaginarna. Sljedeći teorem daje kriterij kako po Fourierovom transformatu raspoznati radi li se o realnoj funkciji:

Teorem 20. *Funkcija f je realna ako i samo ako njen Fourierov transformat $\mathcal{F}(f)$ ima svojstvo*

$$\mathcal{F}(f)(-\omega) = \overline{\mathcal{F}(f)(\omega)}$$

za sve $\omega \in \mathbb{R}$.

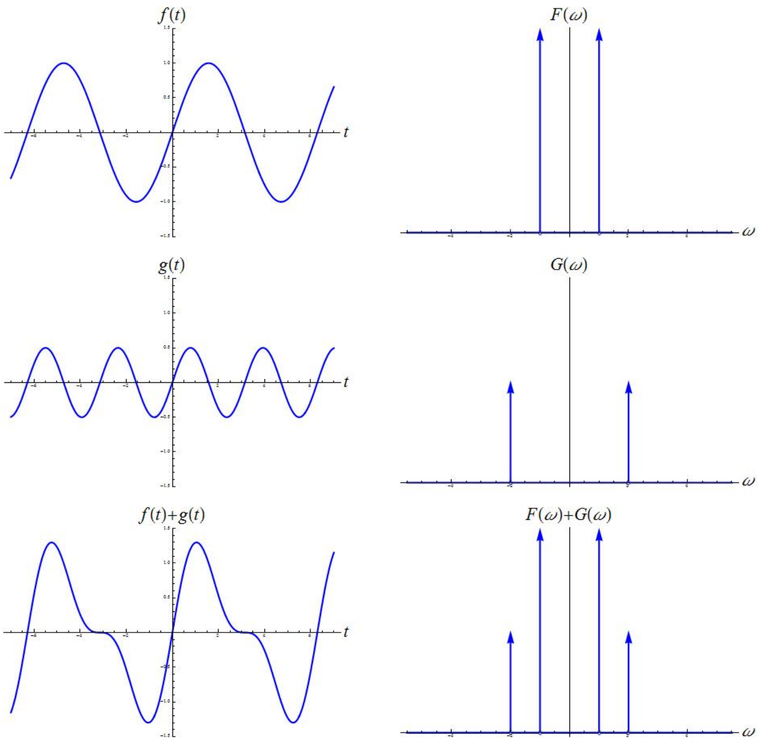
Kao i Fourierov red, tako i Fourierov transformat određuje dva spektra: spektar amplituda $M(\omega) = |\mathcal{F}(f)(\omega)|$ i fazni spektar $\varphi(\omega) = \mathrm{arctg} \frac{b(\omega)}{a(\omega)}$.

Fourierova transformacija $\mathcal{F}$ apsolutno integrabilnoj funkciji f pridružuje njen Fourierov transformat $\mathcal{F}(f)$. Domena od $\mathcal{F}$ je vektorski prostor $L^1(\mathbb{R})$, a kodomena je vektorski prostor koji se označava s $A(\hat{\mathbb{R}})$ (prostor svih funkcija s $\mathbb{R}$ u $\mathbb{C}$ koje se mogu dobiti kao Fourierovi transformati). Fourierova transformacija je linearan operator, tj. vrijedi:

$$\mathcal{F}(f + g)(\omega) = \mathcal{F}(f)(\omega) + \mathcal{F}(g)(\omega),$$

$$\mathcal{F}(\alpha f)(\omega) = \alpha \mathcal{F}(f)(\omega),$$

za sve $f, g \in L^1(\mathbb{R})$ i skalare α.



Slika 8.4: Linearnost Fourierove transformacije.

Slikom 8.4 ilustrirana je aditivnost Fourierove transformacije za slučaj $f(t) = \sin t$ i $g(t) = \frac{1}{2}\sin(2t)$.

Često pitanje je: ako znamo funkciju F i znamo da je ona Fourierova transformacija nepoznate funkcije f, kako odrediti f? Odgovor na to daje sljedeći teorem.

Teorem 21 (Inverzna Fourierova transformacija)**.** *Neka je $F \in L^1(\mathbb{R}) \cap A(\hat{\mathbb{R}})$. Pretpostavimo da je $F = \mathcal{F}(f)$ za neku $f \in L^1(\mathbb{R})$. Tada za sve $t \in \mathbb{R}$ vrijedi*

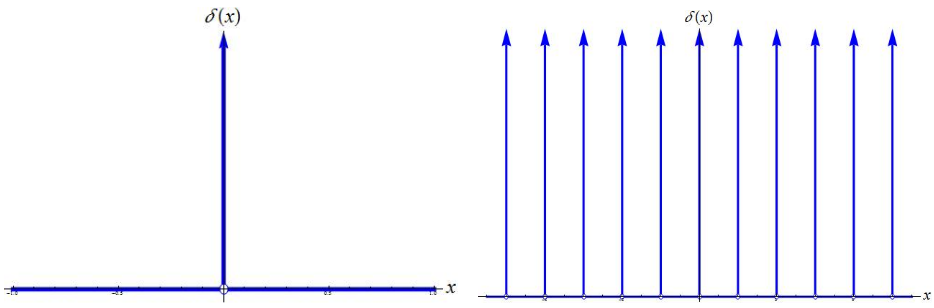
$$f(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega)e^{i\omega t}\,\mathrm{d}\omega.$$

Vezano za Fourierovu transformaciju često se pojavljuje Diracova δ-funkcija. Iako se može integrirati po intervalima skupa $\mathbb{R}$, Diracova δ-funkcija nije uobičajena realna funkcija. Možemo ju zamisliti kao trenutni impuls odnosno kao funkciju koja je jednaka nula svuda osim u jednoj točki (trenutku 0), u kojoj iznosi $+\infty$; pritom se definicijom zahtijeva da je $\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(t)\,\mathrm{d}t = 1$. Može se pokazati da je Fourierov transformat Diracove δ-funkcije konstantna funkcija iznosa 1:

$$\mathcal{F}(\delta)(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t}\delta(t)\,\mathrm{d}t = 1.$$

Inverzna Fourierva transformacija daje integralnu formulu δ-funkcije:

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t}\,\mathrm{d}\omega.$$



(a) (b)

Slika 8.5: Diracova δ-funkcija i Diracov češalj.

Fourierov transformat „pomaknute" δ-funkcije $\delta(t-t_0)$ (funkcije koja je svuda 0 osim u t_0 kad je beskonačna) je $e^{i\omega t_0}$.

Želimo li prikazati dva razdvojena impulsa razmaknuta za $2a$, možemo ih reprezentirati funkcijom formule

$$\delta(x-a)+\delta(x+a)$$

čiji Fourierov transformat je

$$e^{i\omega a}+e^{-i\omega a}=2\cos\omega a.$$

Periodični niz jediničnih impulsa (s periodom T) je opisan s

$$\delta_T(t)=\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\delta(t-nT).$$

Funkcija δ_T zove se i Diracov češalj. Pripadni Fourierov red je $\delta_T(t)=\frac{1}{T}\sum_{n=-\infty}^{+\infty}e^{in\omega_0 t}$ uz $\omega_0=\frac{2\pi}{T}$. Integriranjem član po član dobiva se:

$$\mathcal{F}(\delta_T)(\omega)=\omega_0\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\delta(\omega-n\omega_0).$$

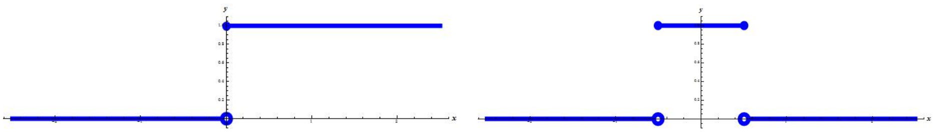
Dakle, Diracov češalj je do na multiplikativnu konstantu ω_0 sam sebi Fourierov transformat.

U Fourierovoj teoriji često se koriste i Heavisideova step-funkcija te funkcija koja predstavlja pravokutni signal. Prva od njih, Heavisideova step-funkcija, definirana je kao

$$U(t)=\begin{cases}0, & t<0\\ 1, & t\geq 0\end{cases}.$$

Pravokutni signal duljine (trajanja) a definira se s

$$\Pi_a(t)=\begin{cases}1, & -\frac{a}{2}\leq t\leq\frac{a}{2}\\ 0, & \text{inače}\end{cases}.$$



(a) (b)

Slika 8.6: Heavisideova step-funkcija (a) i pravokutni signal duljine $a = 1$ (b).

Grafovi tih dviju funkcija u Cartesiusovom koordinatnom sustavu prikazani su slikom 8.6.

Iako integral u definiciji Fourierovog transformata sadrži kompleksne brojeve, u jednostavnim situacijama se lako računa, a imaginarna jedinica se pritom ponaša kao i svaka druga konstanta u integralima. U realističnijim, kompliciranijim, slučajevima za dobivanje Fourierovog transformata neke funkcije koriste se formule poznatih Fourierovih transformata i razne numeričke i druge tehnike. Neki češće korišteni Fourierovi transformati dani su sljedećom tablicom:

$f(t)$	$\mathcal{F}(f)(\omega)$
$\delta(t)$	1
$e^{i\omega_0 t}$	$2\pi\delta(\omega-\omega_0)$
$\mathrm{sgn}(t)$	$\frac{2}{i\omega}$
$\frac{i}{\pi t}$	$\mathrm{sgn}(\omega)$
$U(t)e^{-at}$ $(a>0)$	$\frac{1}{a+i\omega}$
$\Pi_a(t)$	$2\frac{\sin(a\omega)}{\omega}$

Primjer 271. *Odredimo Fourierov transformat funkcije*

$$f(t) = \begin{cases} e^{-t}, & t \geq 0 \\ 0, & t < 0 \end{cases}.$$

Kako je $f(t) = U(t)e^{-t}$, *iz gornje tablice dobivamo*

$$\mathcal{F}(f)(\omega) = \frac{1}{1+i\omega}.$$

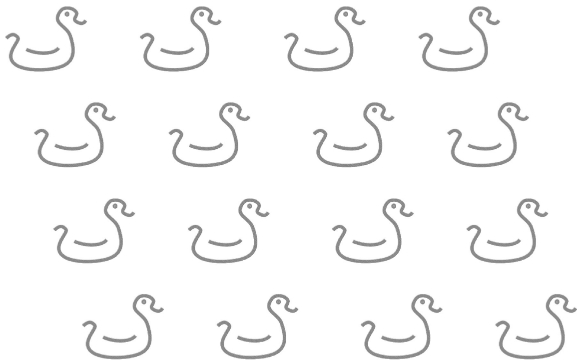
Stoga je spektar amplituda od f *dan s*

$$|\mathcal{F}(f)|(\omega) = \frac{1}{\sqrt{1+\omega^2}},$$

a fazni spektar s

$$\varphi(\omega) = -\mathrm{arctg}\omega.$$

Za primjene izuzetno bitna operacija je konvolucija dvije funkcije.



Slika 8.7: Konvolucija slike s dvodimenzionalnom rešetkom (dvodimenzionalnim Diracovim češljem).

Definicija 59 (Konvolucija)**.** *Konvolucija*[3] *dviju funkcija* $f, g : I \to \mathbb{R}$ *(gdje je* I *neki, ne nužno ograničen, interval u* $\mathbb{R}$*) je funkcija* $f * g$ *definirana s:*

$$f * g(x) = \int_I f(t)g(x-t)\,\mathrm{d}t.$$

Operacija $*$ je komutativna, asocijativna, distributivna te kvaziasocijativna. Jedan način kako vizualizirati konvoluciju dvije funkcije je da zamislimo da se graf jedne giba u smjeru osi apscisa jednolikom brzinom preko grafa druge funkcije te da u svakom trenutku računamo površinu presjeka — iznos te površine je vrijednost njihove konvolucije u tom trenutku. Drugi način za vizualizaciju konvolucije je ovaj: Zamislite sliku koju niste dobro fokusirali. Dobivena „zamućena slika" je konvulucija točne slike s funkcijom „zamućivanja". Pritom je za funkciju zamućivanja dovoljno opisati što bi se desilo sa slikom jedne jedine točke. Posebno korisne znadu biti konvolucije s Diracovom δ-funkcijom. Konvoluciju neke slikice sa jediničnim signalima u više točaka pravca, ravnine ili prostora možemo zamisliti kao kopije te slike u svim tim točkama — vidi sliku 8.7.

Nabrojimo sad neka od često korištenih svojstava Fourierovih transformata (sva vrijede uz pretpostavku da je f apsolutno integrabilna i eventualno neke dodatne uvjete, koji su u praksi obično zadovoljeni):

- Pomaci: Ako je $g(t) = f(t-t_0)$, onda je $\mathcal{F}(g)(\omega) = \mathcal{F}(f)(\omega)e^{-i\omega t_0}$. Ako je $g(t) = e^{i\omega_0 t}f(t)$, onda je $\mathcal{F}(g)(\omega) = \mathcal{F}(f)(\omega-\omega_0)$.
- Skaliranje: Ako je $g(t) = f(\alpha t)$, onda je $\mathcal{F}(g)(\omega) = \frac{1}{|\alpha|}\mathcal{F}(f)\left(\frac{\omega}{\alpha}\right)$.
- Promjena smjera: Ako je $g(t) = f(-t)$, onda je $\mathcal{F}(g)(\omega) = \mathcal{F}(f)(-\omega)$.
- Simetrija: Ako je $g(t) = \mathcal{F}(f)(t)$, onda je $\mathcal{F}(g)(\omega) = 2\pi f(-\omega)$.
- Deriviranje: Fourierov transformat od f' dan je s $\mathcal{F}(f')(\omega) = i\omega\mathcal{F}(f)(\omega)$;

[3] Naravno, konvolucija nije definirana za sve funkcije f i g, već za tzv. Schwartzove funkcije.

- Modulacija:
  Ako je $g(t) = f(t)\cos\omega_0 t$, onda je $\mathcal{F}(g)(\omega) = \frac{1}{2}\left(\mathcal{F}(f)(\omega-\omega_0) + \mathcal{F}(f)(\omega+\omega_0)\right)$;
- Konvolucija obzirom na vrijeme: $\mathcal{F}(f * g) = \mathcal{F}(f)\mathcal{F}(g)$;
- Konvolucija obzirom na frekvenciju: $\mathcal{F}(f) * \mathcal{F}(g)(\omega) = \mathcal{F}(2\pi f(t)g(t))$.

Gornje ideje lako se poopćavaju na više dimenzije. Od zanimanja za primjene u kristalografiji je trodimenzionalni slučaj:

$$\mathcal{F}(f)(\mathbf{s}) = \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{r})e^{i\pi\mathbf{s}\cdot\mathbf{r}}\,\mathrm{d}\mathbf{r}$$

gdje je $\mathbf{r}$ radij-vektor promatrane točke u $\mathbb{R}^3$, a $\mathbf{s}$ je vektor u recipročnom prostoru (izomorfnom s $\mathbb{R}^3$). Posjetimo se da je jedinica duljine u recipročnom prostoru recipročna jedinici duljine u direktnom prostoru — to je u skladu s već uočenom činjenicom da je jedinica varijable Fourierovog transformata (ovdje je to $\mathbf{s}$) recipročna jedinici varijable osnovne funkcije f (ovdje je to $\mathbf{r}$). U standardnoj situaciji kakva se susreće u difrakcijskoj strukturnoj analizi, $\mathbf{r}$ je radij-vektor nekog atoma ili iona u kristalu, f je funkcija elektronske gustoće (nepoznata), a $\mathcal{F}(f)$ je rezultat dobiven difrakcijom na kristalu. Cilj je odrediti točke maksimuma funkcije elektronske gustoće, tj. pozicije atoma. Kako je difrakcijski uzorak ekvivalent Fourierovog transformata elektronske gustoće, teorem o inverznoj Fourierovoj transformaciji omogućuje rekonstrukciju funkcije elektronske gustoće — ali samo teoretski. Naime, zapravo se kao rezultat difrakcije dobiva samo spektar amplituda te se f ne može putem teorema o inverznoj Fourierovoj transformaciji direktno rekonstruirati. Taj problem se zove problem faza. Njega se rješava na više različitih načina, primjerice Pattersonovom metodom ili tzv. direktnim metodama.

Trodimenzionalna varijanta δ-funkcije je nula svuda osim u jednoj točki (x_0, y_0, z_0). Trodimenzionalni Diracov češalj se definira s

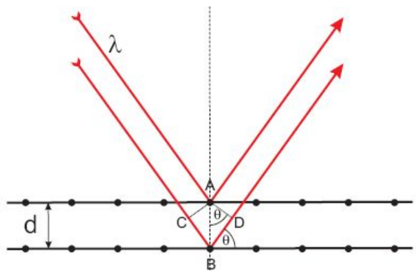
$$\delta_{a,b,c}(x,y,z) = \sum_{i,j,k=-\infty}^{+\infty} \delta(x - ia, y - jb, z - kc).$$

Možemo ga zamisliti kao trodimenzionalni periodički niz jediničnih signala. Stoga kristalnu strukturu možemo opisati kao konvoluciju kristalne rešetke (trodimenzionalnog Diracova češlja) i sadržaja jedinične ćelije. Fourierov transformat bilo kakve rešetke daje njoj recipročnu rešetku. Stoga je Fourierov transformat kristalne strukture produkt Fourierova transformata sadržaja jedinične ćelije i recipročne rešetke. Činjenica koju smo u jednodimenzionalnom slučaju opisali teoremom 20 sad se može iskazati i ovako: difrakcijski uzorak, budući da potječe od realnog kristala, je uvijek centrosimetričan.

Da bismo ukratko objasnili primjenu Fourierove transformacije na kristalografiju, treba nam Braggov zakon, tj. uvjet difrakcije na kristalu:

$$n\lambda = 2d\sin\theta.$$

Tu je λ valna duljina zračenja, $\theta \in [0, \pi/2]$ upadni kut zračenja u odnosu na određeni smjer (hkl) mrežnih ravnina kristalne strukture, a $d = d_{hkl}$ je razmak između susjednih



Slika 8.8: Slika uz dokaz Braggova zakona.

mrežnih ravnina tog smjera. Braggov zakon se posebno često koristi za određivanje razmaka d_{hkl} između susjednih mrežnih ravnina smjera (hkl).

Dokaz Braggova zakona: Promotrimo sliku 8.8. Razlika pređenog puta je $|CB| + |BD| = 2|BD|$. Iz pravokutnog trokuta $\triangle ABD$ slijedi $\sin\theta = \frac{|BD|}{d}$ tj. razlika pređenog puta je $2d\sin\theta$. S obzirom da nas zanima konstruktivna interferencija tj. interferencija kad je razlika u faza među valovima jednaka 0, gledamo samo taj slučaj. Pomak faza 0 imamo samo kad je razlika pređenog puta cjelobrojni višekratnik valne duljine.

U daljnjem je s λ označena valna duljina upadnog zračenja, a s θ kut pod kojim to zračenje upada (mjeren u odnosu na fiksirani smjer (hkl) mrežnih ravnina koje su međusobno razmaknute za d_{hkl}).

Za neke tipove rešetki dobivaju se lako prepoznatljivi difrakcijski uzorci. Tako primjerice za kubične rešetke (parametra jedinične ćelije a) znamo (vidi poglavlje o recipročnoj rešetci) da je razmak između dviju susjednih (hkl) ravnina jednak

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

pa slijedi da ćemo reflekse prvog reda ($n = 1$ u Braggovom zakonu) dobiti pod kutevima θ određenim jednadžbom

$$\sin\theta = \frac{\lambda}{2a}\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}.$$

Računajući moguće $h^2 + k^2 + l^2$ (podsjećamo: za primitivne rešetke $h, k, l \in \mathbb{Z}$ i sva tri broja su u pravilu jednoznamenkasti), vidjet ćemo da u slučaju primitivne kubične ćelije ne možemo dobiti $h^2 + k^2 + l^2 = 7,\ 15,\ \ldots$. Odsustvo takvih kombinacija je karakteristično za primitivnu kubičnu rešetku.

Primjer 272. *Za kristal s kubičnom rešetkom refleks prvog reda na ravninama* (111) *opažen je pri kutu* $\theta = 11,2°$. *Korištene su* Cu (K_α) *röntgenske zrake valne duljine* 154 pm. *Koliko je dug brid a jedinične ćelije? Kako se radi o refleksu prvog reda, imamo* $n = 1$ *i Braggov zakon povlači da mora vrijediti*

$$d_{111} = \frac{\lambda}{2\sin\theta} = \frac{154\,\text{pm}}{2\sin 11{,}2°} = 396\text{pm}.$$

Nadalje, znamo $d_{111} = \frac{a}{\sqrt{1+1+1}} = \frac{a}{\sqrt{3}}$. *Slijedi da je* $a = 687pm$.

Raspršenje röntgenskih zraka je posljedica oscilacija koje elektromagnetski val izaziva kod elektrona. Teški atomi imaju jače raspršenje od lakih pa difraktogram ne ovisi samo o kristalnoj rešetci. Ta ovisnost o broju elektrona i njihovom položaju u elektronskom oblaku označava se s f i zove atomski faktor raspršenja. On je direktno povezan s elektronskom gustoćom ρ.

Napomena 32. *Veza između atomskog faktora raspršenja i elektronske gustoće dana je formulom*

$$f(\theta) = 4\pi \int_0^{+\infty} \rho(r) \frac{\sin kr}{kr} r^2 \, \mathrm{d}r$$

(r je udaljenost od središta atoma, a $k = 4\pi \frac{\sin\theta}{\lambda}$). Vrijednost f je najveća za $\theta = 0$; pri tom kutu je $f = 4\pi \int_0^{+\infty} \rho(r) r^2 \, \mathrm{d}r$ jednak broju elektrona u atomu: $4\pi r^2 \, \mathrm{d}r$ infinitezimalni dio volumena kugle (dio između dvije bliske sfere) pa po definiciji ρ (broj elektrona u infinitezimalnom dijelu volumena podijeljen s brojem elektrona u tom dijelu, tj. funkcija gustoće vjerojatnosti za nalaženje elektrona u nekoj točki prostora) slijedi da je $f = 4\pi \int_0^{+\infty} \rho(r) r^2 \, \mathrm{d}r$ jednak ukupnom broju elektrona u atomu.

Difrakcijski uzorak je u biti Fourierov transformat elektronske gustoće ρ, a cilj nam je iz nje odrediti točke s maksimalnom elektronskom gustoćom, tj. pozicije atomâ opisane radij-vektorima $\mathbf{r} = [x, y, z]$. Zbog periodičnosti kristalne strukture elektronska gustoća ρ je periodična funkcija s temeljnim periodima a, b i c u smjeru pojedinih kristalografskih osi. Stoga ju možemo razviti u trodimenzionalni Fourierov red

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{h,k,l=-\infty}^{+\infty} c_s e^{-2\pi i \mathbf{r}\cdot\mathbf{s}}.$$

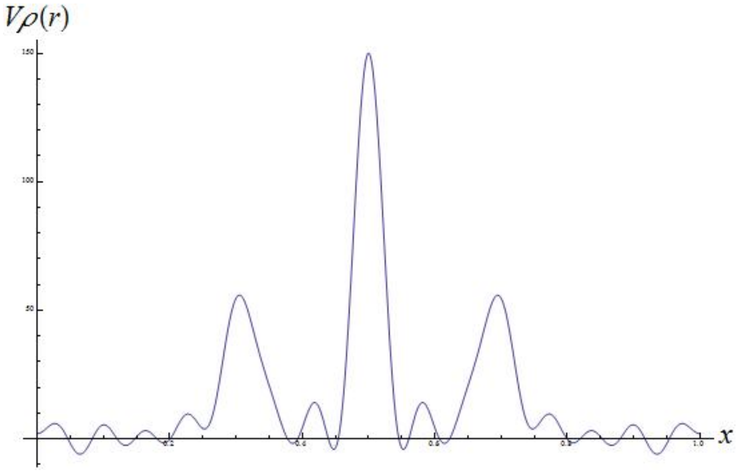
Pritom je $\mathbf{s} = [h, k, l]$ radij-vektor u recipročnom prostoru koji odgovara smjeru mrežnih ravnina na kojem je došlo do difrakcije, a sa $\cdot$ je označen skalarni produkt vektora, tj. $\mathbf{r} \cdot \mathbf{s} = hx + ky + lz$, kako smo vidjeli u poglavlju o recipročnom prostoru. Faktor $\frac{1}{V}$ se pojavljuje zbog tog što koordinate od $\mathbf{r}$ daju relativne, a ne stvarne duljine. Eksponent je negativan, za razliku od naše ranije definicije Fourierovog reda, no to je samo pitanje dogovora. Gornja jednadžba zove se jednadžba Fourierove sinteze elektronske gustoće.

Recimo da jedinična ćelija kristala sadrži atome na pozicijama $\mathbf{r}_j = [x_j, y_j, z_j]$ (gdje je $0 \leq x_j, y_j, z_j < 1$, kooordinate su dane obzirom na kristalografski koordinatni sustav), s atomskim faktorima raspršenja f_j. Tada se strukturni faktor, koji opisuje raspršenje u jediničnoj ćeliji na mrežnim ravninama (hkl), dobiva zbrojem svih doprinosa svih atoma u jediničnoj ćeliji tj. kao

$$F_{hkl} = \sum_j f_j e^{2\pi i \mathbf{r}_j \cdot \mathbf{s}},$$

gdje je $\mathbf{s} = [h, k, l]$ vektor recipročne rešetke.

Primjer 273. *Promotrimo smjer $(h00)$, tj. mrežne ravnine paralelne s $\mathfrak{b}$ i s $\mathfrak{c}$. Pisat ćemo F_h za F_{hkl}. Uočimo da je $\mathbf{r} \cdot \mathbf{s} = hx$. Pri analizi su dobiveni rezultati:*



Slika 8.9: Ovisnost elektronske gustoće o pomaku u smjeru a-osi za primjer 273.

h	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
F_h	16	-10	2	-1	7	-10	8	-3	2	-3	6	-5	3	-2	2	-3

Utvrđeno je i da vrijedi $F_h = F_{-h}$. Treba izračunati funkciju elektronske gustoće.

Prema jednadžbi Fourierove sinteze imamo

$$V\rho(\mathbf{r}) = \sum_{h=-\infty}^{+\infty} F_h e^{-2\pi i h x} = F_0 + \sum_{h=1}^{+\infty} (F_h e^{-2\pi i h x} + F_{-h} e^{2\pi i h x}) = F_0 + 2\sum_{h=1}^{+\infty} F_h \cos(2\pi h x).$$

Eksperimentalni podaci omogućuju izračunavanje parcijalne sume

$$V\rho(\mathbf{r}) = F_0 + 2\sum_{h=1}^{15} F_h \cos(2\pi h x).$$

Dobiva se graf od $V\rho(\mathbf{r})$ za $x \in [0,1]$ (tj. unutar jedinične ćelije) prikazan slikom **??**. *Uočljiva su tri istaknuta lokalna maksimuma (tri atoma u jediničnoj ćeliji) i njihove x-pozicije.*

8.3 Zadaci za vježbu

1. Ispitajte koje od sljedećih funkcija su periodične

   (a) $f(x) = \sin 3x$.

   (b) $f(x) = \sin(x^2)$.

   (c) $f(x) = \sin^2 x$.

   (d) $f(x) = \sin \frac{1}{x}$.

Rješenje.
(a) periodična ($T = \frac{2\pi}{3}$). (b) nije periodična.
(c) periodična ($T = \pi$). (d) nije periodična.

2. Je li funkcija

$$f(x) = \begin{cases} 1\,, & x \in \mathbb{Q} \\ 0\,, & \text{inače} \end{cases}$$

periodična? Ima li temeljni period?

Rješenje. f je periodična (period je svaki pozitivni racionalni broj $T \in \mathbb{Q}_+$). Temeljni period ne postoji.

3. Uz koje uvjete na parametre $\alpha, \beta > 0,\ \alpha \neq \beta$ je funkcija

$$f(x) = \cos \alpha x + \sin \beta x$$

periodična?

Rješenje. $\alpha T = 2k\pi,\ \beta T = 2\ell\pi$, za neke $k, \ell \in \mathbb{N} \Rightarrow \frac{\alpha}{\beta} = \frac{k}{\ell} \in \mathbb{Q}_+$.

4. Neka je $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ periodična sa periodom T. Dokažite da za proizvoljne $a, b \in \mathbb{R}$ vrijedi

$$\int_a^{a+T} f(x)\,\mathrm{d}x = \int_b^{b+T} f(x)\,\mathrm{d}x\ .$$

5. Dokažite da je niz funkcija

$$\frac{1}{2},\ \sin x,\ \cos x,\ \cos 2x,\ \sin 2x,\ \ldots, \cos nx,\ \sin nx,\ \ldots$$

ortogonalan na segmentu $[-\pi, \pi]$.

Rješenje. $\int_{-\pi}^{\pi} \frac{1}{2} \cos nx\,\mathrm{d}x = 0$, $\int_{-\pi}^{\pi} \frac{1}{2} \sin nx\,\mathrm{d}x = 0$, $\int_{-\pi}^{\pi} \cos mx \sin nx\,\mathrm{d}x = 0$, $\int_{-\pi}^{\pi} \cos mx \cos nx\,\mathrm{d}x = \pi\delta_{mn}$, $\int_{-\pi}^{\pi} \sin mx \sin nx\,\mathrm{d}x = \pi\delta_{mn}$.

6. Razvijte u Fourierov red funkciju f koja je zadana na $[-\pi, \pi]$ s

$$f(x) = \begin{cases} x\,, & -\pi < x < 0 \\ 0\,, & 0 \leq x < \pi \end{cases}$$

i zatim proširena po periodičnosti na $\mathbb{R}$.

Rješenje. $L = \pi,\ A_0 = -\frac{\pi}{2},\ A_{2k} = 0,\ A_{2k-1} = \frac{2}{(2k-1)^2\pi},\ B_n = \frac{(-1)^{n+1}}{\pi}$,
$f(x) = -\frac{\pi}{4} + \frac{2}{\pi}\big(\cos x + \frac{\cos 3x}{9} + \frac{\cos 5x}{25} + \ \ldots \big) + \big(\sin x - \frac{\sin 3x}{2} + \frac{\cos 3x}{3} + \ \ldots \big)$.

7. Razvijte u Fourierov red funkciju f koja je zadana na $[-1, 1]$ s $f(x) = x^2$ i zatim proširena po periodičnosti na $\mathbb{R}$.

Rješenje. $L = 1,\ A_0 = \frac{2}{3},\ A_n = (-1)^n \frac{4}{\pi^2 n^2},\ B_n = 0$ (f parna),
$f(x) = \frac{1}{3} - \frac{4}{\pi^2}\big(\cos \pi x - \frac{\cos 2\pi x}{4} + \frac{\cos 3\pi x}{9} - \ \ldots \big)$.

8. Razvijte u Fourierov red funkciju f koja je zadana na $[-1, 1]$ s $f(x) = |x|$ i zatim proširena po periodičnosti na $\mathbb{R}$. Koristeći dobiveni razvoj izračunajte sumu reda $1 + \frac{1}{3^2} + \frac{1}{5^2} + \frac{1}{7^2} + \ \ldots$
   Rješenje. $L = 1,\ A_0 = 1,\ A_{2k} = 0,\ A_{2k-1} = -\frac{4}{(2k-1)^2\pi^2},\ B_n = 0$ (f parna),
   $f(x) = \frac{1}{2} - \frac{4}{\pi^2}\big(\cos\pi x + \frac{\cos 3\pi x}{9} + \frac{\cos 5\pi x}{25} + \ \ldots\big)$,
   $x = 0 \ \Rightarrow\ 1 + \frac{1}{3^2} + \frac{1}{5^2} + \frac{1}{7^2} + \ \ldots = \frac{\pi^2}{8}$.

9. Razvijte u Fourierov red funkciju f koja je zadana na $[0, 4]$ s $f(x) = \frac{2-x}{2}$ i zatim proširena po periodičnosti na $\mathbb{R}$.
   Rješenje. $T = 4,\ A_0 = \frac{2}{T}\int_0^4 f(x)\,\mathrm{d}x = 0,\ A_n = \frac{2}{T}\int_0^4 f(x)\cos\frac{2n\pi x}{T}\,\mathrm{d}x = 0,$
   $B_n = \frac{2}{T}\int_0^4 f(x)\sin\frac{2n\pi x}{T}\,\mathrm{d}x = \frac{2}{n\pi},\ f(x) = \frac{2}{\pi}\sum_{n=1}^{+\infty}\frac{\sin\frac{n\pi x}{2}}{n}$.

10. Odredite kompleksni Fourierov red za funkciju definiranu s

$$f(x) = \begin{cases} -E\ , & -\pi < x < 0 \\ E\ , & 0 \le x < \pi \end{cases}$$

   koja je po periodičnosti proširena na $\mathbb{R}$.
   Rješenje. $L = \pi,\ C_0 = 0,\ C_{2k} = 0,\ C_{2k-1} = -\frac{2iE}{(2k-1)\pi}$,
   $f(x) = -\frac{2iE}{\pi}\big(\sum_{k=-\infty}^{-1}\frac{e^{i(2k-1)x}}{2k-1} + \sum_{k=1}^{+\infty}\frac{e^{i(2k-1)x}}{2k-1}\big)$.

11. Odredite kompleksni Fourierov red za funkciju koja je po peridočnosti proširena na $\mathbb{R}$, a na $[-1, 1]$ zadana sa $f(x) = e^x$.
   Rješenje. $L = 1,\ \ f(x) = \mathrm{sh}1\sum_{k=-\infty}^{+\infty}\frac{(-1)^k}{1-ik\pi}\,e^{ik\pi x}$.

12. Odredite Fourierov transformat funkcije f, ako je

   (a) $f(x) = \cos\frac{x}{2},\quad -\pi \le x \le \pi$.
   (b) $f(x) = \cos x,\quad 0 \le x \le \pi$.

   Rješenje.
   (a) $\mathcal{F}(f)(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{4}{1-4\omega^2}\cos\pi\omega$. (b) $\mathcal{F}(f)(\omega) = \frac{i\omega}{\sqrt{2\pi}}(e^{-i\pi\omega} - 1)$.

Poglavlje 9

Standardne oznake

x_j	j-ta nepoznanica u sustavu
a_{ij}	koeficijent i-te jednadžbe sustava linearnih jednadžbi uz j-tu nepoznanicu ili element matrice A koji se nalazi u i-tom retku i j-tom stupcu
b_i	slobodni član u i-toj jednadžbi sustava linearnih jednadžbi
A, B, C, ...	matrice
$M_{m,n}$	skup svih matrica s m redaka i n stupaca
$0_{m,n}$	nulmatrica s m redaka i n stupaca
M_n	skup svih kvadratnih matrica s po n redaka i stupaca
I_n	jedinična matrica u M_n
A^t	matrici A transponirana matrica
A^*	kompleksnoj matrici A hermitski konjugirana matrica
A^{-1}	matrici A inverzna matrica
$\det A$	determinanta matrice A
$\operatorname{tr} A$	trag kvadratne matrice A
$\mathbb{R}^n$	skup odnosno vektorski prostor uređenih n-torki realnih brojeva
$\mathbb{C}^n$	skup odnosno vektorski prostor uređenih n-torki kompleksnih brojeva
$\hat{A}$, $\hat{\Omega}$, ...	linearan operator
$k_A(\lambda)$	karakteristični polinom operatora prikazanog matricom A
ν_J	stehiometrijski koeficijent sudionika J neke reakcije
c_J, [J]	množinska koncentracija sudionika J neke reakcije
ξ	doseg reakcije
$\frac{\partial f}{\partial x_i}$	parcijalna derivacija prvog reda skalarne funkcije f po varijabli x_i
$\frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}$	parcijalna derivacija drugog reda skalarne funkcije f, prvo po x_i, pa onda po x_j
$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}$	parcijalna derivacija drugog reda skalarne funkcije f, dvaput po istoj varijabli x_i
$\operatorname{grad} f = \nabla f$	gradijent skalarne funkcije f
$Hf(X)$	Hesseova matrica skalarne funkcije f u točki X
$\iint_A f \,\mathrm{d}A$	dvostruki integral funkcije dviju varijabli f po području A
$\iiint_V f \,\mathrm{d}V$	trostruki integral funkcije triju varijabli f po području V
(r, ϕ, θ)	sferne koordinate
JF, $\left\lvert \frac{\partial(F_1,\ldots,F_n)}{\partial(x_1,\ldots,x_n)} \right\rvert$	Jakobijan vektorske funkcije $F = (F_1, \ldots, F_n)$ od n varijabli $x_1, \ldots, x_n$
∇	nabla-operator
$\nabla \cdot F = \operatorname{div} F$	divergencija vektorske funkcije F
$\nabla \times F = \operatorname{rot} F$	rotacija vektorskog polja $F : \Omega \subseteq \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$
$\mathrm{d}f(X)$	diferencijal funkcije f u točki X
$\omega = M\,\mathrm{d}x + N\,\mathrm{d}y + \ldots$	diferencijal
$\int_\gamma f \,\mathrm{d}s$	krivuljni integral prve vrste skalarne funkcije f po krivulji γ
$\int_\gamma M\,\mathrm{d}x + N\,\mathrm{d}y + \ldots$	krivuljni integral druge vrste vektorskog polja $F = (M, N, \ldots)$ po krivulji γ
$\oint$	krivuljni integral po zatvorenoj krivulji

U	unutrašnja energija
S	entropija
H	entalpija
A	Helmholtzova energija
G	Gibbsova energija
a_n	opći član niza
(a_n), $(a_n)_n$, $(a_n)_{n\in\mathbb{N}}$	niz
$\lim_{n\to\infty} a_n$, $\lim_n a_n$, $\lim a_n$	limes niza
$\sum_{n=1}^{\infty} a_n$, $\sum a_n$	red određen nizom (a_n)
$\sum_n c_n(x-c)^n$	red potencija oko točke c
$\mathcal{F}(f)$	Fourierov transformat funkcije f

Poglavlje 10

Formule

Laplaceov razvoj determinante po i-tom retku:

$$\det A = \sum_{j=1}^{n} (-1)^{i+j} a_{ij} \det A_{ij},$$

Laplaceov razvoj determinante po j-tom stupcu:

$$\det A = \sum_{i=1}^{n} (-1)^{i+j} a_{ij} \det A_{ij}.$$

Karakteristični polinom operatora prikazanog matricom A:

$$k_A(\lambda) = \det(A - \lambda I).$$

Homogene diferencijalne jednadžbe $y' = f(y/t)$ se na jednadžbu sa separiranim varijablama svode supstitucijom

$$y = tu, \; y' = tu' + u.$$

Rješenje nehomogene linearne diferencijalne jednadžbe prvog reda $y' + f(t)y = g(t)$ se iz rješenja $y_H = Ce^{-F(t)}$ (F je neka antiderivacija od f) pripadne homogene jednadžbe $y' + f(t)y = 0$ dobiva metodom varijacije konstante: C shvatimo kao funkciju varijable t te $y(t) = C(t)e^{-F(t)}$ i $y'(t) = C'(t)e^{-F(t)} + C(t)e^{-F(t)}(-f(t))$ uvrstimo u polaznu jednažbu $y' + f(t)y = g(t)$ čime dobivamo jednažbu $C'(t) = g(t)e^{F(t)}$ iz koje se C određuje integriranjem.
Homogena linearna diferencijalna jednadžba drugog reda s konstantnim koeficijentima $a_2y'' + a_1y' + a_0y = 0$ rješava se pomoću njene karakteristične jednadžbe $a_2x^2 + a_1x + a_0 = 0$. Ovisno o diskriminanti $D = a_1^2 - 4a_0a_2$ imamo sljedeće oblike općeg rješenja jednadžbe $a_2y'' + a_1y' + a_0y = 0$:

$D > 0$	dva realna rj. kar. j. x_1, x_2	$y(t) = C_1e^{x_1t} + C_2e^{x_2t}$,
$D = 0$	jedno realno rj. kar. j. x	$y(t) = C_1e^{xt} + C_2xe^{xt}$,
$D < 0$	dva kompl. rj. kar. j. $a \pm bi$	$y(t) = e^{at}(C_1\cos(bt) + C_2\sin(bt))$.

Određivanje partikularnog rješenja nehomogene linearne diferencijalne jednadžbe drugog reda s konstantnim koeficijentima $a_2y'' + a_1y' + a_0y = f(t)$ metodom neodređenih koeficijenata:

- Ako je $f(t)$ polinom[1] stupnja n pretpostavlja se da je y_P polinom istog stupnja, ali s neodređenim koeficijentima.
- Ako je $f(t)$ oblika e^{at}, pretpostavlja se da je y_P oblika Ae^{at} s nepoznatim A.
- Ako je $f(t)$ oblika e^{at} pomnožen s polinomom stupnja n, pretpostavlja se da je y_P oblika Ae^{at} pomnožen s polinomom stupnja n s nepoznatim A i koeficijentima polinoma.

[1] Konstantnu funkciju smatramo polinomom stupnja nula.

- Ako je $f(t)$ oblika $e^{at}(\alpha\sin(bt)+\beta\sin(bt))$ (što uključuje oblike $\sin(bt)$, $\cos(bt)$, $e^{at}\sin(bt)$ i $e^{at}\cos(bt)$), pretpostavlja se da je $y_P = e^{at}(A\sin(bt)+B\sin(bt))$ s neodređenim A i B.

Određivanje partikularnog rješenja nehomogene linearne diferencijalne jednadžbe drugog reda s konstantnim koeficijentima $a_2y''+a_1y'+a_0y=f(t)$ metodom varijacije konstanti: u homogenom rješenju $y_H = C_1y_1 + C_2y_2$ se pretpostavi da su C_1 i C_2 funkcije od t; C_1' i C_2' određuju iz sustava

$$C_1'y_1 + C_2'y_2 = 0,$$

$$a_2(C_1'y_1' + C_2'y_2') = f(t).$$

Zakon brzine reakcije reda n sa samo jednim reaktantom A:

$$\frac{1}{\nu_{\mathrm{A}}}\cdot\frac{\mathrm{d}[\mathrm{A}]}{\mathrm{d}t} = k_n[\mathrm{A}]^n.$$

Lančano pravilo za parcijalne derivacije — slučaj kompozicije skalarne funkcije f koja ovisi o n varijabli s vektorskom funkcijom $(x_1,\ldots,x_n)$, gdje su $x_i = x_i(t)$ realne funkcije jedne varijable t

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \sum_{i=1}^{n}\frac{\partial f}{\partial x_i}\cdot\frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t}.$$

Lančano pravilo za parcijalne derivacije — slučaj kompozicije skalarne funkcije f dviju varijabli s vektorskom funkcijom dviju varijabli $(x,y) = (x(u,v), y(u,v))$:

$$\frac{\partial f}{\partial u} = \frac{\partial f}{\partial x}\cdot\frac{\partial x}{\partial u} + \frac{\partial f}{\partial y}\cdot\frac{\partial y}{\partial u},$$

$$\frac{\partial f}{\partial v} = \frac{\partial f}{\partial x}\cdot\frac{\partial x}{\partial v} + \frac{\partial f}{\partial y}\cdot\frac{\partial y}{\partial v}.$$

Eulerovo cikličko pravilo

$$\frac{\partial x}{\partial y}\cdot\frac{\partial y}{\partial z}\cdot\frac{\partial z}{\partial x} = -1$$

Hesseova matrica skalarne funkcije f u točki X:

$$Hf(X) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(X) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(X) & \ldots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(X) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1}(X) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(X) & \ldots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n}(X) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1}(X) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2}(X) & \ldots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2}(X) \end{pmatrix}$$

Gradijent skalarne funkcije f:

$$\mathrm{grad}\, f = \nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n}\right)^t.$$

Postupak određivanja lokalnih ekstrema skalarne funkcije f:

- Prvo se odrede stacionarne točke, tj. elementi X iz domene od f takvi da je $\nabla f(X)$ nulvektor.
- Ako je X stacionarna točka, ona je točka lokalnog minimuma ako su sve glavne minore od $Hf(X)$ pozitivne.
- Ako je X stacionarna točka, ona je točka lokalnog maksimuma ako predznaci minora Hesseove matrice $H(f)(X_0)$ alterniraju počevši s negativnim.

Fubinijev teorem:

$$\iint\limits_{[a,b]\times[c,d]} f(x,y)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = \int_a^b \left(\int_c^d f(x,y)\,\mathrm{d}y \right) \mathrm{d}x = \int_c^d \left(\int_a^b f(x,y)\,\mathrm{d}x \right) \mathrm{d}y.$$

$$\iiint\limits_{[a,b]\times[c,d]\times[p,q]} f(x,y,z)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z = \int_a^b \left(\int_c^d \left(\int_p^q f(x,y,z)\,\mathrm{d}z \right) \mathrm{d}y \right) \mathrm{d}x.$$

Formule za prijelaz iz sfernih u Cartesiusove koordinate:

$$x = r\cos\phi\sin\theta,$$

$$y = r\sin\phi\sin\theta,$$

$$z = r\cos\theta.$$

Jakobijan vektorske funkcije $F = (F_1, \ldots, F_n)$ od n varijabli $x_1, \ldots, x_n$:

$$JF = \det\left(\frac{\partial F_i}{\partial x_j}\right).$$

Zamjena varijabli u višestrukim integralima:

$$x = u(x',y'), y = v(x',y'), F = (u,v) \Rightarrow \iint\limits_S f(x',y') \left| \frac{\partial(u,v)}{\partial(x',y')} \right| \mathrm{d}x'\,\mathrm{d}y' = \iint\limits_A f(x,y)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y,$$

$$x = u(x',y',z'), y = v(x',y',z'), z = w(x',y',z'), F = (u,v,w) \Rightarrow$$

$$\iiint\limits_W f(x',y',z') \left| \frac{\partial(x,y,z)}{\partial(x',y',z')} \right| \mathrm{d}u\,\mathrm{d}v\,\mathrm{d}w = \iiint\limits_V f(x,y,z)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z.$$

Nabla-operator: gradijent, divergencija, rotacija

$$\operatorname{grad} f(X) = \nabla f(X) \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)^t,$$

$$\nabla(f+g) = \nabla f + \nabla g,$$

$$\nabla(\alpha f) = \alpha \nabla f,$$

$$\nabla(fg) = f\nabla g + g\nabla f,$$

$$\operatorname{div} F(X) = \nabla F(X) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial F_i}{\partial x_i}(X),$$

$$\nabla \cdot (F+G) = \nabla \cdot F + \nabla \cdot G,$$

$$\nabla \cdot (\alpha F) = \alpha \nabla \cdot F,$$

$$\nabla \cdot (fF) = (\nabla f) \cdot F + f(\nabla \cdot F),$$

$$\operatorname{rot} F(X) = \nabla \times F(X) = \begin{vmatrix} \overrightarrow{i} & \overrightarrow{j} & \overrightarrow{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ F_x & F_y & F_z \end{vmatrix},$$

$$\nabla \times (F+G) = \nabla \times F + \nabla \times G,$$

$$\nabla \times (\alpha F) = \alpha \nabla \times F,$$

$$\nabla \times (fF) = (\nabla f) \times F + f(\nabla \times F),$$

$$\nabla \times (F \times G) = (\nabla \cdot G)F + (G \cdot \nabla)F - (\nabla \cdot F)G - (F \cdot \nabla)G,$$

$$\nabla \cdot (F \times G) = (\nabla \times F) \cdot G - F \cdot (\nabla \times G),$$

$$\nabla(F \cdot G) = F \times (\nabla \times G) + G \times (\nabla \times F) + (F \cdot \nabla)G + (G \cdot \nabla)F.$$

Djelovanje Laplaceovog operatora na skalarnu funkciju

$$\nabla \cdot \nabla f = \nabla^2 f = \sum_i \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}$$

Gradijent, divergencija, rotacija i Laplaceov operator u sfernim koordinatama (za funkcije triju varijabli)

$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial r}, \frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial \theta}, \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial f}{\partial \phi}\right),$$

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial f}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial f}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial f}{\partial\phi^2},$$

$$\nabla \cdot F = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2 F_r) + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta F_\theta) + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial F_\phi}{\partial\phi},$$

$$\nabla \times F = \frac{1}{r\sin\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\phi}(\sin\phi F_\theta) - \frac{\partial F_\phi}{\partial\theta}\right)\hat{r} + \frac{1}{r}\left(\frac{1}{\sin\phi}\frac{\partial F_r}{\partial\theta} - \frac{\partial}{\partial r}(rF_\theta)\right)\hat{\phi} +$$

$$+\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}(rF_\phi) - \frac{\partial F_r}{\partial\phi}\right)\hat{\theta}$$

Diferencijal funkcije

$$\mathrm{d}f(X) = \sum_{i=1}^{n}\frac{\partial f}{\partial x_i}(X) \cdot \mathrm{d}x_i,$$

$$\mathrm{d}x_i(y_1, y_2, \ldots, y_n) = y_i$$

Krivuljni integrali prve vrste skalarne funkcije f

$$\int_\gamma f\,\mathrm{d}s = \int_a^b f(\gamma(t))||\gamma'(t)||\,\mathrm{d}t,$$

$$\int_\gamma f\,\mathrm{d}s = \int_a^b f(x(t), y(t))\sqrt{(x'(t))^2 + (y'(t))^2}\,\mathrm{d}t,$$

$$\int_\gamma f\,\mathrm{d}s = \int_a^b f(x(t), y(t), z(t))\sqrt{(x'(t))^2 + (y'(t))^2 + (z'(t))^2}\,\mathrm{d}t$$

$$\int_{-\gamma} f\,\mathrm{d}s = \int_\gamma f\,\mathrm{d}s$$

$$\int_{\gamma_1\cup\gamma_2} f\,\mathrm{d}s = \int_{\gamma_1} f\,\mathrm{d}s + \int_{\gamma_2} f\,\mathrm{d}s$$

Duljina krivulje $\gamma : [a, b] \to \mathbb{R}^n$

$$l(\gamma) = \int_\gamma \mathrm{d}s$$

Krivuljni integrali druge vrste vektorskog polja $F = (F_1, \ldots, F_n)$

$$\int_\gamma \sum_{i=1}^{n} F_i\,\mathrm{d}x_i = \int_a^b \langle F(\gamma(t)), \gamma'(t)\rangle\,\mathrm{d}t$$

$$\int_\gamma M(x, y)\,\mathrm{d}x + N(x, y)\,\mathrm{d}y = \int_a^b \left(M(x(t), y(t))x'(t) + N(x(t), y(t))y'(t)\right)\,\mathrm{d}t$$

$$\int_{\gamma_1 \cup \gamma_2} \omega = \int_{\gamma_1} \omega + \int_{\gamma_2} \omega$$

$$\int_{-\gamma} \omega = -\int_{\gamma} \omega$$

$$\oint \mathrm{d}f = \oint \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i} \cdot \mathrm{d}x_i = 0$$

$$\int_{\gamma} \mathrm{d}f = \int_{\gamma} \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i} \cdot \mathrm{d}x_i = f(\gamma(b)) - f(\gamma(a))$$

Prvi i drugi glavni stavak termodinamike

$$\mathrm{d}U = \mathrm{d}w + \mathrm{d}q$$

$$\mathrm{d}S = \frac{\mathrm{d}q}{T}$$

Entalpija, Helmholtzova i Gibbsova energija

$$H = U + pV$$

$$A = H - TS$$

$$G = H - TS$$

Metoda najmanjih kvadrata — aproksimacija afinom funkcijom

$$s_{x^2} = \sum_{i=1}^{n} x_i^2, \quad s_x = \sum_{i=1}^{n} x_i, \quad s_{xy} = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i, \quad s_y = \sum_{i=1}^{n} y_i$$

$$a = \frac{n s_{xy} - s_x s_y}{n s_{x^2} - s_x^2}$$

$$b = \frac{s_{x^2} s_y - s_x s_{xy}}{n s_{x^2} - s_x^2}$$

Limesi nizova

$$\lim aq^n = \begin{cases} 0, & -1 < q < 1, \\ a, & q = 1, \\ +\infty, & q > 1,\ a_0 > 0, \\ -\infty, & q > 1,\ a_0 < 0, \\ \text{neodređen}, & q \leq -1 \end{cases},$$

$$\lim_{n \to +\infty} \frac{1}{n^k} = 0, \quad \text{za } k > 0,$$

$$\lim_{n \to +\infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n = e.$$

Suma geometrijskog reda (za $|q| < 1$):

$$\sum_{n} aq^n = a + aq + aq^2 + \ldots = \frac{a}{1-q}.$$

Taylorov red funkcije f:

$$T(x) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(c)}{n!} (x-c)^n.$$

Greška aproksimacije funkcije f oko točke c Taylorovim polinomom $T_n(x)$:

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(t)}{(n+1)!} (x-c)^{n+1},$$

za neki t između c i x.
Važniji Maclaurinovi redovi:

$$\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{+\infty} x^n = 1 + x + x^2 + x^3 + \dots, \quad x \in \langle -1, 1\rangle,$$

$$\frac{1}{1+x} = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n x^n = 1 - x + x^2 - x^3 + \dots, \quad x \in \langle -1, 1\rangle,$$

$$(1+x)^\alpha = \sum_{n=0}^{+\infty} \binom{\alpha}{n} x^n \quad x \in \langle -1, 1\rangle,$$

$$e^x = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots, \quad x \in \mathbb{R},$$

$$\sin x = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{2n+1} = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots, \quad x \in \mathbb{R},$$

$$\cos x = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} x^{2n} = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots, \quad x \in \mathbb{R},$$

$$\ln(1+x) = \sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^{n+1} \frac{x^n}{n} = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots, \quad x \in \langle -1, 1]$$

Fourierov red funkcije f zadane na $[-L, L]$:

$$f(x) = \frac{A_0}{2} + \sum_{n=1}^{+\infty} \left(A_n f_n(x) + B_n g_n(x) \right),$$

$$A_n = \frac{1}{L} \langle f, f_n \rangle,$$

$$B_n = \frac{1}{L} \langle f, g_n \rangle, \quad n \in \mathbb{N},$$

$$f_m(x) = \cos\left(\frac{m\pi x}{L} \right),$$

$$g_n(x) = \sin\left(\frac{n\pi x}{L} \right)$$

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n \phi_n(x),$$

$$\phi_n(x) = e^{in\pi x/L}$$

$$c_0 = \frac{A_0}{2}, \quad c_n = \frac{A_n - iB_n}{2}, \quad c_{-n} = \frac{A_n + iB_n}{2}$$

Fourierov transformat funkcije f

$$\mathcal{F}(f)(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-i\omega t} \, \mathrm{d}t$$

Bibliografija

[1] P. Atkins, J. De Paula, Physical Chemistry, *Oxford University Press*, 2006.

[2] T. Cvitaš, materijali iz fizikalne kemije, `ftp://ftp.chem.pmf.hr/download/cvitas/Fiz_Kem/`

[3] S. Kurepa, Matematička analiza 2, *Tehnička knjiga*, Zagreb, 1971.

[4] R. G. Mortimer, Mathematics for Physical Chemistry, 3rd ed., *Elsevier*, 2005.

[5] E. A. Reinsch, Mathematik für Chemiker, *Teubner*, 2004.

[6] V. Simeon, Kemijska termodinamika, 1. poglavlje, primjerak za studentsku uporabu, Zagreb, 2004.

[7] `http://www.slimy.com/~steuard/teaching/tutorials/Lagrange.html`

[8] Paul's Online Math Notes, `http://tutorial.math.lamar.edu/`

[9] `http://betterexplained.com/articles/category/math/vector-calculus/`

[10] `http://www.ma.utexas.edu/users/hausel/m408k/wyles-stergio-anderson/calculus/problem.html`

[11] `http://www.sosmath.com/diffeq/diffeq.html`

Kazalo