Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Karoliny Lademann

Metody aproksymacji numerycznej liniowego równania Kleina-Gordona z masą czasowo- i przestrzenno-zależną

Łukasz Płociniczak
Katedra Matematyki Stosowanej, Wydział Matematyki,
Politechnika Wrocławska

24 lipca 2023

Rozprawa doktorska mgr Karoliny Lademann została napisana pod kierunkiem dr hab. Karoliny Kropielnickiej, prof. IMPAN. Praca jest odpowiedniej długości dziełem składającym się z 5 rozdziałów oraz bibliografii. Chciałbym od razu zwrócić uwagę na fakt, że większość wyników zaprezentowanych w rozprawie jest oryginalna i umieszczona w trzech pracach [1, 3, 2]. Jedna z nich ukazała się już w *Applied Mathematics Letters*. Sądzę, że pozostałe dwie również zostaną rychło opublikowane.

1 Charakterystyka wyników

Głównym przedmiotem rozprawy jest konstrukcja oraz analiza metod numerycznych służących rozwiązywaniu niejednorodnego równania falowego w postaci zwanego w fizyce kwantowej jako równanie Kleina-Gordona (w odpowiednim układzie współrzędnych)

$$\partial_t^2 \psi = \Delta\psi + f(x,t)\psi, \tag{1}$$

ze standardowo zadanymi warunkami początkowymi. Dziedziną, na której rozważa się powyższe równanie jest $(x,t) \in \mathbb{T}^d \times (0,T)$, gdzie $\mathbb{T}^d$ jest d-wymiarowym torusem, a $T > 0$ maksymalnym czasem. Zgodnie z fizyczną interpretacją równania Kleina-Gordona nieznana funkcja ψ opisuje funkcję falową cząstki o masie f. Równanie zostało zaproponowane około wieku temu jako opisujące relatywistyczną cząstkę kwantową (Schrödinger, Fock, Klein, Gordon). Zwykle przyjmuje się, że masa nie może się zmieniać ani w czasie ani w przestrzeni, jednak w łatwy sposób można wtedy pokazać, że gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w punkcie (x,t) może być ujemna. Częściowo problem ten można rozwiązać pozwalając na to, żeby $f = f(x)$ jednak w oczywisty sposób traci się wtedy niezmienniczość na transformację Lorenza, którą przywrócić można rozważając pełną zależność masy od czasu i przestrzeni, to jest $f = f(x,t)$.

Na pierwszy rzut oka wydaje się, że równanie Kleina-Gordona (1) nie powinno powodować żadnych niezwykłych trudności obliczeniowych. Jest przecież ono liniowym równaniem rzędu drugiego, dla którego istnieje szereg efektywnych schematów numerycznych. W wielu miejscach pojawia się jednak potrzeba na to, aby funkcja masy zawiera w sobie oscylacje o bardzo dużej częstotliwości. Modelowo może mieć ona postać

$$f(x,t) = \alpha(x,t) + \sum_{|n|\leq N} \alpha_n(x,t)e^{i\omega_n t}, \tag{2}$$

w których niektóre częstotliwości ω_n mogą być bardzo duże. Dokładne rozwiązanie numeryczne staje się wtedy trudne do otrzymania w rozsądnym czasie obliczeniowym. Klasyczne metody numeryczne wymagałyby wybrania bardzo drobnego kroku dyskretyzacji h, to znaczy $h < (\max_n \omega_n)^{-1}$. W zastosowaniach praktycznie zawsze jest to niemożliwe. Doktorantka w swojej rozprawie proponuje trzy metody numeryczne, które rozwiązują ten problem i pozwalają na wyznaczenie rozwiązania z krokiem h niezależnym od częstotliwości oscylacji. Klasycznym podejściem do analizy schematu numerycznego jest udowodnienie jego rzędu zbieżności, czyli pokazania, że błąd metody jest mniejszy niż Ch^p, dla pewnych dodatnich stałych C i p. Zauważmy, że nawet gdy rząd p jest duży to błąd metody wciąż może nie być bliski zero gdy stała C jest rosnącą funkcją częstotliwości ω_n (a dzieje się tak w klasycznych metodach numerycznych). Tutaj leży źródło problemu i Doktorantka pokazuje jak można go rozwiązać.

Pierwsza z rozważanych metod jest wyprowadzona w Rozdziale 2 i dotyczy oscylującej funkcji masy

$$f(x,t) = \sum_{|n|\leq N} \alpha_n(x,t)e^{in\omega t}, \tag{3}$$

to jest sytuacji, w której oscylacje są harmoniczne o podstawowej częstotliwości ω. Zauważmy, że nie występuje tutaj człon wolno-zmienny $\alpha(x,t)$. Metoda numeryczna opiera się na standardowym zapisaniu równania drugiego rzędu po czasie (1) jako układ dwóch równań pierwszego rzędu. Następnie rozwiązanie równania poszukiwane jest jako *ansatz* będący rozwinięciem asymptotycznym w ujemne potęgi ω dla $\omega \to \infty$. Współczynniki w tym rozwinięciu z definicji nie zależą od częstotliwości i mogą być wyznaczone standardowymi schematami numerycznymi. Wydaje się, że takie podejście można nazwać quasi-numerycznym, gdyż bazowe równanie nie jest dyskretyzowane od samego początku. Niemniej ilustracje numeryczne pokazują wydajność metody dla szybko-oscylującej funkcji masy. Należy się również spodziewać, że dla wolnych oscylacji metoda przestaje być użyteczna. Wyniki te opierają się na pracy [1].

W kolejnym rozdziale Doktorantka proponuje schemat numeryczny zupełnie innej natury, dzięki któremu jest w stanie rozwiązywać równanie Kleina-Gordona zarówno z szybkimi jak i wolnymi oscylacjami. Metoda ta jest oparta na wzorze Duhamela i okazuje się być rzędu trzeciego niezależnie od częstotliwości oscylacji. Wyniki z tego rozdziału znajdują się w pracy [2]. Znowu rozważamy tutaj równoważny układ równań pierwszego rzędu, który tym razem można „odwrócić" za pomocą wzoru Duhamela. Następnie dyskretyzujemy wszystkie wielkości różnicami skończonymi aby otrzymać jawny schemat numeryczny (jest to przykład tzw. metod wykładniczych). Na szczególną uwagę zasługują tutaj dwa zabiegi, dzięki którym Pani Lademann jest w stanie zaprojektować metodę, której błąd rzeczywiście nie rośnie wraz ze wzrostem częstotliwości funkcji masy. Jest to

Twierdzenie 9, w którym Doktorantka sprawnie transformuje pierwotny schemat numeryczny powstały dzięki wzorowi Duhamela do równoważnej postaci, która prowadzi do jednostajnego względem ω oszacowania błędu. Drugi zabieg to użycie metody Filon do numerycznego obliczania całek oscylujących postaci

$$\int_0^h g(s)e^{i\omega s}ds, \quad \omega \gg 1, \tag{4}$$

za pomocą interpolacji wielomianowej funkcji nieoscylującej g. Dzięki temu jesteśmy w stanie kłopotliwe oscylujące całki obliczyć analitycznie. Najważniejszym wynikiem rozdziału jest Lemat 12 i płynące z niego Twierdzenie 14 mówiące o dokładnym i jednostajnym ze względu na częstotliwość oszacowaniu na błąd. Jak zostało już wspomniane metoda jest rzędu trzeciego co potwierdzają obliczenia numeryczne. Oprócz tego schemat ten jest uniwersalny i można go zastosować do dowolnej funkcji masy f. Doktorantka wykazała się tu bardzo dużą biegłością techniczną oraz zrozumieniem istoty przybliżeń numerycznych.

Rozdział 4 omawia trzecią metodę numeryczną opartą na rozwinięciu Magnusa. Ta metoda jest również uniwersalna ze względu na funkcję masy oraz przewyższa dwie poprzednie zarówno dokładnością jak i złożonością obliczeniową. Wyniki te umieszczone są w preprincie [3]. Konstrukcja metody jest dosyć złożona, ale wszystkie kroki oraz dowody oszacowań błędów przedstawione są w sposób czytelny. W skrócie rozwiązanie równania Kleina-Gordona zapisujemy jako równanie abstrakcyjne

$$z'(t) = A(t)z(t), \tag{5}$$

które całkuje się po małym przedziale aby, analogicznie jak w równaniach zwyczajnych, otrzymać rozwiązanie zawierające eksponentę. Istota metody polega na zastosowaniu rozwinięcia Magnusa aby przybliżać całki z operatora $A(t)$ jako szereg iterowanych całek z zagnieżdżonych komutatorów. Następnie dzięki metodzie Stranga rozdzielenia eksponent Doktorantka proponuje sposób efektywnego wyznaczania kolejnych przybliżeń. Metoda, a tak naprawdę rodzina metod, jest bardzo pomysłowa i wyprowadzenie jej wymaga sporych umiejętności analitycznych. Co cieszy, że mimo skomplikowania technicznego Doktorantka jest w stanie dokładnie oszacować wszystkie z wielu składników budujących całkowity błąd schematu numerycznego. Jak zwykle rozdział kończy wyczerpujący zestaw ilustracji numerycznych.

2 Uwagi

Pracę czyta się bardzo dobrze i czytelnik nie powinien mieć kłopotów ze zrozumieniem przekazywanych idei. Oczywiście nie da się ustrzec od drobnych literówek, na przykład:

- str. 4, wers -3: powinno być „przeze mnie",
- str. 7, wers -3: powinno być „zależy od ilości funkcji",
- str. 8, Przykład 1: powinno być „równanie Kleina-Gordona" (podobnie str.10, Przykład 2),

- w kilku miejscach pojawia się metoda „niezmieniania stałej", a oczywiście powinno być „uzmienniania stałej",
- str. 13, środek czwartego akapitu: „Gaussa-Legendre'a",
- pod koniec dowodu Twierdzenia 11 powinno być „co dowodzi tezy twierdzenia",
- str. 26, trzeci akapit: „poszukujemy funkcji",
- wiele nazwisk w bibliografii jest napisanych od małej litery.

W wielu miejscach pojawiają się również powtórzenia oraz wydaje się, że graficznie rozprawa mogłaby zyskać na nie umieszczaniu pustego miejsca między akapitami. Wydaje mi się również, że korzystne byłoby rozszerzenie części omawiającej fizyczne podstawy badanego równania. Dałoby to szerszy kontekst i motywację do badania takiego zagadnienia, które jest odmienne od ortodoksyjnego równania Kleina-Gordona. W szczególności chciałbym przeczytać coś więcej o „mechanice kwantowej ciał niebieskich". Czy chodzi tu o gwiazdy czy bardziej egzotyczne obiekty? Niektóre rysunki mogłyby być większe i zapisane w lepszej, wektorowej jakości. Również numeracja twierdzeń byłaby łatwiejsza w nawigowaniu gdyby nie resetowała się w każdym z rozdziałów. Chciałbym zaznaczyć, że powyższe usterki są bardzo drobne i nie wpływają zarówno na pozytywny odbiór jak i na ocenę rozprawy.

Przejdę teraz do moich uwag natury matematycznej. Prosiłbym Doktorantkę o krótkie ustosunkowanie się do nich podczas publicznej obrony.

1. Przy jakich założeniach na regularność warunków początkowych oraz funkcji masy $f(x, t)$ rozwiązanie równania Kleina-Gordona istnieje i jest jednoznaczne? W jakim sensie? Jaka jest jego regularność? O założeniach mowa jest dopiero w Podrozdziale 4.1. Chyba warto by było ujednolicić notację i na samym początku rozprawy omówić to zagadnienie.

2. Podobnie jak wyżej: przy jakich założeniach możemy twierdzić, że rozwiązanie równania Kleina-Gordona jest postaci asymptotycznej (2.3) i (2.4)? W jakim sensie te szeregi zbiegają?

3. Czy istnieje jakaś ścisła reguła wyboru liczby N określającej ilość wyrazów w szeregu (2.7)?

4. Czy wszystkie obliczenia numeryczne były liczone na superkomputerze? Czy można zaproponowane metody stosować na komputerach osobistych? Przy jakich ograniczeniach?

5. Jaka jest motywacja Twierdzenia 9 z Rozdziału 3? To znaczy skąd wziął się pomysł żeby akurat w ten sposób manipulować sinusami i kosinusami? Uważam, że ten pomysł jest bardzo dobry.

6. Dlaczego w linijce zaraz poniżej wzoru (3.19) występuje znak równoważności $\equiv$? Co on oznacza?

7. Jak Doktorantka zaznacza już na samym początku rozprawy, będzie badać jedynie zbieżność swoich metod po czasie, dlatego moje następujące pytanie powinno być traktowane w sensie „rozwojowym". Jasne jest, że dyskretyzacja przestrzeni wprowadzi ograniczony operator G zgodnie z Uwagą 13 z Rozdziału 3. Wiemy jednak, że aby zapewnić stabilność metody jawnej musi być spełniony pewien warunek CFL. Czy jest szansa na jawne jego sformułowanie na przykład dla metody Duhamela?

8. Uwagi do Twierdzenia 14 z Rozdziału 3.

   (a) Od czego dokładnie zależy (albo od czego nie zależy) stała C w sformułowaniu twierdzenia?

   (b) Co dokładnie oznacza stwierdzenie, że „ρ_k jest górnym ograniczeniem $\|\epsilon_k\|$ dla $k = 0, 1, ..., K$"? Nie mogłem tu uchwycić istoty wprowadzenia tego nowego oznaczenia. Proszę również wyjaśnić skąd wynikają oszacowania na ρ_k i ρ'_k występujące zaraz poniżej wzoru (3.22).

   (c) Ciąg oszacowań powyżej wzoru (3.23) wymaga większej ilości objaśnień i usprawnień. W szczególności skąd mamy ostatnią równość? Czy ostateczna stała stojąca przy $\mathcal{R}'$ nie powinna zawierać między innymi eksponenty oraz ostatecznego czasu T? Z pierwszej linijki wynika, że

$$\rho'_K \leq \mathcal{R}' \frac{(1 + 3M\|G\|h)^{K-1} - 1}{3M\|G\|h} = \mathcal{R}' \frac{K}{3M\|G\|} \frac{\left(1 + \frac{3M\|G\|h(K-1)}{K-1}\right)^{K-1} - 1}{hK}$$
$$\sim \mathcal{R}' K \frac{\exp(3M\|G\|T) - 1}{3M\|G\|T},$$

   gdy $h \to 0$ oraz $hK \to T$ (powyższą zależność asymptotyczną można poprawić na $\leq$).

   Oczywiście jest to tylko stała niezależna od h więc teza twierdzenia jest jak najbardziej prawdziwa.

Chciałbym podkreślić, że powyższe uwagi nie umniejszają wysokiej jakości wyników uzyskanych przez Panią Lademann i służą jedynie uzupełnieniom i dalszym rozwinięciom.

3 Konkluzje

Moja ocena rozprawy doktorskiej Pani mgr Karoliny Lademann jest bardzo dobra. Doktorantka pokazała, że świetnie orientuje się w obszarze metod numerycznych oraz niuansów z nimi związanych. Dodatkowo udowodniła, że bardzo biegle i sprawnie posługuje się nietrywialnym rachunkiem macierzowym oraz różniczkowym. Liczne przykłady numeryczne są dobrane adekwatnie do potrzeb weryfikacji własnych wyników teoretycznych, co wskazuje na dużą dojrzałość matematyczną, zrozumienie analizy numerycznej oraz implementacji. Według mnie uzyskane wyniki są ważne dla rozwoju metod numerycznych dla równań szybko-oscylujących i uważam, że Doktorantka umiejętnie je przedstawiła oraz przekonała czytelnika o zasadności podjęcia takiego kierunku badań.

Z całym przekonaniem uważam, że przedstawiona rozprawa doktorska spełnia ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim w dyscyplinie matematyka. **Wnoszę o dopuszczenie Doktorantki do dalszych etapów przewodu doktorskiego.**

Łukasz Płociniczak

....

dr hab. inż. Łukasz Płociniczak, prof. PWr

Literatura

[1] Marissa Condon, Karolina Kropielnicka, Karolina Lademann, and Rafał Perczyński. Asymptotic numerical solver for the linear Klein–Gordon equation with space-and time-dependent mass. *Applied Mathematics Letters*, 115:106935, 2021.

[2] Karolina Kropielnicka and Karolina Lademann. Third order, uniform in low to high oscillatory coefficients, exponential integrators for Klein-Gordon equations. *arXiv preprint arXiv:2212.13762*, 2022.

[3] Karolina Kropielnicka, Karolina Lademann, and Katharina Schratz. Effective highly accurate integrators for linear Klein-Gordon equations from low to high frequency regimes. *arXiv preprint arXiv:2112.08908*, 2021.