Συνήθεις Διαφορικές Εξισώσεις

Οι διαφορικές εξισώσεις (δ.ε.) *είναι εξισώσεις που περιέχουν παραγώγους μιας άγνωστης συνάρτησης*, ίσως την ίδια την άγνωστη συνάρτηση και ίσως την ανεξάρτητη μεταβλητή (ή τις ανεξάρτητες μεταβλητές για συναρτήσεις πολλών μεταβλητών).

Το ζητούμενο στην επίλυση μιας δ.ε. είναι να βρεθεί η άγνωστη συνάρτηση.

Στις *συνήθεις δ.ε.* η άγνωστη συνάρτηση είναι συνάρτηση μίας μεταβλητής και μόνο οι παράγωγοι ως προς αυτή την μεταβλητή εμφανίζονται στην εξίσωση.

Το αόριστο ολοκλήρωμα είναι η λύση του απλούστερου παραδείγματος συνήθους δ.ε.

$$\frac{df(x)}{dx} = g(x) \quad \Leftrightarrow \quad f(x) = \int g(x)dx$$

Η γενικότερη μορφή μιας συνήθους δ.ε. είναι $F\left(x, f(x), f'(x), f''(x), \ldots\right) = 0 \;\Leftrightarrow F\left(x, f, f', f'', \ldots\right) = 0$

με ζητούμενο την άγνωστη συνάρτηση *f*(*x*) που ικανοποιεί την εξίσωση για κάθε *x*.

Παραδείγματα:

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + f = 0 \qquad \frac{df}{dx} + f^2 + 1 = 0 \qquad \frac{df}{dx} + \sin(x) + 1 = 0$$

$$\frac{df}{dx} + \sin(x) f = 1 \qquad \frac{d^2 f}{dx^2} + \sin(f) = 0 \qquad \frac{d^2 f}{dx^2} + x\frac{df}{dx} + e^x f = x^3 \qquad f\frac{d^2 f}{dx^2} + x\frac{df}{dx} + f = 0$$

Τάξη διαφορικής εξίσωσης

Μια δ.ε. είναι ***n**[*]*

Μια δ.ε. είναι $n^{\sigma\tau\eta\varsigma}$ **τάξης** όταν η ανώτερη παράγωγος που εμφανίζεται στην δ.ε. είναι η $n^{\sigma\tau\eta}$ παράγωγος.

Παραδείγματα:

$\dfrac{df(x)}{dx} = g(x)$	$\dfrac{d^2 f}{dx^2} + f = 0$	$\dfrac{df}{dx} + f^2 + 1 = 0$	$\dfrac{d^3 f}{dx^3} + \left(\dfrac{df}{dx}\right)^4 + x^4 = 5$
$1^{\eta\varsigma}$ τάξης	$2^{\eta\varsigma}$ τάξης	$1^{\eta\varsigma}$ τάξης	$3^{\eta\varsigma}$ τάξης

Η γενική μορφή μιας δ.ε. $1^{\eta\varsigma}$ τάξης είναι: $$\frac{df}{dx} = F(x, f)$$

Η γενική μορφή μιας δ.ε. $2^{\eta\varsigma}$ τάξης είναι: $$\frac{d^2 f}{dx^2} = F(x, f, f')$$

Γραμμικές και Μη-γραμμικές διαφορικές εξισώσεις

*Μια δ.ε. λέγεται **γραμμική** όταν τόσο η άγνωστη συνάρτηση f(x) όσο και οι παράγωγοί της ($f^{/}(x)$, $f^{//}(x)$,…) εμφανίζονται σαν γραμμικοί όροι σε αυτήν.*

Αλλιώς (όταν υπάρχουν μη γραμμικοί τέτοιοι όροι) λέγεται μη-γραμμική δ.ε.

Παραδείγματα:

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + x\frac{df}{dx} + e^x f = x^3$$

γραμμική δ.ε.

$$\frac{df}{dx} + \sin(x) f = 1$$

γραμμική δ.ε.

$$f\frac{d^2 f}{dx^2} + x\frac{df}{dx} + f = 0$$

μη-γραμμική δ.ε.

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + \sin(f) = 0$$

μη-γραμμική δ.ε.

Η γενική μορφή μιας γραμμικής δ.ε. 1ης τάξης είναι: $$\frac{df}{dx} = a(x)\cdot f + b(x)$$

Η γενική μορφή μιας γραμμικής δ.ε. 2ης τάξης είναι: $$\frac{d^2 f}{dx^2} = a(x)\cdot\frac{df}{dx} + b(x)\cdot f + c(x)$$

όπου οι *a*(*x*), *b*(*x*), *c*(*x*) είναι γνωστές συναρτήσεις της ανεξάρτητης μεταβλητής *x*.
Αν είναι σταθερές, τότε έχουμε *γραμμικές δ.ε. με σταθερούς συντελεστές*.

Ομογενείς και Μη-ομογενείς διαφορικές εξισώσεις

Μια δ.ε. λέγεται **ομογενής** αν δεν υπάρχει κανένας όρος που να μην περιέχει την συνάρτηση ή παραγώγους της

Αν γράψουμε μια δ.ε. έτσι ώστε όλοι οι όροι που περιέχουν την άγνωστη συνάρτηση και τις παραγώγους της να είναι στο αριστερό μέρος και όλοι οι όροι που περιέχουν μόνο την ανεξάρτητη μεταβλητή στο δεξί μέρος, τότε:

- αν το δεξί μέρος είναι μηδέν, η δ.ε. λέγεται **ομογενής**
- αλλιώς (αν υπάρχει μη μηδενικός όρος στο δεξί μέρος) λέγεται **μη-ομογενής** δ.ε.

Παραδείγματα:

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + x\frac{df}{dx} + e^x f = x^3$$

μη-ομογενής δ.ε.

$$\frac{d^3 f}{dx^3} + \frac{df}{dx} + x^4 = 0$$

μη-ομογενής δ.ε.

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + x\frac{df}{dx} + f = 0$$

ομογενής δ.ε.

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + x^2\frac{df}{dx} = f$$

ομογενής δ.ε.

Για τις *γραμμικές **και** ομογενείς δ.ε.* ισχύει *η αρχή της επαλληλίας (ή υπέρθεσης) των λύσεων*:

Αν οι $f_1(x)$ και $f_2(x)$ είναι λύσεις μιας γραμμικής και ομογενούς δ.ε., τότε κάθε **γραμμικός συνδυασμός τους** της μορφής $c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x)$, όπου c_1 και c_2 τυχαίες σταθερές, είναι επίσης λύση.

Γενική λύση διαφορικής εξίσωσης
Αριθμός αυθαίρετων σταθερών (παραμέτρων) της λύσης

Η λύση της $df(x)/dx = g(x)$ (δ.ε. 1ης τάξης) προσδιορίζεται με *μία αυθαίρετη σταθερά* (την σταθερά της ολοκλήρωσης). Αυτή είναι η γενική λύση της δ.ε.

$$f(x) = \int g(x)\,dx + c$$

Η λύση προσδιορίζεται μονοσήμαντα αν ξέρουμε *μια αρχική συνθήκη* στο σημείο x_0: $f(x_0) = y_0$ (από μια τέτοια σχέση μπορεί να προσδιοριστεί η σταθερά της ολοκλήρωσης).

Αντίστοιχα, *η γενική λύση μιας δ.ε. nστης τάξης* προσδιορίζεται με *n αυθαίρετες σταθερές*

Η λύση προσδιορίζεται μονοσήμαντα αν ξέρουμε *n αρχικές συνθήκες*:

$$f(x_0) = y_0,\ f'(x_0) = y_1,\ \ldots\ ,\ f^{(n-1)}(x_0) = y_{n-1}$$

Η γενική λύση $f_g^h(x)$ μιας *γραμμικής και ομογενούς δ.ε. nστης τάξης*, προκύπτει αν ξέρουμε *n* μερικές (ειδικές) <u>ανεξάρτητες</u> λύσεις $f_1(x)$, …, $f_n(x)$, από την επαλληλία τους:

$$f_g^h(x) = c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x) + \ldots + c_n f_n(x)$$

Η γενική λύση $f_g^{nh}(x)$ μιας *γραμμικής και μη-ομογενούς δ.ε. nστης τάξης*, προκύπτει από την γενική λύση της αντίστοιχης ομογενούς δ.ε., $f_g^h(x)$, και μία μερική λύση της μη-ομογενούς $f_p^{nh}(x)$:

$$f_g^{nh}(x) = f_g^h(x) + f_p^{nh}(x) \ = c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x) + \ldots + c_n f_n(x) + f_p^{nh}(x)$$

Για τις *μη-γραμμικές δ.ε.* **δεν** υπάρχει συστηματικός τρόπος κατασκευής της γενικής λύσης

Διαχωρίσιμες διαφορικές εξισώσεις 1ης τάξης

Μια δ.ε. 1ης τάξης είναι *διαχωρίσιμης μορφής*, αν μπορεί να γραφεί ως: $\frac{df}{dx} = A(x) \cdot B(f)$

Τότε η λύση της είναι $\frac{df}{B(f)} = A(x)dx \quad \Leftrightarrow \quad \int \frac{1}{B(f)} df = \int A(x)dx \quad \Leftrightarrow \quad F(f) = G(x) + c$

Παραδείγματα:

$$\frac{df}{dx} = -f^2 \qquad \Rightarrow \quad f(x) = \frac{1}{x+c}$$

$$\frac{df}{dx} = \sqrt{f} \qquad \Rightarrow \quad f(x) = \frac{1}{4}(x+c)^2$$

$$\frac{df}{dx} = xf \qquad \Rightarrow \quad f(x) = ce^{x^2/2}$$

$$\begin{aligned} &\frac{df}{dx} + 2xf^2 = 0 \\ &f(0) = \frac{1}{2} \end{aligned} \qquad \Rightarrow \quad f(x) = \frac{1}{x^2+2}$$

$$\begin{aligned} &\frac{df}{dx} - xe^{-f} = 0 \\ &f(0) = 0 \end{aligned} \qquad \Rightarrow \quad f(x) = \ln\left(\frac{x^2}{2} + 1\right)$$

Γραμμικές διαφορικές εξισώσεις 1ης τάξης

Η γενική μορφή μια τέτοιας εξίσωσης είναι: $\frac{df}{dx} + P(x) f = R(x)$

όπου $P(x)$, $R(x)$ γνωστές συναρτήσεις. $R(x)$ *ο μη-ομογενής όρος*

Επίλυση της *ομογενούς δ.ε.* (διαχωρίσιμης): $\frac{df}{dx} + P(x) f = 0$

Η γενική λύση της *ομογενούς δ.ε.* (που περιέχει μία αυθαίρετη σταθερά): $f_g^{h}(x) = c e^{-\int P(x) dx}$

Η γενική λύση της *μη-ομογενούς δ.ε.* είναι: $f_g^{nh}(x) = f_g^{h}(x) + f_p^{nh}(x)$

όπου $f_p^{nh}(x)$ μια μερική λύση που προκύπτει από την σχέση

$$f_p^{nh}(x) = g(x) \int \frac{R(x)}{g(x)} dx \qquad \text{με} \qquad g(x) = e^{-\int P(x) dx}$$

Παράδειγμα: $\frac{df}{dx} - f = e^{x} \quad \Rightarrow \quad f(x) = c e^{x} + x e^{x}$

$$f_g^{h}(x) = c e^{-\int (-1) dx} = c e^{x} \qquad f_p^{nh}(x) = e^{x} \int \frac{e^{x}}{e^{x}} dx = x e^{x}$$

ποιες είναι οι αντίστοιχες λύσεις που ικανοποιούν τις αρχικές συνθήκες

$f(0) = 5$ ή $f(2) = 0$

Γραμμικές διαφορικές εξισώσεις 2ης τάξης με σταθερούς συντελεστές (Ι. ομογενείς δ.ε.)

Η γενική μορφή μια τέτοιας εξίσωσης είναι: $a\dfrac{d^2 f}{dx^2} + b\dfrac{df}{dx} + cf = 0$ a, b, c σταθερές

Για την επίλυση της *ομογενούς δ.ε.* αναζητούμε λύσεις της μορφής $f(x) = e^{sx}$ και ανικαθιστώντας στην δ.ε. καταλήγουμε σε μια δευτεροβάθμια εξίσωση (*χαρακτηριστική εξίσωση*) για το s:

$$as^2 + bs + c = 0$$

Η εύρεση 2 λύσεων s_1 και s_2 οδηγεί στην γενική λύση της ομογενούς δ.ε.: $f_g^h(x) = c_1 e^{s_1 x} + c_2 e^{s_2 x}$

Αν υπάρχει μία διπλή ρίζα s, οι δύο ανεξάρτητες λύσεις είναι e^{sx} και $x\,e^{sx}$ $\Rightarrow f_g^h(x) = c_1 e^{sx} + c_2 x e^{sx}$

Παραδείγματα:

$$\frac{d^2 f}{dx^2} - f = 0 \quad \Rightarrow \quad f(x) = c_1 e^{x} + c_2 e^{-x}$$

$$\begin{gathered}\frac{d^2 f}{dx^2} - f = 0 \\ f(0) = 1, f'(0) = 0\end{gathered} \quad \Rightarrow \quad f(x) = \frac{1}{2}\left(e^{x} + e^{-x}\right)$$

$$\begin{gathered}\frac{d^2 f}{dx^2} - f = 0 \\ f(0) = 0, f'(0) = 1\end{gathered} \quad \Rightarrow \quad f(x) = \frac{1}{2}\left(e^{x} - e^{-x}\right)$$

$$\frac{d^2 f}{dx^2} - 3\frac{df}{dx} + 2f = 0 \quad \Rightarrow \quad f(x) = c_1 e^{x} + c_2 e^{2x}$$

Γραμμικές διαφορικές εξισώσεις 2ης τάξης με σταθερούς συντελεστές (II. μη-ομογενείς δ.ε.)

Η γενική μορφή μια τέτοιας εξίσωσης είναι: $a\dfrac{d^2 f}{dx^2} + b\dfrac{df}{dx} + cf = R(x)$ *a*, *b*, *c* σταθερές

Για την επίλυση της *μη-ομογενούς* χρειαζόμαστε μία μερική λύση της, $f_p^{nh}(x)$: $f_g^{nh}(x) = f_g^{h}(x) + f_p^{nh}(x)$

Μορφή του R(x)	Μορφή της $f_p^{nh}(x)$
πολυώνυμο	πολυώνυμο του ίδιου βαθμού
γραμμικός συνδυασμός εκθετικών	γραμμικός συνδυασμός των ίδιων εκθετικών
ημίτονα ή συνημίτονα ή γραμμικός συνδυασμός τους	γραμμικός συνδυασμός ημιτόνων και συνημιτόνων του ίδιου ορίσματος
πολυώνυμο * εκθετικό	πολυώνυμο * το ίδιο εκθετικό
γραμμικός συνδυασμός των παραπάνω	γραμμικός συνδυασμός των αντίστοιχων λύσεων

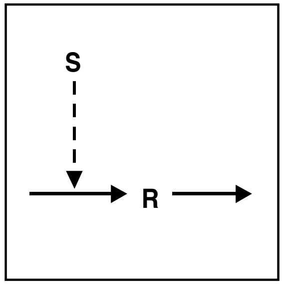
Παράδειγμα: $\dfrac{d^2 f}{dx^2} - 4f = 2e^x \quad \Rightarrow \quad f(x) = c_1 e^{2x} + c_2 e^{-2x} - \dfrac{2}{3}e^x$

$f_g^h : \ (s^2 - 4 = 0) \ \Rightarrow f_g^h(x) = c_1 e^{2x} + c_2 e^{-2x}$ $f_p^{nh} = Ae^x \Rightarrow A - 4A = 2 \Rightarrow f_p^{nh}(x) = -\dfrac{2}{3}e^x$

Εφαρμογή:
τμήματα ρυθμιστικών και σηματοδοτικών μονοπατιών

Tyson, Chen, Novak, *Current Opinion in Cell Biology* ***15***, 221 (2003)

Δυναμική πρωτεϊνικής σύνθεσης και αποδόμησης



$$\frac{dR}{dt} = k_1 S - k_2 R \qquad \Rightarrow \quad R(t) = c \cdot e^{-k_2 t} + \frac{k_1}{k_2} S$$

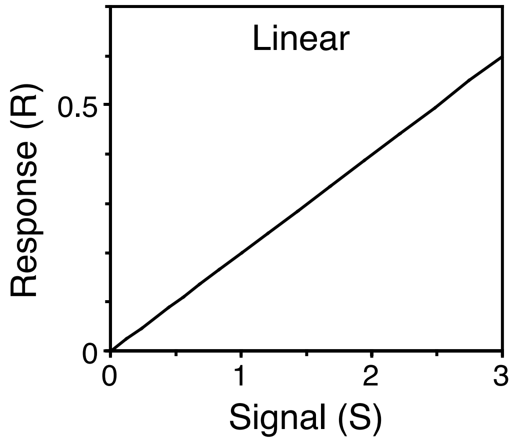
R: συγκέντρωση πρωτεΐνης

S: ένταση σήματος παραγωγής της πρωτεΐνης
(π.χ. συγκέντρωση μεταγραφικού παράγοντα ή mRNA)

Στάσιμη κατάσταση (*dR*/*dt* = 0):

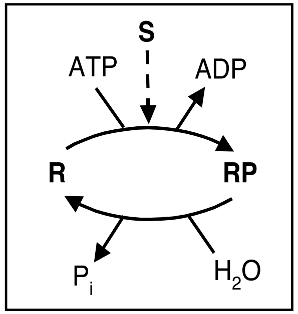
$$R_{st} = \frac{k_1}{k_2} S$$

Γραμμική απόκριση



$k_1 = 1$
$k_2 = 5$

Δυναμική φωσφορυλίωσης και αποφωσφορυλίωσης



$$\frac{dR_P}{dt} = k_1 S(R_T - R_P) - k_2 R_P$$

$$= k_1 S R_T - (k_1 S + k_2) R_P$$

$$\Rightarrow \quad R_P(t) = c \cdot e^{-(k_1 S + k_2)t} + \frac{R_T S}{(k_2/k_1) + S}$$

R_P: συγκέντρωση φωσφορυλιωμένης πρωτεΐνης

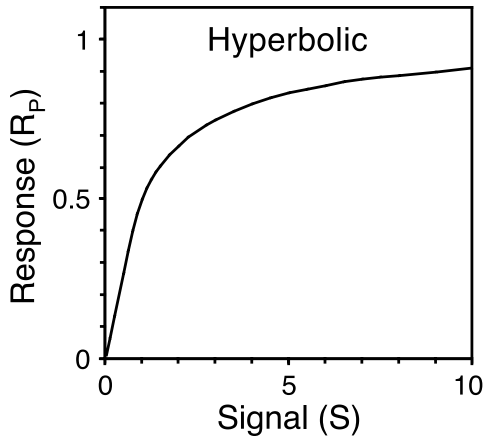
R: συγκέντρωση μη-φωσφορυλιωμένης πρωτεΐνης

$R_T = R + R_P$: συνολική συγκέντρωση πρωτεΐνης

S: ένταση σήματος φωσφορυλίωσης της πρωτεΐνης (π.χ. συγκέντρωση κινάσης)

Στάσιμη κατάσταση ($dR_P/dt = 0$):

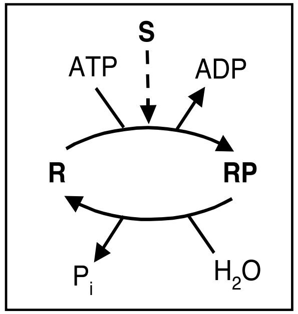
$$\frac{R_{Pst}}{R_T} = \frac{S}{(k_2/k_1) + S}$$



$k_1 = k_2$
$R_T = 1$

Υπερβολική απόκριση
(αρνητική καμπυλότητα)

Δυναμική φωσφορυλίωσης και αποφωσφορυλίωσης II



Αν οι αντιδράσεις φωσφορυλίωσης/αποφωσφορυλίωσης εμφανίζουν *κινητική Michaelis-Menten*:

$$\frac{dR_P}{dt} = k_1 S \frac{R_T - R_P}{K_{m1} + R_T - R_P} - k_2 \frac{R_P}{K_{m2} + R_P}$$

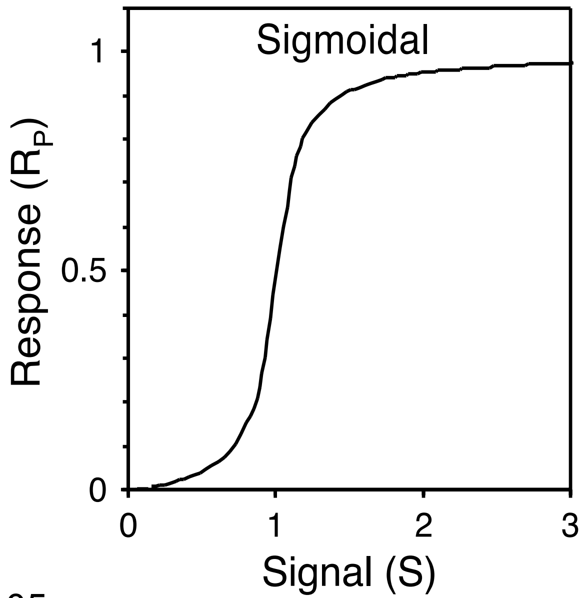
K_{m1}, K_{m2}
Michaelis constants

Στάσιμη κατάσταση ($dR_P/dt = 0$):

Σιγμοειδής απόκριση
(switch-like)
όταν K_{m1}/R_T και $K_{m2}/R_T \ll 1$

Απότομη απόκριση,
αλλά *βαθμιαία* και *αντιστρεπτή*

$k_1 = k_2 = 1$
$R_T = 1$
$K_{m1} = K_{m2} = 0.05$

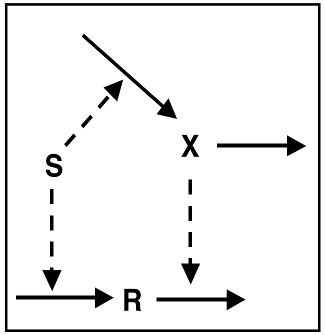


Τέλεια προσαρμογή καμπυλών σήματος-απόκρισης

Προσθέτοντας στο γραμμικό στοιχείο απόκρισης ένα δεύτερο μονοπάτι:

$$\frac{dR}{dt} = k_1 S - k_2 X R$$

$$\frac{dX}{dt} = k_3 S - k_4 X$$



R: συγκέντρωση πρωτεΐνης

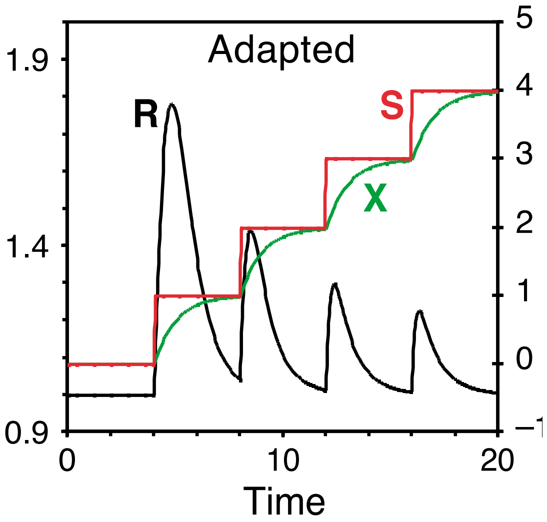
X: συγκέντρωση ρυθμιστικής πρωτεΐνης που αποδομεί την R

S: ένταση σήματος παραγωγής και της πρωτεΐνης R και της X

Στάσιμη κατάσταση (*dR*/*dt* = 0 και *dX*/*dt* = 0):

$$X_{st} = \frac{k_3}{k_4} S$$

$$R_{st} = \frac{k_1 S}{k_2 X_{st}} = \frac{k_1 k_4}{k_2 k_3}$$



$k_1 = k_2 = 2$
$k_3 = k_4 = 1$

Τέλεια προσαρμογή

το σύστημα εμφανίζει *μεταβατική απόκριση* σε αλλαγές του σήματος S, αλλά *η στάσιμη κατάσταση του στοιχείου απόκρισης R είναι ανεξάρτητη του S*

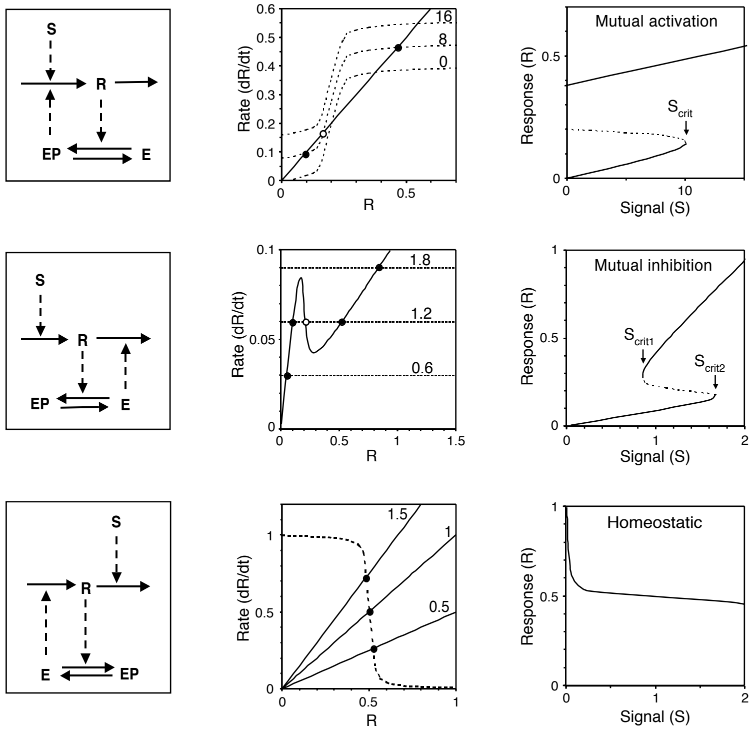
Τυπική συμπεριφορά χημειοτακτικών συστημάτων που αποκρίνονται σε απότομες αλλαγές χημ. στοιχείων, αλλά προσαρμόζονται σε σταθερά επίπεδα του σήματος (π.χ. όσφρηση)

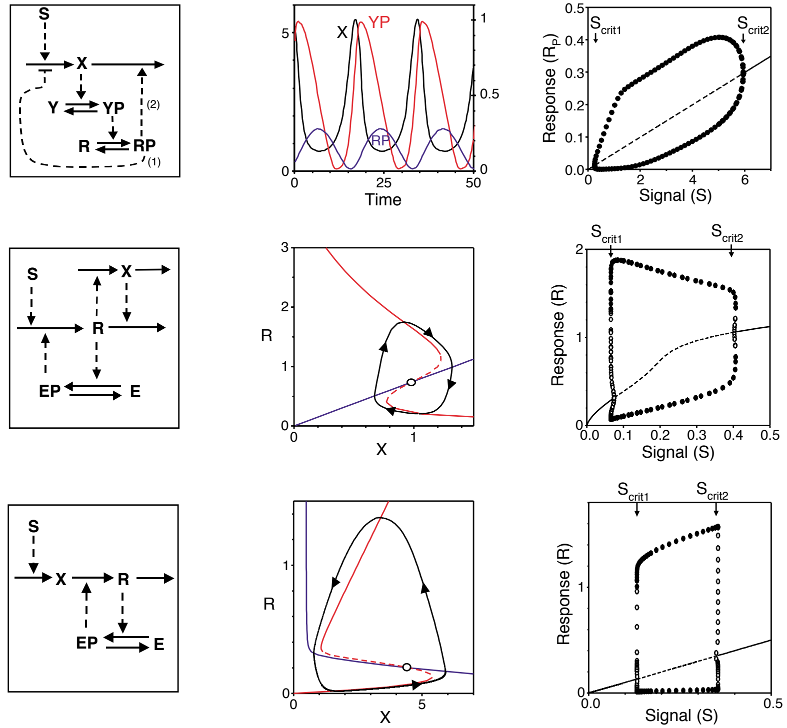
Πιο σύνθετα μονοπάτια μπορεί να εμφανίζουν *ασυνεχείς* και *μη-αντιστρεπτές* ή *ομοιοστατικές* αποκρίσεις

Tyson, Chen, Novak,
Curr. Opin. Cell Biol. ***15***, 221 (2003)

positive feedback

negative feedback





ή *περιοδικές* αποκρίσεις
(ταλαντωτική συμπεριφορά)

... διάφορες βιολογικές εφαρμογές
(κυτταρικός κύκλος, κτλ.)

Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις

Στις *μερικές δ.ε.* η άγνωστη συνάρτηση είναι συνάρτηση πολλών μεταβλητών και οι μερικές παράγωγοί της ως προς διάφορες μεταβλητές εμφανίζονται στην εξίσωση

Εξίσωση Διάχυσης σε 1 διάσταση

Μερική δ.ε. $2^{ης}$ τάξης

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

$c(x,t)$: συγκέντρωση κάποιας ουσίας

D: συντελεστής διάχυσης

Περιγράφει την χρονική μεταβολή της συγκέντρωσης *λόγω τυχαίας θερμικής κίνησης*, που οδηγεί σε ροή σωματιδίων από περιοχές μεγαλύτερης συγκέντρωσης προς περιοχές μικρότερης συγκέντρωσης

Η ροή σωματιδίων J είναι ανάλογη της βαθμίδας της συγκέντρωσης:

$$J = -D\frac{\partial c}{\partial x}$$

νόμος Fick

Όταν $\vartheta c/\vartheta x > 0$ ($\vartheta c/\vartheta x < 0$) δηλαδή η $c(x)$ αύξουσα (φθίνουσα), τότε $J < 0$ ($J > 0$)

Από την σχέση ορισμού της ροής σωματιδίων J και την διατήρηση του αριθμού των σωματιδίων (=> $\vartheta c/\vartheta t = -\vartheta J/\vartheta x$), προκύπτει η εξίσωση διάχυσης (όταν το D είναι ανεξάρτητο της θέσης)

Εξίσωση Διάχυσης σε 3 διαστάσεις

Μερική δ.ε. 2ης τάξης

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}\right)$$

$$c(\vec{r},t) = c(x,y,z,t)$$

ή, ισοδύναμα,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \cdot \nabla^2 c$$

όπου

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x}\hat{i} + \frac{\partial}{\partial y}\hat{j} + \frac{\partial}{\partial z}\hat{k} \qquad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Ο τελεστής στο δεύτερο μέρος μπορεί να εκφραστεί σε καμπυλόγραμμες συντεταγμένες, για προβλήματα με κατάλληλη συμμετρία

Η ροή σωματιδίων είναι: $\vec{J} = -D \cdot \vec{\nabla} c$

Τυπικός χρόνος διάνυσης απόστασης *L* με διάχυση: $t \approx L^2/D$

Διαχεόμενη ουσία και περιβάλλον	Συντελεστής διάχυσης*
Ιόν Κ σε νερό	$\approx 2000\ \mu m^2/sec$
Σφαιρική πρωτεΐνη σε νερό	$\sim 100\ \mu m^2/sec$
GFP σε κυτταρόπλασμα E.coli	$\approx 7\ \mu m^2/sec$
DNA σε πυρήνα ζύμης	$\approx 5 \times 10^{-4}\ \mu m^2/sec$

**Physical Biology of the Cell*, 2nd Ed., Garland Science (2013)

Παρόμοια με την εξίσωση διάχυσης είναι η μερική δ.ε. θερμικής αγωγιμότητας

Εξίσωση Θερμικής Αγωγιμότητας σε 1 διάσταση

Μερική δ.ε. 2ης τάξης

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

$$a^2 = \frac{\kappa}{\rho c}$$

$T(x,t)$: θερμοκρασία

κ: συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας

ρ: πυκνότητα μάζας

c: ειδική θερμοχωρητικότητα

Περιγράφει την χρονική μεταβολή της θερμοκρασίας σε ένα υλικό λόγω ροής θερμότητας από περιοχές υψηλότερης θερμοκρασίας προς περιοχές χαμηλότερης θερμοκρασίας

Η ροή θερμότητας J είναι ανάλογη της βαθμίδας της θερμοκρασίας: $$J_E = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x}$$ νόμος Fourier

Εξίσωση Θερμικής Αγωγιμότητας σε 3 διαστάσεις

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a^2 \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) = a^2 \cdot \nabla^2 T$$

$$T(\vec{r},t) = T(x,y,z,t)$$

Η ροή θερμότητας είναι: $$\vec{J}_E = -\kappa \cdot \vec{\nabla} T$$

Κυματική εξίσωση σε 1 διάσταση

Μερική δ.ε. 2ης τάξης

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2}$$

ξ(*x*,*t*): πυκνότητα για ακουστικά/ηχητικά κύματα,
ένταση ηλεκτρικού πεδίου για η.μ. κύματα,
πλάτος μετατόπισης για ταλαντούμενη χορδή
κτλ.

v: ταχύτητα διάδοσης του κύματος

Η εξίσωση έχει λύσεις του τύπου $\xi(x,t) = f(x - vt)$ (οδευόντων κυμάτων σταθερής μορφής)

Κυματική εξίσωση σε 3 διαστάσεις

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} = v^2 \left(\frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial z^2} \right) = v^2 \cdot \nabla^2 \xi$$

$$\xi(\vec{r},t) = \xi(x,y,z,t)$$

Μέθοδος επίλυσης μερικών δ.ε.

Μια μερική δ.ε. επιλύεται σε συνδυασμό με

1) κατάλληλες *συνοριακές συνθήκες* που ισχύουν *για κάθε χρονική στιγμή* στα όρια της περιοχής του χώρου που μας ενδιαφέρει, και προκύπτουν από το εκάστοτε πρόβλημα

2) *αρχικές συνθήκες* που δίνουν την αρχική (για $t = 0$) χωρική κατανομή της συνάρτησης αν η μερική δ.ε. είναι 1ης τάξης ως προς τον χρόνο (όπως η εξίσωση διάχυσης),
ή τις αρχικές χωρικές κατανομές της συνάρτησης και της πρώτης χρονικής παραγώγου της αν η μερική δ.ε. είναι 2ης τάξης ως προς τον χρόνο (όπως η κυματική εξίσωση)

Η βασική μέθοδος επίλυσης μερικών δ.ε. είναι η *μέθοδος χωρισμού μεταβλητών*

- (1ο βήμα) Γράφουμε την άγνωστη συνάρτηση πολλών μεταβλητών σαν *γινόμενο* διαφορετικών συναρτήσεων των ανεξάρτητων μεταβλητών
- (2ο βήμα) Αντικαθιστούμε στην μερική δ.ε. και διαιρώντας με την άγνωστη συνάρτηση καταλήγουμε στην ισότητα μεταξύ δύο συναρτήσεων *διαφορετικών ανεξάρτητων μεταβλητών*, που μπορεί να ικανοποιείται μόνο όταν αυτές ισούνται με μια σταθερά
- (3ο βήμα) Οι τελευταίες ισότητες οδηγούν σε *συνήθεις* δ.ε. τις οποίες λύνουμε
- (4ο βήμα) Εφαρμόζουμε τις *συνοριακές συνθήκες* για να προσδιορίσουμε κάποιες από τις σταθερές που προκύπτουν από την επίλυση των συνήθων δ.ε., καθώς και διακριτές τιμές της σταθεράς που προέκυψε στο 2ο βήμα
- (5ο βήμα) Γράφουμε την ζητούμενη λύση σαν *γραμμικό συνδυασμό των ανεξάρτητων λύσεων* που προέκυψαν στο 3ο και 4ο βήμα (λόγω της γραμμικής και ομογενούς δ.ε. και των συνοριακών συνθ.)
- (6ο βήμα) Εφαρμόζουμε τις *αρχικές συνθήκες* για να προσδιορίσουμε τις σταθερές του γραμμικού συνδυασμού του βήματος 5

Παράδειγμα: Απελευθέρωση φαρμάκου από λεπτό πλακίδιο (slab) πάχους L. Υποθέτουμε ότι το φάρμακο διαχέεται μέσα στο παρασκεύασμα με συντελεστή διάχυσης D, αρχικά είναι ομοιογενώς κατανεμημένο στο εσωτερικό του (έστω N_0 ο αρχικός αριθμός των μορίων του φαρμάκου στο πλακίδιο) και όταν φτάνει με διάχυση στις επιφάνειες του πλακιδίου απομακρύνεται αμέσως στο περιβάλλον (συνοριακές συνθήκες).

Έχουμε να λύσουμε την εξίσωση διάχυσης στην μία διάσταση λόγω της συμμετρίας του προβλήματος, όπου x η διάσταση κατά μήκος της λεπτής πλευράς του πλακιδίου

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \qquad (1)$$

$c(x,t)$: γραμμική συγκέντρωση φαρμάκου (αριθμός μορίων φαρμάκου ανά μονάδα μήκους)

με συνοριακές συνθήκες $\quad c(x=0,t)=0 \quad (2), \qquad c(x=L,t)=0 \quad (3)$

και αρχικές συνθήκες $\quad c(x,t=0)=\text{constant}=N_0/L \quad (4)$

1ο βήμα: $\quad c(x,t)=\mathrm{X}(x)\cdot T(t) \quad (5)$

2ο βήμα: $\quad (1)\Rightarrow \dfrac{\mathrm{X}(x)\cdot T'(t)}{\mathrm{X}(x)\cdot T(t)} = D\dfrac{\mathrm{X}''(x)\cdot T(t)}{\mathrm{X}(x)\cdot T(t)} \Leftrightarrow \dfrac{1}{D}\dfrac{T'(t)}{T(t)} = \dfrac{\mathrm{X}''(x)}{\mathrm{X}(x)} = \text{constant} = -k^2 \quad (6)$

3ο βήμα: $\quad (6)\Rightarrow T'(t)=-k^2 D T(t) \Leftrightarrow T(t)=ae^{-k^2 Dt} \quad (7)$

$(6)\Rightarrow \mathrm{X}''(x)+k^2\mathrm{X}(x)=0 \Leftrightarrow \mathrm{X}(x)=A\cos(kx)+B\sin(kx) \quad (8)$

4ο βήμα: $\quad (2)\Rightarrow \mathrm{X}(x=0)=0 \xrightarrow{(8)} A=0$

$(3)\Rightarrow \mathrm{X}(x=L)=0 \xrightarrow{(8)} B\sin(kL)=0 \xrightarrow{\mathrm{B}\neq 0\ (\mathrm{X}(x)\neq 0)} k=n\pi/L, \quad n=1,2,3,\ldots$

Από τις (5), (7) και (8) οι ανεξάρτητες λύσεις που έχουν προκύψει είναι: $\quad c_n\cdot\sin\left(\dfrac{n\pi}{L}x\right)\cdot e^{-\frac{n^2\pi^2}{L^2}Dt}, \quad n=1,2,3,\ldots$

όπου c_n σταθερές

5ο βήμα: $$c(x,t)=\sum_{n=1,2,3,\ldots} c_n \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\cdot e^{-\frac{n^2\pi^2}{L^2}Dt} \qquad (9)$$

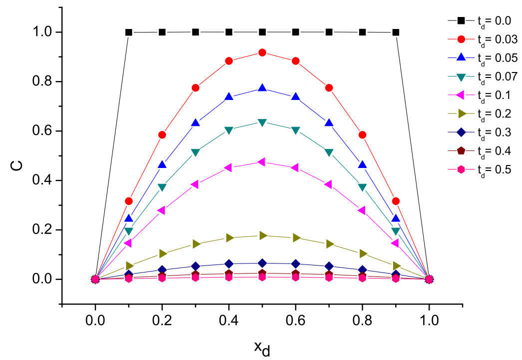
6ο βήμα: $$(9),(4)\Rightarrow \quad c(x,t=0)=\sum_{n=1,2,3,\ldots} c_n \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)=\frac{N_0}{L} \qquad (10)$$

$$(10)\Rightarrow \quad c_n=\frac{2}{L}\int_0^L \frac{N_0}{L}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx=\frac{2}{n\pi}\frac{N_0}{L}\int_0^{n\pi}\sin(y)dy=-\frac{2N_0}{n\pi L}\left(\cos(n\pi)-\cos(0)\right)=\begin{cases}0, & n=even\\ \frac{4N_0}{n\pi L}, & n=odd\end{cases} \qquad (11)$$

(ανάπτυγμα μιας συνάρτησης –εδώ της σταθεράς N_0/L – σε σειρά ημιτόνων)

Αντικαθιστώντας στην (9) τις σταθερές c_n από την (11), βρίσκουμε την ζητούμενη λύση που αποτελεί λύση της εξ. διάχυσης και ικανοποιεί τις συνοριακές και αρχικές συνθήκες του προβλήματος

$$c(x,t)=\frac{4N_0}{\pi L}\sum_{\substack{n=1,3,5,\ldots\\(n=odd)}}\frac{1}{n}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\cdot e^{-\frac{n^2\pi^2}{L^2}Dt}$$



Ο αριθμός των μορίων φαρμάκου που βρίσκεται στο εσωτερικό του σκευάσματος την χρονική στιγμή t είναι

$$N(t)=\int_0^L c(x,t)dx=\frac{4N_0}{\pi L}\sum_{\substack{n=1,3,5,\ldots\\(n=odd)}}\frac{1}{n}e^{-\frac{n^2\pi^2}{L^2}Dt}\cdot\int_0^L \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx=\frac{8N_0}{\pi^2}\sum_{\substack{n=1,3,5,\ldots\\(n=odd)}}\frac{1}{n^2}e^{-\frac{n^2\pi^2}{L^2}Dt}$$

ενώ το ποσοστό των μορίων φαρμάκου που έχουν απελευθερωθεί την χρονική στιγμή t (μια πειραματικά παρατηρούμενη ποσότητα) είναι

$$\frac{N_0-N(t)}{N_0}=1-\frac{N(t)}{N_0}=1-\frac{8}{\pi^2}\sum_{\substack{n=1,3,5,\ldots\\(n=odd)}}\frac{1}{n^2}e^{-\frac{n^2\pi^2}{L^2}Dt}$$