

A DIFFÚZIÓ MATEMATIKAI MODELLJEI

BSc szakdolgozat

Írta: Tóth Beáta

Matematika BSc - alkalmazott matematikus szakirány

Témavezető:

Izsák Ferenc, adjunktus

Alkalmazott Analízis és Számításmatematikai Tanszék
Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

2012

Köszönetnyilvánítás

Ezúton szeretném megköszönni Izsák Ferencnek, hogy elvállalta a konzulensi teendőket. Köszönöm, hogy a konzultációk során türelmével, tudásával és szakmai tapasztalatával nagymértékben segítette munkámat, és irányított a szakdolgozat felépítésének megalkotásában.

Előszó

A dolgozat megírása során [2] könyv 4.3 fejezetét dolgoztam fel, ami a Robin-peremfeltétellel foglalkozik egy dimenzióban, a sajátértékek vizsgálatán keresztül. Ezt több helyen kiegészítettem, magyarázatokkal láttam el, az eredményeket értelmeztem, kiegészítettem a kétdimenziós eset vizsgálatával. Az ott szereplő eredményekre ezért minden külön jelzés nélkül hivatkozom.

Az első fejezetben egy általános bevezető szerepel a diffúzió jelenségéről. A második fejezetben le van vezetve a hővezetési egyenlet, a lehetséges peremfeltételekkel együtt. A harmadik fejezet foglalkozik részletesen a Robin-peremfeltétel esetével.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	1
1.1. A diffúzió előfordulása fizikai, kémiai és biológiai rendszerekben	1
1.2. A diffúzió jelensége	2
2. A standard diffúzió	3
2.1. A hővezetési egyenlet	4
2.2. Mellékfeltételek	4
3. A Robin-peremfeltétel	6
3.1. Sajátérték-feladatok vizsgálata	6
3.1.1. A Fourier-módszer	7
3.1.2. Sajátérték-feladatok vizsgálata egy dimenzióban	8
3.1.3. Sajátérték-feladatok vizsgálata két dimenzióban	17
Irodalomjegyzék	23

Ábrák jegyzéke

3.1. A (3.8)-ban szereplő függvények grafikonjai és a sajátértékek $a_0, a_l > 0$ esetén.	11
3.2. A (3.8)-ban szereplő függvények grafikonjai és a sajátértékek $a_0 < 0, a_l > 0, a_0 + a_l > 0$ esetén.	12
3.3. A (3.8)-ban szereplő függvények grafikonjai és a sajátértékek $a_0 < 0, a_l > 0, a_0 + a_l > 0$ esetén.	13
3.4. A (3.8)-ban szereplő függvények grafikonjai különféle értékű a_0, a_1 konstansok esetén.	15
3.5. Az $\Omega = (0, \pi) \times (0, \pi)$ tartomány a kifelé mutató normálisokkal	18

1. fejezet

Bevezetés

1.1. A diffúzió előfordulása fizikai, kémiai és biológiai rendszerekben

A diffúziónak számos kémiai, fizikai és biológiai folyamatban fontos szerepe van. Ezekből sorolunk fel néhányat:

- A különböző fázisfelületek átmeneteinél a folyamatok sebességét a diffúzió sebessége határozza meg. Ha a folyamatokat gyorsítani akarjuk, akkor elsősorban a diffúzió sebességének növeléséről kell gondoskodnunk, [5].
- A diffúzió jelentős szerepet játszik a félvezető eszközök gyártástechnológiájában. Az adalékanyagokat a félvezető kristályba gyakran diffúzió segítségével viszik be, [4].
- Bár a diffúzió a koncentráció különbségek kiegyenlítésére, az eredetileg többé-kevésbé elkülönült anyagok összekeverésére irányul, mégis megfelelő berendezésben a diffúziót gázelegyek szétválasztására, koncentráció különbségek létrehozására (dúsításra) is fel lehet használni, [5].
- Diffúzióval lép be az oxigén a tüdő légteréből a hajszálerekbe, illetve diffúzió juttatja be a nátriumionok nagy mennyiségét az idegsejtbe az ingerületi állapot kezdetén, [3].

1.2. A diffúzió jelensége

A jelenség leírásához képzeljünk el egy egyenes csövet, amelyet egy mozdulatlan folyadék és egy kémiai anyag tölt meg, mondjuk egy festék, amely terjed a folyadékban. A standard diffúzió a következő törvénnyel jellemezhető. A festék a magasabb koncentrációjú helyekről az alacsonyabb koncentrációjú helyekre áramlik. A mozgás sebessége a diffúziós együtthatóval arányos. (Ez Fick törvényeként ismert). Ennek dinamikáját akarjuk valamilyen egyenlettel leírni.

A diffúzió jelenségével több mennyiség vizsgálata során is találkozunk:

- **Hőmennyiség:** ha egy rendszeren belül a hőmérséklet pontról pontra nem azonos, akkor olyan folyamat indul el, hogy a hőmérséklet kiegyenlítődjék. Hő áramlik a nagyobb hőmérsékletű helyről a kisebb felé. Ez a hővezetés.
- **Anyagmennyiség (koncentráció, populáció sűrűsége):** Ha egy többkomponensű rendszeren belül valamely komponens koncentrációja nem egyenletes, akkor külső hatás nélkül is olyan folyamat indul el, hogy a koncentráció kiegyenlítődjék. Anyagi részecskék áramlanak a nagyobb koncentrációjú helyről a kisebb felé. Diffúzióon gyakran ezt a jelenséget értik.
- **Potenciál - töltésmennyiség:** Ha elektromos töltéssel rendelkező rendszerben (ionokat tartalmazó rendszer) az elektromos potenciál nem azonos, akkor a töltéssel rendelkező részecskék a térerőtől és töltésük minőségétől függően meghatározott irányba mozdulnak el, a töltés kiegyenlítődik. Ennek nyomán jön létre az elektromos vezetés.

2. fejezet

A standard diffúzió

A diffúziós egyenlet felírásához a

$$\partial_t l(t, \cdot) + \nabla \cdot \psi(t, \cdot) = f(t, \cdot) \quad (2.1)$$

egyenletből indulunk ki, amelyet kontinuitási egyenletnek is neveznek, és a tömegmegmaradás elvéből vezetnek le, [6]. Az l mennyiségre vonatkozó egyenlet úgy kapható, ha benne a $\psi(t, \cdot)$ áramfüggvényt meghatározzuk.

$$\psi(t, \mathbf{x}) = -D(t, \mathbf{x}) \nabla l(t, \mathbf{x}), \quad (2.2)$$

ahol a D függvényt, amely gyakran konstansnak is tekinthető, diffúziós együtthatónak nevezzük. Ez azt írja le, hogy az anyag milyen gyorsan (könnyen) diffundál. A fenti feltételezést többen is leírták, és a modellben szereplő mennyiségtől függően az alábbi módon hivatkoznak rá.

- hővezetés - Fourier-elv
- koncentrációváltozás - Fick-törvény
- elektronika - Ohm-törvény

2.1. A hővezetési egyenlet

A (2.2) egyenletet behelyettesítve az (2.1) egyenletbe a következőt kapjuk

$$\partial_t l(t, \mathbf{x}) - \nabla \cdot D(t, \mathbf{x}) \nabla l(t, \mathbf{x}) = f(t, \mathbf{x}).$$

Ezt tovább alakítva:

$$\partial_t l(t, \mathbf{x}) = \nabla \cdot D(t, \mathbf{x}) \nabla l(t, \mathbf{x}) + f(t, \mathbf{x}),$$

ami \mathbf{x} szerint állandó D esetén:

$$\partial_t l(t, \mathbf{x}) = \nabla \cdot D(t) \nabla l(t, \mathbf{x}) + f(t, \mathbf{x}),$$

ahol

$$\nabla \cdot D(t) \nabla l(t, \mathbf{x}) = D(t) (\nabla \cdot \nabla l(t, \mathbf{x})) = D(t) \Delta l(t, \mathbf{x}).$$

Így kapjuk a hővezetési/diffúziós egyenletet:

$$\partial_t l(t, \mathbf{x}) = D(t) \Delta l(t, \mathbf{x}) + f(t, \mathbf{x}). \quad (2.3)$$

2.2. Mellékfeltételek

Általában a parciális differenciálegyenleteknek sok megoldása van. A valóságban viszont egy jól meghatározott folyamat zajlik. Az ennek megfelelő megoldást a mellékfeltételek helyes megadásával választhatjuk ki. Úgy próbáljuk megfogalmazni a feltételeket tehát, hogy egyértelmű megoldáshoz jussunk. Ezek a feltételek a fizika által vannak motiválva, és kétfélét különböztetünk meg: kezdeti és peremfeltételeket. A peremfeltételeket a vizsgált tartomány határán adjuk meg. A vizsgált jelenségtől függően választunk peremfeltételeket.

Dirichlet - peremfeltétel

Dirichlet - peremfeltételt alkalmazunk a következő esetekben:

- Hővezetés: ismert a hőmérséklet egy térrész peremén.

- Koncentrációváltozás: konstans koncentráció biztosítása.
- Elektronika: leföldelt perem.

Neumann - peremfeltétel

Ekkor $\partial_{\nu}u = \boldsymbol{\nu} \cdot \nabla u$ adott a határon ($\boldsymbol{\nu}$ - a kifelé mutató normális egységvektor), azaz (2.2) szerint

$$\begin{aligned}\nabla u(\mathbf{x}) &= -\frac{1}{D(t, \mathbf{x})} \cdot \psi(\mathbf{x}), \\ \partial_{\nu}u(\mathbf{x}) &= -\frac{1}{D(t, \mathbf{x})} \boldsymbol{\nu} \cdot \psi(\mathbf{x}),\end{aligned}$$

ami éppen a fluxus befelé mutató komponensét adja meg. Vagyis abban a gyakori esetben, ha nincs a határon keresztül áramlás, akkor ez nulla. Ilyen esetek:

- teljesen hőszigetelő fal,
- kísérlet egy kémcsőben,
- teljesen elektromos szigetelő fal.

Egy dimenzióban vizsgálva ezt az esetet, egy l hosszúságú rudat tekintünk. Ekkor ez a peremfeltétel azt jelenti, hogy $\partial_x u(0, t) = \partial_x u(l, t) = 0$. A későbbiekben vizsgált sajátérték feladatok formájában felírva:

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

Robin -(harmadfajú, vegyes) peremfeltétel

A dolgozatban ennek elemzésével foglalkozunk.

3. fejezet

A Robin-peremfeltétel

Gyakran a vizsgált tartomány határán mért áramlás arányos a „külső és belső érték” különbségével, azaz

$$\boldsymbol{\nu} \cdot \psi(\mathbf{x}) \sim \lim_{\substack{\mathbf{x}_n \rightarrow \mathbf{x} \\ (\mathbf{x}_n) \subset \mathbb{R}^n \setminus \Omega}} u(\mathbf{x}_n) - \lim_{\substack{\mathbf{x}_n \rightarrow \mathbf{x} \\ (\mathbf{x}_n) \subset \Omega}} u(\mathbf{x}_n) := u(\mathbf{x}^-) - u(\mathbf{x}).$$

Vagyis ekkor a (2.2) formula szerint

$$C(u(\mathbf{x}^-) - u(\mathbf{x})) = -D(t, \mathbf{x}) \partial_{\boldsymbol{\nu}} u(\mathbf{x}),$$

amelyet tovább alakítva

$$\partial_{\boldsymbol{\nu}} u(\mathbf{x}) = \frac{C}{D} (u(\mathbf{x}) - u(\mathbf{x}^-)), \quad (3.1)$$

ahol $u(\mathbf{x}^-)$ az ismert külső érték (pl. hőmérséklet) [6], és C az átteresztőképességet leíró együttható, amely függhet \mathbf{x} -től. Ha $\frac{C}{D}$ pozitív, ami jó vezetőképeséget jelent, erre az esetre „energiasugárzasként” hivatkozunk. Ha negatív, akkor $\frac{C}{D}$ negatív, akkor ez az ellenkező eset, ez energia elnyelésnek felel meg, ha pedig $\frac{C}{D} = 0$, azaz energiaszigetelés van, ez az eset a Neumann-peremfeltételeknek felel meg.

3.1. Sajátérték-feladatok vizsgálata

A sajátértékek ismerete hasznos, ez az alapja a Fourier-módszernek, amely a parciális differenciálegyenletek elméletében és numerikus megoldásaiban is fontos. Ezt

a módszert és benne a sajátértékek, illetve sajátfüggvények szerepét mutatjuk be röviden [1] alapján.

3.1.1. A Fourier-módszer

Mindenekelőtt megjegyezzük, hogy elég foglalkozni a homogén peremfeltételű problémákkal, hiszen az inhomogén peremfeltételű problémák mind a klasszikus, mind az általánosított esetekben könnyen visszavezethetők homogén peremfeltételű problémára a peremérték-feladatoknál alkalmazott eljárással. Nevezetesen, legyen u_0 olyan „megfelelően sima” függvény, amely eleget tesz az inhomogén peremfeltételnek, u akkor és csak akkor elégíti ki az inhomogén peremfeltételű problémát, ha $\tilde{u} = u - u_0$ egy alkalmas homogén peremfeltételű probléma megoldása.

Tekintsünk tehát egy $Lu = f$ alakú klasszikus vegyes feladatot. Tegyük fel, hogy ismertek a

$$w \mapsto Lw = \sum_{j,l=1}^n \partial_j(a_{jl}\partial_l w) + dw$$

operátornak megfelelő

$$Lw + \lambda w = 0 \quad \text{az } \Omega\text{-ban,}$$

$$w|_{\partial\Omega} = 0,$$

illetve az

$$Lw + \lambda w = 0 \quad \text{az } \Omega\text{-ban,}$$

$$(\partial_\nu * w)|_{\partial\Omega} + h(w|_{\partial\Omega}) = 0$$

klasszikus sajátérték-probléma összes sajátértékei, valamint a sajátfüggvények teljes ortonormált rendszere az $L^2(\Omega)$ térben:

$$\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_j, \dots (\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \lambda_j \leq \dots),$$

$$w_1, w_2, \dots, w_j, \dots$$

($n = 1$ esetében egy közönséges differenciáloperátorhoz tartozó sajátérték-problémáról van szó).

A Fourier-módszer alap gondolata a következő. Mivel u folytonos ha klasszikus megoldást keresünk, azért $0 \leq t < T$ esetén:

$$x \mapsto u(\mathbf{x}, t) \in C(\bar{\Omega}) \subset L^2(\Omega),$$

tehát tetszőleges, rögzített t értékre ($0 \leq t < T$) az $x \mapsto u(t, x)$ függvény Fourier-sorba fejthető a sajátfüggvények ortonormált rendszere szerint:

$$u(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{\infty} \xi_j(t) w_j(x),$$

ahol a sor minden rögzített t mellett az $L^2(\Omega)$ tér normája szerint konvergens. Ha sikerül meghatározni a $\xi_v(t)$ Fourier-együtthatókat, akkor megkapjuk a vegyes feladat megoldását a sor alakjában. Ehhez a módszerhez ismerni kell a fenti sajátértékeket és sajátfüggvényeket.

3.1.2. Sajátérték-feladatok vizsgálata egy dimenzióban

A továbbiakban a szétválasztható változójú parciális differenciálegyenletekkel foglalkozunk, ahol a megoldás előáll

$$u(x, t) = X(x)T(t) \tag{3.2}$$

alakban. Itt az $X(x)$ függvényt sajátfüggvénynek nevezzük. Ha ezt behelyettesítjük a diffúziós egyenletbe, akkor ezt kapjuk:

$$\frac{T'}{DT} = \frac{X''}{X} = -\lambda, \tag{3.3}$$

ahol λ a sajátérték.

Az egy dimenziós eset annak felel meg, hogy egy l hosszúságú rúdban vizsgáljuk a diffúzió jelenségét.

A Robin-peremfeltétel azt jelenti, hogy az $X'' = \lambda X$ egyenletet oldjuk meg a következő peremfeltételekkel:

$$X' - a_0 X = 0, \quad \text{ha } x = 0, \tag{3.4}$$

$$X' + a_l X = 0, \quad \text{ha } x = l, \tag{3.5}$$

ahol az a_0, a_l konstansok adottak.

A konstansok azért vannak ellentétes előjellel megadva, mivel a (3.1)-ben szereplő $\frac{C}{D}$ konstans $x = 0$ -ban a_0 , $x = l$ -ben pedig a_l .

A kifelé mutató normális egységvektor balra mutat $x = 0$ -ban azaz $\nu = -1$, ezért ebben az esetben, mikor a sajátfüggvényeket vizsgáljuk

$$\partial_\nu u(x) = -X' \Rightarrow -X' = -a_0 X \Rightarrow X' - a_0 X = 0,$$

$x = l$ -ben pedig jobb felé mutat, azaz $\nu = 1$, ezért

$$\partial_\nu u(x) = X' \Rightarrow X' = -a_l X \Rightarrow X' + a_l X = 0,$$

mert $X = u(x^-)$ és $u(x) = 0$.

A fentiek alapján az is világos, hogy ha a_0 és a_l pozitívak, az azt jelenti, hogy $\frac{C}{D}$ pozitív, azaz energiasugárzás van. Ha negatívak, akkor $\frac{C}{D}$ negatív, akkor ez az ellenkező eset, ekkor energiaelnyelés van, ha pedig $a_0 = a_l = 0$, akkor $\frac{C}{D} = 0$, azaz energiaszigetelés van.

Pozitív sajátértékek

A (3.3) azonosság alapján a feladat az, hogy megoldjuk az $X'' = \lambda X$ közönséges differenciálegyenletet a (3.4), (3.5) peremfeltételekkel. Először nézzük a pozitív sajátértékek esetét:

$$\lambda = \beta^2 > 0.$$

Mint általában a KDE megoldása:

$$X(x) = P \cos \beta x + Q \sin \beta x,$$

ahol P és Q konstansok.

Deriválva:

$$X'(x) = -\beta P \sin \beta x + \beta Q \cos \beta x.$$

Behelyettesítve a peremfeltételekbe:

$$X'(x) \pm aX(x) = (\beta Q \pm aP) \cos \beta x + (-\beta P \pm aQ) \sin \beta x.$$

$x = 0$ - ban:

$$0 = X'(0) - a_0 X(0) = \beta Q - a_0 P.$$

$x = l$ - ben:

$$0 = (\beta Q + a_l P) \cos \beta l + (-\beta P + a_l Q) \sin \beta l.$$

Az utóbbi két egyenlet felírható mátrixos egyenletrendszer formájában:

$$\begin{pmatrix} -a_0 & \beta \\ a_l \cos \beta l - \beta \sin \beta l & \beta \cos \beta l + a_l \sin \beta l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P \\ Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

ahol a $Q = \frac{a_0 P}{\beta}$ helyettesítéssel kapjuk, hogy

$$0 = (a_0 P + a_l P) \cos \beta l + \left(-\beta P + \frac{a_0 a_l P}{\beta} \right) \sin \beta l.$$

Nem szeretnénk a triviális $C = 0$ megoldást, ezért osztunk $P \cos \beta l$ -el, és szorzunk β -val:

$$(\beta^2 - a_0 a_l) \tan \beta l = (a_0 + a_l) \beta. \quad (3.6)$$

Bármilyen $\beta > 0$ megoldás egy $\lambda = \beta^2$ sajátértéket ad.

A következőkben azt vizsgáljuk, hogy mi lehet a megfelelő sajátfüggvény. Ez lehetne a fenti $X(x)$ behelyettesítve $Q = \frac{a_0 P}{\beta}$ -t:

$$X(x) = P \cos \beta x + \frac{a_0 P}{\beta} \sin \beta x$$

P -t kiemelve:

$$X(x) = P \left(\cos \beta x + \frac{a_0}{\beta} \sin \beta x \right) \quad (3.7)$$

bármilyen $P \neq 0$ -ra.

Mivel $\cos \beta l$ -el osztottunk, külön vizsgálnunk kell azt az esetet, amikor $\cos \beta l = 0$. Ez azt jelentené a (3.6) egyenlet szerint, hogy $\beta = \sqrt{a_0 a_l}$.

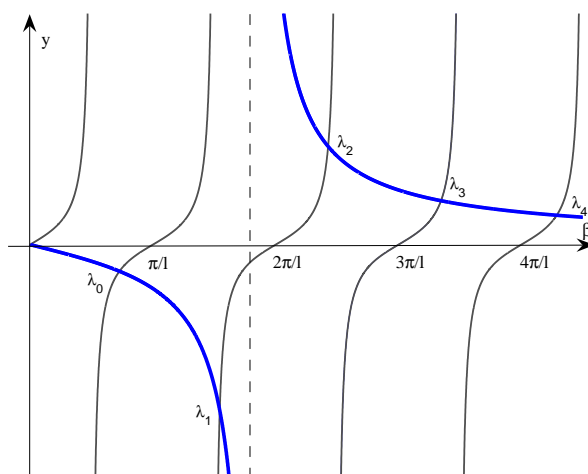
A következőkben a feladat: megoldani (3.6)-ot β -ra. Ez nem egyszerű. Az egyik módszer, hogy kiszámoljuk a gyököket numerikusan, Newton-módszerrel. A másik módszer a grafikai analízis, amely a pontos numerikus megoldások helyett kvalitatív információt ad. Ezt fogjuk tenni.

Írjuk át a (3.6) egyenletet a következő formába:

$$\tan \beta l = \frac{(a_0 + a_l) \beta}{\beta^2 - a_0 a_l}, \quad (3.8)$$

ahol a jobb oldalon levő függvényre használjuk az $y_2 = y_2(\beta) = \frac{(a_0 + a_l) \beta}{\beta^2 - a_0 a_l}$ jelölést.

A módszer az, hogy felrajzoljuk az $y_1 = y_1(\beta) = \tan \beta l$ tangensfüggvény és az y_2 racionális törtfüggvény grafikonját $\beta > 0$ függvényeként, és megkeressük a metszéspontjaikat. A racionális törtfüggvény alakja az a_0 és a_l konstansoktól függ.



3.1. ábra. A (3.8)-ban szereplő függvények grafikonjai és a sajátértékek $a_0, a_l > 0$ esetén.

1. eset: Az 3.1. ábrán azt az esetet ábrázoltuk, amikor energiasugárzás van mindkét végpontban, azaz az a_0 és a_l konstansok pozitívak. Minden egyes metszéspont ($\beta > 0$ -ra) egy sajátértéket ad meg: $\lambda_n = \beta_n^2$. Az eredmény nagyban függ a_0 -tól és a_l -től. A fent említett kivételes eset, amikor $\cos \beta l = 0$ és $\beta = \sqrt{a_0 a_l}$ az ábrán annak felel meg, hogy a tangens és a racionális törtfüggvény grafikonjai a „végtelenben metszik egymást”.

Nyilván igaz, hogy:

$$n^2 \frac{\pi^2}{l^2} < (n+1)^2 \frac{\pi^2}{l^2} \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots), \quad (3.9)$$

továbbá

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \lambda_n - n^2 \frac{\pi^2}{l^2} = 0, \quad (3.10)$$

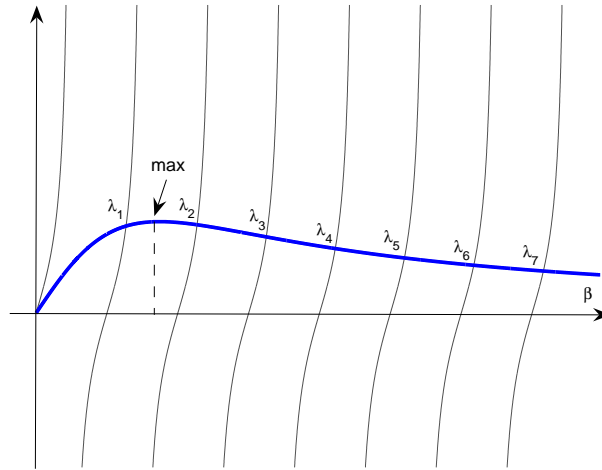
ami azt jelenti, hogy a nagyobb sajátértékek közelítenek $\frac{n^2 \pi^2}{l^2}$ -hez. Amikor $a_0 = a_l = 0$, vagyis mikor a Neumann-peremfeltételek állnak fel, akkor a sajátértékek egyenlők $\frac{n^2 \pi^2}{l^2}$ -vel.

2. eset: Azt az esetet vizsgáljuk, amikor energia elnyelés van $x = 0$ -ban és energiasugárzás $x = l$ -ben, de nagyobb a sugárzás, mint az elnyelődés, ami a következő

feltételekkel van megadva:

$$a_0 < 0, \quad a_l > 0, \quad a_0 + a_l > 0. \quad (3.11)$$

Ekkor a grafikon úgy néz ki, mint a 3.2. és a 3.3. ábrákon, a_0 és a_l egymáshoz vi-



3.2. ábra. A (3.8)-ban szereplő függvények grafikonjai és a sajátértékek $a_0 < 0$, $a_l > 0$, $a_0 + a_l > 0$ esetén.

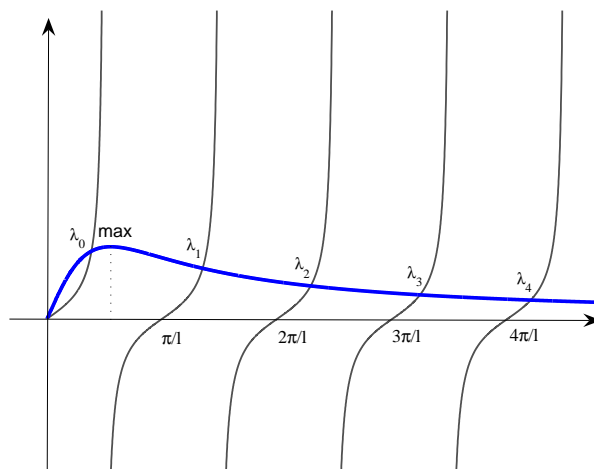
szonyított nagyságától függően változik y_2 görbéjének formája. Látjuk, hogy (3.9) és (3.10) továbbra is érvényes, kivéve a 3.2. ábrát, ahol nincs λ_0 sajátérték a $(0, \frac{\pi^2}{l^2})$ intervallumban.

Sajátérték csak akkor van a $(0, \frac{\pi^2}{l^2})$ intervallumban, ha y_2 görbéje metszi a tangensgörbe első ágát. Mivel y_2 görbéjének csak egy maximumhelye van, ezért ez a metszés csak akkor lehetséges, ha y_2 görbéjének meredeksége nagyobb, mint a tangensgörbe meredeksége az origóban. Számoljuk ki ezt a két meredekséget. y_2 görbéjének meredeksége az origóban:

$$\frac{a_0 + a_l}{-a_0 a_l} = \frac{a_l - |a_0|}{a_l |a_0|} > 0$$

(3.11) miatt. Másrészt, a tangensgörbe meredeksége az origóban $(\tan \beta l)' = \frac{1}{\cos^2 \beta l} l = l \frac{1}{\cos^2 0} = l$. Ebből a következőt kapjuk. Ha

$$a_0 + a_l > -a_0 a_l l, \quad (3.12)$$



3.3. ábra. A (3.8)-ban szereplő függvények grafikonjai és a sajátértékek $a_0 < 0$, $a_l > 0$, $a_0 + a_l > 0$ esetén.

akkor y_2 görbéjének meredeksége az origóban nagyobb lesz, mint a tangensgörbe meredeksége, és a két grafikon a $(0, \frac{\pi}{2l})$ intervallumban metszi egymást. Ezért a 2. esetben csak akkor van sajátérték a $(0, \frac{\pi}{2l})^2$ intervallumban, ha a (3.12)-beli feltételek teljesülnek.

Nulla sajátérték

Nulla sajátérték pontosan akkor van, ha

$$a_0 + a_l = -a_0 a_l l.$$

Ez csakis akkor történhet meg, ha a_0 és a_l ellentétes előjelűek, és az intervallum hossza „megfelelő”, azaz

$$l = -\frac{a_0 + a_l}{a_0 a_l}.$$

Negatív sajátértékek

Most vizsgáljuk meg a negatív sajátérték lehetőségét. Hogy elkerüljük a komplex számokkal való számolást, megadjuk hogy

$$\lambda = -\gamma^2 < 0,$$

A differenciálegyenlet megoldását a következő alakban írjuk fel:

$$X(x) = C \cosh \gamma x + D \sinh \gamma x.$$

(egy másik formája ennek: $Ae^{\gamma x} + Be^{-\gamma x}$). A peremfeltételek, úgy ahogy korábban, a következő egyenlethez vezetnek:

$$\tanh \gamma l = -\frac{(a_0 + a_l)\gamma}{\gamma^2 + a_0 a_l}. \quad (3.13)$$

A (3.13) egyenlet két oldalán lévő függvények grafikonjainak metszéspontjait keressük $\gamma > 0$ -ra. Minden metszéspont egy negatív sajátértéket ad meg: $\lambda^2 = -\gamma^2$ és egy megfelelő sajátfüggvényt:

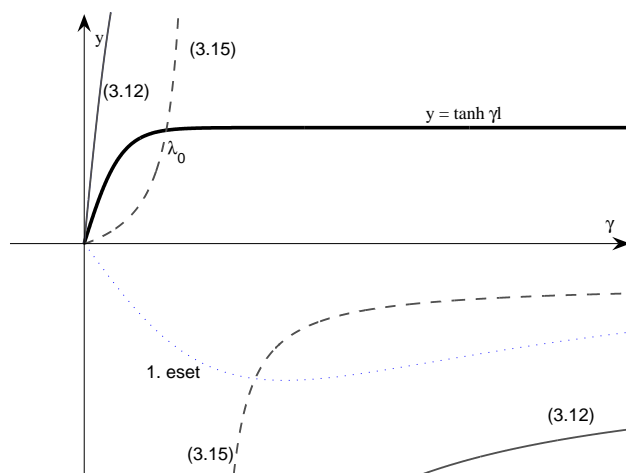
$$X(x) = \cosh \gamma x + \frac{a_0}{\gamma} \sinh \gamma x. \quad (3.14)$$

A 3.4. ábrán néhány különböző esetet ábrázolunk. Az első esetben, mikor mindkét végpontban energia sugárzás van, vagyis a_0 és a_l pozitív, nincs metszéspont és nincs negatív sajátérték. A 2. eset, amikor több a sugárzás, mint az elnyelés ($a_0 < 0$, $a_l > 0$, $a_0 + a_l > 0$), a folytonos (3.12) és szaggatott (3.15) vonalakkal van ábrázolva. Ezek esetében vagy egy vagy nulla metszéspont van, attól függően, hogy mennyi a meredekség az origóban. A tanh görbe meredeksége l , amíg a racionális törtfüggvény meredeksége $-(a_0 + a_l)/(a_0 a_l) > 0$. Ha ez kisebb, mint l , akkor van metszéspont, ellenkező esetben nincs. Így a következtetésünk a 2. esetben:

Legyen $a_0 < 0$ és $a_l > -a_0$. Ha

$$a_0 + a_l < -a_0 a_l l, \quad (3.15)$$

akkor pontosan egy negatív sajátérték létezik (λ_0). Ha a (3.12) eset áll fenn, akkor nincs negatív sajátérték.



3.4. ábra. A (3.8)-ban szereplő függvények grafikonjai különféle értékű a_0, a_1 konstansok esetén.

Összefoglalás

A következő módon foglaljuk össze a különböző eseteket:

1. eset: Csak pozitív sajátértékek.
2. eset ($a_0 + a_l > -a_0 a_l l$): Csak pozitív sajátértékek.
2. eset ($a_0 + a_l = -a_0 a_l l$): Nulla sajátérték, a többi pozitív.
3. eset ($a_0 + a_l < -a_0 a_l l$): Egy negatív sajátérték, a többi pozitív.

Minden esetben, bármilyen a_0 és a_l értékre az összes sajátérték valós, továbbá mindig végtelen számú pozitív sajátérték van, ami (3.8)-ból következik. y_2 az origóból a β tengelyhez közelít a végtelenben, ezért a tangens függvény összes ágát kell metszenie, kivéve az elsőt.

Az összes ilyen problémánál nagyon fontos megtalálni az összes sajátértéket. Ha csak egy is hiányozna, akkor nem tudnánk megoldani a diffúziós egyenletet, mert ha a differenciáloperátor szimmetrikus, akkor a sajátfüggvények merőlegesek egymásra, és a hiányzó komponenst a többivel nem tudjuk előállítani.

Példa az eredmények alkalmazására

A 3.1.1. fejezetben ismertetett Fourier-módszert mutatjuk be egy konkrét példán. Ehhez az u függvényt a következő alakba írjuk:

$$u(x, t) = \sum_n T_n(t) X_n(x),$$

ahol $X_n(x)$ -ek a sajátfüggvények, és

$$T_n(t) = A_n e^{-\lambda_n kt}.$$

Legyen $a_0 < a_0 + a_l < -a_0 a_l l$. Ebben az esetben pontosan egy negatív sajátérték van $\lambda_0 = -\gamma_0^2 < 0$ és a többi pozitív $\lambda_n = +\beta_n^2 > 0$, $n = 1, 2, 3, \dots$

A következő diffúziós probléma:

$$\begin{aligned} u_t &= k u_{xx} && \text{ha } 0 < x < l, \quad 0 < t < \infty \\ u_x - a_0 u &= 0 && \text{ha } x = 0 \\ u_x + a_l u &= 0 && \text{ha } x = l \\ u &= \Phi && \text{ha } t = 0 \end{aligned}$$

teljes megoldása a fentiek alapján

$$\begin{aligned} u(x, t) &= A_0 e^{+\gamma_0^2 kt} \left(\cosh \gamma_0 x + \frac{a_0}{\gamma_0} \sinh \gamma_0 x \right) \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{-\beta_n^2 kt} \left(\cos \beta_n x + \frac{a_0}{\beta_n} \sin \beta_n x \right) \end{aligned} \quad (3.16)$$

Ennek a következtetésnek a következő fizikai értelmezése van: $u(x, t)$ egy l hosszúságú rúdban a hőmérséklet. Azt az esetet vizsgáltuk, amikor a rúd bal végpontjában energia elnyelés van, a jobb végpontban pedig energia sugárzás. Egy adott l hosszúságra, és egy adott $a_l > 0$ sugárzásra csak akkor van negatív sajátérték ($\lambda_0 = -\gamma_0^2$), ha az elnyelés elég nagy [$|a_0| > a_l/(1 + a_l l)$]. Ilyen nagy elnyelési együttható lehetővé teszi, hogy a hőmérséklet magas értékekig emelkedjen, ahogy látjuk a (3.16)-beli sorfejtésből. Valójában az összes együttható csökken ahogy az idő halad előre, kivéve az elsőt, amely exponenciálisan növekszik $e^{\gamma_0^2 kt}$ következtében. Vagyis a rúd melegszik.

Másrészt, ha az elnyelés aránylag kicsi [$|a_0| < a_l/(1 + a_l l)$], akkor az összes sajátérték pozitív és a hőmérséklet bizonyos korlátok között marad, végül lecsökken nullára.

3.1.3. Sajátérték-feladatok vizsgálata két dimenzióban

Két dimenzióban a vizsgált tartományunk legyen $\Omega = (0, \pi) \times (0, \pi)$. Ekkor vizsgáljuk a

$$\Delta u(x, y) = \lambda u(x, y) \quad (x, y) \in \Omega$$

sajátérték-feladatot.

Az ehhez tartozó peremfeltételek a következőképpen írhatóak fel:

$$\partial_{\nu} u - a_1 u = 0, \quad \text{ha } x = \pi, \quad (3.17)$$

$$\partial_{\nu} u - a_2 u = 0, \quad \text{ha } y = 0, \quad (3.18)$$

$$\partial_{\nu} u - a_3 u = 0, \quad \text{ha } x = 0, \quad (3.19)$$

$$\partial_{\nu} u - a_4 u = 0, \quad \text{ha } y = \pi, \quad (3.20)$$

ahol $\partial_{\nu} u = \nu \nabla u$, tehát a peremfeltételek átírhatóak, ha behelyettesítjük a megfelelő normális egységvektorokat:

$$(3.17) \quad \partial_{\nu} u = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \nabla u = \partial_x u$$

$$(3.18) \quad \partial_{\nu} u = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} \cdot \nabla u = -\partial_y u$$

$$(3.19) \quad \partial_{\nu} u = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \nabla u = -\partial_x u$$

$$(3.20) \quad \partial_{\nu} u = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \nabla u = \partial_y u$$

Tehát a peremfeltételek felírhatóak a következő formában:

$$\partial_x u - a_1 u = 0, \quad \text{ha } x = \pi,$$

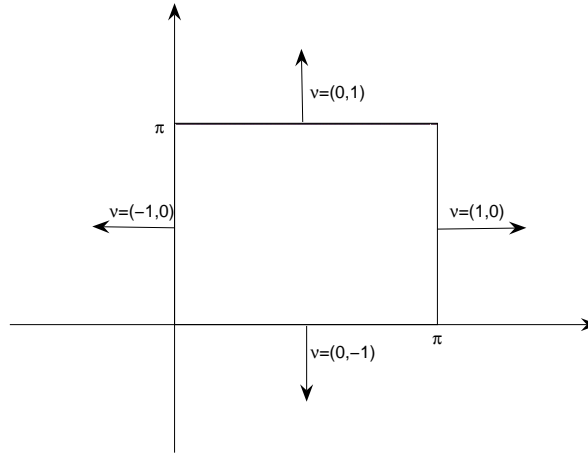
$$-\partial_y u - a_2 u = 0, \quad \text{ha } y = 0,$$

$$-\partial_x u - a_3 u = 0, \quad \text{ha } x = 0,$$

$$\partial_y u - a_4 u = 0, \quad \text{ha } y = \pi.$$

A fenti sajátértékprobléma vizsgálatához felhasználjuk a következő eredményeket [1]:

1. Definíció. Legyen $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ lokálisan téglaszerű tartomány, $p \in C^1(\bar{\Omega})$, $q \in C(\bar{\Omega})$, $p > 0$, $q \leq 0$ ($\bar{\Omega} - \text{on}$); továbbá $g, h \in C(\partial\Omega)$, $gh \geq 0$, $g + h > 0$ a $\partial\Omega$ peremen.



3.5. ábra. Az $\Omega = (0, \pi) \times (0, \pi)$ tartomány a kifelé mutató normálisokkal

Keressünk olyan $\lambda \in \mathbb{C}$ számot és olyan $u \in C^2(\Omega) \cap C^1(\bar{\Omega})$ függvényt, amelyre $u \neq 0$ (azaz u nem azonosan nulla függvény) és

$$\operatorname{div}(p \operatorname{grad} u) + qu + \lambda u = 0 \quad \text{az } \Omega \text{ - n,} \quad (3.21)$$

$$gu|_{\partial\Omega} + h\partial_{\nu}u|_{\partial\Omega} = 0 \quad (3.22)$$

Ezt a $\operatorname{div}(p \operatorname{grad} u) + qu + \lambda u = f$, $gu|_{\partial\Omega} + h\partial_{\nu}u|_{\partial\Omega} = \varphi$ problémához tartozó klasszikus harmadik sajátérték-problémának (sajátérték-feladatnak) nevezzük. A $h = 0$ esetben első, a $g = 0$ esetben második sajátérték-problémáról beszélünk. A fentieknek megfelelő λ számot a sajátérték-probléma sajátértékének, az u függvényt a probléma sajátfüggvénynek nevezzük.

A továbbiakhoz értelmezzük az \tilde{L} lineáris operátort a következőképpen:

$$\begin{aligned} \tilde{L}u &= -\operatorname{div}(p \operatorname{grad} u) - qu, \quad u \in C^2(\Omega) \cap C^1(\bar{\Omega}), \\ \tilde{L}u &\in L^2(\Omega), \quad gu|_{\partial\Omega} + h\partial_{\nu}u|_{\partial\Omega} = 0. \end{aligned} \quad (3.23)$$

1. Tétel. Tegyük fel, hogy teljesülnek az 1. definíció feltételei, és az Ω tartomány lokálisan téglaszerű.

a) Ekkor a (3.23) formulával értelmezett $L^2(\Omega)$ -ból $L^2(\Omega)$ -ba képező \tilde{L} lineáris operátor szimmetrikus és pozitív. Ezért az \tilde{L} operátor sajátértékei nemnegatívak, legfeljebb megszámlálhatóan végtelen sok sajátérték van, a különböző sajátértékekhez tartozó sajátfüggvények ortogonálisak.

b) $\lambda = 0$ $q = 0$, $g = 0$ (azaz a második sajátérték-probléma) esetében sajátérték, és ekkor csak az azonosan konstans függvények a sajátfüggvények.

c) Ennek következtében a $q = 0$, $g = 0$ esettől eltekintve a $\operatorname{div}(p \operatorname{grad} u) + qu + \lambda u = f$, $gu|_{\partial\Omega} + h\partial_\nu u|_{\partial\Omega} = \varphi$ probléma megoldása $\lambda \leq 0$ esetén egyértelmű. A $q = 0$, $g = 0$ esetben $\lambda = 0$ mellett a probléma megoldása additív állandótól eltekintve egyértelmű.

Az általunk vizsgált esetben $p = -1$ és $q = 0$, vagyis \tilde{L} -nek a (-1) -szeresét vizsgáljuk. Tehát az 1. Tétel alapján Δ -nak az 1. Definícióban leírt feltételekkel csak negatív sajátértéke van.

1.eset: Ellenőrizzük, hogy az 1. Definíció feltételei teljesülnek-e:

$$gh \geq 0, \quad g + h > 0, \quad h = 1 \text{ mindegyik esetben, és } g = -a_1, -a_2, -a_3, -a_4$$

$$\begin{aligned} \partial_x u - a_1 u = 0, \quad -a_1 \geq 0 &\Rightarrow a_1 \leq 0 & -a_1 + 1 > 0 &\Rightarrow 1 > a_1 &\Rightarrow a_1 \leq 0 \\ -\partial_y u - a_2 u = 0, \quad -a_2 \geq 0 &\Rightarrow a_2 \leq 0 & -a_2 + 1 > 0 &\Rightarrow 1 > a_2 &\Rightarrow a_2 \leq 0 \\ 0 &&&&& \\ -\partial_x u - a_3 u = 0, \quad -a_3 \geq 0 &\Rightarrow a_3 \leq 0 & -a_3 + 1 > 0 &\Rightarrow 1 > a_3 &\Rightarrow a_3 \leq 0 \\ 0 &&&&& \\ \partial_y u - a_4 u = 0, \quad -a_4 \geq 0 &\Rightarrow a_4 \leq 0 & -a_4 + 1 > 0 &\Rightarrow 1 > a_4 &\Rightarrow a_4 \leq 0 \end{aligned}$$

Ebből arra tudunk következtetni, hogy ha $a_1, a_1, a_3, a_4 \leq 0$, akkor Δ -nak csak negatív sajátértéke van.

2. eset: Most ismert, szorzat alakú sajátfüggvényeket vizsgálunk, ellenőrizzük, hogy melyek teljesítik a peremfeltételeket.

Legyen tetszőleges $k_1, k_2 \in \mathbb{Z}$ esetén a sajátfüggvény:

$$u(x, y) = (a_{11} \sin k_{11}x + b_{11} \cos k_{11}x)(a_{12} \sin k_{12}y + b_{12} \cos k_{12}y), \quad (3.24)$$

ahol a_{11}, a_{12}, b_{11} és b_{12} konstansok.

Ellenőrizzük, hogy ez Δ -nak sajátfüggvénye:

Első deriváltak:

$$\partial_x u(x, y) = (a_{11}k_{11} \cos k_{11}x - b_{11}k_{11} \sin k_{11}x)(a_{12} \sin k_{12}y + b_{12} \cos k_{12}y)$$

$$\partial_y u(x, y) = (a_{11} \sin k_{11}x + b_{11} \cos k_{11}x)(a_{12}k_{12} \cos k_{12}y - b_{12}k_{12} \sin k_{12}y)$$

Második deriváltak:

$$\partial_{xx} u(x, y) = (-a_{11}k_{11}^2 \sin k_{11}x - b_{11}k_{11}^2 \cos k_{11}x)(a_{12} \sin k_{12}y + b_{12} \cos k_{12}y)$$

↓

$$\partial_{xx} u(x, y) = -k_{11}^2 (a_{11} \sin k_{11}x + b_{11} \cos k_{11}x)(a_{12} \sin k_{12}y + b_{12} \cos k_{12}y)$$

$$\partial_{yy} u(x, y) = (a_{11} \sin k_{11}x + b_{11} \cos k_{11}x)(-a_{12}k_{12}^2 \sin k_{12}y - b_{12}k_{12}^2 \cos k_{12}y)$$

↓

$$\partial_{yy} u(x, y) = -k_{12}^2 (a_{11} \sin k_{11}x + b_{11} \cos k_{11}x)(a_{12} \sin k_{12}y + b_{12} \cos k_{12}y)$$

A Laplace-operátor:

$$\Delta u(x, y) = \partial_{xx} u(x, y) + \partial_{yy} u(x, y)$$

$$\begin{aligned} \Delta u(x, y) &= -k_{11}^2 (a_{11} \sin k_{11}x + b_{11} \cos k_{11}x)(a_{12} \sin k_{12}y + b_{12} \cos k_{12}y) \\ &\quad + -k_{12}^2 (a_{11} \sin k_{11}x + b_{11} \cos k_{11}x)(a_{12} \sin k_{12}y + b_{12} \cos k_{12}y) \end{aligned}$$

↓

$$\Delta u(x, y) = (-k_{11}^2 - k_{12}^2)(a_{11} \sin k_{11}x + b_{11} \cos k_{11}x)(a_{12} \sin k_{12}y + b_{12} \cos k_{12}y)$$

Tehát $u(x, y)$ valóban sajátfüggvény, és a sajátérték $\lambda = -k_{11}^2 - k_{12}^2$

Most azt vizsgáljuk, hogy mi történik a $(0, \pi) \times (0, \pi)$ tartomány peremén:

1. $x = \pi$, ekkor $\partial_x u - a_1 u = 0$

$$\partial_x u(\pi, y) = k_{11}(a_{11} \cos k_{11}\pi - b_{11} \sin k_{11}\pi)(a_{12} \sin k_{12}y + b_{12} \cos k_{12}y)$$

$$a_1 u(\pi, y) = a_1(a_{11} \sin k_{11}\pi + b_{11} \cos k_{11}\pi)(a_{12} \sin k_{12}y + b_{12} \cos k_{12}y)$$

↓

$$k_{11}(a_{11} \cos k_{11}\pi - b_{11} \sin k_{11}\pi) = a_1(a_{11} \sin k_{11}\pi + b_{11} \cos k_{11}\pi)$$

ha $k_{11} \in \mathbb{Z}$, akkor $\cos k_{11}\pi = (-1)^{k_{11}}$ és $\sin k_{11}\pi = 0$

$$k_{11}a_{11}(-1)^{k_{11}} = a_1b_{11}(-1)^{k_{11}}$$

$$a_1 = \frac{k_{11}a_{11}}{b_{11}}, \quad \text{ha } k_{11} \in \mathbb{Z}$$

2. $y = 0$, ekkor $-\partial_y u - a_2 u = 0$

$$\partial_y u(x, 0) = (a_{11} \sin k_{11}x + b_{11} \cos k_{11}x)k_{12}(a_{12} \cos k_{12}0 - b_{12} \sin k_{12}0)$$

$$a_2 u(x, 0) = a_2(a_{11} \sin k_{11}x + b_{11} \cos k_{11}x)(a_{12} \sin k_{12}0 + b_{12} \cos k_{12}0)$$

↓

$$-k_{12}(a_{12} \cos k_{12}0 - b_{12} \sin k_{12}0) = a_2(a_{12} \sin k_{11}0 + b_{12} \cos k_{12}0)$$

$\cos k_{12}0 = 1$ és $\sin k_{11}0 = 0$

$$-k_{12}a_{12} = a_2b_{12}$$

$$a_2 = -\frac{k_{12}a_{12}}{b_{12}}$$

3. $x = 0$, ekkor $-\partial_x u - a_3 u = 0$

$$\partial_x u(0, y) = k_{11}(a_{11} \cos 0 - b_{11} \sin k_{11}0)k_{12}(a_{12} \sin k_{12}y + b_{12} \cos k_{12}y)$$

$$a_3 u(0, y) = a_3(a_{11} \sin k_{11}0 + b_{11} \cos k_{11}0)(a_{12} \sin k_{12}y + b_{12} \cos k_{12}y)$$

↓

$$-k_{11}(a_{11} \cos k_{11}0 - b_{11} \sin k_{11}0) = a_3(a_{11} \sin k_{11}0 + b_{11} \cos k_{11}0)$$

itt $\cos k_{11}0 = 1$ és $\sin k_{11}0 = 0$, azaz

$$-k_{11}a_{11} = a_3b_{11}$$

$$a_3 = -\frac{k_{11}a_{11}}{b_{11}}$$

4. $y = \pi$, ekkor $\partial_y u - a_4 u = 0$

$$\partial_y u(x, \pi) = (a_{11} \sin k_{11}x + b_{11} \cos k_{11}x)k_{12}(a_{12} \cos k_{12}\pi - b_{12} \sin k_{12}\pi)$$

$$a_4 u(x, \pi) = a_4(a_{11} \sin k_{11}x + b_{11} \cos k_{11}x)(a_{12} \sin k_{12}\pi + b_{12} \cos k_{12}\pi)$$

↓

$$k_{12}(a_{12} \cos k_{12}\pi - b_{12} \sin k_{12}\pi) = a_4(a_{12} \sin k_{12}\pi + b_{12} \cos k_{12}\pi)$$

ha $k_{12} \in \mathbb{Z}$, akkor $\cos k_{12}\pi = (-1)^{k_{12}}$ és $\sin k_{12}\pi = 0$, vagyis

$$k_{12}a_{12}(-1)^{k_{12}} = a_4 b_{12}(-1)^{k_{12}}$$

$$a_4 = \frac{k_{12}a_{12}}{b_{12}}, \quad \text{ha } k_{12} \in \mathbb{Z}$$

Következtetés

Ezzel a vizsgálattal arra jutottunk, hogy ha $k_{11}, k_{12} \in \mathbb{Z}$, akkor $a_1 = \frac{k_{11}a_{11}}{b_{11}}$, $a_2 = -\frac{k_{12}a_{12}}{b_{12}}$, $a_3 = -\frac{k_{11}a_{11}}{b_{11}}$, $a_4 = \frac{k_{12}a_{12}}{b_{12}}$, vagyis csak akkor azonos mindegyik előjele, ha mindegyik 0, különben pedig $a_1 = -a_3$ és $a_2 = -a_4$, tehát itt nem teljesülnek az 1. Definícióban leírt feltételek. De ki van számolva, hogy a Δ operátor sajátértékei itt negatívak: $\lambda = -k_{11}^2 - k_{12}^2$. Azaz a $-\Delta$ operátor sajátértékei mind pozitívak, csakúgy mint az első esetben. Elképzelhető tehát, hogy az 1. Definíció feltételei nem teljesülnek, de $-\Delta$ -nak mégis csak pozitív sajátértékei vannak.

Irodalomjegyzék

- [1] Simon László és E. A. Baderko, *Másodrendű lineáris parciális differenciálegyenletek*, Tankönyvkiadó, Budapest 1983.
- [2] Walter A. Strauss, *Partial Differential Equations, An Introduction*, John Wiley & Sons, Inc. 1992.
- [3] Biokémia I.: A sejtek kémiai felépítése,
<http://www.sulinet.hu/tovabbtan/felveteli/2001/1het/biosz/biosz1.html>
- [4] Diffúzió, <http://www.kislexikon.hu/diffuzio.html>
- [5] Diffúzió szerepe a gyakorlatban, <http://regi.sdt.sulinet.hu/Player/default.aspx?g=53942792-88a5-4961-9dee-a33b4eabca8f&cid=89f4ce64-f9a6-4966-aa88-19e66456b7ce>
- [6] Matematikai modellalkotás tárgy honlapja, Izsák Ferenc,
<http://www.cs.elte.hu/izsakf/amata/ea2.pdf>