Egyenlőtlen cellafelbontáson alapuló többszintű numerikus modellezési eljárások

Írta: Gáspár Csaba, aki az Informatikai Tudományágban az MTA doktori cím elnyerésére pályázik

Győr 2007

TARTALOMJEGYZÉK

1.	Egyenlőtlen felbontású cellarendszerek (QT-hálók)	6	
1.1.	. QT-hálók generálása, regularizálása	6	
1.2.	. Néhány közvetlen alkalmazás	9	
1.3.	. Véges differencia és véges térfogat módszerek QT-hálókon	10	
1.4.	. Többszintű (multigrid) módszerek QT-hálókon	14	
1.5.	. Alkalmazások a numerikus hidraulikában	15	
1.6.	. Alkalmazások a gyors multipólus módszerben	17	
2.	Multi-elliptikus interpoláció QT-hálókon	24	
2.1.	. A szórt pontú interpolációs probléma	24	
2.2.	. A radiális bázisfüggvények módszere	26	
2.3.	. Multi-elliptikus interpoláció	28	
2.4.	. Numerikus multi-elliptikus interpoláció QT-hálók használatával	40	
2.5.	. Vektor-interpolációs problémák, multi-elliptikus megoldás	44	
3.	Multi-elliptikus interpolációra alapozott hálónélküli módszerek	47	
3.1.	. Multi-elliptikus interpoláció a duális és többszörös reciprocitásban	47	
3.2.	. Hálónélküli módszerek konstrukciója a radiális bázisfüggvények módszerével	50	
3.3.	. Multi-elliptikus interpoláció és a Kansa-módszer	52	
3.4.	. Multi-elliptikus interpoláció és a partikuláris megoldások módszere	53	
3.5.	. A homogén probléma megoldási módszerei	55	
3.	2.5.1. A Laplace-egyenlet approximálása Laplace-Helmholtz-interpolációval	57	
3.	2.5.2. Az alapmegoldások módszere és regularizálás multi-elliptikus interpolációva.	. 68	
3.	2.5.3. A perem-rekonstrukció módszere	74	
3.6.	. Lokális sémák generálása a radiális bázisfüggvények módszerével, és		
újraglobalizálás multi-elliptikus interpolációval77			
4.	4. Összefoglalás		
5.	5. Irodalomjegyzék		

BEVEZETÉS

Az elmúlt két évtized hatalmas számítástechnikai fejlődést hozott magával: korábban úgyszólván elképzelhetetlen teljesítményű processzorokkal és memóriával ellátott számítógépek szerezhetők be, ráadásul egyre olcsóbban. Felületes szemlélő ennek alapján azt hihetné, hogy ezzel a számítástechnikai háttérrel a numerikus matematika majdnem minden problémája szinte magától meg kellene, hogy oldódjék. Azonban ez nincs így: az alkalmazás és a kutatás étvágya még e lehetőségeknél is nagyobb mértékben is növekszik. Ahol - pl. a természetes vizek mozgásának modellezésekor - nem is olyan régen megelégedtek egydimenziós modellezéssel (St. Venant-egyenletek), ott igen hamar fellépett az igény két-, sőt háromdimenziós modellezésre (sekélyvízi egyenletek, teljes Navier-Stokes-egyenletek). Ahol a PC-k megjelenése előtt egy-egy futási eredményre - vagy akárcsak egyetlen iterációs lépésre! - órákat kellett várni, ott ma természetes az igény, hogy az eredményeket másodpercek alatt lehessen megkapni. Ahol valamikor – jobb híján – analitikus közelítéseket vagy ekvidisztáns rácson definiált véges differencia módszereket alkalmaztak különféle mechanikai, hővezetési, áramlási stb. problémák megoldására, ott ma már igen finom, végeselemes szoftverek működnek (bár igencsak borsos áron). Mindez kitermelte a maga sajátos, addig nem létező problémakörét is. Ilyen pl. a végeselemes hálógenerálás vagy az adott problémához legjobban illeszkedő görbevonalú koordinátarendszerek konstrukciója. Ezen részproblémák csaknem olyan nehezek - olykor határozottan nehezebbek is! -, mint az eredeti (hővezetési, áramlási stb.) feladatot kellően pontosan megoldó módszer kidolgozása. Nagyon jellemző a perem-integrálegyenlet (vagy peremelem) módszer esete, melyet eredetileg épp a numerikus nehézségek enyhítésére találtak ki: a módszer az említett számítástechnikai fejlődés ellenére ma is létezik, és elterjedtebb, mint valaha. Ugyanakkor új problémákat is hozott magával, így pl. bizonyos tartományon vett integrálok kiszámítását rács- ill. hálófelbontás nélkül.

Megállapíthatjuk tehát, hogy a számítási bonyolultság csökkentését ill. elkerülését célzó módszerek kutatása ma is aktuális, sőt, talán aktuálisabb, mint valaha.

A disszertáció tárgyát a pályázó ilyen irányú, majdnem 20 évre visszamenő és jelenleg is tartó kutatásainak összefoglalása alkotja. Időrendben az első eredmény a peremelem módszer és a más területeken nagy karriert befutott multigrid módszerek összekapcsolása volt [19], [26]. Ezt követte egy nagyon szerencsésnek bizonyult "takarékos" diszkretizálási ötlet, melyről kiderült, hogy nem más, mint a számítógépes grafikában már ismert quadtree (QT) algoritmus (elfogadott magyar elnevezése ma sincs, leginkább "négyzetfának" lehetne nevezni). Az algoritmus által generált cellarendszer meglepően univerzális eszköznek bizonyult. Alkalmazható pl. lokális finomításokkal bíró végeselemes háló előállítására; nagyszámú, de szabálytalanul elhelyezkedő pontból álló pontrendszer térbeli sűrűségeloszlásának meghatározására (ez különösen a részecskeszemléletű szimulációkban lehet hasznos); az ilyen pontrendszerhez tartozó pontok legközelebbi szomszédainak gyors megkeresésére és így tovább. A módszer ereje azonban igazán akkor mutatkozik, ha a cellarendszert számítási hálóként használjuk, és különösen akkor, ha egy természetes módon adódó multigrid (többszintű) módszerbe ágyazzuk be. Az így nyert numerikus módszerek lényegesen kevesebb ismeretlen bevezetését kívánják meg és jóval gyorsabbak is a hagyományos véges differenciás ill. véges elemes módszereknél. E módszerek nagyon jól használhatóknak bizonyultak különféle áramlási és transzport problémák modellezésére ([20], [22], [23], [25], [28], [29]), sőt, sekély tavak komplex vízminőségi modellezésére is. Kiderült, hogy a módszer rokonítható a perem típusú módszerekkel, így a perem-integrálegyenlet módszerrel, amennyiben a perem által generált, a perem környékén sűrűsödő QT-cellarendszert használunk [21].

A módszer új lehetőségeket hozott a *szórt pontú interpoláció* klasszikus problémájában is, amikor kiderült, hogy nagyon jó interpolációs tulajdonságú függvények konstruálhatók bizonyos magasabbrendű (pl. biharmonikus) parciális differenciálegyenletek megoldásával, me-

lyekhez az interpolációs feltételeket mint speciális, diszkrét pontokbeli peremfeltételeket csatoljuk [27]. E megközelítés pusztán elméleti érdekesség volna, ha a szóbanforgó magasabbrendű egyenletekre nem lehetne gyors megoldási módszereket konstruálni: a QT-cellarendszereken alapuló multigrid módszerek viszont épp ilyenek. Ennek az interpolációs módszernek aztán a közvetlen interpoláción túlmenően, új alkalmazási területei is mutatkoztak. Egy ilyen terület a perem-integrálegyenlet módszeren belül adódik eléggé természetes módon (amikor is bizonyos *tartományon* vett integrálok kiszámítását *peremintegrálok* kiszámításának sorozatára vezetjük vissza, [43-46]). Egy másik területet pedig egy új – mondhatni, újrafelfedezett – és nagyon gyorsan fejlődő módszercsalád, a *hálónélküli* módszerek [48] alkotják. A hálónélküliség igénye a peremelem módszerben is fellépett, és a fentebb jelzett új interpolációs módszer itt is sikerrel alkalmazhatónak bizonyult [47], [49]. Az ezredforduló óta az ilyen témakörnek szentelt konferenciák, workshopok gyorsan nő, és jelenleg a hálónélküli módszerek témaköre a numerikus matematika egyik legdinamikusabban fejlődő részének tekinthető.

Az értekezés három fejezetéből az elsőben összefoglaljuk a QT-hálók generálását, azok legfontosabb tulajdonságait. Áttekintjük a véges térfogati sémák QT-hálókon való konstrukcióját, egyúttal bemutatva a fa-struktúrából adódó természetes multigrid technikát is. Példákat mutatunk ennek a módszernek első, közvetlen alkalmazásaira főként a numerikus hidraulikában, majd külön szakaszban foglalkozunk a perem-integrálegyenlet módszerben (ezen belül a gyors multipólus módszerben) kínálkozó alkalmazási lehetőségekel.

A második fejezet a szórt pontú interpolációs problémát és annak magasabbrendű parciális differenciálegyenletekre vezető megoldását tárgyalja. Ez utóbbi probléma numerikus megoldására ugyancsak QT-hálókat és multigrid technikát használunk, melynek révén a tárgyalt módszer jelentős előnyöket mutat fel a manapság általánosan elterjedtnek tekinthető radiális bázisfüggvény-módszerhez képest: így pl. nincs szükség nagyméretű, tele mátrixú és sokszor nagyon rosszul kondícionált egyenletrendszer megoldására és ilyen mátrixok tárolására sem. A fejezet végén vektor-interpolációs problémákra való alkalmazási lehetőségeket is mutatunk. Itt az interpolált vektormezőkre még globális feltételeket is teszünk (pl. örvénymentesség és/vagy divergenciamentesség), melyre a hagyományos, pl. a radiális bázisfüggvényeken alapuló interpolációs technikák alig alkalmazhatók.

A harmadik, legterjedelmesebb fejezet pedig a pályázó azon – jelenleg is folyó – kutatásainak eredményeit mutatja be, melyekben az előző fejezetben bemutatott multi-elliptikus interpoláció technikáját hálónélküli módszerek konstrukciójára használjuk. Időrendben az első ilyen eredmény az volt, amikor a multi-elliptikus interpolációt a perem-integrálegyenlet módszer duális reciprocitási módszerére alkalmaztuk. E megközelítés lényege, hogy bizonyos tartományon vett integrálok kiszámítását peremintegrálok kiszámítására vezeti vissza, így magának a perem-integrálegyenlet módszernek az alkalmazhatóságát kiterjeszti inhomogén és/vagy nemlineáris egyenletekre is. A duális reciprocitási módszer alapgondolata nem más, mint egy szórt pontú interpoláció (amely ennélfogva nem igényli a tartomány végeselemes diszkretizálását, pusztán interpolációs alappontok elhelyezését), így nem meglepő, hogy az előző fejezet interpolációs módszere itt is alkalmazható, méghozzá figyelemreméltó számításigény-csökkenés mellett. A további szakaszokban a hagyományosabb, radiális bázisfüggvényeken alapuló hálónélküli módszerek helyett multi-elliptikus interpoláción alapuló hálónélküli módszereket konstruálunk és analizálunk. Külön megemlítjük a Laplace-Helmholtz-interpolációra alapozott megoldási módszert, mint a Laplace-egyenlet (és általánosabb elliptikus, de homogén egyenletek) egy különösen hatékony hálónélküli megoldási módszerét, továbbá a regularizált alapmegoldás-módszert, a perem-rekonstrukció módszerét: újra hangsúlyozzuk, hogy az értekezésben bemutatott technikák elkerülik a nagyméretű, teljesen kitöltött és rosszul kondícionált mátrixokkal járó numerikus problémákat, melvek a hagyományosabb, radiális bázisfüggvényeken alapuló módszerek komoly gyakorlati hátránya.

A fejezetet – és az egész értekezést – a lokális és újraglobalizált hálónélküli sémák algoritmusainak bemutatása zárja. A lokális sémák lényegében általánosított véges differencia módszereknek tekinthetők, a sémák konstrukciója azonban nem a hagyományos Taylor-sorfejtésen, hanem ugyancsak a radiális bázisfüggvény-módszeren alapul (azt lokálisan alkalmazva, minden diszkretizálási pontban csak annak bizonyos szomszédait használva). A multielliptikus interpoláció itt is sikerrel alkalmazható: így nyerjük az újraglobalizált sémákat, melyek műveletigénye mindazonáltal mérsékelt marad. A módszert példaként a Stokesegyenletrendszer hálónélküli megoldására is alkalmazzuk.

Az értekezésben bemutatott új módszerek közös alapgondolatát a multi-elliptikus interpoláció jelenti. Erre alapozva, ezen módszerek lehetővé teszik a szokásos elliptikus másodrendű parciális differenciálegyenletek "visszavezetését" *magasabbrendű* parciális differenciálegyenletek megoldására, melyek ugyanakkor az eredeti probléma tartományától és annak peremétől teljesen függetlenek, így a QT-hálós multigrid technikával hatékonyan megoldhatók. Röviden szólva tehát, egy peremérték feladat megoldása során a számítási munka zömét nem annyira a differenciálegyenlet megoldása, hanem a *perem* megfelelő leírása jelenti (hagyományosan: hálógenerálás), és épp ez az, aminek elkerülését ill. minimálisra redukálását a bemutatott módszerek lehetővé teszik.

Végezetül, a pályázó szeretné köszönetét kifejezni az Országos Tudományos Kutatási Alapprogramok (OTKA) szervezetének az eddigi kutatások részbeni finanszírozásáért az alábbi kutatási témák keretében: T4105 (1992-94), T17373 (1995-97), T47287 (2004-2006).

1. Egyenlőtlen felbontású cellarendszerek (QT-hálók)

1.1. QT-hálók generálása, regularizálása

Ebbe a szakaszban összefoglaljuk az egyenlőtlen felbontású cellarendszerek előállítására szolgáló quadtree (QT-) algoritmus lényegét. Az algoritmus egy (általában) nemekvidisztáns, nem-uniform, de *derékszögű* cellafelbontást eredményez. A cellastruktúra kialakítása teljesen automatikus, az algoritmus vezérlése általában egy véges ponthalmazzal történik.

E szakasz eredményei javarészt elég régóta ismertek, bár elsősorban *nem* a numerikus matematikában ([13], [16], [71], [77]). Mégis fontosnak láttuk összefoglalni a fő eredményeket, mert a QT-cellarendszerre alapozott többszintű technikák – rendkívüli robusztusságuknak köszönhetően – alapvető szerepet játszanak az értekezésben bemutatott numerikus módszerek konstruálásában.

A quadtree/octtree algoritmus: Jelöljön $\Omega_0 \subset \mathbb{R}^2$ egy kiindulási négyzetet, és legyen $S_0 \coloneqq \{x_1, x_2, ..., x_N\} \subset \Omega_0$ egy véges ponthalmaz, melynek elemeit *vezérlő pontoknak* nevezzük. Legyenek $N_{\min}, L_{\max} \in \mathbb{N}$ adott nemnegatív egészek. A *quadtree (QT) algoritmus* az alábbi, rekurzív módon definiált felbontási eljárás (a szemléletesség kedvéért egy szimbolikus, Pascal-szerű programozási nyelven leírva):

```
procedure build(\Omega, S, L);

begin

if (L < L_{max}) and (|S| \ge N_{min}) then begin

...(bontsuk fel \Omega-t az \Omega_1, \Omega_2, \Omega_3, \Omega_4

egybevágó rész-négyzetekre)...

build(\Omega_1, S \cap \Omega_1, L+1);

build(\Omega_2, S \cap \Omega_2, L+1);

build(\Omega_3, S \cap \Omega_3, L+1);

build(\Omega_4, S \cap \Omega_4, L+1);

end;

end;
```

ahol |S| jelöli az S halmaz pontjainak számát. Az Ω négyzetet tehát négy egybevágó részre bontjuk, ha legalább N_{\min} vezérlő pontot tartalmaz, és ugyanakkor az L paraméter – az aktuális felbontási szint – még nem érte el a maximális L_{\max} szintet. Ezek után a kiindulási Ω_0 négyzet QT-felbontása (*QT-cellarendszer*, *QT-háló*) a

build($\Omega_0, S_0, 0$);

eljáráshívással történik.

A felbontás során keletkező négyzeteket celláknak nevezzük.

Az algoritmus egy olyan egymásba ágyazott cellarendszert szolgáltat, melynek legfinomabb cellái (melyeket már nem osztunk fel tovább) általában különböző méretűek. A cellarendszer tehát nem uniform és nem ekvidisztáns, ugyanakkor a vezérlő pontok környezetében besűrűsödik, melyet *lokális finomításokként* interpretálunk. Ekvidisztáns cellarendszert az $N_{\min} := 0$ választással nyerünk (S_0 -tól függetlenül). Az algoritmus számításigénye meglepően kevés, $O(N \cdot L_{\max})$ értékkel becsülhető. Tipikus, hogy $L_{\max} \leq C \cdot \log N$ valamilyen *N*-től független *C* konstanssal: ekkor a műveletigény $O(N \log N)$.

A cellarendszer természetes módon reprezentálható egy fa-struktúrájú gráffal, melynek elemei az egyes cellák. A gyökérelemnek az Ω_0 négyzet felel meg, az élek pedig a felbontá-sokat reprezentálják.

Az algoritmus nyilvánvalóan általánosítható más véges dimenziós terekre. Egydimenziós megfelelője a bin-tree algoritmus (szisztematikus szakaszfelezések), mely egyidejűleg egy gyors rendezési algoritmust is ad a vezérlő ponthalmaz elemeire. A háromdimenziós térben ennek megfelelője az *octtree* algoritmus: itt egy kocka nyolcfelé darabolásáról van szó. Nyilvánvaló az is, hogy a felbontási kritériumok meglehetősen szabadon változtathatók. Így pl. lehetséges lokális finomításokat generálni azokon a helyeken, ahol egy adott függvény adott értéket meghalad. Ha ez a függvény valamilyen probléma közelítő megoldását jellemző hibajellegű függvény, akkor *adaptív finomításokhoz* jutunk. Az sem kötelező, hogy *négyzetet* daraboljunk: az eljárás könnyen kiterjeszthető pl. konvex négyszögekre vagy akár háromszögekre is ([89]), bár ekkor annak eldöntése, hogy egy adott vezérlő pont melyik cellába esik, általában munkaigényesebb, mint a négyzet alakú cellák esetében.

QT-hálók regularizálása. Egy QT-cellarendszert *regulárisnak* nevezünk, ha bármely két szomszédos cella méretének aránya legfeljebb 2. Ez azt jelenti, hogy a cellaméretekben nincsenek nagy ugrások. Minden QT-cellarendszer regularizálható pótlólagos cellafelbon-tásokkal, és a regularizálás műveletigénye még mindig csak $O(N \log N)$.

A regularizálás jelentősége a QT-hálókon történő véges differencia ill. véges térfogat sémák definiálásakor van: reguláris QT-hálók esetén ui. a különböző cellakonfigurációk száma minimálisra csökken, ami a sémák definiálását jelentősen megkönnyíti.

Az *1.1. ábrán* egy nemreguláris QT-háló és annak regularizálása látható, melyet 150 db, az egységnégyzetben szabálytalanul elszórt pont generál: jól megfigyelhetők a vezérlő pontok környékén keletkezett lokális finomítások.



1.1. ábra. Nemreguláris és regularizált QT-cellarendszerek

Az 1.2. ábra olyan reguláris QT-hálókat mutat, melyet egy körvonal pontjai generálnak. Itt tehát *automatikusan* olyan háló alakul ki, mely egy tartomány (jelen esetben egy kör) pere-

mére sűrűsödik, ami sok esetben nagyon hasznos (pl. a tartományon kitűzött Laplace-egyenlet megoldásakor). Nyilvánvaló, hogy a cellák száma általában csak töredéke a legfinomabb cellák méretével mint rácstávolsággal egyező ekvidisztáns rács rácspontjai számának. Ez a cellarendszer "takarékosságát" jelzi.



1.2 .ábra. Körvonal által generált nemreguláris és regularizált QT-cellarendszerek

Szomszédkeresés QT-hálókban. A QT-hálók használatához minden cella esetében szükség lesz a szomszédos cellákra is. Szemben az uniform (egyenes- vagy görbevonalú) rácsokkal, a szomszédság megállapítása QT-hálók esetében nem triviális. Ezen segít a már említett gráfreprezentáció. Standard fa-bejáró algoritmusokat használva, a szomszédos cellák már egyszerűen, és kevés művelettel meghatározhatók.

Nevezzük egy cella *gyermekeinek* a cellafelbontás során kapott négy cellát. Nevezzük a felső kettőt (az 1. és 2. számút) *északi fekvésűnek*, a jobb oldali kettőt (a 2. és 4. számút) *keleti fekvésűnek* és így tovább (*1.3. ábra*).

1	2
3	4

1.3. ábra. Gyermek-cellák számozása a szomszédkereséshez

A következő algoritmus egy reguláris QT-cellarendszer egy adott levél-cellájának (mely már nincsen tovább-bontva) az északi szomszédját (szomszédait) szolgáltatja:

1.lépés: Haladjunk a gráfon felfelé (az ősök irányába) mindaddig, amíg a cella aktuális őse *déli* fekvésű lesz a saját szülő-cellájában. Ha ilyen ős nincs, akkor a cella a négyzet északi peremére illeszkedik, így nincs északi szomszédja.

2.*lépés*: Vegyük az 1.lépésben kapott ős-cella közvetlen északi szomszédját: ez testvér-cella lévén, azonnal adódik.

3.lépés: Haladjunk vissza a gráfon ugyanúgy, ahogy az 1. lépésben felfelé haladtunk, a keletnyugati irányítást megtartva, de mindig a déli fekvésű gyermek-cellát véve. A kiindulási cella felbontási szintjével azonos szinten így eljutunk a kiindulási cellával azonos méretű cellához, mely annak közvetlen északi szomszédja. (Ha eddig a szintig nem tudunk visszamenni, akkor – a regularitás következtében – az eggyel alacsonyabb szintig biztosan eljuthatunk, és ekkor ez lesz a kiindulási cella egyetlen északi szomszédja.)

4.lépés: Ha a 3.lépésben kapott azonos méretű északi szomszéd gyermektelen, akkor ez az egyetlen északi szomszéd. Ellenkező esetben e cella 3. és 4. számú (azaz déli fekvésű) gyermekei a kiindulási cella két északi szomszédja: a regularitás értelmében pedig nincs is több, mert ezek a cellák már szükségképpen gyermektelenek.

Megmutatható, hogy az összes cella összes szomszédja megkeresésének műveletigénye még mindig csak $O(N \log N)$, tehát nem több, mint a generálás és a regularizálás műveletigénye. A szomszédos cellák megkeresésének algoritmusa egyszerűen általánosítható egy rendezetlen síkbeli (térbeli) ponthalmaz esetére, az egyes *pontok* legközelebbi szomszédainak megkeresésére. A "naiv" megoldás (az összes pontpár távolságának összehasonlítása) nyilván $O(N^2)$ műveletet igényel, ami nagy N esetén a QT-hálós algoritmus műveletigényénél sokkal nagyobb.

1.2. Néhány közvetlen alkalmazás

A quadtree/octtree algoritmus a komputeres grafikából származik [71]; bizonyos adatbázisokban is célszerű a QT-adatstruktúra használata [84]. Az algoritmus önmagában is alkalmazható a numerikus modellezésben. E szakaszban két közvetlen alkalmazást mutatunk: egy harmadik – a multipólus módszerrel összefüggésben – külön szakaszban kerül bemutatásra.

Végeselemes hálók automatikus generálása. Nyilvánvaló, hogy minden reguláris QT-cellarendszer a cellák alkalmas felvágásával triangularizálható: ehhez elég a cellaközéppontokat a cellacsúcspontokkal és – amennyiben kisebb méretű szomszédok is vannak – a megfelelő cellaoldalak felezőpontjaival összekötni (*1.4. ábra*):



1.4. ábra. Körvonal által generált reguláris QT-cellarendszer triangularizálása

Megjegyezzük, hogy az ily módon keletkező háromszögek mindegyike egyenlő szárú derékszögű háromszög, azaz kicsi ($\pi/4$ -nél kisebb) szögek sehol sem keletkeznek: ismeretes, hogy ez a nyert háromszöghálón definiált véges elem módszerek stabilitása szempontjából fontos tulajdonság.

Egy másik közvetlen alkalmazás a részecskeszemléletű szimulációkban fontos **pontsűrűség-becslés**. Tegyük fel, hogy az $x_1, x_2, ..., x_N \in \mathbf{R}^2$ pozíciókban egy-egy azonos tömegű részecskét helyeztünk el (ahol N nagy szám: százezres vagy milliós nagyságrendű is lehet), és a probléma ezen részecskék meghatározta koncentrációmező minél pontosabb előállítása. Ennek szokásos módja az, hogy - valamilyen előzetes információra támaszkodva - megadunk egy cellaméretet, és ilyen méretű cellarendszerrel lefedjük a szóban forgó tartományt: az egyes cellákban összeszámolva az ott-tartózkodó részecskéket, ezek száma megadja a cellára jellemző koncentrációértékeket (konstans szorzó erejéig). A fő kérdés a cellaméret alkalmas definiálása. Ha a cellaméret túl nagy, akkor a koncentráció-eloszlás térbeli felbontása lesz rossz; ha az túl kicsi, akkor a becslés hibája lesz nagy. Egyfajta optimális kompromisszumot jelent az, ha térben változó cellaméretet alkalmazunk, éspedig olyat, hogy minden cellában kb. azonos számú részecske esik: pontosan ilyen cellarendszert generál a QT-algoritmus, ha vezérlő ponthalmaz gyanánt a részecskepozíciók halmazát választjuk [29]. Ezt illusztrálja az 1.5. ábra, ahol egy egyenlőtlen sűrűségű részecskeeloszlás és az általa generált QT-háló látható: az ábra jól szemlélteti, hogy a háló térbeli felbontása követi a lokális pontsűrűségeket.



1.5. ábra. Nem-egyenletes sűrűségeloszlású ponthalmaz, és az általa generált QT-háló

1.3. Véges differencia és véges térfogat módszerek QT-hálókon

Ebben a szakaszban felvázoljuk a QT-hálóknak *számítási rácsként (hálóként)* való használatát. Az ötlet a pályázó nevéhez fűződik, az első ilyen jellegű publikációk 90-es évek elejéig nyúlnak vissza [27], [28], [30], [31], [33], [35], [36], [37], [38], [39], [72]. Az így kapott módszer közvetlenül használható elliptikus peremértékfeladatok megoldására, és közvetve – az idő szerint végrehajtott diszkretizálással és az operátor splitting elv alkalmazásával – transzportfolyamatok Lagrange-i (mozgó koordinátarendszeres) modellezésére is.

A reguláris QT-hálók szerkezete nem lényegesen bonyolultabb a hagyományos (uniform, ekvidisztáns) rácsokénál, de lényegesen egyszerűbb egy szabálytalan, nem strukturált sokszöghálóénál. Várható tehát, hogy a szokásos differenciáloperátorok diszkretizálása nem lesz sokkal bonyolultabb, mint az ekvidisztáns rácsok esetben. Ez valóban így is van. Csak a Laplace-operátor diszkretizálására koncentrálunk, az elsőrendű deriváltak esete ennél egyszerűbb és eléggé kézenfekvő. Többféle diszkretizálási stratégia között válogathatunk, a következőkben ezekből mutatunk be néhányat.

Cella-csúcsponti sémák. Ekkor egy tetszőleges $u: \Omega_0 \to \mathbb{R}$ függvényt a cellák csúcspontjaiban felvett értékeinek sorozatával diszkretizálunk. Legyen *C* egy centrálisnak tekintett cellacsúcspont, amely nem illeszkedik Ω_0 peremére. Kihasználva a QT-háló regularitását, mindössze két, lényegesen különböző esetet kell megkülönböztetni (*1.6. ábra*):



1.6. ábra. Cellakonfigurációk cella-csúcsponti sémák esetén

(a) C-re négy cella illeszkedik: ekkor $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ és $\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$ külön-külön is diszkretizálhatók közönséges nem feltétlen centrális sémákkal így Au-ra 5-pontos séma írható fel:

közönséges, nem feltétlen centrális sémákkal, így Δu -ra 5-pontos séma írható fel:

$$\Delta u_C \coloneqq \frac{u_N + u_W + u_S + u_E - 4u_C}{h^2}$$

(b) C-re három cella illeszkedik: ekkor Δu diszkretizálása az alábbi sémával történik (h jelöli a kisebbik cella oldalhosszát):

$$\Delta u_C \coloneqq \frac{u_N + u_W + u_S + u_E - 4u_C}{\frac{3}{2}h^2}, \text{ abol } u_E \coloneqq \frac{u_N + u_{NW} + u_{SW} + u_S}{4}$$

Standard Taylor-sorfejtéses technikával megmutatható, hogy e sémák a Laplace-operátort legalább elsőrendben approximálják [43].

Cellaközepű sémák. Ez a fajta diszkretizáció sokkal jobban illeszkedik a QT-adatstruktúrához, mivel az $u: \Omega_0 \rightarrow \mathbf{R}$ függvényeket most a cellaközéppontokban felvett értékeivel diszkretizáljuk, így minden cellához pontosan egy diszkrét függvényérték tartozik. A sémák konstrukciója történhet pl. a *Taylor-sorfejtés* alapján: ekkor, a regularitást kihasználva csak korlátos számú különböző cellakonfigurációt kell figyelembe venni, bár ezek száma még mindig kényelmetlenül nagy [37], [43]. Két jellemző esetet kiragadva:



1.7. ábra. Két tipikus cellakonfiguráció cellaközépponti sémák esetén

Az első esetben:

$$\Delta u_C := \frac{20u_N + 24u_W + 20u_S + 16u_{NE} + 16u_{SE} - 96u_C}{21h^2}$$

A másodikban pedig:

$$\Delta u_C := \frac{18u_N + 18u_W + 16u_S + 6u_{SE} + 8u_E - 66u_C}{21h^2}$$

Mindkét séma elsőrendben approximálja a Laplace-operátort, ami standard Taylor-sorfejtési technikával nehézség nélkül igazolható.

Sokkal egyszerűbbek az *integrált sémák* (box-sémák, véges térfogati sémák), melyekhez úgy juthatunk, hogy a Δu kifejezést integráljuk a *C* centrális cellán, és alkalmazzuk a Greenformulát: $\int_C \Delta u d\Omega = \int_{\partial C} \frac{\partial u}{\partial n} d\Gamma$, úgyhogy csak a ∂C cellaoldalakon keresztüli fluxusokat kell approximálni. A regularitás következtében mindegyik oldali fluxus számításakor mindössze három különböző cellakonfigurációra kell tekintettel lenni (ezekből is csak kettő különbözik lényegesen), melyet a keleti cellaoldalra nézve a *1.8. ábrán* vázoltunk:



1.8. ábra. Cellakonfigurációk cellaközépponti, integrált sémák esetén

Az egyes esetekben a fluxusok approximációja az alábbi formulákkal történik (*ICI* jelenti a *C* cella oldalhosszúságát):

(a)
$$\int_{\Gamma} \frac{\partial u}{\partial n} d\Gamma \sim \frac{u_E - u_C}{|C|} \cdot |C| = u_E - u_C$$

(b)
$$\int_{\Gamma} \frac{\partial u}{\partial n} d\Gamma \sim \frac{\frac{u_{NE} + u_{SE}}{2} - u_C}{\frac{3}{4} |C|} \cdot |C| = \frac{2}{3} u_{NE} + \frac{2}{3} u_{SE} - \frac{4}{3} u_C$$

(c)
$$\int_{\Gamma} \frac{\partial u}{\partial n} d\Gamma \sim \frac{u_E - \frac{u_C + u_N}{2}}{\frac{3}{2} |C|} \cdot |C| = \frac{2}{3} u_E - \frac{1}{3} u_N - \frac{1}{3} u_C$$

Ugyanezek a sémák alkalmasak elsőrendű deriváltak diszkretizálására is. A Bramble-Hilbertlemma [7] alapján megmutatható, hogy az így nyert sémák legalább elsőrendűek (a $H^1(\Omega_0)$ - norma szerint).

Még egyszerűbb a fluxusok alábbi közelítése, mely már csak centrális sémákat tartalmaz. Az *1.8. ábrán* jelölt három eset közül az első kettőben legyen most is:

$$\int_{\Gamma} \frac{\partial u}{\partial n} d\Gamma \sim \frac{u_E - u_C}{|C|} \cdot |C| = u_E - u_C,$$

a harmadikban pedig:

$$\int_{\Gamma} \frac{\partial u}{\partial n} d\Gamma \sim \frac{u_E - u_{P(C)}}{|E|} \cdot |C| = \frac{1}{2} u_E - \frac{1}{2} u_{P(C)},$$

ahol P(C) jelöli a C cella szülőjét, amely a regularitás miatt biztosan azonos méretű E-vel: az $u_{P(C)}$ értéket pedig a gyermek-cellákhoz tartozó értékek számtani közepe definiálja. Ez a diszkretizálási technika különösen jól illeszkedik a QT-hálókon definiált többszintű (multi-grid) módszerekhez, és szintén legalább elsőrendű.

Hasonló módon konstruálhatók az *eltolt hálós* (staggered grid) sémák, melyek különösen áramlási problémák esetén népszerűek. Itt bizonyos fizikai paramétereket (jellemzően: sebesség- és fajlagos hozam-komponenseket) a cella *oldalaihoz* (azok középpontjaihoz), míg a többit (nyomás, vízmélység) a cellák középpontjaihoz csatoljuk [43].

A fenti sémák nem a legpontosabbak, de talán a legegyszerűbbek. QT-hálós környezetben elvileg nem lehetetlen magasabbrendű sémákat konstruálni, de akkor épp az egyszerűséget veszítjük el, mert a különböző cellakonfigurációk száma gyorsan nő, ha a közvetlen oldalszomszédokon kívül más cellákat is bevonunk a sémába.

Mindegyik séma közös jellemzője, hogy bár a szó szoros értelmében *tartomány típusú* módszert definiál, lényegesen kevesebb ismeretlent vezet be, mint a klasszikus véges differencia vagy véges elem módszerek, továbbá a feladat geometriájából is sokkal kevesebb információt használ. Elkerülhető tehát a numerikus hálógenerálás nehéz problémája, ennek helyébe a jóval egyszerűbb QT-algoritmus lép. Miután pedig ez a vezérlő pontokon kívül semmiféle a priori információt nem kíván, a QT-hálókon értelmezett diszkretizációs módszerek egyfajta "fekete doboznak" tekinthetők, melyekhez egyedül a vezérlő pontokat kell input adatként megadni. Ilyen értelemben a QT-hálók *rácsnélküli* módszereknek tekinthetők.

1.4. Többszintű (multigrid) módszerek QT-hálókon

A hatékony numerikus modellezéshez egy mégoly pontos diszkretizáció önmagában még kevés, ezt egy robusztus megoldási algoritmussal kell összekötni. Elliptikus parciális differenciálegyenletek esetére az egyik leggyorsabb algoritmus az 1960-as évek elején felbukkant és 1976-ban újra felfedezett módszer, a *multigrid módszer* ([10], [69]). Itt a megoldandó problémát egyszerre több diszkretizációs szinten (az elterjedt terminológia szerint: *durva* és *finom hálókon*) is kezeljük. A durvább hálókon nyert közelítéseket lehetséges a finom hálókon vett megoldások javítására oly módon felhasználni, hogy az eljárás teljes műveletigénye a bevezetett ismeretlenek számának csupán *első* hatványával nő. A multigrid módszerek konstruálásához jellemzően az alábbi lépések szükségesek: Ha az eredeti probléma Ax = balakú egy X Banach-térben (ahol $A: X \to X$ adott lineáris operátor, $b \in X$ adott vektor), akkor:

- véges dimenziós terek egymásba ágyazott X₀ ⊃ X₁ ⊃... ⊃ X_M sorozatának definiálása (ezekben történnek a különböző szintű diszkretizációk), ahol X₀ a legfinomabb, X_M a legdurvább háló;
- az egyes szintek közötti összeköttetést létesítő P_k: X_k → X_{k+1} leszűkítési operátor (restrikció) Q_k: X_{k+1} → X_k kiterjesztési operátor (prolongáció) konstruálása;
- az eredeti problémának minden szinten egy, az eredetivel konzisztens $A_k x_k = b_k$ alakú diszkretizálása;
- végül minden szinten egy, a diszkrét problémával konzisztens *simító eljárás*, azaz egy *x̃_k* := *B_kx_k* + *f_k* alakú javító formula konstruálása, amely pl. egy konvergens iterációs el- járás is lehet, mindazonáltal a célja csupán a hiba bizonyos Fourier-komponenseinek csök-kentése.

A legegyszerűbb, mégis meglepően jól működő multigrid módszer a *kaszkád-módszer*. Ebben először a legdurvább hálón oldjuk meg a problémát (ennek műveletigénye csekély, mert X_M alacsony dimenziós), majd a *k*-adik szinten alkalmazzuk a simító eljárást:

$$x_k^{(n+1)} \coloneqq B_k x_k^{(n)} + f_k$$

mégpedig tipikusan csak néhányszor, úgyhogy e lépések is kevés számú művelettel elvégezhetők. A simító iteráció kezdőértékét az előző szintről vesszük:

$$x_k^{(0)} \coloneqq Q_k x_{k+1}^{(n_{\max})}$$

Elérve a legfinomabb szintre, egy, már rendszerint igen jó közelítést nyerünk, mely tovább javítható kifinomultabb multigrid technikákkal (multigrid ciklus, Full Multigrid Algorithm) [10], vagy akár prekondícionerként is használható valamilyen (pl. konjugált gradiens típusú) iterációhoz.

A multigrid technika fenti formája eléggé régóta ismert. Kutatásainkban az igazi áttörést az jelentette, amikor ezt a módszert QT-hálókon alkalmaztuk ([26], [27], [28], [30], [33]). Ez, a QT-hálók speciális gráf-szerkezetét kihasználva, meglehetősen természetes módon elvégezhető. A *k*-adik diszkretizálási szint egyszerűen a QT-fa *k*-adik szinten való elvágásával adódik, azaz mindazon cellák alkotják, melyek felbontási szintje vagy pontosan *k*, vagy *k*-nál kisebb, de gyermektelenek. Az egyes szinteken a diszkrét problémák az előző szakaszban leírt

módon definiálhatók (a Poisson-egyenlet esetére), a simító eljárás a közönséges Seideliteráció (vagy alulrelaxálás) lehet. A leszűkítés és a kiterjesztés operátorai egyszerű átlagolással ill. súlyozással konstruálhatók. Ha a C cella gyermekeit az egyszerűség kedvéért $C_1,...,C_4$ jelöli, akkor a leszűkítés:

$$u_C \coloneqq \frac{1}{4} (u_{C_1} + u_{C_2} + u_{C_3} + u_{C_4}).$$

A kiterjesztés legegyszerűbb esetben a konstans kiterjesztés:

$$u_{C_1} \coloneqq u_{C_2} \coloneqq u_{C_3} \coloneqq u_{C_4} \coloneqq u_C,$$

de ennél simább kiterjesztés is konstruálható (1.9. ábra):



1.9. ábra. Jelölések a kiterjesztési operátor konstruálásához

$$\begin{split} u_{NW} &:= \frac{2u_C + u_N + u_W}{4}, \qquad u_{SW} &:= \frac{2u_C + u_S + u_W}{4} \\ u_{NE} &:= \frac{2u_C + u_N + u_E}{4}, \qquad u_{SE} &:= \frac{2u_C + u_S + u_E}{4} \end{split}$$

1.5. Alkalmazások a numerikus hidraulikában

A QT-hálók és a multigrid módszer összekapcsolása bizonyos elliptikus parciális differenciálegyenletekre olyan robusztus módszert eredményezett, mely a legváltozatosabb esetekben is alkalmazhatónak bizonyult, egyebek közt Lagrange-i szemléletű modellezésekben is, oly módon, hogy minden egyes időlépésben új QT-hálót generálunk a mozgó pontokra alapozva.

A legközvetlenebb alkalmazás a Poisson-egyenlet megoldása:

$$\Delta u = f$$

amelynek közvetlen fizikai jelentése is van (potenciálos áramlás, stacionárius Darcy-féle szivárgás, stacionárius hővezetés stb. modellezése) ugyanakkor egy sor nemstacionárius feladatban is fellép az egyes időszinteken megoldandó részproblémaként.

A stacionárius szivárgási feladatoknál maradva, ha a szivárgási közeg inhomogén (de izotróp), akkor a jelenséget az általánosabb

div k grad
$$u = f$$

elliptikus egyenlet írja le, ahol $k: \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ adott, pozitív értékű függvény. Erre az előző szakaszban tárgyalt QT-hálós diszkretizáció csekély módosítással adódik. Ilyen jellegű problémára vezet a sekély tavakban kialakuló szélkeltette áramlások vizsgálata is. Ezt a jelenséget a

$$\operatorname{div} \frac{A}{h} \operatorname{grad} \Psi = B \cdot \operatorname{rot} \left(\frac{\| \mathbf{W} \| \cdot \mathbf{W}}{h} \right)$$

egyenlet írja le, ahol ψ az áramlás áramfüggvénye, *A* a fenék-, *B* a szélsúrlódást leíró tag, *h* a vízmélység, **W** pedig a szélsebesség vektora. Megjegyezzük, hogy a fenti probléma könnyen kibővíthető komplex vízminőségi modellé. Csekély számításigénye miatt a QT-hálós diszkretizáció megfelelőnek bizonyult éves nagyságrendű folyamatok elfogadható idő alatt való szimulálására.

A QT-hálók rugalmas felhasználhatósága lehetővé tette Lagrange-i (mozgó koordinátarendszeres) modellezéseket is. Ennek legegyszerűbb esete a

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \operatorname{grad} c - D\Delta c = 0$$

konvekciós-diffúziós egyenlet Lagrange-i megoldása, mely lehetővé teszi a konvektív deriváltak diszkretizálásának és ezáltal a numerikus diffúzió jelenségének elkerülését. Cserébe ezért, minden egyes időlépésben egy diffúziós jellegű problémát kell megoldani. A probléma egy igen gazdaságos megoldását a mozgó (Lagrange-i) pontok által generált QT-hálós diszkretizálás ill. multigrid módszer adja. Itt markánsan kihasználható a QT-hálók generálásának csekély műveletigénye, mert minden egyes időlépésben új QT-hálót kell generálni a mozgó pontok aktuális helyzeteire alapozva.

Szintén Lagrange-i alkalmazás a kétdimenziós Navier-Stokes-egyenletek megoldása, amikor az egyenleteket örvényfüggvény-áramfüggvény alakban írjuk fel:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \operatorname{grad} \omega - \mathbf{v} \Delta \omega = 0$$
$$\Delta \psi = -\omega$$

és az ω örvényességet véges sok, egy-egy pontra koncentrált eloszlással, ún. örvényrészecskék együttesével közelítjük. (Itt ω az örvényfüggvényt, ψ az áramfüggvényt jelöli, ν pedig a kinematikai viszkozitást.) Az áramfüggvényre vonatkozó Poisson-egyenletet az örvényrészecskék által generált QT-hálón oldottuk meg minden egyes időlépésben. A módszer hidrodinamikai instabilitások (örvényleválás, -felcsavarodás, Kelvin-Helmholtz-instabilitás) modellezésére is alkalmasnak bizonyult.

Megjegyzés: Az e szakaszban leírt eredmények (QT-hálókon differenciasémák és multigrid módszerek konstrukciója) mind a pályázó eredményei; számos alkalmazást is a pályázó és munkatársai dolgoztak ki. Mindezek az alábbi publikációkban lettek közzétéve:

- a differenciasémák és multigrid technikák konstrukciójával kapcsolatos eredmények: [33];
- alkalmazások a 2D Navier-Stokes-egyenletekre: [28], [30];
- alkalmazások tavi modellezésben: [35], [43];
- egyéb alkalmazások (peremelem módszer kiváltása ill. transzportfolyamatok Lagarange-i modellezése): [26], [27].

A sémák approximációs tulajdonságait részletesen [34]-ban vizsgáltuk. Magyar nyelven a Hidrológiai Közlöny hasábjain 1994-95-ben egy (később Vitális Sándor Nívódíjjal elismert) négyrészes cikksorozatot jelentettünk meg, melyben – áramlási problémákra koncentrálva – részleteztük a most vázolt technika lényegét és addigi alkalmazásait [36], [37], [38], [39]. Hasonló témakörökkel foglalkoznak a pályázó [41], [46] kutatási jelentései is. A pályázó említett publikációin alapulnak a vízmozgással és transzportfolyamatokkal foglalkozó [6], [65], [66], [81], [90] cikkek is.

1.6. Alkalmazások a gyors multipólus módszerben

Sok problémában, különösen a 2D pontforrások által keltett potenciálok kiértékelése kapcsán fellép az alábbi probléma. Tegyük fel, hogy az alábbi típusú összegeket kell kiszámítani:

$$\Phi(z_k) \coloneqq \sum_{\substack{j=1\\j \neq k}}^{N} \alpha_j \Phi_j(z_k) \qquad (k=1,2,...,N)$$
(1.6.1)

ahol $\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_N \in \mathbb{C}$ adott együtthatók, $z_1, z_2, ..., z_N$ (most komplex számoknak tekintett) adott kétdimenziós vektorok, Φ_j -k pedig (valamilyen z_j körüli körön kívül konvergens) multipólus sorba fejthető függvények:

$$\Phi_j(z) \coloneqq a_0^{(j)} \log(z - z_j) + \sum_{r=1}^{\infty} \frac{a_r^{(j)}}{(z - z_j)^r}$$
(1.6.2)

Nyilvánvaló, hogy (1.6.1) "naiv" (definíció szerinti) kiértékeléséhez $O(N^2)$ művelet szükséges (mivel minden egyes Φ_j függvényérték kiszámításának műveletigénye egy *N*-től független konstanssal becsülhető, tekintve, hogy a gyakorlatban (1.6.2) kiértékelésekor az összegzést természetesen csak egy előre adott *p* indexig végezzük el).

Felhasználva azonban a multipólus sorokra vonatkozó *eltolási tételt* [83], mely szerint multipólus sorokat más középpont körüli multipólus sorokká lehet – kevés számítás árán – transzformálni, a műveletigény lényegesen csökkenthető. A stratégia az, hogy minden k indexre a z_k -hoz közeli pontok adalékát az (1.6.1) összegben közvetlenül számítjuk, míg a távoli pontok esetén több pont adalékát egyszerre számítjuk ki úgy, hogy a megfelelő multipólus sorokat közös középpontba transzformálva, egyesítjük azokat. A közeli-távoli osztálybasoroláshoz pedig pontosan az 1.1. szakaszban leírt QT-cellarendszer használható. Megmutatható, hogy ily módon a (4.8) kiértékelések össz-műveletigénye $O(N^2)$ -ről $O(N \log N)$ -re csökken.

A fenti kiértékelési módszert eredetileg *pontforrások* keltette potenciálok gyors kiértékelésére használták [11], [14], [67], később a 2.2. szakaszban leírt radiális bázisfüggvények módszerrel kombinálva, a szórt pontú interpoláció problémakörében alkalmazták sikerrel [3]. A pályázó a módszert a perem-integrálegyenlet módszerben fellépő perem-integráloperátorok gyors kiértékelésére terjesztette ki, mely kombinálva a perem-integrálegyenletekre szintén a pályázó által kifejlesztett multigrid módszerrel, különösen robusztus módszert eredményezett. A következőkben ennek lényegét tekintjük át.

A perem-integrálegyenlet (peremelem) módszer. Ez a módszer – jóllehet, a hozzá szükséges matematikai eszközök már régóta ismeretesek – az elmúlt negyedszázadban futott be látványos karriert (ld. pl. [9]). Fő gondolata, hogy a megoldandó, valamilyen *tartományon* kitűzött parciális differenciálegyenletet visszavezetjük egy olyan integrálegyenletre, mely a tartomány *peremén* van kitűzve. Ezáltal egyrészt sokkal kevesebb ismeretlent vezetünk be, mint a tartomány típusú módszerek esetében, másrészt elmarad a tartomány (ráccsal vagy hálóval való) diszkretizálása: ennek helyébe a perem diszkretizálásának jóval egyszerűbb problémája lép.

A módszer a harmadik Green-formulán alapszik, mely szerint minden, elég sima U függvény egy (szintén elég sima) Ω tartomány belsejében felvett értékei két perem- és egy tartományon vett integrállal fejezhetők ki. Kétdimenziós tartomány esetében:

$$U(z) = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int (\frac{\partial}{\partial n_y} \log \frac{1}{\|z - y\|}) u(y) d\Gamma_y + \frac{1}{2\pi} \int (\log \frac{1}{\|z - y\|}) v(y) d\Gamma_y$$

$$-\frac{1}{2\pi} \int (\log \frac{1}{\|z - y\|}) f(y) d\Omega_y$$
(1.6.3)

ahol $\Gamma := \partial \Omega$, $u := U |_{\Gamma}$, $v := \frac{\partial U}{\partial n} |_{\Gamma}$ és $f := \Delta u$.

A jobb oldal első integrálja egy klasszikus kettősréteg potenciál, a második egy egyszerű réteg potenciál, a harmadik egy logaritmikus Newton-potenciál. Mindhárom integrál magfüggvénye a Laplace-operátor alapmegoldásából származik.

Tekintsük a $\Delta u = f$ Poisson-egyenletet, melyet valamilyen szokásos peremfeltétellel látunk el. A perem-integrálegyenlet (vagy peremelem) módszer alapgondolata, hogy *z*-vel valamilyen $x \in \Gamma$ peremponthoz tartva, vizsgáljuk (1.6.3) két oldalának limeszét. A bal oldal nyilván u(x)-hez tart, a jobb oldalon a megfelelő potenciálok folytonosságára ill. ugrására vonatkozó klasszikus tételeket alkalmazzuk. Innen kapjuk a Poisson-egyenlet *perem-integrál-egyenletét*:

$$\alpha(x)u(x) + (Ku)(x) - (Rv)(x) = -(Lf)(x) , \qquad (1.6.4)$$

ahol $\alpha(x)$ jelöli a Γ perem x-beli belső törésszögét, K, R, L pedig a kettős-, egyszerű- ill. logaritmikus potenciált:

$$(Ku)(x) \coloneqq \int \frac{\left\langle x - y, n_y \right\rangle}{\Gamma \parallel x - y \parallel^2} u(y) d\Gamma_y,$$

$$(Rv)(x) \coloneqq \int (\log \frac{1}{\parallel x - y \parallel}) v(y) d\Gamma_y,$$

$$(Lf)(x) \coloneqq \int (\log \frac{1}{\parallel x - y \parallel}) f(y) d\Omega_y,$$

(1.6.5)

és $x \in \Gamma$ tetszőleges perempont.

Az (1.6.4) egyenletben az ismeretlen függvények csak az u, v peremfüggvények.

(1.6.4)-hez csatolva a Poisson-egyenletre tett peremfeltételeket, az így nyert rendszerből – valamilyen szokásos diszkretizáció után – u, v közelítően meghatározható. Ha u, v mindketten ismertek már a teljes Γ peremen, az U megoldás Ω belsejében felvett értékeit további egyenletmegoldás nélkül, a (1.6.3) Green-formula közvetlen implementálásával kaphatjuk.

Ha az (1.6.3) egyenlőségben nem az oldalak értékeinek, hanem normális irányú deriváltjainak limeszét számítjuk ki a Γ peremen, akkor egy (1.6.4)-hez hasonló szerkezetű egyenletet nyerünk (*derivált perem-integrálegyenlet*):

$$\pi \cdot v(x) + (K^* v)(x) - (Qv)(x) = -(L_1 f)(x) , \qquad (1.6.6)$$

ahol K^* a *K* operátor adjungáltja, *Q* egy hiperszinguláris operátor (a kettősréteg potenciál normális irányú deriváltja), *L*₁ pedig a Newton-potenciál normális irányú deriváltja. Ha a Γ perem elég sima, akkor a fellépő perem-integráloperátorok folytonossági tulajdonságai jól jellemezhetők: $K \in L(H^{1/2}(\Gamma))$, $K^* \in L(H^{-1/2}(\Gamma))$, $R \in L(H^{-1/2}(\Gamma), H^{1/2}(\Gamma))$, végül $Q \in L(H^{1/2}(\Gamma), H^{-1/2}(\Gamma))$.

A módszer – lényegét tekintve változatlan gondolatmenettel – háromdimenziós és általánosabb parciális differenciálegyenletekre is kiterjeszthető, ha explicit módon ismert a szóban forgó egyenlet egy alapmegoldása. Ez a helyzet másodrendű, *állandó együtthatós* parciális differenciálegyenletek esetében. Időfüggő problémákra szintén alkalmazható a módszer, az idő szerinti szokásos diszkretizálást alkalmazva, sőt, lehetséges időfüggő alapmegoldások használata is. Nem ez a helyzet viszont változó együtthatós és/vagy nemlineáris problémák esetén. Ilyenkor a feladatot valamilyen algoritmus szerint állandó együtthatós egyenletek sorozatára szokás visszavezetni.

Numerikus problémák. Amikor a peremelem módszer használható, akkor általában jóval gazdaságosabb a hagyományos véges differencia ill. véges elem módszereknél. Modell-feladatként, tekintsük pl. az egységnégyzeten kitűzött Laplace-egyenletet Dirichlet-perem-feltétellel. Ekvidisztáns $N \times N$ -es ráccsal diszkretizálva és véges differencia módszert alkalmazva, a bevezetett ismeretlenek száma $O(N^2)$, a diszkrét egyenletek mátrixa $N^2 \times N^2$ -es szimmetrikus, ritka mátrix. Megoldásához egyszerű Gauss-eliminációt használva, a szükséges műveletszám $O(N^6)$. Konjugált gradiens módszert alkalmazva (prekondícionálás nélkül) a műveletigény $O(N^4)$ -re csökken, mely prekondícionálással tovább csökkenthető. Mivel Ω most speciális alakú (ez általában nincs így), a gyors Fourier-transzformációs algoritmus alkalmazható, mely $O(N^2 \log N)$ műveletbe kerül. Végül egy jól felépített multigrid módszer műveletigénye csak $O(N^2)$.

Ha ugyanerre a modellfeladatra a peremelem módszert alkalmazzuk (pl. kollokációs módszerrel összekötve), akkor elég csak a peremet diszkretizálni; az előbbivel azonos pontsűrűség eléréséhez csak 4N pont szükséges. A bevezetett ismeretlenek száma tehát O(N), a diszkrét egyenletek mátrixa 4N×4N-es. A megoldáshoz leggyakrabban egyszerű Gauss-eliminációt használnak (az általánosan alkalmazott iterációs módszerek nagy része ui. nem konvergál [5]), a műveletigény így $O(N^3)$. Ha tehát a viszonylag ritkán alkalmazható

FFT-módszert és a viszonylag újabb keletű multigrid módszert nem számítjuk, akkor a peremelem módszer memóriaigénye kb. a véges differencia módszerével egyezik, de a megoldás műveletigénye határozottan kisebb, és mint említettük, elmarad a tartományra vonatkozó rács- (háló-)generálás problémája.

Ezen előnyökért cserébe az alábbi árat kell megfizetni:

- a diszkrét egyenletek mátrixa teljesen kitöltött, nem szimmetrikus és rosszul kondícionált;
- a peremmegoldás meghatározása után a tartomány belsejében vett függvényértékek meghatározásához még kb. ugyanannyi művelet szükséges (bár további egyenletmegoldásra már nincs szükség).

Kutatásainkban először a műveletigény csökkentését céloztuk meg: ezt azzal sikerült elérni, hogy a multigrid módszert perem-integrálegyenletekre kiterjesztettük. További műveletszámcsökkenést eredményezett a multipólus módszer alkalmazása a perem-integráloperátorok kiértékelésében.

Multigrid módszerek perem-integrálegyenletekre. Másodfajú Fredholm-egyenletekre a multigrid technika általában nehézség nélkül alkalmazható. A rácsok (hálók) konstrukciója nem különbözik lényegesen a differenciálegyenletek esetétől, a simító eljárás konstruálása pedig kézenfekvő. Ha az egyenlet pl.

$$u = \lambda L u + b$$

alakú, melyet a k-adik szinten

$$u_k = \lambda L_k u_k + b_k$$

alakban diszkretizálunk, akkor simító eljárásként az

$$\widetilde{u}_k = \lambda L_k u_k + b_k$$

Picard-iteráció általában megfelelő, és a multigrid módszer standard módon felépíthető [68], [69], [85].

Ha viszont a megoldani kívánt integrálegyenlet egy (1.6.4) vagy (1.6.6) alakú perem-integrálegyenlet, akkor ez általában *nem* másodfajú egyenlet. Az egyenlet típusa a tett peremfeltételek jellegétől függ. Tiszta Neumann-probléma esetén (1.6.4) másodfajú, tiszta Dirichletprobléma esetén elsőfajú, ekkor viszont az (1.6.6) egyenlet másodfajú. Ez esetekben tehát a multigrid technika a perem-integrálegyenletekre is működik. Nem ez a helyzet, ha *kevert* peremfeltétel (a perem egy Γ_1 részén Dirichlet- a fennmaradó Γ_2 részén pedig Neumann-feltétel) adott. Ekkor sem (1.6.4) sem (1.6.6) nem másodfajúak, így a multigrid módszer közvetlen alkalmazása nehézségbe ütközik.

Erre a problémára a pályázónak sikerült kidolgozni egy, a gyakorlatban igen jól működő módszert (ld. [24], [25], [40], [42]). Ennek alapgondolata, hogy a kevert peremérték feladatot visszavezetjük tiszta Dirichlet- és tiszta Neumann-feladatok sorozatára, melyek megoldásai gyorsan konvergálnak az eredeti kevert feladat megoldásához. Modellfeladatként tekintsük a következő kevert peremérték feladatot:

$$\Delta U = 0, \quad U|_{\Gamma_1} = u_0|_{\Gamma_1}, \quad \frac{\partial U}{\partial n}|_{\Gamma_2} = v_0|_{\Gamma_2} \quad . \tag{1.6.7}$$

Jelölje $W_1 := \{u \in H^{1/2}(\Gamma) : u \mid_{\Gamma_1} = 0\}$, mely a $H^{1/2}(\Gamma)$ Szoboljev-tér egy zárt altere, és legyen $P \in L(H^{1/2}(\Gamma))$ ennek egy projektora. Jelölje $P_1 := I - P$, $P_2 := P^*$ (ezek szintén projektorok). Akkor minden $u \in H^{1/2}(\Gamma)$ esetén $P_1u = u$ a Γ_1 peremszakasz mentén, így P_1 a Γ_1 -ről Γ -ra való *kiterjesztésként* interpretálható. Hasonlóan, P_2v (mint funkcionál) egyezik v-vel a W_1 zárt altéren minden $v \in H^{-1/2}(\Gamma)$ mellett, így P_2 is kiterjesztésként fogható fel (Γ_2 -ről Γ -ra). Ezekkel a projektorokkal az eredeti (1.6.7) probléma az alábbi formába írható át:

$$\Delta U = 0, \quad P_1 \gamma U = P_1 u_0, \quad P_2 \delta U = P_2 v_0 , \qquad (1.6.8)$$

ahol $\gamma U \coloneqq U \mid_{\Gamma}$ és $\delta U \coloneqq \frac{\partial U}{\partial n} \mid_{\Gamma}$ a közönséges nyom-operátorok.

Az (1.6.7) feladat megoldását (mely, mint ismeretes, létezik és egyértelmű a $H^1(\Omega, \Delta)$ Szoboljev-térben) ezek után keressük a következő iterációs eljárással:

$$\Delta U_{n+1/2} = 0, \quad \gamma U_{n+1/2} \coloneqq u_n + P_1(u_0 - u_n)$$

$$\Delta U_{n+1} = 0, \quad \delta U_{n+1} \coloneqq v_{n+1/2} + P_2(v_0 - v_{n+1/2})$$
(1.6.9)

ahol $u_n \coloneqq \gamma U_n$, $v_{n+1/2} \coloneqq \delta U_{n+1/2}$, az iterációt pedig tetszőleges $U_1 \in H^1(\Omega, \Delta)$ függvényből indíthatjuk.

Az (1.6.9) iteráció szemléletes jelentése a következő. Az első fél-lépésben egy tiszta Dirichlet-feladatot oldunk meg, melynek peremfeltétele pontosan egyezik az eredeti peremfeltétellel a Γ_1 peremszakasz mentén. Hasonlóan, a második fél-lépésben tiszta Neumann-feladatot oldunk meg, és most a Γ_2 mentén elégítjük ki pontosan a Neumann-peremfeltételt. Így (1.6.9) tiszta Dirichlet- és tiszta Neumann-feladatok egymásutánja.

Megmutattuk [42], hogy – a *P* projektorra vonatkozó, nem túl erős feltételek mellett – az (1.6.9) iteráció valóban konvergens, sőt, a tapasztalatok szerint gyorsan konvergál. Az iteráció realizálásához csak a peremmegoldások szükségesek, ezért a perem-integrálegyenlet módszer természetes módon alkalmazható az egyes részproblémákra. Mivel pedig e részfeladatok már tiszta Dirichlet- ill. tiszta Neumann-feladatok, a megfelelő perem-integrálegyenletek már multigrid technikával is megoldhatók. A szükséges össz-műveletszám $O(N^3)$ -ról $O(N^2)$ -re csökken, ami nagyságrendben már eléri a tartomány típusú módszerekre alkalmazott multigrid módszerek hatékonyságát.

Gyorsítás multipólus módszerrel. A perem-integrálegyenletek megoldásának műveletigénye (a multigrid technikától függetlenül is) tovább csökkenthető, ha a fellépő (diszkretizált) perem-integráloperátorok kiértékelését gyors multipólus módszerrel végezzük. Tegyük fel, hogy a Γ perem poligon, ill. azzal approximálható. Jelölje az oldalakat $\Gamma_1,...,\Gamma_N$, a csúcsokat pedig $w_1,...,w_N$. Az u, v peremfüggvényeket szakaszonként konstans függvényekkel approximálva, a perem-integrálegyenletek diszkretizálására a $z_j \coloneqq (w_j + w_{j-1})/2$ pontokra támaszkodó kollokációs módszert használva (ahol $w_0 \coloneqq w_N$), az (1.6.9) iteráció minden egyes lépésében ki kell értékelni a $K\varphi_j, R\varphi_j, K^*\varphi_j, Q\varphi_j$ függvények valamely lineáris kombinációját a $z_1,...,z_N$ kollokációs pontokban. Itt φ_j jelöli azt a szakaszonként konstans peremfüggvényt, mely azonosan 1 a Γ_j peremszakaszon, másutt pedig azonosan 0. A multipólus módszer alkalmazásához a fenti potenciálokat z_j körüli multipólus sorba kell fejteni. Megmutattuk [45], hogy (azonosítva az \mathbf{R}^2 síkot a C komplex számsíkkal), az $R\varphi_j$ függvény az alábbi komplex egyszerű réteg potenciál valós része:

$$R_j(z) \coloneqq -e^{-i\omega_j} \int_{\Gamma_j} \log(z-\zeta) d\zeta$$
(1.6.10)

ahol $e^{i\omega_j} := a_j / |a_j|$, és $a_j := w_j - w_{j-1}$. Innen a $z \to \log(1-z)$ függvény Taylorsorfejtését használva, kapjuk, hogy:

$$R_{j}(z) = -e^{-i\omega_{j}} \log(z - z_{j}) \int d\zeta + \sum_{r=1}^{\infty} \frac{e^{-i\omega_{j}}}{r(z - z_{j})^{2}} \int_{\Gamma_{j}} (\zeta - z_{j})^{r} d\zeta$$
(1.6.11)

A jobb oldali összegben levő integrálok analitikusan kiszámíthatók, innen nyerjük R_j -nek a z_j középpont körüli multipólus sorát:

$$R_j(z) = \alpha_0 \log(z - z_j) + \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\alpha_r}{(z - z_j)^r}$$

ahol $\alpha_0 = -a_j e^{-i\omega_j}$, és $r \ge 1$ -re:

$$\alpha_r = \begin{cases} a_j e^{-i\omega_j} \frac{1}{r(r+1)} \left(\frac{a_j}{2}\right)^r, & \text{ha } r \text{ páros} \\ 0, & \text{ha } r \text{ páratlan} \end{cases}$$

Hasonlóan, a $K\varphi_j$ függvény az alábbi komplex kettősréteg potenciál valós része:

$$K_j(z) \coloneqq -i \int_{\Gamma_j} \frac{1}{z - \zeta} d\zeta$$

Felhasználva, hogy könnyen láthatóan $R'_{j}(z) = -ie^{-i\omega_{j}}K_{j}(z)$, a K_{j} függvény z_{j} körüli multipólus sora már egyszerűen adódik:

$$K_{j}(z) = \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\beta_{r}}{(z-z_{j})^{r}}, \text{ alol } \beta_{r} = \begin{cases} 0, & \text{ha } r \text{ páros} \\ -\frac{2i}{r} \left(\frac{a_{j}}{2}\right)^{r}, \text{ ha } r \text{ páratlan} \end{cases}$$

A $K^* \varphi_j$, $Q \varphi_j$ függvények multipólus sorai hasonlóan állíthatók elő (felhasználva, hogy e függvények az egyszerű ill. a kettősréteg potenciál normális irányú deriváltjai, így multipólus soruk $K \varphi_i$, $R \varphi_i$ multipólus soraiból egyszerűen származtathatók).

Az itt vázolt módszer részletei a pályázó [42], [44], [45] publikációiban találhatók. A módszer kombinálva a módszert a perem-integrálegyenletekre alkalmazott multigrid módszerrel, a perem-integrálegyenlet megoldásának műveletigénye $O(N^2)$ -ről $O(N \log N)$ -re csökkent. Tudomásunk szerint ennél gyorsabb perem-integrálegyenlet megoldó módszer mindmáig nem született.

Megjegyzés: Numerikus szempontból további problémát jelent, ha a (1.6.4) perem-integrálegyenletben $f \neq 0$. Ekkor már nemcsak peremintegrálok fordulnak elő, és *Lf* értékeinek meghatározása gondot okozhat. Ha ui. az (*Lf*)(*x*) integrálokat valamilyen szokásos numerikus kvadratúrával számítjuk, akkor Ω -n rácsot vagy hálót kell definiálni, így a módszer egyik fő előnye elvész. Az *f* függvény pedig biztosan nem azonosan zérus, ha a perem-integrálegyenlet módszert inhomogén és/vagy nemlineáris feladatra alkalmazzuk. A probléma a Newtonpotenciálok hálómentes kiértékelésével vagy hálómentes módszerek alkalmazásával kerülhető meg. Ezekkel a kérdésekkel a 3. fejezetben foglalkozunk.

2. Multi-elliptikus interpoláció QT-hálókon

A fizikai-mérnöki problémák matematikai modellezésében a leggyakrabban előforduló részfeladat – kimondva vagy kimondatlanul – az interpoláció feladata. A modellek megvalósításakor sok paraméter numerikus megadása szükséges. Ezek többsége mérési adat. A legritkább eset az, hogy egy adatra mérési eredmény épp abban a pontban áll rendelkezésre, ahol a modellnek szüksége van. Így pl. sekélyvízi egyenletek esetén szükséges a fenékgeometria ismerete; szivárgási problémák esetén a szivárgási tényező értékei; hővezetési probléma esetén a hővezetési tényező értékei stb. stb. Végeselemes vagy végesdifferenciás numerikus modellek (de akár a következő fejezetben tárgyalandó hálónélküli módszerek) esetében ezen értékekre előre meghatározott helyzetű csomó- vagy rácspontokban van szükség, ami ezen adatokra vonatkozó interpolációhoz vezet. A numerikus modellek számítási eredményeinek vizualizálásakor az interpoláció ugyancsak természetes módon fellépő részprobléma.

Az egydimenziós interpoláció témaköre jól ismert és jól kidolgozott, nem utolsósorban azért, mert a számegyenesen létezik egy természetes rendezés. Nem ez a helyzet kettő- vagy többdimenziós problémák esetén, ha az interpolációs alappontoknak semmiféle szabályos struktúrája nincs. Ebben a fejezetben ilyen problémákra koncentrálunk, a hangsúlyt a pályázó által kidolgozott multi-elliptikus módszerekre helyezve. Végig kétdimenziós problémákat vizsgálunk azzal a megjegyzéssel, hogy az eredmények könnyen kiterjeszthetők magasabb dimenziós terekre is. A 3. fejezetben a szórt pontú interpoláció természetes módon lép fel a hálónélküli (más szóval rácsnélküli) módszerek konstruálásakor.

2.1. A szórt pontú interpolációs probléma

Legyen $\Omega_0 \subset \mathbf{R}^2$ korlátos tartomány, legyenek $x_1, x_2, ..., x_N \in \Omega_0$ adott, páronként különböző pontok, melyeken semmiféle (rács- vagy háló-) struktúrát nem tételezünk fel; legyenek végül $f_1, f_2, ..., f_N \in \mathbf{R}$ adott számok. Keressünk olyan, minél simább $f : \Omega_0 \to \mathbf{R}$ függvényt, mely kielégíti az

$$f(x_k) = f_k$$
 (k = 1,2,...,N) (2.1.1)

interpolációs feltételeket.

Nyilvánvaló, hogy a probléma ebben a megfogalmazásban alulhatározott, úgyhogy az interpolációs f függvényre további feltételeket kell tenni.

Az approximációs tulajdonságok vizsgálatához célszerű a problémát az alábbi módon átfogalmazni. Legyenek X,Y Banach-terek, $X \subset Y$ folytonos injekcióval, és tegyük fel, hogy $X \subset C(\overline{\Omega}_0)$, ugyancsak folytonos injekcióval. Az $A \in L(X,Y)$ folytonos lineáris operátort *interpolációs operátornak* nevezzük az $S := \{x_1, x_2, ..., x_N\} \subset \Omega_0$ halmazra nézve, ha

$$(Af)(x_k) = f(x_k)$$
 (k = 1,2,...,N) (2.1.2)

teljesül minden $f \in X$ esetén, azaz az f és az Af függvények megegyeznek az $\{x_1, x_2, ..., x_N\}$ alappontrendszeren.

Interpolációs operátorok konstruálásakor arra törekszünk, hogy f és Af a lehető legkisebb hibával megegyezzék (az Y-beli norma szerint), azaz az A operátor a lehető legjobban közelítse az X-beli I identitást:

$$\|Af - f\|_{Y} \le C(S) \|f\|_{X}$$
,

ahol a C(S) konstans S-től függhet, de *f*-től nem. Azt mondjuk, hogy az A interpolációs operátor *s*-*edrendű* valamely $s \ge 0$ szám mellett, ha

$$\|Af - f\|_Y \le C \cdot h^s \|f\|_X$$

ahol a *C* konstans *S*-től és *f*-től is független *h* pedig az *S* halmaz sűrűségét jellemző *karakterisztikus* vagy *szeparációs* távolságot jelöli:

$$h \coloneqq \sup_{x \in \Omega_0} \inf_{y \in S} \|x - y\|$$

A probléma hasonlóan fogalmazható meg akkor is, ha Ω_0 nem két-, hanem három- vagy még magasabb (de véges) dimenziós. Az egydimenziós interpoláció ezeknél jóval speciálisabb és sokkal kidolgozottabb problémakör, elsősorban azért, mert **R**-nek van egy természetes rendezése, melyet az interpolációs módszerek hallgatólagosan vagy kimondottan felhasználnak.

Példa: Tetszőleges $f \in C(\overline{\Omega}_0)$ függvényre definiáljuk az *Af* interpolációs függvényt az alábbi súlyozott átlaggal (Shepard-interpoláció):

$$(Af)(x) \coloneqq \frac{\sum_{j=1}^{N} f(x_j) w(x - x_j)}{\sum_{j=1}^{N} w(x - x_j)}, \text{ abol } w(x) \coloneqq \frac{1}{\|x\|^2}$$

Ez a formula akkor értelmes, ha $x \neq x_k$ semelyik k = 1, 2, ..., N indexre: ehelyett legyen $(Af)(x_k) \coloneqq f(x_k)$ az alappontokban. Ismert, hogy Af folytonos $\overline{\Omega}_0$ -on (sőt, folytonosan differenciálható), de az alappontokban mindkét parciális derivált eltűnik, ami az interpolációt rontja.

A módszer realizálása (ellentétben a következő szakasz módszereivel) egyenletmegoldást nem igényel, műveletigénye minden egyes $x \in \Omega_0$ esetén O(N).

A módszert illusztrálandó, legyen Ω_0 az egységnégyzet, és legyen $f(x, y) := \sin \pi x \sin \pi y$. Az $x_1, x_2, ..., x_N$ pontokat Ω_0 -ban egyenletes eloszlás szerint kvázi-véletlenszerűen választottuk (nem fogadva el olyan pontokat, melyek a többiek bármelyikétől előre adott $\varepsilon > 0$ számnál közelebb vannak). N := 50 mellett az interpolációs függvényt a 2.1. ábra mutatja. Az interpoláció relatív hibája 27.88% volt (a maximum-norma szerint).



2.1. ábra. Interpoláció Shepard-módszerrel. $f(x, y) := \sin \pi x \sin \pi y$

2.2. A radiális bázisfüggvények módszere

Jelenleg a többdimenziós interpolációs problémák megoldásának valószínűleg a legnépszerűbb módszercsaládja a radiális bázisfüggvények módszere (RBF-módszer, [19], [20], [62], [63], [64]). Ebben a megközelítésben, ha adottak az $f_k \coloneqq f(x_k)$ függvényértékek az x_k interpolációs alappontokban, akkor az Af interpolációs függvényt az alábbi alakban keressük:

$$(Af)(x) \coloneqq \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \Phi_j(x - x_j) , \qquad (2.2.1)$$

ahol $\Phi_1, \Phi_2, ..., \Phi_N : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ adott radiális (körszimmetrikus) bázisfüggvények, azaz a $\Phi_j(x)$ függvényértékek csak az r := ||x|| normától függnek. Az ismeretlen $\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_N$ együtthatók pedig az interpolációs egyenletekből határozhatók meg:

$$\sum_{j=1}^{N} \alpha_{j} \Phi_{j}(x_{k} - x_{j}) = f_{k} \qquad (k = 1, 2, ..., N), \qquad (2.2.2)$$

feltéve, hogy a (3.8) egyenletrendszernek egyáltalán van megoldása (ez nem mindig teljesül [78]).

A Φ_j radiális bázisfüggvények alkalmas megválasztásával sokféle konkrét módszerhez jutunk. A leggyakrabban használatos módszerek a következők:

Multikvadrikus módszer (method of multiquadrics, MQ-módszer [70], [73], [74]):

$$\Phi_j(r) \coloneqq \sqrt{r^2 + c_j^2} ,$$

ahol a $c_1, c_2, ..., c_N > 0$ számok alkalmasan választott skálázó paraméterek, egy lehetséges megválasztásuk:

$$c_k \coloneqq \min_{j \neq k} \| x_k - x_j \|$$

Vékony lemez módszer (thin plate splines, TPS-módszer [22]):

$$\Phi_j(r) \coloneqq r^2 \log r$$
, minden *j* indexre

Gauss-függvények:

$$\Phi_j(r) \coloneqq e^{-c_j^2 r^2}$$

 $(c_1, c_2, ..., c_N$ itt is skálázó konstansok).

A duális reciprocitásban (3.1. szakasz) tradícionálisan használt függvények [82]:

$$\Phi_j(r) \coloneqq 1 + r$$
, minden *j* indexre

Néha a (2.2.1) formula jobb oldalát kiegészítik még néhány további taggal, tipikusan alacsony fokszámú polinomokkal:

$$(Af)(x) \coloneqq \sum_{j=1}^{N} \alpha_{j} \Phi_{j}(x - x_{j}) + \sum_{j=1}^{M} a_{j} p_{j}(x)$$
(2.2.3)

Ez esetben a (2.2.2) rendszer további egyenletekkel egészül ki (ortogonalitási feltételek):

$$\sum_{j=1}^{N} \alpha_{j} \Phi_{j}(x_{k} - x_{j}) + \sum_{j=1}^{M} a_{j} p_{j}(x_{k}) = f_{k} \qquad (k = 1, ..., N)$$

$$\sum_{j=1}^{M} \alpha_{j} p_{k}(x_{j}) = 0 \qquad (k = 1, ..., M)$$
(2.2.4)

Mindezen bázisfüggvények közös jellemzője, hogy bár a (2.2.2) interpolációs egyenletrendszer általában megoldható, de a rendszer numerikus szempontból nagyon kedvezőtlen. Miután e bázisfüggvények tartója nem korlátos, a rendszer mátrixa teljesen kitöltött mátrix, sokszor nemszimmetrikus és általában rosszul kondícionált: a kondíciószám tetszőlegesen nagy lehet, ha *S* egymáshoz közeleső pontokat is tartalmaz. Ezért (2.2.2) megoldására általában – jobb híján – Gauss-eliminációt használnak: ennek műveletigénye $O(N^3)$, ami megengedhetetlenül naggyá válik, ha az alappontok *N* száma nagy (a jelenlegi gyakorlatban: *N* meghaladja az ezres nagyságrendet). Ez a fenti módszerek alapvető hátránya, jóllehet, a módszerek interpolációs tulajdonságai nagyon jók: megmutatható pl., hogy az MQ-módszer (elég sima függvények esetén) *exponenciálisan* konvergál [76]. Sok alkalmazás viszont, így pl. a rácsmentes módszerek konstrukciója, ennél jóval több alappontot is használhat.

A 2.2. *ábrán* az előző szakasz példája látható ($f(x, y) \coloneqq \sin \pi x \sin \pi y$, 50 kvázi-véletlenszerűen választott alappontrendszerrel), de az interpolációs módszer most az MQ-módszer volt, mely a Shepard-módszernél sokkal simább interpolációs felületet ad. A relatív hiba most 1.23% volt (a maximum-norma szerint).



2.2. ábra. Interpoláció MQ-módszerrel. $f(x, y) := \sin \pi x \sin \pi y$

A fentebb jelzett nehézségek áthidalására több módszer is kínálkozik. Az egyik lehetőség a *kompakt tartójú bázisfüggvények* használata [88]. Ekkor a (2.2.2) egyenletrendszer mátrixa ritka mátrix lesz, továbbá lehetséges az interpolációs probléma *többszintű* megoldása is [12], [21], ami tovább csökkenti a műveletigényt. Egy más lehetőség a TPS-módszer használata oly módon, hogy a (2.2.2) egyenletrendszert valamilyen robusztus iterációs módszerrel pl. konjugált gradiens módszerrel oldjuk meg, és eközben a (2.2.1) formula kiértékelését a *multipólus módszerrel* gyorsítjuk [3]. Mi egy harmadik módszert javasoltunk, mely azon alapul, hogy a szórt pontú interpolációs problémát visszavezetjük egy magasabbrendű (pl. biharmonikus) parciális differenciálegyenletre, melyet aztán numerikusan QT-hálón definiált multigrid módszerrel oldunk meg (ezt elsőként [32]-ban javasoltuk). Ez a megközelítés lehetővé teszi, hogy a (2.2.2) ill. a (2.2.4) egyenletrendszert és annak megoldását teljesen elkerüljük: megemlítjük továbbá, hogy ez a megközelítés akkor is működik, ha néhány alappont nagyon közel kerül egymáshoz, úgyhogy a (2.2.2) ill. a (2.2.4) egyenletek már lényegében szingulárisak.

2.3. Multi-elliptikus interpoláció

Ismeretes, hogy a TPS-módszerben fellépő $\Phi: \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, $\Phi(r) := r^2 \log r$ függvény (konstans szorzó erejéig) *alapmegoldása* a kétdimenziós biharmonikus egyenletnek. Ennélfogva a (2.2.1) formula által definiált interpolációs függvény az interpolációs alappontok kivételével mindenütt biharmonikus. (Ugyanez áll a (2.2.3) alakú kiterjesztett TPS-módszerre, ha (2.2.3) jobb oldalán fellépő p_j függvények elég alacsony fokú polinomok). Ez adja az ötletet, hogy interpolációs függvényt olyan *f* függvényként keressük, mely kielégít egy alkalmas,

$$Lf = 0$$
 (2.3.1)

alakú parciális differenciálegyenletet Ω_0 -ban, az interpolációs alappontok esetleges kivételével (disztribúció-értelemben), ahol *L* egy, a módszert jellemző operátor. A (2.3.1) egyenlethez az

$$f(x_k) \coloneqq f_k \quad (k = 1, 2, ..., N)$$
 (2.3.2)

interpolációs egyenleteket mint speciális "peremfeltételeket" csatoljuk. Az Ω_0 tartomány peremén tetszőleges reguláris peremfeltételt pl. Dirichlet-feltételt írhatunk elő.

Ezt az interpolációs ötletet más meggondolások is alátámasztják. Egyrészt nyilvánvaló, hogy csak olyan *L* operátorok jöhetnek szóba, melyek alapmegoldása folytonos az origóban; így két- vagy háromdimenziós interpolációs problémák esetén a jól ismert másodrendű operátorok (Laplace-operátor, Helmholtz-operátor) nem használhatók (logaritmikus jellegű szingularitások generálódnak az alappontokban), de pl. negyedrendű operátorok (biharmonikus operátor) már igen. Másrészt, egydimenziós problémákat tekintve, a Laplace-operátornak megfelelő d^2/dx^2 operátor alapmegoldása (az abszolútérték-függvény) folytonos az origóban, és a (2.3.1) - (2.3.2) probléma megoldása épp a szakaszonként lineáris interpoláció. Hasonló állítás igaz a harmadfokú spline interpolációra, mely az alappontok kivételével mindenütt kielégíti a $d^4 f/dx^4 = 0$ egyenletet, a megfelelő alapmegoldás ($x \rightarrow |x|^3$) pedig szintén folytonos az origóban. Két- és magasabbdimenziós problémákban szokatlan ugyan a diszkrét pontokban adott peremfeltétel, de megmutattuk [49], [51], hogy ez mégis korrekt kitűzésű problémákra vezet alkalmas $H^s(\Omega_0)$ Szoboljev-terekben, ha $s \ge 2$.

Biharmonikus interpoláció. A (2.3.1)-ben szereplő *L* operátor legegyszerűbb megválasztása a biharmonikus operátor: $L := \Delta \Delta$. Ekkor tehát az interpolációs függvény az az Af := F függvény, melyre

$$\Delta \Delta F = 0 \qquad \Omega_0 \setminus \{x_1, x_2, \dots, x_N\} \text{-en (disztribúció-értelemben)}, \tag{2.3.3}$$

és

$$F(x_k) = f(x_k) \qquad (k = 1, 2, ..., N)$$
(2.3.4)

teljesül. Az Ω_0 tartomány peremén tetszőleges reguláris peremfeltételt írhatunk elő, pl. $F|_{\partial\Omega_0} \coloneqq 0, \frac{\partial F}{\partial n}|_{\partial\Omega_0} \coloneqq 0$ (Dirichlet-feltétel).

A problémát a $H_0^2(\Omega_0)$ Szoboljev-térben vizsgáljuk. Mint ismeretes, itt a következő (skaláris szorzat által generálható) normák mind ekvivalensek:

$$\| u \|^{2} \coloneqq \sum_{|\alpha| \leq 2} \| D^{\alpha} u \|_{L_{2}(\Omega_{0})}^{2}$$
$$\| u \|^{2} \coloneqq \sum_{|\alpha| = 2} \| D^{\alpha} u \|_{L_{2}(\Omega_{0})}^{2}$$
$$\| u \|^{2} \coloneqq \| \Delta u \|_{L_{2}(\Omega_{0})}^{2}$$

Vezessük be a

$$W := \{ u \in H_0^2(\Omega_0) : u(x_1) = \dots = u(x_N) = 0 \}$$

alteret, amely a beágyazási tételek értelmében *zárt* altere a $H_0^2(\Omega_0)$ Szoboljev-térnek. Akkor a (2.3.3) - (2.3.4) probléma az alábbi módon is megfogalmazható:

Direkt interpolációs probléma: Adott $f \in H_0^2(\Omega_0)$ függvényhez keressünk olyan $u \in W$ függvényt, hogy

$$\Delta\Delta(u+f) = 0 \tag{2.3.5}$$

teljesüljön (disztribúció-értelemben) az $\Omega_0 \setminus \{x_1, x_2, ..., x_N\}$ tartományon.

Ekkor az F := u + f függvény nyilván megoldása (2.3.3) - (2.3.4)-nak.

A fenti probléma variációs feladatként is felírható:

Variációs probléma 1: Adott $f \in H_0^2(\Omega_0)$ függvényhez keressünk olyan $u \in W$ függvényt, hogy

$$\left\langle \Delta(u+f), \Delta w \right\rangle_{L_2(\Omega_0)} = 0 \tag{2.3.6}$$

teljesüljön minden $w \in W$ -re.

A probléma egy másik variációs megfogalmazása a következő:

Variációs probléma 2: Adott $f \in H_0^2(\Omega_0)$ függvényhez keressünk olyan $u \in W$ függvényt, mely minimalizálja a *W* altéren az alábbi kvadratikus funkcionált:

$$G(v) := \|\Delta(v+f)\|_{L_2(\Omega_0)}^2 \qquad (v \in W)$$
(2.3.7)

A következő tétel [49] szerint a fenti problémák mind ekvivalensek:

2.3.1.Tétel: A (2.3.5), (2.3.6) és (2.3.7) problémák ekvivalensek, és egyetlenegy megoldásuk létezik, éspedig: u = -Pf, ahol *P* jelöli a *W* zárt altér ortogonális projektorát a

$$\langle u, v \rangle \coloneqq \langle \Delta u, \Delta v \rangle_{L_2(\Omega_0)} = \int_{\Omega_0} \Delta u \cdot \Delta v \, d\Omega$$

skaláris szorzat szerint (amely skaláris szorzat a $H_0^2(\Omega_0)$ -normával ekvivalens normát generál).

A tétel bizonyításának fő gondolatmenete a következő (részletek [49], [51]-ban). A két variációs feladat átírható az alábbi formákra:

- (a) keressünk $u \in W$ -t, hogy $\langle u + f, w \rangle = 0$ teljesül minden $w \in W$ -re (2.3.8)
- (b) keressünk $u \in W$ -t, hogy $||u + f||^2 \le ||u + f + w||^2$ teljesül minden $w \in W$ -re (2.3.9)

E két variációs probléma ekvivalens. Valóban, ha *u* megoldása (2.3.8)-nak, akkor (2.3.9)-nek is, mert tetszőleges $w \in W$ -re:

$$||u + f + w||^{2} = ||u + f||^{2} + 2\langle u + f, w \rangle + ||w||^{2} = ||u + f||^{2} + ||w||^{2} \ge ||u + f||^{2}.$$

Ha pedig u megoldása (2.3.9)-nek, akkor

$$|| u + f + w ||^{2} = || u + f ||^{2} + 2\langle u + f, w \rangle + || w ||^{2} \ge || u + f ||^{2}$$

miatt minden $w \in W$ -re $2\langle u + f, w \rangle \ge - ||w||^2$ teljesül: innen standard meggondolásokkal adódik, hogy szükségképp $\langle u + f, w \rangle = 0$, azaz *u* megoldása (2.3.8)-nak is.

A (2.3.8) variációs probléma megoldására pedig: $u + f \in W^{\perp}$, teljesül, ahonnan adódik, hogy a megoldás létezik, és egyértelmű, éspedig u = -Pf, ahol *P* jelöli a *W* zárt altér ortogonális projektorát a $\langle ... \rangle$ skaláris szorzat szerint.

Végül a (2.3.5) direkt és a (2.3.6) variációs problémák ekvivalenciáját kell megmutatni. Legyen *u* megoldása (2.3.6)-nak, és legyen $\varphi \in \mathcal{D}(\Omega_0 \setminus \{x_1, ..., x_N\})$ tetszőleges, akkor $\varphi \in W$ is teljesül, így $\int \Delta(u + f) \cdot \Delta \varphi d\Omega = 0$, ahonnan (disztribúció-értelemben) Ω_0

 $\Delta\Delta(u+f) = 0$ az $\Omega_0 \setminus \{x_1, ..., x_N\}$ tartományon, azaz *u* megoldása a (2.3.5) direkt problémának. Megfordítva, ha *u* megoldása (2.3.5)-nek, akkor egyúttal (2.3.6)-nek is megoldása, mivel a $\mathcal{D}(\Omega_0 \setminus \{x_1, ..., x_N\})$ altér sűrű *W*-ben: ez az állítás nem következik

abból a jól ismert állításból, hogy $\mathcal{D}(\Omega_0)$ sűrű altere $H_0^2(\Omega_0)$ -nek; ennek (egyébként technikai jellegű) igazolása [51]-ban található.

A fenti formulákban szereplő F := u + f függvényt *biharmonikus interpolációs függvénynek* nevezzük. Más szóval, a (2.3.4) interpolációs feltételek mint diszkrét pontokbeli peremfeltételek valóban nem rontják el a (2.3.3) biharmonikus egyenlet korrekt kitűzését, ami onnan is sejthető, hogy az alappontokra koncentrált Dirac-disztribúciók *folytonosak* a $H_0^2(\Omega_0)$ -norma szerint.

A biharmonikus interpolációs függvény approximációja a klasszikus (Taylor-sorfejtésen alapuló) megközelítéstől eltérően, Szoboljev-terekben vizsgálható kényelmesen. Az approximációt a h szeparációs távolság függvényében szeretnénk becsülni. Az eredményeket az alábbi tétel foglalja össze [49]:

2.3.2.Tétel: A biharmonikus interpoláció másodrendű az $L_2(\Omega_0)$ -norma és elsőrendű a $H^1(\Omega_0)$ -norma szerint, azaz tetszőleges $f \in H_0^2(\Omega_0)$ esetén érvényesek az

$$\| F - f \|_{L_{2}(\Omega_{0})} \leq C_{1}h^{2} \| f \|_{H_{0}^{2}(\Omega_{0})},$$

$$\| F - f \|_{H^{1}(\Omega_{0})} \leq C_{2}h \| f \|_{H_{0}^{2}(\Omega_{0})},$$

becslések, alkalmas $C_1, C_2 \ge 0$ konstansok mellett: e konstansok Ω_0 -tól függhetnek, de *f*-től valamint az interpolációs alappontoktól nem.

A tétel bizonyításának fő eszköze az alábbi lemma [34], [51]:

Lemma: Legyenek *X*, *Y* Banach-terek, $X \subset Y$, kompakt injekcióval. Tegyük fel, hogy *X* normája előáll $||x||_X^2 = ||x||_Y^2 + p(x)^2$ alakban, ahol *p* folytonos félnorma *X*-ben. Legyen *q* egy másik folytonos félnorma *X*-ben, melyre p + q már norma, azaz p(x) = 0, q(x) = 0 csak úgy lehet, hogy x = 0. Akkor alkalmas C > 0 konstans mellett $||x||_Y \le C \cdot (p(x) + q(x))$ teljesül minden $x \in X$ -re (ahonnan könnyen következik, hogy *X* normája *ekvivalens* is a p + q normával).

(Megjegyezzük, hogy ebből a lemmából mind a jó ismert Bramble-Hilbert-lemma, mind a Friedrich-Poincaré-egyenlőtlenségek levezethetők [34])

Alkalmazzuk a lemmát a következő szereposztásokban. Legyen Ω egy korlátos, elég sima tartomány, $x_0 \in \Omega$ tetszőleges pont. Legyen

$$\begin{aligned} X &\coloneqq H^2(\Omega), \ Y &\coloneqq L_2(\Omega), \\ p(u) &\coloneqq \| u \|_{2,\Omega} &\coloneqq \left(\sum_{|\alpha|=2} \| D^{\alpha} u \|_{L_2(\Omega)}^2 \right)^{1/2}, \ q(u) &\coloneqq \| u(x_0) \| + \| \operatorname{grad} u \|_{L_2(\Omega)}, \end{aligned}$$

innen kapjuk, hogy minden $u \in H^2(\Omega)$ esetén

$$|| u ||_{L_{2}(\Omega)} \le C \cdot (| u(x_{0}) | + || \operatorname{grad} u ||_{L_{2}(\Omega)} + | u ||_{2,\Omega})$$

teljesül alkalmas $C \ge 0$ konstans mellett (mely Ω -tól és x_0 -tól függ, de *u*-tól nem). Hasonlóan, legyenek $x_1, x_2, x_3 \in \Omega$ nem kollineáris pontok, és

$$X := H^{2}(\Omega), Y := H^{1}(\Omega), \ p(u) := |u|_{2,\Omega}, \ q(u) := |u(x_{1})| + |u(x_{2})| + |u(x_{3})|,$$

innen kapjuk, hogy minden $u \in H^2(\Omega)$ esetén

$$\| u \|_{H^{1}(\Omega)} \leq C \cdot \left(\| u(x_{1}) \| + \| u(x_{2}) \| + \| u(x_{3}) \| + \| u \|_{2,\Omega} \right)$$

teljesül alkalmas (*u*-tól független) $C \ge 0$ konstans mellett. E két becslésből már adódik, hogy ha $x_1, x_2, x_3 \in \Omega$ nem kollineáris ponthármas, akkor alkalmas $C_1, C_2 \ge 0$ konstansok mellett az

$$\| u \|_{L_2(\Omega)} \le C_1 \cdot \| u \|_{2,\Omega}$$
, $\| u \|_{H^1(\Omega)} \le C_2 \cdot \| u \|_{2,\Omega}$

becslések teljesülnek minden olyan $u \in H^2(\Omega)$ függvény esetén, melyek eltűnnek az x_1, x_2, x_3 pontokban. A $C_1, C_2 \ge 0$ konstansok függését az Ω tartomány átmérőjétől egyszerű változótranszformációval kapjuk: innen a tétel állítása már kézenfekvő lépésekkel adódik. A részletek megtalálhatók a pályázó [51] publikációjában.

A biharmonikus interpolációs függvény és az RBF-típusú interpoláció közt szoros összefüggés áll fenn, ahol a radiális bázisfüggvény épp a biharmonikus alapmegoldás. Pontosabban, érvényes az alábbi tétel [49]:

2.3.3.Tétel: Az F biharmonikus interpolációs függvény egyértelműen reprezentálható az

$$F(x) = w(x) + \sum_{j=1}^{N} \beta_j \Phi(x - x_j)$$
(2.3.10)

alakban, ahol $w: \Omega_0 \to \mathbf{R}$ egy Ω_0 -on *mindenütt* biharmonikus függvény (beleértve az interpolációs alappontokat is), Φ pedig a biharmonikus alapmegoldást jelöli: $\Phi(r) = \frac{1}{8\pi}r^2 \log r$.

Legyen ui. $\varphi_0 \in \mathcal{D}(\Omega_0)$ olyan függvény, melynek tartója az egységkör belsejében van, és $\varphi_0(\mathbf{0}) = 1$. Jelölje $\varphi_j(x) \coloneqq \varphi_0\left(\frac{x-x_j}{\varepsilon_j}\right)$ (j = 1, 2, ..., N), ahol az $\varepsilon_1, \varepsilon_2, ... \varepsilon_N$ pozitív számok olyanok, hogy az x_j középpontú, ε_j sugarú körök páronként diszjunktak és mind Ω_0 -ba esnek. Ezekután tetszőleges $\varphi \in \mathcal{D}(\Omega_0)$ függvény esetén jelölje $v(x) \coloneqq \varphi(x) - \sum_{j=1}^N \varphi(x_j) \varphi_j(x)$, akkor $v \in W$, és ezért: $\langle F, v \rangle = \langle \Delta F, \Delta \varphi \rangle_{L_2(\Omega_0)} - \sum_{j=1}^N \varphi(x_j) \cdot \langle F, \varphi_j \rangle = 0$.

Innen (disztribúció-értelemben) az következik, hogy:

$$\Delta \Delta F = \sum_{j=1}^{N} \left\langle F, \varphi_j \right\rangle \cdot \delta_{x_j} =: \sum_{j=1}^{N} \beta_j \cdot \delta_{x_j},$$

ahol δ_{x_j} jelöli az x_j alappontra koncentrált Dirac-disztribúciót. Innen a tétel állítása már következik

Megjegyzés: A 2.3.3. Tétel Duchon tételének [22] egy általánosítása, mely szerint $\Omega_0 = \mathbf{R}^2$ esetén a TPS-interpoláció épp egy (2.3.10) alakú függvényt eredményez: ez esetben w legfeljebb elsőfokú polinom.

A (2.3.10) reprezentációban szereplő β_j együtthatók *egyenletmegoldás nélkül* számíthatók ki a biharmonikus interpoláció végrehajtása során, ui.

$$\Delta\Delta F = \sum_{j=1}^{N} \beta_j \delta_{x_j}$$
(2.3.11)

miatt (δ_{x_j} jelöli az x_j pontra koncentrált Dirac-disztribúciót), ha az F interpolációs függvényt már meghatároztuk, akkor a $\Delta\Delta F$ függvény x_j -beli szingularitásának "mértéke" épp a β_j együtthatót adja. (2.3.11) numerikus kiértékeléséhez ugyanazok a differenciasémák használhatók, mint a biharmonikus interpolációs probléma megoldására. A reprezentációban szereplő β_j együtthatók nemcsak egyértelműen, de *stabil módon* is meg vannak határozva: az együtthatók abszolút értékei nem lehetnek akármilyen nagyok. Ezt fejezi ki a biharmonikus interpoláció *stabilitási tétele* [49]:

2.3.5.Tétel: Ha az $\varepsilon_1, \varepsilon_2, ..., \varepsilon_N > 0$ számok olyanok hogy az x_j közepű, ε_j sugarú körök páronként diszjunktak, és mind Ω_0 -ba esnek, akkor

$$\sum_{j=1}^{N} \varepsilon_{j}^{2} \beta_{j}^{2} \le C \cdot \| f \|_{H_{0}^{2}(\Omega_{0})}^{2}$$
(2.3.12)

teljesül, ahol a *C* konstans mind az *f* függvénytől, mind az $x_1, x_2, ..., x_N$ alappontoktól független.

Valóban, a 2.3.4. Tétel bizonyításából kiderül, hogy a β_j együtthatók explicit formában felírhatók, és:

$$|\beta_{j}|^{2} = |\langle F, \varphi_{j} \rangle|^{2} \leq \iint_{B_{j}} \Delta F |^{2} d\Omega \cdot \iint_{B_{j}} \Delta \varphi_{j} |^{2} d\Omega$$

ahol B_j jelöli az x_j közepű, ε_j sugarú kört. A jobb oldali utolsó integrált a B_0 egységkörbe transzformálva kapjuk, hogy

$$\int_{B_j} |\Delta \varphi_j|^2 d\Omega = \frac{1}{\varepsilon_j^2} \int_{B_0} |\Delta \varphi_0|^2 d\Omega.$$

 ε_j^2 -tel szorozva, és *j* szerint összegezve j = 1, 2, ..., N-re, a tétel állítása már adódik.

A 2.3. ábrán egy példát mutatunk a biharmonikus interpolációra. Itt Ω_0 az egységnégyzet,

 $f(x, y) = \sin^2 \pi x \sin^2 \pi y$, és 100, az egységnégyzetben egyenletesen, kvázi-véletlenszerűen elszórt alappontot használtunk. Diszkretizálásként ekvidisztáns rácshálóra épülő centrális differenciasémákat alkalmaztunk. Az interpoláció sima függvényt szolgáltat, a relatív hiba 1.43% volt (a diszkrét L_2 -norma szerint).



2.3. ábra. Biharmonikus interpoláció ekvidisztáns rácson

Megjegyezzük, hogy az interpolációban az Ω_0 tartomány peremére tett peremfeltételek alárendelt szerepet játszanak. Az $F|_{\partial\Omega_0} \coloneqq 0$, $\frac{\partial F}{\partial n}|_{\partial\Omega_0} \coloneqq 0$ Dirichlet-féle peremfeltétel más reguláris peremfeltételre is kicserélhető: ez a *W* altér definíciójában jelent kis változást. Így pl. *W* gyanánt a

$$W := \{ u \in H^2(\Omega_0) \cap H^1_0(\Omega_0) : u(x_1) = \dots = u(x_N) = 0 \}$$

alteret választva, a direkt problémában ez az $F \mid_{\partial \Omega_0} = 0$, $\Delta F \mid_{\partial \Omega_0} = 0$ Navier-féle peremfeltételt eredményezi. Az így nyert interpoláció approximációjára, reprezentációjára stb. az előzőhöz teljesen analóg tételek igazolhatók.

Egyéb negyedrendű multi-elliptikus interpolációs módszerek. A biharmonikus interpoláció nem az egyetlen stratégia a multi-elliptikus típusú interpolációs módszerek konstruálására (bár kétségkívül a legegyszerűbb). Ennél általánosabb az

$$L := (\Delta - c_1^2 I)(\Delta - c_2^2 I)$$
(2.3.13)

differenciáloperátor alkalmazása, ahol $c_1, c_2 \in \mathbf{R}$ adott, a módszert jellemző számok.

A $H_0^2(\Omega_0)$ térben a norma könnyen láthatóan ekvivalens az

$$\langle u, v \rangle \coloneqq \left\langle (\Delta - c_1^2 I)(\Delta - c_2^2 I)u, v \right\rangle_{L_2(\Omega_0)} =$$

$$= \left\langle \Delta u, \Delta v \right\rangle_{L_2(\Omega_0)} - c_1^2 \left\langle u, \Delta v \right\rangle_{L_2(\Omega_0)} - c_2^2 \left\langle \Delta u, y \right\rangle_{L_2(\Omega_0)} + c_1^2 c_2^2 \left\langle u, v \right\rangle_{L_2(\Omega_0)}$$

$$(2.3.14)$$

skaláris szorzat által indukált normával is:

$$\| u \|^{2} = \| \Delta u \|_{L_{2}(\Omega_{0})}^{2} + (c_{1}^{2} + c_{2}^{2}) \| \operatorname{grad} u \|_{L_{2}(\Omega_{0})}^{2} + c_{1}^{2} c_{2}^{2} \| u \|_{L_{2}(\Omega_{0})}^{2}$$
(2.3.15)

Ezért a biharmonikus interpoláció konstrukciójakor tett meggondolások érvényben maradnak, és – értelemszerű változtatások után – az alábbi eredményeket nyerjük.

Direkt interpolációs probléma: Adott $f \in H_0^2(\Omega_0)$ függvényhez keressünk olyan $u \in W$ függvényt, hogy

$$(\Delta - c_1^2 I)(\Delta - c_2^2 I)(u + f) = 0$$
(2.3.16)

teljesüljön (disztribúció-értelemben) az $\Omega_0 \setminus \{x_1, x_2, ..., x_N\}$ tartományon.

Hagyományosabb megfogalmazásban ez azt jelenti, hogy az F := u + f interpolációs függvényre megköveteljük az alábbi egyenlőségek teljesülését:

$$\begin{aligned} (\Delta - c_1^2 I)(\Delta - c_2^2 I)F &= 0 & \Omega_0 \setminus \{x_1, x_2, ..., x_N\} \text{-en} \\ F \mid_{\partial \Omega_0} &= 0, \quad \frac{\partial F}{\partial n} \mid_{\partial \Omega_0} = 0 & \text{(peremfeltételek)} \end{aligned}$$

 $F(x_k) = f(x_k)$ (k = 1,2,...,N) (interpolációs feltételek).

Variációs probléma 1: Adott $f \in H_0^2(\Omega_0)$ függvényhez keressünk olyan $u \in W$ függvényt, hogy

$$\left\langle u+f,w\right\rangle =0\tag{2.3.17}$$

teljesüljön minden $w \in W$ -re.

Variációs probléma 2: Adott $f \in H_0^2(\Omega_0)$ függvényhez keressünk olyan $u \in W$ függvényt, mely minimalizálja a *W* altéren a

$$G(v) := ||v + f||^2 \qquad (v \in W)$$
(2.3.18)

kvadratikus funkcionált.

A fenti problémák megoldhatóságára a 2.3.1. Tétellel analóg tétel érvényes [51]:

2.3.6.Tétel: A (2.3.16), (2.3.17) és (2.3.18) problémák ekvivalensek, és pontosan egy megoldásuk létezik a *W* altérben. A megoldásból képezett F := u + f interpolációs függvény másodrendben közelíti *f*-et az $L_2(\Omega_0)$ -norma szerint, és elsőrendben a $H^1(\Omega_0)$ -norma szerint. Az *F* interpolációs függvény egyértelműen előáll

$$F(x) = w(x) + \sum_{j=1}^{N} \beta_j \Phi(x - x_j)$$
(2.3.19)

alakban, ahol $w: \Omega_0 \to \mathbf{R}$ egy Ω_0 -on *mindenütt* (az interpolációs alappontokban is), kielégíti a $(\Delta - c_1^2 I)(\Delta - c_2^2 I)w = 0$ differenciálegyenletet, Φ pedig a $(\Delta - c_1^2 I)(\Delta - c_2^2 I)$ multi-elliptikus operátor alapmegoldása: ha $c_1, c_2 > 0$ és $c_1 \neq c_2$, akkor

$$\Phi(r) = -\frac{K_0(c_1r) - K_0(c_2r)}{2\pi(c_1^2 - c_2^2)},$$
(2.3.20)

ahol K_0 az ismert harmadfajú módosított Bessel-függvény.

Fontos speciális eset, ha $c_1 = c_2 = c > 0$ (bi-Helmholtz-interpoláció), és ha $c_1 = 0$, $c_2 = c > 0$ (kevert Laplace-Helmholtz-interpoláció). Standard meggondolásokkal igazolható, hogy a 2.3.6. Tétel most is érvényben marad, de a reprezentációban szereplő Φ radiális bázisfüggvény a következő alakú:

$$\Phi(r) = \frac{r}{4\pi c} K_1(cr)$$
(2.3.21)

(bi-Helmholtz-interpoláció), illetve
$$\Phi(r) = -\frac{1}{2\pi c^2} \cdot \left(K_0(cr) + \log(cr) \right)$$
(2.3.22)

(kevert Laplace-Helmholtz-interpoláció). Megjegyezzük, hogy az előbbi esetben K_1 origóbeli szingularitását az r szorzó kompenzálja, utóbbi esetben a logaritmusfüggvény és a K_0 Bessel-függvény 0-beli szingularitásai épp kioltják egymást, így a fenti alapmegoldások – a biharmonikus alapmegoldáshoz hasonlóan – az origóban is folytonosak maradnak.

Ha szükséges – de általában nem szükséges! –, a (2.3.19) reprezentációban szereplő β_j együtthatók ismét *egyenletmegoldás nélkül* számíthatók az innen azonnal adódó

$$(\Delta - c_1^2 I)(\Delta - c_2^2 I)F = \sum_{j=1}^N \beta_j \delta_{x_j}$$
(2.3.23)

egyenlőség alapján.

Mint látható, a biharmonikus és az általánosabb negyedrendű multi-elliptikus interpolációk meglehetősen hasonlóak. A lényeges különbség köztük az, hogy míg a biharmonikus alapmegoldás értékei nőnek az origótól távolodva, az általánosabb negyedrendű multi-elliptikus operátor alapmegoldása (exponenciálisan) csökken $r \rightarrow +\infty$ mellett, amennyiben a c_1 , c_2 paraméterek egyike sem 0 (beleértve a bi-Helmholtz-interpoláció esetét is). Így, bár egyik függvény tartója sem korlátos, numerikus szempontból azonban a (2.3.20) alapmegoldás mégis lényegében kompakt tartójúnak tekinthető, a "lényeges tartó" szélessége a c_1 , c_2 paraméterekkel szabályozható. A bi-Helmholtz-interpoláció esetén e két skálázó paraméter megegyezik. Megmutattuk [49], hogy a bi-Helmholtz-interpoláció reprezentációja még $\Omega_0 := \mathbf{R}^2$ mellett is érvényben marad, de ekkor *w* eltűnik:

$$F(x) = \sum_{j=1}^{N} \beta_j \Phi(x - x_j), \qquad (2.3.24)$$

ami *pontosan* egy RBF-típusú interpolációs formulával egyezik. Ez egyúttal egzisztencia- és unicitási tételt is ad a bi-Helmholtz operátor alapmegoldására mint radiális bázisfüggvényre alapozott klasszikus RBF-interpolációs problémára. Ugyanakkor a β_j együtthatók kiszámításához továbbra sem kell nagyméretű, tele mátrixú egyenletrendszert megoldani, még akkor sem, ha közvetlenül az interpolációs egyenletekből kívánjuk a β_j együtthatókat meghatározni, ui. a fellépő egyenletrendszer mátrixa (elég nagy *c* mellett) ritka mátrix lesz.

Megjegyzések:

- 1. A bi-Helmholtz-interpoláció alkalmazásakor döntő a c paraméter helyes megválasztása. A cél az, hogy a Φ függvény lényeges tartójának mérete ne csökkenjen az alappontok karakterisztikus távolságának nagyságrendje alá. Ha c túl kicsi, akkor az interpoláció lényegében a biharmonikus interpolációt adja vissza, így a (2.3.24) reprezentáció érvényét veszti. Ha c túl nagy, akkor az alappontokban numerikus szingularitások alakulnak ki, ami tönkreteszi az interpolációt.
- 2. A kevert Laplace-Helmholtz-interpoláció esetében, mivel K_0 gyorsan csökken az origótól távolodva, a Φ függvény "majdnem" harmonikus az origótól távol. Ezt kihasz-

nálva, olyan interpolációs függvények konstruálhatók, melyek az alappontoktól távol lényegében harmonikusak. Pontosan ilyen függvényekre van szükség a Laplaceegyenletre vonatkozó Dirichlet-probléma megoldásakor, amennyiben az interpolációs alappontokat egy (Ω_0 -nál szűkebb) Ω tartomány peremén vesszük fel. Erre a gondolatra épül a következő fejezetben bemutatásra kerülő egyik hálómentes módszer, a *regularizált alapmegoldások módszere*.

Poliharmonikus interpoláció. A multi-elliptikus interpolációs módszerek egy másik irányú általánosítási lehetősége az alkalmazott *L* differenciáloperátor rendjének növelése. Ha *L*-et a Laplace-operátor magasabb hatványainak választjuk, az így kapott módszer nagyjából megfelel a poliharmonikus spline-okra épülő RBF-módszereknek (de az interpolációs egyenletrendszer megoldása itt is elkerülhető). Az alábbiakban ezt a megközelítést vázoljuk, részletek a pályázó [51], [55] publikációiban találhatók.

Legyen m > 2 egész szám. Az interpolációs függvényt most a $H_0^m(\Omega_0)$ Szoboljev-tér egy alkalmas zárt alterében keressük, mely többféleképp is megválasztható (annak megfelelően, hogy most már nemcsak az alapponti függvényértékek, de (m-2)-edrendig bezárólag a deriváltak is előírhatók, mivel nemcsak az alappontokra koncentrált Dirac-disztribúciók, de annak deriváltjai is folytonosak a $H^m(\Omega_0)$ -norma szerint). Egy lehetséges választás:

$$W_{0,m} := \{ u \in H_0^m(\Omega_0) : \quad u(x_1) = \dots = u(x_N) = 0 \} .$$
(2.3.25)

Az ennek megfelelő variációs és direkt probléma (egyszerűség kedvéért csak egyetlen variációs problémát fogalmazunk meg):

Variációs probléma: Adott $f \in H_0^m(\Omega_0)$ függvényhez keressünk olyan $u \in W_{0,m}$ függvényt, hogy minden $w \in W_{0,m}$ esetén

$$\left\langle u+f,w\right\rangle _{m}=0 \tag{2.3.36}$$

teljesüljön, ahol

$$\langle u, v \rangle_{m} \coloneqq \begin{cases} \left\langle \operatorname{grad} \Delta^{l} u, \operatorname{grad} \Delta^{l} v \right\rangle_{L_{2}(\Omega_{0})}, & \operatorname{ha} m = 2l + 1 \\ \left\langle \Delta^{l} u, \Delta^{l} v \right\rangle_{L_{2}(\Omega_{0})}, & \operatorname{ha} m = 2l \end{cases}$$

$$(2.3.37)$$

mely valóban skaláris szorzat $H_0^m(\Omega_0)$ -on, éspedig az eredeti $H^m(\Omega_0)$ -normával ekvivalens normát generál [51].

Direkt interpolációs probléma: Adott $f \in H_0^m(\Omega_0)$ függvényhez keressünk olyan $u \in W_{0,m}$ függvényt, hogy

$$\Delta^m(u+f) = 0 \tag{2.3.38}$$

teljesüljön (disztribúció-értelemben) az $\Omega_0 \setminus \{x_1, x_2, ..., x_N\}$ tartományon.

Az F := u + f függvényt *m*-harmonikus interpolációs függvénynek nevezzük. A (2.3.37) direkt probléma hagyományosabb felírásban a következő:

$$\Delta^{m} F = 0 \qquad \Omega_{0} \setminus \{x_{1}, x_{2}, ..., x_{N}\} \text{-en},$$

$$\frac{\partial^{j} F}{\partial n^{j}} = 0 \qquad \partial \Omega_{0} \text{ mentén } (j = 0, 1, ..., m - 1) \text{ (peremfeltételek)},$$

$$F(x_{k}) = f(x_{k}) \qquad (k = 1, 2, ..., N) \text{ (interpolációs feltételek)}.$$

Ha m > 2, akkor a direkt interpolációs probléma megoldható ugyan, de a megoldás nem egyértelmű. Szemléletesen, ennek oka az, hogy nemcsak *F* értékei, de bizonyos deriváltak is előírhatók az alappontokban. A (2.3.36) variációs probléma azonban egyértelműen megoldható, és megoldása egyúttal a (2.3.38) direkt problémát is kielégíti. Az interpoláció rendjére érvényes az

$$\|F - f\|_{H^{l}(\Omega_{0})} \leq C \cdot h^{m-l} \|f\|_{H^{m}_{0}(\Omega_{0})} \qquad (l = 0, 1, ..., m-1)$$
(2.3.39)

becslés, az interpolációs függvény pedig egyértelműen reprezentálható az alábbi alakban:

$$F(x) = w(x) + \sum_{j=1}^{N} \beta_j \Phi_m(x - x_j) , \qquad (2.3.40)$$

ahol $w: \Omega_0 \to \mathbf{R}$ egy Ω_0 -on mindenütt *m*-harmonikus függvény, Φ_m pedig az *m*-harmonikus alapmegoldás: $\Phi_m(r) = r^{2m} \log r$ (konstans szorzó erejéig).

A Waltér egy másik lehetséges megválasztása:

$$W_{1,m} := \{ u \in H_0^m(\Omega_0) : \Delta u(x_1) = \dots = \Delta u(x_N) = 0 \} , \qquad (2.3.41)$$

(itt fel kell tenni, hogy m > 3: ekkor $W_{1,m}$ valóban zárt $H_0^m(\Omega_0)$ -ban).

Ez a választás annak felel meg, hogy az alappontokban nem f, hanem Δf értékeit írjuk elő. A megfelelő variációs és direkt probléma most a következő:

Variációs probléma: Adott $f \in H_0^m(\Omega_0)$ függvényhez keressünk olyan $u \in W_{1,m}$ függvényt, hogy minden $w \in W_{1,m}$ esetén

$$\left\langle u+f,w\right\rangle _{m}=0 \tag{2.3.42}$$

teljesüljön, ahol $\langle .,. \rangle_m$ a (2.3.37)-ben definiált skaláris szorzat.

Direkt interpolációs probléma: Adott $f \in H_0^m(\Omega_0)$ függvényhez keressünk olyan $u \in W_{1,m}$ függvényt, hogy

$$\Delta^m (u+f) = 0 \tag{2.3.43}$$

teljesüljön (disztribúció-értelemben) az $\Omega_0 \setminus \{x_1, x_2, ..., x_N\}$ tartományon.

A variációs probléma most is egyértelműen megoldható, és megoldása a direkt problémát is kielégíti, míg a direkt problémára az egyértelműség nem teljesül. Némi eltérés van a reprezentációs formulában: most az F := u + f interpolációs függvény egyértelműen előáll az

$$F(x) = w(x) + \sum_{j=1}^{N} \beta_j \Phi_{m-1}(x - x_j)$$
(2.3.44)

alakban, ahol w egy Ω_0 -on mindenütt *m*-harmonikus függvény, míg Φ_{m-1} az (m-1)-harmonikus alapmegoldás: $\Phi_{m-1}(r) = r^{2m-2} \log r$.

A fentiekkel analóg interpolációk konstruálhatók még pl. a $W := W_{0,m} \cap W_{1,m}$ választás mellett (ekkor mind a függvényértékek, mind a Laplace-értékek előírtak az alappontokban); az is lehetséges, hogy az alappontok egy részében függvényértéket, a többiben Laplace-értéket írunk elő. Ez utóbbi eset a W altér következő választásának felel meg:

$$W := \{ u \in H_0^m(\Omega_0) : \Delta u(x_1) = \dots = \Delta u(x_M) = 0, \quad u(x_{M+1}) = \dots = u(x_N) = 0 \}.$$

Ez a választás különösen Poisson-egyenletek rácsmentes módszereinek konstruálásakor tűnik fel természetes módon. Ilyenkor a Poisson-egyenlet Ω kitűzési tartománya egy Ω_0 -nál szűkebb tartomány: Ω -ban elhelyezve az $x_1, x_2, ..., x_M$ pontokat, Ω peremén pedig az $x_{M+1}, x_{M+2}, ..., x_N$ pontokat, ez az interpoláció a következőképp interpretálható: keressünk olyan *u* függvényt, melyre a belső pontokban a $\Delta u(x_k) = f_k$ (k=1,2,...,M), a perempontokban pedig az $u(x_k) = u_0(x_k)$ (k = M+1,...,N) előírások teljesülnek. Ez a probléma pedig nyilvánvalóan a $\Delta u = f$, $u \mid_{\partial \Omega} = u_0$ Dirichlet-probléma egyfajta közelítését jelenti.

Az eddig említett módszerek közös jellemzője, hogy az interpolációs problémát egy 2medrendű parciális differenciálegyenletre vezetik vissza. Nagyobb m esetén ez numerikus nehézségeket okozhat. Tapasztalatunk szerint legfeljebb m = 4 mellett érdemes a módszert implementálni (tetraharmonikus interpoláció): ennél nagyobb m esetén a módszer használata kényelmetlen.

2.4. Numerikus multi-elliptikus interpoláció QT-hálók használatával

Az előző szakaszban konstruált multi-elliptikus interpolációs módszerek numerikus realizálása nem magától értetődő feladat, különösen, ha a hagyományos RBF-módszereknél gazdaságosabb módszereket szeretnénk nyerni. Ehhez ui. egy legalább negyedrendű, síkvagy térbeli Ω_0 tartományon kitűzött parciális differenciálegyenletet kell megoldani. Az eredeti interpolációs problémát tehát egy – látszólag – sokkal nehezebb problémára (negyedrendű differenciálegyenletre) vezettük vissza; azonban az Ω_0 tartomány lényegében szabadon választható, végletekig egyszerű geometriával rendelkezhet: kétdimenziós problémák esetén pl. négyzet (vagy kör) lehet, háromdimenziós esetben kocka (vagy gömb), stb. Ugyanakkor az Ω_0 tartomány peremén tett peremfeltétel is tág határok közt szabadon választható.

Síkbeli probléma esetén néha az egyszerű ekvidisztáns rácsra épített multigrid módszer is versenyképes lehet. Legyen ui. N az interpolációs alappontok száma. Akkor, a pontok helyzetét 1/N pontossággal közelítve, az Ω_0 tartomány lefedhető egy, nagyságrendben N×Nes ráccsal. Multigrid módszert alkalmazva elérhető, hogy a fentebb tárgyalt interpolációk implementálásának műveletigénye $O(N^2)$ legyen, ami kevesebb a hagyományos RBF-módszerek $O(N^3)$ -os műveletigényénél. Térbeli (és magasabbdimenziós) problémák esetén ez már nem áll: a megfelelő ekvidisztáns rács itt már legalább N×N×N–es, így a multigrid módszerek sem tudnák a műveletigényt $O(N^3)$ alá szorítani.

A leginkább gazdaságos megoldást az 1. fejezetben bemutatott QT-hálós multigrid módszerek kínálják, ha a QT-háló szerkezetét az interpolációs alappontok vezérlik. Ekkor a probléma már csak a megfelelő differenciálegyenlet megoldására és az interpolációs feltételek helyes diszkretizálására korlátozódik.

Fontos kiemelni, hogy a multi-elliptikus interpolációra alkalmazott QT-hálós multigrid technika kikerüli az RBF-módszereknek már korábban említett numerikus hátrányát, a nagyméretű, teljesen kitöltött és rosszul kondícionált egyenletek megoldásának szükségességét. A multi-elliptikus interpoláció még akkor is stabilan működik, amikor két alappont nagyon közel van egymáshoz, úgyhogy a hagyományos RBF-módszeren alapuló interpolációs egyenletrendszerek lényegében már szingulárisak. Ismételten hangsúlyozzuk, hogy a módszer műveletigénye ugyanakkor nagyságrendben csak töredéke az RBF-módszerek műveletigé-nyének.

A későbbiekben csak a fő negyedrendű (biharmonikus, bi-Helmholtz, kevert Laplace-Helmholtz) egyenletekre szorítkoztunk.

Biharmonikus interpoláció: Ekkor az *F* interpolációs függvény az alappontok kivételével kielégíti a

$$\Delta \Delta F = 0 \tag{2.4.1}$$

biharmonikus egyenletet, mely ekvivalens egy Poisson-egyenletpárral:

$$\Delta F = G, \quad \Delta G = 0 \tag{2.4.2}$$

Megjegyzés: A fenti egyenletpár egy nyeregpont-problémaként is felírható:

$$\begin{pmatrix} I & -\Delta \\ -\Delta & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$
 (2.4.3)

A többszintű módszereket szem előtt tartva, elég tehát Poisson-egyenleteket megoldani minden diszkretizációs szinten. Ezt az 1. fejezetben már tárgyaltuk.

Az interpolációs feltételek diszkretizálására – az egyszerűbb megfogalmazás érdekében – ekvidisztáns rácsot alkalmazunk. Legyen C egy olyan centrális rácspont, mely az alappontoktól különbözik, szomszédait jelölje N, W, S, E. Ekkor (2.4.2) diszkretizálása értelemszerűen a centrális

$$\frac{F_N + F_W + F_S + F_E - 4F_C}{h^2} = G_C$$

$$\frac{G_N + G_W + G_S + G_E - 4G_C}{h^2} = 0$$
(2.4.4)

sémákkal történhet, melynek Seidel-iterációra alkalmas alakja:

$$F_{C} \coloneqq \frac{1}{4} (F_{N} + F_{W} + F_{S} + F_{E} - h^{2}G_{C})$$

$$G_{C} \coloneqq \frac{1}{4} (G_{N} + G_{W} + G_{S} + G_{E})$$
(2.4.5)

Ha viszont C interpolációs alapponttal egyezik, akkor a (2.4.2) egyenlet diszkrét megfelelője érvényét veszti. Ehelyett F_C előírt, G_C -t pedig *definiáljuk* a

$$G_C \coloneqq \frac{F_N + F_W + F_S + F_E - 4F_C}{h^2} \,. \tag{2.4.6}$$

formulával.

Bi-Helmholtz-interpoláció: Ekkor az F interpolációs függvény az alappontok kivételével a

$$(\Delta - c^2 I)^2 F = 0 \tag{2.4.7}$$

egyenletet elégíti ki, mely a

$$(\Delta - c^2 I)F = G, \quad (\Delta - c^2 I)G = 0,$$
 (2.4.8)

egyenletpárral ekvivalens. Ha a C rácspont nem interpolációs alappont, akkor (2.3.8)-ból az

$$F_{C} \coloneqq \frac{1}{4 + c^{2}h^{2}} (F_{N} + F_{W} + F_{S} + F_{E} - h^{2}G_{C})$$

$$G_{C} \coloneqq \frac{1}{4 + c^{2}h^{2}} (G_{N} + G_{W} + G_{S} + G_{E})$$
(2.4.9)

Seidel-iterációs formulák adódnak. Ha C interpolációs alappont, akkor F_C előírt, G_C pedig definíció szerint:

$$G_C \coloneqq \frac{F_N + F_W + F_S + F_E - 4F_C}{h^2} - c^2 F_C . \qquad (2.4.10)$$

Kevert Laplace-Helmholtz-interpoláció: Ekkor az *F* interpolációs függvény az alappontok kivételével kielégíti a

$$\Delta(\Delta - c^2 I)F = 0 \tag{2.4.11}$$

egyenletet, mely ekvivalens az alábbi egyenletpárral:

$$(\Delta - c^2 I)F = G, \quad \Delta G = 0.$$
 (2.4.12)

Ha a C rácspont nem interpolációs alappont, akkor (2.4.12)-ből:

$$F_{C} \coloneqq \frac{1}{4 + c^{2}h^{2}}(F_{N} + F_{W} + F_{S} + F_{E} - h^{2}G_{C})$$

$$G_{C} \coloneqq \frac{1}{4}(G_{N} + G_{W} + G_{S} + G_{E})$$
(2.4.13)

ha pedig interpolációs alappont, akkor F_C előírt, G_C -t pedig (2.4.10) adja.

A fenti iterációk nehézség nélkül multigrid módszerbe ágyazhatók, és QT-hálós környezetbe is átírhatók.

Illusztratív példaként, a 2.4. *ábra* egy QT-hálón elvégzett biharmonikus interpoláció eredményét mutatja ($f(x, y) := \sin \pi x \sin \pi y$, 50 db, az egységnégyzetben kvázi-véletlenszerűen választott alapponttal). A biharmonikus egyenlethez itt az $F \mid_{\partial \Omega_0} := 0$, $\Delta F \mid_{\partial \Omega_0} := 0$ peremfeltételeket csatoltuk.



2.4. ábra. Biharmonikus interpoláció QT-hálón

Az 1. táblázat pedig azt mutatja, hogyan változott a relatív hiba az alappontok számának (és az alkalmazott legnagyobb felbontási szintnek) függvényében. Azt tapasztaltuk, hogy – amint az várható is volt – a QT-hálós interpoláció pontossága lényegében egyezik az ekvidisztáns rácsot használó interpolációéval, műveletigénye viszont csak töredéke az utóbbi módszer műveletigényének.

$N \setminus L_{\max}$	6	7	8	9	10
25	2.616	2.703	2.639	2.601	2.577
50	0.620	0.591	0.614	0.610	0.607
100	0.147	0.114	0.103	0.102	0.105
200	0.103	0.059	0.047	0.042	0.040
400	0.059	0.046	0.034	0.026	0.023
800	0.052	0.029	0.018	0.015	0.012

1. táblázat. A biharmonikus interpoláció relatív hibája az alappontok számának és a maximális felbontási szintnek függvényében

2.5. Vektor-interpolációs problémák, multi-elliptikus megoldás

Egy sor gyakorlati interpolációs problémában az alappontokhoz nem skalár, hanem vektormennyiségek (pl. sebesség, mágneses indukció, elektromos térerősség stb) vannak rendelve. Tipikusan ez a helyzet pl. áramlási jelenségek leírása esetén. Ilyenkor az interpoláció ugyan végrehajtható komponensenként is, ugyanakkor az interpolációs függvénytől még valamilyen globális tulajdonságot is elvárunk, pl. azt, hogy az interpolált sebességmező örvénymentes és/vagy divergenciamentes legyen.

Az e szakaszban leírtak alapjául a pályázó [52] publikációja szolgál.

Példaként, legyenek az $x_1, x_2, ..., x_N \in \Omega_0 \subset \mathbb{R}^2$ interpolációs alappontokhoz (ahol $\Omega_0 \subset \mathbb{R}^2$ egyszeresen összefüggő tartomány) az $\mathbf{u}_k := (u_k v_k) \in \mathbb{R}^2$ (k = 1, 2, ..., N) (sebesség)értékek rendelve. Az interpolált $\mathbf{u} : \Omega_0 \to \mathbb{R}^2$ sebességmezőtől követeljük meg az örvénymentességet is:

$$rot \mathbf{u} \equiv 0 \qquad \Omega_0 \text{-ban.} \tag{2.5.1}$$

A klasszikus RBF-megközelítés két független interpolációs problémára vezet a két sebességkomponensre nézve:

$$\sum_{j=1}^{N} \alpha_{j} \Phi(x_{k} - x_{j}) = u_{k}, \qquad \sum_{j=1}^{N} \beta_{j} \Psi(x_{k} - x_{j}) = v_{k} \qquad (k = 1, 2, ..., N),$$
(2.5.2)

ahol Φ és Ψ két (nem feltétlen különböző) radiális bázisfüggvény. Ekkor a rot $\mathbf{u} \equiv 0$ feltétel általában nem teljesül.

Bevezetve azonban a sebességmező φ potenciálfüggvényét, az $\mathbf{u} \coloneqq \operatorname{grad} \varphi$ sebességmezőre az örvénymentesség automatikusan teljesül, mivel rot $\mathbf{u} = \operatorname{rot} \operatorname{grad} \varphi \equiv 0$. Ez a megközelítés a φ potenciálfüggvényre nézve a következő Hermite-típusú interpolációs problémára vezet:

grad
$$\varphi(x_k) = \mathbf{u}_k$$
 (k = 1,2,...,N)

azaz

$$D_1 \varphi(x_k) = u_k, \qquad D_2 \varphi(x_k) = v_k \qquad (k = 1, 2, ..., N)$$
 (2.5.3.)

Formálisan most is felírhatók az RBF-típusú interpolációs egyenletek. Az interpolációs potenciálfüggvényt $\varphi(x) \coloneqq \sum_{j=1}^{N} \alpha_j D_1 \Phi(x - x_j) + \sum_{j=1}^{N} \beta_j D_2 \Phi(x - x_j)$ alakban keresve, az interpolációs egyenletek alakja a következő:

$$\sum_{j=1}^{N} \alpha_{j} D_{11} \Phi(x_{k} - x_{j}) + \sum_{j=1}^{N} \beta_{j} D_{12} \Phi(x_{k} - x_{j}) = u_{k}$$

$$\sum_{j=1}^{N} \alpha_{j} D_{12} \Phi(x_{k} - x_{j}) + \sum_{j=1}^{N} \beta_{j} D_{22} \Phi(x_{k} - x_{j}) = v_{k}$$

$$(k = 1, 2, ..., N)$$

azaz tömören:

$$\sum_{j=1}^{N} D^{2} \Phi(x_{k} - x_{j}) \mathbf{a}_{j} = \mathbf{u}_{k} \qquad (k = 1, 2, ..., N), \qquad (2.5.4)$$

ahol $\mathbf{a}_j := (\alpha_j, \beta_j)$. Azonban a (2.5.4) típusú interpolációs egyenletrendszer megoldhatósága adott Φ radiális bázisfüggvény mellett – a pályázó tudomása szerint – még nyitott probléma. A numerikus tapasztalat szerint (2.5.4) általában megoldható ugyan, de ugyanazok a kedvezőtlen numerikus tulajdonságok lépnek fel, mint a klasszikus (skalár) RBF-módszer esetén: a rendszer mátrixa nagyméretű, teljesen kitöltött és sokszor rosszul kondícionált.

A probléma megkerülhető a multi-elliptikus interpoláció alkalmazásával. Mivel most a deriváltak előírtak, várható, hogy negyedrendű multi-elliptikus operátorok alkalmazása nem elegendő. A $(\Delta - c^2 I)^3$ tri-Helmholtz-operátor (hatodrendű!) viszont alkalmazható, a probléma a $H^3(\Omega_0)$ Szoboljev-térnek a

$$W := \{ w \in H^3(\Omega_0) : D_1 w(x_j) = D_2 w(x_j) = 0, \ j = 1, 2, ..., N \}$$

zárt alterén nehézség nélkül kitűzhető. A fenti tri-Helmholtz-interpolációs függvény most a következő alakban reprezentálható:

$$w(x) + \sum_{j=1}^{N} \alpha_j D_1 \Phi(x - x_j) + \sum_{j=1}^{N} \beta_j D_2 \Phi(x - x_j), \qquad (2.5.5)$$

ahol Φ a tri-Helmholtz-operátor alapmegoldása, és a *w* függvény Ω_0 -ban mindenütt (az interpolációs alappontokban is) kielégíti a $(\Delta - c^2 I)^3 w = 0$ tri-Helmholtz-egyenletet. Standard meggondolásokkal megmutatható, hogy Φ alakja a következő:

$$\Phi(r) = -\frac{1}{16\pi c^4} \Big(r^2 c^2 K_0(rc) + 2rcK_1(rc) \Big),$$
(2.5.6)

továbbá, felhasználva, hogy Φ az origótól távol gyorsan csökken, a (2.5.5) reprezentáció az $\Omega_0 := \mathbf{R}^2$ választás mellett is érvényben marad, éspedig ekkor a megfel*e*lő w függvény

azonosan zérus. Következésképp megoldhatósági tételt nyertünk a (2.5.4) interpolációs problémára is (legalábbis a (2.5.6) radiális bázisfüggvény-választás mellett). Numerikus szempontból gazdaságosabb a tri-Helmholtz-interpoláció implementálása, az előzőekben rész-letezett QT-hálós multigrid technikát alkalmazva.

Az itt vázolt vektoriális interpoláció akkor is alkalmazható (2D problémák esetén), ha az örvénymentesség (2.5.1) feltétele helyett a divergenciamentesség

$$\operatorname{div} \mathbf{u} \equiv 0 \qquad \Omega_0 \operatorname{-ban} \tag{2.5.7}$$

feltételét írjuk elő. Ez esetben az interpolációs a ψ áramfüggvényre vonatkozik, melyből a

sebességmező az $\mathbf{u} = (\operatorname{grad} \psi)^{\perp} = (D_2 \psi, -D_1 \psi)$ formulával számítható.

Illusztratív példaként tekintsük az egységnégyzetben a $\Psi(x, y) \coloneqq v_0 \cdot \sin 2\pi x \sin 2\pi y$ áramfüggvényű (divergenciamentes) áramlást. Az alkalmazott interpolációs alappontok száma 200 volt. A sebességmező a 2.5. *ábrán* látható. A 2.6. *ábrán* tüntettük fel a komponensenkénti TPS-módszerrel nyert interpolált sebességmezőt (baloldalt), és a tri-Helmholtz-interpolációval nyert sebességmezőt (jobboldalt). Az első interpolált sebességmező nem teljesíti a divergenciamentesség feltételét, míg a második igen.



2.5. ábra. Divergenciamentes áramlás sebességmezője, példa



2.6. ábra. Komponensenkénti TPS-módszerrel ill. tri-Helmholtz-interpolációval interpolált sebességmezők

3. Multi-elliptikus interpolációra alapozott hálónélküli módszerek

Az 1. fejezetben rámutattunk, hogy a peremelem módszer nem igényli a tartományon vett rács- ill. hálógenerálást, még akkor sem, ha a perem-integrálegyenletben tartományon vett Newton-potenciálok fordulnak elő (ami tipikus, ha nemlineáris és/vagy inhomogén problémára alkalmazzuk a perem-integrálegyenlet módszert). Megmarad azonban a peremen történő rács- ill. hálógenerálás problémája, ami, bár jóval egyszerűbb (különösen kétdimenziós feladatoknál), mégis bizonyos kényelmetlenséggel járhat, ha pl. lokális finomítások létrehozása céljából új pontokat kívánunk a peremen elhelyezni ill. annak hálóstruktúrájába beilleszteni. Mindenesetre kétségtelen, hogy a legegyszerűbb adatstruktúrát az jelenti, ha egyáltalán nem használunk rácsot. Ezzel viszont nagymennyiségű információt vesztünk (rácspontok kapcsolódása, szomszédságok, metrikus paraméterek stb.) Rácsnélküli módszerek konstruálásakor tehát az a fő cél, hogy a struktúra hiánya miatti információvesztést kompenzálni lehessen, tehát a módszer ne is használja fel ezeket az információkat. Várható, hogy ennek ára a diszkretizáció bonyolultabbá és/vagy munkaigényesebbé válása lesz. Ennek fényében meglepő, hogy lehetséges olyan rácsnélküli módszereket konstruálni, melyek műveletigénye legalábbis nagyságrendben – nem több a rácsokat használókénál, még ha azok multigrid technikával fel is lettek gyorsítva. Ilyen módszerek konstruálása a pályázónak is sikerült: a főszerepet itt is a 2. fejezetben részletezett interpolációs technikák és a QT-hálós multigrid módszerek játszzák. Természetesen nem ez az egyetlen lehetséges út, mindenesetre tény, hogy az utóbbi években az ilyen módszerek kutatása szerfelett intenzívvé vált. Csak néhány példát említve, az alábbi módszerek születtek meg: rácsmentes Galjorkin-módszerek; az egységosztáson alapuló módszerek (partition of unity methods [2]); csúszó legkisebb négyzetek módszere [15], [79]; az alapmegoldások módszere [1], [17]; radiális bázisfüggvényeken alapuló módszerek [18], [19], [20], [23] stb. Az általunk konstruált módszer leginkább a legutóbbival rokonítható, ezért röviden összefoglaljuk az idevágó fogalmakat.

Elsőnek olyan módszereket tárgyalunk, amelyek, ha nem is a szó szoros értelmében vett hálónélküli módszerek (meshless methods), hanem olyan eljárások, melyek bizonyos, a perem-integrálegyenlet módszerben fellépő *tartományon* vett integrálok közvetlen kiszámítását *peremintegrálok* kiszámítására vezetik vissza, ezáltal jelentős számítási munka megtakarítását teszik lehetővé, tekintve, hogy ekkor a tartomány ráccsal vagy hálóval való diszkretizálása helyett elég csak annak peremét diszkretizálni (mesh reduction methods).

3.1. Multi-elliptikus interpoláció a duális és többszörös reciprocitásban

A duális és többszörös reciprocitás az inhomogén perem-integrálegyenlet módszerben fellépő

$$(Lf)(x) \coloneqq -\frac{1}{2\pi} \iint_{\Omega} \left(\log \frac{1}{\|x - y\|} \right) f(y) d\Omega_y$$
(3.1.1)

alakú integrálok kiszámítását teszi lehetővé az Ω tartomány ráccsal vagy hálóval való diszkretizálása nélkül, azáltal, hogy a szóban forgó integrálokat a $\Gamma := \partial \Omega$ peremen értelmezett peremintegrálok kiszámítására vezetjük vissza [86]. A többszörös reciprocitás elve [80]: Jelölje

$$L_0(x) := -\frac{1}{2\pi} \log \frac{1}{\|x\|},$$

és vezessük be a poliharmonikus alapmegoldásokat a

$$\Delta L_1 \coloneqq L_0, \quad \Delta L_2 \coloneqq L_1, \quad \Delta L_3 \coloneqq L_2, \dots$$

definíciókkal. Egyszerűen igazolható, hogy e függvények előállíthatók az alábbi alakban:

$$L_j(x) = \|x\|^{2j} \cdot (A_j \log \|x\| + B_j)$$

4

ahol az A_i, B_j együtthatók a következő rekurzióból nyerhetők:

$$A_0 \coloneqq \frac{1}{2\pi}, \quad A_{j+1} \coloneqq \frac{A_j}{4(j+1)^2}, \qquad B_0 \coloneqq 0, \quad B_{j+1} \coloneqq \frac{B_j - \frac{A_j}{j+1}}{4(j+1)^2} \qquad (j = 0, 1, 2, ...)$$

Ezek után (3.1.1) az alábbi alakba írható:

$$(Lf)(x) = \int_{\Omega} \Delta L_1(x - y) f(y) d\Omega_y .$$
(3.1.2)

A jobb oldalon a Green-formulát használva kapjuk, hogy

$$(Lf)(x) = \int_{\Omega} L_1(x-y)\Delta f(y)d\Omega_y + \int_{\Gamma} \frac{\partial L_1(x-y)}{\partial n_y} f(y)d\Gamma_y - \int_{\Gamma} L_1(x-y)\frac{\partial f}{\partial n}(y)d\Gamma_y \quad (3.1.3)$$

A jobb oldal első tagja hasonlóan kezelhető, most már az L_2 függvény szerepeltetésével:

$$(Lf)(x) = \int_{\Omega} \Delta L_2(x - y) \Delta f(y) d\Omega_y + (\text{peremintegrálok})$$
(3.1.4)
$$= \int_{\Omega} L_2(x - y) \Delta \Delta f(y) d\Omega_y + (\text{peremintegrálok}),$$

és az eljárás folytatható. A módszer alkalmazhatósága természetesen az így nyert sor konvergenciájától függ, mely nem mindig biztosítható.

A duális reciprocitás elve [82] ennél általánosabb. Itt először *f*-et próbáljuk meg $f = \Delta g$ alakban előállítani, ahol *g*-re nem követelünk meg semmilyen peremfeltételt. Ekkor

$$(Lf)(x) = \int_{\Omega} L_0(x - y)\Delta g(y)d\Omega_y .$$
(3.1.5)

Ismét a Green-formulát alkalmazva:

$$(Lf)(x) = g(x) + \int_{\Gamma} L_0(x-y) \frac{\partial g}{\partial n}(y) d\Gamma_y - \int_{\Gamma} \frac{\partial L_0(x-y)}{\partial n_y} g(y) d\Gamma_y$$
(3.1.6)

és a jobb oldal már csak peremintegrálokat tartalmaz, tartományon vett integrálokat nem.

Egy, a fenti tulajdonságú g függvényt (közelítőleg) úgy nyerhetünk, ha *f*-et valamilyen, előre adott $x_1, x_2, ..., x_N \in \Omega$ pontokra támaszkodva, egy szórt pontú RBF-interpolációval közelítjük:

$$f(x) \coloneqq \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \Phi_j(x - x_j) \quad . \tag{3.1.7}$$

Ekkor ui. a

$$g(x) \coloneqq \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \Psi_j(x - x_j)$$
(3.1.8)

előírással definiált függvényre $\Delta g = f$ teljesül, amennyiben a Ψ_j radiális bázisfüggvények kielégítik a $\Delta \Psi_j = \Phi_j$ egyenleteket. Φ_j -k szokásos választása mellett ilyen Ψ_j függvények könnyen találhatók: így pl. a tradícionális

választás mellett

$$\Psi_j(r) = \frac{1}{4}r^2 + \frac{1}{9}r^3$$

 $\Phi_i(r) := 1 + r$

adódik.

A duális reciprocitás tehát magában foglal egy szórt pontú interpolációt, így örökli annak minden numerikus előnyét, de hátrányát is. Természetesnek tűnt tehát alkalmazni a 2. fejezetben bemutatott, numerikusan igen gazdaságos interpolációs módszereket. A szakasz hátralevő részében ennek eredményeit mutatjuk be. Részletek a [47], [48], [49] publikációkban találhatók.

Biharmonikus és bi-Helmholtz-interpoláció alkalmazása a duális reciprocitási módszerben. Az RBF-módszer explicit alkalmazása helyett, az f függvényt állítsuk elő bi-Helmholtzinterpolációval (c = 0-t is megengedve, ekkor a biharmonikus interpolációt kapjuk). A 2.3.3.Tétel (reprezentációs tétel) szerint ekkor az interpolációs függvény előáll a következő alakban:

$$f(x) = w(x) + \sum_{j=1}^{N} \beta_j \Phi(x - x_j) , \qquad (3.1.9)$$

ahol $\Phi(r) = \frac{r}{4\pi c} K_1(cr)$, a β_j együtthatók pedig egyenletmegoldás nélkül számíthatók a

$$(\Delta - c^2 I)^2 f = \sum_{j=1}^N \beta_j \delta_{x_j}$$

egyenlőségből. Ha tehát a β_i együtthatókat már meghatároztuk, w is ismertnek tekinthető.

Jelölje Ψ a $\Delta(\Delta - c^2 I)^2$ operátor egy alapmegoldását, akkor $\Delta \Psi = \Phi$. Ilyen pl. az alábbi formulával definiált függvény:

$$\Psi(r) \coloneqq \begin{cases} \frac{1}{2\pi c^4} (K_0(cr) + \log(cr)) + \frac{r}{4\pi c^3} K_1(cr) & (c \neq 0) \\ \frac{1}{128\pi} r^4 \log r - \frac{3}{256\pi} r^4 & (c = 0) \end{cases}$$
(3.1.10)

Akkor $(\Delta - c^2 I)^2 \Psi = L_0$, így az (Lf)(x) integrál alakja:

$$(Lf)(x) = \int_{\Omega} (\Delta - c^2 I)^2 \Psi(x - y) w(y) d\Omega_y + \sum_{j=1}^N \beta_j \int_{\Omega} L_0(x - y) \Delta \Psi(y) d\Omega_y$$
(3.1.11)

A jobb oldal első integráljában kétszer, a többiben egyszer alkalmazva a Green-formulát, és kihasználva, hogy $(\Delta - c^2 I)^2 w = 0$, a jobb oldal a következő alakú lesz:

$$(Lf)(x) = \sum_{j=1}^{N} \beta_j \Psi_j (x - x_j) + (\text{peremintegrálok}), \qquad (3.1.12)$$

azaz a tartományon vett integrál kiszámítását sikerült peremintegrálok kiszámítására visszavezetni, *és ehhez nem kellett interpolációs egyenletrendszert megoldani*.

(3.1.11) jobb oldala első tagjának átalakítása egy többszörös reciprocitási eljárásnak felel meg, mely 2 lépés után véget ér. A többi tag átalakítása a duális reciprocitás alkalmazásának felel meg.

(3.1.11) kiértékelése tovább egyszerűsödik, ha az integrálást egy Ω -nál bővebb tartományra terjesztjük ki, és elég nagy *c* paramétert alkalmazunk ahhoz, hogy *w* már elhanyagolható legyen (ld. (2.3.24)): sőt, valójában a fellépő többi peremintegrált sem kell kiszámítani, mert lévén ezek egyszerű- és kettősréteg potenciálok, Ω -n harmonikusak, így egy extra perem-integrálegyenlet megoldásával meghatározhatók.

3.2. Hálónélküli módszerek konstrukciója a radiális bázisfüggvények módszerével

Modellfeladatként tekintsük a kétdimenziós Poisson-egyenletet Dirichlet-peremfeltétellel ellátva:

$$\Delta u = f \qquad \Omega \text{-ban}, \qquad u \mid_{\partial \Omega} = u_0 . \tag{3.2.1}$$

Legyenek az $x_1,...,x_M$ pontok az Ω tartományon, az $x_{M+1},...,x_{M+N}$ pontok pedig a $\partial \Omega$ peremen elhelyezve.

Aszerint, hogy magát az u megoldást vagy az f jobb oldalt approximáljuk RBF-módszerrel, a (3.2.1)-re alkalmazott rácsnélküli RBF-módszerek két csoportra oszthatók:

Kansa módszere [73], [74]: Ekkor közvetlenül az u megoldást approximáljuk

$$u(x) := \sum_{j=1}^{M+N} \alpha_j \Phi_j(x - x_j)$$
(3.2.2)

alakban, ahol $\Phi_1, \Phi_2, ..., \Phi_{M+N}$ adott radiális bázisfüggvények, az $\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_{M+N}$ együtthatók egyelőre ismeretlenek. Feltéve, hogy nemcsak (3.2.2) jobb oldalán álló kifejezés approximálja jól *u*-t, hanem annak Laplace-értékei is Δu -t, az ismeretlen együtthatókra az alábbi rendszert nyerjük:

$$\sum_{j=1}^{M+N} \alpha_{j} \Delta \Phi_{j}(x_{k} - x_{j}) = f(x_{k}) \qquad (k = 1, 2, ..., M)$$

$$\sum_{j=1}^{M+N} \alpha_{j} \Phi_{j}(x_{k} - x_{j}) = u_{0}(x_{k}) \qquad (k = M + 1, ..., M + N)$$
(3.2.3)

Ez az egyenletrendszer – nagy M és N esetén – épp olyan rossz numerikus tulajdonságokkal rendelkezik, mint a 2.2. szakaszban bemutatott interpolációs módszerekből adódó egyenlet-rendszer: a mátrix nagyméretű, általában teljesen kitöltött, sokszor nemszimmetrikus és rosz-szul kondícionált.

A gondolatot a következő szakaszban továbbfejlesztettük úgy, hogy ezek a numerikus kényelmetlenségek elmaradnak. A fő szerepet a poliharmonikus és ezzel rokon interpolációs módszerek játsszák.

A partikuláris megoldások módszere: Ekkor először (3.2.1) jobb oldalán álló f függvényt approximáljuk:

$$f(x) \coloneqq \sum_{j=1}^{M+N} \alpha_j \Phi_j(x - x_j)$$
(3.2.4)

alakban, ahol $\Phi_1, \Phi_2, ..., \Phi_{M+N}$ adott radiális bázisfüggvények, az $\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_{M+N}$ együtthatók egyelőre ismeretlenek. Megoldva a megfelelő

$$\sum_{j=1}^{M+N} \alpha_j \Phi_j (x_k - x_j) = f(x_k) \qquad (k = 1, 2, ..., M + N)$$
(3.2.5)

interpolációs egyenletrendszert, tekintsük az ugyanezen α_j együtthatókkal képzett v függvényt:

$$v(x) \coloneqq \sum_{j=1}^{M+N} \alpha_j \Psi_j(x - x_j) , \qquad (3.2.6)$$

ahol Ψ_j -k olyan radiális bázisfüggvények, melyekre $\Delta \Psi_j = \Phi_j$ teljesül. Akkor *v* (közelítő) megoldása az (3.2.1) Poisson-egyenletnek, mert:

$$\Delta v(x) = \sum_{j=1}^{M+N} \alpha_j \Delta \Psi_j(x - x_j) = \sum_{j=1}^{M+N} \alpha_j \Phi_j(x - x_j) = f(x).$$
(3.2.7)

Ennélfogva (3.2.1) *u* megoldása u = v + w alakban előáll, ahol *w* megoldása a $\Delta w = 0$ Laplace-egyenletnek, és kielégíti a módosított

$$w|_{\partial\Omega} \coloneqq u_0 - v|_{\partial\Omega} \tag{3.2.8}$$

peremfeltételt.

A problémát így a *Laplace*-egyenletre kitűzött Dirichlet-feladatra vezettük vissza, amely tartományon definiált függvényt már nem tartalmaz, így pl. peremelem módszerrel gazdaságosan megoldható.

Ehelyett a 3.5.1.szakaszban olyan módszert mutatunk, mely a kevert Laplace-Helmholtzinterpolációra támaszkodva, még a perem diszkretizálását sem igényli, csak az interpolációs alappontok elhelyezését.

Megjegyezzük, hogy mind a Kansa-módszer, mind a partikuláris megoldások módszere nehézség nélkül alkalmazható általánosabb peremfeltételek mellett is. Így pl. ha (3.2.1)-ben Dirichlet-peremfeltétel helyett az általánosabb

$$u|_{\Gamma_1} = u_1 \qquad \frac{\partial u}{\partial n}|_{\Gamma_2} = v_2 . \tag{3.2.9}$$

kevert peremfeltétel adott, ahol $\Gamma_1 \cup \Gamma_2$ a $\Gamma := \partial \Omega$ perem egy diszjunkt felbontása, akkor a megfelelő homogén (Laplace-) egyenlethez (3.2.8) helyett az

$$w|_{\Gamma_1} = u_1 - v|_{\Gamma_1} \qquad \frac{\partial w}{\partial n}|_{\Gamma_2} = v_2 - \frac{\partial v}{\partial n}|_{\Gamma_2} \quad (3.2.10)$$

módosított peremfeltételt csatoljuk.

3.3. Multi-elliptikus interpoláció és a Kansa-módszer

Alkalmazzuk a magasabbrendű multi-elliptikus interpoláció módszerét magára az u megoldásfüggvényre. Minden feltételt – a peremfeltételt, és magát a Poisson-egyenletet is – interpolációs feltételként kezelünk. Ehhez (legalább) $H^4(\Omega)$ -beli interpolációs függvényt, azaz (legalább) tetraharmonikus (vagy tetra-Helmholtz) interpolációt használunk. Legyen tehát $\Omega_0 \supset \Omega$ tetszőleges, elég sima tartomány, és *u*-t approximáljuk tetraharmonikus interpolációval:

$$\Delta^4 u = 0 \qquad \Omega_0 \setminus \{x_1, x_2, ..., x_N\} - \text{en}, \qquad (3.3.1)$$

melyhez a következő mellékfeltételeket csatoljuk:

$$\frac{\partial^{J} u}{\partial n^{j}}|_{\partial \Omega_{0}} = 0 \qquad (j = 0, 1, 2, 3)
u(x_{k}) = u_{0}(x_{k}) \qquad (k = M + 1, ..., M + N)
\Delta u(x_{k}) = f(x_{k}) \qquad (k = 1, 2, ..., N)$$
(3.3.2)

A megfelelő variációs probléma most a $H_0^4(\Omega_0)$ térnek az alábbi zárt alterére épül:

$$W := \{ u \in H_0^4(\Omega_0) : \Delta u(x_1) = \Delta u(x_2) = \dots = \Delta u(x_M) = 0, \\ u(x_{M+1}) = \dots = u(x_{M+N}) = 0 \}$$
(3.3.3)

Egy végletekig leegyszerűsített példát mutat a 3.1. ábra. Itt $f \equiv 0$, és $u \equiv 1$. Az Ω tartomány egy ¼ sugarú körlemez, Ω_0 pedig az egységnégyzet. Ω peremét mindössze 32 peremponttal diszkretizáltuk. Megfigyelhető mindazonáltal, hogy az (3.3.1) – (3.3.2) probléma u megoldása nemcsak Ω -n sima, hanem az egész Ω_0 -on is (sima kiterjesztés). A numerikus tapasztalatok szerint viszont a tetraharmonikus interpoláció realizálása kényelmetlen, és – noha a QT-cella-felbontással alapuló multigrid módszer alkalmazható – a konvergencia lassabb, mint a későbbi szakaszokban mutatott módszereké, melyek csak negyedrendű interpolációs feladatra vezetik vissza a problémát.



3.1. ábra. Tetraharmonikus interpoláción alapuló rácsnélküli módszer. Pontos megoldás: $u \equiv 1$

3.4. Multi-elliptikus interpoláció és a partikuláris megoldások módszere

A multi-elliptikus interpoláció kézenfekvő és természetes módon alkalmazható a partikuláris megoldások módszerében. Az eljárás szoros kapcsolatba hozható a 3.1.szakaszban tárgyalt duális reciprocitási elvvel: a lényeges különbség, hogy míg a duális reciprocitás elvének alkalmazásakor a logaritmikus (általában: Newton-) potenciál kiszámítását peremintegrálok kiszámítására vezetjük vissza, addig a multi-elliptikus interpoláció alkalmazásával a peremintegrálok kiszámítását is megtakarítjuk.

A módszert ismét a Poisson-egyenlet Dirichlet-feladatának példáján mutatjuk be:

$\Delta u = f$	Ω-ban,	(3.4.1)
$u _{\partial\Omega} = u_0$		(3.4.2)

Tegyük fel, hogy az Ω tartományon az f jobb oldali függvény értékei $x_1, ..., x_M \in \Omega$ szórt alappontokban adott. A partikuláris megoldások módszere szerint először keressünk olyan $v: \Omega \rightarrow \mathbf{R}$ függvényt, amely a (3.4.1) Poisson-egyenletet kielégíti, de a (3.4.2) peremfeltételt nem feltétlenül:

$$\Delta v = f \qquad \Omega \text{-ban} \tag{3.4.3}$$

Ilyen v partikuláris megoldást könnyen nyerhetünk az alábbi algoritmussal:

- 1. *lépés*: Generáljunk egy QT-hálót az $x_1, ..., x_M \in \Omega$ alappontokra mint vezérlő pontokra támaszkodva egy kiindulási $\Omega_0 \supset \Omega$ négyzetben.
- 2. *lépés*: Alkalmazzunk egy multi-elliptikus (pl. biharmonikus vagy bi-Helmholtz) interpolációt az *f* függvényre. Az interpoláció eredményeképp *minden* cellaközéppontban nyerünk az *f* függvényre egy-egy (interpolált) értéket.
- 3. *lépés*: Ugyanezen a QT-hálón oldjuk meg a (3.4.3) Poisson-egyenletet az (Ω -nál bő-vebb) Ω_0 tartományon, annak peremén tetszőleges reguláris peremfeltételt írva elő.

A 2.3.2. approximációs tétel szerint az interpolált f függvény jól (az $L_2(\Omega)$ -norma szerint másodrendben) közelíti az eredeti f jobb oldali függvényt, ennélfogva a 3. lépésben kapott v függvény is jól közelíti az elméleti partikuláris megoldást.

Az eljárás ott különbözik lényegesen a 3.1. szakasz duális reciprocitási elvétől, hogy a partikuláris megoldást nem a reprezentációs tétel adta RBF-formában állítjuk elő, ehelyett közvetlenül a (3.4.3) Poisson-egyenletet oldjuk meg, éspedig ugyanazon a QT-hálón, mint amelyen a jobb oldali *f* függvényre vonatkozó interpolációt hajtottuk végre.

Gyakorlati szempontból érdemes megjegyezni, hogy mivel később, a homogén egyenlet megoldásakor a partikuláris megoldás értékeire a perempontokban is szükség lesz, célszerű a QT-háló generálásában az $x_{M+1},...,x_{M+N}$ perempontokat is bevonni vezérlő pontokként. Ugyanakkor megjegyezzük azt is, hogy a multi-elliptikus interpoláció alkalmazása esetén nincs mindig szükség a partikuláris megoldások módszerének két lépését (a partikuláris megoldás megkeresését és a homogén egyenlet megoldását) élesen elválasztani, mint a klasszikus RBF-módszerek esetén. Mihelyt a jobb oldali függvény interpolációja megtörtént, és annak értékei így definiálva lettek minden cellaközéppontban, lehetséges magát az eredeti (3.4.1) problémát megoldani ugyanezen a QT-hálón valamelyik, a következő szakaszban részletezett módon kezelve a peremfeltételt. A továbbiakban mégis szétválasztjuk a fenti két lépést a módszerek tisztább bemutathatósága érdekében.

Végezetül megjegyezzük, hogy a jobb oldali függvény interpolációja után a partikuláris megoldás – elvben – más, tradícionális módszerrel (így pl. az FFT-algoritmussal) is megkapható. Azonban az FFT alkalmazásához először ekvidisztáns rácsra kell interpolálni, az össz-műveletigény pedig legalább nagyságrendben legalább akkora, mint a multi-elliptikus interpolációé. Ugyanakkor a QT-hálós multigrid algoritmus – mivel az interpolációhoz a QT-háló-struktúra amúgy is szükséges – sokkal egyszerűbben implementálható.

3.5. A homogén probléma megoldási módszerei

Ebben a szakaszban a partikuláris megoldások módszerének alkalmazása során nyert homogén egyenlet megoldására konstruálunk különféle hálónélküli algoritmusokat. Modellfeladatként tekintsük a kétdimenziós Poisson-egyenletet:

$$\Delta u = 0 \qquad \Omega \text{-ban}, \tag{3.5.1}$$

melyet az egyszerűség kedvéért Dirichlet-peremfeltétellel látunk el:

$$u \mid_{\Gamma} = u_0 \tag{3.5.2}$$

(ahol $\Gamma := \partial \Omega$), de a későbbiekben vizsgálni fogjuk a Neumann-peremfeltétel esetét is.

Tegyük fel, hogy a Γ peremet az $x_1, x_2, ..., x_N \in \Gamma$ pontokkal diszkretizáljuk, melyeken semmiféle struktúrát nem tételezünk fel.

Multi-elliptikus interpolációról lévén szó, melyben a (3.5.1)-(3.5.2) modellfeladatnál lényegesen bonyolultabb, legalább negyedrendű differenciálegyenletet kell megoldani, természetes módon kínálkozik magának a (3.5.1)-(3.5.2) modellfeladatnak QT-hálón való multigrid technikát használó megoldása, hasonlóan az 1.5. szakaszban leírtakhoz. Ezt – interpolációs szempontból – perem-interpolációként is interpretálhatjuk, ahol az alkalmazott multi-elliptikus operátor maga a Laplace-operátor ("harmonikus interpoláció").

Ha a Γ peremen elhelyezett pontok száma olyan nagy, hogy ezeknek a peremen vett karakterisztikus távolsága az alkalmazott legfinomabb cella mérete alá esik, akkor ez a megközelítés elvben alkalmazható. Azonban ekkor a szükséges perempontok száma a QT-háló felbontásától függ. Ez sokszor nagyon nagyszámú perempont elhelyezését tesz szükségessé, ami egyrészt a számítási munkát növeli meg feleslegesen, másrészt a kellő finomságú perempont-sorozat sokszor nem is áll rendelkezésre. A hálónélküli módszerek tipikus alapproblémája, hogy az $x_1, x_2, ..., x_N \in \Gamma$ perempontok rendszerint *előre adottak*, új perempont definiálása sokszor nehézségbe ütközik. Ha pedig a megoldásra QT-hálós multigrid technikát alkalmazunk úgy, hogy a legfinomabb cellaméret a perempontok karakterisztikus távolsága alá esik, ez szükségképp *numerikus szingularitások* megjelenését eredményezi a perempontokban. Másképp megfogalmazva, a diszkrét pontokban adott peremfeltétel a Laplace-egyenletet inkorrekt kitűzésű feladattá teszi, ami a közelítés pontosságát tönkreteszi.

A jelenség jól megfigyelhető az alábbi példán. Tekintsük a Laplace-egyenletet az $\Omega_1 \setminus \Omega_{\varepsilon}$ tartományon, ahol Ω_1 az egységkör, Ω_{ε} pedig egy origó közepű, $0 < \varepsilon < 1$ sugarú kör. Az egységkör Γ_1 peremén legyen az $u \mid_{\Gamma_1} \coloneqq 0$, az Ω_{ε} kör Γ_{ε} peremén pedig a $u \mid_{\Gamma_{\varepsilon}} \coloneqq 1$ peremfeltétel adott. Ha $\varepsilon << 1$, a feladat numerikus megoldása jól modellezi az origóban mint egyetlen pontban adott interpolációs feltétel hatását. A pontos megoldás (polárkoordinátákban) nyilván $u_{\varepsilon}(r) = \frac{\log r}{\log \varepsilon}$. Ha $\varepsilon \to 0$, akkor $u_{\varepsilon} \to 0$ pontonként Ω_1 -ben mindenütt, az origót kivéve. Azaz a "harmonikus interpolációnak" nincs az alappontokban is folytonos megoldása: a numerikus megoldások azt az esetet közelítik, amikor ε az alkalmazott rács lépésközének nagyságrendjébe esik, így logaritmikus jellegű numerikus szingularitás lép fel az origóban.

A peremen elhelyezett interpolációs alappontok problémáját szemléltetendő, tekintsük a (3.5.1) Laplace-egyenletet az egységkörön. A pontos megoldás legyen

$$u(x, y) \coloneqq x + y \,,$$

a Dirichlet-peremfeltétel legyen ezzel konzisztens. Helyezzünk el a peremen 32 pontot (ekvidisztáns módon). A tesztfeladatra QT-hálós multigrid módszert alkalmazva, max. 8 felbontási szinttel, a közelítő megoldás a 3.2. *ábrán* látható. Jól megfigyelhetők a (logaritmikus jellegű) numerikus szingularitások a perempontokban, melyek miatt a közelítés relatív hibája nagy (L_2 -normában mérve 13.36%).



3.2. ábra. Harmonikus perem-interpoláció 32 alapponttal Szingularitások az alappontokban

Ha a perempontok számát – változatlan QT-cellafelbontás alkalmazása mellett – 1024-re növeljük, a numerikus szingularitások eltűnnek, és a közelítés relatív hibája (L_2 -normában) 0.10%-ra csökken. Ez persze a számításigény növekedésével jár.



3.3. ábra. Harmonikus perem-interpoláció 1024 alapponttal Nincsenek szingularitások az alappontokban

A szakasz további részében olyan hálómentes módszerek konstruálunk, melyek a peremszingularitások most vázolt problémáját megkerülik.

3.5.1. A Laplace-egyenlet approximálása Laplace-Helmholtz-interpolációval

Modellfeladatként tekintsük egy korlátos, sima Ω tartományon kitűzött Laplace-egyenletet, Dirichlet-peremfeltétellel ellátva ((3.5.1)-(3.5.2) probléma), ahol $u_0 \in H^{1/2}(\Gamma)$ adott, folytonos peremfüggvény. Jelölje $u^* \in H^1(\Omega)$ ennek megoldását. Tegyük fel ismét, hogy a Γ peremet az $x_1, x_2, ..., x_N \in \Gamma$ pontokkal diszkretizáljuk. A módszer alapötlete, hogy az u^* megoldást első lépésben az alábbi típusú (szingulárisan perturbált) negyedrendű multi-elliptikus egyenlet megoldásával közelítjük (ld. a pályázó [50], [51], [53], [54], [55], [56] publikációit):

$$\Delta \left(I - \frac{1}{c^2}\Delta\right) u = 0 \qquad \Omega \text{-ban},$$
(3.5.1.1)

ahol c > 0 egy később megválasztandó (skálázó jellegű) konstans. Az egyenlet nyilván ekvivalens a

$$\Delta(\Delta - c^2 I)u = 0$$

Laplace-Helmholtz-egyenlettel. Ennek megoldását pedig a

$$\Delta(\Delta - c^2 I)v = 0$$

$$v(x_k) = u_0(x_k) \qquad (k = 1, 2, ..., N)$$
(3.5.1.2)

Laplace-Helmholtz-interpolációval közelítjük. Azt várjuk, hogy alkalmasan megválasztott c konstans mellett ily módon a (3.5.1)-(3.5.2) probléma megoldásának egy jó közelítését kapjuk.

Az első részproblémát vizsgálandó, tekintsük a

$$\Delta(\Delta - c^2 I)u = 0 \tag{3.5.1.3}$$

differenciálegyenletet, ellátva az alábbi Dirichlet-féle peremfeltétellel:

$$u|_{\Gamma} = u_0, \quad \frac{\partial u}{\partial n}|_{\Gamma} = 0, \tag{3.5.1.4}$$

az u_0 peremfüggvényről pedig tegyük fel, hogy $u_0 \in H^{3/2}(\Gamma)$. Akkor (3.5.1.3)-(3.5.1.4)nek egyetlen megoldása létezik a $H^2(\Omega)$ Szoboljev-térben. Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy $\Omega = (0, L) \times (0, +\infty)$, a peremfeltételeket pedig a $\Gamma := \{(x, 0) : 0 \le x \le L\}$ szakaszon írjuk elő, a megoldást x szerint L-periodikusnak tételezve fel, mely $y \to +\infty$ esetén gyorsan csökken. Innen a korlátos, sima Ω tartomány esete egyszerű változótranszformációval adódik. (Természetesen, mivel Ω most nem korlátos, a konstans függvény nincs benne $H^2(\Omega)$ -ban, így fel kell tenni, hogy az u_0 peremfüggvény trigonometrikus Fourier-sorának konstans tagja hiányzik, ez azonban nem lényeges megszorítás.)

Az alábbi tétel a (3.5.1)-(3.5.2) modellfeladat és a (3.5.1.3)-(3.5.1.4) negyedrendű probléma megoldásának eltérésére ad becslést: **3.5.1.Tétel**: A (3.5.1)-(3.5.2) és a (3.5.1.3)-(3.5.1.4) feladatok u^* ill. u megoldásainak eltérésére érvényes az alábbi becslés:

$$\| u - u^* \|_{L_2(\Omega)}^2 \le \frac{\pi}{c^2} \| u_0 \|_{H^{1/2}(\Gamma)}^2$$

Bizonyítás: Fejtsük az u_0 peremfüggvényt komplex trigonometrikus Fourier-sorba:

$$u_0(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \alpha_k e^{\frac{2\pi i k x}{L}} =: \sum_{k=-\infty}^{\infty} \alpha_k e^{i\kappa x},$$

ahol az egyszerűség kedvéért a $\kappa := \kappa(k) := \frac{2\pi k}{L}$ jelöléssel éltünk. Akkor az u^* megoldás explicit módon kifejezhető:

$$u^{*}(x, y) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \alpha_{k} e^{-|\kappa|y} e^{i\kappa x}$$

Kézenfekvő levezetések után azt kapjuk, hogy a (3.5.1.3)-(3.5.1.4) feladat *u* megoldása szintén kifejezhető szeparált alakú megoldások végtelen összegeként:

$$u(x,y) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \alpha_k \left(A_k e^{-|\kappa|y|} + B_k e^{-\sqrt{\kappa^2 + c^2}y} \right) e^{i\kappa x},$$

ahol

$$A_k = \frac{\sqrt{\kappa^2 + c^2}}{\sqrt{\kappa^2 + c^2} - |\kappa|}, \qquad B_k = -\frac{|\kappa|}{\sqrt{\kappa^2 + c^2} - |\kappa|} \qquad (k \in \mathbb{Z}).$$

Standard technikával könnyen levezethető ugyanis, hogy a (3.5.1.3) negyedrendű egyenlet

$$u_k(x, y) \coloneqq e^{i\kappa x} b_k(y)$$

alakú (szeparált) megoldásait keresve:

$$\begin{aligned} \Delta(\Delta - c^2 I)u_k(x, y) &= \Delta\Delta u_k(x, y) - c^2 \Delta u_k(x, y) = \\ &= e^{ikx} \Big(\kappa^4 b_k(y) - 2\kappa^2 b_k^{"}(y) + b_k^{IV}(y) + c^2 \kappa^2 b_k(c) - c^2 b_k^{"}(y) \Big) = \\ &= e^{ikx} \Big(b_k^{IV}(y) - (2\kappa^2 + c^2) b_k^{"}(y) + (\kappa^4 + c^2 \kappa^2) b_k(y) \Big) = 0, \end{aligned}$$

így a $b_k \ (k \in \mathbb{Z})$ függvények szükségképp kielégítik a

$$b_k^{IV} - (2\kappa^2 + c^2)b_k^{"} + (\kappa^4 + c^2\kappa^2)b_k = 0$$

negyedrendű differenciálegyenletet. Ennek karakterisztikus gyökei: $|\kappa|$, $(-|\kappa|)$, $\sqrt{\kappa^2 + c^2}$ és $(-\sqrt{\kappa^2 + c^2})$. Ezekből csak a negatív gyökök vehetők figyelembe, a pozitív gyököknek megfelelő megoldások ui. *y* szerint exponenciálisan nőnek, így a megfelelő szeparált megoldások nem tartoznak már az $L_2(\Omega)$ térbe sem. Kaptuk tehát, hogy minden $k \in \mathbb{Z}$ egész szám és $A_k, B_k \in \mathbb{R}$ esetén

$$\left(A_k e^{-|\kappa|y} + B_k e^{-\sqrt{\kappa^2 + c^2}y}\right) e^{i\kappa x}$$

megoldása a (3.5.1.3) egyenletnek. Az A_k , B_k együtthatók konkrét alakja pedig onnan adódik, hogy a b_k függvényeknek ki kell elégíteniük a $b_k(0) = 1$, $b'_k(0) = 0$ mellék-feltételeket ahhoz, hogy a fenti alakú *u* függvény kielégítse a (3.5.1.4) peremfeltételeket. Ezek után a modellfeladat pontos u^* megoldása és a (3.5.1.3)-(3.5.1.4) feladat *u* megoldásának eltérése:

$$u(x,y) - u^*(x,y) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \alpha_k \left((A_k - 1) \cdot e^{-|\kappa|y|} + B_k e^{-\sqrt{\kappa^2 + c^2}y} \right) e^{i\kappa x} =$$
$$= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \alpha_k B_k \left(e^{-|\kappa|y|} + e^{-\sqrt{\kappa^2 + c^2}y} \right) e^{i\kappa x},$$

ahol felhasználtuk a nyilvánvaló $A_k + B_k = 1$ egyenlőséget. A Parseval-tételt használva:

$$\| u - u^* \|_{L_2(\Omega)}^2 = \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{L} u(x, y) - u^*(x, y) |^2 dx dy =$$

= $L \cdot \int_{0}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} |\alpha_k|^2 B_k^2 \left(e^{-2|\kappa|y} - 2e^{-(|\kappa| + \sqrt{\kappa^2 + c^2})y} + e^{-2\sqrt{\kappa^2 + c^2}y} \right) dy =$
= $L \cdot \sum_{k=-\infty}^{\infty} |\alpha_k|^2 B_k^2 \left(\frac{1}{2|\kappa|} - \frac{2}{|\kappa| + \sqrt{\kappa^2 + c^2}} + \frac{1}{2\sqrt{\kappa^2 + c^2}} \right).$

 B_k helyébe annak kifejezését beírva, a jobb oldal lényegesen leegyszerűsíthető. Hoszszabb, de kézenfekvő algebrai átalakítások után kapjuk, hogy

$$\| u - u^* \|_{L_2(\Omega)}^2 = \frac{L}{2} \cdot \sum_{k=-\infty}^{\infty} |\alpha_k|^2 \cdot \frac{|\kappa|}{\sqrt{\kappa^2 + c^2} \cdot \left(\sqrt{\kappa^2 + c^2} + |\kappa|\right)}$$

ahonnan a kívánt becslés már adódik:

$$\| u - u^* \|_{L_2(\Omega)}^2 \leq \frac{L}{2} \cdot \sum_{k=-\infty}^{\infty} |\alpha_k|^2 \cdot \frac{|\kappa|}{\kappa^2 + c^2} \leq \frac{L}{2c^2} \cdot \sum_{k=-\infty}^{+\infty} |\alpha_k|^2 \cdot |\kappa| = \frac{\pi}{c^2} \cdot \sum_{k=-\infty}^{+\infty} |\alpha_k|^2 \cdot |k| \leq \frac{\pi}{c^2} \cdot \sum_{k=-\infty}^{+\infty} |\alpha_k|^2 \cdot \sqrt{1 + k^2} = \frac{\pi}{c^2} \cdot \|u_0\|_{H^{1/2}(\Gamma)}^2$$

Mielőtt rátérnénk a (3.5.1)-(3.5.2) modellfeladat u^* megoldása és a (3.5.1.2) Laplace-Helmholtz-interpolációs függvény eltérésének becslésére, szükségünk lesz a Laplace-Helmholtz-egyenlet megoldásainak becslésére. Erre vonatkozik a következő tétel:

3.5.2.Tétel: Legyen $u \in H^2(\Omega)$ tetszőleges megoldása a $\Delta(\Delta - c^2 I)u = 0$ egyenletnek, és tegyük fel, hogy $\frac{1}{c} \leq L$. Akkor

$$\| u \|_{L_{2}(\Omega)}^{2} \leq L^{2} \| u |_{\Gamma} \|_{H^{-1/2}(\Gamma)}^{2} + \frac{L^{2}}{c^{2}} \left\| \frac{\partial u}{\partial n} |_{\Gamma} \right\|_{H^{-1/2}(\Gamma)}^{2}$$

Bizonyítás: A bizonyítás technikája hasonló a 3.5.1. Tétel bizonyításához. Állítsuk elő az *u* függvényt szeparált alakú megoldások végtelen összegeként:

$$u(x, y) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left(a_k e^{-|\kappa|y} + b_k e^{-\sqrt{\kappa^2 + c^2}y} \right) e^{i\kappa x}$$

alakban, ahol $\kappa := \kappa(k) := \frac{2\pi k}{L}$. Az *u* függvénynek a Γ peremen vett nyomai:

$$u(x,0) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} (a_k + b_k) e^{i\kappa x} =: \sum_{k=-\infty}^{\infty} \alpha_k e^{i\kappa x}$$
$$\frac{\partial u}{\partial n}(x,0) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left(|\kappa| a_k + \sqrt{\kappa^2 + c^2} b_k \right) e^{i\kappa x} =: \sum_{k=-\infty}^{\infty} \beta_k e^{i\kappa x}$$

Innen az a_k , b_k együtthatók meghatározhatók:

$$a_k = A_k \alpha_k + A_k \beta_k, \qquad b_k = B_k \alpha_k + B_k \beta_k,$$

ahol minden $k \in \mathbb{Z}$ -re

$$A_{k} = \frac{\sqrt{\kappa^{2} + c^{2}}}{\sqrt{\kappa^{2} + c^{2} - |\kappa|}}, \qquad B_{k} = -\frac{|\kappa|}{\sqrt{\kappa^{2} + c^{2} - |\kappa|}} = 1 - A_{k}$$
$$\tilde{A}_{k} = -\frac{1}{\sqrt{\kappa^{2} + c^{2} - |\kappa|}}, \qquad \tilde{B}_{k} = \frac{1}{\sqrt{\kappa^{2} + c^{2} - |\kappa|}} = -\tilde{A}_{k}$$

Mivel $u \in H^2(\Omega)$, azért nyilván $a_0 = 0$. Ugyanakkor $a_0 = A_0\alpha_0 + \tilde{A}_0\beta_0 = \alpha_0 - \frac{\beta_0}{c}$ és $b_0 = B_0\alpha_0 + \tilde{B}_0\beta_0 = \frac{\beta_0}{c}$, ahonnan $b_0 = \alpha_0$. A nemzérus indexű a_k, b_k -ra kapott

kifejezéseket visszehelyettesítve az *u* függvény formulájába:

$$u(x, y) = \alpha_0 e^{-cy} + \sum_{k \neq 0} \alpha_k \left(A_k e^{-|\kappa|y|} + B_k e^{-\sqrt{\kappa^2 + c^2}y} \right) e^{i\kappa x} + \sum_{k \neq 0} \beta_k \left(\tilde{A}_k e^{-|\kappa|y|} + \tilde{B}_k e^{-\sqrt{\kappa^2 + c^2}y} \right) e^{i\kappa x}$$

A Parseval-tételt és az elemi $|z_1 + z_2|^2 \le 2 |z_1|^2 + 2 |z_2|^2$ egyenlőtlenséget használva:

$$\begin{split} \| u \|_{L_{2}(\Omega)}^{2} &= \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} |u(x,y)|^{2} dxdy \leq \\ \leq \frac{L}{2c} |\alpha_{0}|^{2} + 2L \sum_{k \neq 0} |\alpha_{k}|^{2} \left(\frac{A_{k}^{2}}{2|\kappa|} + \frac{2A_{k}B_{k}}{|\kappa| + \sqrt{\kappa^{2} + c^{2}}} + \frac{B_{k}^{2}}{2\sqrt{\kappa^{2} + c^{2}}} \right) + \\ &+ 2L \sum_{k \neq 0} |\beta_{k}|^{2} \left(\frac{\tilde{A}_{k}^{2}}{2|\kappa|} + \frac{2\tilde{A}_{k}\tilde{B}_{k}}{|\kappa| + \sqrt{\kappa^{2} + c^{2}}} + \frac{\tilde{B}_{k}^{2}}{2\sqrt{\kappa^{2} + c^{2}}} \right) = \\ &= \frac{L}{2c} |\alpha_{0}|^{2} + L \sum_{k \neq 0} \frac{|\alpha_{k}|^{2}}{|\kappa|} \left(A_{k}^{2} + \frac{4|\kappa|A_{k}B_{k}}{|\kappa| + \sqrt{\kappa^{2} + c^{2}}} + \frac{|\kappa|B_{k}^{2}}{\sqrt{\kappa^{2} + c^{2}}} \right) + \\ &+ L \sum_{k \neq 0} \frac{|\beta_{k}|^{2}}{|\kappa|} \left(\tilde{A}_{k}^{2} + \frac{4|\kappa|\tilde{A}_{k}\tilde{B}_{k}}{|\kappa| + \sqrt{\kappa^{2} + c^{2}}} + \frac{|\kappa|\tilde{B}_{k}^{2}}{\sqrt{\kappa^{2} + c^{2}}} \right) = \end{split}$$

 A_k , B_k és \tilde{A}_k , \tilde{B}_k helyébe azok kifejezését beírva, a jobb oldali zárójeles kifejezések leegyszerűsíthetők. A következőt kapjuk:

$$A_{k}^{2} + \frac{4|\kappa|A_{k}B_{k}}{|\kappa| + \sqrt{\kappa^{2} + c^{2}}} + \frac{|\kappa|B_{k}^{2}}{\sqrt{\kappa^{2} + c^{2}}} = \frac{|\kappa|}{|\kappa| + \sqrt{\kappa^{2} + c^{2}}} + \frac{|\kappa| + \sqrt{\kappa^{2} + c^{2}}}{\sqrt{\kappa^{2} + c^{2}}} = \frac{\frac{|\kappa|}{c}}{\frac{|\kappa|}{c}} + \frac{\frac{|\kappa|}{c}}{\sqrt{\kappa^{2} + c^{2}}} + \frac{\frac{|\kappa|}{c}}{\sqrt{\frac{\kappa^{2}}{c^{2}} + 1}} + 1 =: f\left(\frac{|\kappa|}{c}\right)$$

ahol $f(t) := \frac{t}{t + \sqrt{t^2 + 1}} + \frac{t}{\sqrt{t^2 + 1}} + 1$. Hasonlóan:

$$\begin{split} \tilde{A}_{k}^{2} + &\frac{4|\kappa|\tilde{A}_{k}\tilde{B}_{k}}{|\kappa| + \sqrt{\kappa^{2} + c^{2}}} + \frac{|\kappa|\tilde{B}_{k}^{2}}{\sqrt{\kappa^{2} + c^{2}}} = \\ &= \frac{(\sqrt{\kappa^{2} + c^{2}} + |\kappa|)^{2}}{c^{4}} \cdot \left(1 - \frac{4|\kappa|}{|\kappa| + \sqrt{\kappa^{2} + c^{2}}} + \frac{|\kappa|}{\sqrt{\kappa^{2} + c^{2}}}\right) = \\ &= \frac{1}{c^{2}} \cdot \left(\sqrt{\frac{\kappa^{2}}{c^{2}} + 1} + \frac{|\kappa|}{c}\right)^{2} \cdot \left(1 - \frac{4\frac{|\kappa|}{c}}{\frac{|\kappa|}{c}} + \frac{\frac{|\kappa|}{c}}{\sqrt{\frac{\kappa^{2}}{c^{2}} + 1}}\right) = :\frac{1}{c^{2}} \cdot g\left(\frac{|\kappa|}{c}\right), \\ &\text{ahol } g(t) := \left(t + \sqrt{t^{2} + 1}\right)^{2} \left(1 - \frac{4t}{t + \sqrt{t^{2} + 1}} + \frac{t}{\sqrt{t^{2} + 1}}\right). \end{split}$$

Standard függvényvizsgálati módszerekkel (pl. a t := sh z helyettesítéssel) könnyen látható, hogy f monoton nő a $[0,+\infty)$ intervallumon, és minden $t \in [0,+\infty)$ esetén $1 \le f(t) < \frac{5}{2}$; továbbá g monoton fogy a $[0,+\infty)$ intervallumon, és minden $t \in [0,+\infty)$ esetén $0 < g(t) \le 1$. Innen

$$\| u \|_{L_{2}(\Omega)}^{2} \leq \frac{L}{2c} | \alpha_{0} |^{2} + \frac{5L}{2} \sum_{k \neq 0} \frac{|\alpha_{k}|^{2}}{|\kappa|} + \frac{L}{c^{2}} \sum_{k \neq 0} \frac{|\beta_{k}|^{2}}{|\kappa|} = \frac{L}{2c} |\alpha_{0}|^{2} + \frac{5L^{2}}{4\pi} \sum_{k \neq 0} \frac{|\alpha_{k}|^{2}}{|k|} + \frac{L^{2}}{2\pi c^{2}} \sum_{k \neq 0} \frac{|\beta_{k}|^{2}}{|k|}$$

Felhasználva az $\frac{1}{c} \le L$ feltételt és az elemi $\frac{1}{|k|} \le \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{1+k^2}}$ $(k \in \mathbb{Z}, k \ne 0)$ egyenlőtlenséget, végül a kívánt becsléshez jutunk:

$$\begin{split} \| u \|_{L_{2}(\Omega)}^{2} &\leq \frac{L^{2}}{2} | \alpha_{0} |^{2} + \frac{5\sqrt{2}L^{2}}{4\pi} \sum_{k \neq 0} \frac{|\alpha_{k}|^{2}}{|k|} + \frac{\sqrt{2}L^{2}}{2\pi c^{2}} \sum_{k \neq 0} \frac{|\beta_{k}|^{2}}{|k|} \leq \\ &\leq L^{2} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{|\alpha_{k}|^{2}}{\sqrt{1+k^{2}}} + \frac{L^{2}}{c^{2}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{|\beta_{k}|^{2}}{\sqrt{1+k^{2}}} = L^{2} \| u \|_{H^{-1/2}(\Gamma)}^{2} + \frac{L^{2}}{c^{2}} \| \frac{\partial u}{\partial n} \|_{H^{-1/2}(\Gamma)}^{2} \,. \end{split}$$

Végül igazolunk egy tételt, mely olyan peremfüggvények Szoboljev-normáira ad becslést, melyek a Γ peremen elhelyezett interpolációs alappontokban eltűnnek.

3.5.3.Tétel: Legyen $u \in H^{3/2}(\Gamma)$ olyan függvény, mely eltűnik a Γ -n elhelyezett $x_1, x_2, ..., x_N$ alappontokon. Jelölje *h* a szomszédos alappontok maximális távolságát Γ mentén, akkor:

$$\| u \|_{H^{0}(\Gamma)}^{2} \leq 2^{3/2} \pi^{3} \cdot \frac{h^{3}}{L^{3}} \cdot \| u \|_{H^{3/2}(\Gamma)}^{2}$$

Bizonyítás: Fejtsük u-t komplex trigonometrikus Fourier-sorba:

$$u(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \alpha_k e^{i\kappa x} \qquad (\kappa := \frac{2k\pi}{L})$$

Tetszőleges $s \in \mathbf{R}$ esetén a $H^{s}(\Gamma)$ -norma a következő alakban fejezhető ki:

$$\| u \|_{H^{s}(\Gamma)}^{2} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} |\alpha_{k}|^{2} \cdot (1+k^{2})^{s} ,$$

továbbá:

$$\| u' \|_{H^{0}(\Gamma)}^{2} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} |\kappa|^{2} |\alpha_{k}|^{2} = \frac{4\pi^{2}}{L^{2}} \cdot \sum_{k=-\infty}^{\infty} k^{2} |\alpha_{k}|^{2} \le \frac{4\pi^{2}}{L^{2}} \cdot \| u \|_{H^{1}(\Gamma)}^{2}.$$

Mivel pedig minden $x \in [x_k, x_{k+1}]$ -re

$$u(x) = \int_{x_{h}}^{x} u'(t) dt ,$$

innen, a Cauchy-Schwarz-egyenlőtlenséget használva:

$$|u(x)|^{2} \leq \left(\int_{x_{k}}^{x} 1^{2} dt\right) \cdot \left(\int_{x_{k}}^{x} |u'(t)|^{2} dt\right) = (x - x_{k}) \cdot \int_{x_{k}}^{x} |u'(t)|^{2} dt,$$

ahonnan

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} |u(x)|^2 dx \le \frac{h^2}{2} \cdot \int_{x_k}^{x_{k+1}} |u'(t)|^2 dt .$$

Összegezve az összes részintervallumra, kapjuk, hogy:

$$L\sum_{k=-\infty}^{\infty} |\alpha_{k}|^{2} = \|u\|_{L_{2}(\Gamma)}^{2} \le \frac{h^{2}}{2} \cdot \|u'\|_{L_{2}(\Gamma)}^{2} \le Lh^{2} \cdot \frac{2\pi^{2}}{L^{2}} \|u\|_{H^{1}(\Gamma)}^{2}$$

ahonnan $|| u ||^{2}_{H^{0}(\Gamma)} \leq 2\pi^{2} \cdot \frac{h^{2}}{L^{2}} \cdot || u ||^{2}_{H^{1}(\Gamma)}.$

Most felhasználjuk a klasszikus *interpolációs egyenlőtlenséget* [75], mely szerint tetszőleges $r \le s \le t$ ($r \ne t$) indexek mellett:

$$\| u \|_{H^{s}(\Gamma)} \leq \| u \|_{H^{r}(\Gamma)}^{\theta} \cdot \| u \|_{H^{t}(\Gamma)}^{1-\theta}, \text{ abol } \theta \coloneqq \frac{t-s}{t-r}$$

Alkalmazzuk ezt az egyenlőtlenséget az $r \coloneqq 0$, $s \coloneqq 1$, $t \coloneqq 3/2$ szereposztással, ekkor $\theta = 1/3$, és az előző becslést felhasználva kapjuk, hogy

$$\| u \|_{H^{1}(\Gamma)} \leq \| u \|_{H^{0}(\Gamma)}^{1/3} \cdot \| u \|_{H^{3/2}(\Gamma)}^{2/3} \leq \left(\frac{\sqrt{2} \cdot \pi h}{L}\right)^{1/3} \cdot \| u \|_{H^{1}(\Gamma)}^{1/3} \cdot \| u \|_{H^{3/2}(\Gamma)}^{2/3},$$

ahonnan azonnal adódik, hogy

$$\| u \|_{H^{1}(\Gamma)}^{2} \leq \sqrt{2} \cdot \pi \cdot \frac{h}{L} \cdot \| u \|_{H^{3/2}(\Gamma)}^{2}.$$

A kapott becslést összevetve az előzőleg nyert $||u||_{H^0(\Gamma)}^2 \le 2\pi^2 \cdot \frac{h^2}{L^2} \cdot ||u||_{H^1(\Gamma)}^2$ becsléssel, az állítás már adódik.

Megjegyzés: A 3.5.3. Tétel általánosabban is igaz. A fentihez hasonló módon igazolható, hogy ha p < q tetszőleges olyan nemnegatív számok, melyek között van egész szám, $u \in \mathcal{D}(\Omega)$ pedig olyan függvény, mely eltűnik a Γ -n elhelyezett $x_1, x_2, ..., x_N$ alappontokon, akkor

érvényes az $||u||_{H^{p}(\Gamma)} \leq C \cdot \left(\frac{h}{L}\right)^{q-p} \cdot ||u||_{H^{q}(\Gamma)}$ becslés alkalmas, az alappontoktól és *u*-tól független $C \geq 0$ konstans mellett.

A 3.5.1 – 3.5.3. Tételek felhasználásával most már egyszerűen adódik e szakasz fő eredménye, a (3.5.1)-(3.5.2) modellfeladat u^* megoldásának és a (3.5.1.2) Laplace-Helmholtz-féle perem-interpolációs v függvény eltérésének becslése. Jelölje u a (3.5.1.3)-(3.5.1.4) negyedrendű feladat megoldását. Akkor nyilván:

$$\| u^* - v \|_{L_2(\Omega)}^2 \le 2 \| u^* - u \|_{L_2(\Omega)}^2 + 2 \| u - v \|_{L_2(\Omega)}^2 \le \frac{2\pi}{c^2} \| u_0 \|_{H^{1/2}(\Gamma)}^2 + 2 \| u - v \|_{L_2(\Omega)}^2,$$

ahol felhasználtuk a 3.5.1. Tételt. Elég tehát a jobb oldal második tagját tovább-becsülni. A 3.5.2. Tétel értelmében:

$$\| u - v \|_{L_{2}(\Omega)}^{2} \leq L^{2} \| u - v \|_{H^{-1/2}(\Gamma)}^{2} + \frac{L^{2}}{c^{2}} \left\| \frac{\partial(u - v)}{\partial n} \right\|_{H^{-1/2}(\Gamma)}^{2} \leq L^{2} \| u - v \|_{H^{0}(\Gamma)}^{2} + \frac{L^{2}}{c^{2}} \left\| \frac{\partial(u - v)}{\partial n} \right\|_{H^{-1/2}(\Gamma)}^{2},$$

$$(3.5.1.4)$$

ahol a jobb oldalon a durva $||u - v||_{H^{-1/2}(\Gamma)}^2 \le ||u - v||_{H^0(\Gamma)}^2$ becslést alkalmaztuk. A jobb oldal két tagját külön becsüljük. Legyen $\Omega_0 \supset \Omega$ egy, az eredeti Ω tartománynál bővebb tartomány, melyen a Laplace-Helmholtz-interpolációt végrehajtjuk. A jobb oldal első tagjának becslésében használjuk fel a 3.5.3. Tételt és a nyom-tételt:

$$\| u - v \|_{H^{0}(\Gamma)}^{2} \leq C_{1}h^{3} \| u - v \|_{H^{3/2}(\Gamma)}^{2} \leq C_{2}h^{3} \| u - v \|_{H^{2}(\Omega)}^{2} \leq C_{2}h^{3} \| u - v \|_{H^{2}(\Omega_{0})}^{2},$$

ahol az utolsó egyenlőtlenségben feltettük, hogy *u* a bővebb Ω_0 tartományra H^2 -folytonosan ki van terjesztve úgy, hogy a kiterjesztett függvény egyúttal a $H_0^2(\Omega_0)$ Szoboljev-térhez tartozik: ismeretes, hogy ilyen folytonos kiterjesztés létezik. Itt és a későbbiekben $C_1, C_2,...$ alkalmas, az u^*, u, v függvényektől valamint a perem-interpolációs alappontoktól független konstansokat jelentenek. Most használjuk ki, hogy a $H_0^2(\Omega_0)$ térben a H^2 -norma ekvivalens a $\|w\| := \|\Delta w\|_{L_2(\Omega_0)}$ -normával, innen kapjuk, hogy:

$$\| u - v \|_{H^{0}(\Gamma)}^{2} \leq C_{3}h^{3} \| \Delta(u - v) \|_{L_{2}(\Omega_{0})}^{2} \leq C_{3}h^{3} (\| \Delta(u - v) \|_{L_{2}(\Omega_{0})}^{2} + c^{2} \| \operatorname{grad}(u - v) \|_{L_{2}(\Omega_{0})}^{2}).$$

$$(3.5.1.5)$$

A jobb oldali zárójeles kifejezés nem más, mint (u - v) normája a $H_0^2(\Omega_0)$ -normával ekvivalens (2.3.15) norma szerint. Mivel az (u - v) függvény *u*-nak a

$$W := \{ w \in H_0^2(\Omega_0) : u(x_1) = \dots = u(x_N) = 0 \}$$

zárt altérre vett ortogonális vetülete (ld. a 2.3. szakasz eredményeit), azért (u - v)-nek e normája *u*-nak ugyanezen normájával becsülhető felülről, és kapjuk, hogy:

$$\| u - v \|_{H^{0}(\Gamma)}^{2} \leq C_{3}h^{3}(\| \Delta u \|_{L_{2}(\Omega_{0})}^{2} + c^{2} \| \operatorname{grad} u \|_{L_{2}(\Omega_{0})}^{2}) =$$

$$= C_{3}h^{3} \| \Delta u \|_{L_{2}(\Omega_{0})}^{2} + C_{3}h^{3}c^{2} \| \operatorname{grad} u \|_{L_{2}(\Omega_{0})}^{2}.$$

$$(3.5.1.6)$$

A (3.5.1.4) egyenlőtlenség jobb oldalának második tagját először a nyom-tétellel becsüljük:

$$\frac{1}{c^2} \left\| \frac{\partial (u-v)}{\partial n} \right\|_{H^{-1/2}(\Gamma)}^2 \leq \frac{C_4}{c^2} \| u-v \|_{H^1(\Omega)}^2,$$

Most használjuk ki, hogy az *u*, *v* függvények már ki vannak terjesztve a bővebb Ω_0 tartományra úgy, hogy a kiterjesztett függvények egyúttal a $H_0^2(\Omega_0) \subset H_0^1(\Omega_0)$ Szoboljev-térhez tartoznak. $H_0^1(\Omega_0)$ -ban a norma ekvivalens a $||w|| := || \operatorname{grad} w ||_{L_2(\Omega_0)}$ normával, innen

$$\begin{split} & \frac{1}{c^2} \left\| \frac{\partial (u-v)}{\partial n} \right\|_{H^{-1/2}(\Gamma)}^2 \leq \frac{C_5}{c^2} \,\| \operatorname{grad}(u-v) \,\|_{L_2(\Omega_0)}^2 \leq \\ & \leq \frac{C_5}{c^4} \left(\| \,\Delta(u-v) \,\|_{L_2(\Omega_0)}^2 + c^2 \,\| \operatorname{grad}(u-v) \,\|_{L_2(\Omega_0)}^2 \right). \end{split}$$

Mint korábban ((3.5.1.5)-ben), a jobb oldalon (u - v)-nek a $H_0^2(\Omega_0)$ -normával ekvivalens (2.3.15)-normája jelent meg, melyet ismét *u* ugyanezen normájával becsülhetünk felülről, lévén (u - v) megegyezik *u*-nak a *W* zárt altérre vett ortogonális vetületével. Innen

$$\frac{1}{c^{2}} \left\| \frac{\partial(u-v)}{\partial n} \right\|_{H^{-1/2}(\Gamma)}^{2} \leq \frac{C_{5}}{c^{4}} \left(\| \Delta u \|_{L_{2}(\Omega_{0})}^{2} + c^{2} \| \operatorname{grad} u \|_{L_{2}(\Omega_{0})}^{2} \right) =
= \frac{C_{5}}{c^{4}} \| \Delta u \|_{L_{2}(\Omega_{0})}^{2} + \frac{C_{5}}{c^{2}} \| \operatorname{grad} u \|_{L_{2}(\Omega_{0})}^{2} \right).$$
(3.5.1.7)

A (3.5.1.4), (3.5.1.6) és (3.5.1.7) egyenlőtlenségekből most már leolvasható a modellfeladat megoldásának és a Laplace-Helmholtz-interpolációs függvény eltérésének becslése:

$$\| u^* - v \|_{L_2(\Omega)}^2 \le C \left(\frac{1}{c^2} \| u_0 \|_{H^{1/2}(\Gamma)}^2 + (h^3 + \frac{1}{c^4}) \| \Delta u \|_{L_2(\Omega_0)}^2 + (h^3 c^2 + \frac{1}{c^2}) \| \operatorname{grad} u \|_{L_2(\Omega_0)}^2 \right),$$

ahol a *C* konstans az u^*, u, v függvényektől valamint a perem-interpolációs alappontoktól független. Következésképp, ha a *c* skálázó konstanst a

$$c \coloneqq \frac{1}{h}$$

definícióval választjuk meg, akkor $v \to u^*$ (az $L_2(\Omega)$ -norma szerint), ha $h \to 0$. Ez teljes összhangban áll a szemlélettel is: ekkor az interpoláció a peremen még megfelelő, a peremtől távol pedig a Laplace-Helmholtz-interpolációs függvény lényegében harmonikussá válik.

Megjegyzés: A levezetett becslés nem éles (3.5.1.4)-ben alkalmazott durva

$$\| u - v \|_{H^{-1/2}(\Gamma)}^{2} \le \| u - v \|_{H^{0}(\Gamma)}^{2}$$

becslés miatt. A numerikus tapasztalatok élesebb becslés létezésére engednek következtetni.

Illusztrációként tekintsük ismét a szakasz elején vázolt tesztfeladatot (Laplace-egyenlet az egységkörön, a pontos megoldás: u(x, y) := x + y, ezzel konzisztens Dirichlet-peremfeltétellel). A közelítő megoldást keressük kevert Laplace-Helmholtz-típusú perem-interpolációs függvényként.

Tekintsük először azt a szélső esetet, amikor a skálázó konstans 0 (peremre épülő biharmonikus interpoláció). Ekkor, szemléletesen, a megoldás jól interpolál a peremen (kis perempontszám esetén sem generálódnak szingularitások az alappontokban), de az interpolációs függvény *nem* harmonikus Ω belsejében, így az interpoláció most ezért nem közelíti jól a Laplace-egyenlet megoldását (*3.4. ábra*; a perempontok száma 32, az approximáció relatív hibája pedig 28.67%).

Ha a skálázó c paraméter nagyon nagy, akkor lényegében visszajutunk a 3.2. ábrán szemléltetett esethez (numerikus perem-szingularitások kialakulása). Ha viszont c-t úgy választjuk meg, hogy ($\Delta - c^2 I$) alapmegoldásának "numerikus tartója" a szomszédos perempontok távolságának nagyságrendjébe essék, akkor elérhető, hogy perem-szingularitások még ne lépjenek fel, ugyanakkor az interpolációs függvény a tartomány belsejében is jól közelítse a (harmonikus) tesztmegoldást. A 3.5. ábrán olyan esetet mutatunk, ahol a peremen továbbra is csak 32 alappontot helyeztünk el, a skálázó paramétert pedig c := 110-re állítottuk be. Az approximáció relatív L_2 -hibája így 0.5% alá csökkent.



3.4. ábra. Biharmonikus perem-interpoláció 32 alapponttal Szingularitások nincsenek, de a közelítés rossz



3.5. ábra. Kevert Laplace-Helmholtz perem-interpoláció 32 alapponttal optimális skálázó paraméter választás esetén

A 2. *Táblázat* a közelítő megoldás relatív hibáját mutatja különböző c skálázó paraméterek mellett (a diszkrét L_2 -norma szerint). Látható, hogy a közelítés hibája nem túlságosan érzékeny a skálázó paraméter megválasztására: az optimális 110-es érték egy meglehetősen tág környezetében a relatív hiba még mindig 2% alatt marad.

С	0	50	70	90	110	130	150	200
relatív L_2 -hiba (%)	28.67	5.17	2.95	1.41	0.48	1.09	1.95	3.80

2. Táblázat. A kevert Laplace-Helmholtz perem-interpoláció relatív L_2 -hibái a skálázó paraméter különböző értékeire

Megjegyzés: Az e szakaszban alkalmazott ötlet, hogy az eredeti $\Delta u = 0$ homogén egyenlet helyett egy $\Delta(\Delta - c^2 I)u = 0$ negyedrendű egyenletet oldunk meg, általánosabban is alkalmazható (ld. a pályázó [58] publikációját). Legyen pl.

$$Lu := \operatorname{div} \sigma \operatorname{grad} u$$

egy elliptikus operátor, ahol $\sigma \in L_{\infty}(\Omega)$, $\sigma > 0$ adott függvény. Akkor az Lu = 0 homogén egyenlet megoldását az $L(L - c^2 I)u = 0$ negyedrendű egyenlet megoldásával közelíthetjük, ahol a *c* paraméter ugyanazt a skálázó szerepet játssza, mint idáig. A gyakorlatban ez utóbbi egyenlet helyett interpolációs problémát oldunk meg, azaz az $L(L - c^2 I)u = 0$ egyenletet a megfelelő interpolációs feltételekkel is ellátjuk. Az interpoláció implementálása most is QThálón kialakított multigrid módszerrel történhet, az alkalmazott véges térfogat sémák értelemszerű módosításával. Jóllehet, a fentebbi pontossági becslések most érvényüket vesztik, a numerikus tapasztalatok szerint a módszer még mindig jól működik. Illusztratív példaként: legyen Ω az egységkör, és

$$\sigma(x, y) := \begin{cases} 1 & (y \ge 0) \\ 4 & (y < 0) \end{cases}$$

A σ együtthatófüggvény szakadása a megoldásban törést generál a tartomány belsejében. Tekintsük az alábbi (pontos) megoldást:

$$u(x, y) \coloneqq \begin{cases} 4y & (y \ge 0) \\ y & (y < 0) \end{cases}$$

Csatoljuk az $L(L-c^2I)u = 0$ interpolációs egyenlethez a fenti megoldással konzisztens Dirichlet-peremfeltételt. A peremen 32 interpolációs pontot elhelyezve, és a σ együtthatófüggvény szakadási helyein további 15 pont elhelyezésével a QT-hálón lokális finomításokat alakítva ki, két közelítő megoldás a 3.6. *ábrán* látható. Első esetben a skálázó paramétert c := 500-ra választottuk: jól megfigyelhetők a peremen fellépő numerikus szingularitások. A közelítés relatív L_2 -hibája 8.58% volt. Második esetben a c := 100 választással éltünk: ekkor a perem-szingularitások eltűntek, a közelítés relatív L_2 -hibája pedig 1.01%-ra csökkent.



3.6. ábra. Változó együtthatójú elliptikus egyenlet megoldása multi-elliptikus interpolációval

3.5.2. Az alapmegoldások módszere és regularizálás multi-elliptikus interpolációval

Modellfeladatként tekintsük ismét a

$$\Delta u = 0 \quad \Omega \text{-ban} \tag{3.5.2.1}$$

Lalplace-egyenletet ($\Omega \subset \mathbf{R}^2$ korlátos, szakaszonként sima tartomány), ahol most *kevert peremfeltételt* is megengedünk:

$$u |_{\Gamma_1} = u_1 |_{\Gamma_1}, \quad \frac{\partial u}{\partial n} |_{\Gamma_2} = v_2 |_{\Gamma_2},$$
 (3.5.2.2)

ahol $u_1 \in H^{1/2}(\Gamma)$, $v_2 \in H^{-1/2}(\Gamma)$ adott függvények, $\Gamma_1 \cup \Gamma_2$ pedig a $\Gamma \coloneqq \partial \Omega$ perem egy diszjunkt felbontása.

Különösen egyszerű implementálhatósága miatt lett népszerű az *alapmegoldások módszere* mint hálónélküli módszer [1], [17], [61]. Itt a peremen elhelyezett

$$x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, ..., x_{N_1}^{(1)} \in \Gamma_1, \quad x_1^{(2)}, x_2^{(2)}, ..., x_{N_2}^{(2)} \in \Gamma_2$$

pontok kollokációs pontok: a közelítő megoldást pedig az Ω tartományon *kívül* elhelyezett $x_1, x_2, ..., x_N \in \mathbf{R}^2 \setminus \overline{\Omega}$ pontokba eltolt harmonikus alapmegoldások mint radiális bázisfüggvények lineáris kombinációjaként keressük:

$$u(x) \coloneqq \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \Phi(x - x_j), \qquad (3.5.2.3)$$

ahol $N = N_1 + N_2$, $\Phi(x) = \log ||x||$. Az a priori ismeretlen $\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_N$ együtthatók a peremfeltételekből határozhatók meg:

$$\sum_{j=1}^{N} \alpha_{j} \Phi(x_{k}^{(1)} - x_{j}) = u_{1}(x_{k}^{(1)}) \qquad (k = 1, 2, ..., N_{1}),$$

$$\sum_{j=1}^{N} \alpha_{j} \frac{\partial \Phi}{\partial n}(x_{k}^{(2)} - x_{j}) = v_{2}(x_{k}^{(2)}) \qquad (k = 1, 2, ..., N_{2}).$$
(3.5.2.4)

Könnyen látható, hogy amennyiben az x_j pontok távol vannak a peremtől (Ω jellemző méretéhez képest), akkor, ha a (3.5.2.4) rendszer még elvben megoldható is, igen rosszul kondícionált, ezenfelül mátrixa teljesen kitöltött mátrix. Szokásos pl. x_j -ket egy, az Ω tartományt tartalmazó kör peremén elhelyezni, Ω alapjától függetlenül. A kondícionáltság javítható azzal, ha az x_j pontokat a Γ peremhez közel helyezzük el (nagyságrendben olyan távolságra, mint a peremen elhelyezett kollokációs pontok jellemző távolsága). Megmarad azonban a rendszer mátrixának teljesen kitöltött és általában nemszimmetrikus volta mint numerikus probléma. A megoldás műveletigénye így jellemzően $O(N^3)$.

Az előző szakaszban tárgyalt Laplace-Helmholtz-interpolációval az említett numerikus probléma kiküszöbölhető. Mivel a (2.3.19) reprezentációs tétel értelmében a Laplace-Helmholtz-interpolációs függvény maga is tekinthető egy RBF-típusú interpolációs függvénynek, azért a Laplace-Helhmoltz-interpoláció egyfajta regularizált alapmegoldás-módszerként is interpretálható, tekintve, hogy az itt előforduló radiális bázisfüggvényeknek nincs szingularitásuk. Hangsúlyozzuk, hogy a Lalplce-Helmholtz-interpoláció közvetlenül az interpolációs függvényt állítja elő, nem pedig a (3.5.2.3)-ban szereplő α_j együtthatókat, megtakarítva ezzel a (3.5.2.3) formula sokszori kiértékelését.

A Laplace-Helmholtz-interpoláció az előző szakaszban tárgyalt formában csak Dirichletperemfeltétel esetén alkalmazható: az interpolációs függvény normális irányú deriváltja, mint láttuk, *nem* approximálja a megoldás normális irányú deriváltját.

A Laplace-Helmholtz-interpoláció ötlete azonban mégis átmenthető a Neumann-peremfeltétel esetére is. Ehhez a Neumann-feladatot *Dirichlet-feladatok megoldásainak sorozatára* vezetjük vissza. Modellfeladatként tekintsük a

$$\Delta u = 0, \qquad \frac{\partial u}{\partial n} |_{\Gamma} = v_0 \in H^{-1/2}(\Gamma)$$
(3.5.2.5)

Neumann-feladatot, ahol $\int v d\Gamma = 0$, a megoldásban fellépő additív konstanst pedig úgy választjuk, hogy $\int u d\Gamma = 0$ is teljesüljön. Ismét csak avval a speciális esettel foglalkozunk, Γ amikor $\Omega = (0, L) \times (0, +\infty)$, $\Gamma = (0, L)$, a megoldást pedig első változója szerint szerint *L*-periodikusnak tételezzük fel. A térváltozókra a szokásosabb *x*, *y* jelöléseket használva, legyen v_0 komplex trigonometrikus Fourier-sora

$$v_0(x) = \sum_{k \neq 0} \beta_k e^{i\kappa x} ,$$

ahol $\kappa := \frac{2k\pi}{L}$. Akkor (3.5.2.5) pontos u^* megoldása előáll

$$u^{*}(x, y) = \sum_{k \neq 0} \alpha_{k} e^{-|\kappa| y} e^{i\kappa x}$$
(3.5.2.6)

alakban, ahol $\beta_k = |\kappa| \alpha_k$ minden $0 \neq k \in \mathbb{Z}$ -re. A Dirichlet-feladatokra való visszavezetés alapötlete, hogy adott $\delta > 0$ mellett tekintsük az $\Omega_{\delta} = (0, L) \times (-\delta, +\infty)$, Ω -nál bővebb tartományon kitűzött

$$\Delta u = 0, \qquad u \mid_{\Gamma_{\delta}} = u_{\delta} \tag{3.5.2.7}$$

Dirichlet-feladatot, az u_{δ} peremfeltételt pedig iteratív módon javítsuk. A legegyszerűbb iteráció azon alapul, hogy a normális irányú deriváltat a $\frac{\partial u}{\partial n} \sim \frac{u_{\delta} - u_0}{\delta}$ különbségi hányadossal közelítjük (ahol $u_0 := u \mid_{\Gamma}$). Innen a Dirichlet-peremfeltétel iteratív javítása kézenfekvően:

$$u_{\delta}^{(n+1)} \coloneqq u_{0}^{(n)} + \delta v_{0} \quad (n = 0, 1, 2, ...) .$$
(3.5.2.8)

Az így nyert $(u_0^{(n)})$ peremfüggvény-sorozat bizonyos értelemben jól közelíti a (3.5.2.5) modellfeladat *u* megoldásának Γ -n vett nyomát, ezért a (3.5.2.7)-(3.5.2.8) Dirichlet-feladatok megoldásainak sorozata Ω -n jól közelíti a (3.5.2.5) modellfeladat megoldását. Pontosabban, érvényes a következő tétel:

3.5.4. Tétel. Legyen a (3.5.2.7)-(3.5.2.8) Dirichlet-feladatok $u^{(n)}$ megoldásainak alakja:

$$u^{(n)}(x,y) = \sum_{k\neq 0} \alpha_k^{(n)} e^{-|\mathbf{\kappa}| y} e^{i\mathbf{\kappa} x} .$$

Akkor minden $k \neq 0$ indexre az $(\alpha_k^{(n)})$ Fourier-együtthatósorozat konvergens, és

$$|\lim_{n \to +\infty} \alpha_k^{(n)} - \alpha_k| \le |\alpha_k| \cdot \pi \cdot |k| \frac{\delta}{L}.$$

Azaz minden "kisfrekvenciás" Fourier-komponens (melyekre $|k| < \frac{L\pi\epsilon}{\delta}$ teljesül, ahol $\epsilon > 0$ adott hibakorlát) határértéke ϵ -nál kisebb relatív hibával közelíti a pontos megoldás megfelelő Fourier-komponensét.

Bizonyítás: Nyilván

$$u_{\delta}^{(n)}(x) = u^{(n)}(x, -\delta) = \sum_{k \neq 0} \alpha_k^{(n)} e^{|\kappa|\delta} e^{i\kappa x}, \quad \text{és}$$
$$u_0^{(n)}(x) = u^{(n)}(x, 0) = \sum_{k \neq 0} \alpha_k^{(n)} e^{i\kappa x},$$

innen a Fourier-együtthatókra érvényesek az alábbi rekurziók:

$$\alpha_k^{(n+1)} e^{|\kappa|\delta} = \alpha_k^{(n)} + \delta\beta_k \qquad (0 \neq k \in \mathbb{Z}, \quad n = 0, 1, 2, \dots),$$

ahonnan

$$\alpha_k^{(n+1)} = e^{-|\kappa|\delta} \alpha_k^{(n)} + e^{-|\kappa|\delta} \delta\beta_k \qquad (0 \neq k \in \mathbb{Z}, \quad n = 0, 1, 2, \dots).$$

Mivel $0 < e^{-|\kappa|\delta} < 1$ minden $k \neq 0$ indexre, azért ezek a rekurziók mind konvergensek. Határértékükre pedig teljesül, hogy

$$\lim_{n \to +\infty} \alpha_k^{(n)} \cdot (e^{|\kappa|\delta} - 1) = \delta\beta_k = \delta |\kappa| \alpha_k \qquad (0 \neq k \in \mathbb{Z}),$$

azaz

$$\lim_{n \to +\infty} \alpha_k^{(n)} = \frac{\delta \mid \kappa \mid \alpha_k}{e^{\mid \kappa \mid \delta} - 1} \qquad (0 \neq k \in \mathbf{Z}).$$

Innen pedig:

$$\left|\lim_{n \to +\infty} \alpha_k^{(n)} - \alpha_k\right| = \left|\alpha_k\right| \cdot \left|1 - \frac{|\kappa|\delta}{e^{|\kappa|\delta} - 1}\right| \rightleftharpoons \alpha_k |\cdot f(|\kappa|\delta) \qquad (0 \neq k \in \mathbf{Z}),$$

ahol $f(t) := 1 - \frac{t}{e^t - 1}$. Felhasználva a könnyen látható $1 - \frac{t}{e^t - 1} \le \frac{t}{2}$ egyenlőtlenséget (t > 0):

$$|\lim_{n \to +\infty} \alpha_k^{(n)} - \alpha_k| \le |\alpha_k| \cdot \frac{|\kappa|\delta}{2} = |\alpha_k| \cdot \frac{|k|\pi\delta}{L} \qquad (0 \ne k \in \mathbb{Z})$$

Pontosabb módszerhez juthatunk az alábbi iterációval (ami azonban a közelítő megoldások normális irányú deriváltjának kiszámítását is igényli Γ mentén):

$$u_{\delta}^{(n+1)} := u_{0}^{(n)} + \omega \delta \cdot (v_{0} - \frac{\partial u^{(n)}}{\partial n} |_{\Gamma}) \quad (n = 0, 1, 2, ...),$$
(3.5.2.9)

ahol $\omega > 0$ alkalmasan megválasztott iterációs paraméter, és $u^{(n)}$ jelöli a (3.5.2.7)-(3.5.2.9) Dirichlet-feladatok megoldását. Az így nyert közelítés pontosságát jellemzi a következő tétel:

3.5.5. Tétel. Legyen a (3.5.2.7)-(3.5.2.9) Dirichlet-feladatok $u^{(n)}$ megoldásainak alakja:

$$u^{(n)}(x, y) = \sum_{k \neq 0} \alpha_k^{(n)} e^{-|\kappa| y} e^{i\kappa x} .$$

Akkor minden $k \neq 0$ indexre és $0 < \omega < 2e$ iterációs paraméterre az $(\alpha_k^{(n)})$ Fourier-együtthatósorozat konvergens, éspedig $\lim_{n \to +\infty} \alpha_k^{(n)} = \alpha_k$. Továbbá

$$|\alpha_k^{(n)} - \alpha_k| \le |1 - \omega| \kappa |\delta e^{-|\kappa|\delta}|^n \cdot |\alpha_k^{(0)} - \alpha_k|,$$

azaz mindegyik ($\alpha_k^{(n)}$) Fourier-együtthatósorozat egy mértani sorozat sebességével konvergál a pontos megoldás α_k Fourier-együtthatójához (melyek kvóciensének abszolút értéke azonban |k| növekedésével egyre közelebb kerül 1-hez).

Bizonyítás: Nyilván

$$u_{\delta}^{(n)}(x) = u^{(n)}(x, -\delta) = \sum_{k \neq 0} \alpha_k^{(n)} e^{|\kappa|\delta} e^{i\kappa x} ,$$

innen a Fourier-együtthatókra érvényesek az alábbi rekurziók:

$$\alpha_k^{(n+1)} e^{|\kappa|\delta} = \alpha_k^{(n)} e^{|\kappa|\delta} + \omega \delta(\beta_k - |\kappa| \alpha_k^{(n)}) \qquad (0 \neq k \in \mathbb{Z}, \quad n = 0, 1, 2, ...),$$

ahonnan

$$\alpha_k^{(n+1)} = (1 - \omega | \kappa | \delta e^{-|\kappa|\delta}) \cdot \alpha_k^{(n)} + \omega | \kappa | \delta \alpha_k e^{-|\kappa|\delta} \qquad (0 \neq k \in \mathbb{Z}, \quad n = 0, 1, 2, ...)$$

Az elemi $te^{-t} \le \frac{1}{e}$ $(t \ge 0)$ egyenlőtlenséget használva, ezért minden $0 < \omega < 2e$ iterációs paraméter mellett

$$1 > 1 - \omega \mid \kappa \mid \delta e^{-|\kappa|\delta} \ge 1 - \frac{\omega}{e} > -1$$

azaz $|1-\omega|\kappa|\delta e^{-|\kappa|\delta}| < 1$ minden $k \neq 0$ indexre, így a fenti rekurziók mind konvergensek. Határértékükre pedig teljesül, hogy

$$\lim_{n \to +\infty} \alpha_k^{(n)} = (1 - \omega | \kappa | \delta e^{-|\kappa|\delta}) \cdot \lim_{n \to +\infty} \alpha_k^{(n)} + \omega | \kappa | \delta \alpha_k e^{-|\kappa|\delta} \qquad (0 \neq k \in \mathbb{Z}),$$

azaz $\lim_{n \to +\infty} \alpha_k^{(n)} = \alpha_k \quad (0 \neq k \in \mathbb{Z})$. Az *n*-edik iterált és a határérték eltérése pedig a rekurzió megoldásából becsülhető:

$$\alpha_{k}^{(n)} = (1 - \omega | \kappa | \delta e^{-|\kappa|\delta})^{n} \cdot \alpha_{k}^{(0)} + \omega | \kappa | \delta \alpha_{k} e^{-|\kappa|\delta} \cdot \frac{1 - (1 - \omega | \kappa | \delta e^{-|\kappa|\delta})^{n}}{\omega | \kappa | \delta e^{-|\kappa|\delta}},$$

ahonnan az állítás már következik:

$$|\alpha_k^{(n)} - \alpha_k| \le |1 - \omega| \kappa |\delta e^{-|\kappa|\delta}|^n \cdot |\alpha_k^{(0)} - \alpha_k| \qquad (0 \ne k \in \mathbb{Z}, \quad n = 0, 1, 2, \dots).$$

Megjegyzés: A fenti tételből azonnal következik, hogy minden rögzített $k_0 \in \mathbb{N}$ esetén az összes ($\alpha_k^{(n)}$) Fourier-együtthatósorozat, melyekre $|k| \le k_0$ teljesül, k szerint *egyenletesen* is tart a pontos megoldás α_k Fourier-együtthatóihoz.

A 3.5.4. – 3.5.5. Tételek gyakorlati alkalmazásában a (3.5.2.7) Dirichlet-feladatokat az előző szakaszban tárgyalt Laplace-Helmholtz-interpolációval oldjuk meg. Így nyerjük (értelemszerű általánosítások után) az alábbi algoritmusokat, melyeket *regularizált alapmegoldás-módszer-ként* interpretálunk. Legyen most már Ω korlátos, szakaszonként sima tartomány, és tekintsük a (3.5.2.1)-(3.5.2.2) kevert peremfeltételű Laplace-egyenletet mint modellfeladatot. Legyenek a Γ peremen elhelyezve az $x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, ..., x_{N_1}^{(1)} \in \Gamma_1$, $x_1^{(2)}, x_2^{(2)}, ..., x_{N_2}^{(2)} \in \Gamma_2$ interpolációs ill. kollokációs pontok. A Γ_2 peremszakasz menti kollokációs pontokhoz definiáljuk az Ω tartományon kívül az $\overline{x}_1^{(2)}, \overline{x}_2^{(2)}, ..., \overline{x}_{N_2}^{(2)}$ pontokat, az $x_1^{(2)}, x_2^{(2)}, ..., x_{N_2}^{(2)}$ pontoktól kifelé mutató normális irányban, azoktól $\delta_1, \delta_2, ..., \delta_{N_2} > 0$ távolságra. Legyen Ω_0 egy olyan, Ω -nál bővebb tartomány, mely még az újonnan definiált külső pontokat is tartalmazza. Akkor a modellfeladat megoldását az alábbi rekurzióval közelítjük: legyen $v^{(n)}$ az Ω_0 tartományon értelmezett, az $x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, ..., x_{N_1}^{(1)}$ és $\overline{x}_1^{(2)}, \overline{x}_2^{(2)}, ..., \overline{x}_{N_2}^{(2)}$ alappontokra támaszkodó Laplace-Helmholtz-interpolációs függvény:

$$\Delta(\Delta - c^2 I)v^{(n)} = 0 \qquad (\Omega_0 \setminus \{x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, ..., x_{N_1}^{(1)}, \overline{x}_1^{(2)}, \overline{x}_2^{(2)}, ..., \overline{x}_{N_2}^{(2)}\} \text{-on})$$

ahol $\,\Omega_0\,$ peremén szokásos, pl. homogén Dirichlet-peremfeltételt írunk elő, az alappontokban pedig a

$$v^{(n+1)}(x_k^{(1)}) \coloneqq u_1(x_k^{(1)}) \quad (k = 1, 2, ..., N_1)$$

$$v^{(n+1)}(\bar{x}_k^{(2)}) \coloneqq v^{(n)}(x_k^{(2)}) + \delta_k \cdot v_2(x_k^{(2)}) \quad (k = 1, 2, ..., N_2)$$
(3.5.2.10)

(vö. (3.5.2.8)) vagy pedig a

$$v^{(n+1)}(x_k^{(1)}) \coloneqq u_1(x_k^{(1)}) \qquad (k = 1, 2, ..., N_1)$$

$$v^{(n+1)}(\bar{x}_k^{(2)}) \coloneqq v^{(n)}(\bar{x}_k^{(2)}) + \omega \delta_k \cdot \left(v_2(x_k^{(2)}) - \frac{\partial v^{(n)}}{\partial n}(x_k^{(2)}) \right) \qquad (k = 1, 2, ..., N_2)$$
(3.5.2.11)

interpolációs feltételeket, ahol $\omega > 0$ egy elég kicsire választott iterációs paraméter.

Megjegyzések

 A (3.5.2.10) ás (3.5.2.11) rekurziók nehézség nélkül beágyazhatók a Laplace-Helmholtz-interpoláció megoldásakor használt QT-hálós multigrid környezetbe. Ennek részleteivel nem foglalkozunk.
- 2. A módszer mindkét változatának alkalmazásához szükség van a perempontokon elhelyezett *normálvektorok* ismeretére is, ami hálómentes megközelítés esetén nem mindig áll rendelkezésre. (Ez az alapmegoldások módszere esetén is így van.) Külön problémaként merül tehát fel a peremmenti normálvektorok meghatározása. A következő szakaszban erre is mutatunk módszert.
- 3. A modellfeladatnak a fenti módszerek alkalmazásával egy, az eredeti tartománynál bővebb tartományon vett megoldását állítjuk elő, másszóval, automatikusan a megoldás egy kiterjesztését kapjuk. Ismeretes, hogy a harmonikus kiterjesztés (amennyiben egyáltalán létezik) igen gyengén meghatározott probléma. Tipikus, hogy a kiterjesztett megoldás Ω-n kívül gyorsan változik, és alkalmasint szélsőséges értékeket vesz fel, míg Ω-n belül a közelítés megfelelő. Ugyanez a jelenség az alapmegoldások módszerének alkalmazásakor is fellép.

A módszer illusztrálására tekintsük az egységnégyzetben elhelyezett 1/2 sugarú körben kitűzött Laplace-egyenletet, a felső félkör mentén Dirichlet-, az alsó félkör mentén Neumannperemfeltétellel ellátva. A pontos megoldás legyen

$$u(x, y) \coloneqq \frac{1}{2} - x + 2y,$$

a peremfeltételek legyenek ezzel konzisztensek. A probléma megoldására a (3.5.2.11) iterációs módszert alkalmaztuk. A peremen összesen 64 perempontot helyeztünk el, a Neumann-perempontoktól normális irányban 0.1 egységnyi távolságban további pontokat helyeztünk el a (3.5.2.11) iteráció realizálásához. Az alkalmazott skálázó Helmholtz-paraméter értéke c := 180 volt. Az iteráció végeredménye a 3.7. ábrán látható: a közelítés relatív L_2 -hibája 0.21%. Jól megfigyelhető, hogy a megoldásnak az eredeti tartományon kívüli értékei extrém ingadozásokat mutatnak (míg a tartomány belsejében a közelítés megfelelő), ld. [56].



3.7. ábra. A regularizált alapmegoldás-módszer eredménye az $u(x, y) \coloneqq \frac{1}{2} - x + 2y$ tesztfeladat mellett, $\delta = 0.1$

Egy másik példa eredményét mutatja a 3.8. *ábra*. A probléma itt a Laplace-egyenlet megoldása volt az egységkörben. A pontos megoldás u(x, y) = (1 - x)y, a peremfeltételek ezzel konzisztensek. A peremet 64 ponttal diszkretizáltuk. Itt a felső félkör mentén tűztünk ki Neumann-peremfeltételt, az alsó félkör mentén pedig Dirichlet-feltételt. A skálázó Helmholtzparaméter értéke c := 200 volt. Az első esetben a perem és a kívül elhelyezett pontok távolsága 0.1 egység volt, a második esetben pedig 0.3 egység. Utóbbi esetben a megoldás az egységkörön kívül már erős ingadozásokat mutatott, de az egységkör belsejében mindkét esetben a relatív L_2 -hiba 0.5% alatt maradt. Ld. [57].



3.8. ábra. A regularizált alapmegoldás-módszer eredménye az $u(x, y) \coloneqq (1-x)y$ tesztfeladat mellett

3.5.3. A perem-rekonstrukció módszere

Az előző két szakaszban tárgyalt módszerek közös hátránya, hogy legtermészetesebben csak a Laplace-egyenletre alkalmazhatók (bár jó tapasztalatok voltak a div σ grad u = 0 elliptikus egyenletekre való alkalmazhatósággal is), továbbá a Neumann-peremek kezelése bizonyos újabb, a tartományon kívüli interpolációs pontok definiálását teszi szükségessé. Elvben sokkal egyszerűbb – még a Laplace-egyenlet esetében is – az amúgy is felépített QT-hálón az *eredeti* probléma megoldása. Láttuk, hogy ekkor a perem mentén numerikus szingularitások lépnek fel, ha a perempontok száma nem extrém magas. A perem-szingularitások kiküszöbölésének egy újabb módja, ha valamilyen módon megpróbáljuk a tartomány belsejét rekonstruálni – és ezáltal annak peremét is –, ami lehetővé teszi a peremfeltételek érvényesítését a perem-interpolációs pontot nem tartalmazó QT-cellákban is (ld. a pályázó [57] publikációját).

A módszer alapötlete, hogy próbáljuk meg a tartomány karakterisztikus függvényét rekonstruálni a

$$\Delta w = 0 \quad \Omega \text{-ban} \tag{3.5.3.1}$$

$$w|_{\Gamma} = 1$$

Dirichlet-probléma megoldásával ($\Gamma \coloneqq \partial \Omega$). A pontos megoldás triviálisan az a függvény, mely az $\overline{\Omega}$ zárt tartományon azonosan 1-gyel egyenlő. Tegyük fel, hogy Ω *egyszeresen összefüggő*. Legyen $\Omega_0 \supset \Omega$ egy Ω -nál bővebb tartomány, és (3.5.3.1) megoldását közelítendő, konstruáljunk Ω_0 -on egy optimális Laplace-Helmholtz-interpolációs függvényt a

$$w(x_k) := 1 \quad (k = 1, 2, ..., N) \tag{3.5.3.2}$$

interpolációs feltételek mellett, ahol $x_1, x_2, ..., x_N \in \Gamma$ a peremen elhelyezett interpolációs alappontok. Ω_0 pereme mentén – szokásos módon – írjunk elő homogén Dirichlet-peremfeltételt: $w \mid_{\Gamma} = 0$, $\frac{\partial w}{\partial n} \mid_{\Gamma} = 0$. Akkor w (közelítően) 1-gyel egyenlő Ω belsejében, Ω -n kívül pedig 0 és 1 közti értékeket vesz fel. Az interpolációs problémát egy, az $x_1, ..., x_N \in \Gamma$ pereminterpolációs pontok által generált QT-hálón megoldva, az Ω tartományba eső QT-cellákat tehát a következő algoritmussal rekonstruálhatjuk: a C cellát *belső cellának* fogadjuk el, ha a C cella x_C középpontjára $w(x_C) \ge 1 - \varepsilon$ teljesül, ahol $\varepsilon \ge 0$ adott tolerancia-paraméter. Ellenkező esetben C-t *külső cellának* tekintjük. A belső cellák egyesítése lesz a rekonstruált tartomány: mindazon belső (külső) cellák összességét, melyekben van külső (belső) típusú oldal-szomszédjuk, perem-celláknak tekintjük.

A perem-rekonstrukciós algoritmust ezekután a következő lépésekkel definiáljuk. Tegyük fel, hogy a megoldandó probléma a

$$\Delta u = 0 \quad \Omega \text{-ban}$$

$$u \mid_{\Gamma} = u_0$$
(3.5.3.3)

Dirichlet-feladat. Akkor:

- 1. Oldjuk meg a $\Delta w = 0$, $w|_{\Gamma} = 1$ segédproblémát Laplace-Helmholtz interpolációval egy $\Omega_0 \supset \Omega$ bővebb tartományon, a $w|_{\Gamma} = 0$, $\frac{\partial w}{\partial n}|_{\Gamma} = 0$ peremfeltételek és a (3.5.3.2) interpolációs feltételek mellett.
- Adott ε≥0 tolerancia-paraméterrel határozzuk meg a belső-, külső- és peremcellákat.
- 3. Végezzünk el egy multi-elliptikus pl. biharmonikus interpolációs az adott perempontokon kitűzött interpolációs feltételekkel Ω_0 -ban:

 $\Delta \Delta v = 0, \quad v(x_k) := u_0(x_k) \quad (k = 1, 2, ..., N)$

Az így nyert *v*-értékeket csak az előző lépésben meghatározott perem-cellákhoz rendeljük. Ily módon a rekonstruált perem mentén egy perem-interpolációt hajtottunk végre.

4. Oldjuk meg ugyanezen a QT-hálón az eredeti (3.5.3.3) Laplace-egyenletet, melyhez a perem-cellákon az előző lépésben kapott (interpolált) értékeket mint peremfeltéte-leket csatoljuk.

Mivel a perem a 3. lépésben már le lett fedve perem-cellákkal, a korábbiakban bemutatott perem-szingularitás jelensége nem lép fel.

Megjegyzések:

- A módszer értelemszerűen általánosítható többszörösen összefüggő tartományok esetére is. Ekkor Ω₀\Ω minden komponensében elhelyezünk olyan zárt görbéket, melyeken a w = 0, dw/∂n = 0 peremfeltételet írjuk elő. Ekkor ezen görbék pontjainak előzetes ismerete szükséges, ami az eredeti Dirichlet-feladat kitűzéséhez képest némi többlet-információt feltételez.
- A módszer alkalmas a (struktúra nélküli perempontok által adott) perem *normálvektorainak* közelítő meghatározására is. Az 1. lépésben nyert w függvény kívülről

vett gradiensvektora ui. nyilván merőleges a peremre, mivel a tangenciális irányú derivált azonosan zérus.

• Ha a peremen ill. annak egy részén homogén Neumann-peremfeltétel adott, akkor a rekonstruált belső cellákon közvetlenül az eredeti Laplace-egyenlet oldható meg: a homogén Neumann-peremfeltételt közvetlenül a QT-cellákon lehet diszkretizálni. Ehhez nem szükséges fiktív külső pontokat definiálni, mint a regularizált alapmegoldás-módszer esetében.

A módszer illusztrálására tekintsük ismét az egységnégyzetben elhelyezett 1/2 sugarú körben kitűzött Laplace-egyenletet, Dirichlet-peremfeltétellel ellátva. A pontos megoldás legyen

$$u(x, y) \coloneqq \frac{1}{2} - x + 2y,$$

a peremfeltétel pedig ezzel konzisztens. A peremet 64 ponttal diszkretizálva, a rekonstruált tartomány karakterisztikus függvénye és a rekonstruált tartományon a közelítő megoldás a 3.9. ábrán látható. A megoldás relatív L_2 -hibája 0.153% volt, perem-szingularitás nem lépett fel.



3.8. ábra. A perem-rekonstrukció módszerének eredménye az $u(x, y) \coloneqq \frac{1}{2} - x + 2y$ tesztfeladat mellett

Összefoglalva tehát, a Laplace-Helmholtz-féle és az ezzel rokon interpolációs technikák lehetővé teszik a homogén problémák valódi hálómentes megoldását anélkül, hogy ezért nagyméretű, teljesen kitöltött és rosszul kondícionált mátrixú egyenletrendszereket kellene megoldani. A numerikus megoldás műveletigénye az alkalmazott MGR-technikának köszönhetően sokkal kisebb, mint a hagyományos RBF-alapú megközelítések műveletigénye.

A megközelítés fő hátránya az, hogy a módszer feltételezi, hogy az interpolációs alappontok térbeli ill. peremmenti eloszlása többé-kevésbé egyenletes. Ha ez nem teljesül, akkor az optimális skálázó paraméter definiálása nem lehetséges, és előfordulhat, hogy a perem egyes részein numerikus szingularitások lépnek fel, míg más részeken ugyanazon skálázó paraméter mellett csak a peremtől távol tekinthető a közelítő megoldás harmonikusnak. A perem-rekonstrukció módszere ezen a problémán enyhíteni képes, ha a QT-felbontást a perempontok sűrűségével vezéreljük. Ekkor viszont előfordulhat, hogy a rekonstruált perem csak durván közelíti az eredeti peremet.

Célszerűnek látszik tehát olyan módszereket konstruálni, melyek ilyenfajta skálázó paramétereket nem tartalmaznak, ugyanakkor elkerülik a numerikus perem-szingularitások problémáját is. A következő szakaszban ilyen módszerekkel foglalkozunk.

3.6. Lokális sémák generálása a radiális bázisfüggvények módszerével, és újraglobalizálás multi-elliptikus interpolációval

Az e szakaszban konstruált módszerek bizonyos szempontból a jól ismert véges differencia sémák általánosításainak tekinthetők. A sémák nem szabályos stencilen, hanem szabálytalanul elszórt pontokban lesznek definiálva. A *lokális sémák* jellegzetessége, hogy egy-egy pontban a vizsgált differenciáloperátort a *szomszédos pontokhoz* tartozó függvényértékekkel approximáljuk. Szomszédos pontokként elven a legegyszerűbb az adott ponthoz egy adott távolságon belül elhelyezkedő pontokat tekinteni (mely távolság nem feltétlen ugyanaz minden pont esetén). Egy másik lehetőség: adott számú, a szóbanforgó ponthoz legközelebbi pontok összessége. Ismét más lehetőség a szomszédos pontokat egy, az alappontok által vezérelt QT-háló segítségével definiálni (ez egyúttal egy természetes többszintű (multigrid) technikát is kínál). Megjegyezzük, hogy ez az irányvonal még korántsem kiforrott, és a kutatás szintjén van: e szakaszban az egyes módszerek algoritmusának jobbára csak a leírására törekszünk; pontos konvergenciatételek kimondása és igazolása a közeli jövőben várható, mindenesetre a numerikus tapasztalatok igen biztatók.

A továbbiakban legyen $S := \{x_1, x_2, ..., x_N\} \subset \overline{\Omega}$ szórt alappontok egy véges halmaza. Modellfeladatként tekintsük ismét a

$$\Delta u = 0 \quad \Omega \text{-ban} \tag{3.6.1}$$

Laplace-egyenletet, melyet egyelőre az

$$(3.6.2)$$

Dirichlet-peremfeltétellel látunk el. Célunk ennek megfelelően a Laplace-operátor diszkretizálása az S ponthalmazon. Ha u egy $\overline{\Omega}$ -n értelmezett folytonos függvény, jelölje a rövidség kedvéért $u_k := u(x_k)$ (k = 1, 2, ., N). Lokális sémák konstruálásakor a differenciáloperátort tetszőleges $x_m \in S$ pontbeli diszkretizációjához csak az itt és a szomszédos pontokban felvett függvényértékeket használjuk. A klasszikus Taylor-sorfejtésen alapuló technika szórt alappontrendszeren meglehetősen nehézkes, ezért a sémákat az RBF-interpoláció felhasználásával konstruáljuk.

Legyen $x_m \in S$ tetszőleges, rögzített, centrálisnak tekintett pont. Legyenek x_m szomszédai $x_1^{(m)}, x_2^{(m)}, ..., x_{N_m}^{(m)} \in S$, melyek egymástól és x_m -től is különböznek. Jelöljön $\tilde{u}^{(m)}$ egy, az $x_1^{(m)}, x_2^{(m)}, ..., x_{N_m}^{(m)}$ alappontokra támaszkodó *lokális interpolációs függvényt*:

$$\tilde{u}^{(m)}(x) \coloneqq \sum_{j=1}^{N_m} \alpha_j \Phi(x - x_j^{(m)}) + \sum_{j=1}^M a_j p_j(x)$$
(3.6.3)

ahol Φ adott radiális bázisfüggvény, $p_1,...,p_M$ pedig adott (alacsony fokszámú) polinomok (jellemzően az 1, x, y, xy, x², y²,... formulákkal definiált kétváltozós alappolinomok közül választva). Az ismeretlen $\alpha_1,...,\alpha_{N_m},a_1,...,a_M$ együtthatók az interpolációs és az ortogonalitási feltételekből számíthatók:

$$\sum_{j=1}^{N_m} \alpha_j \Phi(x - x_j^{(m)}) + \sum_{j=1}^{M} a_j p_j(x) = u_k^{(m)} \qquad (k = 1, 2, ..., N_m)$$

$$\sum_{j=1}^{N_m} \alpha_j p_k(x_j^{(m)}) = 0 \qquad (k = 1, 2, ..., M),$$
(3.6.4)

vagy tömören:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\alpha} \\ \mathbf{a} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix},$$
 (3.6.5)

ahol:

$$\begin{split} &A \in \mathbf{M}_{N_m \times N_m}, \ A_{kj} \coloneqq \Phi(x_k^{(m)} - x_j^{(m)}) \ (k, j = 1, 2, ..., N_m) \text{ (nyilván A szimmetrikus mátrix)}; \\ &B \in \mathbf{M}_{N_m \times M}, \ B_{kj} \coloneqq p_j(x_k^{(m)}) \ (k = 1, 2, ..., N_m, \ j = 1, 2, ..., M); \\ &\mathbf{\alpha} \coloneqq (\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_{N_m}) \in \mathbf{R}^{N_m}, \text{ és } \mathbf{a} \coloneqq (a_1, a_2, ..., a_M) \in \mathbf{R}^M. \end{split}$$
Az $\alpha_1, ..., \alpha_{N_m}, a_1, ..., a_M$ együtthatók esetén az *m* indexet az egyszerűség kedvéért nem tün-

tettük fel.

A (3.6.5) egyenletrendszer megoldhatósága általában nem biztosított, még akkor sem, ha A pozitív definit. Ekkor ui. A invertálható, és $\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ -ból $\alpha = A^{-1}Ba$, innen $B^*A^{-1}Ba = 0$, és A^{-1} pozitív definitsége miatt szükségképp Ba = 0. Ha tehát A szimmetrikus, pozitív definit, akkor (3.6.5) egyértelmű megoldhatósága azzal ekvivalens, hogy B magtere csak a zérusvektorból áll, azaz B mint lineáris operátor, kölcsönösen egyértelmű. Ez pedig, B elemeinek definíciója miatt azzal ekvivalens, hogy a $\sum_{j=1}^{M} a_j p_j$ polinomok közül csak a zéruspolinom tűnik el mindegyik $x_1^{(m)}, x_2^{(m)}, \dots, x_{N_m}^{(m)}$ alappontban. Ez az $x_1^{(m)}, x_2^{(m)}, \dots, x_{N_m}^{(m)}$ pontok elhelyezkedésére ró nehezen ellenőrizhető feltételeket. Pl. ha (mint az szokásos) $p_1(x, y) = 1$, $p_2(x, y) = x$, $p_3(x, y) = y$, $p_4(x, y) = xy$, $p_5(x, y) = x^2$, $p_6(x, y) = y^2, \dots$, akkor M = 1 esetén B kölcsönösen egyértelmű voltára vonatkozó feltétel mindig teljesül; M = 3 esetén akkor, ha az $x_1^{(m)}, x_2^{(m)}, \dots, x_{N_m}^{(m)}$ pontok nem kollineárisak; de már M = 6 esetén ez a feltétel csak akkor teljesül, ha az $x_1^{(m)}, x_2^{(m)}, \dots, x_{N_m}^{(m)}$ pontok nem illeszkednek semmilyen legfeljebb másodrendű görbére.

Ha a (3.6.5) rendszer minden $x_m \in S$ centrális pont esetén megoldható, akkor a (3.6.1) Laplace-egyenlet az alábbi módon diszkretizálható. Helyezzünk el x_m körül, a fő koordinátairányokban x_m -től h > 0 távolságra négy fiktív pontot $(x_m^N, x_m^W, x_m^S, x_m^E)$, ahol h jelöli az $||x_m - x_k^{(m)}||$ $(k = 1, 2, ..., N_m)$ távolságok valamilyen közepét: mi négyzetes közepet alkalmaztunk. A (3.6.1) Laplace-egyenlet diszkretizált alakja ekkor (Seidel-iterációra al-kalmas formába írva):

$$u_m \coloneqq \frac{1}{4} (\tilde{u}^{(m)}(x_m^N) + \tilde{u}^{(m)}(x_m^W) + \tilde{u}^{(m)}(x_m^S) + \tilde{u}^{(m)}(x_m^E)).$$
(3.6.6)

A séma jobb oldala az $u_k^{(m)}$ számokkal kifejezhető. Valóban, (3.6.6) jobb oldala definíció szerint:

$$\sum_{j=1}^{N_{m}} \boldsymbol{\alpha}_{j} \frac{\Phi(x_{m}^{N} - x_{j}^{(m)}) + \Phi(x_{m}^{W} - x_{j}^{(m)}) + \Phi(x_{m}^{S} - x_{j}^{(m)}) + \Phi(x_{m}^{E} - x_{j}^{(m)})}{4} + \sum_{j=1}^{M} a_{j} \frac{p_{j}(x_{m}^{N}) + p_{j}(x_{m}^{W}) + p_{j}(x_{m}^{S}) + p_{j}(x_{m}^{E})}{4} =: \sum_{j=1}^{N_{m}} \boldsymbol{\alpha}_{j} \boldsymbol{\beta}_{j} + \sum_{j=1}^{M} a_{j} b_{j} =: \\ =: \left\langle \begin{pmatrix} \boldsymbol{\alpha} \\ \mathbf{a} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \boldsymbol{\beta} \\ \mathbf{b} \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbf{R}^{N_{m}+M}},$$

ahol
$$\beta_j \coloneqq \frac{1}{4} (\Phi(x_m^N - x_j^{(m)}) + \Phi(x_m^W - x_j^{(m)}) + \Phi(x_m^S - x_j^{(m)}) + \Phi(x_m^E - x_j^{(m)})), (j = 1, ..., N_m)$$

és $b_j \coloneqq \frac{1}{4} (p_j(x_m^N) + p_j(x_m^W) + p_j(x_m^S) + p_j(x_m^E)) (j = 1, ..., M).$ Ámde (3.6.5) alapján:
 $\begin{pmatrix} \boldsymbol{\alpha} \\ \boldsymbol{a} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & 0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, (\mathbf{p}) \end{pmatrix}_{\mathbf{R}^{N_m + M}} = \left\langle \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & 0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\beta} \\ \mathbf{b} \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbf{R}^{N_m + M}} = \left\langle \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & 0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{\beta} \\ \mathbf{b} \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbf{R}^{N_m + M}} = \left\langle \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \mathbf{R}^{N_m + M} \\ \mathbf{b}^* \end{pmatrix}_{\mathbf{R}^{N_m + M}} = \left\langle \mathbf{u}, \mathbf{w} \right\rangle_{\mathbf{R}^{N_m + M}} = \left\langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \right\rangle_{\mathbf{R}^{N_m + M} = \left\langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \right\rangle_{\mathbf{R}^{N_m + M}} = \left\langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \right\rangle_{\mathbf{R}^{N_m + M} = \left\langle \mathbf{u},$

ahol a $\begin{pmatrix} \mathbf{w} \\ \mathbf{v} \end{pmatrix}$ vektor megoldása az

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{w} \\ \mathbf{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\beta} \\ \mathbf{b} \end{pmatrix}$$
(3.6.7)

lokális egyenletrendszernek.

A lokális séma konstrukciója tehát a következő algoritmussal történik. Minden $x_m \in S$ ponthoz

- meghatározzuk a szomszédos pontokat;
- kiszámítjuk a β és a **b** vektorokat;
- megoldjuk a (3.6.7) lokális egyenletrendszert.

Az így kapott $\mathbf{w} \in \mathbf{R}^{N_m}$, $\mathbf{v} \in \mathbf{R}^M$ vektorpárból **v**-t később már nem használjuk; **w** elemeivel pedig felírhatjuk a diszkretizált Laplace-egyenletet (Seidel-iterációs formában):

$$u_m \coloneqq \sum_{j=1}^{N_m} w_j u_j^{(m)} \tag{3.6.8}$$

A w_j $(j = 1,2,...N_m)$ együtthatókat elég a számítás elején *egyszer* meghatározni. A (3.6.8) Seidel-iterációt ezekután vagy önmagában használhatjuk mint a diszkretizált Laplace-egyenlet megoldási algoritmusát, vagy egy – eléggé természetes módon definiálható – multigrid környezetbe ágyazva, simító iterációként. Az iteráció során a (3.6.2) peremfeltétel figyelembe vétele értelemszerűen, nehézség nélkül elvégezhető.

Standard eszközökkel (a Bramble-Hilbert-lemmára alapozva) megmutatható, hogy a fenti lokális séma képlethibája $O(h^2)$ nagyságrendű, amennyiben a (3.6.3) interpoláció reprodukálja a legfeljebb harmadfokú polinomokat. Az ilyen típusú sémák stabilitása viszont – a pályázó tudomása szerint – nincs igazolva, mint ahogy a (3.6.8) Seidel-iteráció konvergenciája sem. Egyszerű példák mutatják, hogy a (3.6.8) séma általában nem vezet szimmetrikus mátrixú egyenletrendszerre még a Laplace-egyenlet esetében sem. A numerikus tapasztalatok ennek ellenére nagyon jónak mondhatók [59], még abban az esetben is, ha a (3.6.3) interpoláció csak a legfeljebb másodfokú polinomokat reprodukálja (sőt, a legfeljebb elsőfokú polinomok reprodukciója esetében is ez a helyzet).

Példaként, tekintsük az egységnégyzetben a Laplace-egyenletet. A pontos megoldás legyen $u(x, y) \coloneqq \log((3x+0.5)^2 + (3y+0.5)^2)$, a Dirichlet-peremfeltétel pedig ezzel konzisztens. A tesztfeladat megoldására a fentebb leírt lokális sémát alkalmaztuk $\Phi(r) \coloneqq r^2 \log r$ radiális bázisfüggvénnyel (polárkoordinátákban felírva), és legfeljebb elsőfokú polinomokat szerepeltetve (3.6.3)-ban. A számításokat kétféle ponthalmazon hajtottuk végre: egy ekvidisztáns rácson és egy egyenletes eloszlás szerint kvázi-véletlenszerűen elszórt ponthalmazon. Három különböző alappontszám esetén a közelítések relatív L_2 -hibáit a 3. Táblázat mutatja (N jelöli a tartomány belsejében, M pedig a peremen elhelyezett pontok számát.) A 3.9. ábrán pedig a közelítő megoldás látható N = 4096, M = 256 esetében. Ld. [59].

N (M)	256 (64)	1024 (128)	4096 (256)
Relatív L_2 -hiba (ekvidisztáns rács), %	0.1157	0.0285	0.0067
Relatív L_2 -hiba (szórt ponthalmaz), %	0.1798	0.0480	0.0165

3. Táblázat. A (3.6.8) lokális séma alkalmazása a Laplace-egyenlet megoldására. A közelítő megoldások relatív L₂-hibái



3.9. ábra. A Laplace-egyenlet közelítő megoldása lokális sémával. Tesztfeladat: $u(x, y) \coloneqq \log((3x+0.5)^2 + (3y+0.5)^2)$

Érdemes megemlíteni még egy nem várt pozitív tapasztalatot. Ha a peremen elhelyezett pontok nem mindegyikénél követeljük meg a Dirichlet-feltételt (azokra a peremfeltétel helyett szintén a (3.6.8) sémát alkalmazva), akkor a séma a peremen automatikusan egy peremmenti interpolációt eredményez, *perem-szingularitások generálása nélkül* (vö. a 3.5. szakasz elején leírtakkal). Illusztrációként tekintsük ismét az előbbi példát: a pontos megoldás legyen $u(x, y) := \log((3x+0.5)^2 + (3y+0.5)^2)$. A belső pontok száma legyen 1024, a peremen elhelyezett pontok száma pedig 128, de ez utóbbiakból csak minden 8.-at deklaráljunk Dirichlet-perempontnak, ahol a peremfeltételt megköveteljük. A Dirichlet-perempontok száma így mindössze 16. A megfelelő közelítő megoldásokat a 3.10. ábra mutatja: az első esetben ekvidisztáns rácsot, a másodikban kvázi-véletlenszerűen elszórt alappontokat használva. A relatív L_2 -hiba természetesen most nagyobb, mint az előző esetben, de így sem haladja meg az 1%-ot.



3.10. ábra. A Laplace-egyenlet közelítő megoldása lokális sémával: peremmenti interpoláció, perem-szingularitások generálása nélkül

Egy másik tesztfeladat megoldását szemlélteti a 3.11. ábra. Itt a pontos megoldás az

$$u(x, y) \coloneqq \operatorname{ch}(\pi(x - \frac{1}{2})) \cdot \sin \pi y$$

formulával értelmezett harmonikus függvény (az egységnégyzeten értelmezve). A peremfeltétel ismét Dirichlet-féle. Az alkalmazott radiális bázisfüggvény: $\Phi(r) := r^2 \log r$ (polárkoordinátákban), legfeljebb elsőfokú polinomokkal kiegészítve. A számítást egy ekvidisztáns és egy kvázi-véletlenszerűen elszórt ponthalmazon hajtottuk végre. A belső pontok száma 4096, a perempontok száma 256. A relatív L_2 -hibák most 0.05% ill. 0.14%-ra adódtak.



3.10. ábra. A Laplace-egyenlet közelítő megoldása lokális sémával. Tesztfeladat: $u(x, y) \coloneqq \operatorname{ch}(\pi(x - \frac{1}{2})) \cdot \sin \pi y$.

Megjegyzés: A Neumann-peremfeltétel diszkretizálása éppoly könnyen történhet, mint a hagyományos véges differencia sémák esetében. Legyen pl. x_m egy perempont, melyen az egyszerűség kedvéért homogén Neumann-peremfeltétel adott. Tegyük fel, hogy a kifelé mutató normálvektor épp az (1,0) vektor: ekkor a Neumann-peremfeltétel diszkretizálása az

$$u_m \coloneqq \frac{1}{4} (\widetilde{u}^{(m)}(x_m^N) + 2\widetilde{u}^{(m)}(x_m^W) + \widetilde{u}^{(m)}(x_m^S))$$

sémával történhet, melyre (3.6.8)-hoz analóg formulák vezethetők le.

Újraglobalizálás multi-elliptikus interpolációval. A fenti lokális sémák használatának van egy alapvető korlátjuk, és ez a *szomszédos pontok* definiálása. Ha a szomszédos pontok száma túl kevés, ez numerikus instabilitást és divergenciát okozhat: ugyanez a helyzet, ha a pontok térbeli elhelyezkedése véletlenül túl speciális, pl. egy egyenesen helyezkednek el. A lokális sémák megoldhatóságára vonatkozó feltételek nehezen biztosíthatók, a numerikus stabilitás még kevésbé garantálható. Ha a szomszédokat egy túl nagy környezetből választjuk, az a számításigényt növeli meg. Sokat javít a helyzeten, ha nem lokális sémát alkalmazunk, hanem egy multi-elliptikus interpolációval realizált globális sémát: az ilyeneket neveztük el *újraglo*-

balizált sémáknak. Ezek lényege, hogy a (3.6.6) formulában fellépő $\tilde{u}^{(m)}$ lokális interpolációs függvényeket felváltjuk globális (az összes interpolációs pontra támaszkodó) multi-elliptikus interpolációs függvényekkel. Ez esetben természetesen a (3.6.7) interpolációs egyenleteket nem oldjuk meg direkt módon, hanem a multi-elliptikus interpolációs függvényt QT-hálós, multigrid technikával meghatározva, közvetlenül a (3.6.6) Seidel-iterációs formulákat értékeljük ki. Továbbá, kihasználva a QT-hálók szerkezetét, a fiktív $x_m^N, x_m^W, x_m^S, x_m^E$ pontok

generálását is megtakaríthatjuk: a Laplace-operátort approximáló séma mindig az x_m pontot tartalmazó legfinomabb cella szomszédos celláinak segítségével történhet, az 1.3. szakaszban leírtak szerint (ld. a 3.11. ábrát).



3.11. ábra. A Laplace-operátor diszkretizálása az interpolációs alappontokban. A fiktív $x_m^N, x_m^W, x_m^S, x_m^E$ pontok helyett a szomszédos cellák középpontjait használjuk

Végeredményben az alábbi algoritmust nyerjük:

- Az x₁, x₂,..., x_N pontokkal vezérelve (melyek egy része az Ω tartomány peremén, a többi pedig Ω belsejében van elhelyezve) generáljunk egy QT-hálót olyan négyzetből kiindulva, mely mindegyik x₁, x₂,..., x_N pontot tartalmazza;
- Határozzuk meg a biharmonikus interpolációs függvényt, ahol a peremre eső pontokban az adott peremfeltételt írjuk elő, az Ω -ba eső pontokban pedig tetszőleges kezdeti közelítést adunk meg interpolációs feltételként;
- Az Ω belsejébe eső interpolációs pontokhoz rendelt értékeket újítsuk fel a környező cellákhoz rendelt értékek használatával, a Laplace-egyenlet Seidel-sémája alapján, és ismételjük az eljárást az előző ponttól.

Az algoritmus gyakorlati megvalósításához a pontos biharmonikus interpoláció helyett elég csak néhány, a biharmonikus interpolációt diszkretizáló Seidel-iterációt végrehajtani. Az algoritmus a QT-háló segítségével igen természetes módon többszintű (multigrid) algoritmussá alakítható: a részletekkel nem foglalkozunk.

Ez a fajta módszer tehát olyan közelítő függvényt szolgáltat, mely az alappontok környezetében biharmonikus, az alapponti értékek maguk – egy durvább diszkretizációs szinten – jó közelítéssel egy harmonikus függvény értékeinek tekinthetők.

A módszert a korábbi (harmonikus) tesztfeladaton szemléltetjük. A pontos megoldás az

$$u(x, y) \coloneqq \operatorname{ch} \left(\pi (x - \frac{1}{2}) \right) \cdot \sin \pi y$$

formulával értelmezett harmonikus függvény, de most Ω egy, az egységnégyzetben elhelyezett, 1/4 sugarú kör, a Dirichlet-peremfeltétel pedig ezzel konzisztens. Az Ω tartományban 350, a peremen további 80 pontot helyeztünk el. A *3.12. ábrán* a közelítő megoldás látható: a relatív L_2 -hiba 0.84% volt.



3.12. ábra. A Laplace-egyenlet közelítő megoldása újraglobalizált sémával. Tesztfeladat: $u(x, y) \coloneqq \operatorname{ch}(\pi(x - \frac{1}{2})) \cdot \sin \pi y$.

Újraglobalizálás, perem-verzió: Az újraglobalizált algoritmus tovább egyszerűsíthető, ha csak a peremen elhelyezett interpolációs alappontokat használunk fel, *a belső interpolációs pontokat pedig automatikusan a (peremvezérelt) QT-háló cellaközéppontjainak választjuk.* Így a következő algoritmust nyerjük:

- Az Ω tartomány peremén elhelyezett interpolációs pontokat vezérlő pontokként használva, generáljunk egy QT-hálót.
- Keressük meg mindazon cellákat, melyek Ω belsejébe esnek, és méretük legalább akkora, mint a perempontok karakterisztikus távolsága. Nevezzük ezeket *belső celláknak*, az ennél kisebb méretű cellákat pedig *peremközeli celláknak*. A fennmaradó cellák a *külső cellák*.
- A perem-cellákhoz az adott Dirichlet-peremfeltételt, a belső cellákhoz egy-egy tetszőleges induló közelítést rendelve, konstruáljunk egy biharmonikus interpolációt (csak a peremközeli és a külső cellákra).
- A belső cellákhoz rendelt értékeket újítsuk fel a Laplace-egyenletre alkalmazott Seidel-iterációs formula alapján (ekkor tehát a peremközeli cellákhoz rendelt értékek változatlanok maradnak), és ismételjük az eljárást az előző ponttól.

Megjegyzés: Ha az eljárás utolsó pontjában a diszkrét Laplace-egyenletet a belső cellákban elég pontosan oldjuk meg (pl. multigrid módszert alkalmazva), előzőleg pedig a biharmonikus interpolációban a belső cellaértékeket nem tekintjük interpolációs feltételeknek, akkor nem feltétlen szükséges a peremközeli biharmonikus interpolációra visszatérni, mivel az interpoláció a belső cellák külső peremén már jól közelíti az ott érvényes peremértékeket. Pontosabb közelítést kapunk azonban az algoritmus utolsó két pontjának iteratív ismétlésével (ld. később).

Durván szólva, az algoritmus a belső cellákon a Laplace-egyenletet, a peremközeli cellákon a biharmonikus interpolációt közelíti. Mivel pedig a peremközeli cellák csak a perem egy szűk környezetében helyezkednek el, szemléletesen nyilvánvaló, hogy az itt elkövetett interpolációs hiba "kicsi", és ez a hiba a belül pontosan megoldott Laplace-egyenlet megoldását is csak kevéssé torzítja el.

A módszer gyakorlati kivitelezésekor a biharmonikus interpolációt ismét helyettesíthetjük néhány biharmonikus Seidel-iterációval. Az algoritmus, talán az előzőnél is természetesebb módon, multigrid környezetbe ágyazható (a részletekkel itt se foglalkozunk).

A módszer hasonlóságot mutat a 3.5.3. szakaszban bemutatott perem-rekonstrukció módszerével. A leglényegesebb különbség, hogy itt *nem* törekszünk a perem ill. a tartomány pontos rekonstrukciójára. Magát a Laplace-egyenletet (ami a megoldandó modellfeladat) nem a rekonstruált tartományon, hanem egy ennél szűkebb tartományon (a belső cellák összességén) oldjuk meg, a peremközeli cellákon az algoritmus egy biharmonikus interpolációt eredményez.

Más megközelítésben, ez a módszer a perem környezetében, egy (vékony) sávban egy biharmonikus interpolációs függvényt szolgáltat, a tartomány fennmaradó részében pedig a Laplace-egyenlet megoldását adja. E két függvény egymáshoz úgy csatlakozik, hogy a függvényértékek, esetenként pedig a normális irányú deriváltak is megegyeznek.

A módszer hibáját csak a következő speciális esetben vizsgáljuk (az általános eset erre visszavezethető). Legyen $\Omega := (0, L) \times (0, +\infty)$, $\Gamma := \{(x, 0) : 0 < x < L\}$, a megoldásról pedig tegyük fel, hogy x szerint L-periodikus. Legyen $\delta > 0$ egyelőre tetszőleges. Legyen $\Omega_{\delta} := (0, L) \times (0, \delta)$ a peremmenti sáv, és jelölje $\Gamma_{\delta} := \{(x, \delta) : 0 < x < L\}$. A modellfeladat legyen az Ω -ban kitűzött Laplace-egyenlet, Dirichlet-peremfeltétellel ellátva:

$$\Delta u = 0 \quad \Omega \text{-ban}, \quad u \mid_{\Gamma} = u_0 \tag{3.6.9}$$

Ha u_0 komplex trigonometrikus Fourier-sora

$$u_0(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \alpha_k e^{i\kappa x} ,$$

ahol $\kappa = \kappa(k) = \frac{2k\pi}{L}$ (és $\alpha_0 = 0$), akkor (3.6.9) pontos u^* megoldása az alábbi sor összegeként állítható elő:

$$u^{*}(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \alpha_{k} e^{-|\kappa| y} e^{i\kappa x}$$
(3.6.10)

Jelöljön v egy tetszőleges, rögzített, az Ω_{δ} sávban biharmonikus függvényt, melyre $v|_{\Gamma} = u_0$ teljesül. Mivel a biharmonikus egyenlet lineárisan független szeparált megoldásai pl. az $e^{-|\kappa|y}e^{i\kappa x}$, $e^{|\kappa|y}e^{i\kappa x}$, $ye^{-|\kappa|y}e^{i\kappa x}$, $ye^{|\kappa|y}e^{i\kappa x}$ formulákkal értelmezett függvények, azért v előáll

$$v(x, y) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left(a_k e^{-|\kappa|y|} + b_k e^{|\kappa|y|} + c_k |\kappa| y \cdot e^{-|\kappa|y|} + d_k |\kappa| y \cdot e^{|\kappa|y|} \right) e^{i\kappa x}$$

alakban. A $v \mid_{\Gamma} = u_0$ egyenlőségből adódóan pedig:

$$a_k + b_k = \alpha_k \quad (k \in \mathbf{Z}) \tag{3.6.11}$$

Jelölje w azt az $\Omega \setminus \overline{\Omega}_{\delta}$ tartományon harmonikus függvényt, mely v-hez csatlakozik Γ_{δ} mentén, azaz

$$w|_{\Gamma_{\delta}} = v|_{\Gamma_{\delta}} = v(x,\delta) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left(a_{k} e^{-|\kappa|\delta} + b_{k} e^{|\kappa|\delta} + c_{k} |\kappa| \delta \cdot e^{-|\kappa|\delta} + d_{k} |\kappa| \delta \cdot e^{|\kappa|\delta} \right) e^{i\kappa x}$$

Könnyen látható, hogy ekkor

=

$$w(x,y) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left(a_k + b_k e^{2|\kappa|\delta} + c_k \mid \kappa \mid \delta + d_k \mid \kappa \mid \delta \cdot e^{2|\kappa|\delta} \right) e^{-|\kappa|y} e^{i\kappa x} \; .$$

A (3.6.9) modellfeladat közelítő megoldásának most azt az u függvényt tekintjük, mely az Ω_{δ} sávon *v*-vel, $\Omega \setminus \overline{\Omega}_{\delta}$ -n pedig *w*-vel egyenlő. Az $(u - u^*)$ eltérést célszerű a Γ_{δ} szakaszon vett eltéréssel jellemezni:

$$(u - u^{-})|_{\Gamma_{\delta}} = v(x, \delta) - u^{-}(x, \delta) =$$

$$\sum_{k = -\infty}^{\infty} \left(b_{k} e^{|\kappa|\delta} - b_{k} e^{-|\kappa|\delta} + c_{k} |\kappa| \delta \cdot e^{-|\kappa|\delta} + d_{k} |\kappa| \delta \cdot e^{|\kappa|\delta} \right) e^{i\kappa x}$$

ahol felhasználtuk a (3.6.11) egyenlőséget. Innen:

$$(u-u^*)|_{\Gamma_{\delta}} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left(2b_k \operatorname{sh}(|\kappa|\delta) - b_k e^{-|\kappa|\delta} + |\kappa|\delta \cdot (c_k e^{-|\kappa|\delta} + d_k e^{|\kappa|\delta}) \right) e^{i\kappa x} .$$
(3.6.12)

Innen nyilvánvaló, hogy minden k index esetén a jobb oldal k-adik tagja 0-hoz tart, ha $\delta \rightarrow 0$, éspedig ekkor a k-adik tag nagyságrendje $O(\delta)$ (a konvergencia k szerint nem egyenletes).

Ennek az esetnek felel meg az újraglobalizált módszer perem-verziójának fentebb vázolt egyszerűsítése (amikor a peremközeli biharmonikus interpolációt csak egyszer hajtjuk végre, ezután a belső Laplace-egyenletet oldjuk meg, szintén csak egyszer, iteratív javítás nélkül). Pontosabb közelítést nyerünk, ha Ω_{δ} -n a biharmonikus interpolációt úgy konstruáljuk, hogy Γ_{δ} mentén nemcsak *v* és *w* nyomai egyeznek, hanem a normális irányú deriváltjuk is (vö. a perem-verzió algoritmusának leírása utáni megjegyzéssel), azaz $\frac{\partial w}{\partial n}|_{\Gamma_{\delta}} = \frac{\partial v}{\partial n}|_{\Gamma_{\delta}}$. Ekkor egyrészt:

$$\frac{\partial v}{\partial n}|_{\Gamma_{\delta}} = -\frac{\partial v}{\partial y}(x,\delta) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} (|\kappa| a_{k}e^{-|\kappa|\delta} - |\kappa| b_{k}e^{|\kappa|\delta} - |\kappa| c_{k}e^{-|\kappa|\delta} + c_{k} |\kappa|^{2} \delta \cdot e^{-|\kappa|\delta} - |\kappa| d_{k}e^{|\kappa|\delta} - d_{k} |\kappa|^{2} \delta \cdot e^{|\kappa|\delta})e^{i\kappa x}$$

másrészt pedig

 $\frac{\partial w}{\partial n}|_{\Gamma_{\delta}} = -\frac{\partial w}{\partial y}(x,\delta) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} (|\kappa| a_k e^{-|\kappa|\delta} + |\kappa| b_k e^{|\kappa|\delta} + c_k |\kappa|^2 \delta \cdot e^{-|\kappa|\delta} + d_k |\kappa|^2 \delta \cdot e^{|\kappa|\delta}) e^{i\kappa x}.$ Innen, minden $k \neq 0$ indexre

$$2 |\kappa| b_k e^{|\kappa|\delta} + 2d_k |\kappa|^2 \delta \cdot e^{|\kappa|\delta} = -|\kappa| c_k e^{-|\kappa|\delta} - |\kappa| d_k e^{|\kappa|\delta},$$

ahonnan b_k kifejezhető c_k és d_k segítségével:

$$2b_k = -2d_k |\kappa| \delta - (c_k e^{-|\kappa|\delta} + d_k e^{|\kappa|\delta}) \cdot e^{-|\kappa|\delta}$$

Ezt visszahelyettesítve (3.6.12)-be, kapjuk, hogy most

$$(u - u^*)|_{\Gamma_{\delta}} = \sum_{k = -\infty}^{\infty} (2d_k | \kappa | \delta \cdot \operatorname{sh}(|\kappa| \delta) - (c_k e^{-|\kappa|\delta} + d_k e^{|\kappa|\delta})e^{-|\kappa|\delta}\operatorname{sh}(|\kappa| \delta) + (c_k e^{-|\kappa|\delta} + d_k e^{|\kappa|\delta})|\kappa|\delta)e^{i\kappa x} =$$

$$= \sum_{k=-\infty}^{\infty} (2d_k | \kappa | \delta \cdot \operatorname{sh}(|\kappa| \delta) + (c_k e^{-|\kappa|\delta} + d_k e^{|\kappa|\delta}) \cdot (|\kappa| \delta - e^{-|\kappa|\delta} \operatorname{sh}(|\kappa| \delta)))e^{i\kappa x} =$$
$$= \sum_{k=-\infty}^{\infty} (2d_k |\kappa| \delta \cdot \operatorname{sh}(|\kappa| \delta) + (c_k e^{-|\kappa|\delta} + d_k e^{|\kappa|\delta}) \cdot (|\kappa| \delta - \frac{1 - e^{-2|\kappa|\delta}}{2}))e^{i\kappa x}.$$

A jobb oldali összeg minden tagja $\delta \to 0$ esetén 0-hoz tart, éspedig – szemben a (3.6.12) egyenlőség jobb oldali tagjaival – most $O(\delta^2)$ nagyságrendű, amint ez az $x \to x \cdot \text{sh } x$ és az

$$x \rightarrow x - \frac{1-e}{2}$$
 leképezések 0 körüli Taylor-sorfejtéséből azonnal látható.

A módszert egy egyszerű tesztfeladaton illusztráljuk (ld. a pályázó [60] publikációját). Legyen Ω az egységnégyzetben elhelyezkedő kisebb négyzet:

$$\Omega \coloneqq \left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right) \times \left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right) = \left\{(x, y): \frac{1}{4} < x, y < \frac{3}{4}\right\}, \text{ és } u(x, y) \coloneqq (1 - x)y \text{ (harmonikus függvény)},$$

az Ω tartomány peremén előírt Dirichlet-peremfeltétel ezzel konzisztens. Az Ω tartomány peremét mindössze 48 peremponttal diszkretizáltuk. A perempontokkal egy QT-hálót generáltunk, 8 felbontási szinttel. Ezen közvetlenül a tesztfeladatot megoldva, numerikus peremszingularitások jelennek meg, és a relatív L_2 -hiba 13.62%. A fentebb leírt újraglobalizált módszer alkalmazásával a perem-szingularitások eltűntek, a relatív L_2 -hiba pedig 0.90%-ra csökkent (3.13. ábra).



3.13. ábra. A Laplace-egyenlet közelítő megoldása közvetlenül és újraglobalizált sémával (perem-verzió). Tesztfeladat: u(x, y) := (1 - x)y

Alkalmazás a Stokes-egyenletre. Végül az e szakaszban leírtakat egy kevésbé egyszerű modellfeladatra alkalmazzuk. Tekintsük a kétdimenziós stacionárius Stokes-egyenleteket: ismeretes, hogy ez az egyenlet írja le a lassú és/vagy nagy viszkozitás melletti áramlásokat. Az egyenletek az általános Navier-Stokes-egyenletekből a konvektív deriváltak elhagyásával származtathatók:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$$
 (folytonossági egyenlet) (3.6.13)

$$-\nu\Delta u + \frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x} = 0$$
(momentum gyenletek)
$$-\nu\Delta v + \frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial y} = 0$$
(3.6.14)

Itt *u*, *v* jelölik a sebességkomponenseket, *p* a nyomást, ρ a sűrűséget, *v* pedig a kinematikai viszkozitást (ez utóbbi kettőt konstansnak tekintjük). Az Ω áramlási tartomány peremén peremfeltételként *u* és *v* adottak. Ismeretes, hogy a *p* nyomás csak additív konstans erejéig egyértelmű: feltehető tehát, hogy e konstans úgy van megválasztva, hogy $\int p d\Omega = 0$ teljesül.

A Stokes-egyenletekre több, jól működő numerikus megoldási módszer ismeretes. Itt a klasszikus *Uzawa-algoritmust* vizsgáljuk [4], [8], [87], mely az (u, v, p) függvényhármast az alábbi rekurzióval közelíti:

$$\Delta u_{k+1} = \frac{1}{\nu \rho} \frac{\partial p_k}{\partial x}$$

$$\Delta v_{k+1} = \frac{1}{\nu \rho} \frac{\partial p_k}{\partial y}$$

$$p_{k+1} \coloneqq p_k - \omega \nu \rho \cdot \left(\frac{\partial u_{k+1}}{\partial x} + \frac{\partial v_{k+1}}{\partial y}\right)$$
(3.6.15)

Ismeretes, hogy minden, elég kis ω iterációs paraméter mellett az iteráció a (3.6.13)-(3.6.14) Stokes-egyenlet (az adott peremfeltétel mellett érvényes) megoldásához konvergál.

Az algoritmus lényege tehát, hogy a Stokes-egyenletek megoldását Poisson-egyenletek sorozatának megoldására vezeti vissza.

Az Uzawa-algoritmus gyakorlati alkalmazásakor (3.6.15) első két Poisson-egyenletét nem szükséges pontosan megoldani, elég néhány (alul)relaxálási lépést alkalmazni. Így kapjuk az egyszerű nyomáskorrekciós módszert:

• Alkalmazzunk néhány (alul)relaxálást a diszkretizált momentumegyenletekre:

$$\Delta u = \frac{1}{\nu \rho} \frac{\partial p}{\partial x}, \qquad \Delta v = \frac{1}{\nu \rho} \frac{\partial p}{\partial y}$$

• Korrigáljuk a nyomást a számított divergenciával:

$$p \coloneqq p - \omega \mathbf{v} \rho \cdot \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right),$$

ahol $\omega > 0$ egy elegendően kicsi iterációs paraméter, és ismételjük az eljárást az előző ponttól.

Kihasználhatjuk, hogy a pontos *p* nyomásfüggvény (a (3.6.13)-(3.6.14) egyenletek egyszerű következményeképp) az áramlási tartományban maga is kielégíti a Laplace-egyenletet (pontos peremfeltételek megadása azonban általában nem lehetséges). Így nyerjük a *simított nyomás-korrekciós módszert*. Itt az egyszerű nyomáskorrekció két lépése kiegészül még egy lépéssel:

• Alkalmazzunk néhány (alul)relaxálást a $\Delta p = 0$ egyenlet diszkrét megfelelőjére (az előző lépésben kapott nyomásból kiindulva), és módosítsuk a nyomást egy konstans hozzáadásával úgy, hogy a nyomás Ω -n vett integrálja 0 legyen:

$$p \coloneqq p - \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} p \, d\Omega$$

(ahol $|\Omega|$ jelöli az Ω tartomány területét).

A simított nyomáskorrekciós módszer realizálása az ebben a szakaszban leírt lokális (vagy újraglobalizált) sémákkal történhet. Megjegyezzük, hogy az egész algoritmus multigrid környezetbe ágyazható (különösen az újraglobalizált sémák alkalmazása esetén): a részletekkel nem foglalkozunk.

A módszert illusztrálandó, tekintsük az alábbi tesztfeladatot. Legyen Ω az egységnégyzet, melyben vízszintes áramlást tételezünk fel kvadratikus sebességprofillal. Ekkor a pontos megoldás:

$$u(x, y) = c \cdot y(L - y), \quad v(x, y) \equiv 0, \quad p(x, y) = cv\rho \cdot (L - 2x),$$

ahol L=1, c pedig egy $\frac{1}{m \cdot sec}$ dimenziójú skálázó konstans. A tesztfeladatban a legegysze-

rűbb $c \coloneqq 1$, $v\rho \coloneqq 1$ választással éltünk. A tartomány peremét 128 ponttal diszkretizáltuk, a tartomány belsejében 1024 kvázi-véletlenül elszórt pontot helyeztünk el. A Poisson-egyenleteket lokális sémákkal diszkretizáltuk. A számított u vízszintes sebességkomponens és a p nyomás a 3.14. ábrán, a számított sebességmező pedig a 3.15. ábrán látható. A sebességmező relatív L_2 -hibája 0.754% volt.



3.14.ábra. Számított vízszintes sebességkomponens és nyomás a Stokes-egyenletre vonatkozó tesztfeladatban



3.14. ábra. Számított sebességmező a Stokes-egyenletre vonatkozó tesztfeladatban

4. Összefoglalás

A mérnöki alkalmazásokban igen sok folyamat írható le (legalábbis közelítőleg) parciális differenciálegyenletekkel. Ezek numerikus megoldásának technikái hagyományosan három nagy módszercsaládba tartoznak: a véges differencia módszerek, a véges elem módszerek, vagy a viszonylag újabb keletű perem-integrálegyenlet (peremelem) módszerek közé. Az első két nagy módszercsaládba tartozó módszerek közös hátránya, hogy a megfelelően finom diszkretizációhoz előbb egy, az adott geometriához jó illeszkedő görbevonalú rács ill. végeselemes háló konstruálása szükséges. Ez a részprobléma sokszor az eredetileg modellezni kívánt folyamatot leíró differenciálegyenlet megoldásával összemérhető nehézségű, esetenként még bonyolultabb is annál. Ez a nehézség hívta életre előbb a *hálóredukciós módszereket* (mesh reduction methods: tipikus képviselője a peremelem módszer), majd az elmúlt néhány évben a *hálónélküli módszereket* (meshless methods). Később a hálónélküliség igénye a peremelem módszerekben is természetes módon fellépett.

Az értekezés témaköre e problémakör köré összpontosul. Közös eszközként az eredetileg a számítógépes grafikában definiált quadtree (QT-) algoritmust használja. Itt a QT-algoritmus által szolgáltatott egyenlőtlen, könnyen kialakítható struktúrájú cellarendszert számítási rács-ként használjuk, azon véges térfogati sémákat és többszintű (multigrid) megoldási algoritmust definiálva. Ezzel rendkívül robusztus módszerekhez jutunk, melyek önmagukban is képesek egy sor modellezési probléma megoldására, így pl. áramlási és transzport folyamatok számítására. Ugyancsak a QT-algoritmus bukkan fel a gyors multipólus módszerben is, melyet sike-rült a perem-integrálegyenlet módszerben is alkalmazni, akár multigrid környezetben is.

Az értekezés központi gondolata a szórt pontú interpolációs probléma egy megoldási ötlete (a multi-elliptikus interpolációnak nevezett módszer), mellyel az interpoláció visszavezethető egy magasabbrendű parciális differenciálegyenlet megoldására. E differenciálegyenlet numerikus megoldására a QT-hálókon felépített multigrid módszer kiválóan alkalmazhatónak bizonyult. Az így kapott interpolációs módszer segítségével aztán egy sor hálónélküli numerikus módszert sikerült konstruálni és azokat analizálni.

A pályázó nevéhez köthető új eredményeket az alábbi hat tézisben foglaljuk össze (az egyértelműség kedvéért egyes szám 1. személyben fogalmazva):

1. Gyors iterációs algoritmust dolgoztam ki kevert peremfeltétellel ellátott perem-integrálegyenletek megoldására. A módszert továbbfejlesztettem multigrid módszerré. A szükséges számításigény további csökkentésére a gyors multipólus módszert általánosítottam az itt előforduló peremintegrálok kiértékelésére, az egyes perem-integráloperátorok multipólus sorba fejtésével. Így a megoldás műveletigényét sikerült $N \cdot \log N$ -nel arányos mértékűre csökkenteni (ahol N a peremelemek száma).

Az 1. pontban jelzett eredmények a következő publikációkban találhatók: [24], [25], [31], [34], [40], [42], [44], [45].

2. A QT-algoritmust egyenlőtlen számítási rácsként használva, cella-csúcsponti és véges térfogat módszeren alapuló cella-középponti sémákat konstruáltam elliptikus differenciáloperátorokra. A cella-középponti sémákhoz multigrid algoritmusokat fejlesztettem ki QT-hálós környezetben, mely a diszkretizálás során bevezetett ismeretlenek számát és a megoldás számításigényét igen jelentős mértékben lecsökkentette.

A 2. pontban jelzett eredmények és azok alkalmazásai a következő publikációkban találhatók: [26], [27], [28], [30], [33], [34], [35], [36], [37], [38], [39], [43]

3. Megmutattam, hogy a kétdimenziós szórt pontú interpolációs probléma egy gyakorlatban is jól használható megoldása a multi-elliptikus interpoláció, amikor az interpolációs függvény – az interpolációs alappontok kivételével – kielégít egy legalább negyedrendű parciális differenciálegyenletet (multi-elliptikus egyenletet), melyhez az interpolációs feltételek mint diszkrét pontokban adott peremfeltételek csatlakoznak. Igazoltam, hogy ily módon korrekt kitűzésű problémát nyerünk. Az interpolációs függvényre approximációs és stabilitási tételeket bizonyítottam. Az interpolációs függvény numerikus előállítását az előző pontban említett QT-hálós multigrid módszerrel végeztem. Megmutattam, hogy az algoritmus műveletigénye töredéke a hagyományos, radiális bázisfüggvényeken alapuló interpoláció műveletigényének, ugyanakkor annak numerikus hátrányait (nagyméretű, kitöltött mátrixú, rosszul kondícionált egyenletrendszerek megoldásának szükségessége) teljesen kikerüli.

A 3. pontban jelzett eredmények a következő publikációkban találhatók: [32], [43], [48], [49], [50], [51], [52].

4. Multi-elliptikus interpolációra alapozott hálónélküli módszereket konstruáltam elliptikus differenciálegyenletek megoldására. A multi-elliptikus interpolációt mind a Kansa-módszer, mind pedig a partikuláris megoldások módszerében alkalmaztam. A partikuláris megoldást így egy, a forrásfüggvényre alkalmazott multi-elliptikus interpoláció és az eredeti problémára alkalmazott QT-hálós multigrid módszer egymásutánjaként állítottam elő. A multi-elliptikus interpolációt a perem-integrálegyenlet módszer duális reciprocitási módszerében is alkalmaztam. Megmutattam, hogy a szükséges műveletigény minden esetben lényegesen kevesebb a hagyományos, radiális bázisfüggvényeken alapuló módszer műveletigényénél.

A 4. pontban jelzett eredmények a következő publikációkban találhatók: [47], [48], [49], [50], [51], [52].

5. A homogén egyenletre (elsősorban a Laplace-egyenletre) speciális, Laplace-Helmholtzinterpoláción alapuló hálónélküli módszert konstruáltam. Megmutattam, hogy ha a Laplace-Helmholtz-interpoláció skálázó paramétere a karakterisztikus alapponttávolság reciprokaként van definiálva, akkor a Laplace-egyenlet Dirichlet-feladatának megoldása jól közelíthető Laplace-Helmholtz-interpolációval. Erre nézve pontossági becsléseket vezettem le. A módszert általánosítottam Neumann-peremfeltétel esetére is, így kaptam az alapmegoldások módszerének egy regularizált változatát, mely mindazonáltal elkerüli a rosszul kondícionált, nagyméretű mátrixokkal való számításokat. Ugyancsak a Laplace-Helmholtz-interpolációra alapozva, újabb algoritmust konstruáltam (a perem-rekonstrukció módszerét), melyben első lépésben az eredeti probléma tartományának karakterisztikus függvénye rekonstruálható, majd az ily módon rekonstruált tartományon az eredeti probléma oldható meg QT-hálós multigrid módszerrel, elkerülve a peremen fellépő numerikus szingularitások problémáját.

Az 5. pontban jelzett eredmények a következő publikációkban találhatók: [53], [54], [55], [56], [57], [58].

6. A radiális bázisfüggvényeken alapuló interpoláció lokális alkalmazásával lokális hálónélküli sémákat vezettem le a Laplace-operátor diszkrét megfelelőjének előállítására, mérsékelt műveletigény árán. A lokális interpolációt globális, multi-elliptikus interpolációra cserélve, új hálónélküli algoritmusokat konstruáltam (újraglobalizált sémák), melyek műveletigénye mindazonáltal sokkal kevesebb, mint a radiális bázisfüggvényeken alakuló sémáké. A módszernek definiáltam a peremvezérelt változatát is, melyben a belső interpolációs pontokat előre megadni nem kell, azokat a QT-cellarendszer belső celláinak középpontjai automatikusan meghatározzák. Megmutattam, hogy ez a megközelítés egyenértékű egy peremkörnyéki biharmonikus interpoláció és egy, a belső cellákban végrehajtott QT-hálós multigrid megoldó algoritmus összekapcsolásával, így maga is multigrid környezetbe ágyazható.

A 6. pontban jelzett eredmények a következő publikációkban találhatók: [59], [60].

Végezetül hangsúlyozzuk, hogy a témakör korántsem tekinthető lezártnak. A multi-elliptikus interpoláció további alkalmazási lehetőségei közül érdemes megemlíteni a felületrekonstrukciót, amikor egy felületet egy azon szabálytalanul elszórt ponthalmaz ismeretében kell rekonstruálni, és esetleg valamilyen struktúrát (pl. háromszöghálót) létrehozni rajta. Az itt bemutatott hálónélküli módszerek további, összetettebb problémákra való alkalmazása is jó reményekre jogosít, tekintve, hogy elkerülhető a rács- ill. hálógenerálás. További érdekes problémakör lehet még bizonyos felületi integrálokkal definiált mennyiségek (fluxusok, vízhozamok) hálónélküli számítása is, tekintve, hogy a perem hálómentes leírásakor az egyes felületdarabok területe ismeretlen, sőt, esetleg a felületi normálvektor sem adott.

5. Irodalomjegyzék

- Alves, C.J.S., Chen, C.S., Sarler, B.: The method of fundamental solutions for solving Poisson problems. Int. Series on Advances in Boundary Elements. Vol. 13. Proceedings of the 24th International Conference on the Boundary Element Method incorporating Meshless Solution Seminar (ed. by C.A.Brebbia A. Tadeu, V. Popov), pp. 67-76. WitPress, Southatmpon, Boston, 2002.
- [2] Babuska, I., Melenk, M.: The partition of unity method. *Int. J. Numer. Methods Eng.* Vol. 40, pp. 727-758, 1997.
- [3] Beatson, R.K., Light, W.A.: Fast evaluation of radial basis functions: Methods for twodimensional polyharmonic splines. *IMA Journal of Numerical Analysis*, Vol. 17, pp. 343-372, 1997.
- [4] Benzi, M., Golub, G.H., Liesen, J.: Numerical solution of saddle point problems. *Acta Numerica*, pp. 1-137, 2005.
- [5] Bettess, J.A.: Solution Techniques for Boundary Integral Matrices. In: Numerical Methods for Transient and Coupled Problems (ed. R.W.Lewis, E.Hinten, P.Battess, B.A.Schrefler). Wiley-Interscience, 1987.
- [6] Borthwick, A.G.L., Marchant, R.D., Copeland, G.J.M.: Adaptive Hierarchical Grid Model of Water-Borne Pollutant Dispersion. *Advances in Water Resources* 23(8) pp. 849-862, 2000.
- [7] Bramble, J.H., Hilbert, S.R.: Bounds for a class of linear functionals with application to Hermite interpolation, *Numer. Math.*, Vol. 6., pp. 362-369, 1971.
- [8] Bramble, J.H., Pasciak, J.E., Vassilev, A.T.: Analysis of the inexact Uzawa algorithm for saddle point problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 34, pp. 1072-1092, 1997.
- [9] Brebbia, C.A., Telles, J.C.W., Wrobel, L.C.: Boundary Element Techniqes. Springer-Verlag, Berlin, New York, 1984.
- [10] Brandt, A.: Multigrid Technique. 1984 Guide with Applications to Fluid Dynamics, *GMD-Studien*, Nr. 85, Bonn, Germany, 1984.
- [11] Carrier, J., Greengard, L., Rokhlin, V.: A Fast Adaptive Multipole Algorithm for Particle Simulations, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 9, pp. 669-686, 1988.
- [12] Chen, C.S., Golberg, M.A., Ganesh, M., Cheng, A.H.-D.: Multilevel compact radial functions based computational schemes for some elliptic problems. *Journal of Computers and Mathematics with Application*, Vol. 2, 87-95, 2002.
- [13] Cheng, J.H., Finnigan, P.M., Hathaway, A.F., Kela, A., Schroeder, W.J.: Quadtreeoctree meshing with adaptive analysis. *Numerical Grid Generation in Computational Fluid Mechanics* '88. (Edited by S. Sengupta, J. Häuser, P.R. Eiseman, J.F. Thompson.) *Pineridge Press*, 1988.

- [14] Dommelen, L. van, Rundensteiner, E.A. Fast, Adaptive Summation of Point Forces in the Two-dimensional Poisson Equation, *Journal of Computational Physics*, Vol. 83, 126-147, 1989.
- [15] Du, C.: A Finite-Point Method for Simulation of Stationary Two-Dimensional Flows in Shallow Waters. *Thesis. Institut für Wasserwirtschaft und Kulturtechnik*, Universität Karlsruhe, Germany, 1998.
- [16] Evans, A., Marchant, M.J., Szmelter, J., Weatherill, N.P.: Mesh Adaptivity with the Quadtree Method.*Numerical Grid Generation in Computational Fluid Dynamics and Related Fields*. (Edited by A.S. Arcilla, J. Häuser, P.R. Eiseman, J.F. Thompson.) *Elsevier*, 1991.
- [17] Fam, G.S.A., Rashed, Y.F.: A study on the source points locations in the method of fundamental solution. Int. Series on Advances in Boundary Elements. Vol. 13. Proceedings of the 24th International Conference on the Boundary Element Method incorporating Meshless Solution Seminar (ed. C.A.Brebbia A. Tadeu, V. Popov), pp. 297-312. WitPress, Southatmpon, Boston, 2002.
- [18] Fasshauer, G.: Solving Partial Differential Equations by Collocation with Radial Basis Functions. *Proceedings of Chamonix*, 1996 (ed. by A. Mehaute, C. Rabut and L. Schumaker), pp. 1-8., 1996.
- [19] Fasshauer, G.E.: On the numerical solution of differential equations with radial basis functions. *Boundary Element Technology* XIII. (ed. C.S.Chen, C.A.Brebbia, D.W.Peppers), pp. 291-300. WIT Press, Southampton, 1999.
- [20] Fasshauer, G.E.: Solving Differential Equations with Radial Basis Functions: Multilevel Methods and Smoothing. *Advances in Comput. Math.* Vol. 11, pp. 139-159, 1999.
- [21] Floater, M.S., Iske, A.: Multistep Scattered Data Interpolation Using Compactly Supported Radial Basis Functions, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 73, pp. 65-78., 1996.
- [22] Franke, R: Scattered Data Interpolation: Test of Some Methods. *Mathematics of Computation*, Vol. 38, No. 157, 1982.
- [23] Franke, C., Schaback. R.: Solving partial differential equations by collocation using Radial Basis Functions. *Applied Mathematics and Computation*, Vol. 93, pp. 73-82, 1998.
- [24] Gáspár C: A Fast Multigrid Solution of Boundary Integral Equations. *Environmental Software*, Vol 5, No 1, March 1990.
- [25] Gáspár C: Solution of Seepage Problems by Combining the Boundary Integral Equation Method with a Multigrid Technique, *Proceedings of the Eight International Conference on Computational Methods in Water Resources*, Venice, Italy, 11-15 June 1990. Computational Mechanics Publications, 1990.
- [26] Gáspár C: A Multigrid Based Boundary Element Method Without Integral Equations, *Proceedings of the 13th International Conference on Boundary Element Method*, Tulsa, Oklahoma, USA, 21-23 August 1991.

- [27] Gáspár C, Józsa J, Simbierowicz P: Lagrangian Modelling of the Convective Diffusion Problem Using Unstructured Grids and Multigrid Technique, *Proceedings of the First International Conference on Water Pollution*, Southampton, UK, 3-5 September 1991. Computational Mechanics Publications/Elsevier, 1991.
- [28] Gáspár C, Józsa J: A Coupled Lagrangian Particle Tracking and Quadtree-based Adaptive Multi-grid Method with Application to Shear Layer Evolution, *Proceedings of the XXIV IAHR Congress*, Madrid, Spain, 9-13 September 1991.
- [29] Gáspár C, Szél S: Application of Unstructured Grids in Monte-Carlo Simulations, *Proceedings of the XXIV IAHR Congress*, Madrid, Spain, 9-13 September 1991.
- [30] Gáspár C, Józsa J: Two-dimensional Lagrangian Flow Simulation Using Fast, Quadtreebased Adaptive Multigrid Solver, *Proceedings of 9th GAMM Conference*, Lausanne, Switzerland, 25-27 September 1991. Vieweg Verlag, 1992.
- [31] Gáspár Cs.: Többhálós multigrid eljárással összekapcsolt perem-integrálegyenlet módszer, és annak szivárgáshidraulikai alkalmazása. *Hidrológiai Közlöny*, 71. évf., 5.sz., 1991.
- [32] Gáspár C, Simbierowicz P: Scattered Data Interpolation Using Unstructured Grids, *Proceedings of the HYDROCOMP '92 Conference*, Budapest, Hungary, 25-29 May, 1992.
- [33] Gáspár C, Simbierowicz P: Difference Schemes in Tree-structured Multigrid Context, Proceedings of the IX. International Conference on Computational Methods in Water Resources, Denver, Colorado, USA, 9-12 June, 1992. Computational Mechanics Publications/Elsevier, 1992.
- [34] Gáspár Cs.: Elliptikus peremérték feladatok perem típusú numerikus megoldási módszerei. *Kandidátusi disszertáció*, Budapest, 1993.
- [35] Gáspár C, J Józsa, J Sarkkula: Shallow Lake Modelling Using Quadtree-based Grids, Proceedings of the X. International Conference on Computational Methods in Water Resources, Heidelberg, Germany, July 19-22, 1994.
- [36] Gáspár Cs., Józsa J., Simbierowicz, P.: Új szemléletmód a numerikus hidraulikában. I. Egyenlőtlen hálók: generálásuk, első alkalmazások. *Hidrológiai Közlöny*, 74. évf., 3.sz., 1994.
- [37] Gáspár Cs., Józsa J., Simbierowicz, P.: Új szemléletmód a numerikus hidraulikában. II. Differenciasémák és multigrid módszerek egyenlőtlen hálókon. *Hidrológiai Közlöny*, 74. évf., 4.sz., 1994.
- [38] Gáspár Cs., Józsa J., Simbierowicz, P.: Új szemléletmód a numerikus hidraulikában. III. Sekély tavakban fellépő szélkeltette áramlások modellezése egyenlőtlen hálók használatával. *Hidrológiai Közlöny*, 75. évf., 1.sz., 1995.
- [39] Gáspár Cs., Józsa J., Simbierowicz, P.: Új szemléletmód a numerikus hidraulikában. IV. Áramlási és transzportfolyamatok Lagrange-féle modellezése egyenlőtlen hálók használatával. *Hidrológiai Közlöny*, 75. évf., 2.sz., 1995.
- [40] Gáspár C: An Iterative and Multigrid Solution of Boundary Integral Equations. *Computers & Mathematics with Applications*, Vol. 29, No. 7, pp. 89-101, 1995.

- [41] Gáspár Cs.: Új numerikus módszercsalád kidolgozása hidraulikai és transzport folyamatok számítására I. *OTKA-zárójelentés*, témaszám: T4105, 1995.
- [42] Gáspár C: Multigrid and Multipole Techniques in the Boundary Integral Equation Method, *Notes on Numerical Fluid Mechanics*, Vol. 54., Vieweg-Verlag, 1996.
- [43] Gáspár C: Flow Modelling Using Quadtrees and Multigrid Techniques, Proceedings of the Third International Conference on Computational Structures Technology, Budapest, Hungary, 21-23 August, 1996. Civil-Comp Press, 1996.
- [44] Gáspár C: Fast Solution of Boundary Integral Equations by Using Multigrid Methods and Multipole Evaluation Techniques, *Proceedings of the Nineteenth International Conference on the Boundary Element Method*, Rome, Italy, 9-12 September, 1997.
- [45] Gáspár C: A Multipole Expansion Technique in Solving Boundary Integral Equations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 157, pp. 289-297, 1998.
- [46] Gáspár Cs.: Új numerikus módszercsalád kidolgozása hidraulikai és transzport folyamatok számítására II. OTKA-zárójelentés, témaszám: T17373, 1998.
- [47] Gáspár C: Dual Reciprocity Method with Multigrid Technique. *Proceedings of the Fourth International Conference on Numerical Methods and Application held in Sofia, Bulgaria, August 19-23, 1998.* World Scientific, 1999.
- [48] Gáspár C: Multigrid technique for biharmonic interpolation with application to dual and multiple reciprocity method. *Numerical Algorithms* Vol. 21, pp. 165-183, 1999.
- [49] Gáspár C.: Multi-level biharmonic and bi-Helmholz interpolation with application to the boundary element method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, Vol. 24/7-8, pp. 559-573, 2000.
- [50] Gáspár C: A meshless boundary element technique based on multi-level iterated Helmholtz-type interpolation. *Proceedings of the 24th International Conference on the Boundary Element Method, held in Sintra, Portugal, 17-19 June, 2002 (ed. by C.A.Brebbia, A.Tadeu, V.Popov)*, pp. 105-114, WITPress, Southampton, Boston, 2002.
- [51] Gáspár C: Fast multi-level meshless methods based on the implicit use of radial basis functions. *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, Vol. 26 (ed. by M.Griebel, M.A.Schweitzer), pp. 143-160, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2002.
- [52] Gáspár C: A Multi-level Solution of Scalar and Vectorial Interpolation Problems Based on Iterated Elliptic Operators. *PAMM (Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics)*, Vol. 3, Issue 1, pp. 535-536, 2003.
- [53] Gáspár C: Boundary Interpolation Instead of Boundary Integrals: A Meshless Approach. Proceedings of the 4th International Conference on Boundary Element Techniques, held in Granada, Spain, 15-17 July, 2003 (ed. by M.H.Aliabadi), pp. 327-332.
- [54] Gáspár C: Fast Meshless Methods Using RBF-like Domain and Boundary Interpolation. International Workshop on Meshfree Methods (MeshFree 2003), held in Lisbon, Portugal, 21-23 July, 2003, pp. 35-40, 2003.

- [55] Gáspár C: A meshless polyharmonic-type boundary interpolation method for solving boundary integral equations. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, Vol. 28/10, pp. 1207-1216, 2004.
- [56] Gáspár C: Boundary interpolation vs boundary elements: theory and some applications. *Proceedings of the 26th World Conference on Boundary Elements and other Mesh Reduction Methods, held in Bologna, Italy, 19-21 April, 2004 (ed. by C.A.Brebbia)*, pp. 143-152, 2004.
- [57] Gáspár C: Meshless direct multi-elliptic boundary interpolation applied to mixed problems. Advances in Boundary Element Techniques V (Proceedings of the 5th International Conference on Boundary Element Techniques, held in Lisbon, Portugal, 21-23 July, 2004, ed. by V.M.A.Leitao and M.H.Aliabadi), pp. 243-248, 2004.
- [58] Gáspár C: A Multi-level Interpolation Method for Solving Elliptic Partial Differential Equations with Variable Coefficients. In: Advances Advances in Computational & Experimental Engineering & Sciences (Proceedings of the 2004 International Conference on Computational & Experimental Engineering and Sciences (ICCES'04), held in Madeira, Portugal, 26-29 July, 2004, (ed. by S.N. Atluri; A.J.B. Tadeu) pp. 1296-1301, 2004.
- [59] Gáspár C.: Global and Local Multi-level Meshless Schemes Based on Multi-Elliptic Interpolation. In: Proceedings of ECCOMAS Thematic Conference on Meshless Methods, held in Lisbon, Portugal, July 11-14, 2005. (ed. by V.M.A.Leitao, C.J.S.Alves, C.A.Duarte), pp. B12.1 - B12.6, 2005.
- [60] Gáspár C.: Meshless Boundary Interpolation: Local and Global Multi-Level Techniques. In: Proceedings of the 7th Intentional Conference on Boundary Element Techniques held in Paris, France, 4-6 September, 2006. (ed. by M.A.Aliabadi), 2006.
- [61] Golberg, M.A.: The method of fundamental solutions for Poisson's equation. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, Vol 16, pp. 205-213, 1995.
- [62] Golberg, M.A., Chen, C.S. The theory of radial basis functions applied to the BEM for inhomogeneous partial differential equations, *Boundary Element Communications*, Vol. 5, No. 2, 57-61, 1994.
- [63] Golberg, M.A., Chen, C.S. A bibliography on radial basis function approximation, *Boundary Element Communications*, Vol. 7, No. 4, 155-163, 1996.
- [64] Golberg, M.A., Chen, C.S., Bowman, H.: Some recent results and proposals for the use of radial basis functions in the BEM. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, Vol. 23, pp. 285-296, 1999.
- [65] Greaves, D.M.: A quadtree adaptive method for simulating fluid flows with moving interfaces. *Journal of Computational Physics* 194(1), pp. 35-56, February 2004.
- [66] Greaves, D.M., Borthwick, A.G.L.: On the Use of Adaptive Hierarchical Meshes for Numerical Simulation of Separated Flows. *Int. J. Num. F.* 26(3), pp. 303-322, 1998.
- [67] Greengard, L., Gropp W.D.: A Parallel Version of the Fast Multipole Method. *Computers Math. Applic.*, Vol. 20, No. 4, 1990.

- [68] Hackbusch, W.: Multigrid Method of the Second Kind. In: Multigrid methods for integral and differential equation (ed. D.J.Paddon, H.Holstein). Clarendon Press, Oxford, 1985.
- [69] Hackbusch, W. Multi-Grid Methods and Applications, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo, 1985.
- [70] Hardy, R.L.: Theory and Applications of the Multiquadric-Biharmonic Method, 20 Years of Discovery 1968-1988, *Computers Math. Applic.*, Vol 19, No. 8-9, pp. 163-208, 1990.
- [71] Jackins, C.L., Tanomoto, S.L.: Oct-trees and Their Use in Representing Three-Dimensional Objects. *Computer Graphics and Image Processing*, Vol. 14, 1980.
- [72] Józsa J, Gáspár C: Fast, Adaptive Approximation on Wind-induced Horizontal Flow Patterns in Shallow Lakes Using Quadtree-based Multigrid Method, *Proceedings of the IX*. *International Conference on Computational Methods in Water Resources*, Denver, Colorado, USA, 9-12 June, 1992. Computational Mechanics Publications/Elsevier, 1992.
- [73] Kansa, E.J. Multiquadrics a Scattered Data Approximation Scheme with Applications to Computational Fluid Dynamics - I. Surface Approximations and Partial Derivative Estimates, *Computers Math. Applic.* Vol. 19, No. 8/9, pp. 127-145, 1990.
- [74] Kansa, E.J.: Multiquadrics a Scattered Data Approximation Scheme with Applications to Computational Fluid Dynamics - II. Solutions to Parabolic, Hyperbolic and Elliptic Partial Differential Equations, *Computers Math. Applic*. Vol. 19. No. 8/9, pp. 147-161, 1990.
- [75] Lions, J.L., Magenes, E.: Non-homogeneous Boundary Problems and Applications, Vol. 1. Springer-Verlag, Berlin, 1972.
- [76] Madych, W.R., Nelson, S.A.: Multivariate interpolation and conditionally positive definite functions II. *Math. Comput.* Vol. 54, pp. 211-230, 1990.
- [77] Makino, J.: Vectorization of a Treecode. *Journal of Computational Physics*, Vol. 87, 1990.
- [78] Micchelli, C.A.: Interpolation of scattered data: distance matrices and conditionally positive definite functions. *Const. Approx.* Vol. 2, pp. 11-22, 1986.
- [79] Morinishi, K.: Gridless Type Solver Generalized Finite Difference Method. Computational Fluid Dynamics for the 21st Century, Notes on Numerical Fluid Mechanics, Vol. 78, pp. 43-58, Springer, 2001.
- [80] Nowak, A.J., Brebbia, C.A. The multiple-reciprocity method. A new approach for transforming BEM domain integrals to the boundary, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 1989, Vol. 6, No. 3, 164-167.
- [81] Park, K.-Y., Borthwick, A.G.L.: Quadtree grid numerical model of nearshore wavecurrent interaction. *Coastal Engineering* 42, pp.219-239, 2001.

- [82] Partridge, P.W., Brebbia, C.A. Computer Implementation of the BEM Dual Reciprocity Method for the Solution of general Field Equations, *Communications in Applied Numerical Methods*, Vol. 6, 83-92, 1990.
- [83] Rokhlin, V. Rapid Solution of Integral Equations of Classical Potential Theory, *Journal* of Computational Physics, Vol. 14, 187-207, 1985.
- [84] Samet, H.: The Quadtree and Related Hierarchical Data Structures. *Computing Surveys*, Vol. 16., No.2, 1984.
- [85] Schippers, H.: Multiple Grid Methods for Equations of the Second Kind with Applications to Fluid Mechanics. *Thesis. Matematisch Centrum, Amsterdam*, 1982.
- [86] Tang, W. Transforming Domain into Boundary Integrals in BEM, A Generalized Approach, *Lecture Notes in Engineering* (ed. by C.A. Brebbia, S.A. Orszag), Vol. 35, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, London, Paris, Tokyo, 1988.
- [87] Temam, R.: Navier-Stokes Equations. North-Holland Publishing Co., New York, 1977.
- [88] Wendland, H.: Piecewise polynomial, positive definite and compactly supported radial functions of minimal degree. *Adv. Comput. Math.* Vol. 4, pp. 389-396, 1995.
- [89] Wille, S.Ø.: A Structured Tri-Tree Search Method for Generation of Optimal Unstructured Finite Element Grids in Two and Three Dimensions. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 14, 1992.
- [90] Yiu, K.F.C., Graeves, D.M., Cruz, S., Saalehi, A., Borthwick, A.G.L.: Quadtree Grid Generation - Information Handling, Boundary Fitting and CFD Applications. *Computers & Fluids*, Vol. 25, No. 8, pp. 759-769, 1996.