Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Rafała Perczyńskiego

Computational methods for highly oscillatory partial differential equations

Łukasz Płociniczak
Katedra Matematyki Stosowanej, Wydział Matematyki,
Politechnika Wrocławska

25 czerwca 2024

Rozprawa mgr. Rafała Perczyńskiego została napisana pod opieką dr. hab. Antoniego Augustynowicza. Dzieło oparte jest częściowo na dwóch opublikowanych pracach [3, 4].

1 Charakterystyka wyników

Rozprawa dotyczy konstrukcji oraz analizy kilku metod numerycznych służących rozwiązywaniu następującego zagadnienia

$$\begin{cases} u_t = \mathcal{L}u + f(x,t)u, & x \in \Omega \subset \mathbb{R}^m, \quad t \in (0,T] \\ u(x,0) = 0, & x \in \Omega, \\ u(x,t) = 0, & x \in \partial\Omega, \end{cases} \tag{1}$$

gdzie $\mathcal{L}$ jest operatorem liniowym. Najważniejszy dla pracy element równania to źródło, o którym zakładamy, że jest szybko oscylujące, to znaczy

$$f(x,t) = \sum_{n=-N,\ n\neq 0}^{N} \alpha_n(x,t) e^{in\omega t}, \quad N \in \mathbb{N}, \quad \omega \gg 1.$$

Takie równania pojawiają się w mechanice kwantowej w różnych sytuacjach, które opisuje równanie Schrödingera (Doktorant podaje kilka przykładów). Jak zaznacza Autor standardowe metody numeryczne służące rozwiązywaniu takiego typu równań nie są dostatecznie dokładne. Inaczej mówiąc, jeśli $h > 0$ jest krokiem czasowym metody, to dla zbieżności zwykle wymagany jest warunek $h\omega < 1$. Dla dużych częstotliwości wymusza to zastosowanie bardzo małych kroków dyskretyzacji. Ten warunek jest zwykle nie do spełnienia w konkretnych zastosowaniach ze względu na olbrzymi koszt obliczeniowy. Podjęty temat analizy specjalistycznych schematów numerycznych jest zatem zasadny.

Rozprawę rozpoczyna ciekawy Wstęp z grubsza opisujący podjętą tematykę, pojawiające się problemy i propozycje ich rozwiązania. W delikatny sposób wprowadza to czytelnika w omawiane zagadnienia. Ze względu na to, że tematyka dotyczy stosowania ścisłej matematyki do analizy zagadnień, które pochodzą z fizyki, bardzo dobrym zabiegiem byłoby dokładne omówienie motywacji konieczności zajmowania się takimi równaniami. W szczególności - wyprowadzeń fizycznych. Na pewno wzbogaciłoby to zawartość rozprawy. Niestety Autor podchodzi do tego w sposób zdawkowy i podsumowuje fizyczne motywacje jednym zdaniem (nie wiem dlaczego ujmuje słowa *real-life* w cudzysłów). Nie jest to wielkie uchybienie, ale czytelnikowi zajmującemu się matematyką stosowaną pozostaje lekki niedosyt.

Doktorant proponuje dwa podejścia do badanego zagadnienia. Pierwszym jest użycie rozwinięć asymptotycznych rozwiązania

$$u(x,t) = p_{0,0}(x,t) + \sum_{r=1}^{R} \omega^{-r} \sum_{s=-S}^{S} p_{r,s}(x,t) e^{is\omega t} + \omega^{-R-1} E_{R,S}(x,t), \quad \omega \to \infty. \tag{2}$$

Jak widzimy jest to reprezentacja rozwiązania jako szereg względem ujemnych potęg ω, co dla dużych jej wartości jest logicznym zabiegiem. Co ważne, Doktorant nie zakłada powyższej postaci rozwiązania (1), a pokazuje, że może być ono rozwinięte w zbieżny szereg tej postaci. Idea przybliżenia polega na wzięciu kilku pierwszych wyrazów tego szeregu w nadziei, że będą miały zakładaną dokładność. Według mnie takie podejście raczej nie powinno być nazywane „numerycznym" gdyż wszystko polega jedynie na obliczaniu kolejnych wyrazów szeregu. Niemniej w Rozdziale 3 Autor pokazuje, że bardzo sprawnie posługuje się narzędziami analizy funkcjonalnej i teorii półgrup. Idea dowodu poprawności podejścia asymptotycznego polega na zastosowaniu szeregu Neumanna, czyli reprezentacji rozwiązania równania operatorowego za pomocą nieskończonego szeregu, którego wyrazy są iteracjami operatora powstałego w wyniku zastosowania reguły Duhamela. Przez samą konstrukcję takie podejście od razu sugeruje, że obliczanie kolejnych wyrazów szeregu Neumanna może być niebywale złożone obliczeniowo. Tak jest w rzeczywistości, ale jak sam Autor zauważa w praktyce możemy ograniczyć się jedynie do kilku składników. Pan Perczyński z dużą biegłością oraz cierpliwością bada tak powstałe zagnieżdżone wyrażenia i w sposób ścisły pokazuje zbieżność (2) wraz z oszacowaniem na błąd (rozważa nawet sytuację rezonansową).

Druga zaproponowana metoda, tym razem już w pełni, numeryczna opisana jest w Rozdziale 4. Jest ona również oparta na idei rozwinięcia rozwiązania w szereg Neumanna, ale tym razem jego wyrazy, które są całkami oscylującymi, oblicza się numerycznie. Odpowiednia metoda całkowania dobrana jest z rodziny kwadratur Filon, czyli idealnie skrojonych do tego typu zadań. Autor znajduje oszacowanie na błąd *jednokrokowy*, który nazywa „lokalnym". Wszystkie dowody są standardowe, ale bardzo techniczne i wymagają sporej wprawy w manipulowaniu całkami. Cieszy dbałość o szczegóły, to znaczy zdefiniowanie wszystkich występujących przestrzeni funkcyjnych oraz dobranie odpowiedniej notacji. Głównym wynikiem jest oszacowanie rzędu błędu lokalnego, które może być uniezależnione od częstotliwości oscylacji.

Każda metoda zilustrowana jest kilkoma obliczeniami numerycznymi, które mają za zadanie praktycznie zweryfikować otrzymane wcześniej rezultaty. Rozprawa kończy się podsumowaniem, w którym Autor wymienia kilka możliwości rozwoju umieszczonych w pracy wyników.

2 Uwagi

Przejdę teraz do uwag natury edytorskiej.

1. Rozprawa napisana jest w języku angielskim. Niestety w wielu miejscach występują błędy językowe, a w szczególności trudność w czytaniu sprawia brak odpowiednich rodzajników. Czasami proza sprawia wrażenie niespójnej. Domyślam się, że taki zabieg był spowodowany chęcią wykorzystania opublikowanych wyników w Rozprawie *ad verbum*. Jednak wtedy złożenie zbioru artykułów wraz z autoreferatem byłoby odpowiednie. W bieżącym przypadku rozprawy jako spójnego dzieła wybór języka polskiego w redakcji byłby bardziej trafny.

2. O ile Wstęp bardzo ciekawie wprowadza czytelnika w istotę tematyki, to zestawienie wyników Autora z tymi z literatury jest zbyt zdawkowe. Dobrze by było gdyby znalazło się tam obszerne omówienie innych rezultatów. Numeryczne rozwiązywanie równań z szybkimi oscylacjami ma długą historię, bardzo wielu specjalistów oraz ważnych wyników. Autor co prawda wymienia prace, między innymi, Arieh Iserlesa, Marissy Condon, Karoliny Kropielnickiej czy Jesúsa Sanz-Serny, ale omówienie ich jest nazbyt powierzchowne by było zajmujące.

3. W niektórych miejscach brakuje sprecyzowania wyrażenia granicznego przy wyrażeniach asymptotycznych typu O.

Jak wspomniałem powyżej Doktorant bardzo biegle posługuje się analizą funkcjonalną oraz z wytrwałością i skrupulatnością przeprowadza swoje technicznie skomplikowane dowody. Cieszy fakt, że cała wyłożona teoria jest zbudowana od podstaw i wszystko jest dobrze zdefiniowane. Mam kilka uwag natury merytorycznej. Proszę Doktoranta do ustosunkowania się do nich podczas obrony.

1. Czy możliwa jest konstrukcja oraz analiza zaproponowanych metod od razu dla równań w większej ogólności? W kilku miejscach rozprawy Autor twierdzi, że jego wyniki można zastosować również do równania falowego. Czy da się to uściślić?

2. Autor wspomina, że wyniki z Rozdziału 3 są uogólnieniami rezultatów z pracy opublikowanej wraz z Karoliną Kropielnicką [2] (ukazała się w roku 2024). W jaki wymiarze są to uogólnienia? Czy oryginalny pomysł rozwinięcia asymptotycznego pochodził właśnie z tego artykułu? Wydaje się też, że czytelnik mógłby skorzystać z porównania drugiej metody z wynikami z [1] (tej pracy brakuje w spisie literatury).

3. Bardzo proszę o uściślenie następującego zagadnienia. W Twierdzeniu 14 udowodnione jest oszacowanie na błąd drugiej metody w pierwszym kroku (i tylko w pierwszym). Podczas iteracji w czasie taki błąd będzie propagował się w przyszłość. W pierwszym kroku mamy rząd błędu 4, który poprzez akumulację powinien redukować się do 3 (zauważa to Autor przy obliczeniach numerycznych). Najistotniejsze byłoby tutaj zatem oszacowanie błędu w dowolnej chwili czasowej $t_n > 0$ (lub, jeszcze lepiej, globalnie w czasie). Wtedy mielibyśmy twierdzenie o zbieżności, a w tym momencie mamy jedynie oszacowanie błędu kwadratury Filon. Dlaczego Autor nie udowodnił zbieżności? Czy pojawienie się szeregów Neumanna powoduje bardzo duże trudności dowodowe?

4. Nigdzie w Rozprawie nie pojawia się słowo „stabilność". W jaki sposób Autor poradził sobie z tym zagadnieniem? Czy użycie szeregu Neumanna w jakimś stopniu daje nam metodę bezwarunkowo stabilną?

5. W części 2.2.1 pojawia się stwierdzenie, że reguła trapezów bardzo dokładnie przybliża całkę. Dlaczego? Jak dokładnie?

6. W Rozdziale 3.7 mówiącym o przykładach numerycznych dla metody asymptotycznej brakuje wykresu błędu względem ilości wyrazów przybliżenia. To, że błąd maleje wraz z częstotliwością jest dosyć oczywiste.

7. Dlaczego na Rys. 4.4 błędy dla najmniejszych h się wysycają i stają się niezależne od ω?

8. Jaka jest szansa udowodnienia podobnych rezultatów dla równań semi- lub quasiliniowych?

9. W jaki sposób w Rozdziale 4.3 liczone są błędy numeryczne? Globalnie czy lokalnie w czasie?

3 Konkluzje

Według mojej oceny rozprawa Pana Perczyńskiego stoi na dobrym (ale nie bardzo dobrym). Zdecydowanie cieszy fakt sprawnego posługiwania się narzędziami analizy funkcjonalnej. Wyprowadzone metody są ciekawe jednak ich oryginalność nie jest dostatecznie zaakcentowana i uzasadniona. W szczególności Autor zbyt mało miejsca poświęca dokładnemu zestawieniu swoich wyników z tymi z literatury (obydwie metody zostały już wcześniej zaproponowane przez innych matematyków). Czytelnik ma zatem trudności w ocenieniu, które zaproponowane metody są istotnie nowe, co jest ważne przy lekturze rozprawy doktorskiej. Niedosyt pozostawia również brak dowodu zbieżności drugiej metody. Analiza błędu w pierwszym kroku nie jest wystarczająca aby mówić o dokładności schematu zwłaszcza, że Autor nie wspomina o stabilności. Można odnieść wrażenie, że Doktorant nie do końca rozumie istotę analizy numerycznej.

Pomimo powyższej wymienionych uchybień i braków, Autor pokazał swój warsztat i umiejętności badania metod numerycznych na porządnym ścisłym poziomie. Uważam, że przedstawiona rozprawa doktorska w dostatecznym stopniu spełnia ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane rozprawom doktorskim w dyscyplinie matematyka. **Wnoszę o dopuszczenie Doktoranta do dalszych etapów przewodu doktorskiego.**

Łukasz Płociniczak

....

dr hab. inż. Łukasz Płociniczak, prof. PWr