

A diffúzió–egyenlet kétféle levezetése és néhány tulajdonsága:

A MAKROFIZIKAI LEVEZETÉS: EGYENSÚLYI ELVEKBŐL — A HŐVEZETÉSI INTERPRETÁCIÓBAN Jelölje $u(t, x)$ az $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d = 1, 2, 3$) pont hőmérsékletét a $t \geq 0$ időpontban. A másik alapvető fogalom a hőáramlás időtől és helytől is függő vektormezője, az $\underline{F}(t, x)$. A harmadik a belső hőforrások $f(t, x)$ sűrűségfüggvénye.

Egy $G \subset \Omega$ térrészen belüli $Q(t) = \int_G c\rho u(t, x) dx$ hőenergia $\dot{Q}(t)$ megváltozása

$$= \text{a } \partial G \text{ peremen átáramló } - \int_{\partial G} \underline{F} \underline{ds} \text{ hőenergia} + \text{a belső hőforrások } \int_G f(t, x) dx \text{ munkája,}$$

azaz

$$\int_G c\rho u_t(t, x) dx = - \int_{\partial G} \underline{F} \underline{ds} + \int_G f(t, x) dx$$

tetszőleges korlátos $G \subset \Omega$ (nyílt) tartományon, ahol ρ az anyagsűrűség és c a fajhő. Az $\int_G \operatorname{div}(\underline{v}) dx = \int_{\partial G} \underline{v} \underline{ds}$ divergenciatétel valamint a diffúzió¹ $\underline{F} = -k \underline{\operatorname{grad}} u$ törvényének segítségével

$$\int_G c\rho u_t(t, x) dx = \int_G \operatorname{div}(k \underline{\operatorname{grad}} u) dx + \int_G f(t, x) dx,$$

amiből a

$$c\rho u_t(t, x) = \operatorname{div}(k \underline{\operatorname{grad}} u) + f(t, x) \quad (1)$$

végeredmény már közvetlenül adódik.² Amennyiben a k diffúziós együttható állandó (és nem $k = k(x)$ alakú függvény), a k állandó kihozható a divergencia operátora elé, és a végeredmény a $c\rho u_t = k\Delta u + f(t, x)$ alakra egyszerűsödik. Ha nincsenek belső hőforrások — azaz ha $f(t, x) \equiv 0$ —, akkor az $a^2 = \frac{k}{c\rho} > 0$ jelöléssel az (1) egyenlet az $u_t = a^2\Delta u$ alakot ölti, amely egy előre megadott $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d = 1, 2, 3$) korlátos tartomány pontjaiban érvényes. A továbbiakban azt is feltesszük, hogy mind a c fajhő, mind a ρ anyagsűrűség, és akkor velük együtt az $a > 0$ paraméter is térben–időben állandók.

A $u_t = a^2\Delta u$ parciális egyenlethez perem- és kezdeti-érték feltételek is tartoznak. A kezdeti feltétel $u(0, x) = g(x)$, $x \in \bar{\Omega}$ alakú. Peremfeltétel többféle is lehet: a két legfontosabb típus a Dirichlet-féle $u(t, x) = h(t, x)$, $(t, x) \in [0, \infty) \times \partial\Omega$ peremfeltétel, illetve a (Carl) Neumann-féle $\frac{\partial u}{\partial \underline{\nu}} = h(t, x)$, $(t, x) \in [0, \infty) \times \partial\Omega$ peremfeltétel. Magától értetődik, hogy itt g és h előre megadott függvények, míg

¹a diffúziós törvényt a hőtanban Fourier, a kémiában Fick, az elektromosságban Ohm nevéhez kötik — hát nem csodálatos, hogy ugyanaz a matematikai modell képes leírni a különböző természettudományok ‘saját’ jelenségeit? — A diffúzió–egyenlet u változója csak a hőtanban jelent hőmérsékletet: a kémiában egy folyadékban oldott anyag $0 < u \ll 1$ koncentrációját jelenti

²egy matematikus még az $\int_G (c\rho u_t(t, x) - \operatorname{div}(k \underline{\operatorname{grad}} u) - f(t, x)) dx = 0$ képletet is közbeiktatja, majd a “ha egy függvény integrálja minden $G \subset \Omega$ tartományon nulla, akkor a függvény azonosan nulla” tételre hivatkozik. (Ez a tétel csak folytonos függvényekre igaz! És különben is, már a divergenciatétel is csak olyan G tartományokra teljesül, amelyek határa ... ráadásul a t szerinti deriválást sem lehetett volna csak úgy bevinni az x szerinti integrálás jele mögé ... de nem akarom tovább karikírozni a dolgot. Elég az hozzá, nem baj, ha egy mérnöknek időnként eszébe jut, hogy minden számolás érvényességének megvannak a maga feltételei — még akkor is, ha ezek a feltételek a számára releváns esetekben automatikusan teljesülnek).

tetszőleges $x \in \partial\Omega$ esetén $\underline{\nu}(x)$ a kifelé mutató normális egységvektort, $\frac{\partial u}{\partial \underline{\nu}} = \langle \underline{\text{grad}} u(t, x), \underline{\nu}(x) \rangle$ pedig a $\underline{\nu}(x)$ mentén vett iránymenti deriváltat jelenti. A $h \equiv 0$ választás a legfontosabb, a Dirichlet-féle esetben ez egyenletes hűtést, a Neumann-féle esetben pedig teljes hőszigetelést jelent.

Megjegyzés: Homogén Neumann peremfeltétel esetén a divergencia-tételt felhasználva

$$\dot{Q}(t) = \int_{\Omega} c\rho u_t(t, x) dx = \int_{\Omega} \text{div}(k \underline{\text{grad}} u) dx = \int_{\partial\Omega} k \underline{\text{grad}} u \underline{ds} = \int_{\partial\Omega} 0 ds = 0 \quad \Rightarrow \quad Q(t) \equiv Q(0)$$

adódik (hiszen $\langle \underline{\text{grad}} u(t, x), \underline{\nu}(x) \rangle = 0$ minden $t \geq 0$ esetén), ami a hőtani interpretációban hőenergia-megmaradást, a kémiai interpretációban pedig a folyadékban oldott (és a diffúzióval terjedő) anyag mennyiségének/tömegének megmaradását jelenti.

Megjegyzés: egy dimenzióban lineáris változó-transzformációkkal — “skálázással” — elérhető, hogy $a = 1$ és $x \in [0, \pi]$ legyen. Valóban, ha eredetileg $x \in [0, L]$, akkor

$$\text{a } \tau = \alpha t \quad , \quad y = \beta x \quad , \quad u(t, x) = \mathcal{U}(\alpha t, \beta x) = \mathcal{U}(\tau, y) \quad \text{lineáris helyettesítésekkel}$$

az $u_t = \mathcal{U}_{\tau} \cdot \alpha$, $u_{xx} = \mathcal{U}_{yy} \cdot \beta^2$ deriválások szerint

$$u_t = a^2 u_{xx} \quad , \quad (t, x) \in [0, \infty) \times [0, L] \quad \Rightarrow \quad \mathcal{U}_{\tau} \cdot \alpha = a^2 \mathcal{U}_{yy} \cdot \beta^2 \quad , \quad \text{azaz } \mathcal{U}_{\tau} = \mathcal{U}_{yy} \quad \text{ha } \beta L = \pi \text{ és } \alpha = a^2 \beta^2 .$$

Magától értetődik, hogy a lineáris helyettesítések a perem- és a kezdeti feltételekre is vonatkoznak.

Megjegyzés: Az $u_t = u_{xx}$, $u(t, 0) = u(t, \pi) = 0$, $u(0, x) = g(x)$ homogén Dirichlet feladat megoldható Fourier-sor alakjában:

$$u(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-n^2 t} \sin(nx) \quad \text{ahol} \quad c_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} g(x) \sin(nx) dx \quad , \quad n = 1, 2, \dots \quad (2)$$

Maga az egyenlet homogén lineáris, és a peremfeltétel is homogén. Így az $u(t, x)$ ($t \geq 0$, $x \in [0, \pi]$) megoldás az $e^{-n^2 t} \sin(nx)$ alapgoldások lineáris kombinációja. A lineáris kombináció együtthatóit a $t = 0$ kezdeti állapotot leíró $g \in L_2[0, \pi]$ függvény Fourier sorfejtése szolgáltatja. Hasonlóképpen, az $u_t = u_{xx}$, $u_x(t, 0) = u_x(t, \pi) = 0$, $u(0, x) = g(x)$ homogén Neumann feladat megoldása:

$$u(t, x) = \frac{c_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-n^2 t} \cos(nx) \quad \text{ahol} \quad c_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} g(x) \cos(nx) dx \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Fontos megjegyeznünk, hogy — még akkor is, ha a g függvény folytonos, sőt ha még a $g(0) = g(\pi) = 0$ kompatibilitási feltételek is teljesülnek — a megoldás “döccenve” indul: a $t = 0$ időpontban a Fourier-sorok konvergenciája általában csak az $L_2[0, \pi]$ térben garantált. Szerencsére ha $t > 0$, akkor a sorösszeg végtelenszer deriválható a t és az x hibrid változóiban. A $t \rightarrow \infty$ határátmenetben a homogén Dirichlet feladat megoldásának képlete egyenletes $u(t, x) \rightarrow 0$ kihűlést, a homogén Neumann feladat megoldásának képlete

pedig az integrál-átlaghoz tartó $u(t, x) \rightarrow \frac{c_0}{2} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi g(x) dx$ teljes hőmérséklet-kiegyenlítődést mutat.

(Ha az $x \in [0, L]$ intervallumon maradtunk volna egy általános $a > 0$ paraméter mellett, akkor a homogén Dirichlet feladat megoldása ez lett volna:

$$u(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} g_n \exp\left(-\left(a \frac{\pi}{L}\right)^2 n^2 t\right) \sin\left(\frac{\pi}{L} n x\right) \quad \text{ahol a} \quad g_n = \frac{2}{L} \int_0^L g(x) \sin\left(\frac{\pi}{L} n x\right) dx, \quad n = 1, 2, \dots$$

állandók éppen a $g : [0, L] \rightarrow \mathbb{R}$ függvény $\{\sin\left(\frac{\pi}{L} n x\right)\}_{n=1}^{\infty}$, $x \in [0, L]$ trigonometrikus rendszer szerinti Fourier sorfejtésének együtthatói.)

A MIKROFIZIKAI PONTOSABBAN A STATISZTIKUS FIZIKAI LEVEZETÉS: A DIFFÚZIÓ BROWN-MOZGÁS SZERINTI INTERPRETÁCIÓJÁBAN Egyetlen pontszerű részecske bolyong a számegyenesen. Mozgásáról csak annyit tudunk, hogy adott helyzetből δt idő alatt $\frac{1}{2}$ valószínűséggel jobbra, $\frac{1}{2}$ valószínűséggel balra megy, és pedig δx távolságot.

Jelölje $P(t, x)$ annak a valószínűségét, hogy a részecske a t időpillanatban a számegyenes x pontjától balra helyezkedik el. A t és a $t + \delta t$ időpillanat közötti lehetséges elmozdulásokat figyelembe véve, a $P(t + \delta t, x)$ valószínűségét kifejezzük a t időpillanathoz tartozó különböző valószínűségekkel. Az az állapot, hogy a $t + \delta t$ időpontban a részecske az x ponttól balra helyezkedik el, kétféleképpen alakulhat ki: ha a t időpillanatban balra volt az $x - \delta x$ ponttól, vagy ha benne volt az $(x - \delta x, x + \delta x)$ intervallumban. Az előző esetben továbbra is balra marad az x ponttól, az utóbbi esetben pedig a jobbra vagy balra lépések egyikével az x ponttól jobbra, másikával az x ponttól balra kerül. A valószínűségét figyelembe véve azt kapjuk, hogy a kétváltozós P függvény eleget tesz a

$$P(t + \delta t, x) = P(t, x - \delta x) + \frac{1}{2}(P(t, x + \delta x) - P(t, x - \delta x))$$

algebrai összefüggésnek. Ezután mindkét oldalból kivonjuk a $P(t, x)$ valószínűséget és osztunk a δt , a jobb oldalon pedig bővítünk a $(\delta x)^2$ kifejezéssel. Így

$$\frac{P(t + \delta t, x) - P(t, x)}{\delta t} = \frac{1}{2} \cdot \frac{P(t, x - \delta x) - 2P(t, x) + P(t, x + \delta x)}{(\delta x)^2} \cdot \frac{(\delta x)^2}{\delta t},$$

majd a $\frac{(\delta x)^2}{2\delta t} = 1$ skálázással és a $\delta t, \delta x \rightarrow 0$ határátmenettel a remélt $P_t(t, x) = P_{xx}(t, x)$ parciális differenciálegyenlet adódik.

Ha a $t = 0$ kezdeti időpontban a részecske biztosan az $x = 0$ pontban volt (azaz $P(0, x) = H(x)$ ahol H a Heaviside függvény), akkor a hőmaggal (lásd a 10-ik oldalon) vett konvolúciós integrál a

$$P(t, x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi t}} \int_{-\infty}^{\infty} H(\xi) e^{-\frac{(x-\xi)^2}{4t}} d\xi = \frac{1}{2\sqrt{\pi t}} \int_0^{\infty} e^{-\frac{(x-\xi)^2}{4t}} d\xi = \frac{1}{2\sqrt{\pi t}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{z^2}{4t}} dz = \Phi\left(\frac{x}{\sqrt{2t}}\right)$$

végeredménnyé egyszerűsödik. Itt $\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{s^2}{2}} ds$, a standard normális eloszlás eloszlásfüggvénye. A fizikusok ezt úgy mondják, hogy a diffúzió a Dirac deltát (vagy más nézőpontból a Heaviside függvény

általánosított deriváltját és ha úgy tetszik, Brown vízbe dobott pollen-csomagocskáját) $t > 0$ idő alatt az $\mathcal{N}(0, \sigma) = \mathcal{N}(0, \sqrt{2t})$ normális eloszlás $\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$ sűrűségfüggvényévé keni szét.

Nemnegatív mátrixok hatványozására vezető feladatok:

PERRON-FROBENIUS TÉTEL: Legyen $\mathbf{A} = \{a_{ij}\}_{i,j=1}^n$ nemnegatív, primitív mátrix. (Azaz ha az \mathbf{A} mátrixnak alkalmas k_0 -adik hatványa csupa pozitív elemet tartalmaz — vagy ami ezzel ekvivalens, ha az irányított átmenetgráf összefüggő és körei hosszának LNKO-ja egy. Konvenció: $(\{i\} \rightarrow \{j\}) \in E(\mathcal{G}) \Leftrightarrow a_{ji} > 0$.) Ekkor $\lambda_1 = r > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_n|$. Az $r > 0$ domináns sajátértékhez tartozó domináns sajátvektor jobbról $\mathbf{v} > \mathbf{0}$, balról $\mathbf{w}^T > \mathbf{0}^T$, a $\mathbf{w}^T \mathbf{v} = 1$ normálással. Továbbá

$$\frac{1}{r^k} \mathbf{A}^k \rightarrow \mathbf{v} \mathbf{w}^T \text{ ha } k \rightarrow \infty \text{ és a konvergencia rendje lényegében } \frac{1}{r^k} |\lambda_2|^k.$$

Tanulságos gyakorló feladat: Legyen $\mathbf{A} = \{a_{ij}\}_{i,j=1}^n$ 0-1 mátrix. A.) Igazolja, hogy $(A^k)_{i,j}$ az átmenetgráf j -edik csúcsából az i -edik csúcsba vezető k hosszúságú irányított utak száma. B.) Határozza meg a k_0 értékét 1.) az \mathbf{A} mátrix első néhány hatványa révén illetve 2.) az \mathbf{A} mátrixhoz rendelt átmenetgráf közvetlen vizsgálatával — ha $n = 4$ és $a_{11} = a_{14} = a_{21} = a_{32} = a_{43} = 1$ és a többi a_{ij} nulla.

PÉLDA 1. – FIBONACCI REKURZIÓ: Az $f_0 = f_1 = 1, f_{n+1} = f_n + f_{n-1}$ ($n = 1, 2, \dots$) másodrendű lineáris rekurziót felbontva az n -edik év ifjú és öreg nyúlparjainak száma szerinti két elsőrendű, egymáshoz csatolt $i_{n+1} = o_n, o_{n+1} = i_n + o_n$ lineáris rekurzióra, amelyek együtt mátrixos alakban is felírhatók:

$$\begin{pmatrix} i_{n+1} \\ o_{n+1} \end{pmatrix} = \mathbf{F} \begin{pmatrix} i_n \\ o_n \end{pmatrix}, \text{ ahol } \mathbf{F} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \text{ és } \begin{pmatrix} i_0 \\ o_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} i_k \\ o_k \end{pmatrix} = \mathbf{F}^k \begin{pmatrix} i_0 \\ o_0 \end{pmatrix}, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

$$\Rightarrow f_k = i_k + o_k = \frac{1}{\sqrt{5}} (\lambda_1^{k+1} - \lambda_2^{k+1}), \text{ ahol } \lambda_{1,2} = \frac{1 \pm \sqrt{5}}{2} \text{ az } \mathbf{F} \text{ mátrix sajátértékei.}$$

PÉLDA 2. – STABIL KORFA AZ \mathbf{L} LESLIE-MÁTRIXBÓL négy korosztály esetén, a $b_1, b_2, b_3 > 0$ születési/birth és az $s_1, s_2, s_3 > 0$ túlélési/survival rátákkal (amikor szintén teljesülnek a Perron-Frobenius tétel feltételei)

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 0 & b_1 & b_2 & b_3 \\ s_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & s_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & s_3 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \frac{1}{r^k} \begin{pmatrix} x_1^k \\ x_2^k \\ x_3^k \\ x_4^k \end{pmatrix} = \frac{1}{r^k} \mathbf{L}^k \mathbf{x}^0 \rightarrow (\mathbf{v} \mathbf{w}^T) \mathbf{x}^0 = (\mathbf{w}^T \mathbf{x}^0) \mathbf{v} \text{ ha } k \rightarrow \infty.$$

A karakterisztikus polinom $p_4(\lambda) = \lambda^4 - b_1 s_1 \lambda^2 - b_2 s_1 s_2 \lambda - b_3 s_1 s_2 s_3$. Mivel $1 < r$ és $1 < R$ (ahol is $R = b_1 s_1 + b_2 s_1 s_2 + b_3 s_1 s_2 s_3$ az egyedenkénti utódok átlagos száma) jelentése egyarant a végtelenhez tartó túlnépesedés, pusztán a biológiai tartalom alapján $1 < r \Leftrightarrow 1 < R$. Hasonlóképpen az aszimptotikus kihalás kettős megfogalmazása: $r < 1 \Leftrightarrow R < 1$. (Ugye a matematikai bizonyítás is mennyire szép volt?)

PÉLDA 3. – AMIKOR KEVESEBB IGAZ: permutáció-mátrix, avagy a cserebogarak négy korosztálya Itt $b_1 = b_2 = 0, b_3 = s_1 = s_2 = s_3 = 1$, és a $p_4(\lambda) = \lambda^4 - 1$ karakterisztikus polinom gyökei $\pm 1, \pm i$.

PÉLDA 4. – NEUMANN JÁNOS – AZ $u'_t = u''_{xx}$ ($t \geq 0$, $0 \leq x \leq L$) DIFFÚZIÓ–EGYENLET: *numerikus megoldás az (N) $u'_x(t, 0) = u'_x(t, L) = 0$ (Carl Neumann) valamint a (P) $u(t, 0) = u(t, L)$ & $u'_x(t, 0) = u'_x(t, L)$ (periodikus) peremfeltétel és az $u(0, x) = g(x)$ kezdeti feltétel esetén.*³

A numerikus $u_{ij} \approx u(i\tau, jh)$ megoldást a véges differenciák módszerével határozzuk meg, amely egy téglalap típusú rácsszerkezetet jelöl ki és olyan lineáris egyenletrendszerhez vezet, amelynek ismeretlenei a pontos megoldás rácsponthoz vett $u(i\tau, jh)$ értékeinek $u_{i,j}$ közelítései. A belső rácsponthoz vett parciális deriváltakat az $u_{i,j}$ ismeretlenekből képzett (magasabb rendű) különbségi hányadosokkal pótolva⁴ az alábbi egyenletrendszert nyerjük:

$$\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\tau} = \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h^2} \Leftrightarrow u_{i+1,j} = \mu u_{i,j+1} + (1 - 2\mu)u_{i,j} + \mu u_{i,j-1}, \quad (3)$$

ahol $0 < \mu = \frac{\tau}{h^2}$ pozitív paraméter. Amint arra részletesen is kitérünk majd, alapvető fontosságú, hogy teljesüljön a $\mu \leq \frac{1}{2}$ egyenlőtlenség. Az átrendezett egyenletrendszer explicit módon, időrétegenként oldható meg, kiindulva a nulladik időréteg rácsponthoz ismert $u_{0,j} = g(jh)$ ($j = 1, 2, \dots, N - 1$) $\Leftrightarrow \mathbf{u}_0 = \mathbf{g}$ numerikus kezdeti feltételekből. Így a közelítő megoldás kiszámítása — az (N) és a (P) feladatokban — az

$$\mathbf{A}_N = \begin{pmatrix} 1 - \mu & \mu & 0 & \dots & & 0 \\ \mu & 1 - 2\mu & \mu & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mu & 1 - 2\mu & \mu & 0 & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & \dots & 0 & \mu & 1 - 2\mu & \mu \\ 0 & & & \dots & 0 & \mu & 1 - \mu \end{pmatrix}, \quad \text{ahol } 0 < \mu \leq \frac{1}{2}$$

illetve az

$$\mathbf{A}_P = \begin{pmatrix} 1 - 2\mu & \mu & 0 & & & \mu \\ \mu & 1 - 2\mu & \mu & 0 & & 0 \\ 0 & \mu & 1 - 2\mu & \mu & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & \dots & 0 & \mu & 1 - 2\mu & \mu \\ \mu & & & \dots & 0 & \mu & 1 - 2\mu \end{pmatrix}, \quad \text{ahol } \begin{cases} 0 < \mu < \frac{1}{2} & \text{ha } N - 1 \text{ páros} \\ 0 < \mu \leq \frac{1}{2} & \text{ha } N - 1 \text{ páratlan} \end{cases}$$

$(N - 1) \times (N - 1)$ méretű szimmetrikus mátrixok hatványozására egyszerűsödik. (Az $(N - 1)$ -re vonatkozó esetsztérválasztásra a Perron–Frobenius Tétel feltételeit most is teljesítendő volt szükség.) A numerikus

³Az (N) és a (P) feladatokat a $\frac{d}{dt} \int_0^L u(t, x) dx = \int_0^L u'_t(t, x) dx = \int_0^L u''_{xx}(t, x) dx = u'_x(t, L) - u'_x(t, 0) = 0$ megmaradási tétel kapcsolja össze. (Fontos az is, hogy az \mathbf{A}_N és az \mathbf{A}_P mátrixok bármely sorában/oszlopában álló számok összege egy.)

⁴az idő szerinti $\frac{\partial}{\partial t}$ elsőrendű parciális derivált τ lépésközű explicit Euler és a tér szerinti $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ másodrendű parciális derivált $h = \frac{L}{N}$ lépésközű (másodrendű) centrális közelítése alapján

peremfeltételeket⁵ úgymond “beolvasztottuk” az A_N és az A_P mátrixok sarokelemeibe. — Numerikusan is igaz lesz: 1.) *energia-megmaradás a hőtani, anyag/tömeg-megmaradás a kémiai interpretációban* 2.) *az időben aszimptotikus homogenizálódás tulajdonsága* 3.) *a “maximum-elv” és a “minimum-elv”.*

A Perron–Frobenius Tétel jelöléseivel mindkét feladatban: $r = 1$ és $\mathbf{v} = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \text{col}(1, 1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^{N-1}$.

Az előző példa világosan mutatja, mit kell elvárunk egy jól megválasztott numerikus (diszkretizációs avagy iteratív) közelítő módszertől:

- Elvárjuk, hogy a számítógépes megoldás a pontos megoldás jó *kvantitatív* közelítését adja — ami azt jelenti, hogy a közelítő és a pontos megoldás különbsége alkalmas normában nullához tartson, ha a diszkretizációs lépésköz(ök) nullához tart(anak) illetve az iterációs lépések száma végtelenhez tart. (A számítógépi számábrázolás és a kerekítési hibák miatt ez a nullához tartás soha nem valósulhat meg ténylegesen. Numerikus szempontból a nagyon kis lépésköz is veszélyes; a nagyon sokadik iteráció pedig már nem javít semmit.)
- Elvárjuk, hogy a számítógépes megoldás a pontos megoldás jó *kvalitatív* közelítését adja — ami azt jelenti, hogy a választott közelítő eljárás respektálja a feladat fizikáját.

Vajon elégedettek lennének egy numerikus eljárással, amely negatív tömeghez vagy negatív illetve egynél nagyobb koncentrációhoz vezetne? Vagy ha következetesen és markánsan csökkentené/növelné az összenergiát vagy az össztömeget, jöllehet olyan feladattal van dolgunk, amelyekben ezek megmaradó mennyiségek? Nyilván nem.

A Neumann Jánostól származó $\mu = \frac{\tau}{h^2} \leq \frac{1}{2}$ feltételnek kettős szerepe van:

- azáltal, hogy az (N) és a (P) feladatokban $u_{i+1,j}$ az eggyel korábbi időréteghez tartozó $u_{i,j-1}$, $u_{i,j}$, és $u_{i,j+1}$ értékek konvex lineáris kombinációja lesz, garantálja a numerikus maximum-elmet. (Ez a (D) feladatra is igaz lesz, jöllehet ott a térbeli peremen lévő rácspontok külön megfontolást igényelnek.)
- mind az (N), mind a (P), mind a (D) feladatban garantálja a numerikus eljárás belső stabilitását. (Ezt kicsit nehezebb megérteni, de végső soron arról van szó, hogy $\mu = \frac{\tau}{h^2} > \frac{1}{2}$ esetén a numerikus számítások teljeseen “szétrázódnak”: érdemes kipróbálni⁶!)

A numerikus maximum (és minimum) elv könnyen érhető és könnyen is igazolható a (3) egyenletrendszer explicit képletei alapján: a nem-negatív súlyokkal képzett átlag nem lehet nagyobb, mint a maximum, és nem lehet kisebb, mint a minimum. Hidegzugok, melegzugok, csakúgy mint a koncentráció összesűrűsödései vagy ritkulásai csupán a diffúzió révén nem jöhetnek létre.

A téridő henger alakú tartományain a maximum is, és a minimum is a térbeli vagy az időbeli “töltényhüvely” peremen (is) felvétetik. Képletekkel kifejezve:

$$\begin{aligned} & \min\{u(t, x) \mid t = t_1, x_1 \leq x \leq x_2 \text{ vagy } t_1 \leq t \leq t_2, x = x_1, x_2\} \\ & \leq \min\{u(t, x) \mid t_1 \leq t \leq t_2, x_1 \leq x \leq x_2\} \leq \max\{u(t, x) \mid t_1 \leq t \leq t_2, x_1 \leq x \leq x_2\} \\ & \leq \max\{u(t, x) \mid t = t_1, x_1 \leq x \leq x_2 \text{ vagy } t_1 \leq t \leq t_2, x = x_1, x_2\}, \end{aligned}$$

⁵amelyek rendre (N) $u_{i,0} = u_{i,1}$ & $u_{i,N} = u_{i,N-1}$ illetve (P) $u_{i,0} = u_{i,N-1}$ & $u_{i,1} = u_{i,N}$ ($i = 1, 2, \dots$)

⁶A Los Alamos-i programozók a (lineáris skálázással elérhető) $a = 1$ esettel foglalkoztak, az idő szerinti τ és a tér szerinti h lépésközt pedig egyformának vették. Választásuk tehát $\mu = \frac{1}{h} \gg \frac{1}{2}$ volt ... — egészen addig, amíg Neumann Jánost meg nem kérdezték, mi okozza a számítógép számukra érthetetlen viselkedését.

ahol $0 < t_1 < t_2 < \infty$ és $0 \leq x_1 < x_2 \leq L$ tetszőlegesek. Az $u_t = \Delta u$ parciális differenciálegyenletre érvényes maximum- és minimum-érvényes teljes általánosságban is megfogalmazzuk majd és bizonyítani is fogjuk. (Az egydimenziós esetben teljesül a Pólya–Sturm tulajdonság is: az egyidejűleg zérus (vagy bármely más) Celsius hőmérsékletű pontok

$$N(t) = \#\{x \in [0, L] \mid u(t, x) = 0\}, \quad t > 0$$

száma véges és az időben monoton csökken. A “pupli”-k száma tehát soha nem nőhet az idő előrehaladtával.)

PÉLDA 5. — A PÉLDA 4. FOLYTATÁSA: *numerikus megoldás a (D) $u(t, 0) = u(t, L) = 0$ (Dirichlet) peremfeltétel és az $u(0, x) = g(x)$ kezdeti feltétel esetén.*

A feladat most⁷ — az

$$\mathbf{A}_D = \begin{pmatrix} 1-2\mu & \mu & 0 & \dots & & 0 \\ \mu & 1-2\mu & \mu & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mu & 1-2\mu & \mu & 0 & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & \dots & 0 & \mu & 1-2\mu & \mu \\ 0 & & & \dots & 0 & \mu & 1-2\mu \end{pmatrix}, \quad \text{ahol } 0 < \mu \leq \frac{1}{2}$$

$(N-1) \times (N-1)$ méretű szimmetrikus mátrix hatványozására egyszerűsödik. — Egyszerű indirekt okoskodással $1 > |\lambda_n|$ ($n = 1, 2, \dots, N-1$) ha $0 < \mu \leq \frac{1}{2}$, következésképpen $\mathbf{A}_D^k \rightarrow \mathbf{0}$ ha $k \rightarrow \infty$.⁸

PÉLDA 6. — MARKOV EGÉR A CELLÁK LABIRINTUSÁBAN *avagy véletlen bolyongás háromosztatú, a kettes és a hármas cella között kétkapus labirintusban.* Jelölje $\xi_n = i$ azt az eseményt, hogy az egér az n -edik időpontban éppen az i -edik cellában van, ahol $n = 0, 1, 2, \dots$ és $i = 1, 2, 3$. Így a P átmenetmátrix — melynek elemei a $p_{ij} = P(\xi_{n+1} = j \mid \xi_n = i)$ valószínűségek⁹:

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/3 & 0 & 2/3 \\ 1/3 & 2/3 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \pi_k^T = \pi_0^T \mathbf{P}^k \rightarrow \pi_0^T (\mathbf{v}\mathbf{w}^T) = \frac{1}{8}(2, 3, 3) \quad \text{ha } k \rightarrow \infty,$$

mert $r = 1$, $\mathbf{v} = \text{col}(1, 1, 1) \in \mathbb{R}^3$ és $\mathbf{w}^T = \frac{1}{8}(2, 3, 3)$ (bármely $\pi_0^T \in \Sigma = \{(x, y, z) \in \text{row}(\mathbb{R}^3) \mid x + y + z = 1, x, y, z \geq 0\}$ kezdeti eloszlásra). Felismerjük \mathbf{w}^T koordinátaiban az átmenetgráf csúcsainak fokszámát?

⁷A numerikus peremfeltételek (D) $u_{i,0} = 0$ & $u_{i,N} = 0$ ($i = 1, 2, \dots$), a numerikus kezdeti feltételek pedig a korábbiakkal egyezően $u_{0,j} = g(jh)$ ($j = 1, 2, \dots, N-1$).

⁸Itt jegyezzük meg, hogy az \mathbf{A}_N , \mathbf{A}_P , \mathbf{A}_D mátrixok teljes sajátérték-sajátvektor rendszere explicit módon számolható.

⁹Sor-sztochasztikus konvenció, ahol az átmenetgráfban ($\{i\} \rightarrow \{j\}$) $\in E(\mathcal{G}) \Leftrightarrow p_{ij} > 0$: az egér az egymás utáni időpontokban mindig egyforma valószínűséggel választ az aktuális cella kapui között — a cellalabirintusokból származó illeten bolyongások \mathcal{G} gráfjai és P Markov mátrixai mind speciális szerkezetűek: tekinthetjük többszörös élekkel rendelkező irányítás (és külön súlyozás) nélküli gráfoknak is őket, a hozzájuk tartozó $P = P_{\mathcal{G}} = D_{\mathcal{G}}^{-1} A_{\mathcal{G}}$ mátrixoknak pedig minden sajátértéke valós. Itt $D_{\mathcal{G}} = \text{diag}(2, 3, 3)$ az a diagonális mátrix, amelynek elemei az irányítás nélküli \mathcal{G} gráf csúcspontjainak fokszámai, $A_{\mathcal{G}}$ pedig a \mathcal{G} gráf szomszédsági mátrixa (ahol is $a_{12} = a_{21} = a_{13} = a_{31} = 1$ és $a_{23} = a_{32} = 2$ [a többi elem pedig nulla]).

MAXIMUM-ELV AZ $u_t = \Delta u$ EGYENLETRE: Legyen $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ korlátos (nyílt) tartomány, és legyen $T > 0$ tetszőleges. Vezessük be az

$$\Omega_T = (0, T) \times \Omega \quad , \quad \partial^* \Omega_T = (\{0\} \times \overline{\Omega}) \cup ((0, T) \times \partial \Omega)$$

jelöléseket¹⁰. Ekkor

$$\max\{u(t, x) \mid (t, x) \in \overline{\Omega_T}\} = \max\{u(t, x) \mid (t, x) \in \partial^* \Omega_T\} . \quad (4)$$

Bizonyítás: A bizonyítás — jóllehet annak két részre bontása ugyancsak szellemes — nem használ fel mást, mint az egyváltozós függvények vizsgálatának szokásos lépéseit.

1.) Tegyük fel először, hogy $u_t < u_{x_1 x_1} + u_{x_2 x_2}$. Megmutatjuk, hogy (4) még ekkor is teljesül. Az indirekt feltevés azt mondja, van olyan $(t^*, x^*) \in (0, T] \times \Omega$ pont, hogy

$$u(t^*, x^*) = \max\{u(t, x) \mid (t, x) \in \overline{\Omega_T}\} > \max\{u(t, x) \mid (t, x) \in \partial^* \Omega_T\} .$$

Ekkor $u_{x_1}(t^*, x^*) = 0$ és $u_{x_1 x_1}(t^*, x^*) \leq 0$ valamint $u_{x_2}(t^*, x^*) = 0$ és $u_{x_2 x_2}(t^*, x^*) \leq 0$. Így

$$u_t(t^*, x^*) < \Delta u(t^*, x^*) = u_{x_1 x_1}(t^*, x^*) + u_{x_2 x_2}(t^*, x^*) \leq 0 ,$$

amiből $u(t^* - \delta, x^*) > u(t^*, x^*)$ ha $0 < \delta \ll 1$ (azaz ha $\delta > 0$ elegendően kicsi). Tehát olyan ponto(ka)t sikerült megkonstruálni a $(0, T] \times \Omega$ halmazban, ahol az u függvény értéke nagyobb a maximumnál, ami ellentmondás.

2.) Most visszatérünk az eredeti u függvényhez. Az $\varepsilon > 0$ paraméter segítségével definiáljuk a $v_\varepsilon(t, x) = u(t, x) - \varepsilon t$ segédfüggvényeket. Mivel

$$(v_\varepsilon)_t(t, x) = u_t(t, x) - \varepsilon = \Delta u(t, x) - \varepsilon < \Delta u(t, x) = \Delta v_\varepsilon(t, x) ,$$

a bizonyítás első része szerint

$$\max\{v_\varepsilon(t, x) \mid (t, x) \in \overline{\Omega_T}\} = \max\{v_\varepsilon(t, x) \mid (t, x) \in \partial^* \Omega_T\}$$

tetszőleges $\varepsilon > 0$ esetén. A kívánt (4) tulajdonság az $\varepsilon \rightarrow 0^+$ határátmenettel adódik. \square

A maximum-elvet a $-u$ függvényre átfogalmazva a

$$\min\{u(t, x) \mid (t, x) \in \overline{\Omega_T}\} = \min\{u(t, x) \mid (t, x) \in \partial^* \Omega_T\} \quad (5)$$

minimum-elvet kapjuk. A *maximum-elv és a minimum-elv együttes következménye* — ha azokat a két hipotetikus megoldás különbségére alkalmazzuk — AZ $u_t = \Delta u + f(t, x)$, $u(0, \cdot)|_\Omega = g$, $u|_{(0, \infty) \times \partial \Omega} = h$ KEZDETI- ÉS PEREMÉRTÉK-FELADAT KLASSZIKUS (az előző lábjegyzetben felsorolt símasági feltételeket kielégítő) MEGOLDÁSÁNAK UNICITÁSA. Ez utóbbi kijelentés független a kérdéses megoldás létezésétől.

Vegyük észre, hogy a bizonyítás lokális jellegű és tetszőleges $(t_1, t_2) \times G \subset (0, \infty) \times \Omega$ nyílt henger “töltényhüvely”-t alkotó “csillagos perem”-ére megismételhető, akkor is ha az x térváltozó nem $d = 2$, hanem $d = 1, 3$ vagy éppen $d \geq 4$ dimenziós. A bizonyítás első része azt is mutatja, hogy maga a maximum-elv igaz az $u_t = \Delta u - u^2$ nemlineáris reakció-diffúzió egyenletre is.

¹⁰A $d = 2$ választás miatt könnyű a szemléltetés. Itt Ω_T egy, az $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^2$ téridőben fekvő korlátos nyílt henger, $\partial^* \Omega_T$ az Ω_T henger “csillagos pereme” (azaz kezdőlapjának és palástja lezárásának az úniója — a “tényleges töltényhüvely”). Annak rendje-módja szerint feltesszük, hogy az u függvény folytonos a $[0, \infty) \times \overline{\Omega}$ zárt halmazon, a t időváltozó szerint egyszer, az $x = (x_1, x_2)$ helyváltozó szerint kétszer folytonosan deriválható annak $(0, \infty) \times \Omega$ belsejében, továbbá ugyanott eleget tesz az $u_t = \Delta u (\equiv u_{x_1 x_1} + u_{x_2 x_2})$ egyenletnek.

Most visszatérünk a Példa 4. A_N mátrixához: Vizsgáljuk a

$$\left. \begin{array}{l} \text{diffúzió-egyenlet:} \\ \text{homogén (N) peremfeltétel:} \\ \text{kezdeti feltétel:} \end{array} \right\} \begin{array}{l} u'_t = u''_{xx} \text{ ahol } 0 \leq t \leq T, 0 \leq x \leq L \\ u'_x(t, 0) = u'_x(t, L) = 0 \text{ ahol } 0 \leq t \leq T \\ u(0, x) = g(x) \text{ ahol } 0 \leq x \leq L \end{array} \quad \text{feladat} \quad (6)$$

közelítő és pontos megoldásának eltérését a $[0, T] \times [0, L]$ téglalap $(i\tau, jh)$ rácspontjaiban, ahol $i = 0, 1, 2, \dots, M$, $j = 0, 1, 2, \dots, N$ és $M\tau = T$, $Nh = L$, valamint $\mu = \frac{\tau}{h^2} \leq \frac{1}{2}$. Célunk tehát HIBABECSLÉS LEVEZETÉSE a (3) egyenletrendszerből kiszámolt $u_{i,j} \approx u(i\tau, jh)$ közelítő megoldás és a mostantól $\bar{u}_{i,j} = u(i\tau, jh)$ által jelölt pontos megoldás között.

Feltesszük, hogy az $\bar{u}(t, x)$ pontos megoldás folytonos az $[0, T] \times [0, L]$ halmazon, és azt is (ami a "döccenve" indulás miatt már nem jelenti az általánosság megszorítását), hogy a $(0, T] \times (0, L)$ halmazon t szerint kétszer, x szerint négyszer folytonosan deriválható.¹¹ A belső rácspontokban tehát

$$\frac{\bar{u}_{i+1,j} - \bar{u}_{i,j}}{\tau} + m_{i,j}^1 = \frac{\bar{u}_{i,j+1} - 2\bar{u}_{i,j} + \bar{u}_{i,j-1}}{h^2} + m_{i,j}^2 \Leftrightarrow \bar{u}_{i+1,j} = \mu\bar{u}_{i,j+1} + (1 - 2\mu)\bar{u}_{i,j} + \mu\bar{u}_{i,j-1} + \tau m_{i,j},$$

ahol $m_{i,j} = m_{i,j}^2 - m_{i,j}^1$. Bevezetve a *rácspontokban vett lokális hibákat* jelölő $e_{i,j} = \bar{u}_{i,j} - u_{i,j}$ változókat, a legutóbbi valamint a (3) sorszámú egyenlet különbsége

$$e_{i+1,j} = \mu e_{i,j+1} + (1 - 2\mu)e_{i,j} + \mu e_{i,j-1} + \tau m_{i,j}, \quad \text{legalábbis a belső rácspontokban.} \quad (7)$$

Idézzük fel az \mathbf{A}_N mátrix bal felső és jobb alsó sarokeleméhez vezető numerikus (N) $u_{i,0} = u_{i,1}$ & $u_{i,N} = u_{i,N-1}$ peremfeltételeket. A pontos megoldásra érvényes $\bar{u}'_x(t, 0) = \bar{u}'_x(t, L) = 0$ peremfeltétel alapján $\bar{u}_{i,0} = \bar{u}_{i,1} + \mathcal{O}(h^2)$ és $\bar{u}_{i,N} = \bar{u}_{i,N-1} + \mathcal{O}(h^2)$ adódik. Tehát a közelítő megoldás értékeit az egymás utáni időrétegeken kiszámoló

$$\mathbf{u}_{i+1} = \mathbf{A}_N \mathbf{u}_i \quad (i = 0, 1, 2, \dots, M-1), \quad \mathbf{u}_0 = \mathbf{g} \in \mathbb{R}^{N-1} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{u}_i = \mathbf{A}_N^i \mathbf{g} \quad (i = 0, 1, 2, \dots, M) \quad (8)$$

mátrixhatványozás valamint az időrétegről időrétegre haladó *hibaterjedés mechanizmusát leíró*

$$\mathbf{e}_{i+1} = \mathbf{A}_N \mathbf{e}_i + \mathbf{m}_i \quad (i = 0, 1, 2, \dots, M-1), \quad \mathbf{e}_0 = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^{N-1} \quad (9)$$

inhomogén mátrix-rekurzió alapszerkezete megegyezik egymással. Ez egy roppant lényeges és nagy általánosságban is érvényes megállapítás. HA VAN MÓDSZERÜNK A KÖZELÍTŐ MEGOLDÁS KISZÁMÍTÁSÁRA, AKKOR ENNEK A MÓDSZERNEK EGY VÁLTOZATA A HIBABECSLÉSHEZ IS ELVEZET.

¹¹

$$u(t + \tau) = u(t) + \tau u_t(t) + \mathcal{O}(\tau^2) \quad \Rightarrow \quad \frac{\bar{u}_{i+1,j} - \bar{u}_{i,j}}{\tau} = \bar{u}_t(i\tau, jh) + m_{i,j}^1$$

és

$$\left. \begin{array}{l} u(x + h) = u(x) + h u_x(x) + \frac{h^2}{2} u_{xx}(x) + \frac{h^3}{6} u_{xxx}(x) + \mathcal{O}(h^4) \\ u(x - h) = u(x) - h u_x(x) + \frac{h^2}{2} u_{xx}(x) - \frac{h^3}{6} u_{xxx}(x) + \mathcal{O}(h^4) \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{\bar{u}_{i,j+1} - 2\bar{u}_{i,j} + \bar{u}_{i,j-1}}{h^2} = \bar{u}_{xx}(i\tau, jh) + m_{i,j}^2$$

ahol $|m_{i,j}^1| \leq C\tau$ és $|m_{i,j}^2| \leq Ch^2$ és így $|m_{i,j}| \leq C(\tau + h^2)$ minden belső rácspontban, azaz ha $i = 1, 2, \dots, M$ és $j = 1, 2, \dots, N-1$. (Itt C alkalmas állandó.)

Tanulságos gyakorló feladat: Idézzük fel a numerikus sorok konvergenciáját biztosító kritériumok egyikét — mondjuk az integrálkritériumot — és alkalmazzuk azt a sor maradékösszegére. Mi mást kaphatnánk, mint egy becslést a konvergencia gyorsaságára? Konkrétan: legyen $s = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3}$ és legyen $s_N = \sum_{n=1}^N \frac{1}{n^3}$, amikor is $|s_N - s| \leq \int_{N+1}^{\infty} \frac{1}{x^3} dx = \frac{1}{2(N+1)^2}$. Hogyan kaphatunk alsó becslést?

Visszatérve a (6) feladat (8) numerikus megoldásához tartozó (9) hibaterjedési rekurzióra, ez utóbbit kifejezetten könnyű explicit hibabecsléssé alakítani. Valóban, az

$$\eta_i = \max\{|e_{i,j}| \mid j = 1, 2, \dots, N-1\}, \quad i = 0, 1, 2, \dots, M-1 \quad \text{ahol } \eta_0 = 0,$$

a (7) formula és az $m_{i,j}$ -re adott becslés alapján az i szerinti rekurzióval — és most kell nagyon a $\mu \leq \frac{1}{2}$ feltevés (de a végeredményből is látszik, hogy τ és h^2 legalábbis azonos nagyságrendű kell hogy legyen) —

$$\eta_{i+1} \leq (2\mu + |1 - 2\mu|)\eta_i + \tau\mathcal{C}(\tau + h^2) = \eta_i + \tau\mathcal{C}(\tau + h^2) \quad \Rightarrow \quad \max_{i=0}^M \eta_i \leq \max_{i=0}^M i\tau\mathcal{C}(\tau + h^2) = T\mathcal{C}(\tau + h^2).$$

ÖSSZEFOGLALÁS: A (6) perem-és kezdetiérték problémát megoldó numerikus eljárás hibája tehát a lépésközök minden határon túl való csökkentésével — természetesen a $\mu = \frac{\tau}{h^2} \leq \frac{1}{2}$ feltételre mindvégig vigyáznunk kell — nullához tart, és pedig legalább $T(\tau + h^2)$ rendben. Már korábban kifejtettük, hogy a pontos megoldás kvalitatív tulajdonságai is megőrződnek:

$$\left. \begin{array}{l} \int_0^L u(t, x) dx = \int_0^L g(x) dx \quad \forall t \geq 0 \\ \lim_{t \rightarrow \infty} u(t, x) \rightarrow \frac{c_0}{2} = \frac{1}{L} \int_0^L g(x) dx \\ \text{max- és min-elv a "csillagos" peremeken} \end{array} \right\} \quad \text{illetve} \quad \left\{ \begin{array}{l} \sum_{j=1}^{N-1} u_{i+1,j} = \sum_{j=1}^{N-1} u_{i,j} \quad \forall i = 0, 1, \dots \\ \lim_{i \rightarrow \infty} u_{i,j} \rightarrow \frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} g(jh) \\ \text{max- és min-elv a "visszafelé vett" átlagokra} \end{array} \right.$$

A megadott határértékek $x \in [0, L]$ -ben és $j = 1, 2, \dots, N-1$ -ben egyenletesek.

A diffúzió-egyenlet a számegeyenesen — Poisson megoldóképlete és a normális eloszlás

Tétel: Tetszőleges $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ folytonos és korlátos függvény esetén

$$u(t, x) = \begin{cases} g(x) & \text{ha } t = 0 \\ \frac{1}{2\sqrt{\pi t}} \int_{-\infty}^{\infty} g(\xi) \exp\left(-\frac{(x-\xi)^2}{4t}\right) d\xi & \text{ha } t > 0 \end{cases} \quad (10)$$

megoldása, és pedig egyetlen megoldása az $u_t = u_{xx}$, $(t, x) \in [0, \infty) \times \mathbb{R}$ egyenletnek, az $u(0, x) = g(x)$ kezdeti feltétel mellett. A konvolúciós integrál magfüggvénye az úgynevezett "hőmag".

Közvetlen behelyettesítés mutatja, hogy a megadott formula $t > 0$ esetén valóban megoldja a a parciális egyenletet. (A formula levezetése jóval keményebb dió.) Azt sem könnyű igazolni, hogy $u(t, x) \rightarrow g(x)$ ha $t \rightarrow 0^+$. Amennyiben az g függvénynek véges sok és pedig csupa elsőfajú szakadása van, akkor is igaz a (10) megoldóképlet, de ekkor a szakadási pontokban $u(t, x^*) \rightarrow \frac{g(x^*-0) + g(x^*+0)}{2}$ ha $t \rightarrow 0^+$.

Most visszatérünk a diffúzió-egyenlet statisztikus fizikai vizsgálatához, amelyet a 3-ik oldal alján kezdtünk el. Elöljáróban áttekintjük a normális eloszlások kétparaméteres $\mathcal{N}(\mu, \sigma)$ családját, ahol $\mu \in \mathbb{R}$ a várható érték, $\sigma > 0$ pedig a szórás (és σ^2 a szórásnégyzet).

Először az általános $\mathcal{N}(\mu, \sigma)$, majd a standard normális $\mathcal{N}(0, 1)$ eloszlást írjuk le:

$$\mathcal{N}(\mu, \sigma) \text{ sűrűségfüggvénye } f_{\mu, \sigma}(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \text{ és eloszlásfüggvénye } \Phi_{\mu, \sigma}(x) = \int_{-\infty}^x f_{\mu, \sigma}(s) ds,$$

$$\mathcal{N}(0, 1) \text{ sűrűségfüggvénye } f(x) = f_{0,1}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \text{ és eloszlásfüggvénye } \Phi(x) = \Phi_{0,1}(x) = \int_{-\infty}^x f(s) ds.$$

A kettő kapcsolata:

$$f_{\mu, \sigma}(x) = \frac{1}{\sigma} f\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right) \quad \text{és} \quad \Phi_{\mu, \sigma}(x) = \Phi\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right).$$

A 3-ik oldal alján lévő számolások tehát a (10) formula $g = H$ (egységugrás más néven Heaviside függvény: $H(x) = 0$ ha $x < 0$, $H(x) = \frac{1}{2}$ ha $x = 0$, $H(x) = 1$ ha $x > 0$) speciális esetéből indulnak és semmi mást nem igényelnek mint lineáris változó-helyettesítéseket az integrálban. Az első helyettesítés az $x - \xi = z$ (és így “ ξ fut 0-tól ∞ -ig” alapján “ z fut x -től $-\infty$ -ig” ahol a “ $-d\xi = dz$ ” formula szerint a “ z határai megfordulnak”), a második helyettesítés — a $t > 0$ esetben — pedig a $\frac{z}{\sqrt{2t}} = s$ választással¹²:

$$P(t, x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi t}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{z^2}{4t}} dz = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\frac{x}{\sqrt{2t}}} e^{-\frac{s^2}{2}} ds = \Phi\left(\frac{x}{\sqrt{2t}}\right) = \Phi_{0, \sqrt{2t}}(x).$$

Normális eloszlások időben változó családjának eloszlásfüggvényeit kaptuk, a $\mu = 0$ és $\sigma = \sqrt{2t}$ paraméterekkel. Az x változó szerinti deriválással sűrűségfüggvényekre is áttérhetünk:

$$P_x(t, x) = \varphi_{0, \sqrt{2t}}(x) \quad \text{már amennyiben } t > 0 \quad (\text{és } x \in \mathbb{R}). \quad (11)$$

A $P_t = P_{xx}$ egyenletet x szerint deriválva, $(P_x)_t = (P_x)_{xx}$ adódik. Már tudjuk, hogy ez utóbbi egyenletet — ismét csak a $t > 0$ értékekre — a (11) formula oldja meg. De hogyan válasszuk meg a kezdeti feltételt? Mihez vezet a $t \rightarrow 0^+$ határátmenet? Ha az $x \in \mathbb{R}$ értékét rögzítjük, akkor

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} P_x(t, x) = \lim_{t \rightarrow 0^+} \varphi_{0, \sqrt{2t}}(x) = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} e^{-\frac{x^2}{4t}} = \begin{cases} 0 & \text{ha } x \neq 0 \\ \infty & \text{ha } x = 0. \end{cases}$$

Milyen értelemben lesz ez a szokatlan határérték függvény, pláne eloszlásfüggvény (mert hogy eloszlásfüggvények egy családjá “indul el” belőle ha $t > 0$)? Ezen a ponton szokás a Dirac deltát, mint disztribúció-értelemben¹³ általánosított függvényt bevezetni. A $\delta = \delta_0$ Dirac delta az az általánosított függvény, amely minden $x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ esetén zérus, az alatta lévő terület azonban egy. A diffúzió a Dirac deltát (vagy

¹²Lehetett volna érvelnünk közvetlenül a $4t = 2\sigma^2 \Leftrightarrow 2\sqrt{\pi t} = \sigma\sqrt{2\pi}$ észrevétel alapján is.

¹³Disztribúciónak az $u : C_0^\infty(\mathbb{R}, \mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}$ folytonos lineáris funkcionálokot nevezzük. Ezek egyike a $\delta(\varphi) = \varphi(0)$ képlettel definiált Dirac delta disztribúció. Itt

$$C_0^\infty(\mathbb{R}, \mathbb{R}) = \{\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \mid \varphi \text{ végtelenszer deriválható és egy } \varphi\text{-től függő, korlátos intervallumon kívül azonosan zérus}\}.$$

A lokálisan (Lebesgue szerint) integrálható $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ függvényt azzal az u_f disztribúcióval szokás azonosítani, amelyet a (minden $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ esetén érvényes) $u_f(\varphi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\varphi(x) dx$ formula definiál. Ha u disztribúció, akkor a $(\partial u)(\varphi) = -u(\varphi')$ képlettel definiált deriváltja is az. Fontos észrevétel, hogy C^1 függvényekre a hagyományos derivált és a disztribúció

más nézőpontból a Heaviside függvény disztribúció értelemben általánosított deriváltját és ha úgy tetszik, Brown vízbe dobott pollen-csomagocskáját — amely azonnal számtalan kicsiny pollen-szemcsére esik szét) $t > 0$ idő alatt az $\mathcal{N}(0, \sigma) = \mathcal{N}(0, \sqrt{2t})$ normális eloszlás $\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$ sűrűségfüggvényévé keni szét.

Az eddigiek alapján az $u_t = a^2 u_{xx}$, $(t, x) \in [0, \infty) \times \mathbb{R}$ diffúziós egyenletet is könnyen megoldhatjuk. Az $u(t, x) = \mathcal{U}(\tau, x)$, $\tau = ct$ lineáris helyettesítéssel

$$u_t = \frac{d}{dt}u(t, x) = \frac{d}{dt}\mathcal{U}(ct, x) = \frac{d}{d\tau}\mathcal{U}(\tau, x) \cdot c = \mathcal{U}_\tau(\tau, x) \cdot c \quad \text{és} \quad u_{xx} = \mathcal{U}_{xx} \quad \text{alapján} \quad u_t = a^2 u_{xx} \Leftrightarrow \mathcal{U}_\tau \cdot c = a^2 \mathcal{U}_{xx},$$

adódik, tehát a $c = a^2$ választással az eddig vizsgált “vegyük a diffúziós együtthatót $a^2 = 1$ -nek” esethez jutunk. Ha a kezdeti feltétel változatlanul $u(0, x) = \mathcal{U}(0, x) = H(x)$, akkor¹⁴

$$\mathcal{U}(\tau, x) = \Phi_{0, \sqrt{2\tau}}(x) \quad \Rightarrow \quad u(t, x) = \Phi_{0, \sqrt{2a^2 t}}(x) = \Phi_{0, a\sqrt{2t}}(x), \quad (t, x) \in (0, \infty) \times \mathbb{R}.$$

Az $u_t = u_{xx} - bu_x$, $u(0, x) = H(x)$ feladat $u(t, x) = \Phi_{0, \sqrt{2t}}(x - bt)$ megoldásához az $u(t, x) = e^{\alpha t} e^{\beta x} z(t, x)$ helyettesítés vezet el: a paraméterek optimális, $\alpha = -\frac{b^2}{4}$ és $\beta = \frac{b}{2}$ megválasztása révén a feladat a már ismert $z_t = z_{xx}$, $z(0, x) = e^{-\beta x} u(0, x)$ alakra egyszerűsödik. A szokásos diffúzió-egyenlet és az $u_t = -bu_x$ transzport-egyenlet fenti kombinációja azt a kísérletet modellezi, amikor a pollen-csomagocskát állóvíz helyett patakvízbe dobjuk: a patak folyásiránya az x irány, sebessége pedig a $b > 0$ állandó.

értelemben vett derivált azonosnak tekinthető, hiszen bármely $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ esetén

$$(\partial u_f)(\varphi) = -u_f(\varphi') = -\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\varphi'(x) dx = [-f(x)\varphi(x)]_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} f'(x)\varphi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f'(x)\varphi(x) dx = (u_{f'}) (\varphi).$$

Ami a H Heaviside függvény disztribúció értelemben vett deriváltját illeti, arra

$$(\partial u_H)(\varphi) = -u_H(\varphi') = -\int_{-\infty}^{\infty} H(x)\varphi'(x) dx = -\int_0^{\infty} \varphi'(x) dx = [-\varphi(x)]_0^{\infty} = \varphi(0) = \delta(\varphi) \quad \Leftrightarrow \quad \partial u_H = \delta$$

adódik. A Dirac deltát úgy is lehet értelmezni, mint a $0 \in \mathbb{R}$ számhoz tartozó egy-pont-mértéket. Ezt a $\delta(A) = 1$ ha $0 \in A$ és 0 ha $0 \notin A$ valamint az $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) d\delta = f(0)$ képletek fejezik ki (ahol $A \subset \mathbb{R}$ tetszőleges halmaz, illetve f tetszőleges, az $x_0 = 0$ pontban folytonos valós függvény).

¹⁴A találékony Olvasó a lineáris helyettesítést a (10) formulában is biztosan el tudja végezni. Brown virágporkísérletét az $u(0, \cdot, \cdot) = \delta_{(0,0)}$ Dirac delta kezdeti sűrűségfüggvénnyel ellátott kétdimenziós $u_t = a^2(u_{xx} + u_{yy})$ egyenlet természetesen jobban modellezi. Mivel az x és az y irányú Brown-mozgások függetlenek egymástól, a megoldás a két egydimenziós formula

$$u(t, x, y) = \frac{1}{4a^2\pi t} e^{-\frac{x^2+y^2}{4a^2 t}}, \quad (t, x, y) \in (0, \infty) \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}$$

szorzataként adódik. A megoldás körszimmetrikus és nem függ az egymásra merőleges x és y irányok konkrét megválasztásától. Ezek a szimmetriák természetesen a kezdetiérték-feladatban is jelen vannak és a

$$\text{ha} \quad u(t, x, y) = u(t, r \cos(\phi), r \sin(\phi)) = \mathcal{U}(t, r, \phi), \quad \text{akkor} \quad u_{xx} + u_{yy} = \mathcal{U}_{rr} + \frac{1}{r} \mathcal{U}_r + \frac{1}{r^2} \mathcal{U}_{\phi\phi} \quad \text{és} \quad \mathcal{U} \quad \text{nem függ a } \phi\text{-től,}$$

illetve a

$$\text{ha} \quad u(t, x, y) = u(t, \xi \cos(\phi) - \eta \sin(\phi), \xi \sin(\phi) + \eta \cos(\phi)) = \mathcal{U}(t, \xi, \eta), \quad \text{akkor} \quad u_{xx} + u_{yy} = \mathcal{U}_{\xi\xi} + \mathcal{U}_{\eta\eta}$$

változó-transzformációkkal fejezhető ki. — A mögöttes számolásokat könnyű elrontani. Senki ne szomorodjon el, ha a levezetések csak a második vagy a harmadik próbálkozásra sikerülnek.

ÖSSZEFOGLALÁS: Az $u_t = -\operatorname{div}(\underline{F}) + f$ egyenlet változatai alapvetően \underline{F} és f választásától valamint – rendszerek esetében – a csatolásoktól függenek:

- diffúzió: $\underline{F} = \underline{F}_{diff} = -k_1 \underline{\operatorname{grad}} u$
- advekción: $\underline{F} = \underline{F}_{adv} = k_2 u \underline{v}$, ahol \underline{v} az áramló közeg ismert sebessége
- advekción–diffúzió: $\underline{F} = \underline{F}_{adv-diff} = -k_1 \underline{\operatorname{grad}} u + k_2 u \underline{v}$
- reakción–diffúzió: $u_t = \alpha^2 \Delta u + f(u, v)$, $v_t = \beta^2 \Delta v + g(u, v)$ — ahol $\dot{u} = f(u, v)$, $\dot{v} = g(u, v)$ egy, az Ω tartomány minden pontjában azonos módon lejátszódó kémiai reakción egyenletrendszere
- chemotaxis–diffúzió: $\underline{F} = \underline{F}_{chtaxis-diff} = -\ell u \underline{\operatorname{grad}} c - \beta^2 \underline{\operatorname{grad}} u$, ahol a szaporodni is képes baktérium (koncentrációja u) menekül egy külső kémiai folyamatban képződő mérge (koncentrációja c) elől — így a csatolt rendszer: $c_t = \alpha^2 \Delta c + f(c)$, $u_t = \beta^2 \Delta u - \ell \operatorname{div}(u \underline{\operatorname{grad}} c) + g(c, u)$

Mindezek a parciális differenciálegyenletek perem- és kezdeti feltételekkel együtt értendők.

Az első három példa mindegyike — már amennyiben az f forrástag sem függ az u ismeretlentől — az advekción–diffúzió egyenlettel bezárólag *lineáris feladat*. A k_1 diffúziós együttható a legegyszerűbb esetben valódi, az $x \in \mathbb{R}^d$ ($d = 1, 2, 3$) térváltozótól független állandó: a $\operatorname{div}(k_1 \underline{\operatorname{grad}} u) = k_1 \Delta u$ azonosság ekkor érvényes. A diffúziós k_1 és az advekcións k_2 együtthatók helytől és időtől való függetlensége az alkalmazások többségében jogosult feltételezés. Az inhomogenitás megjelenésének diffúzióegyenletben szokásos módja az f forrástag $f = f(t, x)$ alakú választása. Az áramló közeg \underline{v} sebessége az advekciónegyenletben szinte mindig $\underline{v} = \underline{v}(t, x)$ alakú¹⁵. Inhomogenitást a peremfeltételek inhomogenitása is okozhat¹⁶.

Amennyiben az f forrástag $f = f(t, x, u)$ vagy akár csak $f = f(u)$ alakú, már *nemlineáris feladat*-tal állunk szemben: tipikusan ez a helyzet a reakción–diffúzió egyenletek esetében. A nemlineáris feladatok minőségileg mások, és a lineáris feladatoknál sokkal de sokkal nehezebbek.

A félév folyamán tárgyalni fogjuk

- a kedvező gének térbeli (egyenes menti) terjedését leíró $u_t = u_{xx} + u(1 - u)$ Fisher–egyenlet valamint
- az idegi ingerületvezetés Hodgkin–Huxley modelljének (ez három közönséges és egy parciális differenciálegyenletből álló rendszer) *utazó hullámát*, továbbá
- az $u_t = \alpha^2 u_{xx} + au + bv$, $v_t = \beta^2 v_{xx} + cu + dv$ alakú rendszerekben megfigyelhető *mintázatképződés* Turing féle alapmechanizmusát.

A félév nagyobb részében egyébként közönséges differenciálegyenletekkel foglalkozunk. A zárt alakban megoldható parciális differenciálegyenletek tipikusan azok, amelyek közönséges differenciálegyenletekre redukálhatók: ilyenkor próbafüggvények “bevetésével” speciális alakú megoldásokat keresünk.¹⁷

¹⁵sőt a valódi alkalmazások jó részében \underline{v} maga is (a Navier–Stokes egyenletekkel kapcsolatos) ismeretlen

¹⁶A Dirichlet peremfeltétel $u|_{\partial\Omega} = h(t, x)$ alakú inhomogenitása (legalábbis a hőtani alkalmazásokban) könnyen megvalósítható. A Neumann peremfeltétel — amúgy $\frac{\partial u}{\partial \underline{v}}|_{\partial\Omega} = h(t, x)$ alakú — inhomogenitása a gyakorlatban csak ritkán fordul elő. (A h függvény mindkét esetben a $t \geq 0$, $x \in \partial\Omega$ változókra értelmezett.)

¹⁷Ha egy lineáris parciális egyenlet belső szimmetriái és értelmezési tartományának szimmetriái azonos szerkezetűek, akkor az általános megoldás is gyakorta előállítható speciális függvények szerinti (nem feltétlenül trigonometrikus Fourier–)sorfejtés avagy különféle integráltranszformációk révén. Legerősebb eszközünk azonban a számítógép, pontosabban a feladat természetének leginkább megfelelő számítógépes eljárás.

A dinamikus rendszer és a diszkretizációs/közelítő módszer fogalma I. : Előkészítés

Amint azt a fenti fejezetcím is egyértelműen kifejezi, a különböző típusú feladatokat:

- algebrai egyenletek,
- közönséges differenciálegyenletek,
- diffúzió típusú, más szóval parabolikus parciális differenciálegyenletek,

sőt

- azok megoldásának elméleti és numerikus vonatkozásait

együttesen fogjuk tárgyalni, a hangsúlyt a közönséges differenciálegyenletek autonóm változataira téve.

Ezt a tárgyalási módszert nemcsak a matematika, hanem a biológiai modell-alkotás belső természete is indokoltta teszi. UGYANAZT A BIOLÓGIAI JELENSÉGET — attól függően, hogy a konkrét helyzetben milyen tényezőket kell figyelembe vennünk és melyeket lehet elhanyagolnunk — A MATEMATIKA KÜLÖNBÖZŐ ÁGAZATAIN BELÜL EGYARÁNT LEHET MODELLEZNI.

Különféle egyfaj- és kétfaj/többfaj-modellek a populációdinamikában. Sok példa

A *populációdinamika* történetileg első matematikai modellje Malthus

$$\dot{x} = rx, \quad x(0) = x_0 > 0 \quad \Rightarrow \quad x(t) = x_0 e^{rt} \quad (12)$$

nevéhez fűződik. Itt az $r > 0$ állandó interpretálható úgy, mint a b *születési ráta* és a d *halálozási ráta* (birth rate illetve death rate) különbsége. A $b > 0$ és a $d > 0$ konstansnak vétele egyfajta átlagolást fejez ki (és nem azt, hogy minden egyed egyformán képes a szaporodásra, sem azt, hogy a halál minden korosztályban egyformán arathat). Ami a (12) egyenletben a leginkább kritizálható, az az erőforrás-korlátok figyelmen kívül hagyása. Verhulst modellje ebből a szempontból sokkal realiztikusabb:

$$\left. \begin{array}{l} \dot{x} = rx \left(1 - \frac{x}{K}\right) \\ x(0) = x_0, \quad 0 \leq x_0 \leq K \end{array} \right\} \Rightarrow x(t) = \frac{Kx_0}{x_0 + (K - x_0)e^{-rt}} \quad (13)$$

Itt $r > 0$ a *növekedési ráta*, $K > 0$ pedig a *környezet eltartóképessége*. Verhulst differenciálegyenlete is finomításra szorul: figyelmen kívül hagyja például azt a tényt, hogy csak az ivarérett korú egyedek szaporodhatnak. Egy faj egyedeinek a szaporodás szempontjából két korosztályra bontására már Fibonacci is ügyelt — jóllehet csak egyetlen konkrét számpélda kapcsán¹⁸ — vagy hatszáz évvel korábban. Leslie modellje a huszadik századi matematika absztrakciós erejével ismétli meg Fibonacci gondolatmenetét. A

¹⁸Fibonacci példájában az egyetlen faj egyedeinek évenkénti száma magától értetődően csak egész szám lehetett. Ha az időváltozó nem diszkrét, avagy ha (a diszkrét időváltozó mellett) térváltozónk is van, és a térváltozó nem diszkrét, akkor az illető faj egyedszáma helyett mindig a biomassza tömege a kérdéses. Ugyanez természetesen a populációdinamika többfaj-modelljeire is érvényes.

modellalkotás szempontjából Leslie egyetlen újítása az egyes korosztályok közötti túlélési ráta (survival rate) s ezen keresztül a maximálisan lehetséges életkor szerepeltetése — amint ezt a 4-ik oldal első két példájának összehasonlítása azonnal mutatja.

Az eddigi négy modell közül egyedül Verhulst (13) modellje nemlineáris. Természetesen ennek is van diszkrét idejű változata, az

$$\left. \begin{array}{l} x_{n+1} = \frac{Rx_n}{1 + \frac{R-1}{K}x_n}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \\ 0 \leq x_0 \leq K \end{array} \right\} \Rightarrow x_N = \frac{Kx_0}{x_0 + (K - x_0)R^{-N}}, \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (14)$$

Beverton–Holt féle nemlineáris rekurzió¹⁹. Itt $R > 1$ jelenti a növekedési rátát, s a logisztikus (13) differenciálegyenlethez hasonlóan most is $K > 0$ a környezet eltartóképesége. A $K \rightarrow \infty$ határátmenettel (13) illetve (14) Malthus sokat kritizált, de nagy történelmi fontosságú (12) modelljébe, illetve ennek diszkrét idejű $x_{n+1} = Rx_n$ változatába megy át. A legfontosabb matematikai észrevétel azonban az, hogy a 4-ik oldalon tárgyalt PÉLDA 1 és PÉLDA 2 mátrix-hatványozásai a Beverton–Holt féle nemlineáris $f : [0, K] \rightarrow [0, K]$, $x \rightarrow f(x) = \frac{Rx}{1 + \frac{R-1}{K}x}$ függvény iterálásának felelnek meg.

A tényt, hogy szaporodás csak az ivarérettség elérése után lehetséges, folytonos idejű modellekben időkésleltetés bevezetésével szokás kifejezésre juttatni. Késleltetett egyenletek esetében a jövőt nemcsak a $t = t_0$ jelen, hanem az $s \in [t_0 - \tau, t_0]$ közelmúlt határozza meg. Itt a $\tau > 0$ állandó a késleltetés mértéke, az annál régebbi állapotok már nincsenek hatással a jövő alakulására. Kézenfekvő, hogy Malthus (12) differenciálegyenletének az $\dot{x}(t) = bx(t - \tau) - dx(t)$ késleltetett egyenlet felel meg: szaporodni csak a $\tau > 0$ -nál idősebb egyedek képesek. Verhulst (13) modelljét Hutchinson az

$$\dot{x}(t) = rx(t) \left(1 - \frac{x(t - \tau)}{K} \right)$$

alakú késleltetett differenciálegyenletre módosította. Elsőrendű parciális valamint integro–differenciálegyenlet modellek is lehetségesek, amelyek az egyes populációk folytonos koreloszlását is figyelembe tudják venni.

A térbeliség figyelembe vétele a populációdinamikában többféle módon is lehetséges. Az időváltozóhoz hasonlóan a térváltozó is lehet folytonos vagy diszkrét. Diszkrét térváltozóra a legegyszerűbb példákat az \mathbb{R}^d ($d = 1, 2, 3$) egy korlátos részhalmazának rác-, illetve cellafelbontásai szolgáltatják. Cellafelbontás alatt szabályos, minél több szimmetriával rendelkező rácselfelbontásokat értünk. Lehetséges az is, hogy a tér

¹⁹A zárt alakú megoldás azért lehetséges, mert az $a_n = \frac{1}{x_n}$ új változó és az $\alpha = \frac{1}{R}$, $\beta = \frac{R-K}{RK}$ új paraméterek bevezetése után a mértani sorozat rekurzív definíciójánál csak kicsivel bonyolultabb

$$a_{n+1} = \alpha a_n + \beta, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad \Rightarrow \quad a_N = \alpha^N a_0 + \beta \frac{\alpha^N - 1}{\alpha - 1} \quad N = 0, 1, 2, \dots$$

formulákat kapjuk. A folytonos idejű Verhulst (13) modellt és a diszkrét idejű Beverton–Holt modellt a lépésköz $h = \frac{R-1}{r}$ választása mellett

$$x_{n+1} = x_n + hr x_n \left(1 - \frac{x_{n+1}}{K} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

semiimplicit Euler diszkrétizáció is összekapcsolja. Valóban,

$$x_{n+1} = x_n + r \frac{R-1}{r} x_n \left(1 - \frac{x_{n+1}}{K} \right) \Leftrightarrow x_{n+1} = Rx_n - \frac{R-1}{K} x_n x_{n+1} \Leftrightarrow (14).$$

pontjait egy adott véges gráf csúcspontjaival reprezentáljuk. A numerikus módszerek szinte mindegyike a tér- és az időváltozó diszkretizálását igényli. A diszkretizációval, illetve a számítógépes közelítő eljárásokkal kapcsolatos általános szempontok a két részletben tárgyalt PÉLDA 4 révén már nem ismeretlenek előttünk. Érdemes visszalapozni az 5-7 valamint a 9-10 oldalakhoz.

A folytonos térváltozó Verhulst (13) modelljébe legegyszerűbben a diffúzió-operátor hozzáadásával építhető be. A térváltozó koordinátái a dimenziótól függően $x \in \Omega \subset \mathbb{R}$, $(x, y)^T \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$, vagy $(x, y, z)^T \in \Omega \subset \mathbb{R}^3$. A t időváltozó mellett ezek lesznek az ismeretlen $u : [0, \infty) \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ függvény változói az

$$u_t = ru \left(1 - \frac{u}{K}\right) + a^2 \Delta u$$

alakú reakció-diffúzió egyenletben. Az $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d = 1, 2, 3$) tartomány $\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$ lezártjának pontjaihoz kezdeti, $\partial\Omega$ határához pedig peremfeltételt is kell rendelnünk.

A diszkrét tér a dinamikában önálló — ugyanakkor a dinamikus rendszerek általános elméletével több ponton is érintkező — diszciplínákat képez. Ezek egyike a *celluláris automaták*, másika a *neurális háló* világa, a maga peremfeltételeivel, input-outputjaival és visszacsatolásaival.

A populációdinamika egyfaj-modelljeinél maradván, mindenképpen meg kell említeni, hogy az r, b, d, K paraméterek szezonális, az évszakok változásától függő ingadozásokat — általában éves periodicitást — mutatnak. Így nem-autonóm mátrix- és/vagy differenciálegyenlet-modellekhez jutunk.

Sajnos az egyenletekben szereplő paraméterek mérése, meghatározása nem könnyű feladat. Ez a tény önmagában indokolja *sztochasztikus modellek* bevezetését. Ami a sztochasztikát illeti, a félév folyamán egyedül a *véletlen gráfok* három legfontosabb típusának — Erdős-Rényi, Albert-Barabási és Strogatz-Watts (más néven Bernoulli, skálafüggetlen illetve kis-világ gráfok) — konstrukcióit fogjuk megismerni, illetve a rajtuk értelmezett sztochasztikus dinamikák egyikét-másikát számítógéppel szimulálni.

Ez eddig elmondottak mind-mind kiterjeszthetők arra az esetre, amikor több, egymás élet-lehetőségeire a legkülönbözőbb módokon ható fajokból álló ökoszisztémákat vizsgálunk. Ez a *többfaj-modellek* világa. Két faj együttélésének (közös erőforrásokért) *versengő*, *szimbiotikus*, avagy éppen *ragadozó-zsákmány* eseteinek szokásos

$$\left. \begin{aligned} \dot{x} &= x(c_1 + a_1x + b_1y) \\ \dot{y} &= y(c_2 + a_2x + b_2y) \end{aligned} \right\} \text{ ahol } c_1, c_2, a_1, a_2, b_1, b_2 \in \mathbb{R} \text{ adott konstansok és } x, y \geq 0 \quad (15)$$

kvadratikusan differenciálegyenlet-modellje Lotka és Volterra nevéhez fűződik. Az esetszétváasztásokat a $c_1, c_2, a_1, a_2, b_1, b_2 \in \mathbb{R}$ paraméterek előjelei határozzák meg. A hat paraméter közül három lineáris változó-helyettesítésekkel ± 1 -re kiskálázható. A Kolmogorov féle általánosítás

$$\dot{x}_k = x_k \alpha_k(x_1, x_2, \dots, x_d) \quad \text{ahol } x_k \geq 0, \quad k = 1, 2, \dots, d \quad (16)$$

alakú. Itt $\alpha_k : \mathbb{R}_+^d \rightarrow \mathbb{R}$ ($k = 1, 2, \dots, d$) adott folytonosan differenciálható függvények. A biológiailag releváns fázistér — amint az a (15) és a (16) egyenletrendszerekben is megjelenik — \mathbb{R}^2 illetve \mathbb{R}^d nemnegatív (és az indukált dinamikára invariáns) ortánsa. Magától értetődik, hogy az ortánsok végtelen távoli pontja egyetlen trajektóriát sem vonzhat: minden trajektóriának $t \rightarrow \infty$ mellett korlátosnak kell maradnia.

A *kétdimenziós Lotka-Volterra* (15) *rendszerek* konkrét példák és általánosításokon át történő — nem minden részletében egyformán olvasmányos, de reményeim szerint mégiscsak jól követhető — bemutatása a *Nemlineáris Dinamika jegyzet*²⁰ 3.8 fejezetében található. A dinamika jellege az egyensúlyi helyzetek

²⁰http://digitus.itk.ppke.hu/~garay/NDS_jegyzet/

kis környezetében a linearizálás módszerével, a “nyom–determináns” ábra szerinti esetszétválasztásokkal állapítható meg. Az $x \geq 0, y \geq 0$ síknegyedben kívüli pontokkal nem kell törődnünk, mivel azok semmilyen biológiai jelentést sem hordoznak. Az origó mindig egyensúlyi helyzet, a vízszintes $y = 0, x \geq 0$ és a függőleges $x = 0, y \geq 0$ féltengelyek pedig egyenként is mindig invariánsak: a dinamika rajtuk könnyen megrajzolható.

Mind az x , mind az y tengelyen tipikusan egy-egy, az origótól különböző egyensúlyi helyzet van, ezek az $y = 0, c_1 + a_1x + b_1y = 0$ illetve az $x = 0, c_2 + a_2x + b_2y = 0$ lineáris egyenletrendszerek megoldásai. A nemnegatív $x, y \geq 0$ ortáns $x, y > 0$ belsejében — ismétcsak a tipikus esetben — legfeljebb egyetlen egyensúlyi helyzet van, éspedig az a pont, ahol a $c_1 + a_1x + b_1y = 0$ és a $c_2 + a_2x + b_2y = 0$ egyenesek metszik egymást. A vektormező a $c_1 + a_1x + b_1y = 0$ egyenes pontjaiban függőleges (és az \dot{y} derivált ottani előjelétől függően felfelé vagy lefelé mutat), az $c_2 + a_2x + b_2y = 0$ egyenes pontjaiban vízszintes (és az \dot{x} derivált ottani előjelétől függően jobbra vagy balra mutat). Az egyensúlyi helyzetek környezetében az is eligazít, ha egy-két közeli pontra rárajzoljuk a vektormező ottani elemét²¹.

A globális dinamika megrajzolásához fontos a következőt tudni: *egy kétdimenziós Lotka–Volterra (15) rendszernek pontosan akkor létezik periodikus megoldása, ha a belső egyensúlyi helyzetéhez tartozó sajátértékek $\lambda_{1,2} = \pm i\omega, \omega \neq 0$. Ez esetben a belső egyensúlyi helyzet centrum, és az egymásba skatulyázott periodikus megoldások teljesen kitöltik az $x, y > 0$ pozitív ortánszt.* Ennek a ténynek az ismeretében (ha még a végtelen távoli pont körüli dinamikát is “feltérképezzük”) az egyensúlyi helyzetek körüli lokális ábrák összeköttetései, más szóval a közöttük lévő trajektória–kapcsolódások is egyértelművé válnak és így a teljes, globális fázisportré is megrajzolható.

A kétdimenziós Lotka–Volterra (15) rendszerek a síkbeli autonóm differenciálegyenletek fázisportré–analízisének legjobb gyakorló terepe. A globális dinamikát bemutató ábra részenként, mindig ugyanazonok a lépéseken keresztül, fokozatosan készíthető el. S eközben a biológiai és a matematikai/geometriai intuíció végig “párhuzamosan”, egymást erősítve működik.

A dinamikus rendszer és a diszkretizációs/közelítő módszer fogalma. II.: A részletek

A dinamikus rendszer fogalma egy X állapottér változásait írja le az idő függvényében. Ez a fogalom csak olyan változásokat enged meg, amelyeket egy állandó, a múlt idővel nem változó, mindig ugyanúgy ható törvény kényszerít ki és amikor a jövőbeli állapot csak a jelenlegi állapottól és a közben eltelt idő hosszúságától függ.

Az X állapottértől csak azt követeljük meg, hogy metrikus tér legyen, a d távolsággal. Először a folytonos idejű dinamikus rendszer fogalmát definiáljuk, ami a (\mathbb{T} mint *time*) $\mathbb{T} = \mathbb{R}$ választásnak felel meg.

A TANTÁRGY NEVÉT ADÓ SZŰKEBB DEFINÍCIÓ: Legyen (X, d) metrikus tér. A $\Phi : \mathbb{R} \times X \rightarrow X$ leképezés *folytonos idejű dinamikus rendszer X -en*, ha igazak rá az alábbi axiómák:

- (i) Φ (mindkét változójában egyszerre) folytonos

²¹különösen hasznos ez, ha a forgásirányt szeretnénk megállapítani egy (stabil vagy instabil) fókuszpont esetében; de akkor is segít, ha a kétdimenziós Lotka–Volterra (15) rendszer $P = \begin{pmatrix} x_0 \\ 0 \end{pmatrix}, x_0 > 0$ egyensúlyi helyzetének típusára vagyunk kíváncsiak: ez esetben az \dot{y} derivált előjelét kell csak megállapítanunk az $\begin{pmatrix} x_0 \\ \varepsilon \end{pmatrix}, 0 < \varepsilon \ll 1$ pontban (hiszen a dinamikát már ismerjük a teljes $y = 0, x \geq 0$ féltengelyen)

$$(ii) \quad \Phi(0, x) = x \quad \forall x \in X$$

$$(iii) \quad \Phi(t, \Phi(s, x)) = \Phi(t + s, x) \quad \forall t, s \in \mathbb{R} \quad \forall x \in X$$

Az (ii) és (iii) axiómák egyszerűen az idő múlását fejezik ki az aktuális állapot megváltozásának tükrében. Zérus idő alatt nem változik semmi, $t + s$ idő pedig úgy telik el, hogy először az s , utána pedig a t idő. Az $s = -t$, $t \geq 0$ választással $x = \Phi(0, x) = \Phi(t - t, x) = \Phi(t, \Phi(t, x)) \quad \forall x \in X$, tehát a $\Phi(t, \cdot) : X \rightarrow X$ t -időleképezés (angolul *t-time map*) az X metrikus térnek önmagára történő, kölcsönösen egyértelmű, oda-vissza folytonos leképezése, röviden az X -et önmagára vivő *homeomorfizmus*. (Folytonos idejű dinamikai rendszerekben a jövő és a múlt szerepe tehát matematikailag felcserélhető. A jelen állapot ebben az absztrakcióban a jövőt is és a múltat is egyértelműen meghatározza.)

Rögzített x esetén a Φ dinamikus rendszer $x \in X$ ponton átmenő trajektóriája a

$$\gamma(x) = \{\Phi(t, x) \subset X \mid t \in \mathbb{R}\}$$

halmaz, amelyet az X térbeli $t \rightarrow \Phi(t, x)$ paraméteres görbéként szemléltethetünk. Az X állapottér tehát a trajektóriák úniója, amelyek az X egyrétű fedését alkotják. Ez az ábrázolásmód a *fázisportré*. Természetesen elegendő csak a legjellemzőbb, legjellegzetesebb trajektóriákat feltüntetnünk: egyensúlyi helyzetek, periodikus megoldások — a többi trajektória közül csak annyit kell megrajzolni, amelyek az előbb kiemelt trajektóriák vonzási-taszítási tulajdonságait már egyértelművé teszik.

ALAPVETŐ PÉLDÁNK — amely egyúttal minden későbbi általánosítást is meghatároz — AZ

$$\dot{x} = f(x), \quad x \in \mathbb{R}^d \tag{17}$$

KÖZÖNSÉGES, AUTONÓM DIFFERENCIÁLEGYENLET MEGOLDÓ-OPERÁTORA. Természetesen feltesszük, hogy az (17) egyenletnek minden $x(0) = x_0 \in \mathbb{R}^d$ kezdeti feltétel esetén pontosan egy megoldása van (*egzisztencia* és *unicitás*), éspedig a teljes számegyenesen értelmezett $x_{0,x_0} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$ függvény, amely folytonosan függ az $x_0 \in \mathbb{R}^d$ kezdeti feltételtől (*folytonos függés*)^{22,23}. Az x_0 kezdeti érték egyfelől a megoldás paramétere, másfelől — ha egyszerre vetünk számot az összes megoldással, a megoldást meghatározó kétváltozós függvény második változója is a $t \in \mathbb{R}$ időváltozó mellett. Ez indokolja, hogy x_0 helyett x -et írjunk,

$$a \quad (t, x_0) \rightarrow x_{0,x_0} \quad \text{jelölést pedig a} \quad (t, x) \rightarrow \Phi(t, x) \quad \text{alakra cseréljük.}$$

²²A $t_0 \in \mathbb{R}$ kezdeti időpontot, mivel az (17) differenciálegyenlet jobb oldalán álló f függvény nem függ a t változótól (és ebben az értelemben *autonóm*), bátran vehetjük $t_0 = 0$ -nak. A *matematikai analízis egy feladata korrekt kitűzésű*, ha pontosan egy megoldása van és ez az egyetlen megoldás folytonos módon függ a feladatban szereplő összes paramétertől — *egzisztencia, unicitás, folytonos függés*. A jelen esetben egyetlen paraméter van, az $x_0 \in \mathbb{R}^d$ kezdeti állapot, amelytől a megoldás folytonosan függ — akkor pedig az x_0 maga is változó, a megoldó-operátor egyik változója: ez az a nézőpont, ami az $x_0 \leftrightarrow x$ betűcserét indokolja. (Az absztrakció egy magasabb szintjén maga az f függvény is paraméter ... de ebbe most ne menjünk bele.)

²³Mindehhez elegendő feltenni az $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ globális Lipschitz-folytonosságát, azaz a

$$|f(x) - f(\tilde{x})| \leq L|x - \tilde{x}| \quad \forall x, \tilde{x} \in X = \mathbb{R}^d \tag{18}$$

egyenlőtlenség teljesülését, alkalmasan választott $L \geq 0$ Lipschitz-konstanssal, ahol $|\cdot|$ az \mathbb{R}^d tér normáját jelöli. (Az $x = (x_1, x_2, \dots, x_d) \in \mathbb{R}^d$ jelölés mintájára használhattuk volna az

$$\dot{x}_k = f_k(x_1, x_2, \dots, x_d) \quad \text{és} \quad x_k(0) = (x_0)_k, \quad k = 1, 2, \dots, d$$

koordinátás írásmódot is. A $d = 1, 2, 3$ esetben — az erősebb hagyomány kedvéért — indexek nélkül, a szokásos x, y, z változókkal koordinátázunk. Ha nem kifejezetten másként specifikáljuk, akkor a $|\cdot|$ norma az euklideszi normát jelenti.)

Közönséges differenciáegyenleteket számítógép segítségével oldunk meg, minden egyes kezdetiérték problémát egyenként. A fázisportré *aszimptotikusan stabil* alakzatait a számítógép — ha elegendően sok ideig futtatjuk, mindig újabb és újabb x_0 kezdőpontból indítva — automatikusan megrajzolja. Ha ugyanazt a numerikus eljárást az $\dot{x} = -f(x)$ egyenletre alkalmazzuk, akkor ugyancsak az $\dot{x} = f(x)$ egyenlet trajektóriáit kapjuk, de az időben negatív irányítással: így a fázisportré *repulzív*, önmagától ellökő, a $t \rightarrow -\infty$ határátmenetben *attraktív* alakzataihoz jutunk. A számítógép alkalmas nyeregpontra szeparatrixainak (ez két dimenzióban a két “bemenő” és a két “kimenő” trajektóriát jelenti, amelyek $t \rightarrow \infty$ illetve $t \rightarrow -\infty$ esetén tartanak oda) ábrázolására is, de ehhez a szokásos programot egy extra ciklussal kell kiegészítenünk.

Legyen $p > 0$ egész szám és legyen a maximális megengedett lépésköz $h_0 > 0$. A $\phi : [0, h_0] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ leképezés p -EDRENDŰ EGYLÉPÉSES DISZKRETIZÁCIÓS OPERÁTOR AZ $\dot{x} = f(x)$ EGYENLETRE²⁴, ha alkalmas $K = K(f) > 0$ konstanssal

$$|\Phi(h, x) - \phi(h, x)| \leq Kh^{p+1} \quad \forall h \in [0, h_0] \quad \forall x \in \mathbb{R}^d. \quad (19)$$

A diszkretizációs operátor iterálása a diszkretizációs/közelítő módszer maga²⁵

$$x_k = \phi^k(h, x_0) \quad \Leftrightarrow \quad x_{k+1} = \phi(h, x_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Rögzített $T > 0$ esetén a h^{p+1} -rendű (19) lokális hibabecslés a $[0, T]$ intervallumon h^p -rendű globális hibabecslést indukál, amely a T függvényében exponenciálisan gyorsan növekszik. Valóban, ha a (18) egyenlőtlenségben $L > 0$, akkor a lépésköz $h = \frac{T}{N} \leq h_0$ választása mellett

$$|\Phi(kh, x) - x_k| = |\Phi(kh, x) - \phi^k(h, x)| \leq \frac{K}{L} e^{Lkh} h^p \leq \frac{K}{L} e^{LT} h^p \quad \forall k = \overline{0, N} \quad \forall x \in \mathbb{R}^d. \quad (20)$$

A tényleges hiba a mindig érvényes (20) becslésnél általában jobb szokott lenni, különösen akkor, ha AZ ALKALMAZOTT NUMERIKUS MÓDSZERT A FELADAT BELSŐ TERMÉSZETÉNEK MEGFELELŐEN VÁLASZTJUK:

²⁴Természetesen azzal a feltevéssel élünk, hogy az f függvény és a h lépésköz ismeretében $\phi(h, x)$ ténylegesen és hatékonyan kiszámítható. Magasabb rendű módszerek esetén mind a ϕ leképezés, mind a (17) differenciálegyenlet jobb oldalán álló f függvény magasabb rendű símaságát is fel kell tennünk. Ez utóbbi feltevés maga után vonja a Φ megoldó-operátor ugyanolyan rendű símaságát. Ennél sokkal fontosabb tudnunk, hogy az ebben a fejezetben leírtak érvényességét érdemben nem korlátozza, ha a (17) differenciálegyenletben — és ennek következtében a (18)–(20) egyenlőtlenségek mindegyikében — az értelmezési tartományokat szűkítenünk kell.

²⁵a számítógép képernyőjén általában nem az x_k pontsorozat jelenik meg, hanem egy, az egymásutáni x_k pontokat összekötő görbe vonal, leggyakrabban spline-görbe. A $p = 1$ esetben — erre legjobb példa az $x_{k+1} = x_k + hf(x_k) \Leftrightarrow X = x + hf(x) \Leftrightarrow X = \phi_E(h, x)$ *explicit Euler módszer* — töröttvonalat kapunk. Az explicit Euler módszer ikertestvére az $X = x + hf(X) \Leftrightarrow X = \phi_I(h, x)$ *implicit Euler módszer*. (Mint a számítógépnek adott utasítás, az implicit Euler módszer is explicit képletté válik: jöllehet az $X = x + hf(X)$ egyenlet pontos megoldása csak ritkán írható fel zárt alakban, a pontos $X = \phi_I(h, x)$ megoldást — elegendően kicsiny, mondjuk a $h = \frac{1}{2L}$ lépésköz-választás esetén — az $X^0 = x$ kezdőpontból indított $X^{\ell+1} = x + hf(X^\ell)$, $\ell = 0, 1, \dots$ sorozat már néhány lépés után is roppant jól közelíti. Valóban, a (18) becslés okán az $X = x + hf(X)$ egyenlet jobb oldala, mint $\mathcal{F}_{h,x} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$, $X \rightarrow \mathcal{F}_{h,x}(X) = x + hf(X)$ leképezés a $q = \frac{1}{2}$ állandóval kontrakciót határoz meg.) A MATLAB kezdetiérték problémák megoldására leggyakrabban használt ODE45 eljárása egy negyed- és egy ötödrendű Runge–Kutta módszer enyhén heurisztikus kombinációja, adaptív, “kanyarban lassíts, jól belátható egyenes szakaszon gyorsíts” lépésköz-szabályozással. A MATLAB ODEs15 eljárásról annyit mindenképpen érdemes tudni, hogy nemcsak a lépésközt változtatja adaptív módon, hanem az aktuálisan használt alpmódszer $1 \leq p \leq 5$ rendjét is. Az s betű a *stiff* (magyarul merev) szó kezdőbetűjére utal. Az ODEs15 eljárást akkor szokás használni, ha a feladatban *különböző léptékű időskálák* egyszerre jelennek meg. Egy $\dot{x} = Ax$ alakú állandó együtthatós lineáris egyenlet is lehet merev — ha például 10^5 és 10^{-5} (pláne ha 10^{10} és 10^{-10}) egyaránt az A mátrix sajátértéke.

Tekintsük a Newton második törvényét potenciális erőterben leíró

$$\ddot{x} + V'(x) = 0, \quad x \in \mathbb{R} \quad \Leftrightarrow \quad (\text{PN}) \quad \begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = -V'(x) \end{cases}, \quad \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$$

differenciálegyenletek családját. A (PN) differenciálegyenletek két különleges tulajdonsággal rendelkeznek:

- pontos megoldások mentén az $E(x, y) = \frac{y^2}{2} + V(x)$ összenergia megőrződik
- az idő múlása a fázisportrén/fázissíkon megőrzi a területet

Az $E = E(x, y)$ összenergia megmaradása a pontos megoldások dinamikájának jól ismert tulajdonsága, amelyet matematikailag az összetett függvény deriválási szabálya igazol:

$$\frac{d}{dt} E(x(t), y(t))|_{(\text{PN})} = (E'_x \cdot \dot{x} + E'_y \cdot \dot{y})|_{(\text{PN})} = V'(x) \cdot y + y \cdot (-V'(x)) = 0. \quad (21)$$

Ennél nehezebb igazolni, hogy a pontos megoldások dinamikájában a terület is változatlan marad: ez Liouville alábbi tételének speciális esete és a $\text{div}_{(-V'(x))} \underline{y}$ divergencia azonosan nulla voltával egyenértékű.

LIIOUVILLE TÉTEL: Tekintsük az $\dot{x} = \underline{f}(x)$, $x \in \mathbb{R}^d$ egyenletet. Legyen $V_0 \subset \mathbb{R}^d$ korlátos tartomány, ∂V_0 peremmel és $\underline{\nu}$ kifelé mutató normális egységvektorral. Legyen továbbá $V(t) = \Phi(t, V_0)$, $t \geq 0$. Ekkor

$$\frac{d}{dt} \text{mesh}(V(t)) = \int_{V(t)} \text{div} \underline{f}(x) \, dx \quad \forall t \geq 0. \quad (22)$$

Bizonyítás: A bizonyítás amennyire váratlan és szellemes, annyira egyszerű és rövid is. Megértünk akkor könnyű, ha először arra a speciális esetre gondolunk, amikor az \underline{f} "áramlás" a folyton növekvő $V(t)$ tartomány $\partial V(t)$ peremét minden pontban és minden $t \geq 0$ időben kifelé metszi. A $\partial V(t)$ peremre ráépülő vékony határréteg térfogata $0 < h \ll 1$ esetén az intergrálközelítő összegek lokális, "alapterület \times magasság" elve szerint (mesh mint measure)

$$\text{mesh}(V(t+h)) - \text{mesh}(V(t)) \approx \int_{\partial V(t)} \underline{f}(x) \cdot h \underline{\nu} \, d\underline{S} = h \int_{\partial V(t)} \underline{f}(x) \, d\underline{S}.$$

Átosztva a $h > 0$ paraméterrel, a $h \rightarrow 0^+$ határátmenetből Liouville nevezetes (22) formuláját kapjuk. \square

A diszkrét idejű eset kezelése jóval egyszerűbb és nem igényel mást, mint annak ismeretét, hogy a determináns geometriai jelentése térfogat, a mátrix oszlopvektorai által kifeszített paralelepipedon térfogata. (Ez a geometriai jelentés az új koordinátarendszerre való áttérés alapvető integráltranszformációs képletének magyarázata is egyben.) Egy $F : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ C^1 leképezés pontosan őrzi meg a d -dimenziós előjeles térfogatot, ha a $J(x) = f'(x)$ Jacobi mátrix determinánsának értéke azonosan egy: $\det(J) \equiv 1$.

A *semiimplicit Euler módszert a (PN) feladatok osztályán* úgy szokás definiálni, mint a

$$\phi_S : [0, h_0] \times \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2, \quad \phi_S \left(h, \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right) = \begin{pmatrix} x + hy \\ y - hV'(x + hy) \end{pmatrix}$$

leképezést, amely mögött természetesen most is a deriváltak különbségi hányadosokkal történő közelítése áll:

$$\left. \begin{array}{l} \frac{X-x}{h} = y \\ \frac{Y-y}{h} = -V'(X) \end{array} \right\} \Leftrightarrow \left. \begin{array}{l} X = x + hy \\ Y = y - hV'(x + hy) \end{array} \right\}$$

A Verlet (más néven Störmer-Verlet) módszert a (PN) feladatok osztályán úgy szokás definiálni, mint a

$$\phi_V : \left(h, \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right) \rightarrow \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x + hy - \frac{h^2}{2} V'(x) \\ y - \frac{h}{2} V'(x) - \frac{h}{2} V'(x + hy - \frac{h^2}{2} V'(x)) \end{pmatrix}$$

leképezést. Mindkét esetben direkt számolás igazolja, hogy $\det(J) \equiv 1$. A semiimplicit Euler módszer esetén

$$J = \frac{\partial(X, Y)}{\partial(x, y)} = \begin{pmatrix} 1 & h \\ -hV''(x + hy) & 1 - hV''(x + hy) \cdot h \end{pmatrix} \Rightarrow \det(J) \equiv 1 \quad \forall h > 0,$$

s már készen is vagyunk. A Verlet módszer esetében a számolás bonyolultabb. A ϕ_S módszer rendje $p = 1$, a ϕ_V módszer rendje $p = 2$. Az igazi kérdés egy matematikus számára az, hogyan lehetett rájönni a Verlet módszer képletére. Egy *informatikus* és egy *bionikus* mérnök első kérdése az, *mire lehet a ϕ_S és a ϕ_V módszereket használni? És miért előnyös, ha használja őket?* Erre kicsiny és nagy válasz egyaránt könnyen adható.²⁶

A *kicsiny válasz* egy konkrét numerikus példa, vagy ha úgy tetszik, az alábbi táblázat:

A gravitációs inga/hajóhinta $\ddot{x} + \sin(x) = 0$ egyenletét oldjuk meg, az $x(0) = \frac{\pi}{2}$, $\dot{x}(0) = 0$ kezdeti feltétellel. Maga az egyenlet természetesen (PN) típusú és $V(x) = 1 - \cos(x)$. (Élvtben lehetne akár $V(x) = -\cos(x)$ is, de a szabad konstansot érdemes úgy választani, hogy az $E(x, y) = \frac{y^2}{2} + V(x)$ összenergia lehetséges minimuma — az inga alsó egyensúlyi helyzetében — zérus legyen.) A kezdeti feltételt/állapotot úgy választottuk, hogy az onnan induló pontos megoldás energiája egységnyi legyen. Hat MATLAB kísérletet végeztünk, az energiát mindig a megfelelő numerikus megoldás mentén vizsgálva a $[0, T]$ időintervallumon. A lépésköz h (és a lépések N számával $T = Nh$). Emlékeztetünk arra, hogy ϕ_E , ϕ_I , ϕ_S és ϕ_V rendre az explicit Euler módszert, az implicit Euler módszert, a semiimplicit Euler módszert és a Verlet módszert jelentik. Íme a numerikus eredmények:

#	módszer	h	T	a numerikus energia $t = 0$ és $t = T$ között
1	ϕ_E	0.001	100	monoton nő 1 és 1.068... között
2	ϕ_E	0.001	1000	monoton nő 1 és 1,70... között
3	ϕ_I	0.001	100	monoton fogy 1 és 0.934... között
4	ϕ_I	0.001	1000	monoton fogy 1 és 0.46... között
5	ϕ_S	0.1	10000	oszcillál 0.957 és 1.045 között
6	ϕ_V	0.1	10000	oszcillál 0.998 és az 1.000... között

²⁶Kifejezetten ajánlom a <http://digitus.itk.ppke.hu/~garay/> tárhely ábrákkal gazdagon illusztrált *Numerikus Dinamika* című vetíthető előadását.

Az utolsóelőtti kísérletben az oszcillációk összessége sinus–hullám, az utolsó kísérletben ciklois–hullám jellegű volt. (Az oszcillációk száma mindkét esetben jó közelítéssel ezer volt.) A numerikus energia az $\frac{1}{2}y_k^2 + V(x_k)$ kifejezés értékeinek $k = 0, 1, \dots, N$ sorozata, amikor is a közelítő megoldás egymás utáni pontjait behelyettesítjük a tényleges energia $E(x, y) = \frac{1}{2}y^2 + V(x)$ képletébe. Lehet csodálkozni, jóllehet a táblázat sokkoló jellegét részben a fázistér kétdimenziós volta okozza.²⁷

CÉLFELADATHOZ TEHÁT CÉLPROGRAM TARTOZIK. De ahhoz, hogy a számítógépet a valóban éles esetekben is jól tudjuk használni, tudnunk kell, mi van a célprogramok "fekete dobozá"-ban: a konkrét feladat–osztály fizikájától függő hibrid, gondosan konstruált, ám ugyanakkor heurisztikus elemeket is jöcskán tartalmazó algoritmusok.

A *nagy válasz* pedig az, hogy az általános, $d + d = 2d$ dimenziós, Hamilton típusú $\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial y}$, $\dot{y} = -\frac{\partial H}{\partial x}$ differenciálegyenletek hatékony számítógépes kezelését a Verlet módszer és az annak nyomán felfedezett további szimplektikus algoritmusok tették lehetővé.²⁸ A hagyományosan, töbtest–problémaként felfogott *molekuláris dinamika*

$$M\ddot{x} + V'(x) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad (\text{MD}) \quad \begin{cases} \dot{x} = M^{-1}y \\ \dot{y} = -V'(x) \end{cases}$$

alapegyenlete is Hamilton típusú.²⁹ A pontos megoldások (21) mintájára a H szintfelületein haladnak.

Láttuk tehát, hogy a közönséges, autonóm differenciálegyenletek elmélete a $\mathbb{T} = \mathbb{R}$, a megoldások számítógépes, diszkrétizációval történő meghatározása viszont a $\mathbb{T} = h\mathbb{N}$ (itt $h > 0$ a lépésköz) idő–választást igényli. A tantárgy nevét adó szűkebb definíció (i)–(ii)–(iii) axiómáinak mindegyike értelmes marad akkor, ha a bennük szereplő \mathbb{R} helyére $h\mathbb{N}$ kerül. Ez utóbbi esetben az idő csak előre mehet³⁰. A \mathbb{T} megválasztására összesen hat lehetőségünk van, \mathbb{R} mellett \mathbb{Z} és $h\mathbb{Z}$, $h\mathbb{N}$ mellett $\mathbb{R}^+ = [0, \infty)$ és \mathbb{N} ($h > 0$ rögzített, a $h = 1$ választást külön esetekként kezeljük): a felsoroltakon kívül az \mathbb{R} additív csoportnak és az $\mathbb{R}^+ = [0, \infty)$ additív félcsoportnak nincsenek más zárt részcsoportjai illetve zárt rész–félcsoportjai (az $\{0\} \in \mathbb{R}$ egyelemű additív csoporttól most tekintsünk el).

A TANTÁRGY NEVÉT ADÓ TÁGABB DEFINÍCIÓ: Legyen (X, d) metrikus tér és legyen \mathbb{T} az \mathbb{R} , \mathbb{R}^+ , \mathbb{Z} , \mathbb{N} , $h\mathbb{Z}$, $h\mathbb{N}$ halmazok bármelyike. A $\Phi : \mathbb{T} \times X \rightarrow X$ leképezés \mathbb{T} *idejű dinamikus rendszer* X -en, ha igazak rá az alábbi axiómák:

- (i) Φ folytonos,
- (ii) $\Phi(0, x) = x \quad \forall x \in X$,
- (iii) $\Phi(t, \Phi(s, x)) = \Phi(t + s, x) \quad \forall t, s \in \mathbb{T} \quad \forall x \in X$.

²⁷Ge és Marsden egy tétele szerint nem létezik olyan diszkrétizációs eljárás, amely egyszerre lenne képes az energia és a terület mindegyikének pontos megőrzésére egy, a (PN) típusba tartozó általános feladat esetén.

²⁸Ezek olyan diszkrétizációs eljárások, amelyek egy sor fizikailag releváns megmaradó mennyiséget (köztük a $2d$ -dimenziós térfogatot) pontosan megőrzik, és a $H = E$ összenergiát csak nagyon lassan és kicsit torzítják.

²⁹A Hamilton–függvény $H(x, y) = \frac{1}{2}\langle M^{-1}y, y \rangle + V(x)$. Itt $M = M^T$ $d \times d$ méretű és pozitív definit mátrix (az általánosított tömegmátrix), $V : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ a potenciális energia ($V'(x) = \text{grad } V(x)$ gradiens–vektorral), $x, y \in \mathbb{R}^d$ pedig az atomi sokaság helyzetre és momentumra vonatkozó kanonikus koordinátái, $\langle \cdot, \cdot \rangle$ pedig az \mathbb{R}^d euklideszi téren értelmezett skaláris szorzás.

³⁰Ezen a megállapításon mit sem változtat, hogy az $\dot{x} = f(x)$ egyenletet az időben visszafelé is meg tudjuk oldani (ha ugyanazt a diszkrétizációs módszert az $\dot{x} = -f(x)$ egyenletre alkalmazzuk), és az sem, hogy az (18) egyenlőtlenség maga után vonja, hogy minden elegendően kicsiny $h > 0$ rögzített lépésköz esetén az $\mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$, $x \rightarrow \phi(h, x)$ leképezés homeomorfizmus.

A hatféle időválasztást párokba csoportosítva

- $\mathbb{T} = \mathbb{R}$ (illetve $\mathbb{T} = \mathbb{R}^+$) esetén Φ folytonos idejű (semi)dinamikus rendszer,
- $\mathbb{T} = \mathbb{Z}$ (illetve $\mathbb{T} = \mathbb{N}$) esetén Φ diszkrét idejű (semi)dinamikus rendszer,
- $\mathbb{T} = h\mathbb{Z}$ (illetve $\mathbb{T} = h\mathbb{N}$) esetén Φ $h > 0$ lépésközű (semi)dinamikus rendszer.

Közönséges differenciálegyenlet alappéldák a természettudományokban

Két példa a villamosságtanból³¹:

<p>RLC-kör</p> $V_L + V_C + V_R = v(t) \quad \& \quad I_L = I_C = I_R$ $V_L = L\dot{I}_L \quad \Leftrightarrow$ $V_R = \ell(I_R) = RI_R$ $V_C = \frac{1}{C} \int_{-\infty}^t I_C(s) ds$	<p>van der Pol oszcillátor</p> $I_C + I_R + I_L = i(t) \quad \& \quad V_C = I_R = V_L$ $I_L = \frac{1}{L} \int_{-\infty}^t V_L(s) ds$ $I_R = n(V_R) = -\mu(V_R - \frac{1}{3}V_R^3), \quad \mu > 0$ $\Leftrightarrow \quad I_C = C\dot{V}_C$
---	---

A t időváltozó szerint deriválva, majd az azonos oszlopban lévő egyenleteket összeadva:

<p>RLC-kör</p> $L\ddot{I} + R\dot{I} + \frac{1}{C}I = \frac{d}{dt} v(t)$	<p>van der Pol oszcillátor</p> $C\ddot{V} - \mu(1 - V^2)\dot{V} + \frac{1}{L}V = \frac{d}{dt} i(t), \quad \mu > 0$
--	--

Két példa a mechanikából³²:

<p>lineáris rugó</p> $m\ddot{x} + b\dot{x} + kx = F(t)$	<p>gravitációs inga/hajóhinta</p> $m\ell\ddot{\theta} + b\dot{\theta} + mg \sin(\theta) = F(\theta), \quad b \geq 0$
---	--

³¹Az LRC-kör sorosan kapcsolt áramköri elemekből áll, $v(t)$ külső vezérlő feszültséggel. Az LRC-kör ellenállása a $V_R = \ell(I_R)$ képlet szerint ohmikus/lineáris ellenállás. Mivel I_C a kondenzátoron tárolt $Q = Q_C$ töltésmennyiség $I_C = \dot{Q}_C$ deriváltja, az LRC-kör egyenlete az $L\dot{Q} + R\dot{Q} + \frac{1}{C}Q = v(t)$ alakban is felírható. A van der Pol oszcillátor párhuzamosan kapcsolt áramköri elemekből áll, $i(t)$ külső vezérlő áramerősséggel. A van der Pol oszcillátor "ellenállása" alagút-dióda, az $I_R = n(V_R)$ nemlineáris karakterisztikával. Mindkét áramkörben egy C kapacitású kondenzátor, és egy L indukciós együtthatójú tekercs is van. A külső gerjesztés nélküli van der Pol egyenletnek többféle normálalakja is van, közülük az $\dot{x} - \mu(1 - x^2)\dot{x} + x = 0$ egyenlet, valamint az $\dot{x} = y$, $\dot{y} = \mu(1 - x^2)y - x$ és az $\dot{x} = \mu(x - \frac{1}{3}x^3 - y)$, $\dot{y} = \frac{1}{\mu}x$ egyenletrendszerek a leggyakrabban használatosak. A $\mu > 0$ paraméter tetszőleges értéke mellett a van der Pol egyenletrendszernek létezik aszimptotikusan stabil periodikus $\Gamma \subset \mathbb{R}^2$ megoldása, amely az origó kivételével az \mathbb{R}^2 fázissík minden pontját magához vonzza. Ez a $\Gamma = \Gamma_\mu$, $\mu > 0$ periodikus megoldás a $\mu = 0$ választásnak megfelelő $\ddot{x} + x = 0 \Leftrightarrow \dot{r} = 0$, $\dot{\varphi} = -1$ polárkoordinátás alakba átírt rendszer $r = 2$ körpályájából bifurkálódik. Időben periodikus külső (például sinus-os) gerjesztés esetén káosz is lehetséges. Utóbbi a periodikusan gerjesztett, súrlódásos gravitációs ingára/hajóhintára is igaz.

³²Mindkét példa az $m\ddot{a} = \underline{F}$ Newton törvény alkalmazása vízszintes rugó (m tömeg, b súrlódási együttható, k rugóállandó, és $F(t)$ külső erő) illetve gravitációs inga/hajóhinta (m tömeg, ℓ kötélhossz/rúdhossz, b közegellenállási együttható, g gravitációs együttható, és $F(t)$ külső erő) esetén: az x a nyugalmi állapottól mért vízszintes kitérés, a θ a lefelé mutató függőleges vektorral bezárt szög mérőszáma az inga felfüggesztési pontjában. (A súlytalan rugó végére rögzített tömeg egyenes mentén, a súlytalan kötél/rúd végére rögzített tömeg egy függőleges síkbeli körön mozog.)

Egyetlen fontos példa a kémiából.³³

Két³⁴ példa a biológiából³⁵:

Lotka–Volterra

Hodgkin–Huxley

$$\dot{x}_1 = r_1 x_1 (1 - a_{11} x_1 - \dots - a_{14} x_4) \quad C_M \dot{V} = -\overline{g_{Cl}}(V - V_{Cl}) - \overline{g_{Na}} m^3 h (V - V_{Na}) - \overline{g_K} n^4 (V - V_K)$$

$$\dot{x}_2 = r_2 x_2 (1 - a_{21} x_1 - \dots - a_{24} x_4) \quad \tau_m(V) \cdot \dot{m} = m_\infty(V) - m$$

$$\dot{x}_3 = r_3 x_3 (1 - a_{31} x_1 - \dots - a_{34} x_4) \quad \tau_h(V) \cdot \dot{h} = h_\infty(V) - h$$

$$\dot{x}_4 = r_4 x_4 (1 - a_{41} x_1 - \dots - a_{44} x_4) \quad \tau_n(V) \cdot \dot{n} = n_\infty(V) - n$$

Vegyük észre, hogy az RLC-kör és a lineáris inga differenciálegyenlete matematika szempontból teljesen azonos. Az is világos kell legyen, hogy a lineáris rugó egyenlete nem más mint a gravitációs inga/hajóhinta $\theta = 0$ alsó egyensúlyi helyzet körüli linearizáltja.

A külső gerjesztés nélküli RLC-kör, lineáris inga és gravitációs inga/hajóhinta pontosan akkor őrzi meg az $E(I, Q) = \frac{1}{2}LI^2 + \frac{1}{2C}Q^2$ (a tekercs mágneses mezőjének energiája plus a kondenzátoron tárolt energia — itt az $I = I_C = \dot{Q}_C = \dot{Q}$ összefüggésre is ügyelni kell), $E(\dot{x}, x) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}kx^2$ (a mozgási plus a rugóban tárolt energia), $E(\dot{\theta}, \theta) = \frac{1}{2}m(\ell\dot{\theta})^2 + mgl(1 - \cos(\theta))$ (a mozgási plus a helyzeti energia) összenergiát, ha az $R \geq 0$ ellenállás, illetve a $b \geq 0$ súrlódási/közegellenállási együttható értéke 0. Az ezzel ellenkező esetekben az energia a megoldások mentén végig csökkenve Ljapunov-függvényként használható.

Linearitás és lokális, egyensúlyi helyzet körüli linearizálás

Linearitás alatt itt és most algebrai, közönséges és parciális egyenletek linearitását értjük, amely linearitás az általános megoldás szerkezetében is megjelenik. Az absztrakció magasabb szintjén a *linearitás az egyenletet, illetve az egyenlet megoldását meghatározó operátor tulajdonsága*.

³³a Nemlineáris Dinamika jegyzet — http://digitus.itk.ppke.hu/~garay/NDS_jegyzet/ — 2.12 fejezetében öt *autokatalitikus, oszcilláló reakció* szerepel, egyikük (az $\dot{u} = \frac{1}{8} - u + u^2v$, $\dot{v} = \mu - u^2v$ Schnakenberg modell a $0 < \mu < 1$ paramétertartományban) részletes tárgyalásával: az aszimptotikusan stabil periodikus pálya a μ paramétert növelve Hopf-bifurkációval születik, és ugyancsak Hopf bifurkációval hal meg.

³⁴természetesen csak mutatóba, az egyik a populációdinamikából és a másik az idegélettanból

³⁵Az N fajból álló $x_i \geq 0$ ökoszisztémát modellező Lotka–Volterra differenciálegyenlet az $N = 4$ speciális esetben szerepel. Ha $N \geq 4$, akkor az együtthatók $r_i > 0$, $a_{ii} > 0$, $a_{ij} \geq 0$, $i, j = 1, 2, \dots, N$ választása mellett (az együtthatók illetően választása — versengő növényevők — garantálja, hogy a végtelen távoli pont taszít és hogy az $x_i \geq 0$ féltengelyek mindegyikén pontosan egy, az origótól különböző P_i egyensúlyi helyzet van) is sikerült kimutatni a káosz létezését. Az $N = 3$ esetben előforduló legbonyolultabb jelenség egy, a P_1 – P_2 – P_3 pontokat a nemnegatív ortáns peremén összekötő, és így a “kő–papír–olló” játékot modellező aszimptotikusan stabil heteroklinikus kör. Az $N = 2$ eset lényegében teljes karakterizációját láttuk a félév folyamán, az $r_i, a_{ij} \leq 0$ választásokat is megengedve. Káosz már az $N = 3$ esetben sem fordulhat elő. A másik példa szintén négy egyenletből áll és az ezüstdróttal preparált tintahal-idegrost Hodgkin–Huxley kísérlet ekvivalens áramköri modelljét mutatja be. A tényleges Hodgkin–Huxley modell az m, h, n kapuváltozók egyenleteit megtartja, de az első egyenlet parabolikus parciális, az x helyváltozótól is függő egyenletté módosul, amelynek utazó hulláma a V akciós potenciál idegrost mentén történő haladását írja le. A kapuváltozókra vonatkozó egyenletek mindegyike átfogalmazható a $\tau_m(V) \cdot \dot{m} = m_\infty(V) - m \Leftrightarrow \dot{m} = \alpha_m(V) \cdot (1 - m) - \beta_m(V) \cdot m$ minta szerint. A Hodgkin–Huxley modell általánosított/kiterjesztett és egyszerűsített változatai ma is lépten-nyomon használatosak.

Mindezt jól ismerjük a *lineáris közönséges differenciálegyenletek* elméletéből, legyen az homogén vagy inhomogén, állandó vagy (az időben) változó együtthatós. Íme két konkrét példa

- a *homogén lineáris egyenlet megoldásai vektorteret alkotnak* valamint az
- *“inhomogén általános” = “homogén általános” + “inhomogén partikuláris”*

szabályok teljesülésére³⁶:

$$\ddot{x} + 2\dot{x} + x = 2 \cos(t) \quad \Leftrightarrow \quad x(t) = c_1 e^{-t} + c_2 t e^{-t} + \sin(t), \quad c_1, c_2 \in \mathbb{R},$$

$$\left. \begin{aligned} \dot{x} &= -3x + 2y + 6 \cos(t) - 4 \sin(t) \\ \dot{y} &= 2x - 6y - 3 \cos(t) + 6 \sin(t) \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix} = c_1 e^{-2t} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} + c_2 e^{-7t} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2 \cos(t) \\ \sin(t) \end{pmatrix}, \quad c_1, c_2 \in \mathbb{R}.$$

Mindkét szabály változtatás nélkül érvényes a *lineáris algebrai egyenletek* körében is:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 5 & 6 & 7 & 8 \\ 9 & 10 & 11 & 12 \\ 13 & 14 & 15 & 16 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 13 \\ 21 \\ 29 \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ w \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad c_1, c_2 \in \mathbb{R}.$$

Vegyük észre, hogy a 0 kétszeres sajátértéke a lineáris egyenletrendszer mátrixának, és hogy a c_1 és a c_2 mellett álló két vektor a 0-hoz tartozó kétdimenziós sajátaltér bázisát alkotja.

A (*homogén Dirichlet peremfeltétellel és az $f(t, x) = 2$ inhomogenitással ellátott*) ($t \geq 0, x \in [0, \pi]$) *diffúzióegyenlet* általános megoldása³⁷ (amint azt lényegében már a 2-ik oldalon láttuk):

$$\left. \begin{aligned} u_t &= u_{xx} + f(t, x) \\ u(t, 0) &= u(t, \pi) = 0 \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow u(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-n^2 t} \sin(nx) + x(\pi - x), \quad c_1, c_2, \dots \in \mathbb{R}. \quad (23)$$

Ha a kezdeti feltétel $u(0, x) = g(x) = \sin^3(x) + x(\pi - x)$, akkor (23) és a $\sin(3x) = 3 \sin(x) - 4 \sin^3(x)$ azonosság miatt $c_1 = \frac{3}{4}, c_3 = -\frac{1}{4}$ és $c_n = 0$ ha $n \neq 1, 3$. Az így kapott $u(t, x) = \frac{3}{4} e^{-t} \sin(x) - \frac{1}{4} e^{-9t} \sin(3x) + x(\pi - x)$ megoldás a $t < 0$ esetén is értelmes. Azt, hogy a *diffúzió-egyenletben az idő csak előre mehet*, a kezdeti feltétel egy másik, kevésbé speciális választása mutatja³⁸.

³⁶A megoldásokat próbafüggvények segítségével számoltuk ki. Az első példában az $\ddot{x} + 2\dot{x} + x = 0$ homogén egyenlet megoldásait $x(t) = e^{\lambda t}$ alakban, az inhomogén egyenlet egy partikuláris megoldását $x(t) = A \cos(t) + B \sin(t)$ alakban kerestük. A második példában ugyanezeknek a próbafüggvényeknek a vektoros, $\underline{x}(t) = e^{\lambda t} \underline{s}$ illetve $\underline{x}(t) = \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \cos(t) + \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \sin(t)$ alakjait használtuk. Az első példa homogén részében tapasztalt $\lambda^2 + 2\lambda + 1 = 0 \Leftrightarrow \lambda_{1,2} = -1$ belső rezonanciával könnyen elbántunk: a homogén egyenlet két alapmegoldásának szokásos választása e^{-t} és $t e^{-t}$. Mivel a második példa homogén részének mátrixa a szimmetrikus $A = \begin{pmatrix} -3 & 2 \\ 2 & -6 \end{pmatrix}$ mátrix, az esetleges $\lambda_1 = \lambda_2$ belső rezonancia ott semmiféle gondot nem okozott volna: *minden $d \times d$ méretű szimmetrikus valós mátrixhoz létezik sajátvektorainak olyan családja, amely az \mathbb{R}^d tér ortonormált* (azaz egymásra páronként merőleges egységvektorokból álló) *bázisát alkotja*. A $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$ egyelőre még szabad konstansokat a kezdeti feltételek megadása teszi egyértelművé.

³⁷a továbbra is lineáris egyenlet inhomogenitásának roppant kényelmes, $f(t, x) = 2$ választása mellett a partikuláris megoldás legegyszerűbb alakja $u(t, x) = x(\pi - x)$ — a Dirichlet peremfeltétel inhomogenitása azt jelentené, hogy $u(t, 0) = A(t)$ és $u(t, \pi) = B(t)$ volna (amikor is a $v(t, x) = u(t, x) - A(t) - \frac{x}{\pi}(B(t) - A(t))$ változó-transzformációt hívnánk segítségül)

³⁸Ha a (23) képletben $c_n = \frac{1}{n}$, akkor a $t = 0$ kezdeti időpontban $u(0, \cdot) = g \in L_2[0, \pi]$ hiszen $\sum_n \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6} < \infty$, de $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} e^{-n^2 t} = \infty$ miatt $u(t, \cdot) \notin L_2[0, \pi]$ ha $t < 0$ (a Fourier együtthatók soha nem tarthatnak végtelenhez. Négyzetösszegük korlátossága akkor és csak akkor típusú jellemzése az $L_2[0, \pi]$ — sőt bármely más — Hilbert tér elemeinek).

DINAMIKUS RENDSZER LINEARITÁSÁNAK DEFINÍCIÓJA: Legyen $(X, \|\cdot\|)$ Banach (azaz teljes normált) tér és legyen \mathbb{T} az $\mathbb{R}, \mathbb{R}^+, \mathbb{Z}, \mathbb{N}, h\mathbb{Z}, h\mathbb{N}$ halmazok bármelyike. A $\Phi : \mathbb{T} \times X \rightarrow X$ dinamikus rendszer *lineáris*, ha az (i)–(ii)–(iii) axiómák mellett az is igaz rá, hogy

- minden rögzített $t \in \mathbb{T}$ esetén $\Phi(t, c_1x_1 + c_2x_2) = c_1\Phi(t, x_1) + c_2\Phi(t, x_2) \quad \forall c_1, c_2 \in \mathbb{R} \quad \forall x_1, x_2 \in X$.

A (17) nemlineáris $\mathbb{T} = \mathbb{R}, X = \mathbb{R}^d$ alappélda lineáris változata az $d \times d$ méretű, valós számokból felépített A mátrix által meghatározott $\dot{x} = Ax$ közönséges, autonóm lineáris differenciálegyenlet

$$\Phi_L : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d, \quad (t, x) \rightarrow \Phi_L(t, x) = e^{At}x$$

alakú megoldó-operátora.

Ha a (17) képletben szereplő nemlineáris differenciálegyenletben $f \in C^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d)$ és $f(0) = 0$, akkor az f függvényt a $0 \in \mathbb{R}^d$ *egyensúlyi helyzet körül linearizálva* $f(x) = Ax + a(x)$ adódik, ahol $A = f'(0)$ a 0-ban vett Jacobi mátrix és az $a \in C^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d)$ függvényre $a(0) = 0$ és $a'(0) = 0$ (az azonosan nulla $d \times d$ mátrix).

Jelölje $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_d$ az A mátrix sajátértékeit. A $0 \in \mathbb{R}^d$ mint az $\dot{x} = Ax$ *differenciálegyenlet egyensúlyi helyzete nem-elfajult*, ha minden $k = 1, 2, \dots, d$ esetén $\operatorname{Re} \lambda_k \neq 0$. A nem-elfajultságnak ez a definíciója az $\dot{x} = f(x)$ differenciálegyenlet bármely más egyensúlyi helyzetére is automatikusan kiterjeszthető.

A LOKÁLIS FÁZISPORTRÉK LÉNYEGI AZONOSSÁGA NEM-ELFAJULT EGYENSÚLYI HELYZETEK ESETÉBEN: A nemlineáris $\dot{x} = f(x)$ differenciálegyenlet fázisportréja külön-külön, minden nem-elfajult egyensúlyi helyzet kis környezetében kvalitatív szempontból azonos az ottani linearizált egyenlet fázisportréjával (és kvantitatíve is csak alig különbözik tőle). A lokális fázisportréknak ez az azonosíthatósága — ha a $0 < h \leq h_0$ lépésközt megfelelően kicsinynek választjuk — kiterjed a $\phi(h, \cdot) : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ diszkretizációs operátorra is.³⁹

Itt és most legyen elegendő számunkra a következő példa, ahol egy síkbeli nyeregpontra kimenő és bemenő trajektóriáit egészen konkrét képletekkel is meg tudjuk adni, mind az eredeti (N) nemlineáris, mind az (L) linearizált, mind a(z explicit Euler módszerrel) (D) diszkretizált esetben:

$$\left. \begin{array}{l} \dot{y} = y \\ \dot{z} = -z + y^2 \end{array} \right\} \text{(N)}, \quad \left. \begin{array}{l} \dot{y} = y \\ \dot{z} = -z \end{array} \right\} \text{(L)}, \quad \left. \begin{array}{l} Y = y + hy \\ Z = z + h(-z + y^2) \end{array} \right\} \text{(D)}.$$

A kimenő trajektóriákat hordozó instabil sokaságok az alábbi, a teljes $\mathbb{R} = \mathcal{Y}$ számegegyenesen értelmezett $\mathcal{Y} \rightarrow \mathcal{Z}$ függvények grafikonjai:

$$z = u(y) \Leftrightarrow u(y) = \frac{y^2}{3} \text{ (N)}, \quad z = 0 \text{ (L)}, \quad z = u_h(y) \Leftrightarrow u_h(y) = \frac{y^2}{3+h} \text{ (D)}.$$

A bemenő trajektóriákat hordozó stabil sokaságok mindegyike a(z $y = 0 \Leftrightarrow Y = 0$ egyenletű) z tengely. Vegyük észre egy általános szabály megjelenését is: mind az (N), mind a (D) dinamikához tartozó instabil

³⁹Arról van szó tehát, hogy bármely nem-elfajult egyensúlyi helyzet kis környezetében mind a linearizálás, mind a diszkretizálás trajektóriát trajektóriába vivő, sőt (a trajektóriák mentén) az időt is megőrző, és az identitáshoz nagyon közeli koordináta-transzformáció. A mögöttes matematikai tétel a Grobman–Hartman Lemma, amelyet a Nemlineáris Dinamika jegyzet — http://digitus.itk.ppke.hu/~garay/NDS_jegyzet/ — több szempontból is részletesen tárgyal. A lényegét legjobban az ottani 2.4 sorszámú ábra fejezi ki. A síkbeli, nem-elfajult egyensúlyi helyzetek osztályozását leíró *nyom-determináns diagram* egyúttal a Grobman–Hartman Lemma két-dimenziós aleteit is szemlélteti.

sokaság az origóban érinti az (L) dinamika instabil alterét. Képletekkel kifejezve: $u(0) = u_h(0) = 0$ és $\frac{d}{dy}u(y)|_{y=0} = \frac{d}{dy}u_h(y)|_{y=0} = 0$. A most észlelt szabályszerűség természetesen érvényes a stabil sokaságok, illetve a stabil altér vonatkozásában is. És az is mindig igaz, hogy a $h \rightarrow 0^+$ határátmenetben $u_h(y) \rightarrow u(y)$ (legalábbis a $z = 0$ instabil altér origóhoz közeli, $\|y\| \ll 1$ részén).

Amint azt a két részletben tárgyalt PÉLDA 4 kapcsán már láthattuk — érdemes visszalapozni az 5-7 valamint a 9-10 oldalakhoz —, a gyakorlatban használt diszkretizációs eljárások szinte mindegyike megőrzi a diszkretizált egyenlet lineáris struktúráját. Hogy másik, egyszerűbb példát is mondjunk, tekintsük az implicit Euler módszer alkalmazását az $\dot{x} = Ax$ lineáris egyenletre, amikor is az általános $X = x + hf(X)$ szabály az alábbi alakot ölti:

$$X = x + hAX \quad \Leftrightarrow \quad (I - hA)X = x \quad \Leftrightarrow \quad X = (I - hA)^{-1}x.$$

A második átalakítás természetesen csak akkor jogos, ha $0 \in \mathbb{R}$ nem sajátértéke az $(I - hA)$ mátrixnak, azaz ha az A mátrix minden λ_k sajátértékére $1 - h\lambda_k \neq 0$, $k = 1, 2, \dots, d$. Ez a $\neq 0$ feltétel minden A mátrixra teljesül, ha $0 < h \ll 1$. Ha azonban az $\dot{x} = Ax$ lineáris egyenlet aszimptotikusan stabil — ami a $\text{Re } \lambda_k < 0 \forall k$ feltétellel ekvivalens —, akkor a $h > 0$ lépésközt tetszőlegesen nagynak is választva, $1 - h\lambda_k \neq 0$ ($k = 1, 2, \dots, d$) automatikusan igaz lesz, sőt (a spektrálsugárról tanultak értelmében) $\|(I - hA)^{-1}\| \rightarrow 0$ ha $h \rightarrow \infty$. Ez itt és most feketén-fehéren azt jelenti, hogy az implicit Euler módszer által meghatározott $x_{n+1} = (I - hA)^{-1}x_n$ sorozat bármely $x_0 \in \mathbb{R}^d$ esetén a $0 \in \mathbb{R}^d$ origóhoz tart.

A fenti okoskodással szokás az implicit módszerek jogosultságát alátámasztani. Jóllehet az egyes lépésekkel több munka van, a lépésköz — különösen a mérnökök által annyira favorizált aszimptotikusan stabil egyensúlyi helyzetekhez egyre közeledve — nagynak, sőt egyre nagyobbak választható. A dinamika aszimptotikus stabilitása — még akkor is, ha az L nagy (!) — alaposan felülírja-felülírhatja a (19) és a (20) egyenlőtlenségeket, ugyanakkor az explicit Euler módszer és más explicit módszerek használatában kikényszeríti- kikényszerítheti a lépésköz $0 < h \ll 1$ választását, ami ugyancsak lassítja a számítógépet és jócskán növeli a kerekítési-számábrázolási hibák összhatását.

Az egydimenziós $u_t = u_{xx}$ diffúzió-egyenlet megoldásai többféle módon is kapcsolatba hozhatók lineáris dinamikus rendszerekkel. Ehhez a (2) és a (10) képleteket kell újra-fogalmaznunk a lineáris funkcionálanalízis nyelvén, a Fourier sorfejtés és a konvolúciós integrál alaptulajdonságainak felhasználásával.

A $[0, \pi]$ intervallumon értelmezett $u_t = u_{xx}$, $u(t, 0) = u(t, \pi) = 0$ ($t \geq 0$, $x \in [0, \pi]$) homogén Dirichlet feladat (2) megoldásai lineáris dinamikus rendszert határoznak meg az $X = L_2[0, \pi]$ Hilbert téren. Az $u(0, \cdot) = g \in L_2[0, \pi]$ kezdeti feltételhez tartozó $\Phi(t, g)$ megoldás minden rögzített $t \geq 0$ esetén a g változóban folytonos és lineáris. Jogos tehát a $\Phi(t, g) = T(t)g$ jelölés, ahol $T(t) \in L(L_2[0, \pi], L_2[0, \pi])$, az $X = L_2[0, \pi]$ teret önmagába vivő folytonos lineáris operátor (melynek normája $\|T(t)\| = \|T(t)\|_{L(L_2[0, \pi], L_2[0, \pi])} = e^{-t}$). A $t = 0$ kezdeti időponthoz a $T(0) = Id_{L(L_2[0, \pi], L_2[0, \pi])}$ identitás-operátor tartozik. A $t > 0$ esetben a $T(t)$ operátort a

$$(\Phi(t, g))(x) = (T(t)g)(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-n^2 t} \sin(nx) \quad \text{ahol} \quad c_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} g(x) \sin(nx) dx, \quad n = 1, 2, \dots$$

képlet definiálja.⁴⁰ A linearitás ténye és a (ii) axióma teljesülése is rendben; a (iii) axióma a $T(t+s) = T(t)T(s)$ azonosság formáját ölti (és a minden $a \in \mathbb{R}$ paraméter esetén érvényes $e^{a(t+s)} = e^{at}e^{as}$ formula következménye). Igazából csak az (i) axióma teljesülése szorul bizonyításra, és az is csak a

$$\|T(t_\ell)g_\ell - g\|_{L_2[0,\pi]} \rightarrow 0 \quad \text{ha} \quad \|g_\ell - g\|_{L_2[0,\pi]} \rightarrow 0 \quad \text{és} \quad t_\ell \rightarrow 0^+ \quad (24)$$

speciális esetben. A $\|T(t_\ell)g_\ell - g\|_{L_2} \leq \|T(t_\ell)g_\ell - T(t_\ell)g\|_{L_2} + \|T(t_\ell)g - g\|_{L_2} \leq \|g_\ell - g\|_{L_2} + \|T(t_\ell)g - g\|_{L_2}$ egyenlőtlenség miatt feltehetjük, hogy $g_\ell = g$ ($\ell = 1, 2, \dots$). Ami még hátra van, az (24) bizonyítása a $g_\ell = g$ ($\ell = 1, 2, \dots$) speciális esetben: egy teljesen elemi, de nagyon szép és jellegzetes számolás⁴¹.

A kapott eredményt úgy is meg lehet fogalmazni, hogy az $u_t = u_{xx}$, $u(t, 0) = u(t, \pi) = 0$ ($t \geq 0$, $x \in [0, \pi]$) homogén Dirichlet feladat (2) megoldásai az $X = L_2[0, \pi]$ Hilbert téren a $\{T(t)\}_{t \geq 0}$ lineáris operátor-félcsoportot definiálják, amely az idő $t \geq 0$ és a kezdeti értékek $g \in L_2[0, \pi]$ változójában egyszerre folytonos. Ez igaz az $u_t = u_{xx}$, $u_x(t, 0) = u_x(t, \pi) = 0$ ($t \geq 0$, $x \in [0, \pi]$) homogén Neumann feladatra is.

A teljes számegyenesen értelmezett $u_t = u_{xx}$ diffúzióegyenlet kezdeti értékeit nemcsak a

$$(BC(\mathbb{R}), \|\cdot\|_{BC(\mathbb{R})} = \{g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \mid g \text{ folytonos és korlátos a } \|g\|_{BC(\mathbb{R})} = \sup_{x \in \mathbb{R}} |g(x)| \text{ normával})$$

Banach térből vehetjük, hanem az $L_1(\mathbb{R})$ vagy az $L_2(\mathbb{R})$ terekből is. A (10) formula minden esetben a teljes számegyenesen értelmezett $u_t = u_{xx}$ diffúzióegyenlet egy-egy megoldását definiálja a $(t, x) \in (0, \infty) \times \mathbb{R}$ halmazon, sőt a kezdetiérték feltételt is kielégíti a 10-ik oldal alján tárgyalt értelemben. A (24) határérték-tulajdonság $\lim_{t_\ell \rightarrow 0} \|T(t_\ell)g - g\|_X = 0$ analogonja azonban nem minden $g \in X = BC(\mathbb{R})$ választás mellett teljesül: ez a negatív eredmény annak a következménye, hogy a $BC(\mathbb{R})$ tér nem minden eleme lesz a teljes számegyenesen egyenletesen folytonos függvény.

Összefoglalásként azt mondhatjuk — néhány további eredményt is bizonyítás nélkül közölve —, hogy az $u_t = u_{xx}$ ($t \geq 0$, $x \in \mathbb{R}$) egyenlet megoldó-operátora lineáris a $\Phi : \mathbb{R}^+ \times X \rightarrow X$ második változóját jelentő kezdeti feltételek $X = L_1(\mathbb{R})$, $X = L_2(\mathbb{R})$ és $X = BC(\mathbb{R})$ terein, dinamikus rendszert azonban csak az $X = L_1(\mathbb{R})$, $X = L_2(\mathbb{R})$ tereken definiál (sőt az $1 \leq p < \infty$ feltételnek eleget tevő $X = L_p(\mathbb{R})$ terek mindegyikén is), de nem definiál dinamikus rendszert a $BC(\mathbb{R})$ és az $X = L_\infty(\mathbb{R})$ terek egyikén sem (mert az (i) axióma nem teljesül).

⁴⁰Ehhez egy kicsit szoktatnunk kell magunkat: adott $t \geq 0$ és $g \in L_2[0, \pi]$ esetén $\Phi(t, g) = T(t)g \in L_2[0, \pi]$ az a függvény, amely az $x \in [0, \pi]$ pontban a $(\Phi(t, g))(x) \in \mathbb{R}$ értéket veszi fel. Amint arra már a 2-ik oldal alján utaltunk, a megoldás "döccenve" indul. A konvergencia alapvetően különbözik a $t = 0$ (amikor is a végtelen sor csupán L_2 értelemben konvergens) és a $t > 0$ (amikor is a végtelen sor és annak valamennyi vegyes deriváltja is egyenletesen konvergens) esetben: jobb lett volna talán a (2) képletet is a (10) képlethez hasonlóan, kapcsos zárójeles esetszétválasztással megadni.

⁴¹Kiindulópontunk a $0 \leq 1 - e^{-n^2 t_\ell} < 1$ egyenlőtlenség és az

$$\|T(t_\ell)g - g\|_{L_2[0,\pi]}^2 = \left\| \sum_n c_n e^{-n^2 t_\ell} \sin(nx) - \sum_n c_n \sin(nx) \right\|_{L_2}^2 = \left\| \sum_n c_n (1 - e^{-n^2 t_\ell}) \sin(nx) \right\|_{L_2}^2 = \frac{\pi}{2} \sum_n c_n^2 (1 - e^{-n^2 t_\ell})^2$$

azonosság. Mivel $\sum_n c_n^2$ konvergens, adott $\varepsilon > 0$ állandó mellett az *indexeket két, ε -tól függő csoportra bontjuk*: $\sum_n = \sum_{n=1}^N + \sum_{n=N+1}^\infty$, ahol $\frac{\pi}{2} \sum_{n=N+1}^\infty c_n^2 \leq \frac{\varepsilon}{2}$. Válasszunk most olyan $t^* = t(\varepsilon) > 0$ értéket, hogy $\sqrt{\frac{\pi}{2}} |c_n| (1 - e^{-n^2 t^*}) \leq \sqrt{\frac{\varepsilon}{2N}}$ legyen minden $n = 1, 2, \dots, N$ esetén. Így

$$\|T(t_\ell)g - g\|_{L_2[0,\pi]}^2 \leq \frac{\pi}{2} \sum_{n=1}^N c_n^2 (1 - e^{-n^2 t_\ell})^2 + \frac{\varepsilon}{2} \leq \frac{\pi}{2} \sum_{n=1}^N c_n^2 (1 - e^{-n^2 t^*})^2 + \frac{\varepsilon}{2} \leq N \frac{\varepsilon}{2N} + \frac{\varepsilon}{2} = \varepsilon$$

ha $0 < t_\ell \leq t^* = t(\varepsilon)$, ami — az $\varepsilon > 0$ állandót minden határon túl csökkentve — pontosan a nullához tartás definíciója.

AZ	ÖSSZEHASONLITÁS	SZEMPONTJAI
\mathbb{R}^n	TÉR tér	$L_2([0, \pi])$
$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \sum_{k=1}^n x_k y_k$	skaláris szorzat	$\langle f, g \rangle = \int_0^\pi f(x)g(x) dx$
$\ \mathbf{x}\ ^2 = \sum_{k=1}^n x_k^2$	norma	$\ g\ ^2 = \int_0^\pi g(x) ^2 dx$
$\mathbf{e}_k, k = 1, \dots, n$	standard ortonormált bázis	$\sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(nx), n = 1, 2, \dots$
$\mathbf{x} = \sum_{k=1}^n x_k \mathbf{e}_k$	Fourier sor	$g = \sum_{n=1}^\infty g_n \sin(nx)$
$x_k = \langle \mathbf{e}_k, \mathbf{x} \rangle$	Fourier együtthatók	$g_n = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi g(x) \sin(nx) dx$
$\ \mathbf{x}\ ^2 = \sum_{k=1}^n x_k^2$	Pythagoras/Parseval	$\ g\ ^2 = \frac{\pi}{2} \sum_{n=1}^\infty g_n^2$
$\dot{x} = Ax$	DIFFERENCIÁLEGYENLET differenciálegyenlet	$u_t = u_{xx}$
—	peremfeltétel	$u(t, 0) = u(t, \pi) = 0$
$x(0) = x_0 \in \mathbb{R}^n$	kezdetifeltétel	$u(0, \cdot) = g \in L_2([0, \pi])$
$x(t) = e^{\lambda t} \mathbf{v}$	PRÓBAFÜGGVÉNYEK	$u(t, x) = c_n(t) \sin(nx)$
$\lambda \mathbf{v} = A \mathbf{v} \Rightarrow \mathbf{v} = \mathbf{s}_k$	<i>a kapott segédegyenlet</i>	$\dot{c}_n = -n^2 c_n \Rightarrow c_n(t) = e^{-n^2 t}$
$e^{\lambda_k t} \mathbf{s}_k, k = 1, \dots, n$	alapmegoldások	$e^{-n^2 t} \sin(nx), n = 1, 2, \dots$
$x(t) = \sum_{k=1}^n c_k e^{\lambda_k t} \mathbf{s}_k$	<i>általános megoldás I</i>	$u(t, x) = \sum_{n=1}^\infty c_n e^{-n^2 t} \sin(nx)$
$c_k = \langle \mathbf{s}_k, \mathbf{x} \rangle$	az együtthatók	$c_n = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi g(x) \sin(nx) dx$
A	OPERÁTOR operátor	$\Delta_D = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ & peremfeltétel
$A = A^T$	önadjungáltság	$\Delta_D = \Delta_D^T$
$\lambda_k \in \mathbb{R}, \mathbf{s}_k$	<i>sajátérték, sajátvektor</i>	$-n^2, \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(nx)$
$\mathbf{s}_k, k = 1, \dots, n$	<i>teljes ortonormált rendszer</i>	$\sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(nx), n = 1, 2, \dots$
$\mathbf{x} = \sum_{k=1}^n c_k \mathbf{s}_k$	Fourier sor	$g = \sum_{n=1}^\infty g_n \sin(nx)$
$A = \text{diag}(\lambda_k)$	főtengelytétel I	$\Delta_D = \text{diag}(\lambda_n)$
$A \mathbf{x} = \sum_k \lambda_k c_k \mathbf{s}_k$	főtengelytétel II	$\Delta_D g = \sum_{n=1}^\infty -n^2 g_n \sin(nx)$
$\Phi(t, \mathbf{x}) = T(t) \mathbf{x} = e^{At} \mathbf{x}$	általános megoldás II	$\Phi(t, g) = T(t)g = e^{\Delta_D t} g$

Az előző oldalt teljesen kitöltő Táblázat azt mutatja, hogy az $u_t = u_{xx}$, $u(t, 0) = u(t, \pi) = 0$ ($t \geq 0$, $x \in [0, \pi]$) homogén Dirichlet feladat az $X = L_2[0, \pi]$ Hilbert téren értelmezett közönséges differenciálegyenletként is felfogható.

A szembevetendő hasonlatosságok ellenére komoly különbségek is vannak. A Táblázat jobb alsó részén a Δ_D (amely a homogén Dirichlet peremfeltétellel ellátott $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ differenciál-operátor szokásos jelölése) nem korlátos lineáris operátor. A $T(t) = e^{\Delta_D t}$ lineáris operátor viszont korlátos, de nem határozható meg az \mathbb{R}^d tér feletti mátrix-exponenciálisok $e^{At} = \sum_k \frac{t^k}{k!} A^k$ formulájához hasonló sorfejtéssel.

DIAGONALIZÁLHATÓ MÁTRIXOK FÜGGVÉNYEI: Az e^{At} mátrixfüggvény meghatározása akkor a legkönnyebb, ha létezik valós sajátvektorokból álló bázis. Ez az az eset, amikor az \mathbf{A} (valós és $d \times d$ méretű) mátrixot (a valós számok teste felett) diagonalizálni lehet. Az általános módszert a $d = 2$ példán mutatjuk be. Emlékeztetünk rá, hogy a \mathbf{v}_1, \dots oszlopvektorok az \mathbf{A} mátrix jobboldali, a \mathbf{w}_1^T, \dots sorvektorok pedig baloldali sajátvektorai. A jobb- és baloldali sajátértékek egyaránt λ_1, \dots . Tehát

$$\begin{aligned} \mathbf{A}\mathbf{v}_1 = \lambda_1\mathbf{v}_1 \ \& \ \mathbf{A}\mathbf{v}_2 = \lambda_2\mathbf{v}_2 \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{A}(\mathbf{v}_1 \mid \mathbf{v}_2) = (\mathbf{v}_1 \mid \mathbf{v}_2) \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{A}\mathbf{M} = \mathbf{M}\mathbf{D} \\ \Leftrightarrow \quad \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{D}\mathbf{M}^{-1} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{pmatrix} \mathbf{w}_1^T \\ \mathbf{w}_2^T \end{pmatrix} \mathbf{A} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{w}_1^T \\ \mathbf{w}_2^T \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} \mathbf{w}_1^T \mathbf{A} = \lambda_1 \mathbf{w}_1^T \\ \mathbf{w}_2^T \mathbf{A} = \lambda_2 \mathbf{w}_2^T \end{cases} \\ \mathbf{A} = \mathbf{M}\mathbf{D}\mathbf{M}^{-1} = (\mathbf{v}_1 \mid \mathbf{v}_2) \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{w}_1^T \\ \mathbf{w}_2^T \end{pmatrix} = \lambda_1 \mathbf{v}_1 \mathbf{w}_1^T + \lambda_2 \mathbf{v}_2 \mathbf{w}_2^T \\ \mathbf{A}^k = (\mathbf{M}\mathbf{D}\mathbf{M}^{-1})^k = \mathbf{M}\mathbf{D}^k\mathbf{M}^{-1} = (\mathbf{v}_1 \mid \mathbf{v}_2) \begin{pmatrix} \lambda_1^k & 0 \\ 0 & \lambda_2^k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{w}_1^T \\ \mathbf{w}_2^T \end{pmatrix} = \lambda_1^k \mathbf{v}_1 \mathbf{w}_1^T + \lambda_2^k \mathbf{v}_2 \mathbf{w}_2^T \end{aligned}$$

Azt kaptuk, hogy az e^{At} mátrix kiszámításához szükséges sorfejtést egyedül a \mathbf{D} mátrix főátlójában lévő sajátértékekre szükséges elvégezni. Az eredmény⁴²:

$$e^{At} = \mathbf{M}e^{\mathbf{D}t}\mathbf{M}^{-1} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} e^{\lambda_1 t} & 0 \\ 0 & e^{\lambda_2 t} \end{pmatrix} \mathbf{M}^{-1} = \sum_{j=1}^d e^{\lambda_j t} \mathbf{v}_j \mathbf{w}_j^T.$$

Ha $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$, azaz ha az \mathbf{A} mátrix szimmetrikus, akkor sajátértékei valósak és a $\mathbf{v}_j = \mathbf{w}_j$ sajátvektorok egymásra merőleges egységvektoroknak is választhatók és így az \mathbf{M} mátrix ortonormált: $\mathbf{M}^{-1} = \mathbf{M}^T$. Ha az \mathbf{A} mátrix ezen felül pozitív semidefinit is (azaz sajátértékei nemnegatívak és az $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$ kvadratikus alak is az), akkor (szintén pozitív semidefinit) négyzetgyökét a $\sqrt{\mathbf{A}} = \sum_{j=1}^d \sqrt{\lambda_j} \mathbf{v}_j \mathbf{v}_j^T$ képlet definiálja.⁴³

⁴²Ugyanez a módszer vezet az $f(\mathbf{A})$ mátrixhoz, ha az f függvény Taylor-sorának konvergenciasugara nagyobb, mint $\max_{1 \leq k \leq d} |\lambda_k|$ és az

$$\frac{1}{r^k} \mathbf{A}^k = \mathbf{v}_1 \mathbf{w}_1^T + \frac{\lambda_2^k}{r^k} \mathbf{v}_2 \mathbf{w}_2^T + \dots + \frac{\lambda_d^k}{r^k} \mathbf{v}_d \mathbf{w}_d^T \rightarrow \mathbf{v}_1 \mathbf{w}_1^T \quad \text{ha } k \rightarrow \infty \text{ és } r = |\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_d|$$

formula szerint a Perron–Frobenius Tétel egy speciális esetét is bizonyítani képes.

⁴³Ha a(z általánosított) PÉLDA 6 \mathcal{G} gráfjának nincsenek izolált csúcsai, akkor a $P_{\mathcal{G}} = D_{\mathcal{G}}^{-1} A_{\mathcal{G}} = D_{\mathcal{G}}^{-1/2} D_{\mathcal{G}}^{-1/2} A_{\mathcal{G}} D_{\mathcal{G}}^{-1/2} D_{\mathcal{G}}^{1/2}$ azonosság (és a $D_{\mathcal{G}}^{-1/2} A_{\mathcal{G}} D_{\mathcal{G}}^{-1/2}$ mátrix szimmetrikus volta — hiszen az $A_{\mathcal{G}}$ szomszédsági mátrix is szimmetrikus, $D_{\mathcal{G}}^{-1/2}$ pedig a $D_{\mathcal{G}}$ -vel együtt maga is diagonális) mutatja, hogy a $P_{\mathcal{G}}$ átmenetmátrix minden sajátértéke valós kell legyen.