Streszczenie

rozprawy doktorskiej mgr inż. Tomasza Hoffmanna pt. ***„Solving the Poisson equation in proper and directed interval arithmetic”***

W rozprawie przedstawiono problematykę szacowania rozwiązań dokładnych dla równań różniczkowych cząstkowych eliptycznych, na przykładzie równania Poissona i jego uogólnień. Jak wiadomo równania różniczkowe cząstkowe umożliwiają modelowanie zjawisk fizycznych, wielu problemów naukowych i inżynierskich. Jeśli równania takie nie mogą być, przynajmniej w łatwy sposób rozwiązane analitycznie, to wówczas podejmujemy próbę zastosowania metod numerycznych. Jednakże otrzymywane komputerowo wyniki stanowią jedynie rozwiązanie przybliżone. Należy zauważyć, że w obrębie tak szerokiej dziedziny, jak równania różniczkowe cząstkowe, wciąż opracowywane są analityczne metody ich rozwiązywania. Niezwykle istotna jest tutaj również kwestia istnienia rozwiązania dla danego równania – w wielu przypadkach może ono nie istnieć [1]. Tak więc już samo zagadnienie musi spełniać określone warunki, by poszukiwanie dla niego rozwiązań przybliżonych było sensowne.

Badania autora skupiały się wokół rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych eliptycznych na przykładzie równania Poissona oraz jego uogólnionych postaci [5]. Dotyczą one zasadniczo metod z klasy różnic skończonych, które prowadzą do układów równań liniowych o bardzo dużych rozmiarach. W praktyce rodzi to dwa problemy: pierwszy, dotyczący optymalizacji użycia pamięci, a w szczególności przechowywania w pamięci macierzy rzadkich, oraz drugi, związany z koniecznością wykonania znaczącej liczby operacji arytmetycznych w celu uzyskania wyników, co stanowi źródło błędów numerycznych i może doprowadzić do otrzymania błędnego rezultatu. Problem przechowywania macierzy rzadkich i ograniczenia użycia pamięci jest już dobrze znany i istnieje wiele algorytmów skutecznie rozwiązujących tego typu zagadnienia, zaimplementowanych w wielu znanych bibliotekach programistycznych służących do obliczeń numerycznych. Z kolei problem drugi, dotyczący błędów zaokrągleń, podejmowany był od strony teoretycznej w książce Wilkinsona [11], oraz od strony praktycznej w pracy [2]. W obu przypadkach wykorzystano podejście analityczne, pozwalające w sposób matematyczny oszacować błąd z góry, z dość dużą niedokładnością. W związku z tym interesującą tematyką badawczą jest problem automatycznego szacowania błędów tak, by otrzymywane rezultaty precyzyjnie informowały o dokładności wykonanych obliczeń. Dlatego autor proponuje zastosowanie arytmetyki przedziałowej, która umożliwia gromadzenie informacji o błędach powstających podczas obliczeń.

Wstępne założenia pracy określają poniższe punkty.

1. Rozwiązywanie równań różniczkowych cząstkowych eliptycznych za pomocą metod z klasy różnic skończonych prowadzi do dużych układów równań liniowych, których rozwiązywanie jest narażone na nagromadzenie błędów zaokrągleń.
2. Błędy metody, jak i błędy zaokrągleń, nie są uwzględniane bezpośrednio w trakcie obliczeń prowadzonych za pomocą istniejących obecnie modeli rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych w arytmetyce zmiennopozycyjnej.
3. Arytmetyka przedziałowa daje możliwość automatycznego gromadzenia informacji o wszystkich rodzajach błędów poprzez uwzględnianie ich w trakcie obliczeń.

Przedstawione w pracy metody przedziałowe należą do klasy FDM (z ang. *finite difference methods*) i pozwalają na znajdowanie oszacowań rozwiązań dokładnych dla zagadnień brzegowych określonych dla wybranych PDE (z ang. *partial differential equations*) eliptycznych. Łącznie przedstawiono metody oparte na pięciu różnych schematach różnicowych, dla trzech typów PDE, które zostały zaimplementowane w trzech rodzajach arytmetyki. tj. arytmetyce zmiennopozycyjnej, przedziałowej zwykłej, i przedziałowej skierowanej. Należy odnotować iż zaprezentowane metody powinno się traktować jako heurystyki, gdyż opracowanie dowodu co do zawierania się rozwiązań dokładnych w przedziałach wynikowych stanowi osobny problem matematyczny. Choć nie dają one matematycznej gwarancji zawierania się rozwiązań, to eksperymentalnie wykazują one skuteczność dla szerokiej klasy eliptycznych równań różniczkowych cząstkowych. Opracowanie dowodów matematycznych stanowi natomiast interesujący temat dla dalszych badań. Jest on podejmowany przez naukowców zajmujących się problemami z pogranicza zaawansowanej matematyki i metod numerycznych, a najważniejszą pracą, stanowiącą bardzo dobre podsumowanie aktualnego stanu tych badań, jest książka [9].

Główna hipoteza badawcza, postawiona w rozprawie doktorskiej, brzmi: zastosowanie arytmetyki przedziałowej do rozwiązywania równania Poissona umożliwia automatyczne uwzględnienie różnych błędów numerycznych wewnątrz otrzymanych rozwiązań przedziałowych. Ponadto wykazano, że metody przedziałowe opracowane w ramach weryfikacji tej hipotezy można uogólnić dla przypadku liniowych PDE eliptycznych rzędu drugiego. Podjęto również próbę odniesienia się do metody pozwalającej na ścisłą weryfikację istnienia rozwiązań rozważanych w pracy rodzajów PDE oraz znajdowania ich oszacowania popartego dowodem matematycznym. Taką metodą dla równań eliptycznych jest, korzystająca z modelu FEM (z ang. *finite element methods*), metoda Nakao [8]. Porównano wyniki uzyskane obiema metodami, tj. zaproponowanymi w tej pracy przedziałowymi metodami FDM oraz korzystającą z przedziałów (lecz nie w pełni przedziałową – na co zwrócono uwagę w rozprawie) metodą Nakao. Wymagało to jednak rozszerzenia algorytmu opracowanego pierwotnie przez autora dla najprostszego równania eliptycznego, jakim jest równa\-nie Poissona, do postaci przeznaczonej dla ogólniejszej klasy równań eliptycznych, jaką rozważał Nakao.

Z tego względu jako punkt wyjścia przyjęto równanie Poissona (PE) z warunkami brzegowymi Dirichleta. Następnie problem uogólniono dodając funkcje będące parametrami tego równania co nazwano (w ramach tej rozprawy) uogólnionym równaniem Poissona (GPE). W dalszej kolejności rozszerzono to równanie do ogólniejszej postaci określającej pewną klasę równań eliptycznych rozważanych przez Nakao (NE). Było to o tyle istotne, iż ze wstępnych analiz aktualnego stanu badań wynikało, że metoda opracowana przez Nakao wykorzystuje arytmetykę przedziałową do weryfikacji istnienia i znajdowania oszacowań dla rozwiązań dokładnych równań eliptycznych, do czego, w ocenie autora, należało się w tej rozprawie odnieść. Stąd szczegółowemu opisowi tej metody został poświęcony osobny rozdział – rozdział 4.

Należy zaznaczyć, iż część eksperymentalna wymagała implementacji arytmetyki przedziałowej, w dwóch wersjach – zwykłej i skierowanej. Arytmetykę przedziałową zwykłą (ang. *proper interval arithmetic*) zaimplementowano wg standardu [3] oraz prac [3][7], natomiast arytmetykę przedziałową skierowaną (ang. *directed interval arithmetic*) wg artykułów [3] [6] [10]. Sama implementacja obu arytmetyk jest nietrywialna i z tego względu poświęcono jej w rozprawie osobny rozdział – rozdział 3.

Przeprowadzone przez autora badania w kierunku weryfikacji hipotezy głównej, pokazały, iż błędy metody możemy szacować eksperymentalnie, a następnie uwzględniać je w trakcie obliczeń. Ponadto udało się wykazać użyteczność arytmetyki przedziałowej dla doboru optymalnej wielkości siatki do danego zagadnienia. Interesujące są również właściwości arytmetyki przedziałowej skierowanej, która ze względu na istnienie elementu przeciwnego i odwrotnego pozwala na wykonywanie obliczeń w sposób pozwalający na pewną redukcję szerokości końcowych rozwiązań przedziałowych. Wyniki eksperymentów, zamieszone w rozdziale 7, potwierdziły, iż przedziały uzyskiwane przy zastosowaniu tej arytmetyki są węższe niż w przypadku zwykłej arytmetyki przedziałowej.

Jednocześnie dla analizowanych równań odtworzono metodę Nakao, co stanowiło element weryfikacji jednej z hipotez pomocniczych. W efekcie tych prac wykazano, iż nie jest możliwe zastosowanie metody Nakao do rozwiązywania równania Poissona i jego uogólnionej postaci, jakkolwiek są one użyteczne dla pewnej, dość ogólnej klasy PDE eliptycznych. Z kolei metody proponowane w tej rozprawie (należące do metod różnic skończonych) można skutecznie stosować również dla równań analizowanych przez Nakao, a ich istotną zaletą jest prostsza konstrukcja i implementacja. Eksperymenty wykazały ponadto, iż rozwiązania dokładne należą do przedziałów otrzymywanych metodami proponowanymi przez autora, aczkolwiek – jak wcześniej wspomniano – znalezienie analitycznego dowodu co do zawierania się rozwiązań dokładnych wydaje się trudne od strony matematycznej i zależne od rozpatrywanego problemu.

Uzyskane wyniki pozwoliły na pozytywną weryfikację postawionej hipotezy badawczej. Dla wszystkich opracowanych metod zaprezentowano sposób w jaki eksperymentalnie można szacować błędy metody. Przykłady obliczeniowe z kolei pokazały, iż rozwiązanie dokładne znajdowało się wewnątrz rozwiązań przedziałowych. Interesującym przedmiotem dalszych badań wydaje się użycie istniejących metod VC (z ang. *verified-computing*) jako narzędzia do wstępnego oszacowania błędów, a następnie wykorzystanie zaprezentowanego w tej pracy sposobu konstrukcji metod w pełni przedziałowych (tj. takich, w których całe obliczenia, czyli wszystkie operacje arytmetyczne wykonywane są na przedziałach). W efekcie uzyskiwane oszacowania rozwiązań dokładnych mogłyby być nie tylko dokładniejsze, ale również, każdorazowo, poparte dowodem matematycznym – wynikającym bezpośrednio z danej metody VC.

Bibliografia:

[1] Evans, L. C., Partial Differential Equations. Rhode Island, USA: ACM, 1998.
[2] Hammer, R., Hocks, M., Kulisch, U., and Ratz, D., C++ Toolbox for Verified Computing I: Basic Numerical Problems Theory, Algorithms, and Programs. Berlin-Heidelberg: Springer Science & Business Media, 2012.
[3] "IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic." https://standards.ieee.org/content/ieee-standards/en/standard/754-2008.html, 2008.
[4] Kulisch, U. W., "Complete Interval Arithmetic and Its Implementation on the Computer," in Numerical Validation in Current Hardware Architectures, pp. 7–26, Hidelberg, Berlin: Springer, 2009.
[5] Marciniak, A. and Hoffmann, T., "Interval Difference Methods for Solving the Poisson Equation," in International Conference on Differential & Difference Equations and Applications, pp. 259–270, Springer, 2017.
[6] Markov, S., "On Directed Interval Arithmetic and Its Applications," in J. UCS The Journal of Universal Computer Science, pp. 514–526, Springer, 1996.
[7] Moore, R., Interval Analysis. Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1966.
[8] Nakao, M. T., "A Numerical Approach to the Proof of Existence of Solutions for Elliptic Problems," Japan Journal of Applied Mathematics, vol. 5, no. 2, p. 313, 1988.
[9] Nakao, M. T., Plum, M., and Watanabe, Y., Numerical Verification Methods and Computer-Assisted Proofs for Partial Differential Equations. Singapore: Springer Singapore, 2019.
[10] Popova, E. D., "Extended Interval Arithmetic in IEEE Floating-Point Environment," Interval Computations, vol. 4, pp. 100–129, 1994.
[11] Wilkinson, J. H., Rounding Errors in Algebraic Processes. Mineola, New York: Dover Publications, 1994.