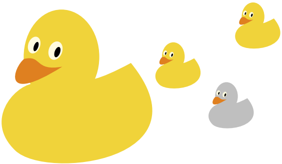
14. predavanje: Sustavi diferencijalnih jednadžbi

Franka Miriam Brückler



Reakcijski mehanizmi

Ukupna kemijska promjena je rezultat osnovnih koraka na molekulskoj razini (elementarnih procesa)

Elementarni proces	Zakon brzine
$A \longrightarrow P$	$v = k[A]$
$2A \longrightarrow P$	$v = k[A]^2$
$A + B \longrightarrow P$	$v = k[A][B]$
$2A + B \longrightarrow P$	$v = k[A]^2[B]$
$A + B + C \longrightarrow P$	$v = k[A][B][C]$

Mehanizam predravnoteže

$$A + B \rightleftharpoons C \longrightarrow D$$

Koliko elementarnih procesa imamo? Koji su to? Za svaki napišite zakon brzine!

Sustavi diferencijalnih jednadžbi

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

Primjer

Mehanizmu predravnoteže odgovara sustav

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

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

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

$$\frac{\mathrm{d}[\mathrm{D}]}{\mathrm{d}t} = k_2[\mathrm{C}].$$

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

$$y' = z$$

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

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

$$y' = z$$

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

Obrnuto, ako je

$$y' = ay + bz + f(t),$$

$$z' = cy + dz + g(t)$$

onda je

$$y'' - (a + d)y' + (ad - bc)y = -df(t) - g(t)$$

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

$$y' = z$$

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

Obrnuto, ako je

$$y' = ay + bz + f(t),$$

$$z' = cy + dz + g(t)$$

onda je

$$y'' - (a+d)y' + (ad - bc)y = -df(t) - g(t)$$

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

Sustav linearnih diferencijalnih jednadžbi 1. reda (s nepoznatim funkcijama $y_1, \dots, y_n$) 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

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 $B = 0_{n,1}$ nulmatrica.

Teorem

Svaka homogena linearna diferencijalna jednadžba reda n ekvivalentna je homogenom sustavu $Y' = AY$ linearnih diferencijalnih jednadžbi 1. reda. Ako se radi o situaciji s konstantnim koeficijentima, karakteristična jednadžba polazne homogene linearne diferencijalne jednadžbe reda n je jednaka karakterističnoj jednadžbi matrice A.

Teorem

Skup svih rješenja Y homogenog sustava $Y' = AY$ linearnih diferencijalnih jednadžbi prvog reda je n-dimenzionalni vektorski prostor.

Teorem

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

$$(y_1, \ldots, y_n) = e^{\lambda t}(y_{1,0}, \ldots, y_{n,0}) \Rightarrow (y_1', \ldots, y_n') = \lambda(y_1, \ldots, y_n)$$

$$(y_1, \ldots, y_n) = e^{\lambda t}(y_{1,0}, \ldots, y_{n,0}) \Rightarrow (y_1', \ldots, y_n') = \lambda(y_1, \ldots, y_n)$$

$$AY_0 = \lambda Y_0.$$

$$(y_1, \ldots, y_n) = e^{\lambda t}(y_{1,0}, \ldots, y_{n,0}) \Rightarrow (y_1', \ldots, y_n') = \lambda(y_1, \ldots, y_n)$$

$$AY_0 = \lambda Y_0.$$

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

$$(y_1, \ldots, y_n) = e^{\lambda t}(y_{1,0}, \ldots, y_{n,0}) \Rightarrow (y_1', \ldots, y_n') = \lambda(y_1, \ldots, y_n)$$

$$AY_0 = \lambda Y_0.$$

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

Zadatak

Riješite na oba načina:

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

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

Zadatak

Promotrimo mehanizam $\mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{B} \rightleftharpoons \mathrm{C}$, *uz pretpostavku da su početne koncentracije od* B *i* C *jednake* 0. *Odredite ravnotežnu koncentraciju od* C*!*

Zadatak

Promotrimo mehanizam $\mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{B} \rightleftharpoons \mathrm{C}$, *uz pretpostavku da su početne koncentracije od* B *i* C *jednake* 0. *Odredite ravnotežnu koncentraciju od* C*!*

$$[\mathrm{A}]_0 \neq 0, [\mathrm{B}]_0 = [\mathrm{C}]_0 = 0 \quad [\mathrm{C}]_\infty = \lim_{t \to +\infty} [\mathrm{C}] = ?$$

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

Zadatak

Promotrimo mehanizam $\mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{B} \rightleftharpoons \mathrm{C}$, *uz pretpostavku da su početne koncentracije od* B *i* C *jednake* 0. *Odredite ravnotežnu koncentraciju od* C*!*

$$[\mathrm{A}]_0 \neq 0, [\mathrm{B}]_0 = [\mathrm{C}]_0 = 0 \quad [\mathrm{C}]_\infty = \lim_{t \to +\infty} [\mathrm{C}] = ?$$

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

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

$$k_A(\lambda) = -\lambda(\lambda + k_1)((\lambda + k_2 + k_{-2})$$

$$\sigma(A) = \{0, -k_1, -k_2 - k_{-2}\}$$

$$Y_{0,1} = (0, k_{-2}, k_2)^t,$$

$$Y_{0,2} = (k_1 - k_2 - k_{-2}, -k_1 + k_{-2}, k_2)^t,$$

$$Y_{0,3} = (0, 1, -1)^t$$

$$\sigma(A) = \{0, -k_1, -k_2 - k_{-2}\}$$

$$Y_{0,1} = (0, k_{-2}, k_2)^t,$$

$$Y_{0,2} = (k_1 - k_2 - k_{-2}, -k_1 + k_{-2}, k_2)^t,$$

$$Y_{0,3} = (0, 1, -1)^t$$

$$([\mathrm{A}], [\mathrm{B}], [\mathrm{C}])^t = C_1 Y_{0,1} + C_2 e^{-k_1 t} Y_{0,2} + C_3 e^{-(k_2 + k_{-2})t} Y_{0,3}.$$

$$\sigma(A) = \{0, -k_1, -k_2 - k_{-2}\}$$

$$Y_{0,1} = (0, k_{-2}, k_2)^t,$$

$$Y_{0,2} = (k_1 - k_2 - k_{-2}, -k_1 + k_{-2}, k_2)^t,$$

$$Y_{0,3} = (0, 1, -1)^t$$

$$([\mathrm{A}], [\mathrm{B}], [\mathrm{C}])^t = C_1 Y_{0,1} + C_2 e^{-k_1 t} Y_{0,2} + C_3 e^{-(k_2+k_{-2})t} Y_{0,3}.$$

$$C_1 = \frac{[\mathrm{A}]_0}{k_2 + k_{-2}}, C_2 = \frac{[\mathrm{A}]_0}{k_1 - k_2 - k_{-2}}, C_3 = \frac{[\mathrm{A}]_0 k_1 k_2}{(k_1 - k_2 - k_{-2})(k_2 + k_{-2})}.$$

$$\frac{[\mathrm{C}]}{[\mathrm{A}]_0 k_2} = \frac{1}{k_2 + k_{-2}} + \frac{e^{-k_1 t}}{k_1 - k_2 - k_{-2}} - \frac{k_1 e^{-(k_2+k_{-2})t}}{(k_1 - k_2 - k_{-2})(k_2 + k_{-2})}$$

$$[\mathrm{C}]_\infty = \frac{[\mathrm{A}]_0 k_2}{k_2 + k_{-2}}$$