A Richardson-extrapoláció és alkalmazása a Dániai Euleri Modellben

Faragó István [1], Havasi Ágnes [1], Zahari Zlatev[2]

[1]ELTE Alkalmazott Analízis és Számításmatematikai Tanszék és MTA-ELTE Numerikus Analízis és Nagy Hálózatok Kutatócsoport
Budapest

[2]Department of Environmental Science, Aarhus University
Roskilde, Dánia

Vázlat

- Idöfüggö feladatok numerikus megoldása
- A Richardson-extrapoláció módszere
- Alkalmazás az UNI-DEM modellben
- Kombinálás operátorszeleteléssel

Idöfüggö feladatok numerikus megoldása

- Alapfeladat: KDE vagy PDE-rendszerhez tartozó kezdetiérték- vagy vegyes feladat megoldása

  Többnyire csak numerikusan lehetséges!

  1. Definiálunk egy rácshálót;
  2. ezen kitüzünk egy diszkrét feladatot;
  3. megoldjuk a diszkrét feladatot $\rightarrow$ numerikus megoldás
  4. ellenörizzük, hogy megfelelöen pontos-e
  5. ha nem, elölröl kezdjük egy finomabb rácshálón

- Mikor jó a numerikus módszer?
  - konzisztens
  - stabil
  - konvergens
  - hatékony (megfelelö pontosság "olcsó" elérése)
  - megörzi a kvalitatív tulajdonságokat

Mi a Richardson-extrapoláció (RE)?

- Ha a numerikus megoldás nem elég pontos, a számolást elölröl kezdjük, a durvább rácson kapott megoldás elvész
- Ötlet (Richardson, 1911): Használjuk fel a régi megoldást egy pontosabb numerikus megoldás elöállításához!
- RE: u.azon módszert két (vagy több) különbözö lépésközzel alkalmazzuk (pl. τ és $\tau/2$), és a megoldásokat megfelelö súlyokkal átlagoljuk
- $\rightarrow$ p-ed rendü módszerböl (p+1)-ed rendü nyerhetö, és nem vész el a korábbi eredményünk!

A RE alkalmazása KDER-ben

- KDER Cauchy-feladata:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y), \; t \in [0, T], \; y(0) = y_0$$

- Definiáljuk a $t_n = n \cdot \tau$ rácshálót (n = 0,1,...,N), ahol $\tau = T/N$ a lépésköz, $t_N = T$.
- Jelölés: $y(t^*)$ - a feladat pontos megoldása $t = t^*$-ban.
- RE: egy p-ed rendü numerikus módszerrel τ és $\tau/2$ lépésközzel is elöállítjuk $y(t^*)$ approximációját. (Ha $t^* = n \cdot \tau$ az elsö rácson, akkor $t^* = 2n \cdot \tau/2$ a második rácson.)

A RE alkalmazása KDER-ben

- Jelölje a τ és $\tau/2$ lépésközzel nyert numerikus megoldást $t = t^*$-ban z_n ill. w_n. Ha a módszer p-ed rendben konvergens, akkor
$$y(t^*) = z_n + K\tau^p + \mathcal{O}(\tau^{p+1})$$
ill.
$$y(t^*) = w_n + K(0.5\tau)^p + \mathcal{O}(\tau^{p+1}),$$
ahol K a numerikus módszertöl függö mennyiség.
- Küszöböljük ki a p-ed rendü tagokat súlyozott átlagolással!
$$y(t^*) = \frac{2^p w_n - z_n}{2^p - 1} + \mathcal{O}(\tau^{p+1})$$
- Az új közelítés:
$$y_n := \frac{2^p w_n - z_n}{2^p - 1},$$
amely $(p+1)$-ed rendben pontos!

A Richardson-extrapoláció két módja

Passzív RE:

$$\begin{tikzcd}
& z_1 \arrow[r] & z_2 \arrow[r] & \cdots \\
y_0 \arrow[ur] \arrow[dr] & & & \\
& w_1 \arrow[r] \arrow[d] & w_2 \arrow[r] \arrow[d] & \cdots \\
& y_1 & y_2 &
\end{tikzcd}$$

Aktív RE:

$$\begin{tikzcd}
& z_1 \arrow[dr] & & z_2 \arrow[dr] & \\
y_0 \arrow[ur] \arrow[dr] & & y_1 \arrow[ur] \arrow[dr] & & y_2 \ \cdots \\
& w_1 \arrow[ur] & & w_2 \arrow[ur] &
\end{tikzcd}$$

A RE konvergenciája

- Passzív RE: ha a mögöttes (p-ed rendü) módszer konvergens, akkor a passzív RE-val kombinálva is az lesz.

  Mi a helyzet az aktív RE-val?

- **Tétel** (Faragó, Havasi, Zlatev, 2011): Tegyük fel, hogy f a 2. változójában lipschitzes, azaz

$$\|f(t_n, y_n) - f(t_n, y_n^*)\| \leq L\|y_n - y_n^*\|$$

  valamely L konstans mellett. Ekkor az explicit Runge-Kutta + aktív RE módszer konvergens.

- **Tétel** (Faragó, Havasi, Zlatev, 2012): Tegyük fel, hogy f a 2. változójában lipschitzes. Ekkor a diagonálisan implicit Runge-Kutta + aktív RE módszer konvergens.

A RE stabilitása rögzített rácson

- Stiff feladatoknál fontos a Dahlquist-féle tesztfeladaton való viselkedés:

$$y' = \lambda y, \quad t \in [0, \infty), \quad y(0) = y_0, \quad Re(\lambda) \le 0$$

- A passzív RE megörzi a mögöttes módszer stabilitási tulajdonságait.
- Ugyanez nem feltétlenül igaz az aktívra: a RE javíthat és ronthat is a stabilitáson:
  - Trapézszabály + RE: nem A-stabil
  - Implicit Euler + RE: L-stabil
  - Általános Θ-módszer + RE: A-stabil, ha $\Theta \in [2/3, 1]$

Az UNI-DEM légkörkémiai almodellje

- az EMEP modellben is alkalmazott kémiai reakcióséma 56 anyagfajtával
- nemlineáris KDER
- egyes anyagfajták lassan, mások gyorsan alakulnak át $\rightarrow$ erösen stiff rendszer
- 24 órás idöintervallum
- referenciamegoldás: négylépéses, ötödrendü L-stabil implicit Runge-Kutta módszerrel
- a hibát maximumnormában mérjük

A IE + RE módszerrel kapott hibák

N	IE	IE + aktív RE	IE + passzív RE
1344	3.063E-1	7.708E-3	6.727E-3
2688	1.516E-1 (2.02)	1.960E-3 (3.93)	1.739E-3 (3.87)
5376	7.536E-2 (2.01)	5.453E-4 (3.59)	4.417E-4 (3.94)
10752	3.757E-2 (2.01)	1.455E-4 (3.75)	1.113E-4 (3.97)
21504	1.876E-2 (2.00)	3.765E-5 (3.86)	2.793E-5 (3.98)
43008	9.371E-3 (2.00)	9.583E-6 (3.93)	6.997E-6 (3.99)
86016	4.684E-3 (2.00)	2.418E-6 (3.96)	1.751E-6 (4.00)
172032	2.341E-3 (2.00)	6.072E-7 (3.98)	4.379E-7 (4.00)
344064	1.171E-3 (2.00)	1.522E-7 (3.99)	1.095E-7 (4.00)

Adott pontosság eléréséhez szükséges gépidö (s) és lépésszám (IE módszer)

Globális hiba	IE		IE + RE	
	Gépidö	Lépésszám	Gépidö	Lépésszám
[1E-2,1E-1]	274	5376	304	672
[1E-3,1E-2]	862	43008	374	1344
[1E-4,1E-3]	7144	688128	661	5376
[1E-5,1E-4]	42384	5505024	1428	21504
[1E-6,1E-5]	265421	44040192	2240	43008

Kombinálás operátorszeleteléssel

A légköri transzport-kémiai egyenletrendszer:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\nabla(uc_i)+\nabla(K\nabla c_i)-\sigma_i c_i+R_i(c_1,\ldots,c_q)+E_i(x,t),\ i=1,2,\ldots,q$$

- Csatolt nemlineáris PDE-rendszer.
- Közvetlen diszkretizáció M térbeli rácspont esetén $\rightarrow$ nagyméretü nemlineáris KDE-rendszer $M \cdot q$ db ismeretlennel
  $\Rightarrow$ standard numerikus módszerek nem használhatók
- Alkalmazzunk operátorszeletelést:
  - Az idöintervallumot τ hosszúságú részekre osztjuk
  - A jobb oldalt részoperátorokra bontjuk, a megfelelö részfeladatokat **egymás után** oldjuk meg a részintervallumokon
  - Csatolás a kezdeti feltételeken keresztül

A pontosság növelése Richardson-extrapolációval

- p: a szeletelési módszer rendje
- r: az alkalmazott numerikus módszer rendje

  $\rightarrow$ A teljes approximáció rendje $\min\{p, r\}$.

  $\Rightarrow$ A részfeladatokra csak akkor érdemes magasabb rendü módszert alkalmazni, ha a szeletelési módszer is magasabb rendü. A magasabb rendü szeletelési módszerek azonban költségesek.

- Ötlet: A pontosságot Richardson-extrapolációval növeljük!

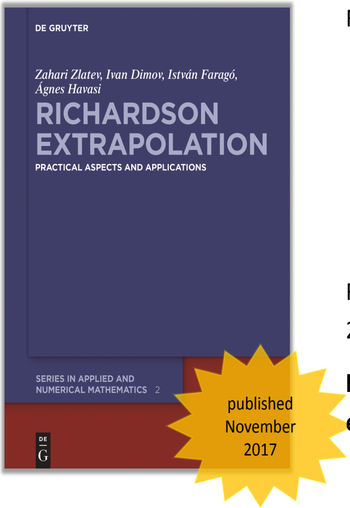
A kombinált módszert az UNI-DEM légkörkémiai almodelljén teszteltük. Két részoperátor: az ózonnal összefüggö anyagok kémiai reakciói + a többi

A szekvenciális szeleteléssel kapott hibák implicit Euler-módszerrel RE nélkül ill. RE alkalmazásával

N	Szekv. szeletelés	Szekv. szel. + RE
1344	2.154e-1	1.799e-2
2688	1.093e-1 (1.97)	5.862e-3 (3.07)
5376	5.509e-2 (1.99)	1.698e-3 (3.45)
10752	2.764e-2 (1.99)	4.598e-4 (3.69)
21504	1.384e-3 (2.00)	1.199e-4 (3.84)
43008	6.926e-3 (2.00)	3.062e-5 (3.92)
86016	3.464e-3 (2.00)	7.740e-6 (3.96)
172032	1.733e-3 (2.00)	1.946e-6 (3.98)

MS-szeleteléssel kapott hibák másodrendü DIRK-módszerrel RE nélkül ill. RE alkalmazásával

N	DIRK	DIRK + MS	DIRK + MS + RE
1344	4.55E-03 (4.15)	3.94E-02 (2.42)	8.61E-03 (3.08)
2688	1.12E-03 (4.07)	1.47E-02 (2.69)	2.42E-03 (3.56)
5376	2.77E-04 (4.03)	4.92E-03 (2.95)	5.83E-04 (4.15)
10752	6.91E-05 (4.02)	1.55E-03 (3.20)	1.19E-04 (4.89)
21504	1.72E-05 (4.01)	4.49E-04 (3.46)	1.99E-05 (5.99)
43008	4.30E-06 (4.00)	1.22E-04 (3.68)	2.73E-06 (7.29)
86016	1.07E-06 (4.00)	3.19E-05 (3.82)	3.30E-07 (8.29)
172032	2.69E-07 (4.00)	8.17E-06 (3.91)	3.83E-08 (8.62)
344064	6.72E-08 (4.00)	2.07E-06 (3.95)	4.56E-09 (8.39)
688128	1.68E-08 (4.00)	5.19E-07 (3.98)	5.64E-10 (8.09)
1376256	4.20E-09 (4.00)	1.30E-07 (3.99)	7.09E-11 (7.96)
2752512	1.05E-09 (4.00)	3.26E-08 (3.94)	8.95E-12 (7.93)



From the Content:

- The basic properties of Richardson extrapolation
- Richardson extrapolation for explicit Runge-Kutta methods
- Linear multistep and predictor-corrector methods
- Richardson extrapolation for some implicit methods
- Richardson extrapolation for splitting techniques
- Richardson extrapolation for advection problems
- Richardson extrapolation for some other problems

Retail price: € 119.95 / US$ 137.99

286 pages

hardcover isbn 978-3-11-051649-4

eBook isbn 978-3-11-053300-2

http://www.degruyter.com/books/978-3-11-051649-4

1

Figure:

Köszönöm a figyelmet!