V. Differenciálegyenletek

A differenciálegyenletek megoldásának ismerete az élet nagyon sok területén, beleértve a fizikát, a kvantumkémiát, a fizikai kémiát és a kémiai reakciókinetikát is elsőrendű fontosságú. Nagyon sok törvény differenciálegyenletek megoldását igényli, vagy azon alapul.

A fizikában például minden, a mozgásegyenletben fellépő erő differenciálegyenletre vezet és ennek megoldását igényli. A kvantummechanika alapegyenletei, az időtől függő, illetve az időtől független Schrödinger-egyenlet is differenciálegyenlet.

Mi egyelőre alapvetően a fizikai kémián belül is a reakciókinetikára koncentrálunk a feladatválasztásoknál.

Előfordulnak a másodrendűnél magasabb rendű differenciálegyenletek is (pl. $\left(\nabla^2\right)^2\psi = 0$), de ritkán, így elsősorban az első- és másodrendű differenciálegyenletekkel és azok megoldási lehetőségeivel kell megismerkednünk.

Fogalmak

A differenciálegyenlet (DE) olyan függvényegyenlet, amely az ismeretlen (meghatározandó) függvény deriváltjait is tartalmazza a független változó egyazon értékénél (kivételt képeznek a késleltetett differenciálegyenletek, pl. a szaporodási egyenletek).

Differenciálegyenletek különböző osztályozási szempontjai:

(a) **közönséges** $\leftrightarrow$ **parciális** (egy $\leftrightarrow$ több független változó)

(b) **állandó** ill. **függvény együtthatós** (ha a függvényt és deriváltjait tartalmazó tagok együtthatói állandók, akkor a DE állandó együtthatós)

(c) **rend** szerinti (egyenletben szereplő legmagasabb derivált rendűsége)

(d) **lineáris** ill. **nemlineáris** (*y* és deriváltjai hatványai szerint, lineáris esetben az ismeretlen függvény és annak deriváltjai legfeljebb első hatványon fordulnak elő és szorzatuk nem szerepel)

(e) **homogén** $\leftrightarrow$ **inhomogén** (állandó vagy a független változó szerinti tagot tartalmaz-e)

Az $y', y'', y''', ..., y^{(n)}$ kifejezéseket gyakran alkalmazzuk az *y* függvény független változója szerinti, első, második, harmadik, …, *n*-edik derivált (differenciálhányados) jelölésére. A zárójel alkalmazása szükséges, hogy a deriváltat a hatványtól megkülönböztethessük. Amennyiben a független változó az idő (általában *t*), úgy többnyire $\dot{y}, \ddot{y}, \dddot{y}$ jelöli a dy/dt, d^2y/dt^2, illetve d^3y/dt^3 deriváltakat.

Amennyiben a differenciálegyenlet egyetlen változótól függ, **közönséges differenciálegyenletről** (ODE, *ordinary differential equation*) beszélünk. Gyakoribb eset, hogy a differenciálegyenletek két vagy több változótól függenek és az ezek szerinti parciális deriváltakat is tartalmazzák, ekkor **parciális differenciálegyenletről** (PDE, *partial differential equation*) beszélünk.

Az *n*-edrendű, állandó együtthatós, lineáris DE általános alakja $f^{(n)} + a_{n-1}f^{(n-1)} + ... + a_1 f' + a_0 f = b$, ahol *f* a keresett (ismeretlen) függvény és a DE rendjét az egyenletben szereplő legmagasabb derivált ($f^{(n)}$) határozza meg.

A lineáris homogén DE-kre (a lineáris $\frac{d^n y}{dx^n} + f_1(x)\frac{d^{n-1}y}{dx^{n-1}} + ... + f_n(x)y = g(x)$ ODE-k esetében a $g(x) = 0$ választás mellett beszélünk homogén DE-ről; ahogy látható, minden derivált illetve a függvény maga is csupán első rendben szerepel az egyenletben) fennáll a **szuperpozíció elve**: az egyedi megoldások tetszőleges lineárkombinációja is megoldás. Nemlineáris DE-kre (pl. $y'^2 - y^2 = x^2$) a szuperpozíció elve nem áll fenn.

VI.1 Közönséges differenciálegyenletek

Nevezetesebb közönséges differenciálegyenlet (ODE) típusok:

(a) **Bernoulli-egyenlet**: $\frac{dy}{dx} + P(x)y = y^n Q(x)$, $n \neq 0$ vagy 1, nemlineáris ODE

(b) **Riccati-egyenlet**: $\frac{dy}{dx} = p(x)y^2 + q(x)y + r(x)$

Az ODE-k főbb megoldási technikái:

(a) **Egyszerű integrálás**: legegyszerűbb eset, észre kell venni, hogy a függő és független változót tartalmazó tagok egymástól azonnal elkülöníthetők.

(b) **Változók szeparálása**: amennyiben a kiválasztott differenciálegyenlet $f_1(x)g_1(y)dx + f_2(x)g_2(y)dy = 0$ alakú, úgy osszunk $g_1(y)f_2(x)$-szel és integráljunk, az eredményt $\int \frac{f_1(x)}{f_2(x)}dx + \int \frac{g_2(y)}{g_1(y)}dy = C$ adja.

(c) **Egzakt differenciállá átalakítás**: amennyiben az ODE $M(x,y)dx + N(x,y)dy = 0$ alakú, ahol fennáll, hogy $\frac{\partial M}{\partial y} = \frac{\partial N}{\partial x}$, úgy alakítsuk át az egyenletet az alábbi alaknak megfelelően: $Mdx + Ndy = dU(x,y) = 0$, azaz $U(x,y) = C$.

(d) **Integrálási tényező** alkalmazása: amennyiben a differenciálegyenlet alakja $M(x,y)dx + N(x,y)dy = 0$, ellenben $\frac{\partial M}{\partial y} \neq \frac{\partial N}{\partial x}$, úgy az egyenletet át lehet írni egzakt differenciállá a μ integrálási tényezővel, $\mu Mdx + \mu Ndy = 0$, és itt már $\frac{\partial(\mu M)}{\partial y} = \frac{\partial(\mu N)}{\partial x}$ fennáll, azaz az előző mgoldási technika alkalmazható.

(e) Inhomogén lineáris differenciálegyenletek, $\frac{dy}{dx} + P(x)y = Q(x)$: általában igaz, hogy érdemes az egyenletet a $\mu = \exp\left(\int P(x)dx\right)$ integrálási tényezővel megszorozni a megoldás elősegítése érdekében, hiszen ekkor az egyenlet $\frac{d}{dx}(\mu\, y) = \mu Q$ alakba írható és így a megoldás $\mu\, y = \int \mu Q dx + C$ alakú.

Vannak speciális alakú ODE-k, melyek főbb megoldási technikáit a következőkben foglalhatjuk össze:

(a) Amennyiben az elsőrendű, lineáris, állandó együtthatós, inhomogén $y' + py + q = 0$ ODE esetében a homogén ($q(x) = 0$) ODE megoldását már ismerjük (ez integrálási tényező segítségével oldható meg), úgy az inhomogén egyenletet az $u = y + q / p$ helyettesítéssel homogénre vezetjük vissza.

(b) Az $y'' + py' + q = 0$ másodrendű ODE megoldása során célszerű az $u(x) := y'(x)$ helyettesítés alkalmazásával azt visszavezetni egy elsőrendű DE megoldására.

(c) Amennyiben $\bar{y}(x)$ az inhomogén $y'' + py' + qy = f(x)$ differenciálegyenlet egy tetszőleges megoldása, akkor az összes megoldás $y = \bar{y} + C_1 y_1 + C_2 y_2$ alakú, ahol $C_1 y_1 + C_2 y_2$ az $y'' + py' + qy = 0$ homogén ODE általános megoldása.

Az integrálási tényező megtalálásánál hasznosak lehetnek az alábbi összefüggések:

$$\frac{xdy - ydx}{x^2} = d\left(\frac{y}{x}\right) \qquad \frac{xdy - ydx}{x^2 - y^2} = \frac{1}{2} d\left(\ln \frac{x-y}{x+y}\right)$$

$$\frac{xdy - ydx}{y^2} = -d\left(\frac{y}{x}\right) \qquad \frac{xdy + ydx}{x^2 + y^2} = \frac{1}{2} d\left(\ln\left(x^2 + y^2\right)\right)$$

$$\frac{xdy - ydx}{x^2 + y^2} = d\left(\tan^{-1} \frac{y}{x}\right)$$

Mintafeladatok

- Oldjuk meg az $x'' = 2$ differenciálegyenletet.

  Megoldás: Az $\underline{\underline{y(x) = x^2 + c_1 x + c_2}}$ függvény megoldása a fenti másodrendű közönséges differenciálegyenletnek, mint arról behelyettesítéssel könnyen megbizonyosodhatunk.

- Jellemezzük az $f'(x) = \dfrac{1}{1+x}$ differenciálegyenletet, majd keressük meg azon megoldásait, melyekre $f(0) = 1$.

  Megoldás: A felírt közönséges differenciálegyenlet (ODE) ($f'(x) + xf'(x) - 1 = 0$) elsőrendű, inhomogén, függvény együtthatós. A megoldást egyszerű integrálással kereshetjük: $\dfrac{df}{dx} = \dfrac{1}{1+x} \Rightarrow \int df = \int \dfrac{1}{1+x} dx \Rightarrow f = \ln|x+1| + C$ az általános megoldás. A megadott feltételből következik, hogy $f(0) = \ln 1 + C = C = 1$, azaz $C = 1$. A partikuláris megoldás ekkor $\underline{\underline{f(x) = \ln|x+1| + 1}}$.

- Jellemezzük és oldjuk meg a $f'(x) + \dfrac{1}{x} f(x) = \sin x$ differenciálegyenletet.

  Megoldás: Közönséges, lineáris, elsőrendű, függvény együtthatós, inhomogén differenciálegyenlet. A DE megoldásához vegyük észre, hogy az átírható az $xf'(x) + f(x) = x \sin x$ alakba, ahol a bal oldal nyilvánvalóan $(xf)'$ alakú. Ekkor $xf(x) = \int x \sin x dx$, melyet parciális integrálás segítségével számíthatunk: $xf(x) = \int x \sin x dx = -x \cos x + \sin x + C$, azaz $\underline{\underline{f(x) = \dfrac{C + \sin x}{x} - \cos x}}$.

- Oldjuk meg a változók szeparálásával a $\dfrac{dy}{dx} = \dfrac{\cos^2 y}{x}$ differenciálegyenletet.

  Megoldás: Általában a $\dfrac{dy}{dx} = \dfrac{f(x,y)}{g(x,y)}$ ODE nem lineáris, de lehet szeparábilis, ami nagy előny. Jelen esetben $\int \sec^2 y dy = \int \dfrac{dx}{x} + C$, melyből $C = \ln A$ mellett $\tan y = \ln x + \ln A$, azaz $\underline{\underline{y = \arctan[\ln(Ax)]}}$.

- Oldjuk meg a $y' - xy = x^3 e^{x^2/2}$ differenciálegyenletet.

  Megoldás: Az integrálási tényező ezen inhomogén DE megoldásánál $\exp(-x^2/2)$, azaz $e^{-\frac{x^2}{3}} y' - x e^{-\frac{x^2}{3}} y = x^3$. A bal oldal most már teljes differenciállá alakítható, $\left(e^{-\frac{x^2}{3}} y\right)' = x^3$. Ennek alapján az ODE általános megoldása $\underline{\underline{y(x) = e^{\frac{x^2}{2}} \left(\dfrac{x^4}{4} + C\right)}}$.

- Egy csónak v_0 kezdeti sebességgel halad. Mozgásegyenlete $m\frac{dv(t)}{dt} = -kv(t)$, ahol m a csónak tömege, k a súrlódási tényező, v a sebesség és t az idő. Írjuk fel a $v(t)$ függvényt!

  Megoldás:

$$m\frac{dv}{dt} = -kv$$
$$\int \frac{1}{v}dv = -\frac{k}{m}\int dt$$
$$\ln v = -\frac{k}{m}t + c_1$$
$$v = ce^{-\frac{k}{m}t}$$
$$v(0) = v_0$$

$v_0 = ce^{-\frac{k}{m}0} = ce^0 = c$ vagyis $c = v_0$. Így $v(t) = v_0e^{-\frac{k}{m}t}$.

- Egy áramkörben sorba kapcsolunk egy L önindukciójú tekercset és egy R ellenállást. Ekkor, ha E egyenfeszültséget kapcsolunk be és I az áram, $L\frac{dI}{dt} + RI = E$. Mi az $I(t)$ függvény alakja, ha kezdetben nem volt áram?

  Megoldás: a differenciál egyenlet inhomogén, így a megoldásnak két része van.

  a. homogén megoldás

$$L\frac{dI}{dt} + RI = 0$$
$$\int \frac{1}{I}dI = \int -\frac{R}{L}dt$$
$$\ln|I| = -\frac{R}{L}t + c_1$$
$$I = ce^{-\frac{R}{L}t}$$

  b. inhomogén megoldás, ekkor *c=c(t)*.

$$I' = c'e^{-\frac{R}{L}t} - \frac{cR}{L}e^{-\frac{R}{L}t}$$

  Visszahelyettesítjük az eredeti egyenletbe az *I*-re és *I'*-re kapott kifejezést:

$$L\frac{dI}{dt} + RI = E$$
$$L\left(c'e^{-\frac{R}{L}t} - \frac{cR}{L}e^{-\frac{R}{L}t}\right) + R\left(ce^{-\frac{R}{L}t}\right) = E$$
$$Lc'e^{-\frac{R}{L}t} = E$$
$$\int dc = \int \frac{E}{L}e^{\frac{R}{L}t}dt$$
$$c = \frac{E}{L}\frac{L}{R}e^{\frac{R}{L}t} + c_1 = \frac{E}{R}e^{\frac{R}{L}t} + c_1$$

Ezt visszaírjuk az *I*-re kapott kifejezésbe:

$$I = \left(\frac{E}{R} e^{\frac{R}{L}t} + c_1\right) e^{-\frac{R}{L}t} = \frac{E}{R} + c_1 e^{-\frac{R}{L}t}$$

Kezdeti érték:

$$I(0) = 0$$

$0 = \frac{E}{R} + c_1 e^0 \to c_1 = -\frac{E}{R}$, vagyis $I(t) = \frac{E}{R}\left(1 - e^{-\frac{R}{L}t}\right)$.

- Egy halállomány *m(t)* időbeli változása $\frac{dm}{dt} = \alpha m^{2/3} - \beta m$; ahol $\alpha, \beta \in R$. Mi az *m(t)* függvény alakja, ha *m*(0)=0?
  Megoldás:

$$\int \frac{1}{\alpha m^{2/3} - \beta m} dm = \int dt$$

$$u = m^{1/3}$$

$$\frac{du}{dm} = \frac{1}{3} m^{-2/3}$$

$$dm = 3m^{2/3} du = 3u^2 du$$

$$\int \frac{1}{\alpha u^2 - \beta u^3} 3u^2 du = \int \frac{3}{\alpha - \beta u} du = \int dt$$

$$-\frac{3}{\beta} ln(\alpha - \beta u) = -\frac{3}{\beta} ln\left(\alpha - \beta m^{\frac{1}{3}}\right) = t + c$$

$$ln\left(\alpha - \beta m^{\frac{1}{3}}\right) = -\frac{\beta}{3} t + c_1$$

$$\alpha - \beta m^{\frac{1}{3}} = e^{-\frac{\beta}{3}t} c_2$$

Átrendezve: $m = \left(\frac{\alpha}{\beta} - \frac{c_2}{\beta} e^{-\frac{\beta}{3}t}\right)^3$

Kezdeti érték: $m(0) = 0$

$$0 = \left(\frac{\alpha}{\beta} - \frac{c_2}{\beta} \cdot 1\right)^3$$

$$c_2 = \alpha$$

Ez alapján a keresett függvény: $m(t) = \left(\frac{\alpha}{\beta} - \frac{\alpha}{\beta} e^{-\frac{\beta}{3}t}\right)^3$

- Magasról elejtünk egy golyót v_0 kezdősebességgel. Mozgásegyenlete $m\frac{dv}{dt} = -kv - g$, ahol *g* a közegellenállási tényező, *m* a tömeg és *g* a gravitációs állandó. Mi a *v*(*t*) és az *s*(*t*) függvény alakja, ha *s*(0) = 0?
  Megoldás:

$$m\frac{dv}{dt} = -kv - g$$

$\frac{dv}{dt} + \frac{k}{m} v = -\frac{g}{m}$ lineáris differenciálegyenlet

a) homogén megoldás

$$m\frac{dv}{dt}+\frac{k}{m}v=0$$

$$\int\frac{1}{v}dv=\int-\frac{k}{m}dt$$

$$lnv=-\frac{k}{m}t+c_1$$

$$v=ce^{-\frac{k}{m}t}$$

b) inhomogén megoldás $c = c(t)$

$$v'=c'e^{-\frac{k}{m}t}-\frac{k}{m}ce^{-\frac{k}{m}t}$$

Visszahelyettesítve az eredeti egyenletbe: $m\frac{dv}{dt}+\frac{k}{m}v=-\frac{g}{m}$

$$c'e^{-\frac{k}{m}t}-\frac{k}{m}ce^{-\frac{k}{m}t}+\frac{k}{m}ce^{-\frac{k}{m}t}=-\frac{g}{m}$$

$$c'e^{-\frac{k}{m}t}=-\frac{g}{m}$$

$$\int dc=\int-\frac{g}{m}e^{\frac{k}{m}t}dt$$

$$c=-\frac{g}{k}e^{\frac{k}{m}t}+c_1$$

$$v=ce^{-\frac{k}{m}t}=\left(-\frac{g}{k}e^{\frac{k}{m}t}+c_1\right)e^{-\frac{k}{m}t}=-\frac{g}{k}+c_1e^{-\frac{k}{m}t}$$

Kezdő érték $v(0)=v_0$

$$v_0=-\frac{g}{k}+c_1\rightarrow c_1=v_0+\frac{g}{k}$$

$$v(t)=\left(v_0+\frac{g}{k}\right)e^{-\frac{k}{m}t}-\frac{g}{k}$$

$s(t)$ alakjának meghatározása: $v(t)=\frac{ds(t)}{dt}$

$$\int ds=\int\left(v_0+\frac{g}{k}\right)e^{-\frac{k}{m}t}-\frac{g}{k}dt$$

$$s=\left(v_0+\frac{g}{k}\right)e^{-\frac{k}{m}t}\cdot\left(-\frac{m}{k}\right)-\frac{g}{k}t+c$$

Kezdeti érték: $s(0)=0$

$$0=\left(v_0+\frac{g}{k}\right)\cdot\left(-\frac{m}{k}\right)\cdot 1-0+c$$

$$c=\left(v_0+\frac{g}{k}\right)\cdot\left(\frac{m}{k}\right)$$

A keresett $s(t)$ függvény alakja:

$$s(t)=\left(v_0+\frac{g}{k}\right)e^{-\frac{k}{m}t}\cdot\left(-\frac{m}{k}\right)-\frac{g}{k}t+\left(v_0+\frac{g}{k}\right)\cdot\left(\frac{m}{k}\right)$$

- Newton II. törvénye szerint $F = ma$. Mi az $s(t)$ függvény alakja, ha $F = \alpha m$?
  Megoldás:

$$ma = m\frac{dv}{dt} = \alpha m$$
$$dv = \alpha dt$$
$$v = \frac{ds}{dt} = \alpha t + c_1$$
$$\int ds = \int (\alpha t + c_1)dt$$
$$s = \alpha t^2 + c_1 t + c_2.$$

- Egy gitárhúr rezgését a $y" + 2y' - 15y = 0$ differenciálegyenlet írja le. Mi az $y(t)$ függvény alakja?
  Megoldás:

$$y = e^{rx} \to y' = r \cdot e^{rx} \text{ és } y" = r^2 \cdot e^{rx}$$
$$r^2 \cdot e^{rx} + 2 \cdot r \cdot e^{rx} - 15 \cdot e^{rx} = 0$$
$$e^{rx}(r^2 + 2r - 15) = 0$$
$$e^{rx} > 0 \text{ , így } r^2 + 2r - 15 = 0$$

$$(r^2 + 2r - 15) = 0$$
$$r_{1,2} = \frac{-2 \pm \sqrt{4 - 4 \cdot (-15) \cdot 1}}{2} = -1 \pm 4$$
$$r_1 = -5$$
$$r_2 = 3$$
$$y = c_1 e^{3x} + c_2 e^{-5x}$$

- Egy részecske x irányú mozgását a $\frac{du}{dx} - 3u = 6$ differenciálegyenlet írja le. Mi az $u(x)$ függvény alakja?
  Megoldás:

$$\frac{du}{dx} = 3u + 6$$
$$\int \frac{1}{3u + 6} du = \int 1dx$$
$$\frac{1}{3}\ln(6 + 3u) = x + c$$
$$\ln(6 + 3u) = 3x + c_1$$

$$3u = e^{3x}c_2 - 6$$
$$u = c_3 e^{3x} - 2$$

- Egy gáz x irányú diffúzióját a $\frac{d^2p}{dx^2} = xe^{-\alpha x}$ differenciálegyenlet írja le, ahol p a gáz parciális nyomása. Mi a $p(x)$ függvény alakja?
Megoldás:

$$\int \frac{dp}{dx} dx = \int x\, e^{-\alpha x} dx$$

A keresett jobb oldali integrál a parciális integrálás szabályai szerint határozható meg az $f'(x) = e^{-\alpha x}$ és $g(x) = x$ választás mellett:

$$\int f'(x)g(x)dx = f(x)g(x) - \int f(x)g'(x)dx$$

$$\int e^{-\alpha x}xdx = -\frac{1}{\alpha}e^{-\alpha x}x + \frac{1}{\alpha}\int e^{-\alpha x} \cdot 1dx = \frac{-e^{-\alpha x}x}{\alpha} - \frac{e^{-\alpha x}}{\alpha^2} + c_1$$

$$\frac{dp}{dx} = \frac{-e^{-\alpha x}x}{\alpha} - \frac{e^{-\alpha x}}{\alpha^2} + c_1$$

$$\int dp = \int \frac{-e^{-\alpha x}x}{\alpha} - \frac{e^{-\alpha x}}{\alpha^2} + c_1 dx$$

$$p = \frac{e^{-\alpha x}}{\alpha^2} + \frac{2e^{-\alpha x}}{\alpha^3} + c_1x + c_2$$

- Az $\boldsymbol{A} \leftrightarrow \boldsymbol{B}; \boldsymbol{B} \leftrightarrow \boldsymbol{C}$ típusú egymás utáni revezibilis reakciókra az **A** komponens koncentrációjának időbeli változását a $c''_A + 8c'_A + 16c_A = 0$ kinetikus egyenlet adja meg. Mi a c_A koncentráció időfüggése?
Megoldás:

$$c''_A + 8c'_A + 16c_A = 0$$

$$c_A = e^{rx} \rightarrow c'_A = r \cdot e^{rx} \text{ és } c''_A = r^2 \cdot e^{rx}$$

$$r^2 \cdot e^{rx} + 8 \cdot r \cdot e^{rx} + 16 \cdot e^{rx} = 0$$

$$e^{rx}(r^2 + 8r + 16) = 0$$

$$e^{rx} > 0 \text{ , így } r^2 + 8r + 16 = 0$$

$$r_{1,2} = \frac{-8 \pm \sqrt{8^2 - 4 \cdot 1 \cdot 16}}{2 \cdot 1} = -4$$

$$c_A = c_1e^{-4x} + c_2xe^{-4x}$$

- Egy gyorsan szaporodó baktérium számának (N) időbeli változására két modellt alkottak a kutatók. Ez első szerint a baktériumok számának napban mért változását a $\frac{dN}{dt} - \frac{N}{t} = t^2 + 3t - 2$ egyenlet írja le, míg a második szerint $\frac{dN}{dt} - 0.3N = e^{0.4t}$. Melyik modell a helyes, ha az első napon 100 baktériumot számoltak, míg 30 nap múlva több mint 2 milliót?

  Megoldás:

  a. homogén megoldások

  I. $\frac{dN}{dt} - \frac{N}{t} = 0$

$$\frac{dN}{dt} = \frac{N}{t}$$

$$\int \frac{dN}{N} = \int \frac{dt}{t}$$

$$\ln(N) = \ln(t) + c$$

$$N = c_I \cdot t$$

  II. $\frac{dN}{dt} - 0.3N = 0$

$$\int \frac{1}{N} dN = \int \frac{3}{10} dt$$

$$\ln(N) = \frac{3}{10} t + c$$

$$N = c_{II} \cdot e^{\frac{3}{10}t}$$

  b. inhomogén megoldások

  I. $N(t) = c_I(t)t$

$$N' = c'_I t + c_I$$

  Visszahelyettesítve az eredeti egyenletbe: $\frac{dN}{dt} - \frac{N}{t} = t^2 + 3t - 2$

$$c'_I t + c_I - \frac{c_I t}{t} = t^2 + 3t - 2$$

$$\frac{dc_I}{dt} = t^2 + 3t - 2$$

$$\int dc_I = \int t^2 + 3t - 2dt$$

$$c_I = \frac{t^4}{4} + t^3 - t^2 + c_A$$

Ezek alapján: $N(t) = c_I(t)t = \left(\frac{t^4}{4} + t^3 - t^2 + c_A\right)$

II. $N(t) = c_{II}(t)e^{\frac{3}{10}t}$

$$N'(t) = c'_{II}e^{\frac{3}{10}t} + c_{II}\frac{3}{10}e^{\frac{3}{10}t}$$

Visszahelyettesítve az eredeti egyenletbe: $\frac{dN}{dt} - 0.3N = e^{0.4t}$

$$c'_{II}e^{\frac{3}{10}t} + c_{II}\frac{3}{10}e^{\frac{3}{10}t} - \frac{3}{10}c_{II}(t)e^{\frac{3}{10}t} = e^{0.4t}$$

$$\frac{dc_{II}}{dt}e^{\frac{3}{10}t} = e^{0.4t}$$

$$dc_{II} = \int \frac{e^{0.4t}}{e^{0.3t}}dt = \int e^{0.1t}dt$$

$$c_{II} = 10e^{0.1t} + c_B$$

$$N(t) = c_{II}(t)e^{\frac{3}{10}t} = (10e^{0.1t} + c_B)e^{\frac{3}{10}t}$$

Most megnézzük, hogy a mérési eredményeket melyik modell adja vissza reális integrálási konstans mellett. $t = 30$ nap, $N = 2 \cdot 10^6$db baktérium.

I. $N(t) = \left(\frac{t^4}{4} + t^3 - t^2 + c_A\right)$

$$c_A = -1771400$$

II. $N(t) = (10e^{0.1t} + c_B)e^{\frac{3}{10}t}$

$$c_B = 45.96$$

A számítások szerint a második modell jobb leírást ad.

- Az egyetem segítségét kérte Superman, aki szeretné megmenteni volt középiskolás évfolyamtársát. A mára gonosszá vált Canduit gyerekkorában egy szörnyűséges „*kryptonit*" mérgezésnek lett kitéve, melynek hatására mutálódott. Megmentése érdekében kísérleteket végeztünk a vérében található mutáns sejtekkel. Úgy találtuk, hogy a megfelelő szérum hozzáadása során a mutálódott sejtek egészségessé változnak az alábbi kinetika szerint: $-\frac{dc}{dt} = kc^3$, ahol $k = 0{,}5 \times 10^7 \frac{(\mathrm{dm})^6}{\mathrm{mol}^2\mathrm{s}}$. Sajnos a szérum rendkívül drága, így csak akkor adjuk be Canduit-nak, ha még élete során biztosan meggyógyul tőle. Feladatunk tehát annak megállapítása, hogy nagyjából mennyi idő múlva gyógyul meg Canduit a szérumtól (azaz mikor csökken a vérében lévő mutáns sejtek koncentrációja $c = 10^{-4}\,\mathrm{mol\,dm^{-3}}$ alá), ha vérében jelenleg a mutálódott sejtek koncentrációja $c_0 = 1\,\mathrm{mol\,dm^{-3}}$.

Megoldás:

$$-\frac{dc(t)}{dt} = kc(t)^3$$

$$-\int_{c_0}^{c_t} \frac{dc(t)}{c(t)^2} = k\int_{t_0=0}^{t} dt$$

$$-\left[-\frac{1}{4}\frac{1}{c^4}\right]_{c_0}^{c_t} = k[t]_{t_0=0}^{t}$$

$$\frac{1}{4}\left(\frac{1}{c_t^4} - \frac{1}{c_0^4}\right) = k(t-0)$$

$$t = \frac{\left(\frac{1}{c_t^4} - \frac{1}{c_0^4}\right)}{4k} = \frac{10^{16}-1}{4\cdot 0.5\cdot 10^7} = 5\cdot 10^8 s \approx 16 \text{ év.}$$

Gyakorló feladatok

- Jellemezze és oldja meg az $f' + x^2 f + \lambda f = 0$ differenciálegyenletet.
- Oldja meg az $y' = 2\sin x$ differenciálegyenletet!
- Adja meg az általános megoldását a következő közönséges differenciálegyenletnek: $\left(4x + xy^2\right)dx + \left(y + x^2 y\right)dy = 0$.
- Mutassa meg, hogy $\left(3x^2 + y\cos x\right)dx + \left(\sin x - 4y^3\right)dy = 0$ egy egzakt differenciálegyenlet. Adja meg az ODE általános megoldását.
- Oldja meg változó szeparálás segítségével a $\dfrac{dy}{dx} = \dfrac{y}{x-y}$ ODE-t.
- Oldja meg integrálási faktor bevezetésével az $y' + a^2 y = e^x$ ODE-t.
- Oldja meg integrálási faktor bevezetésével a $\left(3xy^2 + 2y\right)dx + \left(2x^2 y + x\right)dy = 0$ ODE-t.
- Oldja meg a következő differenciálegyenletet: $2r\cos\varphi\,\mathrm{d}r - \mathrm{tg}\varphi\,\mathrm{d}\varphi = 0$.
- Mutassa meg, hogy a $-ydx + xdy = 0$ differenciálegyenlet egzakttá tehető mind a $\mu(y) = y^{-2}$, mind a $\mu(x,y) = (xy)^{-1}$ integrálási tényezővel. A szimpatikusabb választás segítségével oldja meg az ODE-t.
- Sorolja be a tanult szempontok alapján az alábbi differenciálegyenleteket, majd oldja meg a (c) feladatot:

$$(a)\ \frac{d^4u}{dt^4} + \sin u = e^t, \qquad (b)\ \frac{\partial^2\varphi(x,t)}{\partial x^2} - c^2\frac{\partial^2\varphi(x,t)}{\partial t^2} = 0,\ c \in R$$

$$(c)\ y^2 - x^2 y' = 0, \qquad (d)\ y - 2 + \left(x+3\right)y' = 0.$$

- Amint azt jól ismerjük, az x koordináta mentén vertikálisan, a gravitáció ellenében fellőtt m tömegű golyó mozgását leíró egyenlet alakja $m\ddot{x} = -mg$. Milyen egyenlet vonatkozik $x(t)$-re, amennyiben $x(0) = x_0$ és $v(0) = v_0$?
- Egy kémiai reakció sebességét a $\dfrac{dy}{dt} = k(a-y)(b-y)$ egyenlet jellemzi. Oldja meg ezt az ODE-t.
- Egy víztisztító-berendezés működése során a szennyezőanyag $y(t)$ mennyiségét az $y'(t) = -k\left(y(t) - M\right)$ differenciálegyenlet írja le, ahol k és $M > 0$ állandók, míg t az eltelt idő. (a) Adja meg ODE általános megoldását ($y(t) > M$ minden t esetén). (b) Egy adott anyag esetén k = 0,025 és M = 0,08, valamint a szennyezőanyag kezdeti mennyisége $y(0)$ = 2,8 m^3 és az időt percben mérjük. Mennyi szennyezőanyag lesz 40 perc múlva?

- Egy tekercs-kondenzátor rezgőkörében az $I(t)$ áramerősséget a t idő függvényében az $LI''(t)+RI'(t)+\frac{1}{C}I(t)=f(t)$ differenciálegyenlet írja le. Legyen $L = 1$, $R = 5$ és $C = 0{,}25$. Adja meg (a) $f(t) \equiv 0$ esetén az $I(0) = 0$, $I'(0) = 1$ kezdeti feltételeket teljesítő megoldást, és (b) $f(t)=e^{-4t}$ esetén az általános megoldást.
- A Newton-féle hűtési törvény kimondja, hogy egy test hőmérsékletének változási sebessége arányos a test és alacsonyabb hőmérsékletű környezete hőmérséklet különbségével. Ha megfigyeljük, hogy egy test 20 perc alatt hűl le 80°C-ról 60°C-ra 20°C-os környezeti hőmérséklet mellett, állapítsa meg a test hőmérsékletét 40 perc múlva.
- A folyadékcsepp a felszínével arányos sebességgel párolog el. Határozza meg a gömb alakú folyadékcsepp sugarát az idő függvényében.
- A rádium bomlási sebessége minden időpillanatban egyenesen arányos a jelen lévő tömegével. Határozza meg, hogy az m_0 kezdeti tömegű rádium hány százaléka bomlik el 100 év alatt, ha tudjuk, hogy a rádium felezési ideje (az az idő, ami alatt a rádium fele elbomlik) 1 590 év.
- A rádium bomlásának sebessége arányos a pillanatnyilag jelen levő minta mennyiségével. Ha a rádium felezési ideje $t_{1/2}$ év, adja meg, hogy mekkora mennyiség lesz jelen a mintában t év múlva.
- 5 dkg cukrot szórunk nagy mennyiségű vízbe. Amennyiben az oldódás sebességét arányosnak tekintjük a még fel nem oldódott cukor mennyiségével, úgy mennyi lesz a fel nem oldott cukor mennyisége t másodperc múlva?
- Írja fel a szabadon eső m tömegű test mozgásegyenletét és jellemezze, majd oldja meg az így kapott differenciálegyenletet.
- Egy élesztőgomba-tenyészetben az aktív fermentum mennyisége a pillanatnyi mennyiséggel arányosan növekszik. Ha 40 perc alatt ez a mennyiség megkétszereződik, hányszorosa lesz a fermentum mennyisége a jelenleginek 3 óra múlva?
- Egy 100 literes teli víztartályban 4 gramm klórmész van oldott állapotban. A tartályba 5 l/perc sebességgel tiszta víz folyik be és az oldat ugyanilyen sebességgel folyik ki a túlfolyón. Mennyi lesz a víz klórmésztartalma fél óra múlva, amennyiben a klórmész egyenletes eloszlását állandó keveréssel biztosítjuk?
- Egy kémiai reakció melléktermékét szeretnénk a lehető leggyorsabban elbontani (a koncentrációját 10^{-5} mol dm^{-3} alá csökkenteni). Erre két lehetőségünk is van. Az első reakció esetében nulladrendű a kinetika ($-\frac{dc}{dt}=k_1$, k_1 = 1 mol dm^{-3} s^{-1}), a második esetben pedig másodrendű ($-\frac{dc}{dt}=k_2c^2$, k_2 = 1 mol^{-1} dm^3·s^{-1}). Melyik reakciót válasszuk, ha kezdetben c_0 = 1 mol dm^{-3} a melléktermék koncentrációja?

- Egy kémiai reaktorba két reaktánst adagolunk, koncentrációjukat jelölje x és y. Mi csak y értékét tudjuk befolyásolni, x nagyságát egy korábbi vegyipari folyamat határozza meg. A végtermék koncentrációja x kis dx változására $\left(e^{x+y}+2xy+1\right)dx$ módon, míg y kis dy változására $\left(e^{x+y}+x^2+1\right)dy$ módon változik. Keresse meg, hogy milyen összefüggés szerint állítsuk be y-t x változása során, hogy a kijövő végtermék koncentrációja állandó maradjon.

- Egy kétállapotú, E_1 és E_2 energiaszintekkel rendelkező kvantumrendszer esetén a **stimulált abszorpció** sebessége $\frac{dN_1}{dt}=B_{2\leftarrow 1}\rho_\nu(\nu_{21})N_1$ ahol $B_{2\leftarrow 1}$ az ún. „sebességi együttható" (**abszorpciós Einstein-koefficiens** B), N_1 az 1-es állapot populációja, ρ_ν pedig az energiasűrűség eloszlási függvénye, azaz hogy mennyi adott frekvenciájú sugárzás éri a rendszert. A 2-es állapotból 1-be történő visszatérés (**stimulált emisszió**) sebessége $\frac{dN_1}{dt}=-B_{2\leftarrow 1}\rho_\nu(\nu_{21})N_2$. A spontán emisszió sebessége $\frac{dN_1}{dt}=A_{2\rightarrow 1}N_2$. Egyensúlyt feltételezve a változási sebességek összege nulla kell legyen. Mutassa meg, hogy a Planck-féle sugárzási formula, $\rho_\nu(\nu_{21})=\frac{8\pi h\nu_{21}^3}{c^3}\frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu_{21}}{kT}\right)-1}$, érvényessége esetén egyensúlyban fenn kell állnia, hogy $B_{2\leftarrow 1}=B_{1\leftarrow 2}$, valamint $A_{2\rightarrow 1}=\frac{8\pi h\nu_{21}^3}{c^3}B_{2\leftarrow 1}$.

VI.2 Parciális differenciálegyenletek

Amint azt Lagrange megmutatta, a két független változót tartalmazó elsőrendű parciális, kvázilineáris differenciálegyenlet (mely felírható a $P\frac{\partial u}{\partial x}+Q\frac{\partial u}{\partial y}=R$, illetve a $Pp+Qq=R$ alakokban, ahol *P*, *Q* és *R* az *x* és *y* független és az *u* függő változó függvényei) megoldása visszavezethető a $\frac{dx}{P}=\frac{dy}{Q}=\frac{du}{R}$ közönséges differenciálegyenlet-rendszer (DER) megoldására. A DER megoldása általában úgy történik, hogy a három felírható egyenletből alkalmas rendezéssel két integrálható változatot keresünk.

A másodrendű PDE-k három fő osztályát különítjük el: (a) **elliptikus PDE**, melyben vagy a ∇^2 vagy a $c^{-2}\partial^2/\partial t^2+\nabla^2$ operátorok vannak jelen; (b) **parabolikus PDE**, melyben megjelenik az $a\partial/\partial t+\nabla^2$ operátor; és (c) **hiperbolikus PDE**, mely tartalmazza a $c^{-2}\partial^2/\partial t^2-\nabla^2$ operátort. Ezek a kanonikus operátorok (az egyszerűség kedvéért két dimenzióban tárgyalva) az alábbi lineáris operátor kapcsán jönnek létre, $L=a\frac{\partial^2}{\partial x^2}+2b\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}+c\frac{\partial^2}{\partial y^2}+d\frac{\partial}{\partial x}+e\frac{\partial}{\partial y}+f$, s mely a kanonikus alakokra redukálódik amennyiben a $D=ac-b^2$ diszkrimináns a >0, 0, <0 értékeket veszi fel. A hiperbolikus eset egyik iskolapéldája a hullámegyenlet, mely az egyszerűség kedvéért $1+1$ dimenzióban felírva $\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi=0$ alakú.

Nevezetesebb parciális differenciálegyenlet (PDE) típusok:

(a) **Laplace-egyenlet**: $\nabla^2\Phi(\mathbf{x})=0$, mely fellép például az elektromágneses jelenségek, a hidrodinamika, a hőáramlás, vagy a gravitációs jelenségek tárgyalása kapcsán

(b) **Poisson-egyenlet (elektrosztatika)**: $\nabla^2\Phi=-\rho/\varepsilon_0$, ahol Φ skalárpotenciál, ρ a töltéssűrűség; a homogén Laplace-egyenlettel ellentétben a DE inhomogén és a $-\rho/\varepsilon_0$ forrástagot tartalmazza

(c) **Helmholtz** (hullám) egyenlet és az **időfüggetlen diffúziós egyenlet**: $\nabla^2\psi\pm k^2\psi=0$, ezek az egyenletek például a hullámmozgásoknál, az akusztikában, az elektromágneses hullámoknál, valamint a magkémiában (atomerőművek) fordulnak elő

(d) **időfüggő diffúziós egyenlet**: $\nabla^2\psi=\frac{1}{a^2}\frac{\partial\psi}{\partial t}$

Megoldási típusok: általános ↔ partikuláris ↔ szinguláris.

A másodrendű PDE-k (melyekben a több változótól függő megoldásfüggvény legfeljebb második parciális deriváltjai szerepelnek), mint a fenti példák is mutatják, megkülönböztetett fontosságúak a fizikában és a fizikai kémiában.

Mintafeladatok

- Oldjuk meg a $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial f}{\partial y} = 0$ másodrendű parciális differenciálegyenletet.

  Megoldás: Ismerjük, hogy az $y''(x) = ky(x)$ másodrendű ODE általános megoldása $C_1 e^{-\sqrt{k}x} + C_2 e^{\sqrt{k}x}$, míg az $y'(t) = -ky(t)$ elsőrendű ODE általános megoldása $C_1 e^{-kt}$. Keressük most a megadott PDE analitikus megoldását a változók szeparálásának segítségével, azaz legyen a keresett megoldásfüggvény $f(x, y) = \rho(x) \cdot \eta(y)$ alakú. A PDE új alakja $\rho'' \cdot \eta + \rho \cdot \eta' = 0$, azaz $\frac{\rho''(x)}{\rho(x)} = -\frac{\eta'(y)}{\eta(y)}$. Minthogy a bal oldal csak *x*-től és a jobb oldal csak *y*-tól függ, így a legáltalánosabb eset az, hogy a két oldal egy azonos *C* skalárral lesz egyenlő. Ekkor két ODE-t kapunk, ezek megoldásai alapján $\rho(x) \propto e^{\pm\sqrt{C}x}$ és $\eta(y) \propto e^{-Cy}$, tehát a megoldásfüggvényt ezek szorzatai adják. A konkrét megoldás függ *C* értékétől, amennyiben $C = 0$, csak triviális megoldást kapunk, míg $C < 0$ esetében *x*-ben periodikus megoldásokat kapunk.

Gyakorló feladatok

- Jellemezze és oldja meg a $\frac{\partial u(x, y)}{\partial x} = 2x + 3y$ parciális differenciálegyenletet.
- Keressük meg azokat az $u(x, y)$ függvényeket, melyek eleget tesznek a $\frac{\partial u}{\partial x} = 1$ parciális differenciálegyenletnek.

Javasolt irodalom

Scharnitzky Viktor: *Differenciálegyenletek*, Műszaki Könyvkiadó, 1998.