Zárójelentés

A prekondicionálás matematikai módszerei nemlineáris fizikai modellekben
című, K-43765 számú OTKA pályázatról

A pályázat keretében 2003-2006 között hét kutató dolgozott: Faragó István, témavezető, Csomós Petra, Havasi Ágnes, Horváth Róbert, Izsák Ferenc, Karátson János és Lóczi Lajos.
A pályázat indulásánál a résztvevők közül négyen voltak PhD-hallgatók. Közülük ketten (Havasi Ágnes és Izsák Ferenc) már elnyerték a doktori fokozatot, ketten (Lóczi Lajos és Csomós Petra) idén védenek. Ugyancsak a pályázat idő alatt habilitált Faragó István.

A kutatási időszakban a résztvevők az alábbi főbb tudományos eredményeket érték el.
(A beszámolóban a honlapon szereplő publikációkra a következőképpen hivatkozunk:
- Ha a megjelenés évében a szerző(k)től csak egy cikk jelent meg, akkor a név és évszám megadásával.
- Ha a fenti jelölés nem egyértelmű, azaz ugyanazon szerző(k)től több cikk is jelent meg ugyanazon évben, akkor a folyóirat rövidített megnevezése is szerepel.)

1. Operátorszeletelések és alkalmazásaik

A szennyezőanyagok nagyskálájú légköri terjedésének vizsgálatában nélkülözhetetlenek az euleri terjedési egyenletrendszer megoldásán alapuló matematikai modellek. Ez a rendszer egy bonyolult parciális differenciálegyenlet-rendszer, amelynek megoldása hatékony, ugyanakkor kellően pontos numerikus módszerek alkalmazását igényli. Az egyik legelterjedtebben alkalmazott módszer az ún. operátorszeletelés (operator splitting), amely lehetővé teszi, hogy a teljes feladat megoldását egyszerűbb részfeladatok megoldására vezessük vissza. Az operátorszeletelés szinte mindig hibát eredményez, amelynek ismerete fontos az eljárás sikeres alkalmazásához. A projekt keretében elméleti és számítógépes vizsgálatokat végeztünk a szeletelési hiba hatásaira vonatkozóan.

Tanulmányoztuk a szeletelési eljárás során kapott véges differenciás sémák konzisztenciáját, és vizsgáltuk a szeletelési hiba eltűnésének feltételeit a szekvenciális, a szimmetrikusan súlyozott szekvenciális, illetve a Strang-Marcsuk szeletelésre (Dimov et al., 2004; Csomós et al., 2005; Faragó és Havasi, 2007). A félcsoportelmélet alkalmazásával bebizonyítottuk a klasszikus szeletelési eljárások (szekvenciális, Strang-Marcsuk, súlyozott szeletelések) rendjét nemkorlátos operátorokra (Faragó és Havasi, 2006), valamint azok konvergenciáját (Faragó és Havasi, 2005). Megvizsgáltuk, hogy az operátorszeletelés és az egyes részproblémákra nyert numerikus módszerek globálisan milyen diszkretizáló eljárást eredményeznek. Vizsgálatainkat számítógépes elemzéssel is elvégeztük és meghatároztuk a gyakorlati és az elméleti szeletelési rend kapcsolatát (Csomós, 2005, Nato Sci. Series). Fontos és érdekes eredményként azt kaptuk, hogy a szeletelési hiba nagysága függ a szeletelési eljárás időparaméterétől, a felbontás után nyert differenciálegyenletben szereplő stacionárius differenciáloperátorok kommutátorának normájától, valamint a részfeladatok megoldására alkalmazott numerikus módszer megválasztásától (Csomós és Faragó, 2007).

A számítógépes kísérletek során sikeresen alkalmaztuk a fenti szeletelési módszereket egy egyszerűsített légkörszennyeződési feladatra, nevezetesen egy légköri oszlopmodellre (Botchev et al., 2004). Emellett a szeletelés rendjére vonatkozó számításokat is végeztünk, amelyekben a szeletelési lépcső mellett figyelembe vettük az alkalmazott numerikus módszer lépésközének változását is (Csomós és Faragó, 2007).

A különböző operátorszeletelési módszereket egy egyszerűsített dinamikai légkörmodellen, a sekélyvízi egyenletrendszeren is teszteltük (Havasi, 2006). Megvizsgáltuk, hogyan módosítja a szeletelés alkalmazása a linearizált rendszer hullámmegoldásainak különféle karakterisztikáit. Arra az eredményre jutottunk, hogy ha operátorszeletelést alkalmazunk, akkor ezek a hullámok torzulnak. A legnagyobb torzulást az elsőrendű additív szeletelés okozta, míg a valóságot legjobban közelítő megoldásokat a szintén elsőrendű szekvenciális szeleteléssel kaptuk. Megmutattuk, hogy a másodrendű Strang-Marcsuk-féle szeletelés ebben a vizsgálatban a szekvenciális módszerrel megegyező eredményeket ad. Ez a meglepő tény a szeletelések spektrum-approximációs tulajdonságaival magyarázható.
A szeletelést egy újonnan kidolgozott véges differenciás sémával együtt is alkalmaztuk háromdimenziós advekciós-diffúziós modellen. Irányok szerinti operátorfelbontást alkalmazva a feladat egydimenziós advekciós-diffúziós feladatokra bomlik, amelyek konzisztenciája és stabilitása könnyen vizsgálható. Az eredményeket a (Dorosenko et al., 2006) közlemény tartalmazza.

A Dániai Euleri Modell (DEM) továbbfejlesztésével kapott UNI-DEM modellel is számos numerikus kísérletet végeztünk – lineáris és nemlineáris tesztfeladatokon egyaránt – a szeletelési módszer és a részrendszerekre alkalmazott numerikus módszerek megválasztására, valamint a szeletelési hiba hatására vonatkozóan (Dimov et al., 2007). Megállapítottuk többek között, hogy p-edrendű szeletelési módszerrel együtt nem érdemes p-nél magasabb rendű numerikus módszert alkalmazni. Továbbá, ha p-edrendű szeletelési módszerrel p-edrendű konvergenciát kívánunk elérni, akkor ehhez legalább p-edrendű numerikus módszerre van szükség.

Egyes szeletelési eljárások hatékonyan párhuzamosíthatók. Az ezzel kapcsolatos elméleti és számítógépes eredményeinket a (Dimov et al., 2003) és (Csomós et al., 2007) közlemények tartalmazzák.

Újonnan kidolgozott szeletelési módszereket is tanulmányoztunk, nevezetesen az additív, iteratív (Faragó és Geiser, 2005; Faragó, 2007, LNCS; Faragó, 2007, Időjárás; Faragó, 2007, AMM, Faragó et al., 2007, CMA; Faragó et al., 2007, AMM) és adaptív szeleteléseket (Faragó és Havasi, 2007). Megvizsgáltuk ezen módszerek numerikus tulajdonságait és algoritmikus realizálásának kérdéseit. A kvalitatív tulajdonságok közül fontos megemlíteni, hogy ezek a módszerek nemcsak a szeletelési pontokban, hanem a teljes időintervallumon azonos rendben konzisztensek. Alkalmaztuk mindhárom módszert egy diffúziós-reakciós modellre. Az eredmények alátámasztják, hogy ezek az új módszerek reális alternatívái a már ismert szeletelési eljárásoknak.

2. Prekondicionált iterációs módszerek és alkalmazásaik

A prekondicionálás gyakran a diszkretizált feladat megoldásának kulcskérdése, mivel a prekondicionáló mátrix megfelelő megválasztása esetén a konvergencia jelentős gyorsítása csekély többletmunkával érhető el. Kutatásainkban ezeket a mátrixokat a folytonos feladat alapterében konstruált prekondicionáló operátor diszkretizációjaként definiáljuk, amely megfelelő Hilbert-tér-elméleten alapul. Egyik fő előnye a konvergencia rácsfüggetlensége, azaz, hogy a konvergencia nem romlik el a rács finomítása során. E munkánk két fő területre összpontosított.

Az első: *nemlineáris elliptikus feladatok* iterációs megoldása a *prekondicionáló operátorok* elve alapján. Nemlineáris rugalmassági fizikai PDE-rendszerre a szeparált elmozdulás elve alapján dolgoztuk ki prekondicionálást az (Axelsson és Karátson, 2004) cikkben, a prekondicionáló operátorok alkalmazását többféle feladattípusra pedig az (Axelsson et al., 2004) és (Karátson és Faragó, 2005) cikkekben tekintettük át. A prekondicionáló operátorok Szoboljev-gradiens-típusú alkalmazását és számítógépes realizációját elektrosztatikus potenciálegyenletre, ill. szemilineáris rendszerekre a (Karátson, 2004) és (Karátson és Lóczi, 2005) cikkek tartalmazzák.

A másik terület a prekondicionált konjugált gradiens-módszer (KGM) *szuperlineáris konvergenciája és annak rácsfüggetlensége.* Ezt igazoltuk többféle prekondicionáló operátor esetén nem szimmetrikus feladatra a GCG ill. PCGN iterációkra az (Axelsson és Karátson, 2004, NM és 2006, SINUM) cikkekben, valamint a szimmetrikus résszel való prekondicionálás módszerét kiterjesztettük vegyes peremfeltételre (Karátson, preprint, 2006) és rendszerekre (Karátson és Kurics, 2006, JCAM), ahol számítógépes kísérletekkel támasztottuk alá az elvi becsléseket. A végeselem-módszer esetére vonatkozó nagyságrendi becslésünket egy véges differenciás modellfeladatra is kiterjesztettük (Karátson és Kurics, 2006, LNCS). Önadjungált feladatra Hilbert-Shmidt-típusú becslést adtunk a (Karátson, 2005, Appl. Mat.) cikkben, amely az O. Axelsson professzor 70. születésnapjára szervezett konferencia különszámában jelent meg. A (Karátson, 2006, NFA) cikkben explicit nagyságrendi becslést adtunk a szuperlineáris konvergenciára és igazoltuk ennek adott tartomány résztartományaitól való függetlenségét is. A (Axelsson és Karátson, 2006, NFA) cikkben a fenti eredményeket nyeregpont-típusú feladatokra terjesztettük ki, majd Stokes-típusú és rugalmasságtani Navier-egyenletekre alkalmaztuk, az (Antal és Karátson, 2007) cikkben pedig külső Newton-iterációval ötvözve nemlineáris transzport-feladatokra építettük fel.

A témához kötődő további nemzetközi együttműködés: S. Margenovval és I. Lirkovval (Bolgár Tud. Akadémia), ezen belül egyik PhD hallgatónk bevonásával párhuzamos számítógéprendszeren realizáltuk a (Karátson és Kurics, 2006, JCAM) cikkbeli módszerünket, az eredményeket a cikk konferenciakiadvány-változatában publikáltuk.

A parciális differenciálegyenletek megoldását numerikusan közelítő eljárások közül a végeselem-módszerek központi jelentőségűek. A prekondicionáló eljárások célja sok esetben éppen az, hogy a végeselem-feladat megoldása során kapott nagy lineáris rendszerek megoldását gyorsítsa. Fontos az eljárás során kapott hiba, a konvergencia rendjének előzetes becslése is. Egy általános nemlineáris áramlási modellben szereplő egyenletre végeztük el ezt (Van der Vegt et al., 2007).
A végeselemes közelítés ismeretében ismét érdemes megbecsülni utólag a hibát, hogy tudjuk, az eljáráson hol és mennyire érdemes finomítani. Külön probléma a hiba lokalizációjának végrehajtása. Ezt végeztük el a Maxwell-egyenletek egy családjára (Izsák et al., 2007). Mindkét esetben több numerikus szimulációval támasztottuk alá az eredményeket, amelyeket nemsima tesztfeladatokon is végrehajtottunk.

3. Numerikus módszerek kvalitatív tulajdonságai

Ismert, hogy a parciális differenciálegyenleteknek van néhány, az általuk modellezett fizikai folyamatokból is levezethető kvalitatív tulajdonsága. A konvergencián kívül e tulajdonságok megőrzése a legfontosabb követelmény hatékony numerikus eljárások konstruálása során.

Kutatásunk kezdetén a modellekre leggyakrabban megkövetelt kvalitatív tulajdonságok – a maximum-minimum elv, a nemnegativitás-megőrzés és a maximumnormabeli kontraktivitás – már ismertek voltak. A kutatás során elért eredményeink feltárták a kvalitatív tulajdonságok közti kapcsolatokat mind a folytonos, mind pedig a diszkrét esetben, ill. szükséges és elégséges feltételeket adtunk meg a tulajdonságok teljesülésére (megfelelő diszkretizációs háló és időlépés megválasztása).

Elliptikus feladatok köréből ide tartozó kutatási témánk a diszkrét maximum-elv, melynek érvényességéhez algebrai ill. geometriai feltételt adtunk a végeselemes diszkretizációra többféle, szimmetrikus ill. nem szimmetrikus (nemlineáris hővezetés típusú) nemlineáris vegyes peremérték-feladat esetén. (Karátson és Korotov, 2004 és 2005) és (Karátson et al., 2006). Ezt kiterjesztettük a numerikus integrálás hibájának figyelembevételével (Karátson és Korotov, 2006, JCAM), valamint 'interface' (felületre koncentrált reakció) típusú problémára (Karátson és Korotov, 2006, preprint). A (Karátson, 2005, AMH) cikkben igazoltuk a második biharmonikus feladat megoldásának regularitását.

A parabolikus (időfüggő) folytonos feladatokra megmutattuk, hogy a szigorú maximum-minimum elvből következik a gyenge maximum-minimum elv. A gyenge maximum-minimum elv implikálja a nemnegativitás-megőrzést ill. a maximumnormabeli kontraktivitást. Amennyiben az ismeretlen függvény nulladik deriváltja nem szerepel az egyenletben, akkor az erős maximum-minimum elv és a nemnegativitás-megőrzés ekvivalens tulajdonságok. Az egylépéses particionált vektoriterációkat ill. a diszkrét hálóoperátorokat vizsgálva a fenti implikációkat megmutattuk a kvalitatív tulajdonságok numerikus megfelelőire is (Faragó és Horváth, 2007, LNCS). A véges differencia és a Galjorkin-féle végeselem-módszereket vizsgáltuk egy, kettő, ill. három dimenzióban (Faragó és Horváth, 2006; Faragó és Horváth, 2007, IJMNE). Felhasználva a nemkeskeny téglalaprács fogalmát, amely korábban csak az elliptikus feladatokra volt ismeretes, megadtuk, hogy az ilyen rácsokon milyen alsó és felső korlátok szerint kell választanunk az időlépést a Galjorkin végeselem megoldások során (Faragó et al, 2007; Horváth, 2007, IJCSE/2). Hasonló feltételeket adtunk meg ún. hibrid rácsok esetén (Faragó et al, 2005, ANM). A hibrid rácsok háromszögeket ill. téglalapokat tartalmaznak, és a háromszögeken lineáris, a téglalapokon bilineáris elemeket használunk. Megmutattuk, hogy az előjelstabilitási tulajdonság – amely csak az egydimenziós parabolikus egyenletre értelmezhető – szigorúbb feltételt ad, mint a korábban említett három másik. Egy, a négyzetes mátrixok előjelstabilitására vonatkozó korábbi bizonyítást lényegesen egyszerűsítve megadtuk a véges differencia és a végeselem módszer előjel-stabilitásának elégséges feltételét (Horváth, 2007, LNCS; Horváth, 2007, AMM). Minden vizsgálatnál törekedtünk arra, hogy a gyakorlati számítások során is jól alkalmazható a priori feltételeket adjunk meg. Több, a gyakorlatból származtatott numerikus példát is konstruáltunk az elméleti úton nyert eredmények szemléltetésére (pl. Faragó és Horváth, 2007, IJNM).

Foglalkoztunk az egydimenziós közönséges autonóm differenciálegyenlet *h*-idejű megoldóoperátorával és annak *h*-lépésközű, egylépéses *p*-edrendű diszkretizációjával. A kutatásban e két leképezés által indukált diszkrét idejű dinamikai rendszereket hasonlítottuk össze numerikus strukturális stabilitás szempontjából.

A numerikus strukturális stabilitás kérdését közönséges differenciálegyenletek esetén különféle hiperbolicitási feltételek mellett általános esetben tisztázták (lokális kiegyenesíthetőségi tételek és a Hartman–Grobman-lemma különböző alakjai). Természetes módon felmerül a kérdés, hogy strukturális stabilitás szempontjából mi a helyzet a legegyszerűbb nemhiperbolikus esetekben, azaz például közönséges differenciálegyenletek olyan egyparaméteres családjában, ahol a hiperbolicitás valamely paraméterértéknél megsérül. Az ilyen pontokat bifurkációs pontoknak hívjuk. Egy nemhiperbolikus egyensúlyi helyzet környezetében az eredeti és a diszkretizált dinamika nem feltétlenül azonosítható konjugáció segítségével. Bizonyos típusú bifurkációs pontok közelében azonban az eredeti és diszkretizált dinamika között a konjugáció léte bebizonyítható. Megvizsgáltuk a nyeregcsomó-, a transzkritikus- és a villa-bifurkációk esetére e legelemibb bifurkációs pontok numerikus strukturális stabilitását: konjugáció megkonstruálásával kvalitatív, közelségi becslések megfogalmazásával pedig kvantitatív szempontból. Az elért eredmények összefoglalásaképpen elmondható, hogy a nyeregcsomó-bifurkációs pont numerikusan strukturálisan stabilis, ám a transzkritikus- és villa-bifurkációs pontok általános diszkretizációkra nézve numerikusan nem strukturálisan stabilak. Ha azonban a megengedett perturbációk halmazát alkalmas módon leszűkítjük, akkor a numerikus strukturális stabilitás ezen bifurkációs pontok közelében is helyreáll. Lényeges eredmény, hogy transzkritikus- és villa-bifurkációs pontok közelében optimális közelségi becsléseket igazoltunk a konjugáció és az identikus leképezés távolságára. A nyeregcsomó-bifurkáció esete lényegesen nehezebbnek bizonyult. Megmutattuk továbbá, hogy a Runge-Kutta módszerek egzaktul megőrzik az *n*-dimenziós nyeregcsomó-, valamint a csúcs-bifurkáció feltételeit. Az elért eredmények egyelőre preprint formájában jelentek meg (Lóczi, Preprint 03/006, Preprint 04/022 és Preprint 05/016).

4. Fizikai és kémiai feladatok numerikus megoldása

A reakció-diffúziós rendszerekben megfigyelt mintázatképződés, a Liesegang-jelenség modelljét vizsgáltuk. A nemlineáris PDE-ekkel történő determinisztikus leírásnak is több változata ismert, vagy nem-folytonos tagot tartalmazó differenciáloperátor szerepel az egyenletben, vagy pedig a negyedrendű tagot is tartalmazó, meg az ismeretlen koncentráció deriváltjától is nemlineárisan függő Cahn-Hilliard - egyenletet használják. Ezek alternatívájaként egy sztochasztikus modellt javasoltunk (Izsák és Lagzi, 2003), amely a determinisztikussal megegyező kvalitatív törvényszerűségeket adta, azaz a mintázatban lévő csapadékzónák távolságára, vastagságára, és megjelenési idejére vonatkozó megfigyeléseket jól reprodukálta, de egyszerűbb szimulációt tett lehetővé. A kísérletek nehéz reprodukálhatóságát folyamatosan jelen levő fluktuációval modelleztük (Izsák és Lagzi, 2004), a numerikus szimulációkban is kimutattuk, hogy különböző kezdeti koncentrációk esetén mennyire lesz instabil a rendszer. Vizsgáltuk a rendszerben jelenlevő elektromos erőtér hatását, amely egy advekciós tagnak felel meg (Lagzi és Izsák, 2004). Ez alkalmas lehet arra, hogy a kialakuló mintázatok formáját vezéreljük. Szimuláltunk különböző peremfeltétellel rendelkező rendszereket (Lagzi és Izsák, 2005; Ripszam et al., 2005), amelyek az egyik reagens folyamatos betáplálását, vagy éppen az egyik végtermékkel való reakcióját modellezték. Olyan jelenségeket is leírtunk, amelyek modellje meg nem tisztázott (Volford et al., 2007), de valószínűleg jóval egyszerűbben modellezhetők, mint a hasonló kvalitatív jelenségeket mutató Beluszov-Zsabotyinszkij - reakció.

A Maxwell-egyenletek numerikus megoldása során fontos kérdés, hogy hogyan lehet az elektromágneses modellben a szemidiszkretizációval nyert közönséges differenciálegyenlet-rendszert hatékonyan megoldani. Ismert, hogy jól alkalmazhatók azok a megoldások, melyek az operátorszeletelési eljáráson alapulnak. Megmutattuk, hogy a korábban publikált eljárások hogyan írhatók fel az operátorszeletelés módszerével (Horváth, 2003; Horváth et al, 2004; Faragó et al, 2005, IJNM) ill. hogy a módszer hogyan alkalmazható a korábbiaknál hatékonyabb eljárások kidolgozására.

Célunk a klasszikus finite-difference time-domain (FDTD) módszernél gyorsabb (lehetőleg feltétel nélkül stabil) eljárások kidolgozása volt. Az egyik publikált módszer azon alapul, hogy a Namiki-Zheng-Chen-Zhang (NZCZ) módszerbeli részfeladatokat a Strang-Marcsuk szeletelés helyett a szekvenciális szeleteléssel bontjuk fel és a részfeladatokat a Crank-Nicolson módszerrel oldjuk meg numerikusan. A módszer nagy előnye, hogy feltétel nélküli stabilitása a konstrukcióból látszik, ill. az elektromágneses tér energiája állandó marad a számítások közben. A másik módszerben a szimmetrikus szekvenciális szeletelésnél adtunk egy olyan másodrendű módszert, melynek műveletigénye jelentősen csökken, ha párhuzamos gépeken alkalmazzák. Az utóbbi kb. 3-szor gyorsabban számítja ki a megoldást, mint a NZCZ-módszer (12-szer gyorsabban, mint a FDTD-módszer), ugyanakkor másodrendben pontos (Horváth, 2007, IJCSE; Horváth, 2006, LNCS). Megmutattuk továbbá, hogy az operátorszeletelési eljárás akkor is hatékonyan alkalmazható, ha forrástag is jelen van. Ezekben az esetekben is megtartják a klasszikus rendjüket a szeletelési eljárások. A szeletelések az FDTD-módszerrel és a végeselem megoldásban alkalmazott Gautschi-féle időbeli integrációs eljárással együtt is hatékonyan alkalmazhatók (Botchev, 2007). Eredményeinket minden esetben numerikus példákkal is demonstráltuk.

Kutatási eredményeinkből 97 tudományos közleményt készítettünk.

A kutatási időszakban a pályázat résztvevői számos (kb. 50) nemzetközi és hazai konferencián vettek részt, nagyobbrészt az OTKA pályázat pénzügyi támogatásával. Mindegyik konferencián előadást tartottunk, amelyek közül több plenáris meghívott előadás volt. Több konferencián tudományos szekciókat illetve ülésszakokat szerveztünk, emellett számos workshop szervezésében vettünk részt. Külön megemlítjük a következő, általunk szervezett eseményeket.

1. Tudományos ülésszak szervezése „Korszerű numerikus módszerek és légkördinamikai alkalmazási lehetőségei” címmel az MTA Meteorológiai Tudományos Bizottság felkérésére, Budapest, 2005. május 2.

2. Advances in Air Pollution Modelling for Environmental Security, NATO Advanced Research Workshop, Borovec, Bulgária, 2004. május 9-13.

3. Tübingen-Budapest Workshop on Evolution Equations, Dobogókő, 2007. március 22-26.

Kutatásaink nagy része nemzetközi együttműködések keretében valósult meg. Főbb partnereink:

- Owe Axelsson, Nijmegen (Hollandia)-Uppsala (Svédország)
- Zahari Zlatev, NERI, Dánia
- Jaap van der Vegt, Mike Botchev, Enschede, Twente University, Hollandia
- Ivan Dimov, Krassimir Georgiev, Svetozar Margenov, Ivan Lirkov, Tzvetan Ostromsky, Bolgár Tudományos Akadémia, Párhuzamos Algoritmusok Intézete
- Anatolij Dorosenko, Vitalij Pruszov, Ukrán Tudományos Akadémia Kibernetikai Intézete
- Szergej Korotov, Helsinki Műszaki Egyetem, Finnország

- Rainer Nagel, Tübingeni Egyetem, Németország

Az együttműködésben nagy segítség volt az OTKA pénzügyi háttere.