

Szakmai beszámoló a „Számítógépigényes kutatás az alkalmazott matematikában” című, K 63066 számú OTKA pályázat zárójelentéséhez

2009. augusztus

Általános megjegyzések

A pályázat fő célkitűzése az volt, hogy radikálisan új lehetőségeket építsen ki a BME Matematika Intézetében folyó változatos számítógépigényes kutatások számára. Ezt nemcsak eszköz szinten akartuk megvalósítani, hanem a kultúrát is fejleszteni szándékoztunk. Ezért külön hangsúlyt fektettünk arra, hogy ezekbe a számítógépigényes kutatásokba minél szélesebb körben vonjunk be az Intézet hallgatóit és doktoranduszait. A kutatási támogatást is erre a kettős célra fordítottuk: kiemelten az intézet számítógépes infrastruktúrájának fejlesztésére (új kiszolgáló, vékonykliensek stb.) másodsorban pedig a pályázatban szereplő vezető oktatók által irányított hallgatói kutatások közvetlen támogatására, ösztöndíj-kiegészítés, valamint konferenciákon való részvétel támogatása formájában. Következésképpen a zárójelentés szakmai részében főként az említett hallgatói kutatási eredmények ismertetésére koncentrálnak. Többek között ennek az intenzív hallgatói aktivitásnak is köszönhető, hogy a pályázat futamideje alatt a számítógépigényes kutatás területén a megelőzőnél jóval magasabb szintre léphettünk mind infrastruktúrában mind kultúrában, aminek a hatása elképzeléseink szerint hosszú távon is megmarad.

Mielőtt a konkrét kutatásokra térnénk, fontos megemlíteni, hogy a számítógépigényes kutatások elvégzéséhez az Intézetben többféle programcsomagot is használunk, ezek közül az egyik legelterjedtebb a *Mathematica*, melynek fejlesztésébe kutatásaikon keresztül az Intézet munkatársai és hallgatói is bekapcsolódtak. A folyamatosan működő kéthetenkénti *Mathematica*-szeminárium visszatérő témája volt a számítógépigényes feladatok kezelése: az egyik legfontosabb előadás erről a témáról, Móra Péteré, a HPC (high performance computing) fogalmát és alkalmazási lehetőségeit ismertette. Hallgatóinkkal együttműködve (Szirmai Jenő kolléga hathatós segítségével) bekapcsolódtunk egy új publikálási formába: demonstrációkat készítettünk. Ezek lelke a *Mathematica* Manipulate parancsa, amely paramétertől függő objektumokat tud megmutatni, ahol az objektumok lehetnek ábrák, függvények, képletek, valószínűségi változók, szóval tetszőleges folytonos vagy diszkrét objektumok. A demonstrációkat lektorálás után teszik fel a <http://demonstrations.wolfram.com> honlapra. Mivel már mintegy ötezer van belőlük, egyáltalán nem könnyű olyat készíteni, amelyik a meglévőktől különböző és publikálásra méltó. A demonstrációkat nagy számuk és rövid, tömör formájuk miatt nem szerepeltetjük a közleménylistán, jelentőségük miatt azonban megadjuk listájukat jelen szakmai beszámoló Függelékében.

Az alábbiakban a közleményekre azzal a sorszámmal utalunk, amivel az OTKA adatbázisában a zárójelentés közleménylistáján szerepelnek.

Hiperbolikus dinamikai rendszerek, statisztikus fizika

Ezeken az egymáshoz is kapcsolódó területeken a felmerülő problémák összetettsége miatt különösen fontos szerepe volt a számítógép használatának.

Nándori Péter kutatásainak tárgya a belső állapotú bolyongások által meglátogatott pontok számának vizsgálata (19, 31, 52 közlemények). Sikert ért erre az esetre általánosítania Dvoretzky-Erdős néhány alapvető eredményét; a helyzet megértésében sokat segítettek az intézeti szerver erőforrásait használó szimulációk.

Móra Péternek munkájával (18, 50 közlemények) az egyik legismertebb fraktál, a Sierpiński háromszög Hausdorff-mértéke eddig ismert legjobb alsó becslését sikerült megadnia. Ezt egy C++ nyelven írt program 1 hónapnyi futása eredményezte a Matematika Intézet központi szerverében (omnibus.math.bme.hu).

Hiperbolikus biliárdok ergodikus tulajdonságait is vizsgálták hallgatói kutatások. Halász Miklós programja segítségével egy érdekes kétparaméteres biliárdcsaládban követhetjük nyomon a KAM-szigetek tulajdonságainak paraméter-függését (5 közlemény). Rappné Pogány Orsolya szimulációi pedig egy igen nehéz probléma, magasdimenziós hengerbiliárdok korreláció-lecsengésének megértése felé tették meg az első lépéseket. (9 közlemény)

Bálint Péter, Tóth Bálint és Tóth Péter munkája a Rayleigh-gáz kis tömeg határesetében vizsgálta részben számítógépes szimulációkat használva a jelölt részecske aszimptotikus szórását. (10 közlemény)

Csikja Rudolf kutatásainak tárgya egy kétparaméteres instabilis lineáris oszcillátor, amely a lehető legegyszerűbb hiszterézises visszacsatolással rendelkezik. Ezzel a visszacsatolással a rendszer stabilizálható bizonyos paramétertartományokban. Témavezetőivel együtt az eddigi megközelítésekhez képest egy egészen más típusú Poincaré-féle metszősíkot alkalmazott. Az így kapott egydimenziós leképezés egy bizonyos tartományon nem egyértelmű, ezt a problémát megoldva azonban egy a korábbiakhoz képest jóval egyszerűbb: véges szakadással rendelkező, szakaszonként lineáris leképezést kapott. Csikja Rudolf fő feladata ezen rendszer szimulációja, illetve a felmerülő implicit összefüggések vizsgálata volt számítógép, pontosabban a *Mathematica* program segítségével. Az elkészített interaktív számítógépes programok sokat segítettek a vizsgálatok megfelelő irányának megválasztásánál: ilyen például a szeparatrixok viselkedése a paraméterek változásának függvényében, a bifurkációs pontok becslése, a kaotikus attraktor és repellor meglétének szemléltetése. (11, 26, 44 közlemények)

Kvantum információ-elmélet

A kvantum információ-elmélet egyik fontos problémája, két kvantumbit állapotbecslése egy algebrai feladathoz, a 4-szer 4-es mátrixok algebrájában komplementáris részalgebrák kereséséhez vezet. Ezek a részalgebrák speciális unitér mátrixokkal is megadhatók. A problémát Szántó András matematikus hallgató kezdte el vizsgálni témalabor keretében. Az unitér mátrixokat véletlenül generálta, a szimuláció a *Mathematica* programcsomag segítségével folyt. Szöllösi Ferenc matematikus hallgató több mint tíz órás számítógépes kereséssel olyan unitér mátrixot is talált, ami ráadásul Hadamard-mátrix. Az eredményeket a közleménylistán 7. folyóiratcikkben sikerült közölni.

Szántó András némileg továbbfejlesztette a fenti cikk tartalmát TDK dolgozatában (1. a közleménylistán), és hasonló témáról írta első TDK dolgozatát Ruppert László is (8. a közleménylistán), aki szimulációra a MatLab programcsomagot használta.

Ruppert László második TDK dolgozatának (15. közlemény) témája kvantumrendszer állapotának becslése mérések alapján. Egy lehetőség az, hogy a második n mérést az első n mérés eredményétől függően tervezzük meg. Az n tart a végtelenhez eset jóval egyszerűbb, mint a véges n esete. Ruppert László vizsgálatainak fő eszköze a számítógépes optimalizáció. Ide tartozik még a 24. közlemény is.

Számítógépes algebra és határterületei

Ennek a témakörnek több fontos területén is sikerült hallgatókat bevonni a kutatásokba.

A Gröbner-bázisok elméletéhez kapcsolódnak Felszeghy Bálint és Hegedűs Gábor munkái. Az n elemű alaphalmaz részalmazzaiból álló halmazcsalád teljes l -széles, ha valamilyen k -ra pontosan a $k, \dots, k+l-1$ elemű részalmazokból áll. A 13. számú közleményben sikerült leírni az ilyen rendszerek karakterisztikus

vektoraihoz tartozó Gröbner-bázist és bizonyos kapcsolódó struktúrákat, valamint megadni az eredmény egy kombinatorikai alkalmazását. Ezeknek az eredményeknek egy részét a 40. közlemény általánosítja arra az esetre, amikor a részhalmazok elemszámára egyenlőség helyett modulo q kongruenciafeltételeink vannak (q egy p prím hatványa), és az alaptest p -karakterisztikájú test.

A 41. közlemény a szerzők által korábban kidolgozott Lex Játék módszert ismerteti, majd ennek több új alkalmazását mutatja be. Ezek: Garsia általános polinom-előállítási tétele szimmetrikus polinomokkal és Hall-monomokkal; Wilson uniform halmazcsaládok illeszkedési mátrixára vonatkozó rangformulája; metszési tulajdonságokkal rendelkező halmazcsaládok méretének becslése; Harima dualitási tételének egy kombinatorikus változata.

Szántó Ágnes olyan többváltozós polinom egyenletrendszerek vizsgálatában vett részt, melyek perturbációi többszörös gyököket tartalmazó (nulladimenziós) rendszereknek. A 6. közlemény azt kutatja, hogy az eredeti rendszer milyen jellemzői kaphatók meg globális algoritmikus módszerekkel. Sikerült megmutatni, hogy a rendszer ún. multiplikációs mátrixából standard numerikus lineáris algebrai módszerekkel fontos információk kaphatók.

A 27. dolgozat folytatja a nulladimenziós polinomideálok globális tulajdonságainak vizsgálatát. A kutatás hosszú távú célja olyan jellemzők felfedezése, amelyek egyrészt hatékonyan számíthatók, másfelől a kérdéses (az ideált leíró) egyenletrendszer fontos tulajdonságairól adnak képet. Az ideál radikáljának kiszámításában jelentős szerepet játszik az ún. nyom mátrix. A dolgozat ennek kiszámítására ad új eljárást abban az esetben, amikor az input ideál szerinti faktoralgebra Gornstein-tulajdonságú. A vizsgálat módszere Sylvester- és Macaulay-típusú rezultánsokon alapul.

Pintér Dömötör véges ponthalmazok Hibert függvényeihez kapcsolódó kutatásokban vett részt (25. közlemény). T. Harima tétele szerint erős kapcsolat van a test feletti projektív térbeli X, Y diszjunkt, véges ponthalmazok Hilbert-függvénye között, ha a Z uniójuk teljes metszet. Ennek az eredménynek egy moduláris és kombinatorikus változatát sikerült bebizonyítani. Itt X, Y nulla-egy vektorokból állnak, Z a teljes Boole-kocka, és test helyett általánosabban D -gyűrű felett érvényesek a formulák.

Deák Attilának egy Nagy Attila által korábban felvetett, permutálható félcsoportokra vonatkozó problémát sikerült megoldania. További kutatásaiban olyan véges félcsoportokkal foglalkozik, amelyekben a kongruenciák egymással felcserélhetőek. (3. és 4. közlemények)

Farkas Barnabás Soukup Lajossal közös kutatásai bizonyos valós számhalmazokból álló rendszerek, úgynevezett analitikus ideálok kombinatorikai-logikai tulajdonságaival foglalkoznak, melyek a matematikai analízis és a halmazelmélet határterületein játszanak fontos szerepet. (12. közlemény)

Mészáros Tamás kutatási témája S -extremális halmazrendszerek számítógépes vizsgálata. Egy véges halmazon értelmezett F halmazrendszer S -extremális, ha az alaphalmaznak pontosan $|F|$ részhalmazát zúzza szét (shatters). Jól ismert tény, hogy legalább $|F|$ halmazt szét kell zúznia. Az S -extremális halmazrendszerek leírása strukturális és algoritmikus szempontból is érdekes kérdés. Mészáros Tamás számítógéppel keres olyan S -extremális példákat, amelyek nem kaphatók meg az ismert egyszerű konstrukciók segítségével. (49. közlemény)

Reakció-diffúzió egyenletek

Kovács Benedek kémiai modellekben felmerülő dinamikai rendszerek paramétereinek becsléséhez kapcsolódó kérdésekkel foglalkozott (2, 14, 29, 42, 43, 47, 48 közlemények). Folytonos idejű és állapotterű determinisztikus, illetve folytonos idejű, diszkrét állapotterű sztochasztikus dinamikai rendszereket vizsgált. Egyfelől reakciókinetikai folyamatok differenciálegyenletekkel leírt modelljéhez végzett paraméterbecslést, ehhez egy neuronhálózatokat használó, bizonyos esetekben nagyon jól alkalmazható módszert dolgozott ki és vizsgált meg. Másfelől mobilitáskezelő algoritmusokat vizsgált, melyeknél születési halálozási folyamatokkal modellezte a cellába való be- és kilépést. A javasolt mechanizmusokban lehetőségek rejlenek telekommunikációs hálózatok túlterhelésvédelmének megvalósítására is. Az előkerülő diszkrét állapotterű, folytonos idejű sztochasztikus modellek egyik sarkalatos problémája pontfolyamatok intenzitásának becslése (42. közlemény).

Ide kapcsolódnak Kovács Benedek Nagy Ilonával közös, részletes egyensúllyal kapcsolatos vizsgálatai is (Tóth János témavezetésével), ugyanis ioncsatornák esetén a részletes egyensúly csökkenti a becslendő paraméterek számát. Ioncsatornák modellezésével kapcsolatban D. Colquhoun és munkatársai három általános eljárást adtak mikroszkopikusan reverzibilis rendszerekben a szabad paraméterek számának meghatározására. A sebességi együtthatókra így kapott összefüggések segítségével a mérések száma csökkenthető. Az eljárás során azonban csak a széles körben elterjedt szükséges feltételeket (ún. körfeltételek) alkalmazták, és figyelmen kívül hagyták az M. Feinberg által megfogalmazott elégséges (ún. feszítőfa-) feltételt. Az 51. folyóiratcikkben sikerült megmutatni, hogy Colquhounék az ioncsatornák speciális szerkezete miatt kapnak mégis helyes eredményt.

Ladics Tamás témája reakció-diffúzió egyenletek közelítő megoldása szeleteléssel (16, 17 közlemények). Az operátorok szeletelésének módszere különösen alkalmas a feladatok párhuzamosítására: segítségével a nagy egyenletrendszerek kisebb, könnyebben kezelhető csatolt problémákra válthatók. A sok alkalmazási területből a levegőszennyeződés terjedésének modellezését, illetve bonyolult reakciókinetikai problémákat érdemes kiemelni. A gyakorlatban szeletelés alkalmazása mellett mindig valamilyen numerikus módszer szolgáltatja az adott probléma megoldását. A használt modell – a Fisher-egyenlet – egyszerűsége ellenére a feladat nagy számítási kapacitást igényel. Ladics Tamás szisztematikus hibabecslést végzett első- és másodrendben konvergens szeletelési sémákra, különböző rendű numerikus módszerek mellett, és megbecsülte a számított közelítő megoldás konvergenciájának rendjét.

Sipos Szabó Eszter oszcilláló biokémiai modelleket vizsgált, ezen belül is azt kutatta, a sejtosztódást szabályozó hálózat kémiai reakciókinetikai modelljei közül melyik a legrobosztusabb a paraméterváltozásokra. Ez a jellemző különösen fontos a biológiai életképesség szempontjából, mivel csak robusztus rendszerek tudnak alkalmazkodni a különböző környezeti és genetikai mutációkhoz. Ennek érdekében a modelleket többféle érzékenységvizsgálati módszerrel hasonlította össze: Lokális érzékenységvizsgálattal. Megnézte, hogy az egyes modellparamétereket mekkora intervallumon lehet változtatni, hogy az oszcilláció fennmaradjon a rendszerben. Globális érzékenységvizsgálattal. Különböző véletlenparaméterhalmazokat generált, majd ezekkel szimulációkat futtatott a modellekre, és ez alapján vont le következtetéseket a robusztusságra vonatkozóan. Szimbolikus érzékenységvizsgálattal. Bevezetett új függvények segítségével, nagy számítási igényű feladatokat megoldva meghatározta, hogy melyik modell a legérzékenyebb az egyes paraméterváltozásokra. A számítások elvégzéséhez a *Mathematica* programot használta. (32, 33, 34, 53, 54 közlemények).

Reakció-diffúzió egyenletekhez kapcsolódóan érdemes még megemlíteni Szabó Anett TDK munkáját (35. közlemény), Kiss Krisztina és Tóth János közös kutatásait (28, 46 közlemények), valamint Nagy Attila László Wolfram demonstrációit (Függelék).

További kutatások

Tóth Ágnesnek sikerült konstruálni algoritmusokat, amelyek gráfok élszínezését gyorsabban és esetenként kevesebb színnel végzik el, mint a *Mathematica* beépített függvényei. A kapcsolódó előadás (20. közlemény) a Wolfram cég érdeklődését is felkeltette; a cégtől Tóth Ágnes az egészértékű programozási megközelítéshez és a párhuzamosításhoz hasznos tanácsokat, valamint nyári gyakorlatra ajánlatot is kapott. Folyóiratcikk (55. közlemény) előkészületben.

Tóth Anna a sűrűségmátrix numerikus renormálási csoport (DM-NRG) módszerrel kiszámolta az elektron-lyuk szimmetrikus kétcsatornás Kondo (2CK) modell legnagyobb súlyú tereinek Green-függvényeit (21, 22, 23, 37, 38 közlemények). Annak ellenére, hogy a 2CK modell paradigmává vált nem-Fermi folyadék jelenségek leírására, dinamikus tulajdonságairól mindeddig keveset publikáltak. Mindmáig a numerikus renormálási csoport az egyetlen olyan módszer, amellyel a teljes frekvenciatartományban megbízhatóan lehet számolni ezeket a tulajdonságokat. Ugyanakkor a 2CK fixpont közelében a különböző Green-függvények analitikus viselkedése konform térelmélet segítségével is megállapítható. A konform térelméleti jósálatok és Tóth Anna DM-NRG számításainak eredményei minden esetben megerősítették egymást.

Tóth Anna további kutatásainak (39. közlemény) tárgya a Lippmann–Schwinger egyenletben megjelenő hullámfüggvény renormálási faktor (Z -faktor) szerepének tisztázása kvantumszennyező modellek esetén. A sűrűségmátrix numerikus renormálási csoport (DM-NRG) módszerrel kiszámolta a Z -faktor értékét a reducibilis, vezetési elektronok sajátenergiájának deriváltjából különböző kvantumszennyező modellekre, és megvizsgálta, hogy az mennyiben tér el az irodalomban elterjedt $Z = 1$ értéktől. Az eltérés okait megmagyarázta a szórási Bethe Ansatz formalizmus segítségével.

Függelék: Wolfram demonstrációk

- "Palindrome Primes" from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/PalindromePrimes/>
Contributed by: Peter Bohus and Márton Károlyi
- "Gilbreath's Conjecture" from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/GilbreathsConjecture/>
Contributed by: Peter Bohus and Márton Károlyi
- "Cooling of a Rod with Initial Temperature Distribution" from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/CoolingOfARodWithInitialTemperatureDistribution/>
Contributed by: Peter Bohus and Márton Károlyi
- "Deltic Engine" from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/DelticEngine/>
Contributed by: Norbert Bus
- "Iso-Optic Curve of a Regular Polygon" from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/IsoOpticCurveOfARegularPolygon/>
Contributed by: Géza Csima
Additional contributions by: János Tóth
Suggested by: Jenő Szirmai
- "Iso-Optic Curve of the Ellipse" from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/IsoOpticCurveOfTheEllipse/>
Contributed by: Géza Csima, Jenő Szirmai, and János Tóth
- "Iso-Optic Plane of the Regular Tetrahedron" from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/IsoOpticPlaneOfTheRegularTetrahedron/>
Contributed by: Géza Csima
Suggested by: Jenő Szirmai
Additional contributions by: János Tóth
- "Damped Swing Pendulum" from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/DampedSwingPendulum/>
Contributed by: Balázs Kiss (Budapest University of Technology and Economics)
Additional contributions by: János Tóth, Attila Nagy

- "Horosphere Packings of the (3, 3, 6) Coxeter Honeycomb in Three-Dimensional Hyperbolic Space" from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/HorospherePackingsOfThe336CoxeterHoneycombInThreeDimensional/>
 Contributed by: Robert Thijs Kozma
 Suggested by: Jenő Szirmai and János Tóth
 After work by: Böröczky and Florian, Jenő Szirmai
- "Volpert Graph" from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/VolpertGraph/>
 Contributed by: Attila Nagy
- "Volpert Graph of Chemical Reactions" from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/VolpertGraphOfChemicalReactions/>
 Contributed by: Attila Nagy
 Suggested by: János Tóth
- "Feinberg-Horn-Jackson Graph" from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/FeinbergHornJacksonGraph/>
 Contributed by: Attila Nagy
- "Descriptive Reaction Kinetics" from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/DescriptiveReactionKinetics/>
 Contributed by: Attila Nagy
- "Robinson Tiling" from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/RobinsonTiling/>
 Contributed by: Peter Ofella
 Additional contributions by: Carl Woll
- "Torus in Nil-Space" from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/TorusInNilSpace/>
 Contributed by: Benedek Schultz and János Pallagi
 Suggested by: Jenő Szirmai
- "Geodesic Balls in the Nil-Space" from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/GeodesicBallsInTheNilSpace/>
 Contributed by: Benedek Schultz, János Pallagi
 Suggested by: Jenő Szirmai
- "Hopf Bifurcation in the Brusselator" from The Wolfram Demonstrations Project
<http://demonstrations.wolfram.com/HopfBifurcationInTheBrusselator/>
 Contributed by: Judit Várdai and János Tóth
 After work by: I. Prigogine and R. Lefever