Oponentský posudek na disertační práci

Algebraic Error in Matrix Computations in the Context of Numerical Solution of Partial Differential Equations

RNDr. Jana Papeže

Předložená disertační práce sestává ze sedmi kapitol. Tři z nich tvoří buď již publikovaný nebo k publikaci zaslaný článek doplněný komentářem či dodatečnými numerickými experimenty. Zbylé kapitoly jsou originální matematické texty, úvod a závěr.

Práce se zabývá především tzv. algebraickou chybou, tedy chybou, která v kontextu numerického řešení parciálních diferenciálních rovnic vzniká nepřesným řešením příslušných soustav lineárních algebraických rovnic. Jde o velmi aktuální tématiku. V klasických pracích o odhadech chyb při numerickém řešení parciálních diferenciálních rovnic se většinou uvažuje pouze chyba diskretizační a tiše se předpokládá, že algebraická chyba je vzhledem k ní zanedbatelně malá. Algebraická chyba se začala systematicky studovat teprve nedávno.

Disertační práce Jana Papeže přehledně popisuje jeho příspěvek k této problematice. Konkrétně, v kapitole 2 se zjišťuje, že prostorové rozložení algebraické chyby může být velmi nerovnoměrné a v některých částech výpočetní oblasti může algebraická chyba silně dominovat, i když její globální norma je relativně malá. Tento výsledek získal Jan Papež společně s Jörgem Liesenem a Zdeňkem Strakošem a publikoval ho v časopise Linear Algebra and its Applications.

Kapitola 3 se věnuje tzv. zpětné chybě, kdy se algebraická chyba interpretuje jako porucha původní soustavy lineárních algebraických rovnic. Přehledně se vysvětlují známá analytická vyjádření zpětné chyby a jejich použití pro odhad původní (přímé) algebraické chyby. Nově se ukazuje, že v tomto kontextu je možné algebraickou chybu interpretovat jako poruchu diskrétní Greenovy funkce a že ji lze odhadnout pomocí Féchetovy derivace.

Kapitola 4 analyzuje, jaký efekt má algebraická chyba v adaptivní metodě konečných prvků, pokud se zjemňování sítě řídí klasickými residuálními indikátory chyby. Tyto odhady jsou odvozeny za předpokladu, že algebraická chyba je nulová, což ovšem v praktických výpočtech není splněno. Závěrem je, že algebraická chyba se v tomto případě projevuje jako dodatečný multiplikativní faktor neznámé velikost. Následující numerické experimenty ukazují, že ignorování algebraické chyby může v některých případech vézt ke zpomalení konvergence adaptivního algoritmu. Tento výsledek byl získán ve spolupráci se Zdeňkem Strakošem a byl zaslán k publikaci do prestižního časopisu IMA Journal of Numerical Analysis.

Kapitola 5 ukazuje, jakým způsobem je možné získat zaručené aposteriorní odhady diskretizační i algebraické složky celkové chyby. Tyto odhady jsou velmi důležité pro praktické výpočty, protože umožňují diskretizační a algebraickou chybu vyvážit. To vede k významné úspoře výpočetního času ve srovnání s v praxi nejrozšířenějším způsobem, kdy se maticové výpočty často provádějí se zbytečně velkou přesností. Spoluautory tohoto výsledku jsou Zdeněk Strakoš a Martin Vohralík a příslušná publikace byla zaslaná do prestižního časopisu Numerische Mathematik.

Kapitola 6 se zabývá předpodmíněním. Popisuje moderní přístup, který interpretuje Rieszovo zobrazení jako operátorové předpodmínění. Toto předpodmínění je možné následně interpretovat jako změnu bázových funkcí a závěrečné numerické experimenty tuto změnu názorně ilustrují.

K obsahu práce bych měl následující doplňující otázku. Algebraická chyba je definovaná jako rozdíl přesného a přibližného řešení. Na několika místech se v práci tato definice přímo používá k výpočtu algebraické chyby, nicméně neznámé přesné řešení se nahrazuje řešením získaným řídkým přímým řešičem pomocí operátoru zpětného lomítka v Matlabu. Jak zdůvodnit, že je toto nahrazení oprávněné, a to nejen globálně, ale i vzhledem k lokálnímu rozložení chyby?

Také bych rád poznamenal, že na konci kapitoly 4 se získané výsledky interpretují tak, že ignorovaná algebraická chyba může způsobit zpoždění konvergence adaptivního algoritmu a dokládá se to grafem na obr. 4.5. S touto interpretací lze souhlasit, pokud se zaměříme na sítě s přibližně 10^3 vrcholy. Nicméně na sítích, které mají 10^4 a více vrcholů, bychom paradoxně mohli říci, že méně přesná algebraická metoda konvergenci naopak urychlila, protože diskretizační chybu na úrovni přibližně 0.3 získáme v méně adaptivních krocích. Podobný paradoxní závěr bychom mohli učinit i z dat prezentovaných na obr. 4.3. Proto bych doporučil být mnohem obezřetnější při hodnocení těchto výsledků a při formulování závěrů.

Celkově však hodnotím disertační práci Jana Papeže jako výbornou. Je zpracovaná velmi kvalitně. Podává nové, aktuální a velmi zajímavé výsledky. Jako nejhodnotnější originální příspěvky hodnotím právě ty, které byly publikovány, či byli podány k publikaci v odborných časopisech. Jejich podání do velmi prestižních periodik je podle mého názoru naprosto na místě. Metody použité v práci jsou vesměs známé z literatury, ale jejich použití pro odhady a interpretaci algebraické chyby je originální.

Po formální stránce je práce na velmi vysoké úrovni. Je psaná velmi dobrou angličtinou. Grafické a typografické zpracování je výborné. V práci jsem nenašel téměř žádné překlepy ani jiné, byť drobné nedostatky. Výsledky této disertační práce mají, podle mého názoru, potenciál najít praktické uplatnění. Jako velmi užitečné vnímám především získané odhady zvlášť diskretizační a algebraické chyby, které spolu s vhodnými zastavovacími kritérii mohou vést k zefektivnění mnoha vědecko-technických výpočtů. Myslím, že jde o podstatný příspěvek ke studovanému tématu a věřím, že problematiku algebraické chyby čeká významný budoucí rozvoj. Proto oceňuji, že autor na konci práce identifikoval tři zásadní otevřené problémy. Věřím, že jejich vyřešení povede k podstatnému pokroku v numerické matematice a že Jan Papež se těmto obtížným otázkám bude věnovat i v budoucnu.

Výše uvedená fakta jasně dokládají dobré předpoklady autora k samostatné výzkumné práci a proto vřele doporučuji, aby mu byl na základě této disertační práce udělen titul Ph.D.

V Praze dne 19. 1. 2017

doc. RNDr. Tomáš Vejchodský, Ph.D.
Matematický ústav AV ČR, v. v. i.
Žitná 25, 115 67, Praha 1