Prof. dr hab. Leszek Plaskota
Wydział Matematyki, Informatyki i Mechaniki
Uniwersytet Warszawski

Ocena rozprawy doktorskiej

pt. *Algorytmy ścisłego całkowania równań wariacyjnych i ich zastosowania do badania bifurkacji rozwiązań okresowych w Kołowym Ograniczonym Problemie Trzech Ciał*

mgr IRMINY WALAWSKIEJ

1. WSTĘP

Rozprawa doktorska mgr IRMINY WALAWSKIEJ mieści się w kręgach szeroko rozumianej analizy numerycznej, a dokładniej *analizy przedziałowej.* Ta gałąź nauki powstała kilkadziesiąt lat temu, najpierw jako próba dokładnej kontroli błędów obliczeń wykonywanych w arytmetyce zmiennoprzecinkowej, obok istniejącej analizy wilkinsonowskiej. Potem znalazła zastosowanie przede wszystkim we wspieranej komputerowo analizie dynamiki procesów opisywanych równaniami różniczkowymi czy wariacyjnymi. I przede wszystkim temu zastosowaniu analizy przedziałowej jest rozprawa poświęcona. Rozprawę i wyniki w niej zawarte można rozdzielić na dwie w zasadzie niezależne części, które odpowiadają dwóm artykułom doktorantki napisanych wraz z jej promotorem, pierwszemu już opublikowanemu w *Applied Mathematics and Computations* oraz drugiemu wysłanemu do publikacji.

Część pierwsza rozprawy koncentruje się na konstrukcji i analizie nowego algorytmu $\mathcal{C}^1$-HO dla obliczania dokładnych oszacowań na rozwiązania równań wariacyjnych pierwszego rzędu, odpowiadających zwyczajnym równaniom różniczkowym, postaci

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \dot{x}(t) & = & f(x(t)), \\ \dot{V}(t) & = & Df(x(t)) \cdot V(t), \\ x(0) & = & [x_0], \\ V(0) & = & [V_0], \end{array} \right. \tag{1}$$

gdzie $[x_0]$, $[V_0]$ są odpowiednio pewnymi przedziałami wektorowymi i macierzowymi. Algorytm $\mathcal{C}^1$-HO, który jest głównym osiągnięciem w tej części rozprawy, okazuje się istotnie konkurencyjny do wcześniej istniejącego algorytmu $\mathcal{C}^1$-Lohner, co wykazano m.in. porównując działanie obu algorytmów na wybranych przykładach.

W drugiej części rozprawy opracowana jest ogólna metoda dowodzenia istnienia bifurkacji zwielokrotnienia okresu oraz bifurkacji *touch-and-go*, w układach z symetrią odwróconą w czasie, z zastosowaniem do układu Michelsona i tytułowego Ograniczonego Kołowego Problemu Trzech Ciał. Tutaj najcenniejszym wynikiem wydaje się być wspierany komputerowo dowód istnienia tzw. orbit halo.

2. ZAWARTOŚĆ ROZPRAWY

Rozprawa liczy ponad 100 stron i składa się z siedmiu rozdziałów. Dwa początkowe zawierają podstawowe pojęcia używane później, w tym sekcje i odwzorowania Poincaré. Dyskutowana jest też arytmetyka przedziałowa indukowana przez arytmetykę zmiennoprzecinkową oraz wprowadzone przedziałowe operatory Newtona i Krawczyka dla rozwiązywania równań nieliniowych. Rozdział 3 przedstawia paradygmaty i ogólny schemat numerycznego rozwiązywania równań wariacyjnych pierwszego rzędu (1) z użyciem analizy przedziałowej jako podstawowego narzędzia, a dalej także jedyny istniejący wcześniej algorytm $\mathcal{C}^1$-Lohner dla w/w równań.

Algorytm $\mathcal{C}^1$-Lohner jest podstawą konstrukcji nowego algorytmu $\mathcal{C}^1$-HO w rozdziale 4. Zasadniczy pomysł polega na poprawieniu oszacowań rozwiązań uzyskanych przez $\mathcal{C}^1$-Lohner. W tym celu używa się (ogólnie słabo znanego) rozwinięcia Hermite'a-Obreszkowa, a dokładniej fakt, że jego reszta jest istotnie mniejsza od reszty w tradycyjnym rozwinięciu Taylora. Użyteczność wzoru Hermite'a-Obreszkowa została odkryta wcześniej i wykorzystana przez Nedialkowa i Jacksona do konstrukcji efektywnego algorytmu klasy $\mathcal{C}^0$ dla równań zwyczajnych. W rozprawie wzór ten został wykorzystany do konstrukcji nowego algorytmu klasy $\mathcal{C}^1$ dla równania (1).

Algorytm $\mathcal{C}^1$-HO poddany jest dość dokładnej analizie pod względem wydajności i porównany z $\mathcal{C}^1$-Lohner. Okazuje się, że chociaż koszt jednego kroku $\mathcal{C}^1$-HO jest w typowych przypadkach kilkanaście procent większy od kosztu $\mathcal{C}^1$-Lohner, to ten deficyt jest rekompensowany większą dokładnością, co skutkuje tym, że w pierwszym algorytmie można użyć mniejszej długości kroku dla uzyskania dokładnego rozwiązania zadania, albo rozwiązania z zadaną dokładnością. W wyniku koszt ostateczny uzyskania rozwiązania jest dla algorytmu $\mathcal{C}^1$-HO mniejszy od tego samego kosztu dla $\mathcal{C}^1$-Lohner. Fakt ten został potwierdzony w sposób ilościowy na gruncie rozumowań teoretycznych i empirycznie bogato testując działanie obu algorytmów na wybranych przykładach, zarówno dla stałego jak i zmiennego kroku czasowego. W pierwszym przypadku testowane były: układ Lorenza, układ Hénona-Heilsa, Płaski Kołowy Układ Trzech Ciał i tzw. projekcja Galerkina równania Kuramoto-Sivashinsky'ego. Natomiast zmienny krok przetestowano na przykładzie układu Rössela, a dokładniej porównano czasy obliczeń obu algorytmów zastosowanych do komputerowo wspieranych dowodów twierdzeń dotyczących dynamiki tego układu. Te ostatnie testy wymagały m.in. nietrywialnych, aczkolwiek znanych wcześniej, wstępnych rozumowań teoretycznych.

Rozdziały 5 i 6 rozprawy mają trochę inny charakter, bo poświęcone są zastosowaniu analizy przedziałowej do dowodzenia istnienia bifurkacji określonego rodzaju w układach z symetrią odwróconą w czasie. Są to: bifurkacja zwielokrotnienia okresu (definicja 10), bifurkacja *touch-and-go* (definicja 11), a także bifurkacja łamania symetrii. Podstawy teoretyczne tego zagadnienia zaprezentowano w podrozdziale 5.1. To dość skomplikowana materia, nawet na poziomie definicji. Najważniejszymi wynikami wydają się tu być twierdzenia 12 i 13, w których podano warunki konieczne istnienia danych typów bifurkacji. Są one podstawą późniejszej weryfikacji istnienia bifurkacji w konkretnych modelach. Jeden z takich modeli - układ hamiltonowski - przeanalizowano w podrozdziale 5.2, gdzie w twierdzeniach 18 i 19 podano warunki na istnienie bifurkacji w tym konkretnym przypadku. Natomiast podrozdział 5.3 zawiera algorytm aproksymacyjnego wyznaczania punktu bifurkacji dla układów hamiltonowskich.

Rozdział 6 to zastosowania wcześniejszej teorii do układu Michelsona (podrozdział 6.1) i tytułowego Kołowego Ograniczenego Problemu Trzech Ciał (podrozdział 6.2). Szczególnie cenne, również ze względu na praktyczny wymiar Problemu, wydają się być wyniki tego drugiego podrozdziału, w którym pokazano wspierany komputerowo dowód istnienia tzw. orbit halo. Wcześniej przyjmowano istnienie takich orbit, ale fakt ten nie był ściśle potwierdzony na gruncie teoretycznym.

Rozprawa jest ilustrowana rysunkami i tabelami, zawiera też bogatą bibiografię składającą się z 125 pozycji. Jej uzupełnieniem jest dołączona płytka CD ze wszystkimi kodami algorytmów i wynikami przeprowadzonych testów numerycznych.

3. UWAGI

- Rozprawa mgr IRMINY WALAWSKIEJ zawiera ponadprzeciętnie bogaty materiał pojęciowy i wynikowy, który wymagał dużej erudycji w temacie układów dynamicznych i równań wariacyjnych, analizie przedziałowej i technik tam używanych, jak również umiejętności programistycznych. Najważniejsze osiagnięcia opisane w rozprawie, czyli algorytm $\mathcal{C}^1$-HO i dowód występowania orbit halo w Problemie Trzech Ciał wydają mi się bardzo cenne, i chociaż otrzymane wraz z promotorem, pokazują wysoki potencjał naukowy doktorantki.

- Owe bogactwo i wielowątkowość rozprawy, jak również używanie żargonu przynależnemu tematowi, ma też skutki negatywne, bo wymusza pewne skróty myślowe i częste powoływanie się na wcześniejsze wyniki. (Inaczej rozprawa musiałaby być znacznie obszerniejsza.) Co z kolei utrudnia weryfikowalność poprawności przez osoby nie specjalizujące się w tej konkretnej dziedzinie. Przykładem jest niestandardowy sposób pisania rozwinięcia Taylora, gdzie symbol $\varphi^{[k]}$ używany jest do oznaczenia $\varphi^{(k)}/k!$, a co nie zostało formalnie wyjaśnione. Albo, mówi się o koszcie obliczenia pola wektorowego nie wskazując co tak naprawdę ma się na myśli.

- Mówienie we wstępie i na str. 60 o wyższej złożoności metody $\mathcal{C}^1$-HO w porównaniu z $\mathcal{C}^1$-Lohner jest dość ryzykowne, bo potem autorka słusznie przekonuje, że pierwsza metoda jest lepsza od drugiej. Ta formalna sprzeczność jest spowodowana pewną nonszalancją w używaniu terminu 'złożoność', które jest raczej zarezerwowane dla minimalnego kosztu wśród algorytmów rozwiązujących dany problem, dokładnie albo z zadanym przybliżeniem. (W w/w miejscach chodziło o koszt jednego kroku algorytmu.)

- Rozprawa cechuje się bardzo staranną szatą graficzną. Autorka nie ustrzegła się jednak kilkudziesięciu 'literówek' i błędów interpunkcyjnych (których tu nie wymieniam). Troszkę irytuje pewna niekonsekwencja w pisaniu niepolskich nazwisk, np. jeśli Czebyszew to także Obreszkow, a nie Obreshkov, itp. Przynajmniej we wstępie autorka powinna wspomnieć o dołączonej płytce CD dokumentującej pracę informatyczną; inaczej istnienie takiej płytki łatwo przeoczyć.

- Użycie arytmetyki przedziałowej w obliczeniach numerycznych arguentuje się tym, że takie obliczenia są obarczone błędami zaokrągleń, przez co nie możemy być pewni wyniku, a arytmetyka przedziałowa pozwala te błędy dokładnie kontrolować. To prawda, ale pomija się przy tym istnienie klasycznej analizy Wilkinsona która, jeśli właściwie zastosowana, daje w wielu zadaniach więcej informacji o jakości wyniku numerycznego. (Przykładem są zwykłe układy równań liniowych.) Oczywiście, inną sprawą jest, czy taką analizę umiemy dla danego zadania przeprowadzić.

Poniżej inne wybrane uwagi szczegółowe.

1. str. 9, -3: Formalnie nie wiadomo o jakiej złożoności mowa.
2. str. 15, Def. 4: Tu mówi się najpierw, że $t_\Pi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, a zaraz potem definiuje się dziedzinę $\operatorname{dom} t_\Pi$, która nie musi być tożsama z $\mathbb{R}^n$.
3. str. 16, Lemat 1: Występuje niespójność oznaczeń, z jednej strony $\Pi_{\alpha_1}, \Pi_{\alpha_2}$, a z drugiej Π_1, Π_2. Poza tym, nie wiadomo dokładnie, co znaczy "gładkie" (czy tylko ciągłe?)
4. str.19, +12: Zdanie "Aby obliczyć (2.4) wystarczy wykonać operacje na końcach przedziału" nie jest formalnie prawdziwe, np. $[-1, 2]^2 = [0, 4]$.
5. str. 19: We wzorze pośrodku powinno być:
$$\mathbb{I}^n \ni ([x_1], \ldots, [x_n]) \to [x_1] \times \cdots \times [x_n] \subset \overline{\mathbb{R}}^n.$$
6. str. 22, rozdział 2.5, +3: Same operatory nie są metodami, a jedynie są wykorzystywane w metodach.
7. str. 22, rozdział 2.5.1, +1: Podobnie, samo twierdzenie 2 nie definiuje metody. Poza tym, w tym twierdzeniu milcząco zakłada się, że pochodna jest nieosobliwa.
8. str. 26, +2: "... ze względu na rząd pochodnych rozwiązań otrzymywanych na wyjściu algorytmu."
9. str. 27, +1: Powinno być $[V_0] \subset \mathbb{R}^{(n^2)}$.
10. str. 28, +3: Wydaje się, że powinno się raczej mówić o jednorodności, a nie liniowości równania (3.1) ze względu na V.
11. str. 61, -8: W definicji Fix nie może być $f(x) = x$ skoro $f : M \to X$, gdzie $M \subset \mathrm{R} \times X$. Zapewne powinno być f_ν zamiast f.

4. PODSUMOWANIE

Podsumowując uważam, że przedstawiona rozprawa zawiera bogate treści merytoryczne, uzyskane wyniki są ważne i dalece nietrywialne, a drobne uwagi krytyczne nie wpływają na tą ocenę. Jestem przekonany, że rozprawa spełnia ustawowe i zwyczajowe wymogi stawiane rozprawom doktorskim i wnoszę o dopuszczenie mgr Irminy Walawskiej do dalszych etapów przewodu doktorskiego.