

Operátorszeletelési eljárások elméleti és numerikus vizsgálata

Csomós Petra

Doktori értekezés tézisei



Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar
Matematika Doktori Iskola, Alkalmazott Matematika Program

Iskolavezető: Dr. Laczkovich Miklós, MHAS

Programvezető: Dr. Prékopa András, MHAS

Témavezető: Dr. Faragó István,
a matematika tudomány kandidátusa

Alkalmazott Analízis és
Számításmatematika Tanszék

2007.

Bevezetés, a munka célkitűzései

Doktori értekezésemben a parciális differenciálegyenletek numerikus megoldására alkalmazott operátorszeletelési eljárásokat vizsgálom. Ezen eljárások olyan időbeli diszkretizációs módszerek, melyek egyszerűsítik, alkalmasint lehetővé teszik a bonyolult differenciálegyenletek numerikus megoldását. Az operátorszeletelési eljárásokat először Marchuk (lásd [17]) és Strang (lásd [19]) tanulmányozta behatóan; azóta igen széleskörűen alkalmazzák őket különféle fizikai jelenségek modellezésekor. Az operátorszeletelési eljárások alapja, hogy a fizikai jelenségek több különböző folyamat együttes hatására alakulnak ki. Egy fizikai mennyiség (például egy kémiai anyag koncentrációjának) időbeli viselkedését olyan parciális differenciálegyenlet írja le, melyben a lokális időbeli deriváltat a folyamatokat leíró részoperátorok határozzák meg. Ezen részoperátorok különböző tulajdonságúak lehetnek. Az egyes részoperátoroknak megfelelő részproblémák megoldására általában hatékony (azaz gyors és pontos) numerikus módszerek léteznek, a részoperátorok összege esetében azonban csak ritkán találhatunk ilyen módszert. Az operátorszeletelési eljárások alkalmazása tehát azt jelenti, hogy az összeg-operátor helyett csak a részoperátorok által meghatározott részproblémákat oldjuk meg külön-külön. A kiindulási probléma megoldását az egyes részfeladatok numerikus megoldásaiból származtatjuk. Értekezésemben a *szekvenciális*, a *Strang-féle*, valamint a *súlyozott* szeletelési eljárásokat vizsgálom. Ehhez tekintsük a G operátorhoz tartozó absztrakt Cauchy-problémát az X Banach-téren:

$$\begin{cases} \frac{du(t)}{dt} = Gu(t), & t \geq 0, \\ u(0) = x \in X. \end{cases} \quad (\text{ACP})$$

Az $(U(t))_{t \geq 0}$ lineáris operátorok egyparaméteres családját *erősen folytonos operátorfélcsoportnak* nevezzük az X Banach-téren, ha

- (i) $U(0) = I$,
- (ii) $U(t+s) = U(t)U(s)$ minden $t, s \geq 0$ esetén,
- (iii) a $t \rightarrow U(t)x$ $\mathbb{R}^+$ -ból X -be való leképezés (trajektória) minden $x \in X$ esetén erősen folytonos.

Az $D(G)$ értelmezési tartománnyal rendelkező G operátort a fenti operátorfélcsoport *generátorának* nevezzük, ha

$$Gx := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{U(h)x - x}{h} \quad \text{minden } x \in D(G) \text{ esetén, ahol}$$

$$D(G) := \left\{ x \in X : \lim_{h \rightarrow 0} \frac{U(h)x - x}{h} \text{ létezik} \right\}.$$

Megmutatható, hogy az absztrakt Cauchy-problémának létezik egyértelmű megoldása, ha a $(G, D(G))$ operátor egy erősen folytonos operátorfélcsoportot generál. Értekezésben felteszem tehát, hogy az $(A, D(A))$ és $(B, D(B))$ részoperátorok generátorai a $(T(t))_{t \geq 0}$ és $(S(t))_{t \geq 0}$ félcsoportoknak az X téren, valamint hogy a $D(A+B) := \overline{D(A) \cap D(B)}$ értelmezési tartományú $G = A+B$ összegoperátor is generátor az X téren. Az (ACP) probléma $u^n(t)$ numerikus megoldását a különböző szeletelések esetén az alábbiak szerint definiáljuk:

$$\begin{aligned} \text{szekvenciális szeletelés:} \quad & u_n^{\text{sq}}(t) := [S(t/n)T(t/n)]^n x, \\ \text{Strang-féle szeletelés:} \quad & u_n^{\text{St}}(t) := [T(t/2n)S(t/n)T(t/2n)]^n x, \\ \text{súlyozott szeletelés:} \quad & u_n^{\text{w}}(t) := [\Theta S(t/n)T(t/n) + (1-\Theta)T(t/n)S(t/n)]^n x \end{aligned}$$

minden rögzített $t \geq 0$ és $n \in \mathbb{N}$ esetén, ahol $x \in D(A) \cap D(B)$ és $\Theta \in (0, 1)$. Mivel az operátorszeletelési eljárások időbeli diszkretizációs módszerek, konvergenciájuk kérdése fontos szerepet játszik az alkalmazások során. Értekezésemben tehát ezen eljárások konvergenciáját vizsgálom az operátorfélcsoport-elmélet keretein belül, továbbá numerikus kísérletek segítségével.

Az alkalmazott módszerek

Értekezésemben a Banach-téren értelmezett operátorfélcsoportok elméletét (approximáció- és perturbáció-elméletet), a kezdetiérték problémákra alkalmazott véges különbséges sémák elméletét (a konvergencia, konzisztencia és stabilitás fogalmait, valamint Lax tételét), a késleltetést tartalmazó differenciálegyenletek operátorfélcsoport-elméletbeli megközelítését (szorzat Banach-terek és operátor-mátrixok fogalmát) és a nagyskálájú környezeti modellezés eredményeit alkalmazom, valamint foglalkozom az operátorszeletelést megvalósító számítógépes programok kifejlesztésének kérdéseivel is.

A saját eredmények pontokba szedett összefoglalása

Az *1. fejezetben* áttekintést nyújtok az értekezésben alkalmazott módszerekről (operátorfélcsoport-elmélet, numerikus analízis, késleltetést tartalmazó egyenletek, légszennyezés terjedését leíró modellek). A *2. fejezetben* bevezetem a dolgozatban vizsgált operátorszeletelési módszereket, és bemutatom a konzisztenciájukra vonatkozó, az irodalomban megtalálható eredményeket. Bemutatom továbbá Ito és Kappel [14], valamint Zagrebnov [21] norma-konvergenciára vonatkozó eredményeit abban az esetben, amikor a szeletelés mellett még valamilyen időbeli diszkretizációt alkalmazunk. Az alábbi új eredményt fogalmazom meg (lásd Csomós és Sikolya [12]).

1. **2.4.5. Tétel.** A [21] dolgozat 10.18. Tételében Zagrebnov szerint bizonyos feltételek teljesülése mellett az alábbi becslések igazak:

$$\|f(\tfrac{t}{n}A)g(\tfrac{t}{n}B) - e^{t(A+B)}\| \leq C_1 \frac{\ln n}{n},$$

$$\|f^{1/2}(\tfrac{t}{n}A)g(\tfrac{t}{n}B)f^{1/2}(\tfrac{t}{n}A) - e^{t(A+B)}\| \leq C_2 \frac{\ln n}{n}$$

minden $t \geq 0$ és $n \in \mathbb{N}$ esetében, valamely $C_1, C_2 > 0$ konstansok mellett. Megmutatom, hogy az f és g függvényekre tett feltételek teljesülnek, ha azok olyan A -stabil és konzisztens időbeli diszkretizációt jelentenek, melyek megőrzik a pozitivitást. A szekvenciális és a Strang-féle szeletelések ezen módszerekkel való együttes alkalmazása tehát konvergens módszerhez vezet.

A 3. fejezetben a szeletelési eljárások konvergenciáját tanulmányozom. A 3.1. részben azt az esetet vizsgálom, amikor a részfeladatok pontos megoldása ismert (lásd Csomós és Nickel [10]), míg a 3.2. részben azokat valamilyen térbeli és időbeli diszkretizációs eljárások segítségével kapjuk (lásd Bátkai, Csomós és Nickel [2]).

2. **3.1.6. és 3.1.7. Állítás.** Vizsgálom a Lax és Chernoff tétele (lásd Lax [16], 34.4. fejezet, 8. Tétel, illetve Engel és Nagel [13], III. fejezet, 5.3. Következmény) közötti kapcsolatot. Megmutatom, hogy a két tétel feltételei megegyeznek, amennyiben a numerikus módszer időlépése csak kompakt intervallumon belül változik, valamint ha a tételben szereplő operátor generátora annak a félcsoportnak, melyet a numerikus módszer segítségével közelítünk.
3. **3.1.8. Lemma.** Bebizonyítom, hogy a szekvenciális szeletelés stabilitási kritériumának teljesüléséből következik a Strang-féle és a súlyozott szeletelések stabilitási kritériuma (még az operátorok fordított sorrendjének esetében is). Mindhárom szeletelés stabilitásának vizsgálatakor elegendő tehát csak ezt az egyet megmutatni, azaz hogy léteznek olyan $M \geq 1$ és $\omega \in \mathbb{R}$ konstansok, melyekre

$$\| [S(t/n)T(t/n)]^n \| \leq M e^{\omega t} \quad \text{teljesül minden } t \geq 0 \text{ } n \in \mathbb{N} \text{ esetén.} \quad (\text{S})$$

Az eredmény időbeli és térbeli diszkretizációs módszerek alkalmazása során is érvényben marad (**3.2.7. és 3.2.19. Lemma**).

4. **3.1.10. Állítás.** Chernoff tételének és a Trotter-féle szorzatformulának segítségével (lásd Engel és Nagel [13], III. fejezet, 5.3. és 5.8. Következmények) megmutatom, hogy a szekvenciális, a Strang-féle és a súlyozott szeletelések konvergensek egy adott időpontban, amennyiben az (S) stabilitási feltétel teljesül.
5. **3.2.14.–16. Tételek.** Pazy, illetve Ito és Kappel eredményeiből kiindulva (lásd 6.7. Tétel, [18], Ito és Kappel [15]) beláttam Chernoff tételét közelítő félcsoportok esetére is

(3.2.11. **Tétel**). Segítségével megmutatom, hogy a szekvenciális, a Strang-féle és a súlyozott szeletelések konvergenciája ebben az esetben is az (S)-hez hasonló stabilitási feltételből következik, amennyiben a $(T_n(t))_{t \geq 0}$ és $(S_n(t))_{t \geq 0}$, $n \in N$ közelítő félcsoporthoz, illetve azok A_n és B_n generátoraira az alábbiak teljesülnek:

(i) *Konzisztencia*:

- (a) $\lim_{n \rightarrow \infty} J_n A_n P_n x = Ax$ minden $x \in D(A)$ esetén,
- (b) $\lim_{n \rightarrow \infty} J_n B_n P_n x = Bx$ minden $x \in D(B)$ esetén.

(ii) *Konvergencia*:

- (a) $\lim_{n \rightarrow \infty} J_n T_n(t) P_n x = T(t)x$ minden $x \in D(A)$
és minden egyes tetszőlegesen rögzített $t \geq 0$ esetén,
- (b) $\lim_{n \rightarrow \infty} J_n S_n(t) P_n x = S(t)x$ minden $x \in D(B)$
és minden egyes tetszőlegesen rögzített $t \geq 0$ esetén.

Ekkor a konvergencia teljesül a vizsgált szeletelésekre, azaz az (ACP) probléma $u(t)$ megoldása a megfelelő szeletelésekkel az alábbi formában áll elő minden $x \in X$ esetén:

$$\begin{aligned} u(t) &= \lim_{n \rightarrow \infty} J_n [S(t/n)T(t/n)]^n P_n x, \\ u(t) &= \lim_{n \rightarrow \infty} J_n [T(t/2n)S(t/n)T(t/2n)]^n P_n x, \\ u(t) &= \lim_{n \rightarrow \infty} J_n [\Theta S(t/n)T(t/n) + (1 - \Theta)T(t/n)S(t/n)]^n P_n x, \quad \Theta \in (0, 1), \end{aligned}$$

ahol a konvergencia egyenletes a t -ben kompakt intervallumokon. A J_n és P_n operátorok az X és X_n Banach-terek közötti leképezések, ahol az utóbbi a térbeli rácson értelmezett függvények tere. Ez az eredmény annak az esetnek felel meg, amikor a szeleteléssel kapott részfeladatok megoldásait valamilyen térbeli diszkretizációs módszer segítségével határozzuk meg.

6. **3.2.20.–22. Tételek**. Megmutatom, hogy a szekvenciális, a Strang-féle és a súlyozott szeletelések konvergenciája abban az esetben is érvényben marad, amikor a félcsoporthoz térbeli és időbeli diszkretizációs módszer segítségével közelítjük. Ekkor a térbeli diszkretizációs módszerek minden egyes időrétegen konvergensek, míg az időbeli numerikus módszereknek stabilnak és konzisztensnek kell lenniük, azaz

(i) *Stabilitás*:

- (a) $\| [q_n(t)]^k \| \leq 1$ minden $t \in (0, T]$ és $n, k \in \mathbb{N}$ esetén,
- (b) $\| [r_n(t)]^k \| \leq 1$ minden $t \in (0, T]$ és $n, k \in \mathbb{N}$ esetén,

továbbá $q_n(0) = I$ és $r_n(0) = I$ minden $n \in \mathbb{N}$ esetében.

(ii) *Konzisztencia:*

(a) $\lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{h} (J_n q_n(t) P_n x - x)$ létezik minden $x \in D(A)$ és $n \in \mathbb{N}$ esetén,

(b) $\lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{h} (J_n r_n(t) P_n x - x)$ létezik minden $x \in D(B)$ és $n \in \mathbb{N}$ esetén.

(iii) *Térbeli konvergencia:*

(a) $\lim_{n \rightarrow \infty} J_n q_n(t) P_n x = T(t)x$ minden $x \in D(A)$
és minden egyes tetszőlegesen rögzített $t \in (0, t_0]$ esetén,

(b) $\lim_{n \rightarrow \infty} J_n r_n(t) P_n x = S(t)x$ minden $x \in D(B)$
és minden egyes tetszőlegesen rögzített $t \in (0, t_0]$ esetén.

Ebben az esetben a konvergencia mindhárom vizsgált szeletelésre teljesül, azaz az (ACP) probléma $u(t)$ megoldása minden $x \in X$ esetén az alábbi formában állítható elő:

$$u(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} J_n [r_n(t/n) q_n(t/n)]^n P_n x,$$

$$u(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} J_n [q_n(t/2n) r_n(t/n) q_n(t/2n)]^n P_n x,$$

$$u(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} P_n [\Theta r_n(t) q_n(t) + (1 - \Theta) q_n(t) r_n(t)]^n P_n x, \quad \text{ahol } \Theta \in (0, 1).$$

A 4. fejezetben az alábbi alakú, késleltetést tartalmazó egyenletekre alkalmazott szeletések konvergenciáját tanulmányozom:

$$\begin{cases} \dot{u}(t) = Cu(t) + \Phi u_t, & t \geq 0, \\ u(0) = x \in X, \\ u_0 = f \in L^p([-1, 0], X), \end{cases} \quad (\text{KE})$$

ahol az u_t történeti függvényt a $u_t(\sigma) := u(t + \sigma)$ formulával definiáljuk. A fenti (KE) egyenlet az $\mathcal{E}_p := X \times L^p([-1, 0], X)$, $1 \leq p < \infty$ szorzat Banach-téren az alábbi G operátorhoz tartozó (ACP) absztrakt Cauchy-problémává írható át:

$$G := \begin{pmatrix} C & \Phi \\ 0 & \frac{d}{d\sigma} \end{pmatrix},$$

ahol a G operátor értelmezési tartománya:

$$D(G) := \left\{ \begin{pmatrix} y \\ g \end{pmatrix} \in D(C) \times W^{1,p}([-1, 0], X) : g(0) = y \right\}.$$

Bátkai és Piazzera [1] könyvének 3.3.2. fejezete, valamint Webb [20] munkája nyomán a fenti G operátor kétfajta felbontását is vizsgálom (melyek a korlátos és nemkorlátos Φ késleltetési operátor esetének felelnek meg).

7. **4.1.2. és 4.1.8. Tétel.** Megmutatom, hogy a szekvenciális, a Strang-féle és a súlyozott szeleltetés a $(G, D(G))$ operátor mindkét felbontása esetén konvergens egy adott időpontban, amennyiben a $(C, D(C))$ operátor disszipatív, és a Φ operátor speciális alakú. A konvergenciát numerikus eredményekkel is illusztrálok (lásd Csomós és Nickel [10]).
8. **4.2.5 és 4.2.7. Tétel.** Belátom, hogy a szekvenciális, a Strang-féle és a súlyozott szeleltetések konvergensek a (KE) késleltetést tartalmazó egyenletre alkalmazva a $(G, D(G))$ operátor mindkét felbontása esetén abban az esetben is, amikor a szelelteléssel kapott részfeladatok megoldásaira konzisztens és konvergens térbeli diszkretizációt alkalmazunk (lásd Bátka, Csomós és Nickel [2]).

Az 5. fejezetben a totális idődiszkretizációs eljárás, azaz a szeleltetés és a vele együtt alkalmazott időbeli numerikus módszer rendjét vizsgálom (lásd Csomós és Faragó [9]).

9. **5.5. Táblázat.** Analitikus és numerikus számítások segítségével megmutatom, hogy amennyiben a szelelteléssel kapott részfeladatok megoldására valamilyen időbeli numerikus módszert alkalmazunk, fellép az úgynevezett *kölcsönhatási hiba*. A totális idődiszkretizációs eljárás rendje a szeleltetés és a numerikus módszer rendjének minimumával egyenlő.
10. **5.5.–5.7. Ábrák.** Bevezetek egy másik újfajta hiba-fogalmat is, mellyel a szeleltetés és az időbeli numerikus módszer segítségével kapott megoldás totális hibája mérhető abban az esetben, amikor a probléma pontos megoldása ismeretlen. Ezt a fajta hibát *gyakorlati hibának* nevezem el, mivel számítása a gyakorlatban, a pontos megoldások ismerete hiányában is lehetséges a numerikus megoldásokból. Megmutatom, hogy a gyakorlati hiba viselkedése hasonló a totális hibához, alkalmazható tehát annak becslésére.

A 6. fejezetben bemutatom, hogyan lehet a szeleltelési eljárás alkalmazásával az alábbi, a levegőszennyezés terjedését leíró modell (lásd Zlatev [22]) számítási idejét csökkenteni:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \left(\frac{\partial (uc)}{\partial x} + \frac{\partial (vc)}{\partial y} \right) + K \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) + E - \sigma c, \quad (\text{LTM})$$

ahol a $c(x, y, t)$ ismeretlen függvény a szennyezőanyag helytől és időtől függő koncentrációját jelöli. Az u , v , K , E és σ függvények a különböző fizikai folyamatok paraméterei, ezek: az advekció, a diffúzió, a kibocsátás és az ülepedés.

11. **6.10. Ábra.** Bemutatom, hogy a szeleltelési eljárás alkalmazása a fenti (LTM) légszennyezés terjedését leíró modellre rövidebb számítási időt eredményez, ha a különböző részfeladatok megoldására különböző numerikus módszereket és időlépéseket választunk. Összehasonlításképpen az advekciós részfeladatot upwind és szemi-Lagrange-i sémával is megoldom. Mivel az utóbbi nagyobb időlépést is megenged, kevesebb számítási lépést, azaz rövidebb számítási időt igényel (lásd Csomós [4]).

Következtetések

Doktori értekezésem eredményeiből az alábbi következtetések vonhatóak le. A szekvenciális szeletelés stabilitási feltételének teljesülése mellett mindhárom vizsgált szeletelési eljárás konvergens a részfeladatok pontos megoldásának ismeretében. Konvergensek abban az esetben is, amikor azokat stabil, konzisztens és konvergens térbeli és időbeli diszkretizációs módszerek segítségével közelítjük. Az utóbbi esetben a totális hiba rendje mindig a szeletelés és a numerikus módszer rendjének minimumával egyenlő, azaz a teljes idő-diszkretizáció rendje alacsonyabb lehet a szeletelésénél, ha a numerikus módszer rendjét és időlépését nem megfelelően választjuk meg.

A fenti eredményekből következik a késleltetést tartalmazó egyenletekre alkalmazott szeletelések konvergenciája korlátos és nemkorlátos késleltetési operátor esetében is. Láthatjuk, hogy a légszennyezés terjedését leíró modell számítási ideje lerövidíthető az operátorszeletelés alkalmazásával, ha a különböző részfeladatok numerikus megoldására a leginkább megfelelő időlépésű numerikus módszereket választunk.

Hivatkozások

- [1] A. Bátkai, S. Piazzera, *Semigroups for Delay Equations*, A K Peters, Wellesley, Massachusetts. (2005)
- [2] A. Bátkai, P. Csomós, and G. Nickel, Splitting and approximations for delay equations (előkészületben).
- [3] P. Csomós, Operator splitting procedures for air pollution transport models, *Lecture Notes in Computational Sciences* **3743**, Springer-Verlag, 331–338. (2006)
- [4] P. Csomós, Analysis of a transport model applying operator splitting and semi-Lagrangian method, *International Journal of Computational Science and Engineering* (megjelenés alatt).
- [5] P. Csomós: Analytical solutions and numerical experiments for optimizing operator splitting procedures, *Időjárás, Quarterly Journal of the Hungarian Meteorological Service* **110** 3-4., 379–415. (2006)
- [6] P. Csomós, Some aspects of interaction between splitting procedures and numerical methods, in K. Georgiev et al. (Eds.), NATO ARW Advances in Air Pollution Modelling for Environmental Security, *NATO Science Series*, Springer-Verlag, 77–91. (2005)
- [7] P. Csomós, I. Faragó, and Á. Havasi, Weighted sequential splittings and their analysis, *Computers and Mathematics with Applications* **50**, 1017–1031. (2005)

- [8] P. Csomós, I. Dimov, I. Faragó, Á. Havasi, and Tz. Ostrowsky, Computational complexity of weighted splitting scheme on parallel computers, *International Journal of Parallel, Emergent and Distributed Systems* **223**, 137–147. (2007)
- [9] P. Csomós, I. Faragó, Error analysis of the numerical solution of split differential equations, *Mathematical and Computer Modelling* (megjelenés alatt).
- [10] P. Csomós, G. Nickel, Operator splittings for delay equations, *Computers and Mathematics with Applications* (megjelenés alatt).
- [11] P. Csomós, I. Faragó, Á. Havasi, Operator splitting and global error analysis, in D. Melas and D. Syrakov (Eds.), NATO ARW Air Pollution Processes in Regional Scale, *Kluwer Academic Publishers*, 37–44. (2002)
- [12] P. Csomós, E. Sikolya, Numerical methods for split differential equations (előkészületben).
- [13] K.–J. Engel, R. Nagel, *One-Parameter Semigroups for Linear Evolution Equations*, Springer-Verlag, Berlin. (2000)
- [14] K. Ito, F. Kappel, *Evolution Equations and Approximations*, World Scientific, River Edge, N. J. (2002)
- [15] K. Ito, F. Kappel, The Trotter–Kato theorem and approximation of PDE’s, *Mathematics of Computation* **67** No. 221, 21–44. (1998)
- [16] P. D. Lax, *Functional Analysis*, John Wiley & Sons, New York. (2002)
- [17] G. I. Marchuk, Some application of splitting-up methods to the solution of mathematical physics problems, *Applik. Mat.* **13** (2), 103–132. (1968)
- [18] A. Pazy, *Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations*, Springer-Verlag, New York. (1983)
- [19] G. Strang, On the construction and comparison of difference schemes, *SIAM J. Numer. Anal.*, September, Vol. 5, No. 3, 506–517. (1968)
- [20] G. F. Webb, Functional differential equations and nonlinear semigroups in L^p -spaces, *Journal of Differential Equations*, **20**, 71–89. (1976)
- [21] V. A. Zagrebnov, *Topics in the Theory of Gibbs Semigroups*, Leuven University Press. (2003)
- [22] Z. Zlatev, *Computer Treatment of Large Scale Air Pollution Models*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht. (1995)