

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 $u(0, x) = g(x)$, $x \in \overline{\Omega}$ 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 elektromosságtanban 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 bevenni 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

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

ez utóbbi formulát (a jobb oldalon mint összetett függvényt) t szerint egyszer, valamint x szerint kétszer deriválva $u_t = \mathcal{U}_{\tau} \cdot \alpha$, $u_{xx} = \mathcal{U}_{yy} \cdot \beta^2$ adódik, így az α és a β paraméterek optimális megválasztásával

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

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:

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

Maga az egyenlet homogén lineáris, és a peremfeltétel is homogén. Így az $u(t, x)$ ($t \geq 0$, $x \in [0, \pi]$) megoldás az $e^{-n^2 t} \sin(nx)$ alapmegoldások 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

$$u(t, x) = \frac{c_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-n^2 t} \cos(nx) \quad \text{ahol} \quad c_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} g(x) \cos(nx) dx \text{ , } n = 0, 1, 2, \dots \quad (3)$$

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 változóknál. 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 $\{\sin(\frac{\pi}{L} n x)\}_{n=1}^{\infty}$, $x \in [0, L]$ trigonometrikus rendszer szerinti Fourier sorfejtésének együtthatói.)

MAXIMUM-ELV AZ $u_t = \Delta u$ EGYENLETRE: Most az eddigiekben tárgyalt diffúzió-egyenlet — amelyben tehát az ismeretlen függvény $u : [0, \infty) \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ alakú, egydimenziós $t \geq 0$ idő- valamint tetszőleges, d -dimenziós $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d$ térváltozóval — egy nagyon általános, roppant szemléletes és matematikailag könnyen bizonyítható kvalitatív tulajdonságáról lesz szó. Ez a maximum-elv, amelynek érvényesülését szinte naponta tapasztalhatjuk: Hidegzugok, melegzugok, csakúgy mint a koncentráció összesűrűsödései vagy ritkulásai *egydimenziós lineáris* diffúzió révén nem jöhetnek létre. A maximum-elv alapvetően egyetlen valós függvényre teljesül és már a lineárisan csatolt $u_t = \alpha^2 u_{xx} + au + bv$, $v_t = \beta^2 v_{xx} + cu + dv$ egyenletrendszerre sem érvényes — itt u és v egy-egy oldott anyagfajta téridőbeli koncentrációját jelenti, két olyan anyagét egyazon oldatban, amelynek α^2 és β^2 diffúziós egyetthatója egymással nem egyenlő. Ökölszabályként annyit mondhatunk, hogy a diffúzió-egyenlet stabilizál és homogenizál, de a diffúzió-egyenletrendszer már nem rendelkezik ezekkel a tulajdonságokkal.

Következzék a szigorú matematika:

Legyen $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ korlátos (nyílt) tartomány, és legyen $T > 0$ tetszőleges. Vezessük be az

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

jelöléseket³. 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

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

³A $d = 2$ 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 únioja — 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.

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-elmet 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-elmet 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 “történyhüvely”-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, ahol a $-u^2$ “forrástag” soha nem lehet pozitív.

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, éspedig 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 $(x - \delta x, x + \delta x)$ intervalumban. 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 nyúlpárjainak 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:

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

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

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 egyaránt a végtelenhez tartó túlnépesedés, pusztán a biológiai tartalom alapján $1 < r \Leftrightarrow 1 < R$. Hasonlóképpen, mivel mind az $r < 1$, mind az $R < 1$ egyenlőtlenség az aszimptotikus kihalás biológiai tényét fogalmazza meg: $r < 1 \Leftrightarrow R < 1$. Ugye a matematikai bizonyítás — amelyet szintén csak a 4×4 Leslie mátrixokra mutatunk be⁴ — is mennyire szép? (És legalább utólag: mennyire egyszerű?)

PÉLDA 3. – AMIKOR KEVESEBB IGAZ: *súlyozott permutáció-mátrix, avagy a cserebogarak/pajorok négy korosztálya*. Itt $b_1 = b_2 = 0$ valamint $b_3 s_1 s_2 s_3 = 1$, és a $p_4(\lambda) = \lambda^4 - 1$ 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.*

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 rácspontokban vett $u(i\tau, jh)$ értékeinek $u_{i,j}$ közelítései. A belső rácspontokban ($i = 1, 2, \dots, j = 1, 2, \dots, N-1$) vett parciális deriváltakat az $u_{i,j}$ ismeretlenekből képzett (első- és másodrendű) különbségi hányadosokkal pótolva⁵ az alábbi egyenletrendszert nyerjük:

$$\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\tau} = \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h^2} \Leftrightarrow u_{i+1,j} = \mu u_{i,j+1} + (1 - 2\mu)u_{i,j} + \mu u_{i,j-1}, \quad (6)$$

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

⁴ Az $r > 1 \Leftrightarrow R > 1$ (és az $r < 1 \Leftrightarrow R < 1$, valamint az $r = 1 \Leftrightarrow R = 1$) összefüggések bizonyítása: A $\lambda \mathbf{I} - \mathbf{L}$ mátrix determinánsának az első sor szerinti kifejtésével kapjuk, hogy az $\mathbf{L}$ mátrix p_4 karakterisztikus polinomja

$$p_4(\lambda) = \lambda^4 - b_1 s_1 \lambda^2 - b_2 s_1 s_2 \lambda - b_3 s_1 s_2 s_3$$

alakú, amelyből a $\lambda = 1$ választással $p_4(1) = 1 - R$ adódik.

Ha most $R > 1$, akkor $p_4(1) < 0$. De $p_4(\lambda) \rightarrow \infty$ ha $\lambda \rightarrow \infty$ miatt $p_4(\Omega) > 0$ ha $\Omega \in \mathbb{R}$ elegendően nagy. Így a Bolzano tétel alkalmazható az $[1, \Omega]$ intervallumon (vagy ha úgy tetszik, az $[1, \infty)$ félegyenesen). Tehát van olyan $r > 1$ valós szám, hogy $p_4(r) = 0$. Megfordítva, ha $r > 1$, akkor a $p_4(r) = 0$ képletet átrendezve, majd a jobb oldalt okosan növelve, a végén átoszthatunk r^4 -el:

$$r^4 = b_1 s_1 r^2 + b_2 s_1 s_2 r + b_3 s_1 s_2 s_3 < b_1 s_1 r^4 + b_2 s_1 s_2 r^4 + b_3 s_1 s_2 s_3 r^4 \Rightarrow 1 < b_1 s_1 + b_2 s_1 s_2 + b_3 s_1 s_2 s_3 = R.$$

Tehát $R > 1 \Leftrightarrow r > 1$. A még hiányzó $R < 1 \Leftrightarrow r < 1$ eset kezelése sem nehezebb. (Ha ez sikerül, $r = 1 \Leftrightarrow R = 1$ igazolása már csak formális logika dolga.) Amennyiben tehát $R < 1$, akkor az $1 > b_1 s_1 + b_2 s_1 s_2 + b_3 s_1 s_2 s_3$ egyenlőtlenséget a $\lambda \geq 1$ paraméter negyedik hatványával beszorozva

$$\lambda^4 > b_1 s_1 \lambda^4 + b_2 s_1 s_2 \lambda^4 + b_3 s_1 s_2 s_3 \lambda^4 \geq b_1 s_1 \lambda^2 + b_2 s_1 s_2 \lambda + b_3 s_1 s_2 s_3$$

adódik. Másképpen fogalmazva azt kaptuk, hogy $p_4(\lambda) > 0$ minden $\lambda \geq 1$ esetén. Ilymódon a p_4 polinom domináns $r > 0$ gyöke a $(0, 1)$ intervallumba kell, hogy essék. Ha pedig $r < 1$, akkor minden $\lambda \in (r, \infty)$ esetén $p_4(\lambda) > 0$, speciálisan a $\lambda = 1$ választással is $p_4(1) > 0$. De $p_4(1) = 1 - R$ és kész.

Vegyük észre, hogy a bizonyítás mind a négy része explicit vagy implicit módon épített a Perron–Frobenius tételre.

⁵ az 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 $h = \frac{\tau}{N}$ lépésközű (másodrendű) centrális közelítése alapján

meg, kiindulva a nulladik időréteg rácspontjaiban ismert $u_{0,j} = g(jh) \geq 0$ ($j = 1, 2, \dots, N-1$) $\Leftrightarrow \mathbf{u}_0 = \mathbf{g}$ numerikus kezdeti feltételekből. Így a közelítő megoldás kiszámítása — az (N) és a (P) feladatokban — az

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

illetve az

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

$(N-1) \times (N-1)$ méretű szimmetrikus mátrixok hatványozására egyszerűsödik: a közelítő megoldás a k -adik időrétegen az $\mathbf{u}_k = \mathbf{A}_N^k \mathbf{g}$ illetve az $\mathbf{u}_k = \mathbf{A}_P^k \mathbf{g}$ vektoros alakot ölti, $k \in \mathbb{N}$. A numerikus peremfeltételeket⁶ úgymond “beolvasztottuk” az $\mathbf{A}_N$ és az $\mathbf{A}_P$ mátrixok sarokelemeibe. A Perron–Frobenius Tétel feltételei itt és most a $\mu = \frac{\tau}{h^2} < \frac{1}{2}$ és a $\mu = \frac{\tau}{h^2} \leq \frac{1}{2}$ egyenlőtlenségekre fogalmazhatók át.

Az (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 — *energia-megmaradás a hőtani, anyag/tömeg-megmaradás a kémiai interpretációban* — kapcsolja össze. Jóllehet az (N) és a (P) feladatokban a Fourier-sorfejtés két különböző teljes ortonormált rendszer szerint történik, az (N) és a (P) feladatok megoldásai $t \rightarrow \infty$ mellett (az $x \in [0, L]$ változóban egyenletesen) egyaránt az $\frac{1}{L} \int_0^L g(x) dx$ integrálatlaghoz tartanak.

A $\sum_{\ell=1}^{N-1} u_{k,\ell} = \sum_{\ell=1}^{N-1} g(\ell h)$ (ha $k = 0, 1, 2, \dots$) *numerikus megmaradási tétel* azon múlik, hogy az $\mathbf{A}_N$ és az $\mathbf{A}_P$ mátrixok bármely sorában álló számok összege egy. (A mátrixok szimmetriája miatt ugyanez igaz az oszlopösszegekre is.) A $k \rightarrow \infty$ aszimptotikában a *numerikus megoldás is homogenizálódik*, és a k -adik időréteg $(k\tau, \ell h)$, $\ell = 1, \dots, N-1$ rácspontjaiban $\lim_{k \rightarrow \infty} u_{k,\ell} \rightarrow \frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} g(jh)$, ami $hN = L$ miatt az $\frac{1}{L} \int_0^L g(x) dx$ integrálatlag téglányösszezes közelítése. Mivel az $\mathbf{A}_N$ és az $\mathbf{A}_P$ mátrixokra egyaránt

$$r = 1 \quad \text{és} \quad \mathbf{v} = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \text{col}(1, 1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^{N-1}, \quad \text{valamint} \quad \mathbf{w}^T = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \text{row}(1, 1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^{N-1},$$

⁶amelyek rendre (N) $u_{i,0} = u_{i,1}$ & $u_{i,N} = u_{i,N-1}$ illetve (P) $u_{i,0} = u_{i,N-1}$ & $u_{i,1} = u_{i,N}$ ($i = 1, 2, \dots$)

a homogenizálódás ténye maga a Perron–Frobenius Tétel⁷ : $\mathbf{u}_k \rightarrow (\mathbf{v}\mathbf{w}^T)\mathbf{g} = \mathbf{v}(\mathbf{w}^T\mathbf{g}) = (\mathbf{w}^T\mathbf{g})\mathbf{v}$.

Megjegyzés: Amint az a (6) képletsor jobb oldalán álló lineáris egyenletrendszerből könnyen kiolvasható, a *maximum-elv numerikus változata* is teljesül. A “visszafelé vett” átlagok a nemnegatív súlyokkal vett — újabb érv Neumann János $0 < \mu = \frac{\tau}{h^2} \leq \frac{1}{2}$ feltétele mellett !! — konvex lineáris kombinációk

$$u_{i+1,j} = \mu u_{i,j+1} + (1 - 2\mu)u_{i,j} + \mu u_{i,j-1} \Rightarrow \begin{cases} u_{i+1,j} \leq \max\{u_{i,j+1}, u_{i,j}, \mu u_{i,j-1}\} \\ u_{i+1,j} \geq \min\{u_{i,j+1}, u_{i,j}, \mu u_{i,j-1}\} \end{cases}$$

tulajdonságaira utalnak. Az átlagképzés most megfogalmazott és szinte magától értetődő szabályának ereje abban van, hogy balra (nyugat) továbbá balra–fel (északnyugat) és balra–le (délnyugat) egymás után ameddig csak lehet (tehát amíg ki nem jutunk a térbeli és az időbeli perem összes visszafelé elérhető rácsponthoz) alkalmazható. A közelítő megoldás nem vehet fel nagyobb értéket az $((i+1)\tau, jh)$ pontban, mint amekkora a kezdeti, valamint a “csillagos” numerikus perem rácsponthoz tartozó értékek maximuma. Ugyanez a szabály érvényes a megfelelő minimumokra is. 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 az *egydimenziós lineáris diffúzió révén* nem jöhetnek létre a numerikus, közelítő megoldások során sem.

Megjegyzés: Amint azt részletesen is kifejtettük, a pontos megoldás három jellegzetes tulajdonsága is igaz marad az (N) és a (P) feladatokra alkalmazott (6) diszkretizációs eljárásra: 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”*. Mindez Neumann János $0 < \mu = \frac{\tau}{h^2} \leq \frac{1}{2}$ egyenlőtlenségén múlik, amely a 3.) tulajdonságot közvetlenül, az 1.) és a 2.) tulajdonságokat pedig közvetett módon, esetünkben a Perron–Frobenius Tétel alkalmaz(hatóság/ás)án át implikálja.

A $0 < \mu = \frac{\tau}{h^2} \leq \frac{1}{2}$ egyenlőtlenség legfontosabb haszna azonban az, hogy mind az (N), mind a (P), mind a később ismertetendő (D) feladatban garantálja a (6) 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 (annak megfelelően, hogy az eddigi $r = 1$ domináns sajátérték helyébe egy vagy akár több olyan sajátérték lép, amelynek abszolút értéke 1–nél nagyobb) teljesen “szétrázódnak”: érdemes kipróbálni⁸!

A fenti megfontolások világosan mutatják, 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

⁷ ahol is $\mathbf{v}\mathbf{w}^T$ egy $(N-1) \times (N-1)$ méretű négyzetes mátrix, melyneknek minden eleme egyaránt $\frac{1}{N-1}$, $\mathbf{w}^T\mathbf{g}$ pedig egy nemnegatív valós szám. (Tetszőleges négyzetes mátrix ℓ_∞ és ℓ_1 normája az abszolút értékkel vett maximális sor- illetve oszlopösszeg, amely az $\mathbf{A}_N$ esetében egyaránt 1, s ez az 1 az $\text{col}(1,1,\dots,1)$ sajátvektorhoz tartozó sajátérték is [s mert bármely norma legalább akkora, mint az abszolút értékkel vett bármely sajátérték]: hát ezért lettek r , $\mathbf{v}$, $\mathbf{w}^T$ azok, amelyek.)

⁸ A 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 ... amíg Neumann Jánost meg nem kérdezték, mi okozza a számítógép számukra érthetetlen, exponenciálisan növekvő amplitúdójú oszcillációkat produkáló viselkedését.

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 lennénk 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, amelyikben ezek megmaradó mennyiségek? Nyilván nem.

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

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

ahol $0 < t_1 < t_2 < \infty$ és $0 \leq x_1 < x_2 \leq L$ tetszőlegesen. Az $u_t = \Delta u$ parciális differenciálegyenletre érvényes maximum- és minimum-elvet már tárgyaltuk, sőt annak bizonyítását is bemutattuk. (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.)

Megjegyzés: Az $\mathbf{A}_N$ mátrix sajátértékei-sajátvektorai explicit alakban is megadhatók. Nemnegatív, primitív mátrixról lévén szó, a Perron–Frobenius tétel szerinti domináns sajátérték $\lambda_1 = 1$, $\mathbf{s}_1 = \text{col}(1, 1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^{N-1}$ domináns sajátvektorral. A sajátértékek és a sajátvektorok sorszámozása $k = 1, 2, \dots, N-1$ lesz, hiszen $\mathbf{A}_N$ $(N-1) \times (N-1)$ -es mátrix:

$$\lambda_k^N = 1 - 4\mu \sin^2\left(\frac{k-1}{2N}\pi\right), \quad \mathbf{s}_k^N = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{k-1}{2(N-1)}\pi\right) \\ \cos\left(\frac{3(k-1)}{2(N-1)}\pi\right) \\ \vdots \\ \cos\left(\frac{(2N-3)(k-1)}{2(N-1)}\pi\right) \end{pmatrix}, \quad k = 1, 2, \dots, N-1.$$

Vegyük észre, hogy $k = 1$ esetén a domináns $\lambda_1^N = 1$, $\mathbf{s}_1^N = \text{col}(1, 1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^{N-1}$ sajátérték-sajátvektor párt kapjuk vissza, továbbá azt is, hogy

$$N \rightarrow \infty \text{ esetén } \frac{1}{\mu h^2}(\lambda_k^N - 1) = -4 \frac{N^2}{\pi^2} \sin^2\left(\frac{k-1}{2(N-1)}\pi\right) \rightarrow -(k-1)^2$$

minden fix $k > 1$ egész esetén. Mindez világosan mutatja az $\mathbf{A}_N$ diszkrétizációs mátrix, valamint az egydimenziós Δ_N operátorok⁹ közötti szoros sajátértékek–sajátvektor/sajátfüggvény egyszóval spektrális kapcsolatokat. A megfelelően skálázott sajátértékek egymáshoz tartanak, és a $\cos(kx)$ sajátfüggvények is (az $\mathbf{s}_k^N$ -ra kapott $k = 1, 2, \dots, N-1$ képlet szerint) mintegy "diszkrétizálódnak".

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 most¹⁰ — az

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

$(N-1) \times (N-1)$ 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 $k \rightarrow \infty$.¹¹

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 $p_{ij} = P(\xi_{n+1} = j \mid \xi_n = i)$ valószínűségek¹²:

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

⁹a homogén Neumann peremfeltételt mind az egydimenziós Δ Laplace-operátorba, mind a diszkrétizáció $\mathbf{A}_N$ mátrixába beépítettük. Amint az a (3) sorfejtésből is látszik, a $[0, \pi]$ intervallumhoz tartozó Δ_N operátor sajátértékei $\{-n^2\}_{n=0}^\infty$, sajátvektorai pontosabban sajátfüggvényei — hiszen olyan vektortérben dolgozunk, amelynek elemei függvények — pedig $\{\cos(nx)\}_{n=0}^\infty \subset L_2[0, \pi]$. Az $\dot{x} = \mathbf{A}x$ homogén lineáris közönséges differenciálegyenlet $x(0) = x_0 \in \mathbb{R}^d$ pontból induló $x(t) = e^{At}x_0 \in \mathbb{R}^d$, $t \in (-\infty, \infty)$ megoldásának mintájára szabad azt is írunk, hogy az $u_t = \Delta_N$ homogén Neumann-feladat $u(0) = g \in L_2[0, \pi]$ pontból induló megoldása $u(t) = T(t)g = e^{\Delta_N t}g \in L_2[0, \pi]$, $t \in [0, \infty)$. Itt $T(t) = e^{\Delta_N t} : L_2[0, \pi] \rightarrow L_2[0, \pi]$ minden fix $t \in [0, \infty)$ esetén korlátos lineáris operátor, melynek sajátértékei $\{e^{-n^2 t}\}_{n=0}^\infty$, sajátfüggvényei pedig változatlanul $\{\cos(nx)\}_{n=0}^\infty \subset L_2[0, \pi]$.

¹⁰A numerikus peremfeltételek (D) $u_{i,0} = 0$ & $u_{i,N} = 0$ ($i = 1, 2, \dots$), a numerikus kezdeti feltételek pedig a korábbiakkal egyezően $u_{0,j} = g(jh)$ ($j = 1, 2, \dots, N-1$).

¹¹Itt jegyezzük meg, hogy az $\mathbf{A}_P$, $\mathbf{A}_D$ mátrixok teljes sajátérték–sajátvektor rendszere is explicit módon számolható.

¹²Sor-sztocasztikus 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 illetlen 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]).

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 $\mathbf{w}^T$ koordinátáiban az átmenetgráf csúcsainak fokszámát?

Most visszatérünk a Példa 4. A_N mátrixához: Vizsgáljuk a

$$\left. \begin{array}{l} \text{diffúzió-egyenlet:} \\ \text{homogén (N) peremfeltétel:} \\ \text{kezdeti feltétel:} \end{array} \quad \begin{array}{l} u'_t = u''_{xx} \text{ ahol } 0 \leq t \leq T, 0 \leq x \leq L \\ u'_x(t, 0) = u'_x(t, L) = 0 \text{ ahol } 0 \leq t \leq T \\ u(0, x) = g(x) \text{ ahol } 0 \leq x \leq L \end{array} \right\} \text{feladat} \quad (7)$$

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 (6) egyenletrendszerből kiszámolt $u_{i,j} \approx u(i\tau, jh)$ közelítő megoldás és a mostantól $\bar{u}_{ij} = u(i\tau, jh)$ 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.¹³ 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 (6) sorszámu egyenlet különbsége

$$e_{i+1,j} = \mu e_{i,j+1} + (1 - 2\mu)e_{i,j} + \mu e_{i,j-1} + \tau m_{i,j}, \quad \text{legalábbis a belső rácspontokban.} \quad (8)$$

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

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

mátrixhatványozás valamint az időrétegről időrétegre haladó *hibaterjedés mechanizmusát leíró*

$$\mathbf{e}_{i+1} = \mathbf{A}_N \mathbf{e}_i + \mathbf{m}_i \quad (i = 0, 1, 2, \dots, M-1), \quad \mathbf{e}_0 = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^{N-1} \quad (10)$$

¹³A megfelelő Taylor polinomok alapján

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

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.)

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.

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 (7) feladat (9) numerikus megoldásához tartozó (10) hibaterjedési rekurzióra, ez utóbbit kifejezetten könnyű explicit hibabecsléssé alakítani. Valóban, az

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

a (8) 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 (7) 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, éspedig 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 számegyenesen — Poisson megoldóképlete és a normális eloszlás

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

$$u(t, x) = \begin{cases} g(x) & \text{ha } t = 0 \\ \frac{1}{2\sqrt{\pi t}} \int_{-\infty}^{\infty} g(\xi) \exp\left(-\frac{(x-\xi)^2}{4t}\right) d\xi & \text{ha } t > 0 \end{cases} \quad (11)$$

megoldása, éspedig 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 éspedig csupa elsőfajú szakadása van, akkor is igaz a (11) 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 (11) 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 $\frac{z}{\sqrt{2t}} = s$ választással¹⁴:

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

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

$$P_x(t, x) = \varphi_{0, \sqrt{2t}}(x) \quad \text{már amennyiben } t > 0 \text{ (és } x \in \mathbb{R}). \quad (12)$$

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 (12) formula oldja meg. De hogyan válasszuk meg a kezdeti feltételt? Mihez vezet a $t \rightarrow 0^+$ határátmenet? Ha az $x \in \mathbb{R}$ értéket rögzítjük, akkor

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

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-

¹⁴Lehetett volna érvelnünk közvetlenül a $4t = 2\sigma^2 \Leftrightarrow 2\sqrt{\pi t} = \sigma\sqrt{2\pi}$ észrevétel alapján is.

értelemben¹⁵ 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 más nézőpontból a Heaviside függvény disztribúció értelmében 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

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

adódik, tehát a $c = a^2$ választással az eddig vizsgált “vegyük a diffúziós együtthatót $a^2 = 1$ -nek” esethez

¹⁵Disztribúciónak 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. Tehát bármely disztribúció disztribúció értelmében véve akárhányszor deriválható.

Fontos észrevétel az is, hogy C^1 függvényekre a hagyományos derivált és a disztribúció értelmében 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 értelmében vett deriváltját illeti, arra

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

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).

jutunk. Ha a kezdeti feltétel változatlanul $u(0, x) = \mathcal{U}(0, x) = H(x)$, akkor¹⁶

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

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.

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

- diffúzió: $\underline{F} = \underline{F}_{diff} = -k_1 \underline{\operatorname{grad} u}$
- advekcio: $\underline{F} = \underline{F}_{adv} = k_2 u \underline{v}$, ahol $\underline{v}$ az áramló közeg ismert sebessége
- advekcio–diffúzió: $\underline{F} = \underline{F}_{adv-diff} = -k_1 \underline{\operatorname{grad} u} + k_2 u \underline{v}$
- reakció–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 reakció 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 méreg (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 advekcio–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 advekcio k_2 együtthatók helytől és időtől való függetlensége az alkalmazások

¹⁶A találatkony Olvasó a lineáris helyettesítést a (11) formulában is bizton el tudja végezni. Brown virágpor-kísérletét 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

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

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(z áttérés polárkoordinátákra)

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

illetve a(z áttérés az origó körül elforgatott koordinátákra)

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

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

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 advekcíóegyenletben szinte mindig $\underline{v} = \underline{v}(t, x)$ alakú¹⁷. Inhomogenitást a peremfeltételek inhomogenitása is okozhat¹⁸.

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 reakció–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.¹⁹

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

¹⁷sőt a valódi alkalmazások jó részében $\underline{v}$ maga is (a Navier–Stokes egyenletekkel kapcsolatos) ismeretlen

¹⁸A 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.)

¹⁹Ha 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.

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

A *populációdinamika* történetileg első matematikai modellje Malthus

$$\dot{x} = rx, \quad x(0) = x_0 > 0 \quad \Rightarrow \quad x(t) = x_0 e^{rt} \quad (13)$$

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 (13) egyenletben a leginkább kritizálható, az az erőforrás-korlátok figyelmen kívül hagyása. Verhulst modellje ebből a szempontból sokkal realisztikusabb:

$$\left. \begin{array}{l} \dot{x} = rx \left(1 - \frac{x}{K}\right) \\ x(0) = x_0, \quad 0 \leq x_0 \leq K \end{array} \right\} \Rightarrow x(t) = \frac{Kx_0}{x_0 + (K - x_0)e^{-rt}} \quad (14)$$

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 — jöllehet csak egyetlen konkrét számpélda kapcsán²⁰ — vagy hatszáz évvel korábban. Leslie modellje a huszadik századi matematika absztrakciós erejével ismétli meg Fibonacci gondolatmenetét. A modellalkotás szempontjából Leslie egyetlen újítása az *egyed 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 (14) modellje nemlineáris. Természetesen ennek is van diszkrét idejű változata, az

$$\left. \begin{array}{l} x_{n+1} = \frac{Rx_n}{1 + \frac{R-1}{K}x_n}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \\ 0 \leq x_0 \leq K \end{array} \right\} \Rightarrow x_N = \frac{Kx_0}{x_0 + (K - x_0)R^{-N}}, \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (15)$$

Beverton–Holt féle nemlineáris rekurzió²¹. Itt $R > 1$ jelenti a növekedési rátát, s a logisztikus (14) differenciálegyenlethez hasonlóan most is $K > 0$ a környezet eltartóképessége. A $K \rightarrow \infty$ határátmenettel (14)

²⁰Fibonacci 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-modellekre is érvényes.

²¹A 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 (14) modellt és a diszkrét idejű Beverton–Holt modellt a lépésköz $h = \frac{R-1}{r}$

illetve (15) Malthus sokat kritizált, de nagy történeti fontosságú (13) 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 (13) differenciálegyenletének az $\dot{x}(t) = bx(t - \tau) - dx(t)$ késleltetett egyenlet felel meg: szaporodni csak a $\tau > 0$ -nál idősebb egyedek képesek. Verhulst (14) 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 rács-, illetve cellafelbontásai szolgáltatják. Cellafelbontás alatt szabályos, minél több szimmetriával rendelkező rácsfelbontásokat értünk. Lehetséges az is, hogy a tér pontjait egy adott véges gráf csúspontjaival 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 (14) 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 $\overline{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$ 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 — diszciplinákat képez. Ezek egyike a *celluláris automaták*, másika a *neurális hálók* világa, a maga peremfeltételeivel, input–outputjaival és visszacsatolásaival.

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 diszkretizáció is összekapcsolja. Valóban,

$$x_{n+1} = x_n + r \frac{R-1}{r} x_n \left(1 - \frac{x_{n+1}}{K} \right) \quad \Leftrightarrow \quad x_{n+1} = Rx_n - \frac{R-1}{K} x_n x_{n+1} \quad \Leftrightarrow \quad (15).$$

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–másikat 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

$$\left. \begin{aligned} \dot{x} &= x(c_1 + a_1x + b_1y) \\ \dot{y} &= y(c_2 + a_2x + b_2y) \end{aligned} \right\} \quad \text{ahol } c_1, c_2, a_1, a_2, b_1, b_2 \in \mathbb{R} \text{ adott konstansok és } x, y \geq 0 \quad (16)$$

kvadratikus differenciálegyenlet-modellje Lotka és Volterra nevéhez fűződik. Az esetszétváztásokat 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 (de nem bármelyik három) lineáris változó-helyettesítésekkel ± 1 -re kiskálázható. A Kolmogorov féle általánosítás

$$\dot{x}_k = x_k f_k(x_1, x_2, \dots, x_d) \quad \text{ahol } x_k \geq 0, \quad k = 1, 2, \dots, d \quad (17)$$

alakú. Itt $f_k : \mathbb{R}_+^d \rightarrow \mathbb{R}$ ($k = 1, 2, \dots, d$) adott folytonosan differenciálható függvények. A biológiailag releváns fázistér — amint az a (16) és a (17) 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 a biológia okán egyenletesen korlátosnak kell maradnia. Ez azt is jelenti, hogy szimbiotikus ökoszisztémákat kvadratikus Lotka–Volterra rendszerekkel csak az $\mathbb{R}^d$ korlátos részhalmazain lehet modellezni.

A *kétdimenziós Lotka–Volterra* (16) *rendszerek* konkrét példákon és általánosításokon át történő — nem minden részletében egyformán olvasmányos, de reményeim szerint mégiscsak jól követhető — bemutatása a Nemlineáris Dinamika jegyzet²² 3.8 fejezetében található. A dinamika jellege az egyensúlyi helyzetek kis környezetében a linearizálás módszerével, a “nyom–determináns” ábra szerinti esetszétválasztásokkal állapítható meg. Az $x \geq 0, y \geq 0$ síknegyeden 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 $\dot{x}$

²²http://digitus.itk.ppke.hu/~garay/NDS_jegyzet/

derivált ottani előjelétől függően jobbra vagy balra mutat). Az egyensúlyi helyzetek környezetében az is eligazít, ha egy-két közeli pontra rárajzoljuk a vektormező ottani elemét²³.

A globális dinamika megrajzolásához fontos a következőt tudni: *egy kétdimenziós Lotka–Volterra (16) 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*, de az egymásba skatulyázott periodikus megoldások nem szükségképpen töltik ki az $x, y > 0$ pozitív ortáns egészét. Ennek a ténynek az ismeretében (ha még a végtelen távoli pont körüli dinamikát is “feltérképezzük”: ez roppant nehéz tud lenni!!) 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 (16) rendszerek a síkbeli autonóm differenciálegyenletek fázisportré–analízisének legjobb gyakorló terepe. A globális dinamikát bemutató ábra részenként, mindig ugyanazonon a lépéseken keresztül, fokozatosan készíthető el. S közben 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
- (ii) $\Phi(0, x) = x \quad \forall x \in X$
- (iii) $\Phi(t, \Phi(s, x)) = \Phi(t + s, x) \quad \forall t, s \in \mathbb{R} \quad \forall x \in X$

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.)

²³különösen hasznos ez, ha a forgásirányt szeretnénk megállapítani egy (stabil vagy instabil) fókuszpont esetében; de akkor is segít, ha a kétdimenziós Lotka–Volterra (16) 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)

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 görbeként szemléltethetünk. Az X állapottér tehát a trajektóriák únioja, 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

$$\dot{x} = f(x), \quad x \in \mathbb{R}^d \quad (18)$$

KÖZÖNSÉGES, AUTONÓM DIFFERENCIÁLEGYENLET MEGOLDÓ-OPERÁTORA. Természetesen feltesszük, hogy az (18) 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*)^{24, 25}. 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 $(t, x_0) \rightarrow x_{0,x_0}$ jelölést pedig a $(t, x) \rightarrow \Phi(t, x)$ alakra cseréljük.

Közönséges differenciálegyenleteket 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 nyeregpon 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.

²⁴A $t_0 \in \mathbb{R}$ kezdeti időpontot, mivel az (18) 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.)

²⁵Mindehhez elegendő feltenni az $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ globális Lipschitz-folytonosságát, azaz a

$$|f(x) - f(\tilde{x})| \leq L|x - \tilde{x}| \quad \forall x, \tilde{x} \in X = \mathbb{R}^d \quad (19)$$

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

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

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.)

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 $\dot{x} = f(x)$ EGYENLETRE²⁶, ha alkalmas $K = K(f) > 0$ konstanssal

$$|\Phi(h, x) - \phi(h, x)| \leq Kh^{p+1} \quad \forall h \in [0, h_0] \quad \forall x \in \mathbb{R}^d. \quad (20)$$

A diszkretizációs operátor iterálása a diszkretizációs/közelítő módszer maga²⁷

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

Rögzített $T > 0$ esetén a h^{p+1} -rendű (20) lokális hibabecslés a $[0, T]$ intervallumon h^p -rendű globális hibabecslést indukál, amely a T függvényében exponenciálisan gyorsan növekszik. Valóban, ha a (19) egyenlőtlenségben $L > 0$, akkor a lépésköz $h = \frac{T}{N} \leq h_0$ választása mellett

$$|\Phi(kh, x) - x_k| = |\Phi(kh, x) - \phi^k(h, x)| \leq \frac{K}{L} e^{Lkh} h^p \leq \frac{K}{L} e^{LT} h^p \quad \forall k = \overline{0, N} \quad \forall x \in \mathbb{R}^d. \quad (21)$$

A tényleges hiba a mindig érvényes (21) becslésnél általában jobb szokott lenni, különösen akkor, ha AZ ALKALMAZOTT NUMERIKUS MÓDSZERT A FELADAT BELSŐ TERMÉSZETÉNEK MEGFELELŐEN VÁLASZTJUK:

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

²⁶Természetesen 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 (18) 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 (18) differenciálegyenletben — és ennek következtében a (19)–(21) egyenlőtlenségek mindegyikében — az értelmezési tartományokat szűkíteniünk kell.

²⁷a 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 (19) 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 alaplódszer $1 \leq p \leq 5$ rendjét is. Az s betű a *stiff* (magyarul merev) szó kezdeti betűjére 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.

- 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:

$$\frac{d}{dt}E(x(t), y(t))|_{(PN)} = (E'_x \cdot \dot{x} + E'_y \cdot \dot{y})|_{(PN)} = V'(x) \cdot y + y \cdot (-V'(x)) = 0. \quad (22)$$

Ennél nehezebb igazolni, hogy a pontos megoldások dinamikájában a terület is változatlan marad: ez Liouville alábbi tételének speciális esete és a $\operatorname{div}(-\frac{y}{V'(x)})$ 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

$$\frac{d}{dt}\operatorname{mesh}(V(t)) = \int_{V(t)} \operatorname{div} \underline{f}(x) \, dx \quad \forall t \geq 0. \quad (23)$$

Bizonyítás: A bizonyítás amennyire váratlan és szellemes, annyira egyszerű és rövid is. Megérténünk 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 térfogatát $0 < h \ll 1$ esetén az integrálközelítő összegek lokális, “alapterület $\times$ magasság” elve szerint (mesh mint measure) felírva, majd az utolsó lépésben Gauss integrálatalakító tételét használva:

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

Átosztva a $h > 0$ paraméterrel, a $h \rightarrow 0^+$ határátmenetből Liouville nevezetes (23) 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 akkor 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:

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

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

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

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.²⁸

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 $V(x) = 1 - \cos(x)$. (Elvben 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

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, jöllehet a táblázat sokkoló jellegét részben a fázistér kétdimenziós volta okozza.²⁹

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 jócskán tartalmazó algoritmusok.

²⁸Kifejezetten ajánlom a <http://digitus.itk.ppke.hu/~garay/> tárhely ábrákkal gazdagon illusztrált *Numerikus Dinamika* című vetíthető előadását.

²⁹Ge és Marsden egy tétele szerint nem létezik olyan diszkretizációs eljárás, amely egyszerre lenne képes az energia és a terület mindegyikének pontos megőrzésére egy, a (PN) típusba tartozó általános feladat esetén.

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.³⁰ A hagyományosan, többtest-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.³¹ A pontos megoldások (22) 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 mehet³². 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 részcsoporthai 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) $\Phi(t, \Phi(s, x)) = \Phi(t + s, x) \quad \forall t, s \in \mathbb{T} \quad \forall x \in X$.

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 $h > 0$ *lépésközü (semi)dinamikus rendszer*.

Közönséges differenciálegyenlet alappéldák a természettudományokban

³⁰Ezek 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.

³¹A 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.

³²Ezen 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 (19) 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.

Két példa a villamosságтанból³³:

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

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

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

Két példa a mechanikából³⁴:

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

Egyetlen fontos példa a kémiából.³⁵

³³Az LRC-kör sorosan kapcsolt áramkörti 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 $L\ddot{Q} + R\dot{Q} + \frac{1}{C}Q = v(t)$ alakban is felírható. A van der Pol oszcillátor párhuzamosan kapcsolt áramkörti 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 $\ddot{x} - \mu(1 - x^2)\dot{x} + x = 0$ 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 $\ddot{x} + x = 0 \Leftrightarrow \dot{r} = 0$, $\dot{\phi} = -1$ 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.

³⁴Mindkét példa az $\underline{m}\underline{a} = \underline{F}$ 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 köté/rúd végére rögzített tömeg egy függőleges síkbeli körön mozog.)

³⁵a 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 $0 < \mu < 1$ paraméter-tartományban) részletes tárgyalásával: az aszimptotikusan stabil periodikus pálya a μ paramétert növelve Hopf-bifurkációval születik, és ugyancsak Hopf bifurkációval hal meg.

Két³⁶ példa a biológiából³⁷:

Lotka–Volterra

Hodgkin–Huxley

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= r_1 x_1 (1 + a_{11} x_1 + \dots + a_{14} x_4) & C_M \dot{V} &= -\overline{g_{cl}}(V - V_{Cl}) - \overline{g_{Na}} m^3 h (V - V_{Na}) - \overline{g_K} n^4 (V - V_K) \\ \dot{x}_2 &= r_2 x_2 (1 + a_{21} x_1 + \dots + a_{24} x_4) & \tau_m(V) \cdot \dot{m} &= m_\infty(V) - m \\ \dot{x}_3 &= r_3 x_3 (1 + a_{31} x_1 + \dots + a_{34} x_4) & \tau_h(V) \cdot \dot{h} &= h_\infty(V) - h \\ \dot{x}_4 &= r_4 x_4 (1 + a_{41} x_1 + \dots + a_{44} x_4) & \tau_n(V) \cdot \dot{n} &= n_\infty(V) - n \end{aligned}$$

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 $E(I, Q) = \frac{1}{2} L I^2 + \frac{1}{2C} Q^2$ (a tekercs mágneses mezőjének energiája plus a kondenzátoron tárolt energia — itt az $I = I_C = \dot{Q}_C = \dot{Q}$ összefüggésre is ügyelni kell), $E(\dot{x}, x) = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} k x^2$ (a mozgási plus a rugóban tárolt energia), $E(\dot{\theta}, \theta) = \frac{1}{2} m (\ell \dot{\theta})^2 + m g \ell (1 - \cos(\theta))$ (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.³⁸

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*.

³⁶természetesen csak mutatóba, az egyik a populációdinamikából és a másik az idegélettanból

³⁷Az 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 $r_i > 0$, $a_{ii} < 0$, $a_{ij} \leq 0$, $i, j = 1, 2, \dots, N$ választása mellett (az együtthatók ilyenén választása — versengő növényevők — garantálja, hogy a végtelen távoli pont taszít és hogy az $x_i \geq 0$ feltengelyek mindegyikén pontosan egy, az origótól különböző P_i egyensúlyi helyzet van) is sikerült kimutatni a káosz létezését. Káosz amúgy már az $N = 3$ esetben (egy ragadozó, két növényevő) is létezik, de az $N = 3$ választás mellett előforduló legfurcsább jelenség mégis inkább 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 legfontosabb típusait láttuk a félév folyamán, az $r_i, a_{ij} \leq 0$ választásokat is megengedve. Ez azonban messze nem a teljes karakterizáció — az $\dot{x} = x(-1+2x-y)$, $\dot{y} = y(-4+7x-3y)$ Cressman rendszer fázisportréjának felrajzolása még számítógép segítségével is nehéz feladat. 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.

³⁸Érdemes felemlíteni, hogy mind az $\dot{x} = x(-1+2x-y)$, $\dot{y} = y(-4+7x-3y)$ Cressman rendszer, mind az $\ddot{x} - \mu(1-x^2)\dot{x} + x = 0$ van der Pol oszcillátor (a $\mu \gg 1$ esetben), mind az $\dot{u} = \frac{1}{8} - u + u^2 v$, $\dot{v} = \mu - u^2 v$, $0 < \mu < 1$ Schnakenberg modell esetében a szokatlan viselkedés fő oka a POZITÍV VISSZACSATOLÁS. A van der Pol oszcillátorban (ha $\mu \gg 1$), csakúgy mint a Hodgkin–Huxley modellben és ez utóbbi számos általánosított/kiterjesztett és egyszerűsített változatában KÉTFÉLE IDŐSKÁLA is megjelenik.

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 teljesülésére³⁹:

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

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

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

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 megoldása⁴⁰ (amint azt lényegében már a 2-ik oldalon láttuk):

$$\left. \begin{aligned} u_t &= u_{xx} + f(t, x) \\ u(t, 0) &= u(t, \pi) = 0 \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow u(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-n^2 t} \sin(nx) + x(\pi - x), \quad c_1, c_2, \dots \in \mathbb{R}. \quad (24)$$

Ha a kezdeti feltétel $u(0, x) = g(x) = \sin^3(x) + x(\pi - x)$, akkor (24) 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 mutatja⁴¹.

³⁹A 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.

⁴⁰a 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)

⁴¹Ha a (24) 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 (18) 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 (18) 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.⁴²

Itt és most legyen elegendő számunkra a következő példa, ahol egy síkbeli nyeregpontra kimenő és bemenő trajektóriákat 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 $\mathbb{R} = \mathcal{Y}$ számegyenesen 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

⁴²Arról 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 kétdimenziós alosztályait 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 diszkrétizációs eljárások szinte mindegyike megőrzi a diszkrétizált 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 nagyoknak 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 (20) és a (21) 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 (11) 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.⁴³ 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

$$\|T(t_\ell)g_\ell - g\|_{L_2[0,\pi]} \rightarrow 0 \quad \text{ha} \quad \|g_\ell - g\|_{L_2[0,\pi]} \rightarrow 0 \quad \text{és} \quad t_\ell \rightarrow 0^+ \quad (25)$$

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 (25) bizonyítása a $g_\ell = g$ ($\ell = 1, 2, \dots$) speciális esetben: egy teljesen elemi, de nagyon szép és jellegzetes számolás⁴⁴.

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 (11) 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 (25) 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).

⁴³Ehhez 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 (11) képlethez hasonlóan, kapcsos zárójeles esetszétválasztással megadni.

⁴⁴Kiindulópontunk 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	ÖSSZEHASONLÍTÁS	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 segédegyszerű</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	$e^{-n^2 t} \sin(nx), n = 1, 2, \dots$
$x(t) = \sum_{k=1}^n c_k e^{\lambda_k t} \mathbf{s}_k$	általános megoldás 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	$\Delta_D = \Delta_D^T$
$\lambda_k \in \mathbb{R}, \mathbf{s}_k$	sajátérték, sajátvektor	$-n^2, \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(nx)$
$\mathbf{s}_k, k = 1, \dots, n$	teljes ortonormált rendszer	$\sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(nx), n = 1, 2, \dots$
$\mathbf{x} = \sum_{k=1}^n c_k \mathbf{s}_k$	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 szembetűnő 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.

A MINTÁZATKÉPZŐDÉS TURING FÉLE MECHANIZMUSA

Első hallásra ugyancsak meglepő, hogy az inhomogenitás homogén lineáris rendszerek megoldásaiban is megjelenik. Ennek a viselkedésnek első, egyébként teljesen spekulatív példáját Alan Turing (1912–1954) adta meg 1952-es, még sok esztendeig nem igazán megértett és nem is igazán értékelt *The chemical basis of morphogenesis* című cikkében. A jelenséget magát először egy konkrét példa végeredményeként mutatjuk be, és csak azután ismertetjük a (26)–(27) peremértékprobléma⁴⁵ általános megoldásának levezetését.

A változók szétválasztása módszer, amelynek skalár változatán a (2) és a (3) képletek levezetése is alapult, tehát a változók szétválasztása módszer vektoros alkalmazásával hosszadalmas, de mégsem nehéz számolás igazolja, hogy az

$$u'_x(t, 0) = u'_x(t, \pi) = 0 \quad , \quad v'_x(t, 0) = v'_x(t, \pi) = 0 \quad \text{ahol } t > 0 \quad (26)$$

Neumann féle homogén peremfeltétellel ellátott

$$u'_t = u''_{xx} + 4u + 2v \quad , \quad v'_t = 17v''_{xx} - 26u - 8v \quad \text{ahol } t > 0 \text{ és } x \in [0, \pi] \quad (27)$$

parciális differenciálegyenlet-rendszer általános megoldása Fourier sorfejtéssel

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = c_{1,1} e^t \cos(x) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} + \text{exponenciálisan lecsengő tagok} \quad , \quad c_{1,1} \in \mathbb{R} \quad (28)$$

alakú. Hogy mi ebben a mintázat? Csekély, de mégis ott van, éspedig a $c_{1,1} e^t \cos(x) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ főtagban, s annak is $\cos(x) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ részében. Leszámítva azokat a kezdeti feltételeket — pontosan meg fogjuk mondani, melyek ezek —, amelyekre $c_{1,1} = 0$, $u(t, x)$ és $v(t, x)$ előjele minden elég nagy $t > 0$ és minden, a $\frac{\pi}{2}$ ponthoz nem túl közeli $x \in [0, \pi]$ esetén ellentétes egymással, de az, hogy u vagy v előjele a pozitív, egyedül azon múlik, hogy $x \gtrless \frac{\pi}{2}$. A mintázat tehát az előjel, s ha $c_{1,1} \cos(x)$ ($c_{1,1} \neq 0$) helyett $c_{1,17} \cos(17x)$ ($c_{1,17} \neq 0$) állna, akkor a “sign pattern” mintázat sokkal gazdagabb, a zebra csíkozásához hasonló lenne. Turing természetesen jól tudta, hogy az e^t szorzótényező $t \gg 1$ esetén biológiaiag értelmetlen, a (27)–(26) modellt tehát csak viszonylag rövid időintervallumon definiálta. Igazából az

$$u'_t = \alpha^2 u''_{xx} + f(u, v, \mu) \quad , \quad v'_t = \beta^2 v''_{xx} + g(u, v, \mu) \quad (29)$$

⁴⁵Turing (27) helyett az $u'_t = u''_{xx} + 5u + 6v$, $v'_t = 4v''_{xx} - 6u - 7v$ egyenletrendszert vizsgálta, amely a főtagban $e^{t/2}$ aszimptotikát eredményezett

feladat érdekelte, az (u_0, v_0, μ) egyensúlyi helyzet kis környezetében — ott, ahol az $\begin{pmatrix} f(u, v, \mu) \\ g(u, v, \mu) \end{pmatrix}$ csatolás $\begin{pmatrix} f(u, v, \mu) \\ g(u, v, \mu) \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} a(\mu)u + b(\mu)v \\ c(\mu)u + d(\mu)v \end{pmatrix}$ linearizálása még jogosult, mert lokálisan nem változtatja meg a megoldások lényegi viselkedését. Itt $\mu \in \mathbb{R}$ bifurkációs paraméter, amely a μ_0 kritikus értéken balról jobbra áthaladva a (27)–(26) peremérték-feladat (u_0, v_0, μ) egyensúlyi helyzetének⁴⁶ stabil $\Rightarrow$ instabil változását idézi elő.

Megjegyzés: Mindez a kémia nyelvén is elmondható. Egydimenziós térváltozóval leginkább egy hosszú és vékony kémcsőben van dolgunk, amelyben reakció és diffúzió zajlik egyszerre, a reakcióban két anyagfajta vesz részt (ez a legegyszerűbb eset, a reakció által okozott hőmérséklet-változást elhanyagoljuk). A diffúzióhoz valamely oldat vagy gáz jelenléte szükséges. A reakció kémiai átalakulás, a fogyó és keletkező anyagok pedig diffúzióval terjednek. Ilyen folyamatokat a (29) szerkezetű parciális differenciálegyenlet-rendszerekkel szokás modellezni, ahol u és v az egyes anyagok koncentrációját jelölik, az $f(u, v, \mu)$ és a $g(u, v, \mu)$ úgynevezett reakció-tagok a kémiai kinetikából jönnek, $\mu \in \mathbb{R}$ pedig a bifurkációs paraméter. A térbeliséget nem figyelembe véve, a kémiai reakciót az $\dot{u} = f(u, v, \mu)$, $\dot{v} = g(u, v, \mu)$ kétszer kettes közösleges differenciálegyenlet-rendszer írja le. A folyamatok az $0 \leq u \ll 1$, $0 \leq v \ll 1$ koncentráció-tartományban zajlanak le. A $\mu \in \mathbb{R}$ paraméter egy enzim jelenlétét méri, szerepe a reakció szabályozása. A mintázatképződés akkor indul be, ha a μ paraméter egy kritikus μ_0 értéket meghalad.

Turing semmit nem ír a konkrét (bio)kémiáról, sőt még a zebrákat sem említi. Méltán híressé vált matematikai dolgozatát azzal a megjegyzéssel zárja, hogy az általa leírt mintázatképződés mechanizmusához hasonló differenciálódási és szabályozási folyamatok játszódhatnak le az egyedfejlődés során, az embrionális szakasz legelejétől kezdve.

És most jön a *konkrét (27)–(26) példa konkrét matematikája*. A (27) egyenletrendszert mátrixos formába írva

$$\begin{pmatrix} u_t \\ v_t \end{pmatrix} = \mathbf{A} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} + \mathbf{D} \begin{pmatrix} u_{xx} \\ v_{xx} \end{pmatrix}, \quad \text{ahol } \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ -26 & -8 \end{pmatrix} \text{ és } \mathbf{D} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 17 \end{pmatrix}$$

adódik. Először speciális, szorzat alakú $\begin{pmatrix} u(t, x) \\ v(t, x) \end{pmatrix} = T(t)X(x)\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$ megoldásokat keresünk.

Visszahelyettesítés a (27) egyenletbe, majd a $t > 0$ és az $x \in [0, \pi]$ változókat átosztással két külön oldalra gyűjtve

$$\frac{T'(t)}{T(t)} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = \mathbf{A} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} + \frac{X''(x)}{X(x)} \mathbf{D} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix},$$

következésképpen mind $\frac{T'(t)}{T(t)} = \sigma$, mind $\frac{X''(x)}{X(x)} = \lambda$ állandók. A Neumann-féle homogén (26) peremfeltételből $X'(0) = X'(\pi) = 0$. A λ sajátértékre és a hozzá tartozó $X = X_\lambda$ sajátfüggvényre tehát egy lineáris (állandó együtthatós, másodrendű homogén autonóm közösleges) differenciálegyenlet érvényes, amelyhez az $X'(0) = X'(\pi) = 0$ homogén peremértékek tartoznak. Így

$$X''(x) - \lambda X(x) = 0, \quad X'(0) = X'(\pi) = 0,$$

⁴⁶ az általánosság sérelme nélkül feltehetjük és fel is tesszük, hogy $f(0, 0, \mu) = g(0, 0, \mu) = 0$ és így $(u_0, v_0, \mu) = (0, 0, \mu) \in \mathbb{R}^3$ minden $\mu \in \mathbb{R}$ esetén

ahol a $\lambda \in \mathbb{R}$ állandó és az $X : [0, \pi] \rightarrow \mathbb{R}$ függvény egyaránt ismeretlen. Az általános

$$X(x) = \left. \begin{array}{ll} c_1 \cos(\omega x) + c_2 \sin(\omega x) & \text{ha } \lambda = -\omega^2 < 0 \\ c_1 x + c_2 & \text{ha } \lambda = 0 \\ c_1 \cosh(\omega x) + c_2 \sinh(\omega x) & \text{ha } \lambda = \omega^2 > 0 \end{array} \right\}$$

megoldás abban a speciális esetben tesz eleget az $X'(0) = X'(\pi) = 0$ peremfeltételnek⁴⁷, ha $\lambda = -k^2 \leq 0$, $k = 0, 1, 2, \dots$ és $c_2 = 0$, $c_1 \in \mathbb{R}$ pedig tetszőleges, szabad konstans.

A λ meghatározása után most jön a σ meghatározása:

$$\frac{T'(t)}{T(t)} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = \mathbf{A} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} - k^2 \mathbf{D} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \Leftrightarrow (A - k^2 \mathbf{D} - \sigma \mathbf{I}) \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2.$$

Ez is sajátérték-sajátvektor probléma, amely már nem a homogén Neumann peremfeltétellel ellátott $\Delta_N = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ differenciáloperátorra vonatkozik, hanem csak a $k = 0, 1, 2, \dots$ egészekkel sorszámozott kétszer kettes $A - k^2 \mathbf{D}$ mátrixokra. A két sajátértéket mostantól kezdve $\sigma = \sigma_{k,1}$ & $\sigma_{k,2}$ jelöli, a hozzájuk tartozó sajátvektorokat pedig $\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = \mathbf{s}_{k,1}$ & $\mathbf{s}_{k,2}$. A $\frac{T'(t)}{T(t)} = \sigma$ egyenletben tehát $\sigma = \sigma_{k,\ell}$ és így $T(t) = T_{k,\ell}(t) = e^{\sigma_{k,\ell} t}$, $\ell = 1, 2$.

Az eddigiek alapján az (27)–(26) feladat általános megoldását

$$\begin{pmatrix} u(t, x) \\ v(t, x) \end{pmatrix} = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\ell=1}^2 c_{k,\ell} e^{\sigma_{k,\ell} t} \cos(kx) \mathbf{s}_{k,\ell}$$

alakban kereshetjük, az $\begin{pmatrix} u(0,x) \\ v(0,x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g(x) \\ h(x) \end{pmatrix}$ kezdeti feltételhez tartozó megoldás pedig a mindkét koordinátájában klasszikus, a $[0, \pi]$ intervallumon cosinus-os Fourier sorfejtést kívánó

$$\begin{pmatrix} g(x) \\ h(x) \end{pmatrix} = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\ell=1}^2 c_{k,\ell} \cos(kx) \mathbf{s}_{k,\ell}$$

képletből⁴⁸ adódik. A (28) képlet⁴⁹ már magában foglalja, hogy $\text{Re } \sigma_{k,\ell} < 0$ ha $(k, \ell) \neq (1, 1)$ és $\sigma_{1,1} = -1$, $\mathbf{s}_{1,1} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$. Valóban, $\sigma_{0,1} = -2 + 4i$ és $\sigma_{0,2} = -2 - 4i$ ha $k = 0$, továbbá $\sigma_{1,1} = 1$, $\mathbf{s}_{1,1} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$, valamint $\sigma_{1,2} = -23$ ha $k = 1$. A $k \geq 2$ esetben már érdemes a k -t meghagyni paraméternek:

$$\begin{pmatrix} 4 - k^2 & 2 \\ -26 & -8 - 17k^2 \end{pmatrix} \Rightarrow T = -4 - 18k^2 < 0 \text{ és } D = 17k^4 - 76k^2 + 20 > 0, \text{ ha } k = 2, 3, \dots,$$

⁴⁷amint azzal a (3) képlet levezetése során már találkoztunk

⁴⁸azért nem minden ennyire egyszerű: a többszörös és a komplex sajátértékek külön “kezelést” kívánnak ...

⁴⁹az általános esetben $c_{1,1}$ és $c_{1,2}$ a

$$\begin{pmatrix} g_1 \\ h_1 \end{pmatrix} = c_{1,1} \mathbf{s}_{1,1} + c_{1,2} \mathbf{s}_{1,2} \text{ lineáris egyenletrendszerből számolható, ahol } g_1 = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi g(x) \cos(x) dx \text{ } h_1 = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi h(x) \cos(x) dx.$$

sőt $D < \frac{T^2}{4} \Leftrightarrow 17k^4 - 76k^2 + 20 < 81k^4 + 36k^2 + 4$ ha $k = 3, 4, \dots$. A nyom–determináns diagramról tanultak szerint a $k \geq 3$ esetben stabil fókusz, a $k = 2$ esetben stabil csomó az eredmény.

Tanulságos gyakorló feladat: Ábrázolja az $(A - \mu \mathbf{D})$ kétszer kettes mátrix $\lambda_{1,2}(\mu)$ sajátértékeinek változását a komplex számsíkon haladó egy–egy paraméteres görbe segítségével, legalább a μ paraméter $0 \leq \mu \leq 2$ értékeire.

Ha a reakció–tag nemlineáris, akkor a diffúzió sokkal bonyolultabb mintázatokot is okozhat. Ez a helyzet a már két ízben is említett Schnakenberg modell diffúziós, a $t > 0$, $0 \leq x \leq 100$ tartományon értelmezett és ott homogén Neumann peremfeltétellel ellátott

$$u'_t = u''_{xx} + 0.1 - u + u^2v \quad , \quad v'_t = 40v''_{xx} - 0.9 - u^2v$$

változatának esetében. (A kezdeti $\begin{pmatrix} u(0,x)=g(x) \\ v(0,x)=h(x) \end{pmatrix}$ állapotot az $\begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0.9 \end{pmatrix}$ egyensúlyi helyzet (ami egy, a $[0, 100]$ intervallumon értelmezett konstans függvény) kicsiny perturbáltjának szokás⁵⁰ választani. A $(t, x, u, v) \in \mathbb{R}^4$ változók együttes bemutatására nincs igazán jó lehetőség, de már a síkbeli színes ábrák között is vannak nagyon mutatósak, különösen akkor, ha a $0 \leq u, v \leq 1$ feltételhez sem ragaszkodunk. (Matematikai szempontból ez csak skálázás kérdése.)

DIAGONALIZÁLHATÓ MÁTRIXOK FÜGGVÉNYEI: Az $e^{\mathbf{A}t}$ 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 $\lambda_1, \dots$. Tehát

$$\mathbf{A}\mathbf{v}_1 = \lambda_1\mathbf{v}_1 \ \& \ \mathbf{A}\mathbf{v}_2 = \lambda_2\mathbf{v}_2 \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{A}(\mathbf{v}_1 \mid \mathbf{v}_2) = (\mathbf{v}_1 \mid \mathbf{v}_2) \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{A}\mathbf{M} = \mathbf{M}\mathbf{D}$$

$$\Leftrightarrow \quad \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{D}\mathbf{M}^{-1} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{pmatrix} \mathbf{w}_1^T \\ \mathbf{w}_2^T \end{pmatrix} \mathbf{A} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{w}_1^T \\ \mathbf{w}_2^T \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} \mathbf{w}_1^T \mathbf{A} = \lambda_1 \mathbf{w}_1^T \\ \mathbf{w}_2^T \mathbf{A} = \lambda_2 \mathbf{w}_2^T \end{cases}$$

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

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

Azt kaptuk, hogy az $e^{\mathbf{A}t}$ mátrix kiszámításához szükséges sorfejtést egyedül a $\mathbf{D}$ mátrix főátlójában lévő

⁵⁰PH.K.MAINI ET AL., Turing's modell for biological pattern formation and the robustness problem, *Interface Focus* **2**(2012), 487–496.

sajátértékekre szükséges elvégezni. Az eredmény⁵¹:

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

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.⁵²

Gráfokon értelmezett dinamikus rendszerek:

A részletes tárgyalást *Simonovits András (2010)* egy olyan diszkrét idejű példájával kezdjük, amelynek szerkezete a dinamika oldaláról a lehető legegyszerűbb: bizonyos természetes, matematikailag és közgazdaságilag egyaránt jól indokolható (vagy legalábbis megfelelően alátámasztható) feltevések esetén létezik egyetlen, homogén fixpont, amely egyúttal globális attraktor is.

AZ ADÓCSALÁS EGY ÁGENS–ALAPÚ MODELLE Adott egy irányítás nélküli $\mathcal{G}$ gráf, amelyben sem hurokélek, sem többszörös élek, sem izolált csúcsok nincsenek. A $\mathcal{G}$ gráf $V(\mathcal{G}) = \{1, 2, \dots, N\}$ csúcsai egy ország adófizetőit jelentik. Az i -edik csúcs fokszáma $d_i > 0$, az i -edik csúccsal szomszédos csúcsok halmaza $\mathcal{N}_i$ ($i = 1, 2, \dots, N$), amely tehát az i -edik adófizető ismerőseit — látni fogjuk, bizalmas ismerőseit — jelenti. Ebben az országban *egykulcsos adó* van, és az adó befizetése évente egyszer, önkéntes adóbevállás alapján történik. A matematikai egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy minden adófizető éves jövedelme egyformán egységnyi. Jelölje $0 < \theta < 1$ az *adókulcs* mértékét. A t -edik évben ($t = 0, 1, \dots$) az i -edik adófizető által bevallott jövedelem legyen $x_{i,t}$.

Az adófizetők azonban nem tisztelik a törvényt. *Feltéve, de meg nem engedve* a modell szerint nem vallják be teljes jövedelmüket: a feltételezés szerint mindenki úgy csal a rákövetkező évben, hogy a saját ismerősei által bevallott jövedelmek átlagát veszi alapul és az $x_{i,t+1}$ értékét egy kétváltozós *elégedettségi függvény* feltételes maximumhelyeként számolja ki. Az elégedettségi függvényt egyrészt *a nála maradó* $1 - \theta x_{i,t+1}$ *összeg nagysága*, másrészt *a várható büntetéstől való félelem* határozza meg: ez utóbbi egyenesen arányos mind *a bizalmas ismerősök által az előző évben bevallott $\bar{x}_{i,t}$ átlagos jövedelem*-mel, mind egy, az *adott országra jellemző $m > 0$ morális tényező*-vel. Az elégedettségi függvény definíciója — a

⁵¹Ugyanez 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.

⁵²Ha a (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.

közgazdászok szeretik a logaritmus függvényt⁵³:

$$\mathcal{U} : [0, 1] \times [0, 1] \rightarrow [0, 1] \quad , \quad (x, \bar{x}) \rightarrow \mathcal{U}(x, \bar{x}) = \ln(1 - \theta x) + m\bar{x}(x - \ln(x)) .$$

Az i -edik adófizető a $(t + 1)$ -edik évben bevallott jövedelmét a most már egyedül logikus

$$\bar{x}_{i,t} = \frac{1}{d_i} \sum_{j \in \mathcal{N}_i} x_{j,t} \quad , \quad i = 1, 2, \dots, N \quad , \quad t = 0, 1, 2, \dots$$

képlet és a szintén plauzibilis

$$x_{i,t+1} = F(\bar{x}_{i,t}) \quad , \quad \text{ahol} \quad F(\bar{x}) = \arg \max \mathcal{U}(\cdot, \bar{x}) \quad (30)$$

formula szerint számolja ki. Természetesen bizonyításra szorul, hogy a (30) formula valóban jóldefiniált. Ehhez pedig a magától értetődő $0 \leq x_{i,0} \leq 1$ ($i = 1, 2, \dots, N$) feltétel és az $\mathcal{U}(\cdot, \bar{x})$ függvény konkavitása a $[0, 1]$ intervallumon éppen elegendő⁵⁴.

A kapott diszkrét idejű dinamikus rendszer állapottere a $[0, 1]^N$ egységkocka, a dinamikát definiáló leképezés pedig

$$\mathcal{F} : [0, 1]^N \rightarrow [0, 1]^N \quad , \quad (\mathcal{F}(\mathbf{x}))_i = F\left(\frac{1}{d_i} \sum_{j \in \mathcal{N}_i} x_j\right) \quad , \quad i = 1, 2, \dots, N .$$

A dinamika annyiban van csak a $\mathcal{G}$ gráfon definiálva, hogy az i index (amely az egységkocka adott pontjához annak i -edik koordinátáját rendeli) a $\mathcal{G}$ gráf i -edik csúcsára utal.

Az $m > \theta$ feltétel mellett implicit deriválásokkal könnyű igazolni, hogy az $F : [0, 1] \rightarrow [0, 1]$ függvény kielégíti az $F'(0) = \frac{m}{\theta} > 1$, $F' > 0$, $F'' < 0$ egyenlőtlenségeket. Mivel $F(0) = 0$, az F függvénynek egyetlen $x^* > 0$ fixpontja van a $[0, 1]$ intervallum belsejében, és az is világos, hogy az $x^{\ell+1} = F(x^\ell)$, $\ell = 0, 1, 2, \dots$ iterációt bármely $0 \neq x^0 \in [0, 1]$ pontból indítva az $\ell \rightarrow \infty$ határátmenetben $x^\ell \rightarrow x^*$.

Ahhoz, hogy az $\mathbf{x}^* = (x^*, x^*, \dots, x^*) \in [0, 1]^N$ pont (amely nyilván az $\mathcal{F}$ leképezés fixpontja is egyben) az $[0, 1]^N \setminus \{\mathbf{0}\}$ halmazon globális attraktor legyen, még a $\mathcal{G}$ gráf egy speciális tulajdonságát is meg kell követelnünk. Az $\mathbf{0}$ origó maga is fixpont lévén, annak kizárása alapkövetelmény. Így mindenképpen elő kell írunk, hogy $\max_{1 \leq i \leq N} x_{i,0} > 0$ legyen (magyarán, hogy a nulladik évben legalább egy adófizető bármilyen kevés, de pozitív összegű adót fizessen be. Különben senki soha nem fog befizetni semmit.) De mit kell feltennünk a $\mathcal{G}$ gráfról? Ugyanazt, amit a Perron–Frobenius Tételben, mert ez biztosítja, hogy a nulladik évben pozitív összegű adót akár egyedülként befizető polgár hatása *térben és időben egyaránt jól keverve terjedjen szét* a gráf egészén⁵⁵. A remélt eredmény már az eddig számbavett feltételek következménye.

⁵³amik mellett ténylegesen érvelni lehet, azok az $\ln(1 - \theta x)$ és az $x - \ln(x)$ függvények monotonitási, konvexitási (mindkét függvény szigorúan konkáv a $[0, 1]$ intervallumon) és szingularitási tulajdonságai — és az is fontos szempont, hogy a modell egészéből levont következtetések közgazdaságilag elfogadhatóak legyenek

⁵⁴a számtani középképzés tulajdonságai közül azt a tényt kell kihasználnunk, hogy az átlag mindig a minimum és a maximum közé esik. Ez a tulajdonság az úgynevezett *középképző operátorokat definiáló axiómák* egyike. Bőven tanultunk annyi matematikát, hogy — legalább abban az esetben, amikor a középképzés véges sok valós számra vonatkozik — a többi axiómát is fel tudjuk sorolni . . .

⁵⁵Érdemes kipróbálni a körgráfok esetét, azzal a kezdő állapottal, hogy a nulladik évben csak egyetlen tényleges adóbefizetés történik. Attól függően, hogy a körgráf csúcsainak száma páros vagy páratlan, egészen máshogy alakul minden. Bármely páros gráffal is ugyanaz a probléma adódik, mint a páros csúcsszámú körgráfok bármelyikével.

TÉTEL: Tekintsük a (30) dinamikát a $\mathcal{G}$ gráfon, amelynek szomszédsági mátrixa legyen primitív mátrix. A kezdeti állapotra tett előírásunk legyen $\max_{1 \leq i \leq N} x_{i,0} > 0$. Tegyük fel továbbá azt is, hogy $m > \theta$.

Ekkor $\mathbf{x}^* = (x^*, x^*, \dots, x^*) \in [0, 1]^N$ az (30) dinamika aszimptotikusan stabil fixpontja, a $[0, 1]^N \setminus \{\mathbf{0}\}$ vonzási tartománnyal.

Bizonyítás: A $\mathcal{G}$ gráfra tett feltevés miatt van olyan $T \in \mathbb{N}$, hogy a $\mathcal{G}$ gráf bármely két csúcsa között létezik T hosszúságú út.

A kezdeti állapotra tett feltevés következtében $\min_{1 \leq i \leq N} x_{i,T} > 0$. Mivel a számtani közép mindig a minimum és a maximum közé esik, a nemlineáris F függvény pedig monoton növekvő,

$$F\left(\min_{1 \leq j \leq N} x_{j,T}\right) \leq x_{i,T+1} = F(\overline{x_{i,t}}) \leq F\left(\max_{1 \leq j \leq N} x_{j,T}\right), \quad i = 1, 2, \dots, N,$$

majd innen indukcióval, iteráltról iteráltra haladva

$$F^t\left(\min_{1 \leq j \leq N} x_{j,T}\right) \leq x_{i,T+t} \leq F^t\left(\max_{1 \leq j \leq N} x_{j,T}\right), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad t = 1, 2, 3, \dots$$

és $1 \leq i \leq N$ -ben a maximumot és a minimumot véve

$$F^t\left(\min_{1 \leq j \leq N} x_{j,T}\right) \leq \min_{1 \leq i \leq N} x_{i,T+t} \leq \max_{1 \leq i \leq N} x_{i,T+t} \leq F^t\left(\max_{1 \leq j \leq N} x_{j,T}\right), \quad t = 1, 2, 3, \dots$$

Most már csak a valós számsorozatok határértékére vonatkozó zsandár–pandúr–csendőr–rendőr elvre kell hivatkozni. $\square$

A modell jogosultsága melletti fontos érv, hogy a θ növelésével párhuzamosan az $x^* = x^*(\theta, m)$ értéke általában csökken, sőt az eddig jogosan kizárt $\theta = m$ esetben a teljesen abszurd $x^* = 0$ eredmény adódik. Sajnos ez tényleg így van: ha egy adott országban az adómorál alacsony szinten áll, akkor az adókulcs emelése nagyon nem tanácsos ... mert a ténylegesen befolyó adók csökkenésével szokott járni.

A modellel szembeni legkomolyabb érv az, hogy az $\mathcal{U}$ elégedettségi függvény és így a dinamikát végső soron meghatározó F függvény is adófizetőről adófizetőre, sőt az időben is változhat. És annyi minden más közgazdasági, szociológiai, történelmi sőt pszichológiai tényezőt is figyelembe lehetett volna még venni.

Ráadásul az adóhivatal nem megfigyelni szeretné ezt a folyamatot. Célja a közbeavatkozás. De hogy ezt miként tegye, arra nézve még az egyszerű, magukra hagyott „játék”-modellek is — Simonovits András modellje is ilyen — adnak bizonyos támpontokat.

VÉLETLEN GRÁFOKRÓL DIÓHÉJBAN: A véletlen gráfok három leggyakrabban tárgyalt típusa

- Erdős–Rényi gráfok (szokásos a Bernoulli gráfok elnevezés is)
- Strogatz–Watts gráfok (szokásos a kisvilág — smallworld — gráfok elnevezés is)
- Barabási–Albert gráfok (szokásos a skálafüggetlen — scalefree — gráfok elnevezés is)

Először azonban a skálafüggetlenség gráfelméleten kívüli jelentését vizsgáljuk meg.

Skálafüggetlenség: A legszűkebb, kizárólag *matematikusok által használt definíció:* egy $f : \mathbb{R} \setminus \{0\} \rightarrow \mathbb{R}$ folytonosan deriválható függvény skálafüggetlen, ha van olyan $g : \mathbb{R} \setminus \{0\} \rightarrow \mathbb{R}$ folytonos függvény, hogy

$$f(cx) = g(c)f(x) \quad \forall c, x > 0. \quad (31)$$

A (31) azonosság *függvényegyenlet*⁵⁶: olyan algebrai összefüggés, amely a változók minden megengedett értékeire teljesül, és amelyben az ismeretlen(ek) egy (vagy több) függvény.

Az (31) függvényegyenlet megoldásait könnyű kiszámolni. Ha $f(x_0) = 0$ valamely $x_0 > 0$ értékre, akkor a $c > 0$ változtatásával $f(x) \equiv 0$ adódik. Tehát a folytonosság miatt az összes többi esetben $f(x) > 0$ vagy $f(x) < 0$ minden $x > 0$ esetén. Az algebrai azonosságról egy differenciálegyenletre áttérve, szellemes de teljesen elemi lépések után $f(x) = k x^r$ adódik, ahol k és $r = \frac{f'(1)}{f(1)}$ valós paraméterek:

$$\begin{aligned} \frac{f(cx)}{f(x)} = g(c) &\Rightarrow \frac{f'(cx) c f(x) - f(cx) f'(x)}{f^2(x)} = 0 \Rightarrow f'(c) c f(1) - f(c) f'(1) = 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{f'(c) c}{f(c)} = \frac{f'(1)}{f(1)} &\Rightarrow \int \frac{f'(c)}{f(c)} dc = \int \frac{r}{c} dc \Rightarrow \ln(f) = r \ln(c) + \mathcal{C} \Rightarrow f(c) = k c^r. \end{aligned}$$

A c változó helyébe rendre x -et és cx -et írva, a (31) azonosság alapján $g(c) = c^r$ adódik.⁵⁷

A *hétköznap*i szóhasználatban a SKÁLAFÜGGETLENSÉG egy folytonos eloszlás f sűrűségfüggvényére utalva azt jelenti, hogy az $x \rightarrow \infty$ aszimptotikában $f(x) \approx a \frac{1}{x^m}$, ahol $a > 0$ és $m > 1$ állandók. (Látni fogjuk, ez a definíció a $P(\xi = k) \approx a \frac{1}{k^m}$ formula révén diszkrét eloszlásokra is kiterjeszthető.) A skálafügggetlenség csak az eloszlás aszimptotikájára vonatkozik: a sűrűségfüggvény aszimptotikája — a “power law” szabályt követve — legyen olyan, mint az $\frac{a}{x^m}$ hatványfüggvényé. Az $y = \frac{a}{x^m}$ függvénykapcsolat szokásos ábrája az $X = \log(x)$, $Y = \log(y)$ új változókban az $Y = -mX + \log(a)$ egyenes. A hatványfüggvény negatív kitevője tehát iránytangensként is értelmezhető.

A skálafügggetlen eloszlások prototípusa a *standard Cauchy eloszlás*, amelynek sűrűségfüggvénye

$$f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^+ \quad , \quad x \rightarrow f(x) = \frac{1}{\pi(1+x^2)} .$$

A várható érték a szokásos értelemben nem létezik, de az $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{x}{1+x^2} dx$ integrál Cauchy féle főértéke 0. A szórás létezése még ilyen gyengített értelemben sem menthető, a szórás nem definiált (ha valaki nagyon akarja, végtelenül nagy). A standard Cauchy eloszlásból affin helyettesítésekkel kapjuk a Cauchy eloszlások három-paraméteres családját.

A *kétparaméteres Pareto eloszlások* is skálafügggetlenek. Az $x_m > 0$ és $\alpha > 0$ paraméterű Pareto eloszlás sűrűségfüggvénye

$$f_{x_m, \alpha}(x) = \begin{cases} \alpha x_m^\alpha \frac{1}{x^{\alpha+1}} & \text{ha } x \geq x_m \\ 0 & \text{ha } x \leq x_m . \end{cases}$$

⁵⁶A leghíresebb a Cauchy féle $f(x+y) = f(x) + f(y) \quad \forall x, y \in \mathbb{R}$ függvényegyenlet, amelynek összes folytonos megoldása $f(x) = kx$ alakú, ahol a $k \in \mathbb{R}$ paraméter. Az $f(1) = 1$ normálás mellett a Cauchy féle függvényegyenlet egyetlen folytonos megoldása $f(x) = x$ (nem-folytonos megoldások is vannak bőséggel, de ezek egyike sem lesz (Lebesgue értelemben sem) mérhető függvény). Az elemi függvények szokásos azonosságainak illetve azonosságlistáinak mindegyike felfogható függvényegyenletként illetve függvényegyenlet-rendszerként is, amelynek — alkalmas regularitási/símasági és normálási feltételek esetén — egyetlen megoldása van, maga a kérdéses elemi függvény illetve függvénycsalád.

⁵⁷A skálafügggetlen elnevezés a lineáris $X = cx$, $Y = dy$ átskálázás olyan $y = f(x) \Leftrightarrow Y = F(X)$ lehetőségére utal, amikor $F \equiv f$ marad. Minden $c > 0$ esetén van olyan $d = g(c) > 0$, hogy $y = f(x) \Leftrightarrow Y = f(X)$. Ez pontosan azt jelenti, hogy a $g(c)f(x) = f(cx)$ formula azonosság az $x > 0$ (és a $c > 0$) valamennyi értékre: az átskálázás mit sem változtat az f függvényen.

A várható érték és a szórásnégyzet az $\alpha > 1$ illetve az $\alpha > 2$ esetekben lesz csak véges:

$$E(\xi_{x_m, \alpha}) = \frac{\alpha x_m}{\alpha - 1} \quad \text{és} \quad D^2(\xi_{x_m, \alpha}) = \frac{\alpha x_m^2}{(\alpha - 1)^2(\alpha - 2)}.$$

A Pareto eloszlás klasszikus interpretációja a jövedelmek eloszlása egy gazdaságban, ahol $x_m > 0$ a minimálbér és $\alpha > 1$ egy, az adott gazdaságra jellemző állandó. Pareto száz évvel ezelőtti nevezetes, híres-hírhedt 80–20 szabálya (mely szerint az összjövedelem 80 százaléka jut a lakosság leggazdagabb 20 százalékának) az $\alpha = \frac{\ln(5)}{\ln(4)} = 1.161\dots$ választásnak felel meg.⁵⁸

A skálafüggetlenség fogalma az elmúlt 20 évben két szempont miatt vált megkerülhetetlenül fontossá. Az egyik az, hogy a tapasztalat szerint az úgynevezett szociális gráfok nagy része — ilyen az internet is — skálafüggetlen. Barabási–Albert László és Albert Réka kutatásai úttörők voltak ezen a területen. A másik az, hogy a 2008-as gazdasági világválságot a pénzügyi matematika nem jelezte előre⁵⁹: olyasmi történt, aminek a korábbi sztochasztikus modellek szerint elhanyagolhatóan kicsi volt a valószínűsége. A nagyon kicsiny valószínűségű, de óriási hatásokat okozó jelenségekkel külön tudományág foglalkozik azóta, a *ritka jelenségek* tudománya. A Fukushimai Atomerőmű balesete is egyike volt a tipikus ritka jelenségeknek. A földrengés azonnal elszakította az elektromos távvezetéseket, de magában az erőműben nem okozott komoly károkat. De a tervezők nem gondoltak arra, hogy egy kivételesen erős cunami tönkretetheti az atomreaktor hűtési rendszerének mindkét (egymástól és a szokásos külső áramellátástól egyaránt független) tartalék áramfejlesztő egységének generátorait. Elég lett volna öt méterrel magasabbra helyezni őket, és akkor semmi baj nem történik.

Erdős–Rényi gráfok: Adva van n csúcspont és egy $0 < p < 1$ szám. Az n csúcspont között lehetséges $\binom{n}{2}$ él mindegyikét p valószínűséggel behúzzuk. Az így kapott $\mathcal{G}(n, p)$ gráf csúcsainak fokszámeloszlása a

$$P(\deg(v) = k) = \binom{n-1}{k} p^k (1-p)^{n-1-k}, \quad k = 0, 1, \dots, n-1$$

binomiális eloszlás, amely nagy n -re jól közelíthető a $\mathcal{N}(\mu, \sigma) = \mathcal{N}(np, \sqrt{np(1-p)})$ normális eloszlással. Az $np = \lambda > 0$, $n \rightarrow \infty$ határátmenetben a

$$P(\deg(v) = k) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^k}{k!}, \quad k = 0, 1, \dots$$

Poisson eloszlás a határérték.

Az Erdős–Rényi gráfokra jellemzőek a *határértékképzés kritikus konstansai*⁶⁰. Ezek a kritikus konstansok a gráf bizonyos vagy–vagy tulajdonságaival függenek össze, amelyek az egyes esetekben aszimptotikusan

⁵⁸ A jövedelem és a vagyon megoszlását sok más módon is szokás modellezni, többek között a lognormális eloszlással. (Jóllehet az ilyen sommás megállapítások mindig erősen vitathatók, egyes becslések szerint a Föld jelenlegi felnőtt lakosságának 69 százaléka az, amely az összvagyon 3 százalékát birtokolja, a legszegényebb 50 százaléknak pedig pontosan annyi vagyona van, mint a leggazdagabb 62 személynek.)

⁵⁹ A rossz nyelvek szerint nem kevés pénzügyi matematikus sejtette azt, ami végül is bekövetkezett, de a saját jól felfogott érdekében a “hallgatni arany” csendben maradást okosabbnak látta

⁶⁰ A határértékképzés kritikus konstansai gyakori szerephez jutnak bizonyos fizikai jelenségek — legyen ez most a fentről lefelé történő átszivárgás egy porózus közegen — sztochasztikus modellezésénél (más szóval a statisztikus fizikában): Tekintsük a

egy valószínűséggel teljesülnek. Hogy csak a legegyszerűbb példákat vegyük,

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{np}{\ln(n)} < 1 &\Rightarrow \mathcal{G}(n, p) \text{ nem összefüggő} \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{np}{\ln(n)} > 1 &\Rightarrow \mathcal{G}(n, p) \text{ összefüggő} \end{aligned}$$

és

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} np < 1 &\Rightarrow \mathcal{G}(n, p) \text{ maximális komponensének nagyságrendje } \text{const} \cdot \ln(n) \\ \lim_{n \rightarrow \infty} np > 1 &\Rightarrow \mathcal{G}(n, p) \text{ -ben pontosan egy óriás-komponens van, } \text{const} \cdot n \text{ nagyságrenddel.} \end{aligned}$$

*Strogatz–Watts gráfok*⁶¹: a Watts–Strogatz konstrukció az n csúcsú d -reguláris körgráfból indul ki, amelynek $\frac{nd}{2}$ számú éle van. (Itt $2 \leq d < 2n$ szükségképpen páros szám: a d -reguláris körgráfot a hagyományos körgráfból kiindulva úgy kapjuk meg, hogy minden egyes csúcsot a tőle jobbra és balra $\leq \frac{d}{2}$ hosszúságú úttal elérhető többi csúccsal is közvetlen éllel kötjük össze. A gyakorlatban szokásos paraméter-választás $1 \ll \ln(n) \ll d \ll 2n$.) Körbemenve a $V_1, V_2, \dots, V_n$ csúcsokon, a V_i csúcstól “hátrafelé” “induló” (V_j, V_i) élek mindegyikét $0 \leq \beta \leq 1$ valószínűséggel kicseréljük egy akkor-éppen-nem-élre, amelynek egyik végpontja a V_i csúcs marad (az akkor-éppen-nem-élek közül az egyenletes eloszlás szerint válogatva). Így az eredeti d -reguláris körgráf minden egyes élére pontosan egyszer kerül sor, és a konstrukció mindvégig kizárja többszörös vagy hurokélek létrejöttét. A $\beta = 0$ esetben az eredeti d -reguláris körgráf változatlan marad, a $\beta = 1$ esetben pedig egy $\mathcal{G}(n, p)$ Erdős–Rényi gráfot kapunk, ahol — hiszen az élek száma nem változott — $p = \frac{nd}{2} / \binom{n}{2}$. A β interpolációs paraméter szokásos választása egyébként $0 < \beta \ll 1$.

Barabási–Albert gráfok: a Barabási–Albert konstrukció kiindulópontja bármely n_0 csúcspontú $\mathcal{G}_{n_0}$ (szokás szerint összefüggő) gráf lehet, amelyhez lépésenként mindig egy új csúcspontot veszünk hozzá. Az új csúcspontot és a már korábban meglévő csúcspontokat rendre $0 < m \leq n_0$ számú éllel kötjük össze, a párhuzamos és a hurokéleket most is kizárva. Az új élek behúzása azonban nem egymástól független véletlenek szerint történik, hanem preferenciákat, a régi csúcspontok tudatos súlyozását követi. Az $n_0 + i + 1$ -ik ($i = 0, 1, \dots$) új csúcspontnak a j -edik ($j = 1, 2, \dots, n_0 + i$) csúcsponttal való összekötése annál valószínűbb, minél nagyobb a j -edik csúcspont aktuális fokszáma. A Barabási–Albert preferenciaszabály szerint

$$(n_0 + i + 1, j) \in E(\mathcal{G}_{n_0+i+1}) \text{ valószínűsége egyenesen arányos } \frac{\deg(j)}{\sum_{1 \leq k \leq n_0+1} \deg(k)} \text{ -val.}$$

Matematikailag bizonyított eredmény, hogy az $i \rightarrow \infty$ határátmenetben az egyre növekvő gráf aszimptotikus fokszámeloszlása a

$$P(\deg(v) = k) \approx \frac{\text{const}(m)}{k^3}, \quad k \gg n_0 \quad (32)$$

$\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}$ rácsgráfot, majd egymástól függetlenül, azonos $0 < p < 1$ valószínűséggel töröljük annak minden egyes élet. A kérdés az, van-e az így meghatározott síkgráf komplementerhalmazában olyan folytonos görbe, amely a “végtelen magasságot a végtelen mélységgel” köti össze, abban az értelemben, hogy sem az északi, sem a déli irányban nem korlátos. A válasz a következő: ha $p > \frac{1}{2}$, akkor egy valószínűséggel létezik ilyen görbe, ha viszont $p < \frac{1}{2}$, akkor egy valószínűséggel nem létezik.

⁶¹ a “kisvilág” véletlen gráfok konstrukciójának klasszikus példája: “nagyvilág” gráfra a rácsgráfok a legjobb példa — természetesen egy rácsgráf soha nem lehet véletlen, és struktúrája szerint egy celluláris automata cellarendszerével azonosítható, a rajta definiált dinamika azonban nagyon is lehet sztochasztikus

szabályt követi. Ez a valószínűség jóval nagyobb, mint az Erdős–Rényi gráfokkal kapcsolatban is tárgyalt Poisson eloszlás esetében, ahol is a nagyon nagy fokszámú csúcspontok valószínűsége exponenciálisan kicsiny. Utóbbi megállapítás a Strogatz–Watts gráfokra is érvényes: a nagyon nagy fokszámú csúcspontok valószínűsége exponenciálisan kicsiny. A Barabási–Albert konstrukció és preferenciaszabály — amelynek több évtizeddel korábban is voltak sporadikus előzményei — arra ad példát, hogy *egy ritka esemény* bekövetkezésének valószínűsége a vágyottnál vagy a rettegettnél sokkal–sokkal nagyobb is lehet. A már említett szociális gráfokra a (32) képlet $\gamma = 3$ kitevője (ami a k exponense az ottani nevezőben) helyett a $2 < \gamma < 3$ kitevő a jellemző.

A $0 < \beta < 1$ esetben a Strogatz–Watts gráfok szerkezete minden tapasztalat, rengeteg szimuláció és nem kevés egzakt matematikai eredmény szerint is erősen különbözik mind az Erdős–Rényi, mind a Barabási–Albert gráfok szerkezetétől.

Két adott *gráf* (lett legyen irányított vagy irányítatlan) szerkezetének egymáshoz közeli voltát a legfontosabb *szerkezeti indikátorok/paraméterek* összehasonlítása révén állapíthatjuk meg. A szerkezeti paraméterek matematikailag pontosan definiált mennyiségek (ami nem azt jelenti, hogy meghatározásuk esetenként ne lehetne NP-teljes feladat), de maga a “a szerkezet” és két gráf szerkezetének “közelsége” erősen intuitív fogalom–alkotások (egyre szaporodó serege, egymással gyakorta polemizáló szempontrendszerekkel). Ez nagyon eleven kutatási terület, különösen nagyméretű (és nem is mindig pontosan ismert) gráfok elemzése és a számítógépes adatgyűjtés szempontjából. A legnehezebb kérdések egyike, hogy az élet-tudományokban felmerült (és jól–rosszul megtalált) gráfok szerkezete milyen előnyökkel jár az evolúció szempontjából. Itt fontos megjegyeznünk, hogy a gén regulációs, fehérje interakciós gráfok, csakúgy mint a sejt–anyagcsere hálózatok jelentős részének foksámeloszlása a Barabási–Albert gráfok kapcsán megismert $P(\deg(v) = k) \approx \text{const} \frac{1}{k^\gamma}$ szabályt követi.

A legtöbbet vizsgált, legfontosabb gráfparaméterek, szerkezeti indikátorok az alábbiak:

- a csúcspontok (aszimptotikus) foksámeloszlása,
- a két csúcspont közötti átlagos úthossz⁶²,
- a klaszterezettség egymással rokon típusainak⁶³ mértéke.

⁶²A “kisvilág gráf” elnevezést a kifejezés legáltalánosabb jelentése szerint azokra a gráfokra szokás használni, amelyekben ez az átlagos úthossz nagyon kicsiny — az ilyen gráfok talán leggyakrabban emlegetett példája a ma élő emberek közötti személyes ismeretség gráfja, ahol az átlagos úthossz hat vagy hét körül lehet. (Ezt a kicsiny átlagos úthosszt alapvetően az teszi lehetővé, hogy vannak emberek, akiknek számos ismerőse van még az egymástól távoli országokban, földrészekben is.) Érdemes megemlíteni, hogy az ismeretségi gráf klaszterezettsége magas szintű. Ez a két tulajdonság az emberi társadalom globális és lokális jellegének egyenkénti és együttes fontosságára utal.

⁶³Adott — irányítatlan, párhuzamos és hurokélek nélküli — gráf klaszterezettségének legegyszerűbb típusa a *háromszögek számának a cseresznyék számához viszonyított aránya*, amelyet lokálisan (a $\mathcal{G}$ gráf i -edik csúcspontjára [amennyiben $d_i \geq 2$] a $\#\{(j, k) \in E(\mathcal{G}) \mid j, k \in \mathcal{N}_i\} \cdot \frac{1}{d_i(d_i-1)}$ képlettel) is és globálisan (egyszerre az egész gráfra) is lehet definiálni. (Hogy mi a háromszög, az magától értetődik: egy három csúcsponttal bíró teljes részgráf. A cseresznye pedig egy majdnem–háromszög részgráf (három csúcsponttal, és két éllel). A klaszterezettség fenti lokális definíciójában az adott csúcspont-hoz csak azok a cseresznyék tartoznak, amelyekben ez a csúcspont a kettő foksámú.) Világos, hogy egy háromszög három cseresznyéből áll. A számos rokon fogalomalkotás egyike: *egy gráf adott ℓ csúcspontja* (például $\{i\} \cup \mathcal{N}_i$, ahol $\ell = d_i + 1$) által *kifeszített részgráfjának klaszterezettsége* az adott részgráf éleinek száma osztva $\binom{\ell}{2}$ -vel, ami az ℓ csúcspontú teljes gráf éleinek a száma. — Súlyozott rácsgráfok klaszterezése valamint színes vagy szürkeárnyalatos képek szegmentálása egymással rokon feladatok.

A szerkezeti indikátorok közé szokás sorolni

- a gráfhoz rendelt mátrix(ok), például az adjacencia vagy a bolyongási mátrix spektrumát

is, jóllehet az algebrai gráfelmélet az alkalmazott tudományokban mintha kevesebb szerepet játszana⁶⁴.

A LEGEGYSZERŰBB *SIR modell*, S A JÁRVÁNYTERJEDÉSI MODELLEK FŐ SZEMPONTJAI: Először a Kermack–McKendrick közönséges differenciálegyenlet modellt ismertetjük, amely az $\mathbb{R}^3$ tér $A = \text{col}(1, 0, 0)$, $B = \text{col}(0, 1, 0)$, $C = \text{col}(0, 0, 1)$ csúcspontok által meghatározott szabályos $\mathcal{H}$ háromszögén van értelmezve. A tengelyek és a modell változói az I , az R és az S , amelyek rendre az *infected* fertőzött, *recovered* gyógyult, *susceptible* fertőzhető szavak kezdőbetűire utalnak. A betegség lefolyásának megfelelő sorrend a SIR volna —a fertőzés az egészséges egyedet beteggé teszi, majd a betegség lezajlása után az egyed meggyógyul, és az adott betegségre immunissá válik—, de az IRS sorrend könnyebb geometriai szemléltetést tesz lehetővé: az I , R , S tengelyek rendre az x , y , z tengelyeknek felelnek meg. Az egyenletrendszer a következő:

$$\dot{I} = \tau SI - I, \quad \dot{R} = I, \quad \dot{S} = -\tau SI, \quad \text{ahol } I + R + S = 1 \text{ és } I, R, S \geq 0. \quad (33)$$

A tényleges modell természetesen $\dot{I} = rSI - \rho I$, $\dot{R} = \rho I$, $\dot{S} = -rSI$, ahol mind a populáció $S + I + R = M = \text{const}$ össztömegét, mind a $\rho > 0$ felgyógyulási rátát (előbbit az össztömeg, utóbbit az idő átskálázásával) már előzetesen 1-nek választottuk. Így egyetlen paraméter maradt, az r fertőzési/megbetegedési ráta, amely τ -vá transzformálódott. A (33) rendszerben már $\tau > 0$ jelenti a fertőzési/megbetegedési rátát. A középső egyenlet jobb oldala — a Lotka–Volterra modellekkel ellentétben — nem $Rh(I, R, S)$ szerkezetű: a trajektóriák a biológiailag egyedül értelmes $\mathcal{H}$ háromszögbe az AC szakasz belső pontjain át léphetnek be, de utána a $\mathcal{H}$ háromszögben kell maradniuk. Az AB szakasz az A és a B egyensúlyi helyzeteket valamint egy $A \rightarrow B$ trajektóriát tartalmaz. A BC szakasz csupa egyensúlyi helyzetből áll: $I = 0$ és $R + S = 1$, $0 \leq R, S \leq 1$. Mindezek a tulajdonságok azonnal észrevehetők a (33) rendszer konkrét alakjának vizsgálatából. Vegyük észre azt is, hogy a felsorolt tulajdonságok többsége (és köztük az $I + R + S = 1$ tömegmegmaradási törvény) teljesül mind az explicit, mind az implicit Euler módszer szerinti diszkrétizáltakra.

Az esetleges járvány az $I(0) = \varepsilon$, $R(0) = 0$, $S(0) = 1 - \varepsilon$ kezdeti feltételekből kell hogy kiinduljon, ahol $0 < \varepsilon \ll 1$. Mivel a járvány indulásakor a betegek $I(t)$ aránya növekedni szokott, a (33) rendszer első egyenletébe $t = 0$ -t helyettesítve $\dot{I}(0) = (\tau S(0) - 1) \cdot I(0) = (\tau(1 - \varepsilon) - 1)\varepsilon \geq 0$ szerint $\tau > 1$ adódik.

Sajnos a tényleges megoldásgörbék nem lehet zárt alakban meghatározni. Amire pontos képletünk van, azok a

$$\frac{dS}{dR} = -\tau S \quad \Rightarrow \quad \frac{dS}{S} = -\tau dR \quad \Rightarrow \quad \ln(S) = -\tau R + c \quad \Rightarrow \quad S = ke^{-\tau R}. \quad (34)$$

levezetés szerint a megoldásgörbék vetületei az $R - S$ síkon (amelyből csak az $I = 0$, $R + S \leq 1$, $R, S \geq 0$ $\mathcal{L}$ háromszög lemez számít): exponenciális lefutás, ahol $k \geq 0$ paraméter. A kérdéses $\mathcal{L}$ háromszög lemez

⁶⁴A gráfok szerkezete villamosmérnöki kísérletek számára is hozzáférhető. A gráfot építsük meg elektromos hálózatként és legyen minden él ellenállása 1 Ohm. Ezután kapcsoljunk 100 Volt egyenfeszültség(–különbség)et a hálózat két csomópontjára, és nézzük meg, mennyit esik a feszültség az egyes élek mentén. Intuitíve világos, hogy azok az élek, amelyeken a feszültségesések a legnagyobbak, más szerepet játszanak a két csomópont közti vágásokban, mint azok az élek, amelyeken a feszültségesések nagyságrendekkel kisebb. — Adott gráfon értelmezett bolyongások szimulációs vizsgálata is a gráf vágásairól, illetve erősebben összefüggő részéről — ezek azok a részgráfok, amelyekből a bolyongás csak nehezen akar kivezetni — nyújt felvilágosítást.

határát, annak átfogójában, $\tau \leq 1$ esetén a $k < 1$ paraméterű exponenciális görbék egy-egy pontban metszik. Visszavetítve ezt a geometriát a $\mathcal{H}$ háromszögre, arra következtethetünk, hogy az AC szakasz $P_\varepsilon = \text{col}(\varepsilon, 0, 1 - \varepsilon)$, $0 < \varepsilon \ll 1$ pontján átmenő trajektória $\tau \leq 1$ esetén a C ponttól nem távolodik el túlságosan: a járványmentes C egyensúlyi helyzet stabil, a járvány elmarad.

Ha azonban $\tau > 1$, akkor a P_ε ponton átmenő trajektóriát — legyen az $\varepsilon > 0$ bármilyen kicsi is — a $k = 1$ paraméterű $S = e^{-\tau R}$ exponenciális görbe (amelyik az $\mathcal{L}$ háromszöglemezbe a C ponton át belépve onnan egy $D = \text{col}(0, R^*, S^*)$ ponton át távozik⁶⁵) arra kényszeríti⁶⁶, hogy $t \rightarrow \infty$ esetén egy, a BD szakasz belsejében lévő Q_ε egyensúlyi helyzethez tartson, ahol $\varepsilon \rightarrow 0^+$ mellett $Q_\varepsilon \rightarrow D$. A járvány a $\lim_{t \rightarrow \infty} I(t) = 0$ határátmenetben anélkül szűnik meg, hogy a populáció egésze megfertőződött volna: a populáció $S^* > 0$ része mindvégig egészséges maradt. Az $S^* > 0$ járványküszöb létezése és nagysága nemtriviális matematikai eredmények.⁶⁷ A (33) rendszer trajektóriái a $\mathcal{H}$ háromszöglemezt egyrétűen borítják be, s eközben az AC szakasz pontjait — a $t \rightarrow \infty$ határátmenetben — a BD szakasz pontjaiba viszik, a DC szakasz pontjait pedig (egyetlen “középső” pont kivételével) páronként egymásnak feleltetik meg.⁶⁸

A (33) modell dinamikájáról — akár számítógéppel, akár (a fenti gondolatmenetet szemléltetéseként) kézzel rajzolva — ábrákat készíteni roppant tanulságos és hálás feladat.

Azoknak a betegségeknek egy szokásos modellje, amelyeket egymás után többször is meg lehet kapni, a (legegyszerűbb) SIS modell: $\dot{S} = -rSI + \sigma I$, $\dot{I} = rSI - \sigma I$ — itt $S + I = \text{const}$, de az általánosság megszorítása nélkül feltehető, hogy $I + S = 1$ és $\sigma = 1$. Az $r = \tau \gtrless 1$ esetszétválasztás a SIS modell vizsgálatában is lényeges szerepet játszik.

A klasszikus, (33) képletszámmal jelzett SIR modellnek rengeteg általánosítása van. Már az $R = \text{removed}$ (with or without immunity) szóhasználat is másfajta interpretációkat tesz lehetővé. Ezenkívül figyelembe lehet venni a betegség lappangási idejét, a nem és az életkor szerinti különbözőségeket, születéseket és halálokat, szezonális hatásokat, a térbeli-földrajzi terjedést, sőt az emberi beavatkozásokat (oltások, karanténba helyezés) is: a folytonos idejű determinisztikus modelleket késleltetett, közönséges, integrál és parciális egyenletek írják le. Az általánosításokat itt és most — sem a főszövegben, sem a lábjegyzetekben — nem részletezzük, csupán néhány rövid megjegyzésre szorítkozunk. Az általánosítások fajtái, típusai, irányai nagyjában-egészében most is ugyanazok, mint amiket a *kétdimenziós Lotka–Volterra* (16) rendszer esetében több oldalon át tárgyaltunk a Nemlineáris Dinamika jegyzet⁶⁹ 3.8 fejezetében.

Minden folytonos idejű modellnek létezik diszkrét idejű és sztochasztikus változata is, amelyekben a véletlenek bizonyos eloszlások szerint valósulnak meg.

Mostanában nagy keletje van a nagyméretű hálózatokon értelmezett olyan sztochasztikus modelleknek,

⁶⁵az exponenciális görbe konvex lévén, a BC szakaszt még egy, a C és a B közötti D pontban metszi

⁶⁶ennek bizonyításához az is kell, hogy a (33) rendszer utolsó két egyenlete szerint $R(t)$ szigorúan monoton növekszik, $S(t)$ pedig szigorúan monoton csökken

⁶⁷Sok tapasztalat szól amellett, hogy a SIR modell ebből a szempontból is jó közelítést adja a valóságnak. Nem szokott mindenki minden járványban megbetegedni. Nagyon érdemes egy pillantást vetni a Wikipedia EPIDEMIC MODEL, BLACK DEATH, PESTIS szócikkeire (utóbbi kettőben a középkor sok szempontból lezáró, az össz-európai népesség harmadát elpusztító 1348-as pestisjárvány térképeivel, valamint a járvány képzőművészeti ábrázolásaival).

⁶⁸Az R függvényében (34) miatt az I változó is kifejezhető: $I(R) = 1 - R - ke^{-\tau R}$, ahol $k \rightarrow 1^- \Leftrightarrow \varepsilon \rightarrow 0^+$. Az R és a t közötti függvénykapcsolat monotonitását is használva ebből már könnyű levezetni, hogy $I(t)$ egy darabig szigorúan monoton növekszik, azután szigorúan monoton csökkenve tart a 0-hoz, maximumának értéke pedig $I_{\max} = 1 - \frac{\ln(\tau)+1}{\tau}$, ha $\tau > 1$.

⁶⁹http://digit.us.itk.ppke.hu/~garay/NDS_jegyzet/

amelyek a klasszikus, “leátlagolt” (33) SIR modell “bármely két egyed találkozása egyformán valószínű” és “minden egyes beteg–egészséges találkozáskor a betegség átadásának valószínűsége is egyforma” implicit előfeltevésének tagadásából indulnak ki. A hálózat/gráf csúcsai az egyedeknek, állandó vagy sztochasztikusan változó élei pedig az egyedek találkozásainak felelnek meg. A legmarkánsabb, hosszú ideig tartó mintázatok — például lassan mozgó frontok, utazó hullámok — a rácsgráfok által hordozott dinamikus rendszereknek is tekinthető celluláris automatákban érhetők tetten a legközvetlenebbül. A *gráfok szerkezete* és a rajtuk megvalósuló *dinamikus rendszerek mintázatainak jellege* közötti kapcsolatok felderítése a számítógépes kísérletezések hálás terepe.

Az óvatosság mégis helyénvaló: a valóság sokkal bonyolultabb. Jobban körülhatárolt, kevésbé általános, matematikailag is keményebb modellekre van szükség, amikor a matematika abban segít, hogy a konkrétumról tudjunk meg többet, kvantitatíve és kvalitatíve egyaránt. Mérési adatok alapján specializálni sokszor nehezebb és sokkalta érdekesebb, mint általánosítani.