

# Wavelet alapú adaptív számítási módszer több jellemző méretskálával rendelkező rendszerek leírására

## 1. BEVEZETÉS

Több különböző karakterisztikus méretskálával rendelkező fizikai rendszerek eléggé gyakran előfordulnak a természetben, elég csak magára az anyagra gondolni, amely atomi szinten egészen másként viselkedik, mint makroszkopikusan. A kutatás motivációja is eredetileg olyan elektronrendszer volt, mely mezoszkopikus skálán egészen másféle lecsengéssel rendelkezett, mint atomi szinteken az megszokott volt.<sup>2</sup>

Ezeknek a rendszereknek a működése többnyire leírható differenciálegyenlettel. Egy ilyen többskálás differenciálegyenlet megoldása természetesen közelíthető a szokásos, véges differenciák módszerével, vagy végeselem módszerrel, azonban ezekben az esetekben sokszor fellép az a probléma, hogy azok miatt a részek miatt, ahol a kisebb méretskála érvényes, fontos a finom felbontású leírás, s ezt gyakran az algoritmusok olyan helyekre is kiterjesztik, ahol egy sokkal durvább felbontás is elegendő lenne.

Az ilyen problémák adaptív, fokozatosan és csak lokálisan finomodó megoldására ad lehetőséget a wavelet elmélet.

## 2. WAVELET ANALÍZIS

A wavelet analízis<sup>3</sup> egy olyan matematikai eszköztár, melynek alkalmazási területe az utóbbi 2-3 évtizedben igen jelentősen kitágult. Eredetileg különböző, például geológiai jelek feldolgozására használták, később a képfeldolgozásban vált nagyon sikeressé, majd egy idő után elkezdték differenciálegyenletek diszkrét egyenletekké való alakításában használni. A Fourier-transzformációhoz<sup>4</sup> hasonlóan a wavelet analízisnek is van folytonos és diszkrét változata. Míg eleinte a folytonosnak

---

[1] Gépészmérnöki, Informatikai és Villamosmérnöki Kar, Távközlési Tanszék.

[2] VARGA Imre – HOFSTETTER, E. – PIPEK J.: One-parameter Superscaling at the Metal-Insulator Transition in Three Dimensions, in *Physics Letters*, 1999/82. szám, 4683–4686. o.

[3] DAUBECHIES, INGRID: *Ten Lectures on Wavelets*, 1992, CBMS-NSF regional conference series in applied mathematics 61, SIAM, Philadelphia; CHUI, CHALES K.: *An Introduction to Wavelets*, 1992, Academic Press, San Diego.

[4] FOURIER, JEAN-BAPTISTE JOSEPH: *Theorie Analytique de la Chaleur*, 1822, Firmin Didot, Paris.

nevezett wavelet transzformáció játszott jelentősebb szerepet, ma már alapvetően diszkrét wavelet analízist használnak a legtöbbször.

A digitális jelfeldolgozáshoz, illetve a digitális jelfeldolgozó processzorok (DSP) és a grafikus kártyák (GPU) felépítéséhez kiválóan adaptálható módszer a wavelet elmélet a következő okok miatt. A waveleteken alapuló analízis, illetve jelszintézis megvalósítható konvolúciós szűrők használatával, melyek a DSP-k egyéb alkalmazási területein is igen fontos szerepet játszanak, tehát a processzorokat optimalizálták a wavelet analízisben található szűrési lépésekre. A többi művelet, a tárolás, illetve a „downsampling” (decimálás, azaz a jel minden második elemének törlése), és az „upsampling” (a jel minden eleme mögé egy-egy nulla értékű elem betöltése) pedig nem bonyolult művelet. A GPU-k szintén könnyen alkalmazhatóak gyors wavelet-analízisre, hiszen a képek, videók egy jelentős része ma már wavelet alapú tömörítő eljárással van kódolva. Ezekon kívül, hagyományos számítógépek felhasználóbarát programcsomagjai is ma már gyakran tartalmaznak wavelet analízishez köthető részeket, tehát például Matlab nyelven is sok lépés beépített programként megtalálható a megfelelő „toolbox”-okban. A waveleteken alapuló differenciálegyenlet-megoldás még kevésbé elterjedt, mint a jelfeldolgozás, ezért az ilyen rutinokat alapvetően analitikus eredményekből a felhasználónak kell implementálnia.

A wavelet analízis függvények terén – alapvetően a négyzetesen integrálható függvények terén – értelmezett elmélet. A waveletek a függvényteret felbontási szintekre osztják, egy finomabb felbontási szint gyorsabban változó részleteket tartalmaz, mint egy durvább – azaz például hangok esetén magasabb, nagyobb frekvenciás összetevőket, képek esetén élesebb részleteket. Ezek a felbontási szintek egymásba ágyazottak, azaz egy olyan rész-tér, mely tartalmazza az élesebb átmeneteket, tartalmazza a lassabb átmenetekkel rendelkező függvényeket is.

Egy felbontási szint minden egyes függvénye  $f(x)$  felírható, mint a szint bázisfüggvényeinek lineáris kombinációja

$$f(x) = \sum_n c_{m,n} \varphi_{m,n}(x), \quad (1)$$

ahol  $\varphi_{m,n}(x)$  az  $m$ -edik felbontási szint  $n$ -edik pozíciójában levő bázisfüggvény – az ún. skálafüggvény –,  $c_{m,n}$  pedig a hozzá tartozó kifejtési együttható.

A felbontási szintek között az átjárást a waveleteknek nevezett függvények biztosítják, tehát a fent említett függvényünk kifejezhető nemcsak a finom felbontási szint skálafüggvényeivel, hanem egy durvább,  $m_0$  felbontási szint skálafüggvényeivel, és a két szint közötti waveletekkel is az alábbi módon:

$$f(x) = \sum_n c_{m_0,n} \varphi_{m_0,n}(x) + \sum_{m=m_0}^{m-1} \sum_n d_{m,n} \psi_{m,n}(x), \quad (2)$$

ahol a kétféle bázisfüggvény kifejezhető egy-egy ősfüggvényből egyszerű nyújtással és eltolással:

$$\begin{aligned} \varphi_{m,n}(x) &= 2^{-m/2} \varphi(2^{-m}x - n), \\ \psi_{m,n}(x) &= 2^{-m/2} \psi(2^{-m}x - n) \end{aligned} \quad (3)$$

A kifejtési együtthatók a következőképpen állnak elő:

$$\begin{aligned} c_{m,n} &= \int f(x) \tilde{\varphi}_{m,n}(x) dx, \\ d_{m,n} &= \int f(x) \tilde{\psi}_{m,n}(x) dx. \end{aligned} \quad (4)$$

A bázisfüggvények duálisai, amelyeket a (4) képletben hullámvonallal jelöltünk, igen sok esetben azonosak a bázisfüggvényekkel, ennek feltétele az, hogy ortonormált rendszert alkossanak a bázisfüggvények (azaz egymásra merőlegesek és egységnyi négyzetintegrálúak legyenek).

### 3. DIFFERENCIÁLEGYENLETEK MEGOLDÁSA WAVELET ANALÍZISSEL

Alapvetően kétféle differenciálegyenlettel, a

$$\hat{D}u(r) = Uu(r), \quad (5)$$

alakú sajátértékegyenlettel, illetve a

$$\hat{D}u(r) = v(r) \quad (6)$$

formában felírható forrással rendelkező egyenlettel a legtöbb fizikai rendszer jól modellezhető. Itt a  $\hat{D}$  jelképezi a differenciáloperátort, ami hullámegyenlet esetén áll a Laplace-operátorból és még esetleg különböző külső hatásokat leíró operátorokból. Természetesen hengerpolár vagy gömbi koordinátarendszerbeli esetben már maga a Laplace-operátor is egészen bonyolult alakú lesz. Az első sajátérték-típusú egyenlet  $U$  sajátértékkel, például atomok elektronrendszerének vagy üregrezonátoroknak leírására alkalmas, míg az utóbbi, forrásos egyenlet  $v$  gerjesztést leíró függvénnyel alkalmas lehet terjedő hullámok vagy akár terjedő légszennyezés modellezésére is.

Galjorkin-féle<sup>5</sup> differenciálegyenlet diszkretizáló módszerek kifejtik az  $u$  megoldást, illetve a  $v$  forrást egyfajta bázisban, itt a wavelet-skálázófüggvény bázisrendszerben,<sup>6</sup> így az alábbi képleteket kapjuk:

$$\begin{aligned} u(r) &= \sum_l c_{m_0 l} s_{m_0 l}(r) + \sum_{ml} d_{ml} w_{ml}(r), \\ v(r) &= \sum_l f_{m_0 l} s_{m_0 l}(r) + \sum_{ml} g_{ml} w_{ml}(r). \end{aligned} \quad (7)$$

Itt a skálázófüggvényeket az egyszerűség kedvéért  $s$ -sel, a waveleteket  $w$ -vel jelöltem, hogy a szakirodalomban szokásos és a bevezetőben használt  $\Psi$  ne keveredjen az atomi elektronrendszereket, illetve elektromágneses hullámokat

[5] ГАЛЁРКИН, БОРИС ГРИГОРЕВИЧ, *Стержни и пластинки. Ряды в некоторых вопросах упругого равновесия стержней и пластинок*. Вестник инженеров, 1915/1. szám. 897–908. o. (GALJORKIN, BORISZ GRIGORJEVICS: Síkok és rudak. Megoldás néhány rudak és síkok rugalmas egyensúlyával kapcsolatos kérdésre, in *Vesztnyik Inzsenyerov*, 1915/1. szám, 897. o.)

[6] DAHMEN, WOLFGANG: Wavelet methods for PDEs. Some recent developments, in *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2001/128. szám, 133. o.

az előző fejezetben leíró jelöléssel. Ezeket behelyettesítve:

$$\begin{aligned} \hat{D}\left(\sum_l c_{m_0 l} s_{m_0 l}(r) + \sum_{m_l} d_{m_l} w_{m_l}(r)\right) &= \sum_l f_{m_0 l} s_{m_0 l}(r) + \sum_{m_l} g_{m_l} w_{m_l}(r), \\ \hat{D}\left(\sum_l c_{m_0 l} s_{m_0 l}(r) + \sum_{m_l} d_{m_l} w_{m_l}(r)\right) &= U\left(\sum_l f_{m_0 l} s_{m_0 l}(r) + \sum_{m_l} g_{m_l} w_{m_l}(r)\right). \end{aligned} \quad (8)$$

Ha ezek az egyenletek igazak, akkor akkor is igazak lesznek, ha mindkét oldalukat megszorozzuk egy tetszőleges bázisfüggvénnyel (pontosabban annak duálisával), és kiintegráljuk őket. A négyzetesen integrálható függvények terén ezt a műveletet belső szorzatnak nevezzük, és matematikában gyakran a  $(f | g) = \int \tilde{f}(r)g(r)dr$  jelölést alkalmazzuk. Ha az összes lehetséges bázisfüggvényt beírjuk, akkor kapjuk a következő megoldandó mátrix egyenleteket, melyeknek alakja az alábbi:

$$\begin{pmatrix} (s_{m_1 l_1} | \hat{D} | s_{m_2 l_2}) & (s_{m_1 l_1} | \hat{D} | w_{m_2 l_2}) \\ (w_{m_1 l_1} | \hat{D} | s_{m_2 l_2}) & (w_{m_1 l_1} | \hat{D} | w_{m_2 l_2}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{m_2 l_2}^{[M]} \\ d_{m_2 l_2}^{[M]} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{m_1 l_1}^{[M]} \\ g_{m_1 l_1}^{[M]} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

illetve

$$\begin{pmatrix} (s_{m_1 l_1} | \hat{D} | s_{m_2 l_2}) & (s_{m_1 l_1} | \hat{D} | w_{m_2 l_2}) \\ (w_{m_1 l_1} | \hat{D} | s_{m_2 l_2}) & (w_{m_1 l_1} | \hat{D} | w_{m_2 l_2}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{m_2 l_2}^{[M]} \\ d_{m_2 l_2}^{[M]} \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} c_{m_1 l_1}^{[M]} \\ d_{m_1 l_1}^{[M]} \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Előbbi esetben látjuk a forrás skálázófüggvény-wavelet kifejtést az egyenlet jobb oldalán, utóbbi esetben a sajátértéket és a sajátfüggvény kifejtési együtthatóit.

A wavelet-alapú diszkretizációt végrehajtva ezeken a differenciálegyenleteken tehát, a differenciálegyenletet visszavezethetjük

$$D_{m_1 m_2 l_1 l_2 t_1 t_2} c_{m_2 l_2 t_2} = U c_{m_1 l_1 t_1}, \quad \text{vagy} \quad D_{m_1 m_2 l_1 l_2 t_1 t_2} c_{m_2 l_2 t_2} = f_{m_1 l_1 t_1} \quad (11)$$

mátrixegyenletekre, s a következő összefüggéseket kapjuk a differenciáloperátorokat reprezentáló mátrixelemekre:

$$D_{m_1 m_2 l_1 l_2 t_1 t_2} = \int \chi_{t_1} (2^{m_1} x - l_1) \bar{D} \chi_{t_2} (2^{m_2} x - l_2) dx = (\chi_{m_1 l_1 t_1} | \hat{D} | \chi_{m_2 l_2 t_2}), \quad (12)$$

ahol  $\chi_t$  egyaránt lehet wavelet és skálázófüggvény is a  $t$  indexnek megfelelően, és a kifejtési együtthatók részére is bevezettük a bázisfüggvény típusára utaló  $t$  indexet.

Ezek a (12) típusú mátrixelemek egy-egy adott operátor esetén univerzálisak, és viszonylag gyorsan kiszámíthatók. Ha egy differenciáloperátor több operátor összege, a mátrixelemek külön-külön is kiszámíthatóak, így mintegy LEGO-szerűen lehet építkezni ezekből a mátrixelem-blokkokból.

#### 4. PREDIKCIÓK A FINOMABB FELBONTÁSI SZINTŰ KIFEJTÉSI EGYÜTTHATÓKRA

A (11) mátrixegyenletek megoldása a második esetben viszonylag gazdaságosan kiszámítható, hiszen egy lineáris egyenletrendszerről van szó a  $c$  ismeretlen kifejtési együtthatókból álló vektorra. Az első, sajátérték-egyenletre vezető probléma megoldása komplexebb, ezért olyan feladatot választottunk, mely sajátérték egyenletre vezet, a Schrödinger-egyenletet. A

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (13)$$

időfüggetlen Schrödinger-egyenlet írja le az atomok, molekulák elektronrendszereinek  $\Psi$  hullámfüggvényeit. A differenciáloperátort történelmi okokból  $H$ -val szokás jelölni,  $E$  pedig az adott  $\Psi$  hullámfüggvényhez, elektroneloszláshoz tartozó energiaszint. Ha a hullámfüggvényt a szokásos wavelet-skálafüggvény bázisban kifejtjük úgy, hogy csak legfeljebb  $m-1$ -edik szintű waveleteket használunk, akkor egy  $m$ -edik szintű közelítést kapunk:

$$\Psi^{[m]}(r) = \sum_k c_{m_0k} \phi_{m_0k}(r) + \sum_{n=m_0}^{m-1} \sum_k d_{nk} \psi_{nk}(r). \quad (14)$$

Egy ilyen közelítés nagyon jó tud lenni, ha a felbontási szint elég magas, azonban azt, hogy mennyire jó, csak azután tudjuk meg, hogy kiszámoltuk. Mivel a sajátérték-egyenletek megoldása legjobb esetben is a mátrix méretének négyzetével skálázódik ( $O(N^2)$  komplexitású), igen előnyös lehet egy olyan számítás, ami egy kapott,  $m$ -edik felbontási szintű megoldás felhasználásával kellően jól megközelíti a következő felbontási szint együtthatóit anélkül, hogy a következő sajátérték-egyenletet megoldaná.

Korábban kidolgoztunk egy módszert, mely alkalmas a fenti feladatra.<sup>7</sup> A módszer alapja az, hogy a  $\Psi^{[m]}$  közelítést csak egyetlen  $m$ -edik felbontási szintű wavelettel perturbáljuk meg, s az így kapott

$$\Psi^{[m+1]pred} = \Psi^{[m]} + \delta_{m\bar{k}} w_{m\bar{k}} \quad (15)$$

hullámfüggvénnyel kifejezzük a sajátértéket:

$$E^{[m+1]pred} = \frac{(\Psi^{[m+1]pred} | \hat{H} \Psi^{[m+1]pred})}{(\Psi^{[m+1]pred} | \Psi^{[m+1]pred})} \quad (16)$$

amit aztán a  $\delta$  kifejtési együtthatóra nézve minimalizálunk a Ritz-féle variációs eljárásnak megfelelően. A kapott eredmény,

$$\delta_{m\bar{k}} = -\frac{E^{[m]} - W}{2R} \pm \left( \left( \frac{E^{[m]} - W}{2R} \right)^2 + 1 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (17)$$

---

[7] PIPEK JÁNOS – NAGY SZILVIA: An Economic Prediction of Refinement Coefficients in Wavelet-Based Adaptive Methods for Electron Structure Calculations, in *Journal of Computational Chemistry*, 2013/34. szám, 460–465. o.

gazdaságosan számítható, hiszen a  $W = (w_{mk} | \hat{H} w_{mk})$  és  $R = (w_{mk} | \hat{H} \Psi^{[m]})$  mátrixelemek ismert építőblokkokból állnak. A kapott eredmények eléggé jól megközelítik a valódi sajátvektort ahhoz, hogy alkalmasak legyenek egyrészt arra, hogy megbecsüljük, mekkora hibát követünk el azzal, ha elhagyjuk őket (azaz nagyságrendileg mekkora hibája van az  $m$ -edik szintű megoldásnak), másrészt, egy utolsó finomítási lépés elvégzésére.

Természetesen felmerült a kérdés, hogy az így kapott, becsült finomabb szintű megoldás szolgálhat-e egy újabb hasonló gazdaságosan kiszámítható becslés alapjául. Megvizsgáltuk a

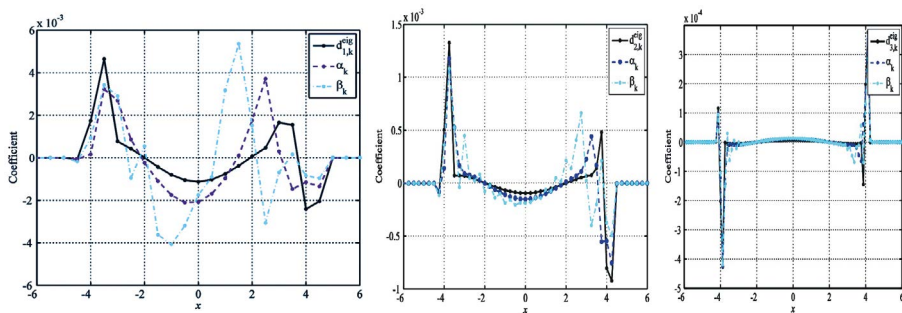
$$\Psi^{[m+1]pred} = \Psi^{[m-1]} + \sum_l \delta_{m-1,l} w_{m-1,l} + \Delta_{mk} w_{mk} \quad (18)$$

második perturbációval kapott hullámfüggvény segítségével kapott sajátenergiát a Ritz-módszerrel, s igen hasonló eredményre jutottunk:<sup>8</sup>

$$\Delta_{mk} = -\frac{E^{[m]p} - W}{2R^p} \pm \left( \left( \frac{E^{[m]p} - W}{2R^p} \right)^2 + 1 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (19)$$

Ahol a  $p$  felső index mindenhol azt jelenti, hogy az eredmény a becsült  $\Psi^{[m]pred}$  hullámfüggvénnyel van számítva. Egy-egy felbontási szinthez ábrázoltuk a kapott igazi  $m$ -edik szintű sajátvektor komponenseit, az első, illetve a második becsléssel kapott együtthatókat az 1. ábrán. Egy harmonikus oszcillátort használtunk modellrendszernek egy dimenzióban. Hasonlóképpen megoldottuk a dobozba zárt elektron problémát is. Mindkét modellrendszerrel azt a következtetést tudtuk levonni, hogy míg magasabb felbontási szinten az első predikciók csak kicsit becsülik felül az igazi együtthatókat (azaz a kapott függvény eléggé jó lesz), a második predikciók ezen értékek körül oszcillálnak, ami természetesen nem ad jó eredményt.

1. ábra: Harmonikus oszcillátor alapállapotának együtthatói a harmadik, ötödik és hatodik felbontási szinten

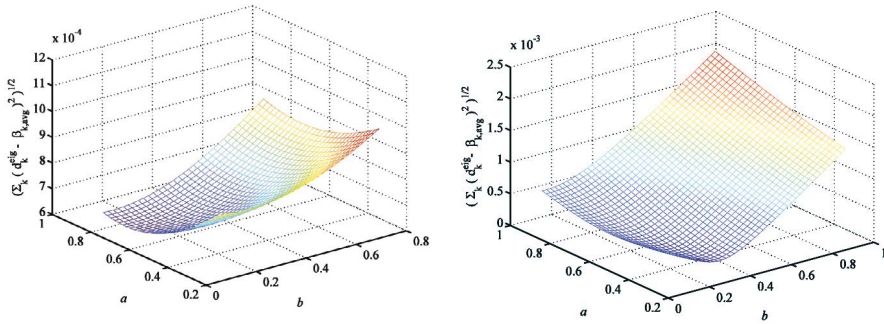


[8] NAGY SZILVIA – PIPEK JÁNOS: An economic prediction of the finer resolution level wavelet coefficients in electronic structure calculations, in *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2015/17, 31558–31565. o.

A  $d$  sajátérték-egyenletből kapott együtthatót jelenti,  $\alpha$  az első,  $\beta$  pedig a második becslést. A  $k$  eltolási index úgy van normalva, hogy ahhoz az  $x$  térbeli pozícióhoz kerüljön az együttható, ahol a hozzá tartozó wavelet közepe van. Atomi egységek.

Megvizsgáltuk tehát, hogy ha egy csúszó átlagolást alkalmazunk a második becslésen, mennyivel javul a kapott eredmény.<sup>9</sup> A csúszó átlagolás során három együtthatót alkalmaztunk, egyet ( $a$ ) az aktuális pozícióban lévő együtthatóhoz, egyet ( $b$ ) az első, és egyet ( $c$ ) a második szomszédjaihoz. A három együttható összege 1 volt, így egy kétparaméteres optimalizációt hajtottunk végre. A legtöbb esetben az átlagolt második predikció és a sajátérték-egyenletből kapott megoldás eltérése igen lapos függvény szerint változott a vizsgált együtthatótartományban, ahogy az a 2. ábrán is látszik. Az  $a=0,4$ ,  $b=0,2$ ,  $c=0,1$  együtthatóhármass választása általában elég jó eredményre vezet.

2. ábra: Együtthatóvektorok euklideszi távolsága dobozba zárt elektron és harmonikus oszcillátor modellrendszereknél  $m=2$  felbontási szinten alapállapotban, illetve második erjesztett állapotban. Atomi egységek.



## 5. ELEKTRODINAMIKAI ALKALMAZÁSOK

Az elektromágneses terek hullámait a

$$\nabla^2 E = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial^2 E}{\partial t^2}. \quad (13)$$

differenciálegyenlet írja le. Itt az  $E$  elektromos térerősségvektor előtt álló differenciáloperátor az ún. Laplace-operátor, mely a koordináták szerinti második deriváltak összegeként áll elő, ha Descartes-koordinátarendszert használunk. Hasonló egyenlet igaz a mágneses térerősségre is, ezért azzal külön nem foglalkozunk.

[9] SZIOVÁ BRIGITA – NAGY SZILVIA – PIPEK JÁNOS: Optimization of the prediction of second refined, wavelet coefficients in electron structure calculation, in *Open Physics*, 2017/14. szám, 643–650. o.

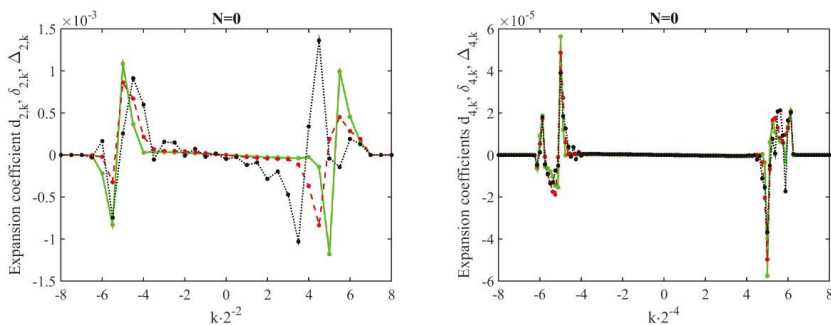
Az egyenlet gyakran, például egy  $z$  irányú tengellyel rendelkező hullámvezető esetén felbontható térbeli és időbeli komponenseire, ezesetben a megoldása egy  $z$  irányban terjedő hullám:

$$E_{x,y}(z,t) = E_0 e^{i(\omega t \pm kz)}, \quad (22)$$

ahol  $E_0$  a maximális elektromos térerősség,  $\omega$  a rezgés körfrekvenciája,  $k$  pedig a hullám hullámszámvektorának abszolút értéke.  $E_0$  a hullámvezetők esetében maga is speciális alakú, egy ún. állóhullám, melynek  $x - y$  síkbeli függvényét egy sajátérték-egyenlet adja meg. Hasonlóképpen sajátérték-egyenlet adja meg egy üregrezonátor vagy egy nagyobb, például elektromágneses összeférhetőségi (EMC) mérésekben használt mérőkamra sajátrezgéseit.

Egy EMC mérőkamra többnyire néhány méter, esetleg pár tíz méter nagyságrendű mérőterrel rendelkezik, fém fala teljesen elszigetelt a külvilágtól, és reflexiómentesített kamra esetén a fém falat belülről elnyelő réteg vonja be 40-50 cm vastagon. Egy ilyen kamrát modelleztünk egy egység vastagságú, 3 szuszceptibilitású bevonattal, 10 egység hosszúságú mérőterrel, 10000 szuszceptibilitású fém fallal.<sup>10</sup> megoldást egy dimenzióban az elektronrendszerek megoldásaihoz hasonló módon hajtottuk végre, csak a differenciáloperátor különbözött. A kapott együtthatók a 3. ábrán láthatók az első, csomópont nélküli félhullám-megoldásra.

3. ábra: Sajátvektorként (zöld), illetve első (piros) és második (fekete) predikcióként keletkezett együtthatók egydimenziós mérőkamra modellben, első módus ( $N=0$  csomópont),  $m=2$ , illetve  $m=4$  felbontási szintek. Tetszőleges egységek.

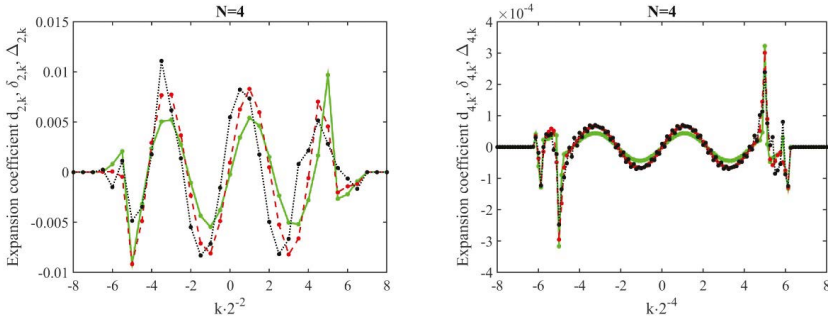


Hasonló eredményt mutatnak magasabb frekvenciájú állóhullám-megoldások is, mint például a 4. ábrán látható együtthatók.

[10] LISZI MÁTÉ – DROTÁR ISTVÁN – PRUKNER PÉTER – NAGY SZILVIA: *On wavelet based modeling of EMC test chambers – economic prediction of the refined expansion coefficients*, 2017, beadva az ICEST2017 Nis, Szerbia konferenciára.

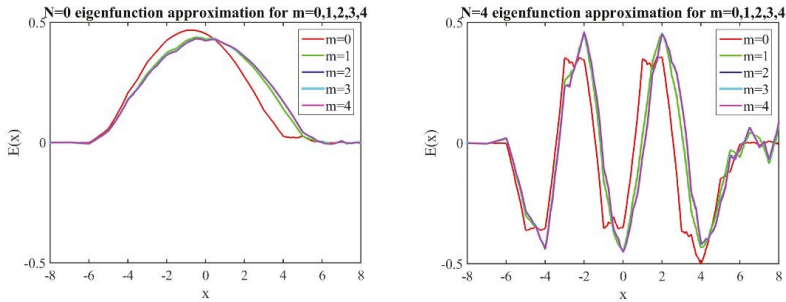


4. ábra: Sajátvektorként (zöld), illetve első (piros) és második (fekete) predikcióként keletkezett együtthatók egydimenziós mérőkamra modellben, ötödik módus ( $N=4$  csomópont),  $m=2$ , illetve  $m=4$  felbontási szintek. Tetszőleges egységek.



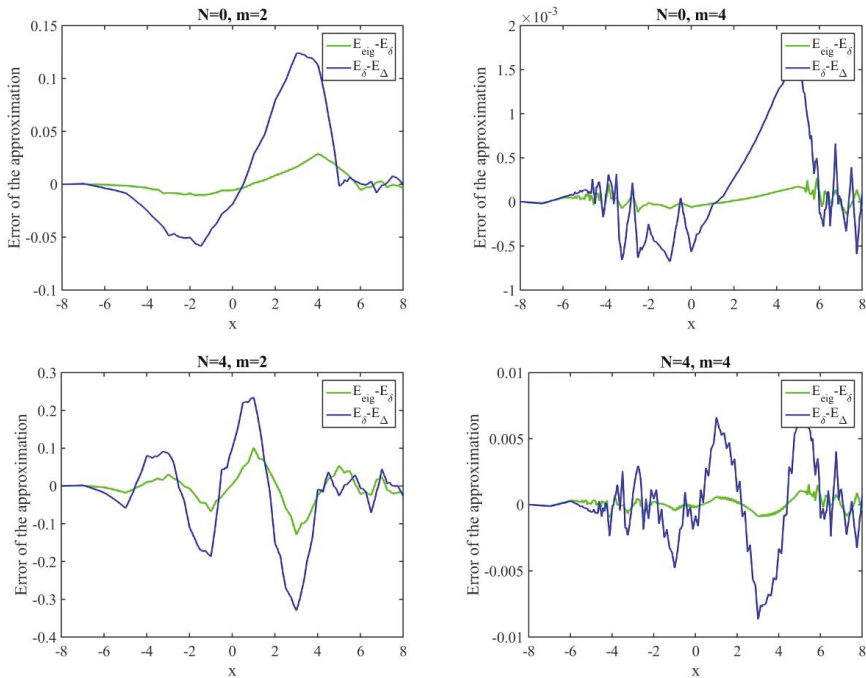
Megvizsgáltuk a keletkezett állóhullámokat is, hiszen a predikció pontossága ebben az esetben alapvetően azon múlik, mennyire jól közelíti a térerősség a valódi megoldást. A kapott térerősségeket az 5. ábrán rajzoltuk fel.

5. ábra: Sajátrezgések térerősség-eloszlásai wavelet alapú egydimenziós mérőkamra modellben különböző felbontási szinteken, az  $N=0$  és  $N=4$  módusokra. Tetszőleges egységek.



A kapott előre becsült együtthatókkal is elkészítettük a térerősség eloszlás függvényeket, s a valódi mátrix-sajátfüggvényt, illetve a predikcióból kapott, azonos felbontási szintű térerősség-eloszlásokat ábrázoltuk a 6. ábrán. Látható, hogy minél magasabb a felbontási szint, annál jobbak a közelítések. Az is leolvasható az ábráról, hogy a nagyobb frekvenciájú, azaz gyorsabban változó térerősség eloszlású állóhullámok azonos felbontási szinten kevésbé pontosan írhatók le, mint az alacsonyabb frekvenciájúak. Mivel az 5. ábra megmutatja a függvények maximumait is (0,5 mindkét példában), le tudjuk azt a következtetést vonni, hogy még egy igen durva,  $\frac{1}{4}$  egység felbontású közelítés is 10% alatti hibát eredményez első becslés esetén, míg a felbontás finomságának négyszeresítése a hibát közel 2 nagyságrenddel lejjebb viszi. Mindkét módus esetében nagyon hasonló a hiba alakja a két felbontási szinten.

6. ábra: Az  $m$ -edik szintű wavelet alapú sajátvektorok és predikcióik különbségei. Zöld vonal: első predikció, kék vonal: második predikció.  $N=0$  és  $N=4$  módusok. A téreloszlások maximuma 0,5, mint az 5. ábráról leolvasható. Tetszőleges egységek.



## 6. KÖVETKEZTETÉSEK, TOVÁBBFEJLESZTÉSI LEHETŐSÉGEK

Mind az elektromágneses, mind pedig az atomfizikai példából látszik, hogy a waveletek együtthatói kellően jól becsülhetők (nyilván, mivel elektromágneses térerősség-eloszlások modellezéséhez kisebb pontosság is elegendő, mint molekulafizikai számításokhoz, ott kisebb végső felbontási szintig kell elmenni).

Az első predikciók általában már a második finomítás után is 5-15% közötti hibát képesek elérni, s ez felbontási szintenként javul közel egy-egy nagyságrendet.

A második predikció hibája az elsőnek 2-4-szerese. A második predikció együtthatói ez első előre becsült együtthatók szinte körül oszcillálnak, ez az oszcilláció csúszóablakos átlagolással majdnem teljesen megszüntethető. Az átlagolás eléggé nagy toleranciát mutat az átlagolási együtthatókkal szemben.

A módszer első továbbfejlesztési lehetősége a dimenziószám növelése, ami szétcsatolódimenziók esetén egyszerűen megoldható, hiszen a sokdimenziós eredmény ez egyes dimenziók eredményeinek szorzata.

A második, még egydimenziós továbbfejlesztési lehetőség új operátorok mátrixelemeinek kiszámítása. Új operátorok lehetnek az eddigi első és másodfokú deriválás, első és másodfokú polinommal való szorzás, illetve dobozfüggvény-

nyel való szorzás mellett például ezek kombinációi, melyek lehetővé tennék hengerpolár koordináta-rendszerbeli Laplace-operátorkomponensek használatát is. Ezek a dobozba zárt differenciáloperátorok alkalmasak környezeti problémák, például városi légszennyeződés terjedésének modellezésére is.

Terjedési egyenletek megoldása esetén azonban ki kell lépni a sajátérték-egyenletek témaköréből és a forrással rendelkező elliptikus differenciálegyenleteket kell alaposabban tanulmányozni. Ezek megoldása egyrészt könnyebb, hiszen egyszerű lineáris egyenletrendszer megoldásra vezetne, másrészt viszont sokkal hatékonyabb predikciós eljárást igényelnek, hogy érdemes legyen a megoldás helyett a predikciót választani.

## FELHASZNÁLT IRODALOM

- CHUI, CHALES K.: *An Introduction to Wavelets*, 1992, Academic Press, San Diego.
- DAHMEN, WOLFGANG: Wavelet methods for PDEs. Some recent developments, in *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2001/128. szám, 133. o.
- DAUBECHIES, INGRID: *Ten Lectures on Wavelets*, 1992, CBMS-NSF regional conference series in applied mathematics 61, SIAM, Philadelphia. FOURIER, JEAN-BAPTISTE JOSEPH: *Theorie Analytique de la Chaleur*, 1822, Firmin Didot, Paris.
- ГАЛЁРКИН, Борис Григоревич, *Стержни и пластинки. Ряды в некоторых вопросах упругого равновесия стержней и пластинок*. Вестник инженеров, 1915, 1. szám. 897–908. o. (GALJORKIN, BORISZ GRIGORJEVICS: Síkok és rudak. Megoldás néhány rudak és síkok rugalmas egyensúlyával kapcsolatos kérdésre, in *Vesztnyik Inzsenyerov*, 1915/1. szám, 897. o.)
- LISZI MÁTÉ – DROTÁR ISTVÁN – PRUKNER PÉTER – NAGY SZILVIA: *On wavelet based modeling of EMC test chambers – economic prediction of the refined expansion coefficients*, 2017, beadva az ICEST2017 Nis, Szerbia konferenciára.
- NAGY SZILVIA – PIPEK JÁNOS: An economic prediction of the finer resolution level wavelet coefficients in electronic structure calculations, in *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2015/17, 31558–31565. o.
- PIPEK JÁNOS – NAGY SZILVIA: An Economic Prediction of Refinement Coefficients in Wavelet-Based Adaptive Methods for Electron Structure Calculations, in *Journal of Computational Chemistry*, 2013/34. szám, 460–465. o.
- SZIOVÁ BRIGITA – NAGY SZILVIA – PIPEK JÁNOS: Optimization of the prediction of second refined, wavelet coefficients in electron structure calculation, in *Open Physics*, 2017/14. szám, 643–650. o.
- VARGA Imre – Hofstetter, E. – Pipek J.: One-parameter Superscaling at the Metal-Insulator Transition in Three Dimensions, in *Physics Letters*, 1999/82. szám, 4683–4686. o.