Beszámoló

a „Nemlineáris időfüggő feladatok numerikus megoldása és kvalitatív vizsgálata” c. K-67819 számú pályázatról

A parciális differenciálegyenletek a természettudomány számos jelenségének szolgálnak matematikai modelljéül (pl. elektromágnesesség, rugalmasságtan, áramlástan, reakció-diffúziós folyamatok). E jelenségek matematikai vizsgálata és megértése egyenleteik numerikus megoldásán és kvalitatív tulajdonságaik megismerésén keresztül lehetséges. Pályázatunk során alapvetően ezen munka két területére koncentráltunk, nevezetesen a diszkrét maximum- és minimum-elvek, ill. iterációs módszerek a prekondicionáló operátorok elve alapján. Emellett, mint az minden kutatás során természetes, vizsgálatainkat kiterjesztettük olyan további problémákra is, amelyek „menet közben” fogalmazódtak meg.

A pályázatot a korábbi, kiválónak értékelt „A prekondicionálás matematikai módszerei nemlineáris fizikai modellekben” c. OTKA projekt folytatásaként nyerte el a csoport, amelynek indulásakor három tagja volt (Faragó István témavezető, Horváth Róbert és Karátson János). A csoporthoz az utolsó évben csatlakozott Csörgő Gábor PhD hallgató.

Kutatási eredményeink

Parciális differenciálegyenletek és diszkretizációjuk diszkrét maximum-elve

A maximum-minimum elvvel kapcsolatban a vegyes peremfeltételű reakciós tagot is tartalmazó parabolikus egyenletekre első ízben megfogalmaztuk a maximum-minimum elvet, megadtuk az elv diszkrét megfelelőjét és elégséges feltételt igazoltunk az elv érvényességére. Abban az esetben, amikor nincs jelen reakciós tag és nincs Robin-féle peremfeltétel, akkor a rácsra vonatkozóan visszakaptuk a lapszögekre vonatkozó ismert nemtompasági feltételt. Általános esetben viszont szigorúan hegyes szögekre van szükség és új feltételként a rácsméretre is kaptunk egy felső korlátot. Numerikus kísérleteink jól mutatják a nyert feltételek élességét. A magasabb térdimenziójú lineáris parabolikus feladatra egyenletes tetrahedrális rácshálón megadtuk a diszkrét maximum-elv érvényességének feltételét a végeselem-módszer esetére. Elméleti eredményeinket a numerikus kísérletek is alátámasztották

További vizsgálatokat folytattunk a diszkrét maximum-minimum-elv elégséges feltételének megadására általánosabb alakú parabolikus feladatokra. Nevezetesen, megvizsgáltuk azt az esetet, amikor állandó együttható mellett forrás is szerepel. Itt konkrét alsó és felső korlátot adtunk egyenletes d-dimenziós szimplektikus rácshálón a diszkrét maximum-elvre. A probléma általánosításaként Mincsovics Miklós PhD hallgató bevonásával megvizsgáltuk a függvényegyütthatós esetet is.

Nemlineáris parciális differenciálegyenlet végeselemes diszkretizációja esetén igazoltuk a diszkrét maximum-elvet megfelelő feltételek esetén, folytatva együttműködésünket S. Korotovval (Helsinki-Bilbao). Ezzel korábbi eredményeinket újabb, általános feladatosztályokra terjesztettük ki. Elliptikus nemlineáris feladatok körében egyrészt kooperatív reakció-diffúziós rendszerekre, majd elsőrendű (konvekciós típusú) tagokat is tartalmazó rendszerekre (stacionárius transzport-feladatokra), valamint felületre koncentrált

(interface-típusú) nemlineáris rendszerekre igazoltuk a végeselemes megoldásra vonatkozó diszkrét maximum-elvet.
Emellett kidolgoztuk általános nemlineáris parabolikus rendszerekre is a diszkrét maximum-elvet végeselemes térbeli felbontás és időben theta-módszerrel való diszkretizáció esetén, ahol a feladat az előbbi elliptikusoknál említett valamennyi típusú tagot tartalmazza (diffúzió, reakció, konvekció, interface típusú reakció). Ezt először diagonálisan domináns (lényegében monoton típusú) csatolás esetére mutattuk meg, majd e feltétel elhagyása esetére is igazoltuk. Mindkét esetet többféle valós modell esetén alkalmaztuk (kémiai reakciók, populációdinamikai modellek stb.).

Üzemanyagcellák numerikus modellezése

Ennek során Szabó Tamás PhD hallgató részvételével kutatásokat folytattunk az üzemanyag cellák matematikai és numerikus modellezése illetve számítógépes szimulációja témakörben. Itt a matematikai modellezés egy nemlineáris parabolikus differenciálegyenletre vezetett. Ennek kvalitatív vizsgálata (folytonos és diszkrét szinten) illetve számítógépes tesztelése történt meg.

Az üzemanyagcellás modellezések és az modellekből nyerhető megfelelő következtetések nagy jelentőségűek az üzemanyagcellák tervezésénél. Fontos feladat a modellezésen belül, hogy a modell numerikus megoldásának kvalitatívan tükröznie kell az üzemanyagcella feszültség-áram viselkedését. Miután ezt elértük a megfelelő numerikus módszerek kiválasztásával és a térbeli és időbeli felosztás megfelelő megválasztásával, a numerikus modellt arra használtuk, hogy a modellben lévő, kísérlettel nem meghatározható, paramétereket becsüljük. Ezen paraméterek meghatározására dolgoztunk ki módszereket. Az alapötlet az volt, hogy meghatároztuk azon paramétereket, melyekkel numerikusan megoldva a feladatot a megoldás a lehető legközelebb lesz a mérési eredményekhez. Három optimalizálási módszert adaptáltunk a paraméterbecslés végrehajtására. A Levenberg-Marquardt, a trust region és a szimulált hűtés módszereit. Ezek közül a numerikus tesztek a Levenberg-Marquardt-módszert mutatták leghatékonyabbnak, így végül a paramétereket ezzel az eljárással határoztuk meg. A numerikus eljárások konvergenciájának biztosítása érdekében a végleges módszerünk a parabolikus és az elliptikus feladat megoldásának egy megfelelő kombinációja lett. Azaz bizonyos áramsűrűségek esetén a parabolikus, más esetben pedig az elliptikus feladatot oldottuk meg. A nyert paraméterekre illesztett konfidenciaintervallumok az elvárt tartományban jósolták a paramétereket. A paraméterek nyert értéke a kémiai megfontolásoknak megfelelő intervallumba esett és felhasználtuk őket a cellák tulajdonságainak további elemzésére.

Az operátorszeletelés elmélete és gyakorlati alkalmazásai

Ez a téma kutatásaink egyik fontos részét képezte.
Az operátorszeletelések elméleti kérdései közül megvizsgáltuk az inhomogén absztrakt Cauchy-feladatra történő alapvető szeletelések lokális hibáját. megállapítottuk, hogy a rend megőrződik, azaz nincs rendcsökkenés az ilyen típusú feladatok esetén. Eredményeinket sikeresen alkalmaztuk a Maxwell-egyenletek numerikus (véges differenciás és végeselemes) megoldására. A vizsgálatot később kiterjesztettük olyan időfüggő feladatokra, amikor a szemidiszkretizáció olyan közönséges differenciálegyenlet-rendszerhez vezet, melynek együtthatómátrixa nem konstans, hanem időfüggő. Megállapítottuk, hogy a szokásos szekvenciális, Strang-Marcsuk és a szimmetrikusan súlyozott szekvenciális szeletelések ezen feladatokra is ugyanolyan rendű (rendre első-, másod-, másodrendű) szeletelési hibát

eredményeznek, mint a konstans együtthatós, homogén feladatra. A vizsgálatokhoz a Magnus-sorfejtést alkalmaztuk, melynek segítségével a nem-autonóm feladat megoldása exponenciális függvény segítségével írható fel. Különösen hasznosnak bizonyult eredményünk a nemstacionárius anyagi közegben érvényes Maxwell-egyenletek megoldása esetén. Ekkor ugyanis a szemidiszkretizált feladat két olyan részfeladatra bontható, amikor a részfeladatok vagy egzaktul vagy pedig nagyon nagy pontossággal oldhatók meg. Ilyenkor lényegében csak a szeletelésből származik hiba. A veszteséget okozó tag kétféleképpen is kezelhető a részfeladatokban: vagy implicit módon diszkretizáljuk, vagy pedig a rotáció operátor diszkretizációs mátrixával összevonjuk, ami azt eredményezi, hogy a feladat egzaktul megoldható lesz. A numerikus kísérletek során azt tapasztaltuk, hogy míg a véges differenciás módszer esetén a második eljárás vezet kisebb hibához, addig a véges elemes esetben az első bizonyult jobbnak. A szeletelés és az alkalmazott numerikus módszer által együttesen meghatározott konvergencia rendjének növelésére alkalmaztuk a Richardson-féle extrapolációt, amely segítségével a konvergencia sebessége egy illetve esetenként két renddel is növelhető. Bevezettük az aktív illetve passzív Richardson-módszert és a különböző szeletelések és az alkalmazott numerikus módszerek alkalmas megválasztásával magas rendben pontos, stabil numerikus eljárásokat nyertünk. Számos módszer stabilitását megvizsgáltuk, beleértve a nulla-stabilitást illetve az A-stabilitást. Ezeket a kutatásainkat szintén nemzetközi együttműködés keretében folytattuk, elsősorban Z. Zlatev (Aarhus University) közreműködésével.

Operátorszeletelések számos gyakorlati alkalmazásával is foglalkoztunk, és ezen belül kiemelten a számítógépes realizálás kérdéseit vizsgáltuk.

A teljesség igénye nélkül megemlítünk néhány alkalmazást.

- *Üzemanyagcellák matematikai és numerikus modellezése*. A numerikus szimulációk eredményei hozzájárultak egy kísérleti jármű (HyGo) kifejlesztéséhez és annak a Széchenyi futamon aratott sikeréhez. A már korábban is kifejlesztett és az újonnan konstruált módszerekre számos alkalmazás történt.
- *Maxwell-egyenletek*. Különösen hasznosnak bizonyult eredményünk a nemstacionárius anyagi közegben érvényes Maxwell-egyenletek megoldása esetén. Ekkor ugyanis a szemidiszkretizált feladat két olyan részfeladatra bontható, amikor a részfeladatok vagy egzaktul vagy pedig nagyon nagy pontossággal oldhatók meg. Ilyenkor lényegében csak a szeletelésből származik hiba. A veszteséget okozó tag kétféleképpen is kezelhető a részfeladatokban: vagy implicit módon diszkretizáljuk, vagy pedig a rotáció operátor diszkretizációs mátrixával összevonjuk, ami azt eredményezi, hogy a feladat egzaktul megoldható lesz.
- *Sekélyvíz egyenletek vizsgálata*. A munka során a fizikai feltevésekből levezettük az egyenletrendszert, és a hagyományos véges differenciás megoldás helyett a célunk valamilyen érdekesebb/jobb/hatékonyabb megoldási módszer kidolgozása volt. Az első, és a kutatás fő irányát adó módszer alapja az operátorszeletelés ötlete. Az egyenletrendszert felszeleteltük három különböző alfeladatra, amelyek megoldásából előállítható az eredeti feladat pontos megoldásának egy közelítése. A mi szeletelési módunk érdekessége, hogy az alfeladatok szerencsés módon expliciten megoldhatók, a megoldás képlettel kifejezhető. A numerikus módszerünket le is programoztuk, és teszteltük. Ez a munka is nemzetközi együttműködés keretében folyt, nevezetesen Csomós Petrával és Alexander Ostermann-nal (Innsbrucki Egyetem) folytattuk a kutatásainkat.
- *Kőkopás numerikus modellezése*. Kőkopási modellekben szokás a felületkopást olyan kopások sorozatával modellezni, amikor egy rövid ideig konstans kopást

alkalmazunk, majd pedig görbülettől függő kopási sebességet. Ezután ezeket időben ismételjük. Ez az eljárás matematikailag megfelel az operátorszeletelési eljárásnak. Emiatt kezdtük el az operátorszeletelési eljárás alkalmazásának vizsgálatát a kőkopási modellek esetén. Itt az alapfeladat a kopást leíró nemlineáris egyenlet megfelelő felbontása egy konstans és egy görbülettől függő tagra. A numerikus kísérletek jó mutatták az eljárás hasznosságát, hiszen a konstans sebességes kopás részfeladata egzaktul megoldható, amivel a megoldási sebesség növelhető volt.

Elliptikus parciális differenciálegyenletek iteratív numerikus megoldása

Szuperlineárisan konvergens eljárásokat konstruáltunk és elemeztünk lineáris és nemlineáris elliptikus feladatok újabb osztályaira: nem szimmetrikus rendszerek, felületre koncentrált („interface”) nemlinearitás, vegyes peremfeltételek. Lineáris feladatok iterációs megoldására nézve rácsfüggetlen szuperlineáris konvergenciát kaptunk alkalmas prekondicionálás segítségével véges differencia-módszer során, valamint e témakörben általános leírást adtunk az ekvivalens operátorok elméletéről és alkalmazásairól végeselem- és véges differencia-módszer esetén. Továbbfejlesztettük az ekvivalens operátorok alapján prekondicionált KGM-t arra az esetre, ha az eredeti konvekciós tag nagy: korábbi eredményeinket módosítva a konvergencia elsőrendű (nem szimmetrikus) állandó együtthatós tagok hozzávételével javítható. Nemlineáris esetre vonatkozóan áttekintést adtunk az ekvivalens operátorokkal analóg prekondicionált iterációkról. A gradiens-végeselem-módszert alkalmaztuk egy képlékenységi feladat megoldására.
Elektronikus könyvet (e-book) szerkesztettünk elliptikus feladatok prekondicionált megoldási módszereiről. Szintén O. Axelssonnal és ostravai csoportjával a prekondicionált konjugált gradiens-módszer konvergenciájának további vizsgálatát végeztük el nyeregpont-típusú feladatokra, alkalmazással heterogén Darcy-áramlásokra. Szintén heterogén elliptikus feladatokra lokális Green-függvényekre épülő Petrov-Galjorkin-módszert konstruáltunk.
Jellemzést adtunk arra, hogy egy nemlineáris elliptikus peremértékfeladat végeselemes diszkretizációjára alkalmazott Newton-iteráció kvadratikus konvergenciája mikor rácsfüggetlen: pontosan akkor, ha a feladat szemilineáris.
Időfüggő feladatokra is alkalmaztuk a fenti iterációs módszereket idődiszkretizációval ötvözve. Egyrészt numerikus megoldási módszert konstruáltunk a nemlineáris Schrödinger-egyenletre a változó prekondicionálás elve alapján, a korábbi valós eset komplex térbe való kiterjesztése segítségével. Másrészt a szeparált prekondicionálásra alapuló, Euler- és végeselemes diszkretizációt használó numerikus módszerünk hatékonyságát egy légszennyezési tesztfeladaton demonstráltuk.

Elliptikus feladatokkal kapcsolatban éles a posteriori hibabecslési módszert dolgoztunk ki többféle nemlineáris peremértékfeladatra. Az elméleti eredményt egy frissebb cikkben PhD-hallgatónk bevonásával numerikusan is teszteltük.
E témakörökben részben O. Axelssonnal (Uppsala-Ostrava) való együttműködésben dolgoztunk, valamint PhD-hallgatóink bevonásával elméleti vizsgálatot és számítógépes realizációt is folytattunk. Ketten (Antal István és Kurics Tamás) időközben meg is szerezték a PhD fokozatot.

Néhány további, a fő témákhoz kapcsolódó kutatások

- Megvizsgáltuk a Richardson-extrapoláció alkalmazását a szeletelésre és a részfeladatokra alkalmazott numerikus módszer által adott konvergencia gyorsítására. Megmutattuk, hogy néhány alapvető kvalitatív tulajdonság milyen esetben öröklődik át az extrapolált kombinációra. Kiderült, hogy a zéró-stabilitás tetszőleges Runge-Kutta-módszer esetén megőrződik, az L-stabilitás is. Viszont az A-stabilitásra ez nem igaz. Az implicit Euler-módszer alkalmazása mellett a módszerek kvalitatív módon adekvátak maradnak.
- A parciális differenciálegyenletelek és diszkretizációjuk egyéb kvalitatív tulajdonságai közül kiemelten foglakoztunk az előjelstabilitással. Ez a tulajdonság az egydimenziós parabolikus feladatok egyik fontos tulajdonsága. Tapasztalataink alapján a belőle származó rácshálóválasztási feltétel szigorúbb minden általunk vizsgált más feltételénél. Korábban már adtunk szükséges és elégséges feltételt a lineáris hővezetési egyenlet numerikus megoldásának előjelstabilitására, mind a véges differenciás, mind pedig a lineáris végeselemes esetre. Jelenleg folyamatban van a vizsgálataink kiterjesztése a nemlineáris egyenletek irányába. Egy olyan egyenletre adtuk meg az előjelstabilitás feltételét, ahol a forrástag függött az ismeretlen függvénytől. A vizsgálatokat elvégeztük a véges differenciás és véges elemes megoldásokra is. A korábbi esetekhez hasonlóan az időlépésre kaptunk felső korlátokat.
- A kutatás mellékirányát egy új típusú Discontinuous Galerkin (DG) módszer kifejlesztése adja, mely kutatást Izsák Ferenccel (ELTE) közösen végeztük. Olyan módszert konstruáltunk, amely megtartja az eredeti, klasszikus DG módszerek jó tulajdonságait, és emellett az eredeti elliptikus feladat megoldását, amely egy folytonos függvény, szintén egy folytonos függvénnyel közelíti. Így például lehetőség nyílik rá, hogy a numerikus módszerünkre vonatkozó hibabecsléseket olyan normában végezzük el (pl H1 vagy L2), amelyik az alkalmazott szakemberek számára plusz információt nyújtanak, ellentétben a hagyományos DG módszereknél használt speciális DG normában való becslésekkel.
- Kutatásokat folytattunk a klasszikus stabilitáselmélet témakörében. Az absztrakt numerikus analízis stabilitás-elméletének eredményeit általánosítva a lokális és globális stabilitás fogalmának megkülönböztetésével új stabilitási fogalmakat definiáltunk, amelyek jól illeszkednek a klasszikus lineáris (Lax-Richtmyer-Kantorovich) elmélethez.

Publikációs tevékenység, fokozatszerzés

A kutatás teljes időszakában a három résztvevő a pályázati időszak alatt 78 tudományos közleményt publikált, amelyek döntő része impakt faktoros, nemzetközi folyóiratban jelent meg. (A negyedik résztvevő, Csörgő Gábor doktorandusz csak egy éve csatlakozott a csoporthoz, és egyelőre csak benyújtott cikkei vannak.)
A résztvevők mindegyike előrelépett a tudományos fokozatszerzésben. Faragó István 2009-ben, Karátson János 2012-ben szerzett MTA doktori fokozatot, Horváth Róbert pedig 2009-ben szerzett habilitációs címet. (Új tagunk, Csörgő Gábor 2013-ban, A Társadalmi Megújulás Operatív Program részeként megvalósuló Nemzeti Kiválóság Program keretében Apáczai Csere János Doktoranduszi Ösztöndíjban részesült.)

A pályázat ideje alatt a csoportunkban dolgozó doktoranduszok közül, a csoport tagjainak témavezetése mellett négyen (Csomós Petra, Kurics Tamás, Szabó Tamás, Antal István) PhD fokozatot szereztek, egy védés (Mincsovics Miklós) pedig idén ősszel lesz. Fontosnak tartjuk megemlíteni, hogy Faragó István és Karátson János két ebooknak, illetve 4 vezető nemzetközi folyóiratbeli különszámnak volt meghívott vendégszerkesztője, amellyel lehetőséget biztosított több hazai kollégának eredményeik nemzetközi megjelenítésére. Számos nemzetközi konferenciának, rangos eseménynek voltunk szervezői, illetve meghívottjai. (Kiemelném, hogy Faragó István 2013-ban meghívott plenáris előadója volt az egyik legnagyobb oroszországi numerikus kongresszusnak, Karátson János pedig közös kutatást folytatott O. Axelssonnal az Oberwolfachi MFO központban.).

Bár nem tartozik szoros értelemben a pályázathoz, zárójelentésünkben fontosnak tarjuk megemlíteni, hogy a kutatócsoportunk „felnőtt" tagjai kiemelten fontosnak tartották az oktatásban való aktív tevékenységüket, beleértve a tudományos utánpótlással való foglalkozást. Ennek keretében több szakdolgozat, TDK munka született, valamint új doktoranduszok kerültek a csoport tagjainak témavezetése alá, akik biztosítják a kutatásaink folytatását. (Jelenleg 6 ilyen doktori hallgató van.) Az oktatási tevékenységhez kapcsolódik, hogy az elmúlt 2 évben a csoport fenti három tagja aktívan részt vett a TÁMOP által biztosított jegyzetírási feladatban is, összesen 8 jegyzet illetve példatár készült el a csoport tagjainak szerzőségével. (Ezeket nem soroltuk fel a pályázat publikációs listájában, hiszen elsősorban nem a legújabb saját kutatási eredményeinket tartalmazzák.)