

KAROLINA KROPIELNICKA

AUTOREFERAT

POSIADANE DYPLOMY

- Dyplom doktora nauk matematycznych, Uniwersytet Gdański, grudzień 2007
tytuł rozprawy: *Uwikłane metody różnicowe dla parabolicznych równań różniczkowo funkcyjnych*,
(z wyróżnieniem; promotor – Prof. Dr Hab. Z. Kamont)
- Dyplom magistra matematyki, Uniwersytet Gdański, listopad 2001
tytuł rozprawy: *Logika temporalna struktur częściowo uporządkowanych*

DOTYCHCZASOWE ZATRUDNIENIE

- Od października 2016
Adiunkt
Instytut Matematyczny,
Polskiej Akademii Nauk,
- Od października 2014
Adiunkt
Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki,
Instytut Matematyki, Uniwersytet Gdański,
- Październik 2012 – wrzesień 2014
Urlop wychowawczy
- Wrzesień 2010 – Październik 2012
Staż podoktorski (opiekun Prof. Arieh Iserles)
Department of Applied Mathematics and Theoretical Physics
Centre for Mathematical Sciences, University of Cambridge, UK
- Marzec 2008 – sierpień 2010
Adiunkt
Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki,
Instytut Matematyki, Uniwersytet Gdański,
- Październik 2004 – grudzień 2007
Doktorantka
Środowiskowe studia doktoranckie w zakresie matematyki i w zakresie informatyki prowadzone przez Wydział Matematyki, Informatyki i Mechaniki Uniwersytetu Warszawskiego przy udziale Wydziału Matematyki, Fizyki i Informatyki Uniwersytetu Gdańskiego oraz Wydziału Matematyki i Informatyki Uniwersytetu Mikołaja Kopernika
- Październik 2003 – Luty 2008
Asystentka
Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej, Politechnika Gdańska
- July 2000 – May 2002
Programistka
Laboratorium Matematyczno-Informatyczne LabNet S.A., Gdańsk

ROZPOZNAWALNOŚĆ W ŚRODOWISKU NAUKOWYM

W ostatnim roku moja praca została doceniona następującymi wyróżnieniami:

- 2017–2020: Grant NCN (HARMONIA),
projekt nr. 2016/22/M/ST1/00257, kierownik,
Nowoczesne metodologie numeryczne w mechanice kwantowej.
- 2017–2020: Grant NCN (SONATA),
projekt nr. 2016/23/D/ST1/02061, kierownik,
Metody cząstek w biologii matematycznej.
- Czerwiec 2017: Zaproszenie do wygłoszenia wykładów w szkole letniej i warsztatach
Focus Activity on Mathematical and Computational Methods in Quantum and Kinetic Problems w Computational Science Research Center, Pekin.
- Czerwiec 2017: Zaproszenie do wygłoszenia wykładów w Jiatong University, Xi'an, Chiny.
- Lipiec 2017: Zaproszenie do wygłoszenia referatu w mini sympozjum na konferencji
Foundations of Computational Mathematics FoCM 2017, Barcelona, Hiszpania,
- Sierpień 2017: Zaproszenie do wygłoszenia wykładów na konferencji
Advances in mathematical modelling and numerical simulation of superfluids, Rouen, Francja.
- Wrzesień 2017: Zaproszenie do wygłoszenia wykładów na konferencji
From computation to information: recent advances in numerical analysis, Cambridge, UK.
- Wrzesień 2017: Zaproszenie do wygłoszenia wykładów w mini sympozjum w konferencji
Scientific Computation and Differential Equations, SciCADE 2017, Bath, UK.
- Styczeń 2018: Zaproszenie do wygłoszenia wykładów na konferencji
Transport phenomena in mathematical biology, Warszawa
- Lipiec 2018: Zaproszenie do wygłoszenia wykładów na konferencji
Algebraic and geometric aspects of numerical methods for differential equations, Mittag-Leffler Institute, Sztokholm, Szwecja
- Lipiec–grudzień 2019: Zaproszenie do udziału w sześciomiesięcznym programie
Geometry, compatibility and structure preservation in computational differential equations, Isaac Newton Institute, Cambridge, UK.

Udział we wszystkich spotkaniach (z wyjątkiem mini sympozjów w konferencjach FoCM i SciCADE) finansowane były (lub będą) przez strony zapraszające.

WSKAZANIE OSIĄGNIĘCIA WYNIKAJĄCEGO Z ART. 16 UST. 2 USTAWY Z DNIA 14 MARCA 2003 R. O STOPNIACH NAUKOWYCH I TYTULE NAUKOWYM ORAZ O STOPNIACH I TYTULE W ZAKRESIE SZTUKI (Dz. U. 2016 R. POZ. 882 ZE ZM W Dz. U. z 2016 R. POZ. 1311.)

Rozprawa habilitacyjna zatytułowana

Zaawansowane metodologie obliczeniowe dla ewolucyjnych równań różniczkowych

składa się z cyklu sześciu prac:

- (1) Karolina Kropielnicka, *Implicit difference methods for parabolic FDE on cylindrical domains*. Dynamic Systems and Applications **19**, (2010) no. 3-4, 557–575,
- (2) Marissa Condon, Alfredo Deaño, Arieh Iserles, Karolina Kropielnicka, *Efficient computation of delay differential equations with highly oscillatory terms*. ESAIM. Mathematical Modelling and Numerical Analysis **46**, (2012) no. 6, 1407–1420,
- (3) Philipp Bader, Arieh Iserles, Karolina Kropielnicka, Pranav Singh, *Effective approximation for the semiclassical Schrödinger equation*. Foundations of Computational Mathematics **14** (2014) no. 4, 689–720,

- (4) Piotr Gwiazda, Karolina Kropielnicka, Anna Marciniak-Czochra, *The escalator boxcar train method for a system of age-structured equations*. Networks and Heterogeneous Media **11** (2016), no. 1, 123–143.
- (5) Arieh Iserles, Karolina Kropielnicka, Pranav Singh, *Magnus-Lanczos methods with simplified commutators for the Schrödinger equation with a time-dependant potential*, SIAM Journal of Numerical Analysis, (2018), DOI 10.1137/17M1149833.
- (6) Philipp Bader, Arieh Iserles, Karolina Kropielnicka, Pranav Singh, *Efficient methods for linear Schrödinger equation in the semiclassical regime with time-dependent potential*. Proceedings of the Royal Society A. 472 (2016), no. 2193,

ZARYS TEMATYKI BADAWCZEJ

Znaczenie równań różniczkowych, jako wiodącego narzędzia matematycznego do opisywania zjawisk codziennego życia nie wymaga tłumaczenia. Równania różniczkowe są dominującym instrumentem w formułowaniu modeli matematycznych w nauce i inżynierii.

Po sformułowaniu i przeanalizowaniu zagadnienia różniczkowego zazwyczaj konieczne jest znalezienie jego rozwiązania. Jako że niewiele równań różniczkowych można rozwiązać analitycznie, aproksymacja numeryczna jest jedynym rozwiązaniem. Koncentracja na metodach obliczeniowych nie oznacza jednak, że w jakikolwiek sposób porzucamy matematykę. Po dyskretyzacji, równania różniczkowe są nadal obiektami matematycznymi (prawdopodobnie nawet bardziej skomplikowanymi obiektami matematycznymi!) i muszą być analizowane z pełnym arsenalem narzędzi matematycznych.

Metody obliczeniowe równań różniczkowych są jedną z największych i najszybciej rozwijających się dziedzin matematyki numerycznej, o kluczowym znaczeniu dla zastosowań. Różnorodność, znaczenie i dynamika rozwoju równań różniczkowych wymusza szybkie tempo i szeroki zakres rozwoju odpowiednich narzędzi numerycznych.

Istnieją dwie niepożądane tendencje w matematyce obliczeniowej: (1) stosowanie bardzo wyrafinowanych metod do prostych, nierealistycznych problemów, (2) stosowanie zbyt prymitywnych metod do realnych zagadnień w zastosowaniach. Pierwszy nurt prowadzi do niekończących się publikacji z być może pięknymi matematycznymi teoriami, ale ma niewiele związku z zastosowaniami. Drugi nurt poświęca piękno i skuteczność matematyki dla bezmyślnych i kosztownych obliczeń. W swojej pracy staram się omijać te tendencje i skupiać się na specyficznych, wysoce nietrywialnych problemach tak, aby znaleźć optymalne metody dedykowane dla konkretnego zagadnienia. Takie, które wprowadzają nowe spojrzenie na problem i które można zaadoptować do innych równań. Aby to zrobić, trzeba sięgnąć po nietrywialne narzędzia matematyczne, takie jak algebra Liego, metody spektralnej kolokacji, metody optymalizacji, metody kompozycji i dekompozycji pola wektorowego, przestrzenie nieujemnych miar Radona, odległość Fortet-Mourier, odległość w sensie Kullbacka-Lieberta i wiele innych.

Cykl prezentowanych prac ilustruje rozwój moich zainteresowań naukowych po uzyskaniu stopnia doktora. W każdej z prac koncentruję się na równaniu różniczkowym typu ewolucyjnego, które (z jakichś powodów) sprawia istotne kłopoty obliczeniowe. Są to na przykład: argument funkcyjny w równaniu ewoluującym w cylindrycznym obszarze, ekstremalnie wysokie oscylacje rozwiązania lub trudne (nielocalne i nieliniowe) warunki brzegowe układu sprzężonych (nieliniowo i nielokalnie) równań różniczkowych cząstkowych. W każdym z problemów skupiam się na optymalnej strategii umożliwiającej szybkie i dokładne obliczenia. Prace te doprowadziły do opracowania metod, które mogą być modyfikowane i stosowane w podobnych zagadnieniach. Teraz, po opracowaniu prezentowanych w tej rozprawie technik jestem w stanie wykorzystać je w dalszych badaniach dotyczących jeszcze trudniejszych zagadnień.

Zanim przejdę do dokładnego opisu moich wyników, przedstawię po krótko ich zakres i tematykę.

(1) Argument funkcyjny i nieregularny brzeg

W pierwszym artykule rozważam uwikłane schematy różnicowe dla parabolicznych równań różniczkowo-funkcyjnych ewoluujących w obszarach cylindrycznych. W związku z tym wprowadzam tu odpowiednie

operatory różnicowe aproksymujące drugą pochodną (mieszaną) funkcji na nieregularnych siatkach. Ponadto proponuję (pewnego rodzaju) uwikłany schemat różnicowy. Schematy takie zwykle kojarzą się ze stosowaniem kosztownych metod iteracyjnych. Dzięki zastosowaniu uwikłania tylko do niewrażliwych operatorów występujących w równaniu otrzymujemy układ równań liniowych, które można łatwo obliczyć (w przeciwieństwie do układów równań nieliniowych, gdzie trzeba stosować metody iteracyjne). Warto podkreślić, że argumenty funkcjonalne pojawiające się w analizowanym problemie mogą być opóźnieniem (w czasie), adwekcją (w przestrzeni), całką (w czasie i / lub przestrzeni) lub kombinacją tych wszystkich. Prawdę mówiąc, zdobywszy doświadczenie w najnowszych trendach numerycznych moja obiektywna opinia na temat tych metod jest mniej entuzjastyczna: niestety, w wielu przypadkach metody różnic skończonych są nieskuteczne. Jednak użycie niestandardowych operatorów różnicowych na siatkach nieregularnych jest nietrywialne w tym kontekście i działa również z bardzo ogólnymi argumentami funkcjonalnymi (spełniającymi jedynie warunek typu Perrona). Są to powody dla których uważam, że analiza tego problemu i dowód jego zbieżności są interesujące, pomysłowe i zaawansowane matematycznie. Uzyskawszy doświadczenie w metodach dekompozycji pola wektorowego (prace (3), (5) i (6)), pracuję obecnie nad ich zastosowaniem do równań parabolicznych różniczkowo-funkcyjnych na zbiorach cylindrycznych. W przeciwieństwie do metod dekompozycji które do tej pory stosowałam, będę musiała uciec się do propagacji czasu w przestrzeni zespolonej.

(2) Opóźnienie w czasie i wysokie oscylacje

W czasie stażu podoktorskiego zaczęłam pracować nad silnie oscylującym równaniem różniczkowym z argumentem funkcyjnym (w tym przypadku opóźnieniem), praca (2). Zagadnienia o wysoko oscylujących rozwiązaniach są wszechobecne w zastosowaniach, a ich dyskretyzacja jest niezwykle trudna. W ciągu ostatnich dwudziestu lat stały się one głównym obszarem badań numerycznych. W szczególności dotyczyło równań różniczkowych zwyczajnych z wymuszonymi oscylacjami. Opracowano wiele metod bazujących na narzędziach analizy asymptotycznej, jednakże nie analizowano równań z opóźnieniem. Równania takie mają zastosowania szczególnie w elektrotechnice (transmisja sygnałów o wysokiej częstotliwości na masztach telefonii komórkowej). Metody różnic skończonych stosowane w (1) okazały się tu bezużyteczne z uwagi na wysokie oscylacje rozwiązań. Pomysł przedstawiony w pracy (2) polega na zastosowaniu pewnego *wzorca rozwiązania* (tzw *ansatz*) – zmodyfikowanego rozwinięcia Fouriera, oraz wyznaczeniu jego współczynników. Nasze zadanie polegało na znalezieniu odpowiedniego wzorca rozwiązania i na udowodnieniu, że jego składowe nie są zagadnieniami oscylującymi - a więc łatwo poddającym się obliczeniom. Dodatkowo można zauważyć, że im wyższe wymuszone oscylacje zagadnienia wyjściowego, tym szybciej zbieżna metoda! Wynika to z dobrze przemyślanej konstrukcji wzorca rozwiązania.

(3) Obliczenia w mechanice kwantowej i wysokie oscylacje

Równanie Schrödingera w ujęciu semiklasycznym – równanie różniczkowe cząstkowe cechujące się ekstremalnie wysokimi oscylacjami rozwiązania, które zachowują szereg *własności jakościowych* (np zachowanie energii czy ewolucji pakietów falowych). Oczekujemy, że własności jakościowe zachowywane będą również przez rozwiązania przybliżone. Metody numeryczne zachowujące takie właśnie cechy jakościowe wpadają w nurt tzw *całkowania geometrycznego* (*geometric integration*).

Praca nad artykułem (3) zajęła wiele lat i przeszła różne ewolucje, aby w końcu zaproponować zupełnie nowe rozwiązanie dla równań w ujęciu semiklasycznym – *Asymptotyczna Dekompozycja Zassenhausa*. Zaproponowanie innowacyjnego i efektywnego podejścia nie było łatwe, ponieważ istnieje wiele strategii obliczeniowych dla równania Schrödingera, jako że gra ono główną rolę w mechanice kwantowej i chemii teoretycznej. Jak się okazuje, asymptotyczna dekompozycja Zassenhausa została powszechnie zaakceptowana jako najnowocześniejsza metoda w tej dziedzinie. Trwają prace innych naukowców aplikujących zaproponowane przez nas rozwinięcie do innych równań w mechanice kwantowej i chemii teoretycznej.

W niepublikowanym raporcie technicznym (Iserles & Kropielnicka 2011) zasugerowaliśmy wykorzystanie spektralnej metody kolokacji (jako bardzo efektywnej dyskretyzacji) w przestrzeni i wprowadziliśmy wspomnianą metodę dekompozycji (symetryczną, asymptotyczną dekompozycja Zassenhausa). Podejście to zostało później poprawione we współpracy z Philippem Baderem (obecnie na Uniwersyte-

cie w Castellón, w Hiszpanii) oraz z Pranavem Singhem (obecnie w Oksfordzie, w Wielkiej Brytanii), pracując w przestrzeni nieskończone wymiarowych operatorów. Praca ta została opublikowana w wiodącym w analizie numerycznej czasopiśmie, *Foundations of Computational Mathematics*. To podejście otworzyło całkowicie nową teorię, która jest dynamicznie rozwijana nie tylko przez nasz zespół, ale również przez innych naukowców. Ta właśnie praca będzie szczególnie dokładnie opisana w dalszej części autoreferatu.

(4) Nielocalne i nieliniowe warunki brzegowe

Równolegle do metod dekompozycji dla równań wysoko oscylujących zaczęłam pracować w obszarze modeli dla populacji ze strukturą, gdzie w celu podniesienia rzędu zbieżności schematów wprowadzenie metod dekompozycji jest nieuniknione. Dokładniej, wraz z Piotrem Gwiazdą (Polska Akademia Nauk) i Anną Marciniak-Czochrą (Uniwersytet w Heidelbergu) zainteresowaliśmy się sprzężonym układem równań transportu o nieliniowych i nielokalnych warunkach brzegowych. Oczywiście można tu zastosować metodę charakterystyk, jednak ze względu na potrzeby biologii obliczeniowej lepiej jest odwoływać się do innych metod, które dla praktyków są intuicyjne i kompatybilne z obserwacjami i pomiarami rzeczywistości. Są to tak zwane metody Escalator Boxcar Train (EBT), które działają w podobny sposób do metody cząstek powszechnie wykorzystywanej w fizyce. Klasyczne metody EBT są rzędu pierwszego, mają jednak potencjał do zwiększenia dokładności dzięki zastosowaniu odpowiednich metod dekompozycji. W pracy (4) wyprowadziliśmy metodę Escalator Boxcar Train dla modeli populacji dwu-płciowych. Zbieżność tej metody została ostatnio udowodniona z jeszcze jednym współautorem, José Carrillo (Imperial College London, Wielka Brytania), w (8). Obecnie we współpracy z José Carrillo, Piotrem Gwiazdą i Agnieszką Świerczewską-Gwiazdą (Uniwersytet Warszawski) pracujemy nad podniesieniem rzędu zbieżności metody dzięki metodom dekompozycji. Praca (4) jest bardzo ciekawa ze względu na postawienie problemu w przestrzeni nieujemnych miar Radona i ze względu na prowadzenie nietrywialnych obliczeń w sensie odległości Fortet-Mourier. Ponadto praca (4) jest pierwszym etapem dużego projektu, w którym między innymi wprowadzamy metody dekompozycji pola wektorowego, które wykorzystywane są w (3), (5) i (6). Obecnie prowadzę projekt, *"Metody Cząstek w Biologii Matematycznej"*, który jest finansowany przez Grant Narodowego Centrum Nauki (SONATA) i oparty na idei podnoszenia dokładności metod zaproponowanych w pracy (4) poprzez dwa czynniki: (a) postawienie problemu w przestrzeniach Sobolewa, (b) wprowadzanie metod dekompozycji pola wektorowego.

(5) Duże oscylacje i potencjał czaso-zależny

Wyniki zawarte w pracy (3) opracowane zostały dla równań w ujęciu semi-klasycznym i dedykowane są dla przypadków, gdzie potencjał nie zależy od czasu. W ciągu ostatnich dwudziestu lat, między innymi ze względu na znaczenie teorii sterowania w fizyce kwantowej, obserwujemy zainteresowanie równaniem Schrödingera z potencjałem czaso-zależnym, często mocno oscylującym zarówno w czasie jak i w przestrzeni. Artykuł (5) dotyczy tego właśnie problemu. W przeciwieństwie do pracy (3) równanie jest tutaj sformułowane w jednostkach atomowych, a nie w ujęciu semi-klasycznym. Z tego powodu w (5) nie odwołujemy się do dekompozycji Zassenhausa, ale zmagamy się z inną trudnością - potencjałem czaso-zależnym. Pokazujemy, że rozwinięcie Magnusa w połączeniu z metodą Kryłowa-Lanczosa jest wystarczająca, o ile wprowadzimy *bezkomutatorową* wersję rozwinięcia Magnusa. Możliwe jest to dzięki pewnym kombinacjom w algebrze Liego, które sprowadzają wielokrotnie zagnieżdżone komutatory dużych rozmiarów (w sensie spektralnym) do niezagnieżdżonych *anty-komutatorów* małych rozmiarów spektralnych. Dodatkową zaletą pracowania z niezagnieżdżonymi anty-komutatorami jest to, że są one anty-Hermitowskie, co w konsekwencji prowadzi do unitarności rozwiązań, a tym samym do stabilności (i potem do zbieżności) metody.

(6) Duże oscylacje i potencjał czaso-zależny w reżimie semiklasycznym

Artykuł (6) również dotyczy równania Schrödingera. Podobnie jak w (3) jesteśmy zainteresowani ujęciem semi-klasycznym i podobnie jak w (5) rozważamy potencjał czaso-zależny. Rozwinięcie Magnusa, które jest sumą wielokrotnie zagnieżdżonych całek z wielokrotnie zagnieżdżonych komutatorów, jest koniecznością. Bezpośrednie użycie metod Kryłowa-Lanczosa, byłoby niezwykle kosztowne, szczegól-

nie, że operujemy w ujęciu semi-klasycznym. W pracy (6) radzimy sobie z tym problemem w sposób następujący: stosujemy rozwinięcie Magnusa, którego komponenty zapisujemy w bazie Munthe-Kaas-Owren. W ten sposób istotnie zmniejszamy promień spektralny składników rozwinięcia. Funkcję eksponencjalną tak przygotowanego szeregu poddajemy asymptotycznej metodzie dekompozycji Zassenhausa, która okazuje się być bardzo wydajnym narzędziem dla równania Schrödingera w ujęciu semi-klasycznym z potencjałem czaso-zależnym.

Prace (3), (5) i (6) uważam za moje główne osiągnięcia ponieważ zawierają wręcz przełomowe wyniki w metodach obliczeniowych. Opracowane tu metodologie są innowacyjne, mają duży potencjał wydajnościowy, jakościowy i (po odpowiednich zmianach) mogą być adoptowane do innych równań różniczkowych. Trzy wymienione artykuły tworzą bazę mojego grantu NCN (HARMONIA), "Nowoczesne metodologie numeryczne w mechanice kwantowej". Dzięki wypracowanym technikom jestem uczestnikiem Grantu Austriackiego Funduszu Badawczego *Large time-dependent systems of ordinary differential equations of Schrödinger type*, gdzie kierownikiem jest Othmar Koch. Co więcej, z powodu mojego wkładu w tę tematykę badawczą, zostałem niedawno zaproszony do wzięcia udziału w sześciomiesięcznym programie Isaac Newton Institute (UK) na temat *Geometry, compatibility and structure preservation in computational differential equations* w 2019 roku.

Wspomniane wyżej artykuły wraz z nowościami wprowadzonymi w pracach (1), (2) i (4) stanowią solidny warsztat zaawansowanych narzędzi numerycznych, które umożliwiają dalsze prace nad wysoce wydajnymi metodami numerycznymi dla równań różniczkowych stosowanych przez fizyków, chemików i biologów.

PREZENTACJA WYNIKÓW UZYSKANYCH W PRZEDSTAWIANYM CYKLU PRAC

(1) Argument funkcyjny i nieregularny brzeg

Niech $Q \subset \mathbb{R}^n$ będzie ograniczonym i wypukłym obszarem o brzegu ∂Q i domknięciu \bar{Q} . Oznaczamy

$$E = [0, a] \times \bar{Q}, \quad E_0 = [-a_0, 0] \times \bar{Q}, \quad \partial_0 E = [0, a] \times \partial Q$$

gdzie $a > 0$, $a_0 \in \mathbb{R}_+ = [0, +\infty)$. Niech $\Sigma = E \times \mathbf{C}(E_0 \cup E, \mathbb{R})$ i załóżmy, że

$$f : \Sigma \rightarrow M[n], \quad f = [f_{ij}]_{i,j=1,\dots,n}, \quad g : \Sigma \rightarrow \mathbb{R}^n, \quad g = (g_1, \dots, g_n),$$

$$G : \Sigma \rightarrow \mathbb{R}, \quad \varphi : E_0 \cup \partial_0 E \rightarrow \mathbb{R},$$

są funkcjami danymi. W pracy (1) rozważamy równanie paraboliczne równanie różniczkowo funkcyjne

$$\partial_t z(t, x) = \sum_{i,j=1}^n f_{ij}(t, x, z) \partial_{x_i x_j} z(t, x) + \sum_{i=1}^n g_i(t, x, z) \partial_{x_i} z(t, x) + G(t, x, z), \quad (1)$$

z zadaniem warunkiem początkowym

$$z(t, x) = \varphi(t, x) \text{ for } (t, x) \in E_0 \cup \partial_0 E. \quad (2)$$

W klasycznych twierdzeniach o zbieżności jawnego schematu różnicowego dla (1)–(2) zakłada się, że (Z. Kamont 1996)

$$1 - 2h_0 \sum_{i=1}^n \frac{1}{h_i^2} f_{ii}(t, x) + h_0 \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^n \frac{1}{h_i h_j} |f_{ij}(t, x)| \geq 0, \quad (t, x) \in E, \quad (3)$$

gdzie h_0 oraz $h' = (h_1, \dots, h_n)$ są krokami siatki względem zmiennych t i (x_1, \dots, x_n) , odpowiednio. Ten warunek jest trudny do praktycznej realizacji szczególnie wtedy, gdy kroki siatki względem zmiennych przestrzennych są małe. Istotnie, zauważmy, że jeśli funkcje f_{ij} , $i, j = 1, \dots, n$ są ograniczone w Σ oraz $h_i = h_j$, $i, j = 1, \dots, n$, to nierówność (3) przyjmuje postać

$$1 - \frac{h_0 \cdot \text{Const.}}{h_i^2} \geq 0,$$

która, z kolei, jest odpowiednikiem warunku Courant–Friedrichs–Lewy (CFL).

W pracy (1) wprowadzam ilorazy różnicowe aproksymujące pochodne przestrzenne na nieregularnych siatkach oraz proponuję schemat, który umożliwia pominięcie założenia (3). W pracy prezentuję pełną analizę proponowanego schematu różnicowego: istnienie rozwiązania, dobre postawienie problemu oraz jego zbieżność.

Prace nad (1) inspirowane były wynikami aktywnego matematyka C.V. Pao, znanego z dużego wkładu w dziedzinę ewolucji układów równań parabolicznych z opóźnieniem, (Pao 1998, Pao 1999, Pao 2002). W artykułach tych C.V. Pao rozważa układy podobne do (1) z brzegowym warunkiem typu Robina, który dotyczy nie tylko funkcji z , jak jest to w (2), ale również jej pochodnej w kierunku zewnętrznego wektora normalnego. Równania rozważane przez C.V. Pao nie zawierają jednak pochodnych mieszanych, funkcje f i g zależą tylko od zmiennych t i x , a funkcja G zależy tylko od t , x i od opóźnienia nieznannej funkcji z . Dyskretyzując układ uwikłanymi (w czasie) operatorami różnicowymi, Pao otrzymuje sprzężony układ nieliniowych równań algebraicznych. Otrzymane układy analizowane są później metodami dolnych i górnych rozwiązań odpowiednich ciągów iteracyjnych. Pao podał trzy takie układy iteracyjne i pokazał, że zbiegają one monotonicznie do jedynego rozwiązania uwikłanego układu równań różniczkowych.

Celem pracy (1) jest uogólnić i poprawić ten wynik. W związku z tym

1. rozważam ogólniejsze równanie różniczkowe, które posiada pochodne mieszane. W związku z tym wprowadzam (według ówczesnej wiedzy: po raz pierwszy w literaturze) operatory różnicowe aproksymujące pochodne mieszane na nieregularnych siatkach. To jest główny wkład pracy (1), który może być zaadoptowany do metod numerycznych dla równań określonych w obszarach o nieregularnych brzegach.
2. wszystkie współczynniki (f , g and G) zależą od argumentu funkcyjnego. Jak wyjaśniam w pracy, *argument funkcyjny* jest znacznie ogólniejszy niż *opóźnienie w czasie*. Argument funkcyjny może być opóźnieniem (w czasie), odchyleniem (w przestrzeni), całką (w czasie i przestrzeni) lub jakąkolwiek funkcją zależną od niewiadomej funkcji z .
3. stosuję uwikłaną metodę różnicową, która prowadzi do liniowego układu równań. Ten, z kolei, można łatwo obliczyć metodami bezpośrednimi bez odwoływania się do metod iteracyjnych. Aby uciec od sprzężonego układu nieliniowych równań algebraicznych wystarczy zauważyć, że uwikłanie stosujemy tylko do aproksymacji pochodnych. Dzięki temu zabiegowi otrzymujemy liniowy, odwracalny układ równań.
4. Założenia o quasi-monotoniczności są niezbędne w (Pao 1998) i (Pao 2002) dla konstrukcji monotonicznego ciągu iteracyjnego zbieżnego do schematu różnicowego. W proponowanych schematach uwikłanych takie założenia nie są potrzebne.
5. Rozważam bardzo ogólną klasę quasi-liniowych równań różniczkowo - funkcyjnych.
6. W moich badaniach warunek Lipschitza zastępuję nieliniowym oszacowaniem typu Perrona, co jest mniej restrykcyjnym założeniem.
7. Dla przejrzystości pracy rozważam równanie skalarne, ale wyniki mogą być łatwo przeniesione na układ równań.
8. Prezentuję przykłady numeryczne potwierdzające wyniki teoretyczne i porównujące metody jawne i uwikłane.

(2) Opóźnienie w czasie i wysokie oscylacje

Praca (2) poświęcona jest układowi liniowych równań różniczkowych zwyczajnych z opóźnieniem (DDEs) typu

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(t) &= A\mathbf{y}(t) + B\mathbf{y}(t-1) + \sum_{-\infty}^{\infty} \mathbf{a}_m(t)e^{im\omega t}, \quad t \geq 0, \\ \mathbf{y}(t) &= \mathbf{s}(t), \quad t \in (-1, 0], \end{aligned} \quad (4)$$

gdzie $\omega \gg 1$. Przyjmujemy, że $\mathbf{y}, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^N$, a A i B są rzeczywistymi macierzami $N \times N$. Wzorzec rozwiązania (tzw *ansatz*) dla równania

$$\mathbf{y}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}) + \sum_{-\infty}^{\infty} \mathbf{a}_m(t)e^{im\omega t}, \quad t \geq 0, \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0 \in \mathbb{R}^N, \quad (5)$$

jest taki, że funkcja \mathbf{y} , dla $\omega \gg 1$, posiada rozwinięcie

$$\mathbf{y}(t) \sim \mathbf{p}_{0,0}(t) + \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{\omega^r} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathbf{p}_{r,m}(t)e^{im\omega t}, \quad (6)$$

gdzie funkcje $\mathbf{p}_{r,m}$ są niezależne od ω . Obliczywszy zatem funkcje $\mathbf{p}_{r,m}$ s (które nie są mocno oscylujące!) możemy przybliżyć rozwiązanie (5) bez kosztownych obliczeń dla równań silnie oscylujących. Niestety taki *ansatz* nie jest odpowiedzią równania z opóźnieniem (4). W pracy (2) proponujemy następujące rozwinięcie funkcji \mathbf{y}

$$\mathbf{y}(t) \sim \mathbf{p}(t) + \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{\omega^r} \mathbf{q}_r(t, \omega),$$

gdzie

$$\mathbf{q}_r(t, \omega) = \sum_{(\ell, m) \in \mathcal{I}_r} \mathbf{b}_m^{r, \ell}(t) e^{i\omega(mt - \ell)},$$

a \mathcal{I}_r jest odpowiednim zbiorem indeksów. Okazuje się, że $\mathbf{b}_m^{r, \ell}$, podobnie jak \mathbf{p} , są niezależne od ω . Zatem mając współczynniki rozwinięcia (które nie są funkcjami wysoko oscylującymi) znamy rozwiązanie $\mathbf{y}(t)$.

Wyznaczenie odpowiedniego zbioru indeksów \mathcal{I}_r wymaga jednak umiejętnych obliczeń kombinatorycznych. Jeśli tylko zbiory indeksów są znane, możemy wyliczyć współczynniki $\mathbf{b}_m^{r, \ell}$ rekurencyjnie lub rozwiązując nieoscylujące równania. Zatem, przyjmując $\mathcal{M} = \{m \in \mathbb{Z} : \mathbf{a}_m \neq \mathbf{0}\}$, pierwsze współczynniki (zerowe) wyznaczamy z następującego układu równań

$$\begin{aligned} \mathbf{p}'(t) &= A\mathbf{p}(t) + B\mathbf{p}(t-1) + \mathbf{a}_0(t), \quad t \geq 0, \quad \mathbf{p}(t) = \mathbf{s}(t), \quad t \in (-1, 1], \\ \mathbf{b}_m^{1,0}(t) &= \frac{\mathbf{a}_m(t)}{im}, \quad m \in \mathcal{M} \setminus \{0\}, \\ \mathbf{b}_0^{1,0'}(t) &= A\mathbf{b}_0^{1,0}(t) + B\mathbf{b}_0^{1,0}(t-1), \quad t \geq 0, \quad \mathbf{b}_0^{1,0}(t) \equiv 0, \quad t \in (-1, 0), \\ &\mathbf{b}_0^{1,0}(0) = -\sum_{j \neq 0} \mathbf{b}_j^{1,0}(0). \end{aligned}$$

Kolejne współczynniki wyprowadzane są w podobny sposób, ale kolejne zbiory indeksów \mathcal{I}_r stają się bardziej skomplikowane.

Aby zilustrować ideę aproksymacji funkcji \mathbf{y} , rozważmy skalarne równanie różniczkowe z opóźnieniem $y'(t) = iy(t) - y(t-1) + t \sin \omega t$, $t \in [0, 20]$ z warunkiem początkowym $y(t) = e^{it}$, $t \in (-1, 0]$. W Fig. 1 pokazujemy rozmiar (w skali logarytmicznej) kolejnych współczynników $\mathbf{q}_r(t, \omega)$ dla $r = 1, \dots, 6$ (czyli 6 kolejnych komponentów rozwinięcia \mathbf{y}), gdzie mamy do czynienia z *bardzo* silnymi oscylacjami $\omega = 10^4$ – postęp w dokładności kolejnych przybliżeń naszego rozwinięcia jest zaskakujący! Praktycznie niemożliwe jest uzyskać taką precyzję obliczeń przy zadanych oscylacjach jakimikolwiek innymi metodami w rozsądnym czasie obliczeniowym.

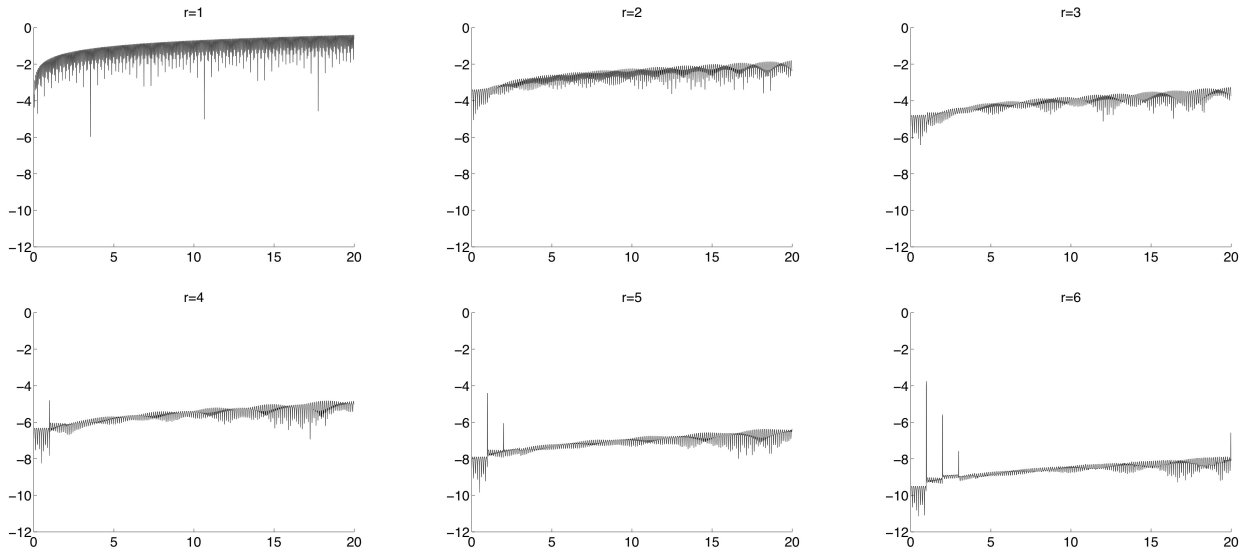


Figure 1: Rozmiar logarytmiczny $\log_{10} |\mathbf{q}_r(t, \omega)|$ kolejnych współczynników $r = 1, \dots, 6$ przy $\omega = 10^4$.

(3) Obliczenia w mechanice kwantowej i wysokie oscylacje

Równania różniczkowe cząstkowe w mechanice kwantowej są trudne ze względu na kilka powodów:

1. Ich rozwiązania dokładne z reguły bardzo oscylują, przez co naiwne dyskretyzacje zagadnień są kosztowne obliczeniowo.
2. Równania są konserwatywne (a dokładniej operator rozwiązania jest unitarny) oraz dyspersyjne: te własności powinny być zachowane przez dyskretyzację zagadnienia.
3. Równania te z reguły posiadają długą listę własności geometrycznych i ewolucyjnych, np symplektyczność czy zachowanie energii, które powinny być zachowane również przez proces dyskretyzacji.

Równanie Schrödingera w ujęciu semiklasycznym opisuje ruch cząstek w polu elektrycznym (w sensie kwantowym). Od lat jest obiektem zainteresowań matematyków ze względu na szeroką klasę zastosowań w chemii, fizyce czy mechanice kwantowej (Griffiths 2004). Rozwiązania tego równania cechuje wiele zjawisk (w szczególności ogromne oscylacje), które utrudniają obliczenia numeryczne.

Pełna gama trudności równania Schrödingera oraz cały szereg metod obliczeniowych opisany jest szczegółowo w przeglądowej pracy (Jin, Markowich & Sparber 2011) opublikowanej w *Acta Numerica*, której głównym autorem jest Peter Markowich (University of Cambridge, UK) – niewątpliwie wiodący ekspert w tej dziedzinie.

W pracy (3) proponujemy zupełnie nową metodę numeryczną dla liniowego równania Schrödingera w ujęciu semiklasycznym, które dla przejrzystości prezentujemy w przypadku jednowymiarowym ($x \in \mathbb{R}$)

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = i\varepsilon \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + i\varepsilon^{-1} V(x)u(x, t), \quad x \in [-1, 1], \quad t \geq 0, \quad (7)$$

z warunkiem początkowym $u(x, 0) = u_0(x)$, oraz okresowym warunkiem brzegowym.

Równanie (7) postawione jest w przestrzeni Hilberta $H_{\text{per}}^2[-1, 1]$. Warto podkreślić, że kwadrat modułu jego rozwiązania odpowiada gęstości prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w miejscu x w czasie t . Warunek początkowy u_0 jest więc znormalizowany i łatwo sprawdzić, że norma L^2 rozwiązania jest niezmienna,

$$\|u(\cdot, t)\|_{L^2}^2 = \int_{-1}^1 |u(x, t)|^2 dx = \|u(\cdot, 0)\|_{L^2}^2.$$

Funkcja falowa ewoluje więc w sposób unitarny, a więc również jej aproksymacja numeryczna powinna ewoluować w ten sam sposób.

W ostatnich latach rozwinął się nurt *numerycznego całkowania geometrycznego* (czyli metody obliczeniowe zachowujące własności geometryczne dokładnych rozwiązań równań różniczkowych), który jest obiektem ciągłych zainteresowań i badań wiodących analityków numerycznych, między innymi: Antonella Zanna Muthe-Kaas (University of Bergen, Norway), Ernst Hairer (University of Geneva, Switzerland), Jesus-Maria Sanz-Serna (Universidad Carlos III, Spain), Christian Lubich (Tübingen University, Germany), Robert McLachlan (Massey University, New Zealand), Sergio Blanes (Universitat Politècnica de Valencia, Spain).

Wprowadzona przez nas metoda obliczeniowa zachowuje normę rozwiązania, która jest konieczna – ze względu na znaczenie w zastosowaniach oraz ze względu na zachowanie stabilności metody.

Mały parametr semiklasyczny $0 < \varepsilon \ll 1$ jest podstawowym źródłem kłopotów obliczeniowych. Jak pokazano w (Jin et al. 2011), rozwiązania Schrödingera oscylują (w czasie i w przestrzeni) co najmniej z częstotliwością $\mathcal{O}(\varepsilon^{-1})$.

Z uwagi na wysokie oscylacje i konieczność ekstremalnie małych kroków siatki, metody różnic skończonych są poza rozważaniami. Najczęściej stosowanym podejściem jest semidyskretyzacja w przestrzeni metodami spektralnymi połączona z metodami dekompozycji (w czasie). O ile trudno poprawić dokładność metod spektralnych, o tyle istnieje potrzeba pracy metodami dekompozycji, *exponential splittings* (Faou 2012, Jin et al. 2011, Lubich 2008, McLachlan & Quispel 2002), które są “wąskim gardłem” dla opisywanych metod, ponieważ często są kosztowne obliczeniowo i o małym rzędzie zbieżności.

Jak wspomnieliśmy, konstrukcja metody obliczeniowej zazwyczaj rozpoczyna się od semidyskretyzacji, która sprowadza problem wyjściowy do układu równań różniczkowych zwyczajnych:

$$\mathbf{u}' = i(\varepsilon\mathcal{K} + \varepsilon^{-1}\mathcal{D})\mathbf{u}, \quad t \geq 0, \quad (8)$$

gdzie wektor $\mathbf{u}(t) \in \mathbb{C}^N$ reprezentuje aproksymację rozwiązania w czasie t , operator drugiej pochodnej reprezentowany jest przez macierz \mathcal{K} , natomiast \mathcal{D} odpowiada za mnożenie rozwiązania przez potencjał V . Wszystko to dzieje się w przestrzeni skończonej wymiarowej.

Znamy rozwiązanie dokładnie równania (8)

$$\mathbf{u}(t) = \exp\left(it(\varepsilon\mathcal{K} + \varepsilon^{-1}\mathcal{D})\right) \mathbf{u}(0).$$

Problem leży jednak w numerycznej aproksymacji powyższej funkcji, która jest eksponentem sumy macierzy o skrajnie różnych wielkościach ($\varepsilon\mathcal{K}$ i $\varepsilon^{-1}\mathcal{D}$). Za względu na duży rozmiar macierzy $\varepsilon^{-1}\mathcal{D}$, jej eksponent jest kosztowny do obliczenia. Oczywiście można przyjąć bardzo mały krok czasowy aby zmniejszyć rozmiar kłopotliwej części wykładnika, $\mathbf{u}((n+1)\Delta t) \approx e^{i\Delta t(\varepsilon\mathcal{K} + \varepsilon^{-1}\mathcal{D})}\mathbf{u}(n\Delta t)$, $n \in \mathbb{Z}_+$. To nie jest jednak dobry pomysł, ponieważ nie tylko znacznie wydłużamy obliczenia, ale praktycznie tracimy informację o i tak małym składniku $\varepsilon\mathcal{K}$, co prowadzi do bezużytecznych obliczeń. W celu prowadzenia precyzyjnych obliczeń można oczywiście pozostać przy relatywnie dużym kroku czasowym Δt , ale to z kolei, prowadzi do bardzo kosztownych metod (n.p. Metoda podprzestrzeni Kryłowa dużego rozmiaru). Alternatywą dla tych rozwiązań jest zazwyczaj dekompozycja Stranga, (*Strang splitting*)

$$e^{it(\varepsilon\mathcal{K} + \varepsilon^{-1}\mathcal{D})} = e^{\frac{1}{2}it\varepsilon\mathcal{K}} e^{it\varepsilon^{-1}\mathcal{D}} e^{\frac{1}{2}it\varepsilon\mathcal{K}} + \mathcal{O}(t^3). \quad (9)$$

To podejście jest jak najbardziej zasadne:

- (a) macierze o różnych skalach (ε and ε^{-1}) są odseparowane i każdy wykładnik jest aproksymowany osobno, przy użyciu innego kroku czasowego,
- (b) dyskretyzując równanie (7) metodami spektralnymi, \mathcal{K} przyjmuje postać diagonalną, a \mathcal{D} staje się macierzą cykliczną, zatem $e^{\frac{1}{2}it\varepsilon\mathcal{K}}$ jest macierzą diagonalną, a $e^{it\varepsilon^{-1}\mathcal{D}}$ może być aproksymowana szybką transformatą Fouriera z kosztem $\mathcal{O}(N \log N)$ operacji.

Niestety, dekompozycja Stranga aproksymuje równanie w czasie z drugim rzędem zbieżności, co jest słabym wynikiem, szczególnie w porównaniu ze spektralną dokładnością aproksymacji względem zmiennej przestrzennej. Oczywiście można podnieść precyzję dekompozycji Stranga za pomocą znanego uogólnienia

$$e^{i\alpha_1 t \varepsilon \mathcal{K}} e^{i\beta_1 t \varepsilon^{-1} \mathcal{D}} e^{i\alpha_2 t \varepsilon \mathcal{K}} \dots e^{i\alpha_r t \varepsilon \mathcal{K}} e^{i\beta_r t \varepsilon^{-1} \mathcal{D}} e^{i\alpha_r t \varepsilon \mathcal{K}} \dots e^{i\alpha_2 t \varepsilon \mathcal{K}} e^{i\beta_1 t \varepsilon^{-1} \mathcal{D}} e^{i\alpha_1 t \varepsilon \mathcal{K}}.$$

Palindromiczność tej dekompozycji skutkuje symetrią całej metody względem czasu. To bardzo porządane zjawisko, ponieważ metody symetryczne gwarantują zawsze parzysty rząd zbieżności. Współczynniki α_i i β_i są przeważnie wybrane tak, aby zapewnić jak najwyższy rząd zbieżności, albo jak najmniejszą stałą błędów, albo obydwie te zalety jednocześnie, (Blanes, Casas & Murua 2006, McLachlan & Quispel 2002).

Uogólnienie metody Stranga w sposób oczywisty zachowuje porządane własności (a) i (b) dekompozycji (9), niestety niewspółmiernie duża liczba eksponentów jest konieczna dla otrzymania odpowiedniego rzędu zbieżności. Najprostszym sposobem uogólnienia dekompozycji Stranga jest metoda Yoshidy (McLachlan & Quispel 2002, Yoshida 1990), która wymaga $2 \times 3^{p-1} + 1$ eksponentów, aby uzyskać rząd $2p$.

W pracy (3) zaproponowaliśmy nowe podejście numeryczne dla równania (7), w którym rozważane zagadnienie ewoluuje w pewnej grupie Liego. Istotną różnicą w stosunku do omawianych metod jest to, że najpierw przeprowadzamy metody dekompozycji (pracując na operatorach nieskończenie wymiarowych), a dopiero pod koniec wprowadzamy semidyskretyzację (w naszych pracach proponujemy odejście od transformaty Fouriera i zastosowanie spektralnej metody kolokacji). Odpowiedni wybór algebry Liego umożliwia nam wyprowadzenie zupełnie nowego podziału pól wektorowych – *asymptotycznej dekompozycji Zassenhausa*

$$e^{ih(\varepsilon \partial_x^2 + \varepsilon^{-1} V)} = e^{\frac{1}{2} W^{[0]}} e^{\frac{1}{2} W^{[1]}} \dots e^{\frac{1}{2} W^{[s]}} e^{\mathcal{W}^{[s+1]}} e^{\frac{1}{2} W^{[s]}} \dots e^{\frac{1}{2} W^{[1]}} e^{\frac{1}{2} W^{[0]}} + \mathcal{O}(\varepsilon^{2s+2}), \quad (10)$$

gdzie

$$\begin{aligned} W^{[0]} &= W^{[0]}(h, \varepsilon, \partial_x^2, V) = \mathcal{O}(\varepsilon^0), \\ W^{[k]} &= W^{[k]}(h, \varepsilon, \partial_x^2, V) = \mathcal{O}(\varepsilon^{2k-2}), \quad k = 1, \dots, s, \\ \mathcal{W}^{[k+1]} &= \mathcal{W}^{[k+1]}(h, \varepsilon, \partial_x^2, V) = \mathcal{O}(\varepsilon^{2s}). \end{aligned}$$

Asymptotyczna dekompozycja Zassenhausa zaproponowana w (Bader, Iserles, Kropielnicka & Singh 2014) ma przewagę na innymi standardowymi dekompozycjami z wielu powodów:

(1) Błąd metody wyrażamy nie sensie długości kroku czasowego Δt , ale w sensie parametru semiklasycznego ε . Istnieją trzy małe (i jednocześnie krytyczne dla obliczeń) parametry: ε , Δt and $1/N$ (gdzie N jest liczbą węzłów semidyskretyzacji). Ustalamy relacje pomiędzy semiklasycznym parametrem ε a wyborem kroków dyskretyzacji Δt i N , przez co możemy wyrazić błąd metody wyłącznie w sensie ε . Dzięki takiemu rozwiązaniu mamy możliwość wyprowadzenia *asymptotycznej* dekompozycji (kolejne eksponenty maleją co do wielkości spektralnej), oraz mamy pewność, że stała błędów nie zależy ani od Δt , ani od N .

(2) Ponieważ działamy na operatorach nieskończenie wymiarowych (a nie na ich dyskretnych wersjach, czyli macierzach), komutatory występujące we wzorze Baker–Campbell–Hausdorff zamienione są na liniowe kombinacje pochodnych ∂_x^k , $k = 0, 1, \dots$, n.p. $[\partial_x^2, V] = V_{xx} + 2V_x \partial_x$.

(3) Wymagamy dużo mniej eksponent, aby otrzymać żadaną dokładność metody, niż w znanych do tej pory metodach dekompozycji. Ponadto, kolejne eksponenty mają coraz mniejszy rozmiar spektralny (stąd nazwa *asymptotyczna* dekompozycja).

(4) Wszystkie eksponenty dekompozycji można łatwo aproksymować numerycznie. Pierwsze dwie ($W^{[0]}$, $W^{[1]}$) są albo diagonalne, albo cykliczne, więc liczy się je bezpośrednio lub za pomocą szybkiej transformaty Fouriera. Pozostałe eksponenty są tak małego rozmiaru spektralnego, że liczy się je niskim kosztem (w naszych przykładach trzech lub czterech) iteracji Lanczosa korzystając z metody podprzestrzeni Kryłowa.

(5) Całkowity koszt dyskretyzacji rośnie kwadratowo względem oczekiwanego rzędu zbieżności a nie wykładniczo, jak jest to w przypadku dekompozycji Yoshidy.

(4) Nielocalne i nieliniowe warunki brzegowe

W pracy (4) koncentrujemy się układach sprzężonych równań różniczkowych z nielokalnymi i nieliniowymi warunkami brzegowymi. Dokładniej, są to równania hiperboliczne typu McKendrick–von Foerster (McKendrick 1926), często występujące w zastosowaniach biologii i opisujące ewolucję populacji.

$$\begin{aligned}\partial_t u(t, x) + \partial_x(b(t, x)u(t, x)) + c(t, x)u(t, x) &= 0, \\ u(t, x_b) &= \int_{x_b}^{\infty} \beta(t, x)u(t, x)dx, \\ u(0, x) &= u_0(x).\end{aligned}\tag{11}$$

W ostatniej dekadzie najchętniej wykorzystywaną przez biologów metodą obliczeniową jest *Escalator Boxcar Train* (EBT), oparta na metodzie cząstek. Schemat EBT jest intuicyjny, prosty i kompatybilny z pomiarami, jakie pobierają praktycy. Ideę EBT dla równania skalarnego można opisać w czterech krokach

- (i) Ustalamy punkty węzłowe siatki przestrzennej w czasie $t = 0$ tworząc tym samym kohorty.
- (ii) Warunek początkowy równania transportu, $u_0(x) = u(0, x)$, prezentujemy jako liniową kombinację delt Diraca: $\bar{u}_0(x) := \sum_k m_k(0)\delta_{x_k(0)}$, gdzie $m_k(0)$ reprezentuje całkę funkcji $u_0(x)$ w kohorcie zawierającej punkt $x_k(0)$. Punkt $x_k(0)$ jest lokalizacją cząstki o masie $m_k(0)$ w k -tej kohorcie.
- (iii) Lokalizacje $x_k(t)$, kohorty oraz masy $m_k(t)$ ewoluują w czasie zgodnie z członem transportu w równania. W konsekwencji w czasie t rozwiązanie równania aproksymowane jest jako kombinacja liniowa delt Diraca: $\bar{u}(t, x) := \sum_k m_k(t)\delta_{x_k(t)}$.
- (iv) W przeciwieństwie do zagadnień fizyki, gdzie równania są często konserwatywne, tutaj model wyposażony jest w nielokalny człon odnowy. W związku z tym wprowadzamy siatkę na zmienną czasową, a jej węzły nazywamy *punktami internalizacji*. W punktach internalizacji nowe osobniki wchłaniane są do systemu, co często owocuje dodaniem początkowej kohorty (wykres 3). (To jest bardzo newralgiczny moment algorytmu, który odpowiada za stratę rzędu jego zbieżności. Aby temu zapobiec, nie ma innego wyjścia, jak odwołać się do metod dekompozycji.)

Model EBT jest tak naprawdę układem równań różniczkowych zwyczajnych opisujących ewolucję lokalizacji $x_k(t)$ i mas $m_k(t)$ wzdłuż kohort. Równania te można aproksymować dowolną metodą (np Eulera czy Runge-Kutta), a jeśli tylko to możliwe – wyliczyć analitycznie.

W pracy (4) wyprowadzamy metodę typu EBT dla układu równań. Koncentrujemy więc naszą uwagę na modelu opisującym ewolucję populacji dwu-płciowej. Model taki (model Fredrickson–Hoppensteadt) po raz pierwszy zaproponowany był w (Fredrickson 1971), a potem analizowany w (Hoppensteadt 1975). Model ten składa się z trzech równań ewolucji populacji, sprzężonych nielokalnymi i nieliniowymi warunkami brzegowymi. Funkcje $u^m(t, x)$ i $u^f(t, x)$ opisują rozkład mężczyzn i kobiet, a $u^c(t, x, y)$ opisuje rozkład populacji par w czasie t . Zmienne strukturalne x i y oznaczają wiek mężczyzn i kobiet, odpowiednio:

$$\begin{aligned}\partial_t u^m(t, x) + \partial_x u^m(t, x) + c^m(t, x)u^m(t, x) &= 0, \\ u^m(t, 0) &= \int_{\mathbb{R}_+^2} \beta^m(t, x, y)u^c(t, x, y)dxdy, \\ u^m(0, x) &= u_0^m(x), \\ \partial_t u^f(t, y) + \partial_y u^f(t, y) + c^f(t, y)u^f(t, y) &= 0, \\ u^f(t, 0) &= \int_{\mathbb{R}_+^2} \beta^f(t, x, y)u^c(t, x, y)dxdy, \\ u^f(0, x) &= u_0^f(x),\end{aligned}\tag{12}$$

$$\begin{aligned}
\partial_t u^c(t, x, y) + \partial_x u^c(t, x, y) + \partial_y u^c(t, x, y) + c^c(t, x, y)u^c(t, x, y) &= \mathcal{T}(t, x, y), \\
u^c(t, x, 0) = u^c(t, 0, y) &= 0, \\
u^c(0, x, y) &= u_0^c(x, y).
\end{aligned}$$

Funkcje c^m , c^f i c^c są współczynnikami umieralności mężczyzn i kobiet oraz rozpadu par, odpowiednio. Funkcje β^m i β^f są tempem narodzin mężczyzn i kobiet. Funkcja małżeństw \mathcal{T} opisuje ile małżeństw zawieranych jest między mężczyznami w wieku x , kobietami w wieku y w chwili czasu t . Wszystkie te współczynniki zależą nieliniowo i nielokalnie od całej, dwu-płciowej populacji.

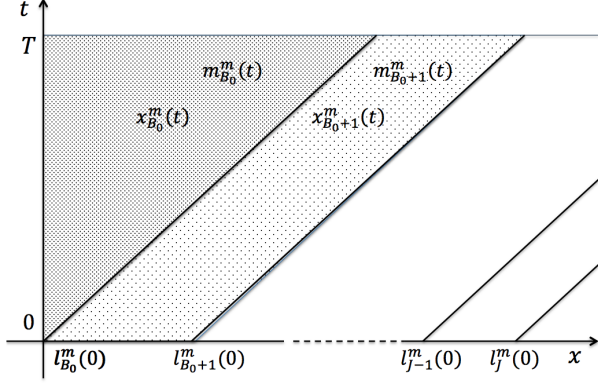


Figure 2: Ewolucja początkowych kohort dla populacji mężczyzn

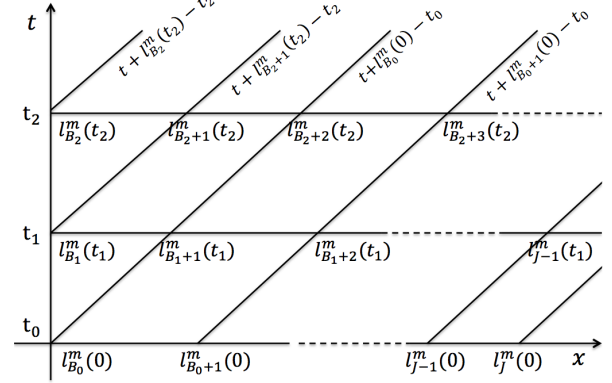


Figure 3: Kohorty i momenty internalizacji dla populacji mężczyzn

Główna trudność w wyprowadzeniu metody EBT dla układu równań polegała nie tylko na nieliniowości i nielokalności warunków brzegowych, ale przede wszystkim na skomplikowanym sposobie sprzężenia równań poprzez funkcję małżeństw T . W pracy przedstawiliśmy również wynik dotyczący rozwiązalności zaproponowanego układu równań, natomiast dowód jego zbieżności oraz przykłady numeryczne zostały przedstawione w wysłanej niedawno pracy (8). Obecnie pracujemy na podniesieniu dokładności modelu EBT, co robimy wprowadzając metody dekompozycji oraz podnosząc regularność zagadnienia z nieujemnych miar Radona z odległością Fortet-Mourier do pewnych przestrzeni Sobolewa.

(5) Duże oscylacje i potencjał czaso-zależny

W pracy (5) rozważamy liniowe równanie Schrödingera (TDSE) opisujące ruch cząsteczki poruszającej się w czaso-zmiennym polu elektrycznym,

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = i \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - iV(x, t)u(x, t), \quad x \in \mathbb{R}, \quad t \geq 0, \quad (13)$$

gdzie $u = u(x, t)$ jest funkcją niewiadomą o wartościach w przestrzeni zespolonej, a warunek początkowy jest zadany przez $u(x, 0) = u_0(x)$. Funkcja $V(x, t)$ o wartościach rzeczywistych jest czaso-zmiennym potencjałem elektrycznym. Równanie rozważane jest w jednostkach atomowych, czyli przyjmując, że stała Plancka jest przeskalowana do jedynki ($\hbar = 1$).

Równania te (z czaso-zmiennym potencjałem) są szczególnie ważne w zastosowaniach, ponieważ pozwalają badać zachowanie się cząstek pod wpływem zmieniającego się w czasie potencjału elektrycznego.

Ponieważ możliwości manipulowania polem elektrycznym (np kształtowanie impulsów laserowych) staje się coraz bardziej zaawansowana, sterowanie kwantowymi systemami atomowymi i molekularnymi stają się możliwe, (Shapiro & Brumer 2003). Teoria sterowania optymalnego układami kwantowymi jest jednym z wielu wyzwań, które wymagają efektywnych (czyli dokładnych i wydajnych) metod aproksymacji równania (13), które nierzadko cechowane są przez silnie oscylujące potencjały elektryczne w dużych przedziałach czasoprzestrzennych.

Aproksymując (13) zazwyczaj rozpoczyna się prace od semidyskretyzacji

$$\mathbf{u}'(t) = i(\mathcal{K}_2 - \mathcal{D}_{V(\cdot, t)})\mathbf{u}(t), \quad t \geq 0, \quad (14)$$

gdzie wektor $\mathbf{u}(t) \in \mathbb{C}^M$ jest aproksymacją rozwiązania w momencie t , $\mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0$ jest otrzymana z warunków początkowych, a \mathcal{K}_2 i $\mathcal{D}_{V(\cdot, t)}$ są macierzami $M \times M$ wymiarowymi reprezentującymi dyskretyzację drugiej pochodnej oraz mnożenie przez potencjał $V(\cdot, t)$, odpowiednio.

Rozważmy ogólniejszy przypadek układu (14) postaci

$$\mathbf{u}'(t) = A(t)\mathbf{u}(t), \quad t \geq 0. \quad (15)$$

Przyjmując, że $A(t) = i(\mathcal{K}_2 - \mathcal{D}_{V(\cdot, t)})$, możemy rozwiązać ten układ za pomocą rozwinięcia Magnusa (Magnus 1954),

$$\mathbf{u}(t) = e^{\Theta(s, t)}\mathbf{u}(s), \quad (16)$$

gdzie $\Theta(s, t) \in \mathfrak{u}_M(\mathbb{C})$ jest czaso-zmienną macierzą rozmiaru $M \times M$, której eksponent ewoluuje od chwili czasu s do t . Rozwinięcie Magnusa $\Theta(s, t)$ uzyskane jest za pomocą nieskończonego szeregu $\sum_{k=1}^{\infty} \Theta^{[k]}(s, t)$, gdzie każdy składnik $\Theta^{[k]}(s, t)$ zbudowany jest z k zagnieżdżonych całek z $k - 1$ zagnieżdżonych komutatorów (jak poniżej).

W praktyce pracujemy na skończonych sumach szeregu Magnusa,

$$\Theta_m(s, t) = \sum_{k=1}^m \Theta^{[k]}(s, t),$$

i propagujemy rozwiązanie w odpowiednio małych krokach czasowych h , $\mathbf{u}^{n+1} = e^{\Theta_m(t_n, t_n+h)}\mathbf{u}^n$, aby kontrolować błąd obciążenia. Dla przejrzystości prezentacji przeanalizujemy tu tylko pierwszy krok (czasowy),

$$\mathbf{u}^1 = e^{\Theta_m(h)}\mathbf{u}^0, \quad (17)$$

rozumiejąc, że $\Theta_m(h) = \Theta_m(0, h)$. Pierwsze wyrazy rozwinięcia $\Theta_m(h)$ przyjmują formę

$$\begin{aligned} \Theta^{[1]}(h) &= \int_0^h A(\xi_1) d\xi_1, \\ \Theta^{[2]}(h) &= -\frac{1}{2} \int_0^h \left[\int_0^{\xi_1} A(\xi_2) d\xi_2, A(\xi_1) \right] d\xi_1, \\ \Theta^{[3]}(h) &= \frac{1}{12} \int_0^h \left[\int_0^{\xi_1} A(\xi_2) d\xi_2, \left[\int_0^{\xi_1} A(\xi_2) d\xi_2, A(\xi_1) \right] \right] d\xi_1 \\ &\quad + \frac{1}{4} \int_0^h \left[\int_0^{\xi_1} \left[\int_0^{\xi_2} A(\xi_3) d\xi_3, A(\xi_2) \right] d\xi_2, A(\xi_1) \right] d\xi_1. \end{aligned}$$

Najprostsze przybliżenie otrzymamy przyjmując, że $\Theta_1(h) \approx \Theta^{[1]}(h)$,

$$\mathbf{u}^1 = e^{\Theta_1(h)}\mathbf{u}^0 = \exp\left(\int_0^h A(\xi) d\xi\right)\mathbf{u}^0 = \exp\left(ih\mathcal{K}_2 - i \int_0^h \mathcal{D}_{V(\xi)} d\xi\right)\mathbf{u}^0.$$

Operator $\int_0^h \mathcal{D}_{V(\xi)} d\xi = \mathcal{D}_{\int_0^h V(\xi) d\xi}$ zazwyczaj aproksymuje się biorąc wartość funkcji V w środku całkowanego przedziału, $\int_0^h V(\xi) d\xi \approx hV(h/2)$. Następnie stosuje się dekompozycję Stranga

$$\mathbf{u}^1 = \exp\left(\frac{1}{2}ih\mathcal{K}_2\right) \exp\left(-ih\mathcal{D}_{V(h/2)}\right) \exp\left(\frac{1}{2}ih\mathcal{K}_2\right)\mathbf{u}^0. \quad (18)$$

Oczywiste jest, że aby otrzymać metody wyższego rzędu musimy używać większej ilości składników rozwinięcia Magnusa, które są bardzo skomplikowane i kosztowne do obliczeń. W omawianej pracy zajmujemy się tym właśnie problemem i proponujemy bezkomutatorowe rozwinięcie Magnusa, którego składniki są takiej struktury i rozmiarów (w sensie spektralnym), że iteracje Lanczosa (pochodzące z metody podprzestrzeni Kryłowa) nie są kosztowne. Wykorzystując specyficzną strukturę (13),

1. zachowujemy wszystkie zalety rozwinięcia Magnusa i iteracji Lanczosa,
2. pozbywamy się zagnieżdżonych komutatorów, a zatem wzrostu rozmiaru spektralnego składników rozwinięcia Magnusa;
3. niezagnieżdżone anty-komutatory zachowują anty-Hermitowskość rozwinięcia, a zatem unitarność rozwiązania i stabilność metody,
4. zachowujemy całki z rozwinięcia Magnusa do ostatniego momentu w algorytmie, w ten sposób mamy większe możliwości w wyborze ich aproksymacji, co często prowadzi do obniżenia kosztu obliczeń.
5. rozwinięcie posiada mniej zagnieżdżonych całek. Wyprowadzona przez nas metoda szóstego rzędu, dla przykładu, ma tylko dwukrotnie zagnieżdżone całki (zamiast czterokrotnego, jak jest to w standardowym Magnusie). Ta własność nie tylko obniża koszt obliczeń, ale również ułatwia analizę i asymptotykę aproksymacji.

W każdej iteracji Lanczosa musimy obliczyć $\Theta_m v$. Jeśli $\Theta_m v$ zbudowane jest z zagnieżdżonych komutatorów (jak to jest w standardowym rozwinięciu Magnusa), to koszt takich obliczeń rośnie eksponencjalnie względem m . Jeśli $\Theta_m v$ nie posiada zagnieżdżonych komutatorów (jak jest to w naszej metodzie) koszt rośnie zaledwie liniowo względem m .

Ponadto, mając możliwość “przechowania” całek do ostatniego etapu algorytmu, mamy możliwość pozostania elastycznym względem wyboru odpowiedniej aproksymacji. Często okazuje się, że całki te można obliczyć analitycznie, a jeśli nie, to możemy wybrać optymalną kwadraturę o optymalnym rzędzie, utrzymując całkowity koszt obliczeniowy metody na minimalnym poziomie. Podejście takie jest szczególnie korzystne, gdy potencjał jest silnie oscylujący aproksymacja kilkakrotnych całek z jego pochodnych jest kosztownym procesem.

Główny pomysł pracy (5) oparty jest na definicji anty-komutatorów:

$$\langle f \rangle_k := \frac{1}{2} (f \circ \partial_x^k + \partial_x^k \circ f), \quad k \geq 0, \quad f \in C_p^\infty(I; \mathbb{R}), \quad (19)$$

które są symetryczne. Operacje tak zdefiniowanego anty-komutatora na funkcji u , na przykład, przyjmuje postać $\langle f \rangle_k u = \frac{1}{2} (f \partial_x^k u + \partial_x^k (f u))$. Łatwo sprawdzić, że dyskretyzacja operatora $\langle f \rangle_k$ jest anty-Hermitowska dla nieparzystych k i Hermitowska dla parzystych k . To kolejny powód, dla którego wybór algebry anty-komutatorów $\langle \cdot \rangle_k$ jest optymalny.

Zauważmy, że z definicji (19) wynika, że anty-komutatory są liniowe, np $\langle 2f(\partial_x g) - (\partial_x f)g \rangle_2 = 2 \langle f(\partial_x g) \rangle_2 - \langle (\partial_x f)g \rangle_2$ oraz, że $\langle f \rangle_0 = f$ i $\langle 1 \rangle_2 = \partial_x^2$.

Na poniższych przykładach widzimy, jak zagnieżdżone komutatory mogą być wymienione przez liniowe kombinacje anty-komutatorów,

$$\begin{aligned} [i\partial_x^2, iV] &= -[\langle 1 \rangle_2, \langle V \rangle_0] = -2 \langle \partial_x V \rangle_1, \\ [iV, [i\partial_x^2, iV]] &= -i[\langle V \rangle_0, [\langle 1 \rangle_2, \langle V \rangle_0]] = 2i \langle (\partial_x V)^2 \rangle_0, \\ [i\partial_x^2, [i\partial_x^2, iV]] &= -i[\langle 1 \rangle_2, [\langle 1 \rangle_2, \langle V \rangle_0]] = i \langle \partial_x^4 V \rangle_0 - 4i \langle \partial_x^2 V \rangle_2. \end{aligned}$$

Zgodnie z tym, co wspomniano wcześniej, bezpośrednia dyskretyzacja tych operatorów zachowuje anty-Hermitowskość, co jest niezbędne do zachowania unitarności rozwiązania numerycznego (i dla stabilności metody).

Poza główną ideą stosowania anty-komutatorów wykorzystujemy również odpowiednie sumy częściowe (segregowane przez wielkość składników sumy, a nie przez kolejność w jakiej dochodzą do rozwinięcia Magnusa), które zachowują symetryczność metod, co skutkuje dalszymi uproszczeniami wyrażeń całkowych. Przedstawiamy ogólny sposób, w jaki można wyprowadzić metodę dowolnie wysokiego rzędu oraz prezentujemy w szczególności metodę rzędu szóstego, która przyjmuje następującą formę

$$\Theta_4(h) = \overbrace{ih\partial_x^2 - i\mu_{0,0}(h)}^{\mathcal{O}(h)} - 2\overbrace{\langle \partial_x \mu_{1,1}(h) \rangle_1}^{\mathcal{O}(h^3)} + i\Lambda[\psi]_{1,1}(h) + 2i\overbrace{\langle \partial_x^2 \mu_{2,1}(h) \rangle_2}^{\mathcal{O}(h^4)} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} & + \frac{1}{6}\overbrace{\langle \Lambda[\varphi_1]_{1,2}(h) + \Lambda[\varphi_2]_{2,1}(h) \rangle_1}^{\mathcal{O}(h^4)} + \frac{1}{6}\overbrace{\langle \Lambda[\phi_1]_{1,2}(h) + \Lambda[\phi_2]_{2,1}(h) \rangle_1}^{\mathcal{O}(h^5)} \\ & + \frac{4}{3}\overbrace{\langle \partial_x^3 \mu_{3,1}(h) \rangle_3}^{\mathcal{O}(h^5)} + \frac{1}{4}\overbrace{i\partial_x^4 \mu_{2,1}(h)}^{\mathcal{O}(h^4)} = \Theta(h) + \mathcal{O}(h^7), \end{aligned} \quad (21)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \varphi_1(h, \zeta, \xi) &= h^2 - 4h\xi + 2\zeta\xi, \\ \varphi_2(h, \zeta, \xi) &= (h - 2\zeta)^2 - 2\zeta\xi, \\ \phi_1(h, \zeta, \xi) &= h^2 - 6h\zeta + 6h\xi + 6\zeta\xi + 3\zeta^2 - 12\xi^2, \\ \phi_2(h, \zeta, \xi) &= h^2 - 6h\zeta + 6h\xi - 6\zeta\xi + 5\zeta^2, \end{aligned}$$

oraz

$$\mu_{j,k}(h) = \int_0^h \tilde{B}_j^k(h, \zeta) V(\zeta) d\zeta, \quad (22)$$

$$\Lambda[f]_{a,b}(h) = \int_0^h \int_0^\zeta f(h, \zeta, \xi) [\partial_x^a V(\zeta)] [\partial_x^b V(\xi)] d\xi d\zeta, \quad (23)$$

a \tilde{B} są przeskalowanymi wielomianami Bernoulliego,

$$\tilde{B}_j(h, \zeta) = h^j B_j(\zeta/h).$$

Wykorzystując liniowość anty-komutatorów, $\Theta_4(h)$ możemy zapisać w znacznie prostszej formie,

$$\Theta_4(h) = \theta_0 + \langle \theta_1 \rangle_1 + \langle \theta_2 \rangle_2 + \langle \theta_3 \rangle_3 \quad (24)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \theta_0 &= -i\mu_{0,0}(h) + i\Lambda[\psi]_{1,1}(h) + \frac{1}{4}i\partial_x^4 \mu_{2,1}(h), \\ \theta_1 &= -2\partial_x \mu_{1,1}(h) + \frac{1}{6}\Lambda[\varphi_1 + \phi_1]_{1,2}(h) + \frac{1}{6}\Lambda[\varphi_2 + \phi_2]_{2,1}(h), \\ \theta_2 &= ih + 2i\partial_x^2 \mu_{2,1}(h), \\ \theta_3 &= \frac{4}{3}\partial_x^3 \mu_{3,1}(h). \end{aligned} \quad (25)$$

Zapisując Θ_4 w formie (24) jasno widać, że rozwinięcie nie posiada zagnieżdżonych komutatorów, ale zbudowane jest z małej liczby anty-komutatorów. Co więcej, liczba koniecznych anty-komutatorów rośnie liniowo w stosunku do żądanej dokładności (w przeciwieństwie do standardowego rozwinięcia Magnusa, gdzie nie dość, że zagnieżdżone komutatory są dużo droższe, to jeszcze ich ilość rośnie wykładniczo w stosunku do żądanej dokładności).

Przypomnijmy, że anty-komutatory są pomocne dla unitarności, zachowania normy i stabilności. Istotnie, rozwinięcie Magnusa przybiera teraz postać $\sum_{k=0}^{\infty} i^{k+1} \langle \theta_k \rangle_k$ dla pewnych θ_k , a składniki sumy $i^{k+1} \langle \theta_k \rangle_k$ dyskretyzują się do form anty-Hermitowskich. Łatwo widać więc, że całe rozwinięcie Magnusa jest anty-Hermitowskie, a więc jego eksponent (rozwiązanie) jest unitarne,

$$\|\mathbf{u}^1\|_2 = \|\exp(\Theta_m(h)) \mathbf{u}^0\|_2 = \|\mathbf{u}^0\|_2,$$

a więc norma rozwiązania \mathbf{u} jest zachowana. W konsekwencji, unitarność gwarantuje stabilność naszej metody niezależnie od wyboru podziału czasowego h ani przestrzennego Δx .

(6) Duże oscylacje i potencjał czaso-zależny w reżimie semiklasycznym

Rozważmy teraz liniowe równanie Schrödingera (TDSE) opisujące ruch cząsteczki poruszającej się w czaso-zmiennym polu elektrycznym,

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = i\varepsilon \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + i\varepsilon^{-1} V(x, t) u(x, t), \quad x \in [-1, 1], \quad t \geq 0, \quad (26)$$

z warunkiem początkowym $u(x, 0) = u_0(x)$ i z okresowymi warunkami brzegowymi. Jak wyjaśniliśmy opisując wyniki w (5), metody wypracowane w (3) nie mogą być zaadoptowane w równaniach z potencjałem czaso-zmiennym. Rozwiązanie zaprezentowane w (5) bazuje na rozpisaniu rozwinięcia Magnusa w formie anty-komutatorów oraz na “zachowaniu całek” i aproksymowaniu ich pod koniec algorytmu. Pracując w reżimie semiklasycznym zastosowanie tylko tych zabiegów nie byłoby efektywne. Dodatkowo należy zastosować asymptotyczną dekompozycję Zassenhaussa. Takie właśnie podejście zostało zaproponowane w manuskrypcie (7), który jest obecnie w recenzji w *Journal of Computational Physics*. Metoda ta daje spektakularne wyniki jeśli potencjał jest silnie oscylujący. Jeśli potencjał nie oscyluje zbyt szybko, to proponujemy metodę opisaną w pracy (6), ponieważ jest ona bardzo szybka.

W pracy (6), (podobnie jak w pracach (3) i (5)) nie przechodzimy od razu do semidyskretyzacji, ale działamy w grupach Liego. Podobnie jak w (5) rozwinięcie Magnusa zapisujemy jako sumę anty-komutatorów (co obniża koszty obliczeń, zapewnia unitarność rozwiązań i stabilność metody).

Główną różnicą między metodami opisanymi w pracach (5) i (6) jest to, że podczas gdy w (5) trzymamy całki “nie zdyskretyzowane”, to w (6) uciekamy się to bazy Munthe-Kaas–Owren. Faktycznie, okazuje się, że wielokrotne całki mogą być efektywnie aproksymowane używając dość prostych jednowymiarowych kwadratur prezentowanych w Munthe-Kaas & Owren (1999). Naśladując to podejście, pobieramy wartości potencjału w punktach kwadratury Gaussa–Legendre ($t_1 = h \left(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10} \right)$, $t_2 = \frac{h}{2}$, $t_3 = h \left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10} \right)$), które potem wykorzystujemy, aby uzyskać “tańsze” kwadratury z pochodnych potencjału, (Iserles & Nørsett 1999). W rezultacie, metoda szóstego rzędu sprowadza się do wzoru

$$\begin{aligned} \Theta(h) = & B_1 + \frac{1}{12} B_3 - \frac{1}{12} [B_1, B_2] + \frac{1}{240} [B_2, B_3] + \frac{1}{360} [B_1, [B_1, B_3]] \\ & - \frac{1}{240} [B_2, [B_1, B_2]] + \frac{1}{720} [B_1, [B_1, [B_1, B_2]]] + \mathcal{O}(h^7), \end{aligned} \quad (27)$$

gdzie dla $A(t) = i(\mathcal{K}_2 - \mathcal{D}_{V(\cdot, t)})$ spełniającego (15), B_1 , B_2 i B_3 mają wartości:

$$B_1 = hA(t_2), \quad B_2 = \frac{\sqrt{15}}{3} h(A(t_3) - A(t_1)), \quad B_3 = \frac{10}{3} h(A(t_3) - 2A(t_2) + A(t_1)). \quad (28)$$

Pochodne potencjału aproksymujemy w standardowy sposób

$$V_0 = V(t_2), \quad V_1 = \frac{\sqrt{15}}{3h} (V(t_3) - V(t_1)), \quad V_2 = \frac{10}{3h^2} (V(t_3) - 2V(t_2) + V(t_1)),$$

i zauważamy, że B_1 , B_2 i B_3 przyjmują wartości

$$B_1 = ih\varepsilon \partial_x^2 - ih\varepsilon^{-1} V_0, \quad B_2 = ih^2 \varepsilon^{-1} V_1, \quad B_3 = ih^3 \varepsilon^{-1} V_2.$$

Wykorzystując notację anty-komutatorów wyprowadzamy wzór na Θ_4 , (który ma postać $\sum_k i^{k+1} c_k \langle f_k \rangle_k$)

gdzie $c_k \in \mathbb{Q}$ oraz $f_k \in C_p^\infty([-1, 1]; \mathbb{R})$, tak, jak było to w pracy **(5)**,

$$\begin{aligned} \Theta_4 = & ih\varepsilon \langle 1 \rangle_2 - ih\varepsilon^{-1} \langle V_0 \rangle_0 - \frac{1}{12} ih^3 \varepsilon^{-1} \langle V_2 \rangle_0 - \frac{1}{6} h^3 \langle \partial_x V_1 \rangle_1 \\ & + \frac{1}{360} \left(4ih^5 \varepsilon \langle \partial_x^2 V_2 \rangle_2 - ih^5 \varepsilon \langle \partial_x^4 V_2 \rangle_0 + 2ih^5 \varepsilon^{-1} \langle (\partial_x V_2)(\partial_x V_0) \rangle_0 \right) \\ & - \frac{1}{120} ih^5 \varepsilon^{-1} \langle (\partial_x V_1)^2 \rangle_0 + \frac{1}{720} \left(-8h^5 \varepsilon^2 \langle \partial_x^3 V_1 \rangle_3 + 3h^5 \varepsilon^2 \langle \partial_x^5 V_1 \rangle_1 \right. \\ & \quad \left. - h^5 \langle 12(\partial_x^2 V_1)(\partial_x V_0) + 4(\partial_x V_1)(\partial_x^2 V_0) \rangle_1 \right), \end{aligned} \quad (29)$$

które może być dalej uproszczone do

$$\begin{aligned} \Theta_4 = & \overbrace{ih\varepsilon \partial_x^2 - ih\varepsilon^{-1} V_0}^{\mathcal{O}(\varepsilon^{\sigma-1})} - \overbrace{\frac{1}{12} ih^3 \varepsilon^{-1} V_2 - \frac{1}{6} h^3 \langle \partial_x V_1 \rangle_1}^{\mathcal{O}(\varepsilon^{3\sigma-1})} \\ & + \overbrace{\frac{1}{360} ih^5 \varepsilon^{-1} \left(2(\partial_x V_2)(\partial_x V_0) - 3(\partial_x V_1)^2 \right)}^{\mathcal{O}(\varepsilon^{5\sigma-1})} \\ & - \overbrace{\frac{1}{180} h^5 \langle (\partial_x V_1)(\partial_x^2 V_0) + 3(\partial_x V_0)(\partial_x^2 V_1) \rangle_1}^{\mathcal{O}(\varepsilon^{5\sigma-1})} \\ & + \overbrace{\frac{1}{90} ih^5 \varepsilon \langle \partial_x^2 V_2 \rangle_2 - \frac{1}{90} h^5 \varepsilon^2 \langle \partial_x^3 V_1 \rangle_3}^{\mathcal{O}(\varepsilon^{5\sigma-1})} = \Theta + \mathcal{O}(\varepsilon^{7\sigma-1}). \end{aligned} \quad (30)$$

O ile w przypadku pracy **(5)** nie pracowaliśmy w reżimie semiklasycznym, o tyle tutaj mamy do czynienia z wciąż kosztownymi (dużymi w sensie spektralnym) składnikami sumy rozwinięcia Magnusa. W związku z tym adaptujemy pomysł opracowany w **(3)** i wyprowadzamy *asymptotyczną dekompozycję Zassenhausa*,

$$e^{\Theta_4} = e^{\frac{1}{2}W^{[0]}} e^{\frac{1}{2}W^{[1]}} e^{\frac{1}{2}W^{[2]}} e^{W^{[3]}} e^{\frac{1}{2}W^{[2]}} e^{\frac{1}{2}W^{[1]}} e^{\frac{1}{2}W^{[0]}} + \mathcal{O}(\varepsilon^{7\sigma-1}), \quad (31)$$

gdzie

$$\begin{aligned} W^{[0]} = & i\varepsilon h \partial_x^2 = \mathcal{O}(\varepsilon^{\sigma-1}), \\ W^{[1]} = & -i\varepsilon^{-1} h V_0 = \mathcal{O}(\varepsilon^{\sigma-1}), \\ W^{[2]} = & \frac{1}{12} i\varepsilon^{-1} h^3 \left(2(\partial_x V_0)^2 - V_2 \right) - \frac{1}{6} h^3 \langle \partial_x V_1 \rangle_1 + \frac{1}{6} i\varepsilon h^3 \langle \partial_x^2 V_0 \rangle_2 = \mathcal{O}(\varepsilon^{3\sigma-1}), \\ W^{[3]} = & -\frac{1}{24} i\varepsilon h^3 (\partial_x^4 V_0) - \frac{1}{360} i\varepsilon^{-1} h^5 \left(13(\partial_x V_0)^2 (\partial_x^2 V_0) + 3(\partial_x V_1)^2 - 12(\partial_x V_2)(\partial_x V_0) \right) \\ & + \frac{1}{30} h^5 \langle 2(\partial_x V)(\partial_x^2 V_1) - (\partial_x V_1)(\partial_x^2 V) \rangle_1 \\ & - \frac{1}{720} i\varepsilon h^5 \langle 127(\partial_x V_0)(\partial_x^3 V_0) + 130(\partial_x^2 V_0)^2 - 18(\partial_x^2 V_2) \rangle_2 \\ & + \frac{1}{60} \varepsilon^2 h^5 \langle \partial_x^3 V_1 \rangle_3 - \frac{13}{90} i\varepsilon^3 h^5 \langle \partial_x^4 V_0 \rangle_4 = \mathcal{O}(\varepsilon^{5\sigma-1}). \end{aligned}$$

BIEŻĄCE I PLANOWANE PROJEKTY OPARTE NA OPRACOWANYCH METODOLOGIACH **(1)**–**(6)**

Zakres tematyki poruszanej w pracach **(1)**–**(6)** dotyczy problematycznych aspektów metod obliczeniowych dla równań różniczkowych typu ewolucyjnego. Zaproponowawszy rozwiązania dla krytycznych problemów obliczeniowych zdobyłam doświadczenie i sposoby, które teraz mogą łączyć i zmieniać tak,

aby budować efektywne metody dla szerszej gamy ewolucyjnych równań różniczkowych. W ostatnim roku (2017) przyznano mi dwa granty NCN w których wdrażam metody oparte na pomysłach prac (1)–(6). Grant HARMONIA skupiony jest na ewolucyjnych równaniach różniczkowych stosowanych w mechanice kwantowej, a grant SONATA na takich równaniach z zastosowaniami w biologii. Od dłuższego czasu pracuję nad tematyką, której podwaliny zostały opisane w prezentowanym cyklu prac (1)–(6):

- Dowód zbieżności metody zaproponowanej w (4) oraz przykłady numeryczne przedstawiające obliczenia w sensie odległości Fortet-Movier zostały opisane w (8) i są obecnie w recenzji w SINUM. Obecnie, razem z José Carrillo (Imperial College), Piotrem Gwiazdą (IMPAN) i Agnieszką Swierczewską-Gwiazdą (UW, Warszawa) pracujemy nad podniesieniem rzędu zbieżności metody EBT. W związku z tym wdrażamy tu metody dekompozycji pola wektorowego ((3), (5) i (6)). Oczywiście metoda Stranga może być wykorzystana, ale jeśli chcemy uzyskać lepszą precyzję aproksymacji, to musimy propagować czas w przestrzeni zespolonej.
- Wyniki otrzymane w (5) i (6) prowadzą bezpośrednio to teorii sterowania optymalnego w mechanice kwantowej, co jest tematem projektu wspólnego z Arieh Iserlesem (University of Cambridge, UK), Siną Ober-Blöbaum (University of Oxford, UK), oraz Pranavem Singhiem (University of Oxford, UK). Na tej tematyce planuję się również skupić w czasie sześciomiesięcznego semestru w Isaac Newton Institute (Cambridge), *Geometry, compatibility and structure preservation in computational differential equations* (Jesień 2019), do którego zostałam zaproszona.
- We współpracy z Yifa Tang z Chińskiej Akademii Nauk pracujemy nad wyprowadzeniem dekompozycji Zassenhausza dla równania Kleina–Gordona. Również w tym przypadku zaobserwowaliśmy redukcję rozmiary (spektralnego) komutatorów, tak jak to było w (3).
- Od prawie roku pracuję nad moim własnym projektem, w którym wyprowadzam *kompaktowe metody wyższego rzędu*, dla równania Schrödingera, (te metody będą mogły być łatwo zaadoptowane dla równania Diraca). Wykorzystuję tu formalizmy opracowane w (3) i (5) razem z wykorzystaniem bazy Gröbnera. Ukończywszy prace nad tym projektem, planuję połączyć siły z Reinoutem Quispelem (La Trobe University, Melbourne), który jest autorytetem w metodach dekompozycji tak, aby uogólnić mój wynik.
- We współpracy z Weizhu Bao (National University of Singapore, Singapore), Arieh Iserlesem (University of Cambridge, UK), Pranavem Singhiem (University of Oxford, UK) oraz Jią Yin (National University of Singapore, Singapore) pracujemy obecnie nad metodą czwartego rzędu dla równania Diraca w polu elektrycznym generowanym przez laser.
- Obecnie w współpracy z Othmarem Kochem (University of Vienna, Austria), Winfriedem Auzingerem (Technical University of Vienna, Austria) i Pranavem Singhiem (University of Oxford, UK) pracujemy nad zastosowaniem metody adaptacji kroku czasowego w metodzie dekompozycji z pracy (3), aby podnieść wydajność naszej metody.
- We współpracy z Othmarem Kochem (University of Vienna, Austria), Winfriedem Auzingerem (Technical University of Vienna, Austria), Pranavem Singhiem (University of Oxford, UK) i Haraldem Hofstatterem (University of Vienna, Austria) wyprowadziliśmy niedawno nową metodę dekompozycji dla układu równań ogniw słonecznych.
- Niedawno rozpoczęłam współpracę z Shevem MacNamarą (Sydney University of Technology) i Arieh Iserlesem (University of Cambridge) nad równaniami różniczkowymi w biologii matematycznej, w szczególności analizujemy *Master Equation* i jego numeryczne (zachowujące strukturę) rozwiązania.
- Wyniki pracy (5) rozszerzamy do przypadku stochastycznego równania Schrödingera we współpracy z Tomaszem Szarkiem (University of Gdansk) i Pranavem Singhiem (University of Oxford, UK).

Prace związane z tematyką rozprawy habilitacyjnej

- (7) Arieh Iserles, Karolina Kropielnicka, Pranav Singh, *Solving Schrödinger equation in semiclassical regime with highly oscillatory time-dependent potentials*,
w recenzji w Journal of Computational Physics,
- (8) José A. Carrillo, Piotr Gwiazda, Karolina Kropielnicka, Anna Marciniak-Czochra, *The Escalator Boxcar Train method for a system of age-structured equations in the space of measures*,
w recenzji w SIAM Journal of Numerical Analysis,
- (9) Arieh Iserles, Karolina Kropielnicka, Pranav Singh, *Compact schemes for laser-matter interaction in Schrödinger equation*,
w recenzji w Computer Physics Communications,

Prace (7) i (9) poświęcone są równaniu Schrödingera z potencjałem czaso-zmiennym. W (7) koncentrujemy się na reżimie semiklasycznym. Wyprowadzamy bezkomutatorowe rozwinięcie Magnusa, które zachowuje “nieruszone całki”, i wyprowadzamy dekompozycję Zassenhaus, które jest koniecznością w reżimie semiklasycznym. W pracy porównujemy tę metodę z innymi wiodącymi metodami. Nasze podejście nie tylko jest dużo tańsze obliczeniowo, ale również uzyskujemy istotnie mniejszą stałą błędy (co znaczy lepszą aproksymację).

Praca (9) oparta jest na zupełnie innym pomysle, gdzie wyprowadzamy tak zwaną metodę *kompaktową* dla równania Schrödingera opisującego ruch cząstek w polu elektrycznym sterowanym przez laser.

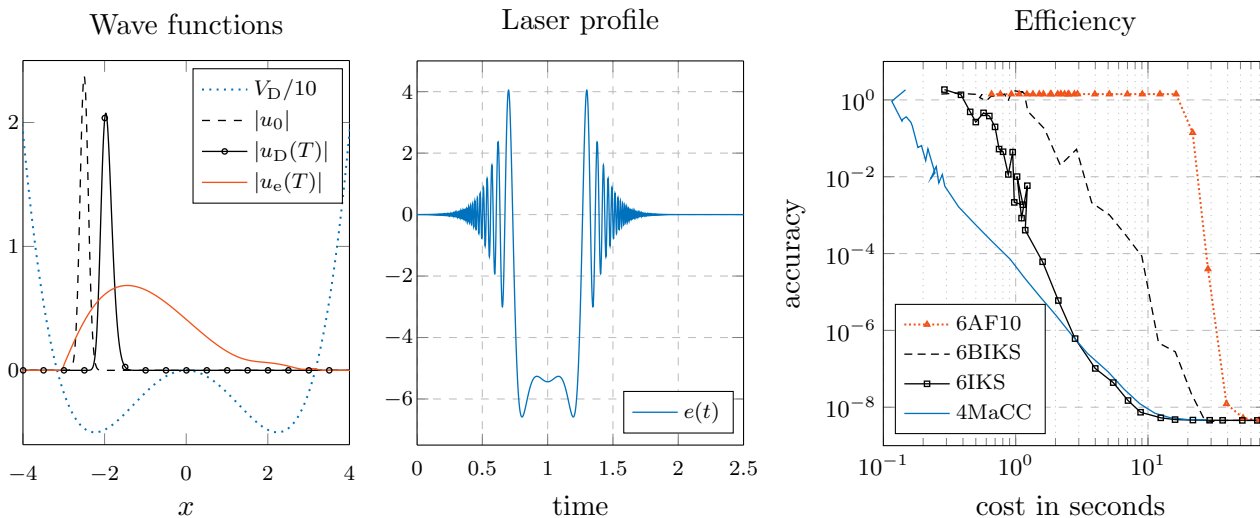


Figure 4: Performance of various schemes for laser-matter interaction in the semiclassical regime.

Aby zilustrować wydajność nowo wprowadzonych metod skupmy się na konkretnym przykładzie, gdzie parametr semiklasyczny $\epsilon = 10^{-2}$ (w wielu zastosowaniach parametr ten może być jeszcze mniejszy). Wtedy nasze metodologie wypadają jeszcze lepiej w porównaniu do innych znanych schematów). Przyjźyjmy się ewolucji Gaussowskiego pakietu falowego (z zerowym początkowym momentem),

$$u_0(x) = (\delta\pi)^{-1/4} \exp\left(\frac{-(x - x_0)^2}{2\delta}\right), \quad x_0 = -2.5, \delta = 10^{-2},$$

pod wpływem czaso-zmiennego potencjału,

$$V_D(x) = \frac{1}{5}x^4 - 2x^2.$$

Jak widzimy na wykresie (Figure 4, lewa kolumna), rozwiązanie, $u_D(T)$, zostaje “uwięzione w lewej studni potencjału aż do czasu $T = 2.5$. Jeśli jednak pole elektryczne pobudzimy laserem,

$$V_e(x, t) = V_D(x) + e(t)x,$$

możemy “zmusić” rozwiązanie $u_e(T)$ do przesunięcia się do prawej studni potencjału. Laser rozważany w opisywanym przykładzie ma postać

$$e(t) = 10 \exp(-10(t - 1)^2) \sin((500(t - 1)^4 + 10)),$$

o bardzo silnie oscylującym profilu czasowym, co jest zilustrowane na wykresie (Figure 4, środkowa kolumna).

Wydajność naszej metody jest przedstawiona na wykresie (Figure 4, prawa kolumna). Pierwsza z porównywanych metod (rzędu szóstego) jest zoptymalizowaną metodą bezkomutatorową zaproponowaną w (Alvermann & Fehske 2011), która niewątpliwie do tej pory stanowiła najlepszą opcję dla analizowanego problemu. W tej metodzie trzeba użyć 10 iteracji Lanczosa, stąd jej nazwa 6AF10. Metoda szóstego rzędu zaproponowana w pracy (6) oznaczona jest przez 6BIKS, i ilustruje dużą poprawę efektywności w porównaniu do 6AF10 dzięki asymptotycznej naturze dekompozycji Magnusa–Zassenhausa. Zauważmy, na przykład, że metoda 6AF10 jest bezużyteczna jeśli potrzebujemy dokładności rzędu 10^{-9} .

Metoda szóstego rzędu 6IKS opisana w (7), opisuje istotne ulepszenie w stosunku do metody z pracy (6). Dzieje się tak dlatego, że potencjał jest wysoko oscylujący a zachowując —nieruszone całki”, dyskretyzujemy je bardzo niskim kosztem pod koniec schematu. Pod koniec przedstawiamy metodę opracowaną w (9), jest to metoda zaledwie czwartego rzędu, a jest na tyle efektywna, że śmiało konkuruje z pozostałymi metodami, które są szóstego rzędu. Należy podkreślić jednak, że metoda opracowana w (9) jest bardzo wyspecjalizowana dla potencjału będącego laserem (ale takie właśnie potencjały są najczęściej wykorzystywane w teorii sterowania optymalnego!)

W pracy (8) dowiedliśmy zbieżności schematu EBT, który wyprowadzony był w (4). Zadanie to jest trudne z powodu postawienia problemu z przestrzeni nieujemnych miar Radona. W (8) zaprezentowaliśmy też przykłady numeryczne, które zilustrowały rozważania teoretyczne. Między innymi pokazaliśmy, że błąd metody EBT liczony metryce wahań całkowitego (Total Variation) nie zbiega do zera! Dopiero obliczenia w sensie odległości Forter-Mouriera potwierdziły zbieżność metody. Dodatkowym atutem pracy jest przeprowadzenie obliczeń dotyczących odległości Wasserstaina w przypadku 2D. Takie obliczenia są bardzo kosztowne i zastosowaliśmy tu nietrywialną metodę iteracji Bergmana opartą na wprowadzeniu metody relatywnej entropii.

Prace dotyczące metod różnicowych

- (10) Z. Kamont, K. Kropielnicka *Implicit difference methods for evolution functional differential equations*, Numerical Analysis and Applications, **4**, 2011, no. 4, 294–308
- (11) Z. Kamont, K. Kropielnicka *Comparison of explicit and implicit difference schemes for parabolic functional differential equations*, Annales Polonici Mathematici **103**, 2012, 135-160
- (12) K. Kropielnicka, L. Sapa *Estimate of solutions for differential and difference functional equations with applications to difference methods*, Applied Mathematics and Computation, **217**, 2011, no. 13, 6206 - 6218
- (13) Z. Kamont, K. Kropielnicka *Numerical method of lines for parabolic functional differential equations*, Applicable Analysis, **88**, 2009, no. 12, 1631 - 1650
- (14) Z. Kamont, K. Kropielnicka *Implicit difference functional inequalities corresponding to first-order partial differential functional equations*, Journal of Applied Mathematics and Stochastic Analysis, **2009**, Article ID 245720
- (15) Z. Kamont, K. Kropielnicka *Implicit difference functional inequalities and applications*, Journal of Mathematical Inequalities, **2**, 2008, no. 3, 407-427

- (16) K. Kropielnicka *Numerical method of bicharacteristic for quasilinear hyperbolic functional differential systems*, Commentationes Mathematicae, **45**, 2005, no.1, 91-109.
- (17) Z. Kamont, K. Kropielnicka *Differential difference inequalities related to hyperbolic functional differential systems and applications*, Mathematical Inequalities and Applications, **8**, 2005, no.4, 655-674.

Powyższe prace dotyczą problematyki schematów różnicowych, ale nie są związane z tematyką mojego doktoratu. Prace (16) i (17) poświęcone są równaniom hiperbolicznym. Nierówności i oszacowania analizowane są w pracach (12), (14) oraz (15). W pozostałych artykułach skupiam się schematach różnicowych uwikłanych.

Prace związane z moim doktoratem

- (18) K. Kropielnicka *Implicit difference methods for quasilinear parabolic functional differential problems of the Dirichlet type*, Applicationes Mathematicae, **35**, 2008, no.2, 155-175.
- (19) K. Kropielnicka *Implicit difference methods for parabolic functional differential problems of the Neumann type*, Nonlinear Oscillations, **11**, 2008, no. 3, 329-347
- (20) K. Kropielnicka *Implicit difference methods for quasilinear parabolic functional differential systems*, Universitatis Iagellonicae. Acta Mathematica, **45**, 2007, 175-195
- (21) K. Kropielnicka *Stability of implicit difference equations generated by parabolic functional differential problems*, Computational Methods in Applied Mathematics, **7**, 2007, no.1, 68-82.
- (22) K. Kropielnicka *Difference methods for parabolic functional differential problems of the Neumann type*, Annales Polonici Mathematici, **92**, 2007, no. 2, 163-178
- (23) K. Kropielnicka *Convergence of implicit difference methods for parabolic functional differential equations*, International Journal of Mathematical Analysis, **1**, 2007, no. 6, 257 - 277
- (24) K. Kropielnicka *Implicit difference method for nonlinear parabolic functional differential systems*, Demonstratio Mathematica, **39**, 2006, no.3, 711-728
- (25) K. Kropielnicka *Implicit difference method for parabolic functional differential equations*, Functional Differential Equations, **13**, 2006, no. 3-4, 483-510.

Powyższe artykuły stanowią cykl prac poświęconych uwikłanym schematom różnicowym dla parabolicznych równań różniczkowo-funkcyjnych.

References

- Bader, P., Iserles, A., Kropielnicka, K. & Singh, P. (2014), ‘Effective approximation for the semiclassical Schrödinger equation’, *Found. Comput. Math.* **14**(4), 689–720.
- Blanes, S., Casas, F. & Murua, A. (2006), ‘Symplectic splitting operator methods tailored for the time-dependent Schrödinger equation’, *J. Chem. Phys.* **124**, 234–105.
- Faou, E. (2012), *Geometric Numerical Integration and Schrödinger Equations*, Zurich Lectures in Advanced Mathematics, Europ. Math. Soc., Zürich.
- Fredrickson, A. G. (1971), ‘A mathematical theory of age structure in sexual populations: random mating and monogamous marriage models’, *Math. Biosci.* **10**, 117–143.
- Griffiths, D. J. (2004), *Introduction to Quantum Mechanics*, 2nd edn, Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ.

- Hoppensteadt, F. (1975), *Mathematical theories of populations: demographics, genetics and epidemics*, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, Pa. Regional Conference Series in Applied Mathematics.
- Iserles, A. & Kropielnicka, K. (2011), 'Effective approximation for linear time-dependent Schrödinger equation'. Technical Report NA2011/15.
- Iserles, A. & Nørsett, S. P. (1999), 'On the solution of linear differential equations in Lie groups', *Phil. Trans. R. Soc. A* **357**, 983–1019.
- Jin, S., Markowich, P. & Sparber, C. (2011), 'Mathematical and computational methods for semiclassical Schrödinger equations', *Acta Numerica* **20**, 121–210.
- Lubich, C. (2008), *From Quantum to Classical Molecular Dynamics: Reduced Models and Numerical Analysis*, Zurich Lectures in Advanced Mathematics, Europ. Math. Soc., Zürich.
- Magnus, W. (1954), 'On the exponential solution of differential equations for a linear operator', *Comm. Pure Appl. Math.* **7**, 649–673.
 URL: <https://doi.org/10.1002/cpa.3160070404>
- McKendrick, A. (1926), 'Applications of mathematics to medical problems', *Proc. Edinburgh Math. Soc.* **44**, 98–130.
- McLachlan, R. I. & Quispel, G. R. W. (2002), 'Splitting methods', *Acta Numerica* **11**, 341–434.
- Munthe-Kaas, H. & Owren, B. (1999), 'Computations in a free Lie algebra', *R. Soc. Lond. Philos. Trans. Ser. A Math. Phys. Eng. Sci.* **357**(1754), 957–981.
- Pao, C. (1998), 'Monotone methods for a finite difference system of reaction diffusion equation with delay', *Comp. Math. Appl.* **36**, 37–47.
- Pao, C. (1999), 'Monotone methods for a finite difference system of reaction diffusion equation with delay', *J. Math. Anal. Appl.* **240**, 249–279.
- Pao, C. (2002), 'Finite difference reaction diffusion systems with coupled boundary conditions and time delays', *J. Math. Anal. Appl.* **272**, 407–434.
- Shapiro, M. & Brumer, P. (2003), *Principles of the Quantum Control of Molecular Processes*, Wiley-Interscience, Hoboken, N.J.
- Yoshida, H. (1990), 'Construction of higher order symplectic integrators', *Phys. Lett. A* **150**(5-7), 262–268.
 URL: [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(90\)90092-3](https://doi.org/10.1016/0375-9601(90)90092-3)
- Z. Kamont, H. (1996), 'Stability of difference equations generated by parabolic differential-functional problems', *Rend. Mat. Appl.* **2**, 265–287.

Kardina Kropielnicka,

1.VI.2018