

Garay Barna DSc
PPKE ITK
1083 Budapest
Práter utca 50.

e-mail: garay@digitus.itk.ppke.hu
tel: 886 47 79
fax: 886 47 24

Opponensi vélemény

HÁZI GÁBOR:

"Nukleáris reaktorok termohidraulikai problémáinak numerikus modellezése különböző mérettartományokban"
című DSc értekezéséről

Az értekezést egy mérnök vagy fizikus opponens bizonyára más szemmel olvasná, jómagam csak az alkalmazott matematika, pontosabban az alkalmazott matematikai analízis és a numerikus dinamika szemszögéből értékelhetem. Matematikus vagyok, aki a matematikusok között szokásos együttműködésen túlmenően mérnökökkel, számítástechnikusokkal, sőt biológussal és közgazdással együtt is írt közös cikket.¹

Házi Gábor értekezése két, egymástól élesen elkülönülő fő részből áll, amelyeket a Bevezetés valamint az Összefoglalás és a Kitekintés próbál egységes keretbe foglalni.

A 23 oldalnyi hosszúságú második fejezet a RETINA modell- és programrendszer ismertetése. A RETINA a paksi atomerőmű számára készült és jelenleg az ottani szimulátor integráns része. Napi rendszerességgel használják az irányító és kezelő személyzet felkészítésében, oktatásában. Segítségével az üzemeltető személyzet képes mind az előre tervezett, mind az előre nem tervezhető körülmények miatt szükséges beavatkozások elvégzésére — természetesen senki sem kívánja, hogy ez utóbbiakra valaha is szükség legyen, de a chicago-i atommáglya biztonsági baltás emberének (Safety Control Reserve Axed Man) szerepe ma is nélkülözhetetlen.

A RETINA modell kiterjed a teljes primér körre, valamint a szekunder

¹Két tényező motiválta, hogy vállaltam a bírálat elkészítésének feladatát. Az egyik a természetes kíváncsiság volt, a másik az, hogy a 2003/2004-es tanév tanszéki szemináriumának fő témája a rácsokon értelmezett dinamikai rendszerek elmélete volt, ahol többek között S.N. Chow "Lattice dynamical systems, in *Lectures from the C.I.M.E. Summer School, LNM 1822*, Springer-Verlag, Berlin, 2003, pp. 1—102." összefoglaló cikkének első felét is feldolgoztuk.

kör legfontosabb komponenseire, a gázfejlesztőkre, a gázkollektorokra és az őket összekötő vezetékekre. Ez a felbontás megjelenik a különböző egyszerűsítések után kapott nemlineáris algebrai egyenletrendszer szerkezetében is, lehetővé téve a Jacobi-mátrix inverzének particionált, jól párhuzamosítható kiszámítását. Magától értetődő, hogy az inverz mátrix meghatározására a Newton-iteráció miatt van szükség, amely a nemlineáris algebrai egyenletrendszer megoldásához vezet. A jelölt több numerikus és tesztelési szempontot alapos és körültekintő részleteséggel elemez, de nem tér ki az iteráció kezdőpontjának megválasztására, holott ez a konvergencia szempontjából elsőrendűen fontos kérdés. A 2.6.1 alpont utolsó bekezdése szerint a Jacobi-mátrix többszöri (más és más pontokban vett) invertálására lehet szükség, ami egyértelmű utalás az iteráció kezdőpontja megválasztásával kapcsolatos nehézségekre. Jóllehet a konvergencia szó szerepel a 2.6.3 alpont címében, az iteráció kezdőpontjának megválasztására csak a 2.7 és 2.8 pontokban vannak távoli utalások: a tranziens üzemzavari folyamatok úgymond rendben vannak, de a csőtöréses üzemzavarokhoz és a balesetekhez tartozó, "a hatáság által elfogadott, validált rendszer kódok által végzett számítások" természete rejtve marad. Nem biztos, hogy ez utóbbiakra rá szabad kérdeznem. De annyit csak megkérdezhetek, hogy a mérnöki intuíció által szolgáltatott "educated initial guess" minden esetben konvergens Newton-iterációhoz vezet-e? KÉRDÉS: Mit lehet akkor tenni, ha nem ez a helyzet?

Az értekezés harmadik, 63 oldalas fejezete a szerző rács-Boltzmann módszerrel kapcsolatos saját munkáit úgy összegzi, hogy a részleteket illetően gyakorta visszautal ezekre a dolgozatokra. A DSc értekezés hivatkozásjegyzékében a szerző 19 folyóiratcikke szerepel², közülük 14 címében is hordozza a "rács-Boltzmann módszer" kifejezést. Ha az Országos Doktori Tanács adatbázisát nézem, akkor az arány még markánsabb: a "rács-Boltzmann módszer" kifejezés a 10 kiemelt publikáció közül 8-nak a címében található meg. A 10 kiemelt publikáció egyébként 101 független hivatkozást kapott³ — közülük a DSc értekezésben [19]–es sorszám alatt szereplő Házi G., Imre A., Mazer G., Farkas I., "Lattice-Boltzmann Methods for Two-Phase Flow Modeling, *Annals of Nuclear Energy* 29(2002), 1421—1453." dolgozat önmagában 43-at. Ha egy áramlásban a két fázis élesen elválik egymástól, akkor a kettejük közötti vékony határréteg a parciális differenciálegyenletek

²közülük 5 az *Annals of Nuclear Energy*-ben, 3 a *Physical Reviews E*-ben, 2-2 a *Physics of Fluids*-ban és az *Int. J. Mathematical Physics*-ben, és a többi is, kivétel nélkül, jónevű folyóiratokban

³a független hivatkozások összesített száma 117

elméletében mint szabad perem jelenik meg. Minél erősebb a keveredés a két fázis között, annál kevésbé alkalmas a szabad perem fogalma az áramlás adekvát leírására. A rács-Boltzmann modellek — mivel tényleges változóik eloszlásfüggvények — lehetőséget kínálnak a két- illetve többfázisú áramlások számítógépes vizsgálatára azokban az esetekben is, amikor a két fázist egymástól a makroszkopikus geometria nem képes jól elkülöníteni.

A rács-Boltzmann modellek mezoszkopikus modellek, félúton a statisztikus fizika molekula-szintű, a molekulák közvetlen kölcsönhatásait leíró modelljei és a megmaradási törvényeket és egyensúlyi elveket kifejező differenciálegyenlet modellek között. A rács-Boltzmann szóösszetétel előtagja nem a CFD módszerekben alkalmazott diszkretizációs eljárások rácspontjaira utal. A rács-Boltzmann módszer (pontosabban módszercsalád) olyan probabilitikus hálózati dinamika, amelyben a rácspontokhoz és rácsvektorokhoz rendelt változók a molekula szintű modellek lokálisan átlagolt tömeg- és impulzus-eloszlásai a statisztikus egyensúlyi állapot közelében. Mint minden szokásos közelítő módszer, így a rács-Boltzmann módszer esetén is kötelező előírás, hogy a megfelelő határértékek képzése a differenciálegyenlet modellhez vezessen.

A "megfelelő határértékek képzése" a rács-Boltzmann modellekben a Chapman-Enskog, többszörös időskálákra vonatkozó Taylor-sorfejtés csonkolását jelenti — az egyik időskála inkább az áramló közeg diffúzív, a másik konvektív változásainak felel meg. A mögöttes differenciálegyenlet Házi Gábor DSc értekezése harmadik fejezetében a Navier-Stokes. A kérdésekre, amelyeket vizsgál, és az általa elért eredményekre azoknak a válaszoknak a perspektívájából tekintek, amelyekkel már találkoztam a közönséges differenciálegyenletek és a reakció-diffúzió egyenletek numerikus módszereinek vizsgálatában. A 3D Navier-Stokes egyenlet esetében ezek távoli analógiák, de két dimenzióban már nem távoliak, hiszen a 2D

$$u_t - \nu \Delta u + (u \cdot \nabla)u + \nabla p = f(x, t), \quad \nabla \cdot u = 0 \quad (1)$$

Navier-Stokes egyenlet és a (bizonyos természetes feltételeknek eleget tevő)

$$u_t - \Delta u = f(u) \quad (2)$$

alakú reakció—diffúzió egyenletek mindegyike tekinthető végtelen-dimenziós függvényterben értelmezett közönséges differenciálegyenletnek, amelyekre egy és ugyanazon jól-kidolgozott matematikai elmélet vonatkozik. Robinson (J.C. Robinson, *Infinite-dimensional dynamical systems*, Cambridge University Press, Cambridge, 2001) könyve a 2D NS (1) és az RD (2) egyenleteket

egymással párhuzamosan tárgyalja. Numerikus módszerek szempontjából a Hairer–Lubich–Wanner (E. Hairer, Ch. Lubich, G. Wanner, *Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*, Springer, Berlin, 2002.) könyvben kifejtett kvalitatív elmélet abszolút illetékes. Ennek az elméletnek egyik központi kijelentése, hogy a fizikailag releváns megmaradó mennyiségek viselkedése és a közelítő eljárások stabilitása között számos belső kapcsolat van. A Ge–Marsden tétel (Ge, Z., Marsden, J.E., Lie-Poisson Hamilton-Jacobi theory and Lie-Poisson integrators, *Physics Letters A*, 133(1988) pp. 134-139.) például azt mondja ki, hogy a klasszikus mechanika Hamilton egyenleteinek esetében az olyan közelítő eljárás, amely egyszerre őrzi meg a szimplektikus struktúrát és a Hamilton függvényt, szükségképpen az idő átparaméterezését és diszkrétte tételét jelenti a pontos megoldások mentén. Ennek a tételnek a fényében nem meglepő, hogy — Házi Gábor kifejezését használva — az analitikus pontosság a rács–Boltzmann modellek esetében sem érhető el; és hogy valamely megmaradó mennyiséggel és/vagy szimmetriával mindig baj lesz. Nem tudom, van-e a Ge–Marsden tételnek analogonja (s ha igen, ez milyen mértékű) a rács–Boltzmann modellek körében, de ha van, akkor a disszertáns eredményeinek egy része kapcsolatos vele. KÉRDÉS: Kérem, kommentálja ezt a felvetést.

Egy másik megfontolás, analógia-keresés a Robinson már idézett könyvében központi szerepet játszó, és az ottani dinamikákat részben nemlineáris projekciók segítségével lassú és gyors változásokra szeparáló spektrális módszerekkel kapcsolatos. Ismeretes, hogy a Chapman–Enskog sorfejtést a rács–Boltzmann modellek körében ki lehet váltani az eloszlásfüggvények Grad–Hermite féle ortogonális sorfejtésével. Megfordult a fejemben, hogy az ortogonális sorfejtések szilárd matematikai megalapozottsága talán segítséget jelent a mindmáig heurisztikus Chapman–Enskog sorfejtés jobb megértésében, a benne alkalmazott időskálák megválasztásában, egymástól való elkülönítésében. KÉRDÉS: Kérem a disszertánst, kommentálja ezt a feltételezést.

A rács–Boltzmann módszer alkalmas számos áramlástan mintázat megjelenítésére. A harmadik fejezet mintegy felét ezeket bemutató, részleteikben is jól kidolgozott esettanulmányok teszik ki. A tényleges műszaki alkalmazásokat megalapozandó, az esettanulmányok egy része — örvény- és buborékképződés atomreaktor fűtőelem–pálcái közötti keskeny szubcsatornában — kapcsolatot teremt az értekezés második és harmadik fejezete között. Az általam ismert matematika szempontjából a fal mellől leváló egyedi buborékok keletkezésének szimulációi a legérdekesebbek. A 3.25 és a 3.30 ábrák

egy-egy sebességmező időbeli, periodikusnak tekinthető változását mutatják be. Első látásra szokatlan volt számomra az ábrázolt sebességek egységvektorokra történő normálása⁴ — ezt leszámítva mindkét ábra a nem-lokális bifurkációk elméletében szokásos fázisportrékra emlékeztet. KÉRDÉS: Lehet-e a 3.25 és a 3.30 ábrákat a bifurkációk nyelvén, a bifurkáció-elmélet szempontjából interpretálni? Lehet-e önmagában a sebességmezők rajzolatának (szép síma(?)) alakulásából a buborék keletkezésének és leválásának (mindenképpen — de lehet, hogy most rossz kifejezést használok — szakadásos, szinguláris) eseményeire következtetni?

A tag értelemben vett átlagolási módszerek használata teljesen általános azoknak a folyamatoknak a vizsgálatában, amelyek egyszerre különböző időskálákon és/vagy térskálákon valósulnak meg⁵. A kevesebb számú átlagolt egyenletből álló rendszer matematikai értelemben vett lezárása többféleképpen is elképzelhető. A rács-Boltzmann modellek körében ezzel kapcsolatban nehéz, és az értekezésben is megjelenő probléma, hogy az átlagolt, probabilisztikus egyenletrendszerben a peremfeltételek fizikája hogyan jeleníthető meg a legjobban. A fűtött fal síknak, a horizontális peremfeltételek periodikusnak választása a matematikailag leginkább kézenfekvő lehetőség. A nagyon szép az, hogy még ilyen egyszerűsítések mellett is sikerült a disszertációnak egészen gazdag jelenség-csoportokat bemutatnia. Utalást tesz arra, hogy a fal finomabb geometriájának (fraktálszerkezetének(?): a differenciáloperátorok elmélete fraktálokon is működik) figyelembe vétele az összkép további árnyalását teheti-teszi lehetővé. KÉRDÉS: A disszertáció elkészítése óta történt-e továbblépés ebbe az irányba?

Az értekezés témaválasztását tekintve abszolút forró, ahol az alkalmazói gyakorlatban leginkább bevált módszerek matematikai megalapozottsága is hiányos, pontosabban a jövő feladata. Az absztrakt matematika, különösen ha azt a definíció-tétel-bizonyítás sémába próbálom gyömöszölni, nehezen talál fogást a vizsgált kérdéseken.

A szerkesztés jó, a nyelvezet tömör és elegáns, a képletek kezelése úgyszintén⁶. Ezzel együtt az a benyomásom, hogy az értekezés egy kicsit ön-

⁴e mögött a szomszédos rácspontok közötti sebesség-alapvektorok véges, a vektorok abszolút értékét, az úgynevezett rácshangsebességet tekintve gyakran egyelemű halmazból történő megválaszthatósága áll

⁵vegyesen geometriai és probabilisztikus átlagolások: blokk-celluláris automaták, a változók összevonása a kémiai kinetikában, hálózati dinamikák egyszerűsítése, gyorsan oszcilláló együtthatók, szinguláris perturbációk, relaxációs oszcillációk

⁶Gépelési hiba alig van, azok is inkább copy paste figyelmetlenségekből adódnak (szóis-

magába záródik — abban az értelemben mindenképp, hogy ugyanez a tartalom kétszer ekkora terjedelmet is kitölthetett volna. Figyelemreméltó, hogy a disszertáns egyetlen könyvet sem idéz azok közül, amelyek címében a rács–Boltzmann módszer kifejezés szerepel. Azt sem említi, hogy saját dolgozatait a témakör jelentős, legtöbbet idézett képviselői is újra meg újra citálják.

Házi Gábor letette a saját névjegyét ezekben a kutatásokban. Értekezése az általa megtett út végigkövetése nehéz és sokfelé ágazó kérdések körében. Téziseit elfogadom, és az értekezés vitára bocsájtását javaslom.

Budapest, 2013 október 10.

Garay Barna

méltós a 6–ik és a 102–ik oldalon, betű-elütés megisméltés a 8–ik, "félbehagyott" képaláírás a 91–ik oldalon). A matematikus olvasó a szigorú, vagy–vagy jelentésekhez szokott, ezért a — szerencsére csak elvétve előforduló — $\gg$ nem tökéletesen konzisztens $\ll$, vagy a $\gg$ megközelítésekkel elérhető függetlenség $\ll$ jellegű nyelvi szerkezeteket nem érezheti a sajátjának. Ugyanakkor a "történeti erők" kifejezést nyelvi telitalálatnak tartom.