Diffúzió és Nemnegatív Mátrixok Hatványozása

Matlab hasznos módszerek

- Diagonális mátrix:
  - Mátrix = diag(ones(n,1)) + diag(ones(n-1,1),1) + diag(ones(n-1,1),-1)
- Sajátértékek/vektorok:
  - [sajátvektor sajátérték] = eig(mátrix)
  - sajátérték = diag(sajátérték)
- Komplex sajátértékek plottolása
  - plot(sajátértékek, ‘o’)
- Szép mátrix reprezentáció
  - imagesc(Mátrix), caxis([0,1])
- Animáció: loop-ban waitforbuttonpress, pause(mp)

Perron-Frobenius mátrixok

Legyen $\mathbf{A} \geq \mathbf{0}$ és $\exists\, k^*$, hogy $\mathbf{A}^{k^*} > \mathbf{0}$ (azaz $\mathbf{A}$ nemnegatív, primitív mátrix).

Ekkor $|\lambda_n| \leq |\lambda_{n-1}| \leq \ldots \leq |\lambda_2| < \lambda_1 = r$ (azaz $0 < r$ domináns sajátérték),
$\mathbf{A}\mathbf{v} = r\,\mathbf{v}$, $\mathbf{w}^T\mathbf{A} = r\,\mathbf{w}^T$, domináns sajátvektor jobbról $\mathbf{v} > \mathbf{0}$, balról $\mathbf{w}^T > \mathbf{0}^T$,
a $\mathbf{w}^T\mathbf{v} = 1$ normálással,

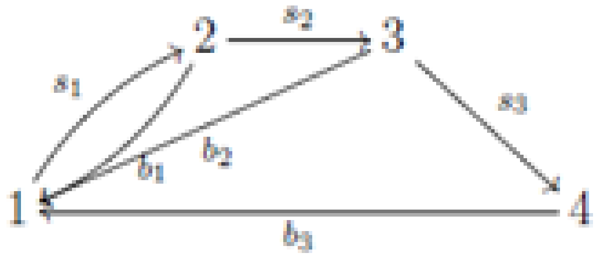
$$\frac{1}{r^k}\mathbf{A}^k \to \mathbf{v}\mathbf{w}^T \quad \text{ha} \quad k \to \infty\,.$$

- legnagyobb sajátérték jellemzi a mátrixot pl.:
  - Diffúzió mátrix sajátértékei (korábbi feladatban különböző μ mellett)

Állapotátmenet gráf

Legyen $\mathbf{A} = \{a_{ij}\}_{i,j=1}^{n} \geq \mathbf{0}$ továbbra is nemnegatív mátrix.

Az általa meghatározott $\mathcal{G} = \mathcal{G}(\mathbf{A})$ átmenetgráf csúcsai és irányított élei :
$V(\mathcal{G}) = \{1,2,\ldots,n\}$ illetve $(\{i\} \to \{j\}) \in E(\mathcal{G}) \;\Leftrightarrow\; a_{ji} > 0.$
Az index–csere értelmes volta az $\mathbf{L}_4$ Leslie mátrix biológiai interpretációjából látszik :



$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 0 & b_1 & b_2 & b_3 \\ s_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & s_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & s_3 & 0 \end{pmatrix},$$

$b_k > 0$ születési/birth , $s_k > 0$ túlélési/survival ráták

Lemma. Legyen $\mathbf{A} = \{a_{ij}\}_{i,j=1}^{n}$ 0–1 mátrix. Ekkor $\{\mathbf{A}^k\}_{i,j}$ a $\mathcal{G}(\mathbf{A})$ átmenetgráf j–edik csúcsából az i–edik csúcsába vezető k hosszúságú irányított utak száma.

Következmény. Általános $\mathbf{A} \geq \mathbf{0}$ esetén $\mathbf{A}^{k^*} > \mathbf{0}$ pontosan akkor teljesül, ha az átmenetgráf bármely csúcsából bármely csúcsába van k^* hosszúságú irányított út.

Világos, hogy ekkor az átmenetgráf mint irányított gráf erősen összefüggő. Mátrixokra átfogalmazva, primitív mátrix szükségképpen irreducibilis is.

Leslie mátrix - biológiai példák

$$\begin{bmatrix} 0 & b_1 & 0 & b_3 \\ s_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & s_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & s_3 & 0 \end{bmatrix}$$

irreducibilis mátrix

Pl:
b1=[0; ½]
b2=[1; ½]
s1=1
s2=1
s3=1

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & b_2 & b_3 \\ s_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & s_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & s_3 & 0 \end{bmatrix}$$

primitív mátrix

$A^{k*} > 0$

Pl:
b2=2
b3=6
s1=1/2
s2=1/2
s3=1/3

$$R = s_1 b_1 + s_1 s_2 b_2 + s_1 s_2 s_3 b_3$$

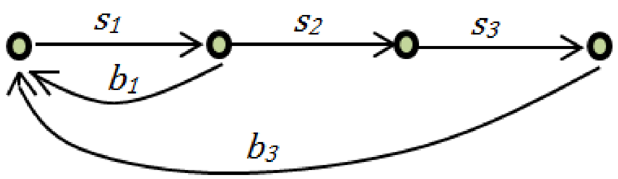
$$R = 1 \Leftrightarrow r = 1$$

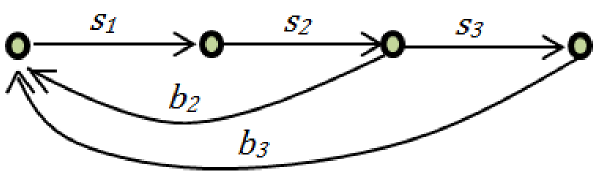
- Biológiai jelentésük:
  - Cserebogár: b1=0
  - Csertölgy: b1=1
  - Egy idő után (pl a 3. évtől) szaporodnak csak az egyedek

Leslie mátrix - biológiai példák

$$\begin{bmatrix} 0 & b_1 & 0 & b_3 \\ s_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & s_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & s_3 & 0 \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} 0 & 0 & b_2 & b_3 \\ s_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & s_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & s_3 & 0 \end{bmatrix}$$

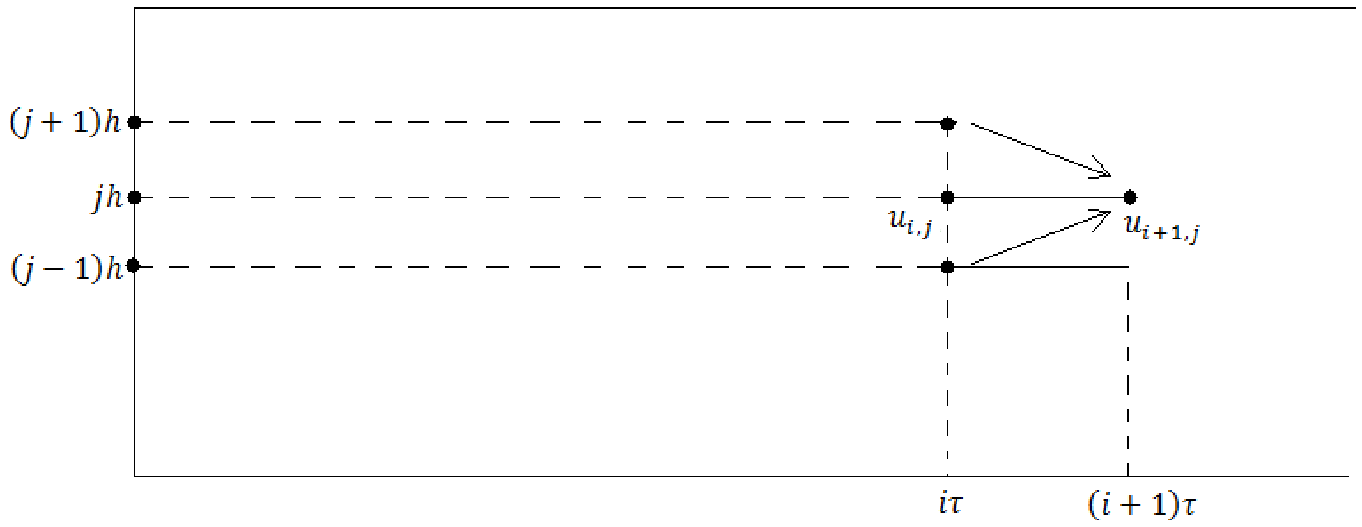
$$(i \to j) \in E(A) \Leftrightarrow a_{ji} > 0$$





Diffúzió diszkretizációja

$u'_t = u''_{xx}$



$$\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\tau} = D\,\frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h^2} \quad \text{ahol}$$

$i = 0,1,2,\ldots$

$j = 0,1,2,\ldots N$

D diffúziós állandó

h beosztás (x)

τ beosztás (t)

$u_{i,j}$ az i-edik időpontban, a j-edik helyen lévő ,,anyagsűrűség vagy anyagáram sűrűség"

Diffúzió diszkretizációja – Neumann feladat

$$u'_t = D\,u''_{xx} \quad , \quad u'_x(t,0) = u'_x(t,L) = 0 \quad , \quad u(0,x) = g(x) \in [0,1) \quad , \quad t \geq 0 \,,\; 0 \leq x \leq L$$

diffúzió–egyenlet , homogén Carl Neumann peremfeltétel , kezdeti feltétel — anyagkoncentráció változása, *homogenizálódása*, *kiegyenlítődése* zárt kémcsőben

$0 \leq u(t,x) < 1$ és $\int_0^L u(t,x)\,dx = \frac{1}{L}\int_0^L g(x)\,dx$ akár a kémia akár a matematika miatt

Lineáris skálázás, normálás, "dimenziótlanítás" $\Rightarrow$ $D = 1,\; L = \pi$

Diszkretizáció: $u_{ij} \approx u(i\tau, jh)$ ahol $\tau > 0,\;\; h = \frac{L}{N},\;\; i = 0,1,2,\ldots,\;\; j = 0,1,\ldots,N$
ahol Neumann János szerint legyen érvényes a $\mu = D\frac{\tau}{h^2} \leq \frac{1}{2}$ stabilitási feltétel

Diffúziós Neumann feladat fizikája

Szorzat alakú tartományon (téglatest, körlemez, gömb etc.) a megoldás előállítható klasszikus ortogonális sorfejtésekkel. Diszkretizációs módszerek mindig rendelkezésre állnak.

Ha a feladatban $t \geq 0$ és $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$ korlátos tartomány, akkor — amint az a maximum elv megfogalmazásához kell — $\Omega_T = (0,T) \times \Omega$ és $\partial_* \Omega_T = \left(\{0\} \times \overline{\Omega}\right) \cup \left((0,T] \times \partial\Omega\right)$.

maga a feladat – megoldás sorfejtéssel – diszkretizált megoldás	megmaradási elv	homogenizálódás	maximum elv
$u'_t = u''_{xx}$ & N BC & IC	$\int_0^\pi u(t,x)\,dx = \text{const}$		$\max_{(t,x)\in\overline{\Omega}_T} u(t,x)$ = (proven by Gauss) $\max_{(t,x)\in\partial_*\Omega_T} u(t,x)$
$\frac{c_0}{2} + \sum_{n=1}^\infty c_n e^{-n^2 t} \cos(nx)$		$u(t,x) \to \frac{1}{\pi} \int_0^\pi g(x)\,dx$ as $t \to \infty$	cannot be easily seen (proven by Pólya)
$\underline{u}_{k+1} = A_N \underline{u}_k$, $\underline{u}_0 = \underline{g}$	A_N is a doubly stochastic matrix for $0 < \mu = \frac{\tau}{h^2} \leq \frac{1}{2}$	Perron–Frobenius: $A_N^k \to \mathbb{1}\mathbb{1}^T$ as $k \to \infty$ $r = 1$, $\underline{v} = \mathbb{1}$, $\underline{w}^T = \mathbb{1}^T$	an easy backward averaging argument

Mátrix reprezentáció

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

$\mu=\frac{\tau}{h^2}$ A diszkretizáció az A_N Perron–Frobenius mátrixhoz vezet
a sarkokban a numerikus peremfeltétel érvényesül és $u_{0j}=g(jh)$, $j=1,2,\ldots,N-1$

Peremfeltétel: Neumann (fal)

Dirichlet (kifolyik)

1-2μ

$$\mathbf{A}_N=\begin{pmatrix} 1-\mu & \mu & 0 & \ldots & & & 0\\ \mu & 1-2\mu & \mu & 0 & \ldots & & 0\\ 0 & \mu & 1-2\mu & \mu & 0 & & \vdots\\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0\\ 0 & & \ldots & 0 & \mu & 1-2\mu & \mu\\ 0 & & & \ldots & 0 & \mu & 1-\mu \end{pmatrix}$$

1-2μ

Periodikus

$$\mathbf{A}_P=\begin{pmatrix} 1-2\mu & \mu & 0 & & & & \mu\\ \mu & 1-2\mu & \mu & 0 & & & 0\\ 0 & \mu & 1-2\mu & \mu & & & \vdots\\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0\\ 0 & & \ldots & 0 & \mu & 1-2\mu & \mu\\ \mu & & & \ldots & 0 & \mu & 1-2\mu \end{pmatrix}$$

Feladat: kipróbálni a különböző feltételeket, μ < 0.5; μ > 0.5

2D diffúzió

Explicit Euler módszer:

$$u_{t+1,i,j} = u_{t,i,j} + {k_x}^2 \mu (u_{t,i,j+1} - 2u_{t,i,j} + u_{t,i,j-1}) + {k_y}^2 \mu \boxed{(u_{t,i+1,j} - 2u_{t,i,j} + u_{t,i-1,j})}$$