ELTE
Tématerületi Kiválósági Program
Ipar és Digitalizáció
Alkalmazásiterület-specifikus nagy megbízhatóságú informatikai megoldások

Kvalitatív tulajdonságokat megőrző diszkretizációk

Lóczi Lajos
Numerikus Analízis Tanszék, Informatikai Kar,
Eötvös Loránd Tudományegyetem (ELTE)
LLoczi@inf.elte.hu

Bevezetés

Természettudományos, műszaki vagy közgazdasági alkalmazásokban időben változó folyamatokat tipikusan differenciálegyenletekkel modelleznek (például megmaradási törvények, hőterjedés, rezgések leírása, populációdinamikai vagy járványterjedési modellek, kémiai reakciók, bolygómozgás, lövedékek röppályája, vagy robotkarok mozgásának szimulációja).
Ezen egyenletek két fontos típusa a közönséges, illetve a parciális differenciálegyenletek osztálya.

Egy differenciálegyenlet pontos megoldása általában nem fejezhető ki képlettel, a megoldásnak csak számítógépes közelítése áll rendelkezésre (szimuláció, numerikus megoldás, numerikus approximáció, diszkretizáció).
Természetes kívánalom tehát, hogy a differenciálegyenleteket megoldó számítógépes algoritmusok megbízható módon működjenek.

A numerikus megoldások megbízhatóságát („jóságát") többféle – egymásnak gyakran ellentmondó – kritériummal lehet jellemezni.
Például egy numerikus algoritmus előnyösebb, ha

- minél kevesebb számítási időt igényel („hatékonyság"),
- kvantitatív szempontból jól viselkedik („pontosság", konvergencia).

Ezen – ma már klasszikusnak számító – tulajdonságokon túl az utóbbi néhány évtizedben felismerték, sok esetben kiemelten fontos, hogy egy numerikus módszer *kvalitatív* szempontból is megbízható legyen. Ezekre a kérdésekre a klasszikus hibaanalízis nem ad választ.

Kutatásainkban közönséges, illetve parciális differenciálegyenletek olyan diszkretizációit vizsgáljuk, amelyek megőrzik az eredeti egyenlet bizonyos kvalitatív, a modellezés szempontjából releváns tulajdonságait.

Relaxációs módszerek

Számos, a gyakorlatban fontos közönséges differenciálegyenlet-rendszer vagy parciális differenciálegyenlet kvalitatív tulajdonságai közé tartozik a konzervativitás, illetve a disszipativitás.
Ez azt jelenti, hogy az egyenlethez tartozó valamely mennyiség az idő előrehaladtával megmarad (invariáns mennyiség), vagy időben nem növekedhet. Ez a helyzet például

- a Kepler-egyenletek megoldásakor (bolygómozgás szimulációja nagyon hosszú, mondjuk százmillió éves időtávon),
- a Hamilton-rendszerek esetében (a fázistérfogat megőrződése bizonyos dinamikai rendszerekben),
- a megmaradási törvények esetén (energiamegmaradás vagy az entrópia), vagy például
- kémiai, illetve populációdinamikai modellekben (első integrálok).

Konzervatív vagy disszipatív egyenletek numerikus megoldásakor olyan módszereket célszerű választani, amelyek maguk is konzervatívak vagy disszipatívak – vagyis a diszkrét approximáció „lemásolja" az eredeti folytonos rendszer megoldásának ezen kvalitatív jellemzőit.

Az ilyen típusú numerikus módszerek közé tartoznak a projekciós, illetve a relaxációs módszerek.
A két kifejezés arra utal, hogy az eredeti idődiszkretizációs módszert (melyek legfontosabb képviselői a klasszikus Runge–Kutta-, illetve a többlépéses módszerek) *alkalmasan* módosítjuk oly módon, hogy az új módszer már konzervatív vagy disszipatív tulajdonságú legyen.

A közelmúltban bevezetett relaxációs Runge–Kutta-módszerek után a relaxációs technikát sikerült általánosítani a lineáris többlépéses (állandó vagy változó lépésközű) módszerek esetére.

Eredményeinket a társszerzőkkel az alábbi cikkben publikáltuk:

Hendrik Ranocha, Lajos Lóczi, David I. Ketcheson, *General relaxation methods for initial-value problems with application to multistep schemes*, Numerische Mathematik, **146**, pp. 875–906 (2020), https://link.springer.com/article/10.1007/s00211-020-01158-4

Pozitivitástartó diszkretizációk

A gyakorlatban előforduló közönséges differenciálegyenlet-rendszerek vagy parciális differenciálegyenletek esetén sok esetben igaz az alábbi kvalitatív tulajdonság:
ha a kezdeti feltétel („input") pozitív, akkor a differenciálegyenlet megoldása („output") mindvégig pozitív marad.
Ezt a tulajdonságot pozitivitástartásnak nevezzük; egy (fizikai vagy kémiai) rendszer esetében a sűrűség vagy a nyomás például olyan mennyiségek, amelyek csak pozitív értéket vehetnek fel. A pozitivitás-tartással analóg módon kezelhető számos egyéb kvalitatív tulajdonság is, például a megoldások monotonitása, kontraktivitása, vagy oszcilláció-mentessége. Ezek a kérdések az utóbbi három évtizedben kidolgozott SSP-elmélettel (strong-stability preserving methods) tárgyalhatók.

Egy parciális differenciálegyenlet numerikus megoldása általában két fázisban történik:

- először egy rácson diszkretizáljuk a teret (térbeli szemidiszkretizáció),
- majd egy másik rácson diszkretizáljuk az időt (idődiszkretizáció).

A pozitivitástartás térbeli szemidiszkretizációk és teljes idődiszkretizációk esetére a fentihez hasonló módon definiálható. Az SSP-elmélet segítségével magasabb rendű idődiszkretizációk konstruálhatók, ha a térbeli szemidiszkretizáció pozitivitástartó és az explicit Euler-módszer (mint legegyszerűbb idődiszkretizáció) szintén pozitivitástartó.

Már a legegyszerűbb parciális differenciálegyenletek között is vannak olyanok (például az advekciós egyenlet), amelyek ugyan pozitivitástartók, de sem a térbeli szemidiszkretizációjuk, sem az explicit Euler-módszerrel történő idődiszkretizációjuk nem pozitivitástartó. Ebben a szituációban az SSP-elmélet tehát nem alkalmazható. Kiderült azonban, hogy az advekciós egyenletnek vannak olyan (nem pozitivitástartó) térbeli szemidiszkretizációi, melyeknek az *implicit* Euler-módszerrel történő idődiszkretizációja már ismét pozitivitástartó. A kérdéskört többféle térbeli szemidiszkretizáció és idődiszkretizáció esetén megvizsgáltuk, eredményeink az alábbi helyen érhetők el:

Yiannis Hadjimichael, David I. Ketcheson, Lajos Lóczi, *Positivity preservation of implicit discretizations of the advection equation*, bírálat alatt, https://arxiv.org/abs/2105.07403

Az „Alkalmazásiterület-specifikus nagy megbízhatóságú informatikai megoldások" című projekt a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból biztosított támogatással, a Tématerületi Kiválósági Program (TKP2020-NKA-06, Nemzeti Kihívások Alprogram) finanszírozásában valósult meg.

Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal

AZ NKFI ALAPBÓL MEGVALÓSULÓ PROGRAM