Vélemény Karátson János „Operator methods for the numerical solution of elliptic PDE problems” című MTA doktori értekezéséről

Az értékelést az alábbi szempontok szerint végeztem :

a) csak a doktori mű értékelése a feladat
b) a doktori mű be kell, hogy mutassa a pályázó tudományos munkásságának egy jellemző részét
c) egyformán kell súlyozni a téma és az eredmények jelentőségét (fontosságát, alkalmazhatóságát, hasznosságát) az eredmények mélységével (eredetiségével, ötletességével, bonyolultságával)
d) javasolni kell a mű elfogadását vagy elutasítását

Karátson János (KJ) a lineáris és nemlineáris elliptikus parciális differenciálegyenletek (PDE) numerikus megoldását jelölte a disszertáció témájának.

Ha megnézzük a Bevezetésben felsorolt fő eredmények listáját ill. elolvassuk a doktori művet, az az érzésünk támadhat, hogy KJ nem a hagyományos módon értelmezi a „numerikus megoldás” fogalmát.

Bár elég régóta követem a numerikus módszerek (NM) körüli eseményeket, nem vagyok numerikus szakember. Sok időmbe telt utánanézni a mű témáiban történt fejleményeknek, még így is, állításaim-véleményeim után, oda kell gondolni a „szerintem” szót.

A magam, talán már elavult módján szerettem volna a művet a „computational physics” szemüvegén keresztül nézni, de hamar rájöttem, hogy ez nem fog menni, igazságtalan lenne. Végső soron a fizika segítségével juthatunk olyan új feladatokhoz, melyek megoldására új és új módszereket kell kifejleszteni (azért van más is, pl. hálózatok vizsgálata). Nehezen tudom elképzelni, hogy komolyabb kutatóintézetek (ipari és egyéb; nálunk ilyenek még(már) nincsenek), melyek konkrét számolással foglalkoznak, nagyobb munka nélkül hasznosítani tudnák az értekezés eredményeit.

Jobb híján „elméleti numerikus analízis”-nek hívhatnánk azt a területet, melyben a szerző dolgozik, kicsit hasonlóan a 60-70-es évekbeli Lions iskolához (Glowinski, Ciarlet, Raviart etc), ahol szintén fő eszköz volt a függvényelmélet.

Ha már a franciáknál tartunk, itt jegyzem meg, hogy az értekezés nagy részében erős az un. Bourbaki hatás, vagyis gyakori a NM-ben szokatlan „definiciók-feltételek-tétel-bizonyítás” struktúra használata; ez aláhúzza a jelölt kötődését az un. „elmélet matematiká”-hoz.

Talán maradhatunk annyiban, hogy a munka lényegi része elméleti jellegű, felülnézetből adhat újszerű rálátást a prekondicionerek elméletére-mibenlétére, a módszerek megbízhatóságára, az eredmények segíthetnek új eszközök konstruálásában.

Nézetem szerint nem lett volna haszontalan egy rövid, de számokat-adatokat tartalmazó ismertetés arról, hogy meddig (méret) jók a direkt módszerek (Gauss etc.), mikortól kell már iterálni és kb. mikortól nem lehet elkerülni a prekondicionálást. Már csak azért is, mert a számolási technikák és a gépek is változnak-fejlődnek, ma már mást jelent a „kicsi, nagy, óriási” mint tíz évvel ezelőtt. Ez nem jelentett volna gondot a szerzőnek és segített volna témája fontosságának megítélésében.

Elég sok időmbe tellett, amíg meggyőződtem a prekondicionálás szükségességéről. Hasonló véleményre jutottam mint egy később talált idézet (1997): „Nothing will be more central to computational science in the next century than the art of transforming a problem that appears intractable into another whose solution can be approximated rapidly. For ………iteration, this is preconditioning.”

A másodrendű elliptikus egyenleteket sokféle szemszögből vizsgálták, általánosabb esetekben is sok olyan tulajdonságuk ismert, melyek hasonlóak a Laplace egyenlet megoldásainak tulajdonságaihoz. Pl. a megoldások nagyon simák, nem lehet egy síkkal úgy elmetszeni a megoldás-felületet, hogy levágjunk egy kis „sapkát” (maximum elv), de gondolhatunk minimál felületekre is.

Az elliptikus operátorok általában invertálhatók, ez azonban nem segít a megoldás konkrét pontokban való kiszámításában, mivel bonyolult az inverz operátor. Itt jön képbe a diszkretizálás: véges differenciák, véges elemek,etc.

A címben említett „operátor módszer” (OM) ötlete nyilván (?) a lineáris algebrai egyenletrendszerek prekondicionált iteratív megoldását megadó formulák vizsgálatából jött, amikor a mátrixok helyébe operátorokat képzeltek (Faber, Manteuffel, Parter). Ez valóban mély ötletnek bizonyult. (Itt is lehetett volna kicsit bőbeszédűbb a szerző, a megfelelő analógiákból jobb képet kaphattunk volna a módszer természetességéről.) Az analógiákat azonban nem mindig egyszerű végigvinni.

Differenciáloperátorokról van szó, bár a szerző szeret csak operátorokról beszélni. Nem világos, mások is szóba jöhetnek-e.

Az első rész első fejezetében több fogalom kerül bevezetésre. A hibára és a residual-ra kapott becslések nem triviálisak, jók. Ismeretük megnyugtató lehet a gyakorlatibb emberek számára még akkor is, ha a jobb oldalak általában függenek az (ismeretlen) spektrumtól.

Ugyanez a jó vélemény vonatkozik a hálófüggetlen, szuperlineáris konvergenciát bizonyító becslésekre is.

A második, leghosszabb fejezet nemlineáris PDE-kkel és ennek megfelelően (nagy?) nemlineáris algebrai egyenletrendszerekkel foglalkozik.

A Newton gyökkereső módszer egyismeretlenes verzióját sokan ismerik. Hasonló a formula n-változó, n-egyenlet esetén is, a derivált helyett a Jacobiánt kell venni. Lehet konvergenciát bizonyítani stb. A Kantorovich tétel hasonló jellegű analitikus eredmény, mindkét esetben fontos az első közelítés kiválasztása. Nagyobb rendszerek esetén nyilván itt is szükséges a prekondicionálás.

Itt bele kellene mennem az un. prekondicionáló operátorok elméletébe (esetenként filozófiai kérdésekbe is), annál is inkább, mivel a szerző érezhetően J. Neuberger hatása alatt áll, aki nagy reményeket fűz saját elméletéhez. Nem teszem. Itt is hasonló jellegű előnyökre lehet számítani mint lineáris esetben, az új skalárszorzat variálásával előnyösebb prekondicionálókat lehet találni. (Nem tudom, KJ és J. Neuberger próbáltak-e megoldani egy „igazi" nemlineáris elliptikus egyenletet egy élekkel-csúcsokkal rendelkező 3dim tartományban, mondjuk Dirichlet feladatot, mondjuk 10 millió pontban. Úgy gondolom, hogy itt a numerikus és az analitikus nehézségek nem összehasonlíthatók , az elméletnél a méret nemigen játszik szerepet, a numerikában sok előre nem látott probléma merülhet fel. Ezekről Magyarországon talán Hegedüs Csaba tudna legtöbbet mondani, sokat számolt nagy rendszereket a KFKI-ban. A méretekre nem emlékszem pontosan, abban az időben világrekord-közeliek voltak.)

A fejezet fő eredményei elméleti jellegűek, nem-triviálisak. Kiemelném a 2.3.1, 2.3.2 és a 2.4.2 tételeket, valamennyiben prekondicionált iterációról van szó. Érdekes eredményt tartalmaz 2.5 is: háló független kvadratikus konvergencia csak szemilineáris egyenletekre igaz, tehát pl. a p-Laplacian típusukra nem. A bizonyítások itt érthetően bonyolultak.

A diszkrét maximum elvvel foglalkozó harmadik fejezetet nem kommentálnám részletesen. Több szempontból is színvonalas, jó munka. Itt nyugodtan el lehet tekinteni mindenfajta „alkalmazás"-tól, az eredmények önállóan is megállják helyüket. Méltó folytatása az un. magyar vonalnak (R. Varga, G. Stoyan, I. Faragó etc).

Ha megkérdezünk egy bonyolult modellt numerikusan megoldó fizikust, vegyészt stb, hogy mi az, amit előre szeretne tudni számolásai végeredményeiről, az elsők között lenne az, hogy az eredeti megoldástól való eltérést. Bármilyen normában. Ez neki már biztonságot adhat abban, hogy jó vagy rossz úton jár.

Az utolsó fejezet becsléseket ad az un. energia normákban. A bizonyítási módszerek újnak látszanak a numerikában, a PDE egyenletek elméletében azonban már megjelentek a 70-es években, ld. „energy methods in PDE theory", főként nemlineáris nem egyenletesen elliptikus-parabolikus egyenletek elméletében. A módszer független a maximum elvtől, így magasabb rendű egyenletek esetben is alkalmas a megoldás kvalitatív tulajdonságainak vizsgálatára.

A disszertációban számos konkrét differenciálegyenleten mutatja be a szerző eredményeinek alkalmazhatóságát, nem-egyszerű esetekben is.

Összefoglalva:

Javaslom a nyilvános vita kitűzését és a mű elfogadását. Karátson János dolgozata és a PhD megvédése óta elvégzett munkássága itt és most megfelel az „MTA Doktora” címhez tartozó követelményeknek.

Kersner Róbert

egyetemi tanár