A Richardson-extrapoláció és alkalmazásai

Havasi Ágnes

ELTE TTK, Alkalmazott Analízis és Számításmatematikai Tanszék és
MTA-ELTE Numerikus Analízis és Nagy Hálózatok Kutatócsoport

Dévényi Dezső emlékülés, Budapest, 2019. november 18.

Vázlat

- A Richardson-extrapoláció (RE) módszere
- Elméleti eredmények
  - Konvergencia
  - Abszolút stabilitás
- Alkalmazások (hullámterjedési modell)

A Richardson-extrapoláció módszere

KDER Cauchy-feladata:

$$\begin{cases} y'(t) = f(t,y), & t \in [0, T] \\ y(0) = y_0 \end{cases} \tag{1}$$

Definiáljuk $[0, T]$-n a következő két rácshálót:

$$\Omega_\tau := \{t_n = n\tau : n = 0, 1, \ldots, N_t\}, \text{ ahol } N_t = T/\tau, \tag{2}$$

$$\Omega_{\tau/2} := \{t_k = k\tau/2 : k = 0, 1, \ldots, 2N_t\}. \tag{3}$$

Jelölje a megfelelő numerikus megoldásokat a durva rács t^* pontjában $z(t^*)$ ill. $w(t^*)$. Ha $y(t)$ $(p+1)$-szer folyt. differenciálható, akkor

$$y(t^*) - z(t^*) = K \cdot \tau^p + \mathcal{O}(\tau^{p+1}), \text{ és} \tag{4}$$

$$y(t^*) - w(t^*) = K \cdot (\tau/2)^p + \mathcal{O}(\tau^{p+1}). \tag{5}$$

K-t kiküszöbölve az

$$y_{\mathrm{RE}}(t^*) := \frac{2^p w(t^*) - z(t^*)}{2^p - 1} \tag{6}$$

approximációhoz jutunk, amely $(p+1)$-ed rendben közelíti a pontos megoldást.

A fenti módon számolva *a kombinált megoldást nem használjuk fel* a továbblépéshez (**passzív RE**).

Másik lehetőség: a durva rács minden t_n időpontjából a finom és a durva rácson is *a kombinált megoldásból* mint kezdeti értékből lépünk tovább (**aktív RE**).

A Richardson-extrapoláció két változata

Passzív RE:

$$
\begin{tikzcd}
 & z_1 \arrow[r] & z_2 \arrow[r] & \cdots \\
y_0 \arrow[ur] \arrow[dr] & & & \\
 & w_1 \arrow[r] \arrow[d] & w_2 \arrow[r] \arrow[d] & \cdots \\
 & y_{RE,1} & y_{RE,2} &
\end{tikzcd}
$$

Aktív RE:

$$
\begin{tikzcd}
 & z_1 \arrow[dr] & & z_2 \arrow[dr] & & \\
y_0 \arrow[ur] \arrow[dr] & & y_{RE,1} \arrow[ur] \arrow[dr] & & y_{RE,2} & \cdots \\
 & w_1 \arrow[ur] & & w_2 \arrow[ur] & &
\end{tikzcd}
$$

Konvergencia

- Passzív RE: ha a mögöttes (p-ed rendű) módszer konvergens (feltettük), akkor a passzív RE-val kombinálva is az lesz ($\gamma_1 + \gamma_2 = 1!$).

  Mi mondható el az aktív RE-ról?

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

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

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

- **Tétel** (Faragó, Havasi, Zlatev, 2013): Tegyük fel, hogy f a 2. változójában lipschitzes. Ekkor a diagonálisan implicit Runge-Kutta + aktív RE módszer konvergens.

Stabilitás rögzített rácson

- A passzív RE megőrzi a mögöttes módszer abszolút stabilitási tulajdonságait.
- Az aktív RE javíthat és ronthat is a stabilitáson:
  - A **középponti módszer** RE nélkül A-stabil, RE-val kombinálva azonban nem
  - **Implicit Euler**: önmagában és a RE-val is L-stabil
  - **Általános θ-módszer**: erősen A-stabil, ha $\Theta \in (1/2, 1]$, míg RE-val csak akkor erősen A-stabil, ha $\theta \in [2/3, 1]$.
  - Számos Runge–Kutta-módszernél igazoltuk a stabilitási tartomány megnövekedését.

Alkalmazások

1. KDER megoldása:
   - Egyszerűsített globális CO_2-modell (Brajnovits Brigitta)
   - Légkörkémiai modell (Faragó István, Zahari Zlatev)
2. PDER $\rightarrow$ térbeli diszkretizáció után KDER $\rightarrow$ passzív/aktív RE alkalmazása az időbeli integrálás pontosságának növelésére:
   - Üzemanyagcella-modell (Horváth Róbert, Szabó Tamás)
   - Reakció-diffúziós modellek biokémiai alkalmazásokkal (Lagzi István, Mona Tamás)
   - Hullámterjedés modellezése (Ehsan Kazemi)
3. PDER, tér- és időbeli Richardson-extrapoláció
   - Advekciós feladat megoldása (Faragó István, Zahari Zlatev)

Hullámterjedési jelenségek modellezése

Tesztfeladat:

$$\begin{aligned} y'(t) &= -i\nu y(t), \ \ t \geq 0 \\ y(0) &= y_0 \end{aligned} \tag{7}$$

ahol $\nu \in \mathbb{R}$ adott. Legyen $\sigma := \nu\tau$.
Pontos megoldás: $y(t) = \exp(-i\nu t)y_0 \Rightarrow y(t_n + \tau) = \exp(-i\sigma)y(t_n)$.
Amplifikációs tényező: $R_e = \exp(-i\sigma)$.
Numerikus módszer alkalmazása: $y_{n+1} = R(\sigma)y_n$. A módszer hibája jellemezhető a következő hányadossal:

$$E(\sigma) = \frac{R(\sigma)}{R_e}. \tag{8}$$

Jelölje φ az $E(\sigma)$ komplex szám irányszögét, ekkor

$$E(\sigma) = |E(\sigma)| \exp(i\varphi) \tag{9}$$

$|E(\sigma)| = |R(\sigma)|$ közelebb van 1-hez $\Rightarrow$ kisebb disszipáció
φ közelebb van 0-hoz $\Rightarrow$ kisebb fázishiba.

Optimális DIRK módszer konstruálása

- Kérdés: felhasználható-e a RE nagy pontosságú, kis disszipációjú és fázishibájú időintegrálási módszerek konstruálására?
- Mögöttes módszer: DIRK (diagonally implicit Runge–Kutta) módszer.
- Két megközelítés:
  1) Optimalizálás a RE alkalmazását megelőzően: meghatároztuk azt a kétlépcsős, harmadrendű sémát, amelyre az

$$Err(T) = \int_0^T |R(\sigma) - \exp(-i\sigma)| \mathrm{d}\sigma \tag{10}$$

  hiba minimális $T = 2$ esetén.
  $\rightarrow$ A kapott séma: DIRK32 módszer, amelyet a RE-val kombinálva a negyedrendű DIRK32RE módszert nyertük.

DIRK32 vagy DIRKRE32?

2) Optimalizálás a kombinált DIRK + RE sémára: a DIRK módszer együtthatóit úgy határozzuk meg, hogy a **kombinált DIRK + RE módszer** legyen a lehető legkisebb disszipációjú és fázishibájú.
Ehhez $Err(T)$ helyett a következő integrált minimalizáltuk:

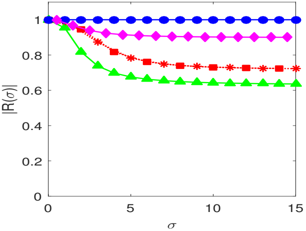
$$\widetilde{Err}(T) = \int_0^T |R_{RE}(\sigma) - \exp(-i\sigma)| \mathrm{d}\sigma \tag{11}$$

ahol

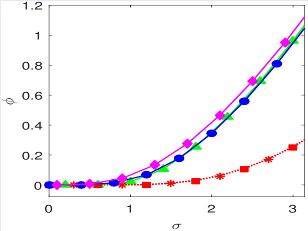
$$R_{RE}(\sigma) = \frac{2^p R(\sigma/2)^2 - R(\sigma)}{2^p - 1} \tag{12}$$

a kombinált DIRK + RE módszer numerikus amplifikációs tényezője.
Az eredményül kapott séma azonban a DIRK32-től nem tér el lényegesen.

Hullámanalízis: DIRK32RE és más negyedrendű módszerek



(a) Amplifikációs tényező



(b) Fázishiba

Kék: DIRK43,
Rózsaszín: DIRKRE43,
Piros: DIRK32RE,
Zöld: SDIRK

Numerikus kísérletek

Lineáris advekciós egyenlet:

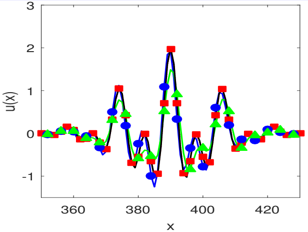
$$\frac{\partial u}{\partial t} = -c\frac{\partial u}{\partial x}, \;\; x \in [0, 500], \;\; t \in [0, 300] \tag{13}$$

Kezdeti függvény (erősen oszcilláló):

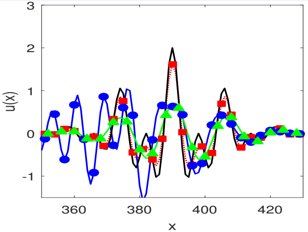
$$u_0(x) = \exp\left(-\frac{(x - x_m)^2}{b^2}\right)\left[\cos(2\pi k_1(x - x_m)) + \cos(2\pi k_2(x - x_m))\right] \tag{14}$$

ahol $x_m = 90$, $b = 20$, $k_1 = 1/(8\Delta x)$, $k_2 = 1/(16\Delta x)$, $\Delta x = 1$.
Advekciós sebesség: $c = 1$.
CFL számok ($c\Delta t/\Delta x$): 0.5, 1, 1.5, 2.
Térbeli diszkretizáció: hatodrendű módszerrel.
A térdiszkretizáció nagy pontossága miatt a hibák elsősorban az időbeli diszkretizációból erednek.

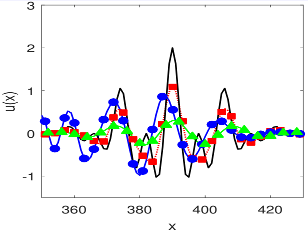
A lineáris advekciós egyenlet numerikus megoldása



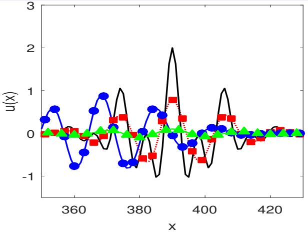
(a) CFL = 0.5



(b) CFL = 1.0



(c) CFL = 1.5



(d) CFL = 2.0

Diszkrét L_2-normabeli hibák ($t = 300$)

u_p: pontos megoldás
u_{num}: numerikus megoldás

$$\mathrm{Err}_{L_2} = \left(\int_0^{x_{\max}} (u_{\mathrm{p}} - u_{\mathrm{num}})^2 \right)^{1/2} \tag{15}$$

CFL	**DIRK32**	**DIRK43**	**SDIRK4**	**DIRK32RE**	**DIRKRE43RE**
0.5	2.5635	1.3603	1.8970	0.0888	0.9155
1.0	3.9441	6.1071	3.7469	1.3672	3.3168
1.5	4.6943	5.8264	4.4248	2.9808	4.1797
2.0	5.0303	7.4117	4.8473	3.6353	4.0986

A legkisebb hibát minden esetben a DIRK32RE módszerre kaptuk. Ez a módszer még az ötödrendű DIRKRE43RE módszert is felülmúlta...

További tervek

- Ismételt és többszörös RE
- Elméleti eredményeink kiterjesztése további mögöttes módszerekre (általános RK módszer)
- A RE alkalmazási lehetőségei PDE rendszerekben
- A RE-val kapott kombinált módszerek kvalitatív tulajdonságai

Kiemelt publikációink

- Faragó I., Havasi Á., Zlatev Z.: The convergence of diagonally implicit Runge-Kutta methods combined with Richardson extrapolation, COMPUTERS AND MATHEMATICS WITH APPLICATIONS 65:(3) pp. 395-401. (2013)
- Zlatev Z., Dimov I., Faragó I., Georgiev K., Havasi Á., Ostromsky T.: Application of Richardson extrapolation for multi-dimensional advection equations, COMPUTERS AND MATHEMATICS WITH APPLICATIONS 67:(12) pp. 2279-2293. (2014)
- Zlatev Z., Dimov I., Faragó I., Georgiev K., Havasi Á.: Stability of the Richardson Extrapolation combined with some implicit Runge-Kutta methods, JOURNAL OF COMPUTATIONAL AND APPLIED MATHEMATICS 310: pp. 224-240. (2017)
- Zlatev Z., Dimov I., Faragó I., Havasi Á.: Richardson Extrapolation: Practical Aspects and Applications Berlin: De Gruyter Verlag, 2017.
- Havasi Á., Kazemi E.: On Richardson extrapolation for low-dissipation low-dispersion diagonally implicit Runge–Kutta schemes, JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS 358: pp. 21-35. (2018)

Köszönöm a figyelmet!