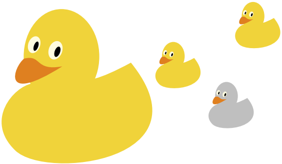
Linearne diferencijalne jednadžbe i njihovi sustavi

Franka Miriam Brückler



Linearne diferencijalne jednadžbe 1. reda

Primjer

Radioaktivni raspad/Svojstveni vektor operatora deriviranja: $N' = -\lambda N$.

Linearne diferencijalne jednadžbe 1. reda

Primjer

Radioaktivni raspad/Svojstveni vektor operatora deriviranja: $N' = -\lambda N$.

Linearna diferencijalna jednadžba prvog reda je diferencijalna jednadžba koja se može zapisati u obliku

$$y' + a_0(t)y = f(t).$$

Ako je $f(t) = 0$ za sve t, govorimo o homogenoj linearnoj diferencijalnoj jednadžbi prvog reda i ona se lako rješava metodom separacije varijabli.

Linearne diferencijalne jednadžbe 1. reda

Primjer

Radioaktivni raspad/Svojstveni vektor operatora deriviranja: $N' = -\lambda N$.

Linearna diferencijalna jednadžba prvog reda je diferencijalna jednadžba koja se može zapisati u obliku

$$y' + a_0(t)y = f(t).$$

Ako je $f(t) = 0$ za sve t, govorimo o homogenoj linearnoj diferencijalnoj jednadžbi prvog reda i ona se lako rješava metodom separacije varijabli. U nehomogenom slučaju koristimo metodu varijacije konstante: riješimo pripadnu homogenu jednadžbu, a zatim konstantu C općeg rješenja te jednadžbe proglasimo funkcijom temeljne varijable t i takvo rješenje uvrštavamo u polaznu jednadžbu, čime dobivamo izraz tipa $C'(t) = \ldots$.

Primjer

Temperatura patke koja se peče u pećnici opisana je diferencijalnom jednadžbom oblika

$$\frac{\mathrm{d}\vartheta}{\mathrm{d}t} = k(200^\circ\mathrm{C} - \vartheta) \Leftrightarrow \dot{\vartheta} + k\vartheta = k \cdot 200^\circ\mathrm{C}$$

s početnim uvjetom $\vartheta(0\,\mathrm{min}) = 2^\circ\,\mathrm{C}$.

Primjer

Temperatura patke koja se peče u pećnici opisana je diferencijalnom jednadžbom oblika

$$\frac{\mathrm{d}\vartheta}{\mathrm{d}t} = k(200^\circ\mathrm{C} - \vartheta) \Leftrightarrow \dot{\vartheta} + k\vartheta = k \cdot 200^\circ\mathrm{C}$$

s početnim uvjetom $\vartheta(0\,\mathrm{min}) = 2^\circ\,\mathrm{C}$.

$$\frac{\mathrm{d}\vartheta}{\vartheta} = -k\,\mathrm{d}t \Rightarrow ln\frac{\vartheta}{\mathrm{C}} = -kt + C_0 \Rightarrow \vartheta_H = C\exp(-kt);$$

Primjer

Temperatura patke koja se peče u pećnici opisana je diferencijalnom jednadžbom oblika

$$\frac{\mathrm{d}\vartheta}{\mathrm{d}t} = k(200^\circ\mathrm{C} - \vartheta) \Leftrightarrow \dot{\vartheta} + k\vartheta = k \cdot 200^\circ\mathrm{C}$$

s početnim uvjetom $\vartheta(0\,\mathrm{min}) = 2^\circ$ C.

$$\frac{\mathrm{d}\vartheta}{\vartheta} = -k\,\mathrm{d}t \Rightarrow ln\frac{\vartheta}{\mathrm{C}} = -kt + C_0 \Rightarrow \vartheta_H = C\exp(-kt);$$

$$\vartheta(t) = C(t)\exp(-kt) \Rightarrow \dot{\vartheta} = C'(t)\exp(-kt) - kC(t)\exp(kt);$$

Primjer

Temperatura patke koja se peče u pećnici opisana je diferencijalnom jednadžbom oblika

$$\frac{\mathrm{d}\vartheta}{\mathrm{d}t} = k(200^\circ \mathrm{C} - \vartheta) \Leftrightarrow \dot{\vartheta} + k\vartheta = k \cdot 200^\circ \mathrm{C}$$

s početnim uvjetom $\vartheta(0\,\mathrm{min}) = 2^\circ$ C.

$$\frac{\mathrm{d}\vartheta}{\vartheta} = -k\,\mathrm{d}t \Rightarrow ln\frac{\vartheta}{\mathrm{C}} = -kt + C_0 \Rightarrow \vartheta_H = C\exp(-kt);$$

$$\vartheta(t) = C(t)\exp(-kt) \Rightarrow \dot{\vartheta} = C'(t)\exp(-kt) - kC(t)\exp(kt);$$

uvrštavanje u polaznu jednadžbu daje

$$C'(t)\exp(-kt) - kC(t)\exp(-kt) + k \cdot C(t)\exp(-kt) = k \cdot 200^\circ \mathrm{C},$$

$$C'(t) = k \cdot 200^\circ \mathrm{C}\exp(kt) \Rightarrow C(t) = 200^\circ \mathrm{C}\exp(kt) + C_1 \Rightarrow$$

$$\vartheta(t) = (200^\circ \mathrm{C}\exp(kt) + C_1)\exp(-kt) = 200^\circ \mathrm{C} + C_1\exp(-kt).$$

Primjer

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. Odgovarajuća diferencijalna jednadžba je nehomogena linearna 1. reda:

$$m\dot{v} = mg - kv.$$

Primjer

RL-strujni krug s jednim otpornikom otpora R i jednom zavojnicom induktiviteta L te baterije elektromotorne sile E opisan je (temeljem Kirchhoffovog zakona) nehomogenom linearnom diferencijalnom jednadžbom 1. reda:

$$L\dot{I} + RI = E.$$

Zadatak

U cisternu obujma 1000 *L izlijeva se vodena otopina neke tvari. Na početku je u cisterni* 800 *L tekućine, od čega je* 20 *g otopljene tvari. Tekućina s masenom koncentracijom spomenute tvari od* 50 *g/L ulijeva brzinom* 3 *L/h. Tekućina se iz cisterne izlijeva brzinom* 2 *L/h. Kad masa otopljene tvari u cisterni dosegne* 5 *kg, prekida se dovod tekućine. Kad će se to dogoditi?*

U ovakvim problemima podrazumijevamo da se u cisterni tekućina dovoljno brzo miješa da možemo smatrati da je otopina potpuno homogena.

Zadatak

U cisternu obujma 1000 *L izlijeva se vodena otopina neke tvari. Na početku je u cisterni* 800 *L tekućine, od čega je* 20 *g otopljene tvari. Tekućina s masenom koncentracijom spomenute tvari od* 50 *g/L ulijeva brzinom* 3 *L/h. Tekućina se iz cisterne izlijeva brzinom* 2 *L/h. Kad masa otopljene tvari u cisterni dosegne* 5 *kg, prekida se dovod tekućine. Kad će se to dogoditi?*

U ovakvim problemima podrazumijevamo da se u cisterni tekućina dovoljno brzo miješa da možemo smatrati da je otopina potpuno homogena.Općenito, brzina promjene količine (mase, množine, ...) bit će jednaka razlici brzina ulijevanja i izlijevanja. U našem slučaju:

$$m' = m'_{in} - m'_{out}.$$

S druge strane: $m'_{in} = V'_{in}\gamma_{in}$, $m'_{out} = V'_{out}\gamma_{out}$.

Dakle,

$$m' = 3\frac{\mathrm{L}}{\mathrm{h}} \cdot 50\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{L}} - 2\frac{\mathrm{L}}{\mathrm{h}} \cdot \frac{m(t)}{V(t)}.$$

Kako u 1 satu u cisternu dodatno uđu 3, a izađu 2 litre, slijedi da je $V(t) = V_0 + 1\frac{\mathrm{L}}{\mathrm{h}} \cdot t$. Tako dobivamo diferencijalnu jednadžbu za m:

$$m' = 150\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{h}} - 2 \cdot \frac{m(t)/\mathrm{h}}{800 + t/\mathrm{h}}$$

s početnim uvjetom $m(0) = 20$ g. Imamo dakle jednadžbu tipa

$$y' + \frac{2}{800 + x}y = 150.$$

Njeno je homogeno rješenje $y_H = \frac{C}{(800+x)^2}$, a za C se metodom varijacije konstante dobije $C = 50(800 + x) + c$, dakle je

$$m(t) = \frac{50\,\mathrm{g}}{800 + t/\mathrm{h}} + \frac{c}{(800 + t/\mathrm{h})^2}.$$

Početni uvjet povlači $c = 15950$ g. Izjednačavanjem $m(t)$ s 5000 g određujemo traženo vrijeme.

Bernoullijeva diferencijalna jednadžba

$$y' + a_0(t)y = f(t)y^n,\ n \neq 0, 1$$

Bernoullijeva diferencijalna jednadžba

$$y' + a_0(t)y = f(t)y^n,\ n \neq 0, 1$$

$$y' + \frac{4y}{t} = t^3y^2, \quad y(2) = -1, \quad t > 0$$

Bernoullijeva se jednadžba rješava supstitutcijom

$$v(t) = y(t)^{1-n},$$

Bernoullijeva diferencijalna jednadžba

$$y' + a_0(t)y = f(t)y^n, \; n \neq 0, 1$$

$$y' + \frac{4y}{t} = t^3y^2, \quad y(2) = -1, \quad t > 0$$

Bernoullijeva se jednadžba rješava supstitutcijom

$$v(t) = y(t)^{1-n},$$

$$v' = (1-n)yy' \Rightarrow \frac{v'}{1-n} + a_0(t)v = f(t).$$

Riješimo gornju jednadžbu!

Linearne diferencijalne jednadžbe višeg reda

Definicija

Linearna diferencijalna jednadžba reda n je diferencijalna jednadžba koja se može zapisati u obliku

$$y^{(n)} + \ldots + a_2(t)y'' + a_1(t)y' + a_0(t)y = f(t).$$

Ukoliko je f nulfunkcija govorimo o homogenoj linearnoj jednadžbi. U slučaju nehomogene jednadžbe, jednadžbu koja se dobije zamjenom f s nulfunkcijom zovemo pripadnom homogenom jednadžbom.
Ako su sve funkcije $a_{n-1}, \ldots, a_0$ konstantne, govorimo o linearnoj diferencijalnoj jednadžbi s konstantnim koeficijentima (homogenoj ili nehomogenoj).

Primjer

Nelinearna DJ: $y'y'' = y$

Nehomogena linearna DJ prvog reda: $y' - y\cos t = 2$

Nehomogene linearna DJ s konstantnim koeficijentima (LDJKK): $y''' - 3y' = 2e^t - t$

Homogena linearna DJ: $y'' = y'\sin t - ty$

Homogena linearna DJ s konstantnim koeficijentima (HLDJKK): $y' - 5y = 0$

Teorem

Opće rješenje svake linearne diferencijalne jednadžbe je zbroj općeg rješenja y_H pripadne homogene jednadžbe i jednog partikularnog rješenja y_P polazne jednadžbe (koje je nulfunkcija ako je polazna jednadžba homogena): $y = y_H + y_P$.

Teorem

Opće rješenje svake linearne diferencijalne jednadžbe je zbroj općeg rješenja y_H pripadne homogene jednadžbe i jednog partikularnog rješenja y_P polazne jednadžbe (koje je nulfunkcija ako je polazna jednadžba homogena): $y = y_H + y_P$.

Teorem

Skup svih rješenja homogene linearne diferencijalne jednadžbe n-tog reda je n-dimenzionalni vektorski prostor, potprostor prostora svih beskonačno puta derivabilnih funkcija (zadanih na istom otvorenom intervalu).

Homogene LDJKK

Linearno nezavisan skup n rješenja (baza prostora rješenja) HLDJ zove se fundamentalnim skupom rješenja.

Homogene LDJKK

Linearno nezavisan skup n rješenja (baza prostora rješenja) HLDJ zove se fundamentalnim skupom rješenja.
Linearna nezavisnost skupa funkcija provjerava pomoću Wronskijana: Ako Wronskijan

$$W(f_1, \dots, f_n)(t) = \begin{vmatrix} f_1(t) & \dots & f_n(t) \\ f_1'(t) & \dots & f_n'(t) \\ f_1''(t) & \dots & f_n''(t) \\ f_1^{(n-1)}(t) & \dots & f_n^{(n-1)}(t) \end{vmatrix}$$

nije nulfunkcija, funkcije $f_1, \dots, f_n$ su linearno nezavisne.

Kako naći fundamentalni skup rješenja?

$$y^{(n)} + \ldots + a_2 y'' + a_1 y' + a_0 y = 0$$

Ako je $\{y_1, \ldots, y_n\}$ fundamentalni skup, opće rješenje je $y = C_1 y_1 + \ldots + C_n y_n$.

Kako naći fundamentalni skup rješenja?

$$y^{(n)} + \ldots + a_2 y'' + a_1 y' + a_0 y = 0$$

Ako je $\{y_1, \ldots, y_n\}$ fundamentalni skup, opće rješenje je
$y = C_1 y_1 + \ldots + C_n y_n$.
test-rješenje: $y(t) = e^{\lambda t}$

Kako naći fundamentalni skup rješenja?

$$y^{(n)} + \ldots + a_2 y'' + a_1 y' + a_0 y = 0$$

Ako je $\{y_1, \ldots, y_n\}$ fundamentalni skup, opće rješenje je
$y = C_1 y_1 + \ldots + C_n y_n$.
test-rješenje: $y(t) = e^{\lambda t}$

$$\lambda^n + \ldots + a_2 \lambda^2 + a_1 \lambda + a_0 = 0$$

Kako naći fundamentalni skup rješenja?

$$y^{(n)} + \ldots + a_2 y'' + a_1 y' + a_0 y = 0$$

Ako je $\{y_1, \ldots, y_n\}$ fundamentalni skup, opće rješenje je $y = C_1 y_1 + \ldots + C_n y_n$.
test-rješenje: $y(t) = e^{\lambda t}$

$$\lambda^n + \ldots + a_2 \lambda^2 + a_1 \lambda + a_0 = 0$$

karakteristična jednadžba

Koliko najviše rješenja može imati?

Za različite λ_i funkcije $y_i(t) = \exp(\lambda_i t)$ su linearno nezavisne.

Za različite λ_i funkcije $y_i(t) = \exp(\lambda_i t)$ su linearno nezavisne.
Za opće rješenje HLDJKK 2. reda mogu nastupiti tri slučaja:

1. Karakteristična jednadžba ima dva različita realna rješenja λ_1 i λ_2: $y(t) = C_1 e^{\lambda_1 t} + C_2 e^{\lambda_2 t}$

Za različite λ_i funkcije $y_i(t) = \exp(\lambda_i t)$ su linearno nezavisne.
Za opće rješenje HLDJKK 2. reda mogu nastupiti tri slučaja:

1. Karakteristična jednadžba ima dva različita realna rješenja λ_1 i λ_2: $y(t) = C_1 e^{\lambda_1 t} + C_2 e^{\lambda_2 t}$
2. Karakteristična jednadžba ima jedno (dvostruko) realno rješenje λ: Pripadna rješenja diferencijalne jednadžbe su linearno zavisna (degeneracija) pa nam treba još jedno, s $e^{\lambda t}$ linearno nezavisno, rješenje. Ono se dobiva pokušajem s test-funkcijom oblika $y(t) = te^{\lambda t}$ i dobivamo $y(t) = C_1 e^{\lambda t} + C_2 te^{\lambda t}$.

3. Karakteristična jednadžba ima dva različita kompleksna rješenja $\lambda_{1,2} = \alpha \pm i\beta$. Uvrštavanje u formulu za opće rješenje $y(t) = c_1 e^{\lambda_1 t} + c_2 e^{\lambda_2 t}$ daje:

$$y(t) = c_1 e^{\lambda_1 t} + c_2 e^{\lambda_2 t} = e^{\alpha t}(c_1 e^{i\beta t} + c_2 e^{-i\beta t}) =$$

$$= e^{\alpha t}((c_1 + c_2)\cos(\beta t) + i(c_1 - c_2)\sin(\beta t)) =$$

$$= e^{\alpha t}(C_1 \cos(\beta t) + C_2 \sin(\beta t)).$$

3. Karakteristična jednadžba ima dva različita kompleksna rješenja $\lambda_{1,2} = \alpha \pm i\beta$. Uvrštavanje u formulu za opće rješenje $y(t) = c_1 e^{\lambda_1 t} + c_2 e^{\lambda_2 t}$ daje:

$$y(t) = c_1 e^{\lambda_1 t} + c_2 e^{\lambda_2 t} = e^{\alpha t}(c_1 e^{i\beta t} + c_2 e^{-i\beta t}) =$$

$$= e^{\alpha t}((c_1 + c_2)\cos(\beta t) + i(c_1 - c_2)\sin(\beta t)) =$$

$$= e^{\alpha t}(C_1 \cos(\beta t) + C_2 \sin(\beta t)).$$

Ako nas zanimaju samo realne funkcije y, C_1 i C_2 moraju biti realni, što je moguće postići pogodnim odabirom kompleksnih konstanti c_1 i c_2 pa imamo

$$y(t) = e^{\alpha t}(C_1 \cos(\beta t) + C_2 \sin(\beta t)).$$

Primjer

$$y'' - 4y' - 5y = 0 \quad y(t) = C_1 e^{5t} + C_2 e^{-t}.$$

Primjer

$$y'' + 4y' + 4y = 0 \quad y(t) = C_1 e^{-2t} + C_2 t e^{-2t}$$

Primjer

$$2y'' + y' + 5y = 0 \quad a = -\frac{1}{4}, b = \frac{\sqrt{39}}{4}$$

$$y(t) = e^{-t/4}\left(C_1 \cos\left(\frac{\sqrt{39}}{4}t\right) + C_2 \sin\left(\frac{\sqrt{39}}{4}t\right)\right).$$

Harmonijski oscilator

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.

Harmonijski oscilator

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.
Jednodimenzionalni slučaj: za opis položaja tijela dovoljna je jedna koordinata x ovisna o vremenu t. Kao ravnotežni položaj uzimamo poziciju 0.
Po definiciji harmonijskog oscilatora, na tijelo (mase m) na poziciji $x(t)$ djeluje sila

$$F(t) = -kx(t),$$

gdje je $k > 0$ konstanta (za titranje na opruzi, to je konstanta opruge, a gornji izraz je Hookeov zakon). Drugi Newtonov zakon povlači:

$$m\ddot{x} = -kx \Rightarrow m\ddot{x} + kx = 0.$$

Karakteristična jednadžba: $m\lambda^2 + k = 0$.

Njena rješenja: $\lambda_{1,2} = \pm i\sqrt{\frac{k}{m}}$.

Pozicija: $x(t) = C_1 \cos(\omega t) + C_2 \sin(\omega t)$ uz $\omega = \sqrt{k/m}$ (kutna frekvencija) odnosno $x(t) = A\cos(\omega t + \delta)$ (A je amplituda gibanja, a δ fazni pomak).

Karakteristična jednadžba: $m\lambda^2 + k = 0$.
Njena rješenja: $\lambda_{1,2} = \pm i\sqrt{\frac{k}{m}}$.
Pozicija: $x(t) = C_1 \cos(\omega t) + C_2 \sin(\omega t)$ uz $\omega = \sqrt{k/m}$ (kutna frekvencija) odnosno $x(t) = A\cos(\omega t + \delta)$ (A je amplituda gibanja, a δ fazni pomak).
Kako se ovdje radi o fizikalnom problemu, uobičajeno je zadavanje početnih uvjeta:

$$x(0\,\mathrm{s}) = x_0, \quad x'(0\,\mathrm{s}) = v_0.$$

Deriviranjem $x(t)$ 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

$$x(t) = x_0 \cos(\omega t) + \frac{v_0}{\omega} \sin(\omega t).$$

Zaključujemo: Ako na tijelo u svakoj poziciji djeluje samo sila oblika $F = -kx$ (s pozitivnom konstantom k), rezultat je periodičko gibanje tijela, s temeljnim periodom $\omega = \sqrt{k/m}$.

Harmonijski oscilator s trenjem

Na tijelo uz silu $-kx(t)$ djeluje i sila trenja $-f\dot{x}(t)$ ($f > 0$ je konstanta trenja): $F = -kx + fv$, tj.

$$m\ddot{x} + f\dot{x} + kx = 0 \quad m\lambda^2 + f\lambda + k = 0;\ \Delta = f^2 - 4mk$$

- Za $\Delta > 0$ (tj. $f > 2\sqrt{mk}$) $\lambda_{1,2} = \frac{-f\pm\sqrt{\Delta}}{2m} < 0$ (jer je $-f - \sqrt{f^2 - 4mk} < -f + \sqrt{f^2 - 4mk} < -f + \sqrt{f^2} = 0$) pa
$$x(t) = C_1 e^{\lambda_1 t} + C_2 e^{\lambda_2 t} \to 0 (t \to \infty)$$
- Za $\Delta = 0$, tj. $f = 2\sqrt{mk}$ dobivamo $\lambda = -\frac{f}{2m} < 0$ i
$$x(t) = C_1 e^{\lambda t} + C_2 t e^{\lambda t} \to 0 (t \to \infty)$$

(zašto?).

Harmonijski oscilator s trenjem

Na tijelo uz silu $-kx(t)$ djeluje i sila trenja $-f\dot{x}(t)$ ($f > 0$ je konstanta trenja): $F = -kx + fv$, tj.

$$m\ddot{x} + f\dot{x} + kx = 0 \quad m\lambda^2 + f\lambda + k = 0;\ \Delta = f^2 - 4mk$$

- Za $\Delta > 0$ (tj. $f > 2\sqrt{mk}$) $\lambda_{1,2} = \frac{-f\pm\sqrt{\Delta}}{2m} < 0$ (jer je $-f - \sqrt{f^2 - 4mk} < -f + \sqrt{f^2 - 4mk} < -f + \sqrt{f^2} = 0$) pa
$$x(t) = C_1 e^{\lambda_1 t} + C_2 e^{\lambda_2 t} \to 0 (t \to \infty)$$
- Za $\Delta = 0$, tj. $f = 2\sqrt{mk}$ dobivamo $\lambda = -\frac{f}{2m} < 0$ i
$$x(t) = C_1 e^{\lambda t} + C_2 t e^{\lambda t} \to 0 (t \to \infty)$$
(zašto?).
- Za $\Delta < 0$, tj. $f < 2\sqrt{mk}$, $\lambda_{1,2} = \alpha \pm i\beta$, uz $\alpha = -\frac{f}{2m} < 0$ i $\beta = \frac{\sqrt{4mk - f^2}}{2m}$ pa je
$$x(t) = e^{\alpha t}(C_1 \cos(\beta t) + C_2 \sin(\beta t)) \to 0 (t \to \infty)$$

Digresija: Kvantnomehanički harmonijski oscilator

Kvantna verzija kinetičke energije jednodimenzijskog gibanja je

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2},$$

a potencijalne energije $\hat{V} = V(x)\cdot$, gdje je je $V(x) = \frac{k}{2}x^2$. Dakle,

$$\hat{H}\psi = (\hat{T} + \hat{V})\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{k}{2}x^2\psi(x),$$

Digresija: Kvantnomehanički harmonijski oscilator

Kvantna verzija kinetičke energije jednodimenzijskog gibanja je

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2},$$

a potencijalne energije $\hat{V} = V(x)\cdot$, gdje je je $V(x) = \frac{k}{2}x^2$. Dakle,

$$\hat{H}\psi = (\hat{T} + \hat{V})\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{k}{2}x^2\psi(x),$$

gdje je $\psi = \psi(x)$ i što po Schrödingerovoj jednadžbi mora biti jednako $E\psi$.

Digresija: Kvantnomehanički harmonijski oscilator

Kvantna verzija kinetičke energije jednodimenzijskog gibanja je

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2},$$

a potencijalne energije $\hat{V} = V(x)\cdot$, gdje je je $V(x) = \frac{k}{2}x^2$. Dakle,

$$\hat{H}\psi = (\hat{T} + \hat{V})\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{k}{2}x^2\psi(x),$$

gdje je $\psi = \psi(x)$ i što po Schrödingerovoj jednadžbi mora biti jednako $E\psi$. Dakle: Jednadžba kvantnomehaničkog (jednodimenzionalnog) harmonijskog oscilatora je

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + \left(\frac{k}{2}x^2 - E\right)\psi = 0.$$

Kakva je ova diferencijalna jednadžba? Zašto je teža za riješiti od jednadžbe klasičnog harmonijskog oscilatora?

Jedno rješenje SJ za kvantni HO je

$$\psi_0(t) = \exp\left(-\frac{1}{2\hbar}\sqrt{km}x^2\right).$$

Uvrštavanje tog rješenja natrag u jednadžbu $\Rightarrow E_0 = \frac{\hbar}{2m}\sqrt{km}$.

Jedno rješenje SJ za kvantni HO je

$$\psi_0(t) = \exp\left(-\frac{1}{2\hbar}\sqrt{km}x^2\right).$$

Uvrštavanje tog rješenja natrag u jednadžbu $\Rightarrow E_0 = \frac{\hbar}{2m}\sqrt{km}$.
Dakle, za svojstvenu vrijednost $E_0 = \frac{\hbar}{2m}\sqrt{km}$ od $\hat{H}$ jedan svojstveni vektor je $\psi_0(x) = \exp\left(-\frac{1}{2\hbar}\sqrt{km}x^2\right)$.
Ovo je samo jedno od beskonačno mnogo rješenja $(E_\nu, \psi_\nu$, $\nu = 0, 1, 2, \ldots)$: ovo je rješenje s najnižom mogućom energijom (E_0 se zove energija nulte točke).

Opći klasični harmonijski oscilator

Ako na tijelo koje oscilira (po pravcu) djeluje i vanjska sila $f(t)$, drugi Newtonov zakon daje *nehomogenu* LDJ2KK:

$$m\ddot{x}(+f\dot{x}) + kx = f(t)$$

s rješenjem oblika

$$x(t) = x_H(t) + x_P(t),$$

gdje je x_H opće rješenje za harmonijski oscilator bez vanjske sile (bez ili sa trenja), a x_P partikularno rješenje gornje jednadžbe.

Primjer

Isti tip jednadžbe dobije se za strujni krug s otpornikom konstatnog otpora R, kondenzatorom konstantnog kapaciteta C, zavojnicom konstantne induktivnosti L, izvora napona iznosa $E(t)$ i sklopke koja se zatvara u početnom trenutku ($I(0\,\mathrm{s}) = 0\,\mathrm{A}$):
$L\frac{\mathrm{d}^2Q}{\mathrm{d}t^2} + R\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}t} + \frac{1}{C}Q = E(t).$

Kako odrediti partikularno rješenje?

Metoda neodređenih koeficijenata

Ovisno o nehomogenom članu $f(t)$ pretpostavimo oblik $y_P(t)$, koji sadrži jednu ili više neodređenih konstanti koje određjemo tako da y_P uvrstimo u polaznu LDJKK.

Metoda neodređenih koeficijenata

Ovisno o nehomogenom članu $f(t)$ pretpostavimo oblik $y_P(t)$, koji sadrži jednu ili više neodređenih konstanti koje određjemo tako da y_P uvrstimo u polaznu LDJKK.

Ova metoda je primjenjiva ako je $f(t)$ umnožak

- polinoma (konstantna funkcija je polinom stupnja 0) i/ili
- eksponencijalne funkcije $\exp(\alpha t) = a^t$ $(\alpha = \ln a)$ i/ili
- oblika $c \cos(\beta t) + d \sin(\beta t)$, pri čemu c ili d može biti 0.

Metoda neodređenih koeficijenata

Ovisno o nehomogenom članu $f(t)$ pretpostavimo oblik $y_P(t)$, koji sadrži jednu ili više neodređenih konstanti koje određjemo tako da y_P uvrstimo u polaznu LDJKK.

Ova metoda je primjenjiva ako je $f(t)$ umnožak

- polinoma (konstantna funkcija je polinom stupnja 0) i/ili
- eksponencijalne funkcije $\exp(\alpha t) = a^t$ $(\alpha = \ln a)$ i/ili
- oblika $c\cos(\beta t) + d\sin(\beta t)$, pri čemu c ili d može biti 0.

Tada se za $y_P(t)$ pretpostavlja isti oblik kakav ima $f(t)$, s tim da se svi konkretni koeficijenti polinoma, te c i d zamijene neodređenim koeficijentima.

Primjer

$$f(t) = 6 \cdot 3^t \cdot \cos(2t) \Rightarrow y_P(t) = A \cdot 3^t \cdot (B\cos(2t) + C\sin(2t));$$

Primjer

$$f(t) = 6 \cdot 3^t \cdot \cos(2t) \Rightarrow y_P(t) = A \cdot 3^t \cdot (B\cos(2t) + C\sin(2t));$$

$$f(t) = t^2 e^{-t} \Rightarrow y_P(t) = (At^2 + Bt + C)e^{-t}$$

Primjer

$$f(t) = 6 \cdot 3^t \cdot \cos(2t) \Rightarrow y_P(t) = A \cdot 3^t \cdot (B\cos(2t) + C\sin(2t));$$

$$f(t) = t^2 e^{-t} \Rightarrow y_P(t) = (At^2 + Bt + C)e^{-t}$$

Ako je pretpostavljeni y_P već uključen u y_H (tj. ako je pretpostavljeni oblik y_P partikularno rješenje pripadne homogene jednadžbe), opisani oblik y_P se *prije* izračunavanja koeficijenata množi s najmanjom mogućom potencijom nezavisne varijable t tako da dobijemo y_P koji nije uključen u y_H.

Primjer

$$y'' - 6y' + 9y = \exp(3t) \quad y_H(t) = C_1\exp(3t) + C_2 t\exp(3t)$$

$$y_P(t) = A\exp(3t) \rightsquigarrow y_P(t) = At^2\exp(3t)$$

Ako je $f(t)$ zbroj više članova opisanog oblika $(f(t) = f_1(t) + f_2(t) + \ldots)$, onda se zasebno odredi po jedan $y_{P,i}$ za svaki f_i, a ukupni y_P je zbroj dobivenih $y_{P,i}$-ova:

Primjer

$$y'' - 4y' - 12y = 8e^{6t} + 216t^2 \qquad \lambda^2 - 4\lambda - 12 = 0$$

$$y_H(t) = C_1 e^{-2t} + C_2 e^{6t};$$

Ako je $f(t)$ zbroj više članova opisanog oblika $(f(t) = f_1(t) + f_2(t) + \ldots)$, onda se zasebno odredi po jedan $y_{P,i}$ za svaki f_i, a ukupni y_P je zbroj dobivenih $y_{P,i}$-ova:

Primjer

$$y'' - 4y' - 12y = 8e^{6t} + 216t^2 \qquad \lambda^2 - 4\lambda - 12 = 0$$

$$y_H(t) = C_1 e^{-2t} + C_2 e^{6t};$$

$$y_{P,1} = Ae^{6t} \Rightarrow y_{P,1} = Ate^{6t} \Rightarrow y_{P,1} = te^{6t};$$

Ako je $f(t)$ zbroj više članova opisanog oblika $(f(t) = f_1(t) + f_2(t) + \ldots)$, onda se zasebno odredi po jedan $y_{P,i}$ za svaki f_i, a ukupni y_P je zbroj dobivenih $y_{P,i}$-ova:

Primjer

$$y'' - 4y' - 12y = 8e^{6t} + 216t^2 \qquad \lambda^2 - 4\lambda - 12 = 0$$

$$y_H(t) = C_1 e^{-2t} + C_2 e^{6t};$$

$$y_{P,1} = Ae^{6t} \Rightarrow y_{P,1} = Ate^{6t} \Rightarrow y_{P,1} = te^{6t};$$

$$y_{P,2} = At^2 + Bt + C \Rightarrow y_{P,2} = -18t^2 + 12t - 7;$$

Ako je $f(t)$ zbroj više članova opisanog oblika $(f(t) = f_1(t) + f_2(t) + \ldots)$, onda se zasebno odredi po jedan $y_{P,i}$ za svaki f_i, a ukupni y_P je zbroj dobivenih $y_{P,i}$-ova:

Primjer

$$y'' - 4y' - 12y = 8e^{6t} + 216t^2 \qquad \lambda^2 - 4\lambda - 12 = 0$$

$$y_H(t) = C_1 e^{-2t} + C_2 e^{6t};$$

$$y_{P,1} = Ae^{6t} \Rightarrow y_{P,1} = Ate^{6t} \Rightarrow y_{P,1} = te^{6t};$$

$$y_{P,2} = At^2 + Bt + C \Rightarrow y_{P,2} = -18t^2 + 12t - 7;$$

$$y = C_1 e^{-2t} + C_2 e^{6t} + te^{6t} - 18t^2 + 12t - 7.$$

Metoda varijacije konstanti

1. Za konstante u y_H se pretpostavi da ovise o t i tako modificirani y_H se uvrsti natrag u polaznu jednadžbu.

Metoda varijacije konstanti

1. Za konstante u y_H se pretpostavi da ovise o t i tako modificirani y_H se uvrsti natrag u polaznu jednadžbu.
2. Odgovaraju nam bilo koje funkcije C_1 i C_2 (nije potrebno odrediti sve moguće), pa dodajemo uvjet:

$$C_1' y_1 + C_2' y_2 = 0,$$

čime se rezultat uvrštavanja $y(t) = C_1(t)y_1(t) + C_2(y)y_2(t)$ u $y'' + a_1 y' + a_0 y = f(t)$ skraćuje na

$$C_1' y_1' + C_2' y_2' = f(t).$$

3. Dakle, dobili smo 2×2-sustav za C_1' i C_2' iz kog možemo odrediti C_1' i C_2', pa onda integriranjem i C_1 i C_2.

Sustav $C_1'y_1 + C_2'y_2 = 0$, $C_1'y_1' + C_2'y_2' = f$ načelno možemo rješavati bilo kojom metodom, ali posebno zgodna je ovdje primjena Cramerovog pravila:

$$D = \begin{vmatrix} y_1 & y_2 \\ y_1' & y_2' \end{vmatrix} = W(y_1, y_2),$$

$$C_1' = \frac{-f\, y_2}{W(y_1, y_2)}, \quad C_2' = \frac{f\, y_1}{W(y_1, y_2)}.$$

Primjer

$$y'' + y = \operatorname{tg} t \Rightarrow y(t) = C_1(t)\sin t + C_2(t)\cos t;$$

$$C_1'(t)\sin t + C_2'(t)\cos t = 0,\ C_1'(t)\cos t - C_2'(t)\sin t = \operatorname{tg} t.$$

Sustav $C_1'y_1 + C_2'y_2 = 0$, $C_1'y_1' + C_2'y_2' = f$ načelno možemo rješavati bilo kojom metodom, ali posebno zgodna je ovdje primjena Cramerovog pravila:

$$D = \begin{vmatrix} y_1 & y_2 \\ y_1' & y_2' \end{vmatrix} = W(y_1, y_2),$$

$$C_1' = \frac{-f\, y_2}{W(y_1, y_2)}, \quad C_2' = \frac{f\, y_1}{W(y_1, y_2)}.$$

Primjer

$$y'' + y = \operatorname{tg} t \Rightarrow y(t) = C_1(t) \sin t + C_2(t) \cos t;$$

$$C_1'(t) \sin t + C_2'(t) \cos t = 0,\ C_1'(t) \cos t - C_2'(t) \sin t = \operatorname{tg} t.$$

$$W(y_1, y_2) = -\sin^2(t) - \cos^2(t) = -1;\ \ C_1' = \sin t;\ \ C_2' = -\frac{\sin^2 t}{\cos t}$$

$$C_1(t) = -\cos t + c_1,\ \ C_2(t) = \sin t - \ln \left| \operatorname{tg} \left(\frac{t}{2} + \frac{\pi}{4} \right) \right| + c_2$$

Sustavi diferencijalnih jednadžbi

Sustavi običnih diferencijalnih jednadžbi sastoje se od više običnih diferencijalnih jednadžbi koje opisuju vezu između više nepoznatih funkcija iste nezavisne varijable t i njihovih derivacija.

Epidemiološki SIR-model

S(usceptible)-I(nfectious)-R(emoved): $S \to I \to R$
Inficiranje ovisi o kontaktu S i I: $\dot{S} = -\lambda\, I\, S$;
Brzina oporavka je razmjerna I: $\dot{R} = \gamma\, I$;
$\dot{I} + \dot{S} + \dot{R} = 0 \Rightarrow \dot{I} = \lambda\, IS - \gamma\, I$.
$R_0 = \lambda/\gamma$=stopa oporavka/stopa zaražavanja.

Primjer

Ukupna kemijska promjena je rezultat osnovnih koraka na molekulskoj razini (elementarni procesi):

Elementarni proces	*Zakon brzine*
$A \longrightarrow P$	$v = k[\mathrm{A}]$
$2A \longrightarrow P$	$v = k[\mathrm{A}]^2$
$A + B \longrightarrow P$	$v = k[\mathrm{A}][\mathrm{B}]$
$2A + B \longrightarrow P$	

Mehanizam predravnoteže

$$\mathrm{A} + \mathrm{B} \rightleftharpoons \mathrm{C} \longrightarrow \mathrm{D}$$

$$-\frac{\mathrm{d}[\mathrm{A}]}{\mathrm{d}t} = k_1[\mathrm{A}][\mathrm{B}] - k_{-1}[\mathrm{C}], \quad -\frac{\mathrm{d}[\mathrm{B}]}{\mathrm{d}t} = k_1[\mathrm{A}][\mathrm{B}] - k_{-1}[\mathrm{C}],$$

$$\frac{\mathrm{d}[\mathrm{C}]}{\mathrm{d}t} = k_1[\mathrm{A}][\mathrm{B}] - k_{-1}[\mathrm{C}] - k_2[\mathrm{C}], \quad \frac{\mathrm{d}[\mathrm{D}]}{\mathrm{d}t} = k_2[\mathrm{C}].$$

Sustavi linearnih diferencijalnih jednadžbi

Pogledajmo

$$y'' + a_1 y' + a_0 y = 0.$$

Uvedimo novu nepoznatu funkciju z definiranu sa $z = y'$. Npr. ako je y put, z je brzina.

Sustavi linearnih diferencijalnih jednadžbi

Pogledajmo

$$y'' + a_1 y' + a_0 y = 0.$$

Uvedimo novu nepoznatu funkciju z definiranu sa $z = y'$. Npr. ako je y put, z je brzina.

$$z = y' \Rightarrow z' = y'' = -a_1 y' - a_0 y = -a_1 z - a_0 y \Rightarrow$$

$$y' = 0 \cdot y + 1 \cdot z$$

$$z' = -a_0 y - a_1 z.$$

Sustavi linearnih diferencijalnih jednadžbi

Pogledajmo

$$y'' + a_1 y' + a_0 y = 0.$$

Uvedimo novu nepoznatu funkciju z definiranu sa $z = y'$. Npr. ako je y put, z je brzina.

$$z = y' \Rightarrow z' = y'' = -a_1 y' - a_0 y = -a_1 z - a_0 y \Rightarrow$$

$$y' = 0 \cdot y + 1 \cdot z$$

$$z' = -a_0 y - a_1 z.$$

Kraće:

$$Y' = A \cdot Y$$

uz $Y = \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}$, a $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -a_0 & -a_1 \end{pmatrix}$.

Analogno je svaka linearna diferencijalna jednadžba reda n za y ekvivalentna sustavu s n linearnih diferencijalnih jednadžbi reda 1 (po jedna za y, y', ..., y^{n-1}).

Analogno je svaka linearna diferencijalna jednadžba reda n za y ekvivalentna sustavu s n linearnih diferencijalnih jednadžbi reda 1 (po jedna za y, y', ..., y^{n-1}).
Sustav linearnih diferencijalnih jednadžbi 1. reda (s nepoznatim funkcijama $y_1, \ldots, y_n$) je sustav oblika

$$Y' = A \cdot Y + B,$$

$$Y' = \begin{pmatrix} y_1' \\ y_2' \\ \vdots \\ y_n' \end{pmatrix}, \; Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \; B = \begin{pmatrix} b_1(t) \\ b_2(t) \\ \vdots \\ b_n(t) \end{pmatrix}, \; A = \left(a_{ij}(t) \right)_{i,j}.$$

Sustav je s konstantnim koeficijentima ako su sve a_{ij} konstantne, tj. ako je $A \in M_n$, a homogen je ako je $B = 0_{n,1}$.

Primjer

Sustav linearnih diferencijalnih jednadžbi prvog reda s konstantnim koeficijentima je primjerice

$$y' = 2y - z + e^t,$$

$$z' = -y + 3z - t.$$

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

$$y'' = 5y' + 6y + t - 2e^t.$$

Odredimo li njeno rješenje y, funkciju z možemo dobiti iz druge diferencijalne jednadžbe polaznog sustava.

U primjeru s HLDJKK2, karakteristična jednadžba matrice A je

$$(-\lambda)(-a_1 - \lambda) + a_0 = 0 \Leftrightarrow \lambda^2 + a_1\lambda + a_0 = 0.$$

U primjeru s HLDJKK2, karakteristična jednadžba matrice A je

$$(-\lambda)(-a_1-\lambda)+a_0=0 \Leftrightarrow \lambda^2+a_1\lambda+a_0=0.$$

Teorem

Svaka homogena linearna diferencijalna jednadžba reda n ekvivalentna je homogenom sustavu linearnih diferencijalnih jednadžbi 1. reda, koji se u matričnom obliku može zapisati kao $Y'=AY$, gdje je Y matrica-stupac koja sadrži nepoznate funkcije sustava, tj. izvornu nepoznatu funkciju y i redom njezine derivacije do reda $n-1$.
Pritom je karakteristična jednadžba polazne homogene linearne diferencijalne jednadžbe reda n točno jednaka karakterističnoj jednadžbi matrice A, dakle su njezina rješenja svojstvene vrijednosti od A.

Teorem

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.

Teorem

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

Opće rješenje nehomogenog sustava $Y' = AY + B$ je zbroj općeg rješenja pripadnog homogenog sustava $Y' = AY$ i jednog partikularnog rješenja.

Rješavanje homogenih sustava s konstantnim koeficijentima

Pretpostavimo li da je rješenje oblika

$$(y_1, \ldots, y_n) = e^{\lambda t}(y_{1,0}, \ldots, y_{n,0}),$$

gdje su $y_{i,0}$ i λ konstante, dobijemo

$$(y_1', \ldots, y_n') = \lambda(y_1, \ldots, y_n)$$

pa iz $Y' = AY$ dobivamo da λ i Y_0 moraju biti takvi da vrijedi

$$AY_0 = \lambda Y_0.$$

Rješavanje homogenih sustava s konstantnim koeficijentima

Pretpostavimo li da je rješenje oblika

$$(y_1, \ldots, y_n) = e^{\lambda t}(y_{1,0}, \ldots, y_{n,0}),$$

gdje su $y_{i,0}$ i λ konstante, dobijemo

$$(y_1', \ldots, y_n') = \lambda(y_1, \ldots, y_n)$$

pa iz $Y' = AY$ dobivamo da λ i Y_0 moraju biti takvi da vrijedi

$$AY_0 = \lambda Y_0.$$

Za skup od n linearno nezavisnih svojstvenih vektora $Y_{0,1}, \ldots, Y_{0,n}$ opće rješenje našeg sustava je dano s

$$Y = C_1 e^{\lambda_1 t} Y_{0,1} + \ldots + C_n e^{\lambda_n t} Y_{0,n}.$$

Primjer

Promotrimo mehanizam $A \longrightarrow B \rightleftharpoons C$*, uz pretpostavku da su početne koncentracije od B i C iznose* 0. *Traži se vremenska ovisnost koncentracije produkta C. Odgovarajući sustav DJ je*

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}c_\mathrm{A}}{\mathrm{d}t} &= -k_1 c_\mathrm{A}, \\ \frac{\mathrm{d}c_\mathrm{B}}{\mathrm{d}t} &= k_1 c_\mathrm{A} - k_2 c_\mathrm{B} + k_{-2} c_\mathrm{C}, \\ \frac{\mathrm{d}c_\mathrm{C}}{\mathrm{d}t} &= k_2 c_\mathrm{B} - k_{-2} c_\mathrm{C} \end{aligned} \quad .$$

Primjer

Promotrimo mehanizam $A \longrightarrow B \rightleftharpoons C$, *uz pretpostavku da su početne koncentracije od* B *i* C *iznose* 0. *Traži se vremenska ovisnost koncentracije produkta* C. *Odgovarajući sustav DJ je*

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}c_\mathrm{A}}{\mathrm{d}t} &= -k_1 c_\mathrm{A},\\ \frac{\mathrm{d}c_\mathrm{B}}{\mathrm{d}t} &= k_1 c_\mathrm{A} - k_2 c_\mathrm{B} + k_{-2} c_\mathrm{C}, \ .\\ \frac{\mathrm{d}c_\mathrm{C}}{\mathrm{d}t} &= k_2 c_\mathrm{B} - k_{-2} c_\mathrm{C}\end{aligned}$$

$$A = \begin{pmatrix} -k_1 & 0 & 0 \\ k_1 & -k_2 & k_{-2} \\ 0 & k_2 & -k_{-2} \end{pmatrix}$$

Primjer

Promotrimo mehanizam $A \longrightarrow B \rightleftharpoons C$*, uz pretpostavku da su početne koncentracije od B i C iznose* 0*. Traži se vremenska ovisnost koncentracije produkta C. Odgovarajući sustav DJ je*

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}c_{\mathrm{A}}}{\mathrm{d}t} &= -k_1 c_{\mathrm{A}}, \\ \frac{\mathrm{d}c_{\mathrm{B}}}{\mathrm{d}t} &= k_1 c_{\mathrm{A}} - k_2 c_{\mathrm{B}} + k_{-2} c_{\mathrm{C}}, \\ \frac{\mathrm{d}c_{\mathrm{C}}}{\mathrm{d}t} &= k_2 c_{\mathrm{B}} - k_{-2} c_{\mathrm{C}} \end{aligned} .$$

$$A = \begin{pmatrix} -k_1 & 0 & 0 \\ k_1 & -k_2 & k_{-2} \\ 0 & k_2 & -k_{-2} \end{pmatrix} \Rightarrow \lambda_1 = 0, \lambda_2 = -k_1, \lambda_3 = -k_2 - k_{-2}$$

Primjer

Promotrimo mehanizam $A \longrightarrow B \rightleftharpoons C$*, uz pretpostavku da su početne koncentracije od B i C iznose* 0*. Traži se vremenska ovisnost koncentracije produkta C. Odgovarajući sustav DJ je*

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}c_{\mathrm{A}}}{\mathrm{d}t} &= -k_1 c_{\mathrm{A}},\\ \frac{\mathrm{d}c_{\mathrm{B}}}{\mathrm{d}t} &= k_1 c_{\mathrm{A}} - k_2 c_{\mathrm{B}} + k_{-2} c_{\mathrm{C}},\ .\\ \frac{\mathrm{d}c_{\mathrm{C}}}{\mathrm{d}t} &= k_2 c_{\mathrm{B}} - k_{-2} c_{\mathrm{C}}\end{aligned}$$

$$A = \begin{pmatrix} -k_1 & 0 & 0 \\ k_1 & -k_2 & k_{-2} \\ 0 & k_2 & -k_{-2} \end{pmatrix} \Rightarrow \lambda_1 = 0, \lambda_2 = -k_1, \lambda_3 = -k_2 - k_{-2}$$

$$\Rightarrow Y_{0,1} = \begin{pmatrix} 0 \\ k_{-2} \\ k_2 \end{pmatrix}, Y_{0,2} = \begin{pmatrix} k_1 - k_2 - k_{-2} \\ -k_1 + k_{-2} \\ k_2 \end{pmatrix}, Y_{0,3} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{pmatrix} c_A \\ c_B \\ c_C \end{pmatrix} = C_1 Y_{0,1} + C_2 e^{-k_1 t} Y_{0,2} + C_3 e^{-(k_2+k_{-2})t} Y_{0,3}.$$

$$\begin{pmatrix} c_A \\ c_B \\ c_C \end{pmatrix} = C_1 Y_{0,1} + C_2 e^{-k_1 t} Y_{0,2} + C_3 e^{-(k_2+k_{-2})t} Y_{0,3}.$$

Iz početnih uvjeta dobivamo:

$$C_1 = \frac{c_{A,0}}{k_2 + k_{-2}}, C_2 = \frac{c_{A,0}}{k_1 - k_2 - k_{-2}}, C_3 = \frac{c_{A,0} k_1 k_2}{(k_1 - k_2 - k_{-2})(k_2 + k_{-2})}$$

pa je

$$c_C(t) = \frac{c_{A,0}\, k_2}{k_2 + k_{-2}} + \frac{c_{A,0}\, k_2\, e^{-k_1 t}}{k_1 - k_2 - k_{-2}} - \frac{c_{A,0}\, k_1\, k_2\, e^{-(k_2+k_{-2})t}}{(k_1 - k_2 - k_{-2})(k_2 + k_{-2})}$$