Válasz Kersner Róbert bírálatára

Mindenekelőtt ezúton is köszönöm Dr. Kersner Róbert, az MTA doktora opponensi munkáját és véleményét.

Bírálatában nem külön tett fel kérdéseket, hanem a bírálaton belül fogalmazott meg felvetéseket, itt ezekre szeretnék válaszolni.

1. Az egyik ilyen kérdéskör elvi típusú: dolgozatom elméleti jellege, a numerikus megoldás fogalmának megközelítése. A bírálat felveti, hogy konkrét számításokban csak nagyobb munkával hasznosíthatóak dolgozatom eredményei, később J. Neuberger hatásának felidézésekor konkrét példaként említ egy nemlineáris elliptikus egyenletet egy élekkel-csúcsokkal rendelkező 3D tartományban, 10 millió csomópontban diszkretizálva. Ezek a felvetések az iterációs módszerekre vonatkoznak, a diszkrét maximum-elv esetén a bírálat is önmagában helytállónak nevezi az elméleti megközelítést.

A bírálat a prekondicionálással kapcsolatban arra a (Treffethen és Bau idézetével alátámasztott) következtetésre jut, hogy a gyakorlati számításokban kulcsfontosságú az eredeti probléma visszavezetése kedvezőbb, egyszerűbben megoldható segédfeladatokra. Úgy gondolom, hogy ez teljes elvi választ ad a fenti kérdéskörre, mivel dolgozatom elméleti eredményei az iterációkkal kapcsolatban ilyen visszavezetésre vonatkoznak. A teljesség kedvéért ezt itt konkrétabban is összefoglalnám.

A dolgozat bevezetőjében úgy fogalmaztam, hogy ha rácsfüggetlen konvergenciát igazolunk olyan prekondicionált iterációkra, melyek optimális rendben megoldható segédfeladatokat tartalmaznak, akkor ezzel az eredeti elliptikus feladatot is optimális rendben oldjuk meg, hisz a munkaigény a segédfeladat megoldási munkaigényének konstansszorosával becsülhető. (Az optimális rend itt a változók számával egyenesen arányos műveletigényt jelent, melynél kevesebbel egy lineáris rendszer nem oldható meg.) Ezzel a módszerrel ráadásul a segédfeladatokra ismeretes számítógépes realizációs technikákat használhatjuk fel – csupán nem egy, hanem egymás után több ilyen segédfeladatra – úgy, hogy ezáltal végül az általánosabb feladat numerikus megoldásához jutunk. A rácsfüggetlen becslések mint elméleti eredmény tehát a segédfeladatokra ismert optimális rendű műveletigény és rendelkezésre álló számítási technikák közvetlen átvitelét eredményezik az általánosabb feladatokra, és ezzel gyakorlati eredményben realizálódnak.

A szóban forgó segédfeladatok lényegében diszkretizált másodrendű szimmetrikus lineáris skalár egyenletek (kiemelten állandó együtthatósak), ezekre hatékony és optimális rendű módszerek állnak rendelkezésre szubrutinként. Ezt támasztja alá pl. az alábbi sarkított megfogalmazás P. Vassilevskitől (akinek 2008-ban jelent meg monográfiája ilyen feladatok megoldásáról a Springernél): "elliptic problems are for the most part a 'done deal' in the sense that there are efficient optimal algorithms, theory to support them and efficient software (including on massively parallel computers) that is now successfully used for these type of applications". A bírálatban említett példára (nagy nemlineáris feladat bonyolult tartományon) nézve ez azt eredményezi, hogy ha ezt az egyenletet pl. Poisson- (vagy általánosabban szakaszonként konstans együtthatós elliptikus) egyenletek sorozatára vezetjük vissza, akkor az utóbbiakra rendelkezésre álló kapacitás a fenti nehézségekre vonatkozóan (rácsgenerálás, nagy adathalmaz tárolása stb.) ezáltal az eredeti feladatra is közvetlenül érvényesül.

2. A második kérdés, hogy milyen mátrixméretig jók a (Gauss-eliminációra alapuló) direkt módszerek, mikortól kell már iterálni és kb. mikortól nem lehet elkerülni a prekondicionálást.

Ez a téma ("direct vs iterative solver") visszatérően felmerül, egyes cikkekben is. A probléma annyiban összetett, hogy a kétféle módszertípus hatékonysága erősen függ a feladattól, a mátrix szerkezetétől (ritkaság és annak mintázata, sávosság stb.), az igénytől (pl. "black-box"-módszer), másrészt a számítási kapacitástól, memóriától (amelyre való nagyobb igény a direkt módszerek fő hátránya). Valószínűleg emiatt alig találkoztam konkrét számokkal.

Összbenyomásom az, hogy a direkt módszerek kb. 10^6 változó alatt számítanak még jónak, ekörül vagy fölött van a határ, amely után általában jobbak az iterációs módszerek még az újabb direkt módszereknél is. A direkt módszerekre vonatkozó tesztmátrixok rendje általában $10^5 - 10^6$ nagyságrendű. Gyakran emlegetett "ökölszabály: 2D vs 3D", azaz 2 dimenziós elliptikus feladatnál direkt, 3 dimenziósaknál iterációs módszerek kellenek inkább. (Ez is függ azonban a memóriától – láttam olyan összehasonlítást is, ahol mindegyik változószámra iterációs módszer bizonyult hatékonyabbnak.) A 3 dimenzió szerepét jól szemlélteti, hogy egy tengely irányában $n = 100$ részre való felosztás esetén a változók száma, azaz a mátrix rendje már $n^3 = 10^6$.

Iterációs módszer választása esetén elliptikus feladatnál kis méret esetén is szokás prekondicionálást is alkalmazni, már a mátrix főátlójával való prekondicionálás (Jacobi) is javít a konvergencián és csekély munkaigényű.

A direkt és iterációs módszer közti választás helyett egyre elterjedtebb a kettő kombinációjának használata, ilyen elvre alapulnak lényegében a tartományfelbontási (DD) és multigrid módszerek is, és ide sorolható az ekvivalens operátoros megközelítés is, ha a segédfeladatokra direkt módszert alkalmazunk.

Budapest, 2012. szeptember 24.

Karátson János