A Richardson-extrapoláció elméleti vizsgálata és alkalmazásai

Havasi Ágnes

Vázlat

- Időfüggő feladatok numerikus megoldása
- A Richardson-extrapoláció (RE)
- Elméleti eredmények
- Légköri alkalmazások

Időfüggő feladatok numerikus megoldása

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

Többnyire csak numerikusan lehetséges!

1. Definiálunk egy rácshálót (időbeli lépésköz: τ);
2. ezen kitűzünk egy diszkrét feladatot;
3. megoldjuk a diszkrét feladatot $\rightarrow$ numerikus megoldás
4. ellenőrizzük, hogy megfelelően pontos-e
5. ha nem, elölről kezdjük egy finomabb rácshálón

Mikor jó a numerikus módszer?

- **Konvergens** (konzisztens és stabil): $\tau \to 0$ esetén a numerikus megoldás tart a pontoshoz. Jelölje ezen konvergencia rendjét p.
- **Kvalitatív módon adekvát**
- **Hatékony**

Mi a Richardson-extrapoláció?

- Ha a numerikus megoldás nem elég pontos, a számolást elölről kezdjük, a durvább rácson kapott megoldás elvész
- **Ötlet:** Használjuk fel a régi megoldást egy pontosabb numerikus megoldás előállításához!

  L.F. Richardson: The deferred approach to the limit, I-single lattice, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London, Series A* 226 (1927), pp. 299-349.
- **RE**: u.azon módszert két különböző lépésközzel alkalmazzuk (pl. τ és $\tau/2$), és a megoldásokat megfelelő súlyokkal átlagoljuk

→ p-ed rendű módszerből (p+1)-ed rendű nyerhető, és nem vész el a korábbi eredményünk!

A RE alkalmazása KDER-ben

KDER-hez tartozó kezdetiérték-feladat:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y), \quad t \in [a, b], \quad y(a) = y_0,$$

$y : [a, b] \rightarrow \Re^s$ folytonosan diffható, $f : \Re^{s+1} \rightarrow \Re^s$ folytonos, y_0 adott kezdeti feltétel.

Ez a feladattípus számos mat. modell alapja (közvetlenül vagy térbeli diszkretizáció után)

A RE alkalmazása KDER-ben

Definiáljuk a $t_n = a + n\tau$ rácshálót (n=0,1,…,N), ahol τ a lépésköz, $t_0 = a, \quad t_N = b.$

Jelölés: $y(t^*)$ - a KDER pontos megoldása t = t*-ban ($t^* \in (a,b]$)

RE: egy p-edrendű numerikus módszerrel τ és $\tau/2$ lépésközzel is előállítjuk $y(t^*)$ approximációját.

(Ha t* = n · τ az első rácson, akkor t* = 2n · $\tau/2$ 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

$$y(t^*) = z_n + \tau^p K + o(\tau^{p+1}) \qquad (1)$$

ill.

$$y(t^*) = w_n + (0.5\tau)^p K + o(\tau^{p+1}) \qquad (2)$$

ahol K a numerikus módszertől függő mennyiség.

- Küszöböljük ki a p-ed rendű tagokat súlyozott átlagolással!

A RE alkalmazása KDER-ben

(1) $\cdot 0{,}5^P \Rightarrow 0{,}5^P y(t^*) = 0{,}5^P w_n + (0.5\tau)^p K + o(\tau^{p+1})$ (1)'

(2) – (1)':

$$(1-0{,}5^P)y(t^*) = w_n - 0{,}5^P z_n + o(\tau^{p+1})$$

$$\Rightarrow y(t^*) = \frac{w_n - 0{,}5^P z_n}{1-0{,}5^p} + o(\tau^{p+1})$$

Az új közelítés: $y_n := \dfrac{2^p w_n - z_n}{2^p - 1}$

Látható: y_n (p + 1)-edrendben közelíti a megoldást, így megfelelően kis lépésközökre mind a z_n, mind a w_n megoldásnál pontosabb.

A Richardon-extrapoláció általánosabb megközelítésben

Alkalmazzunk ismét p-ed rendben konvergens numerikus módszert!

$y_\tau(t^*)$: a numerikus megoldás t = t*-ban τ lépésközű rácson

$$y(t^*) = y_\tau(t^*) + \alpha(t^*)\tau^p + o(\tau^{p+1})$$

τ_1 és $\tau_2 < \tau_1$ lépésközzel is megoldva a feladatot:

$$y(t^*) = y_{\tau_1}(t^*) + \alpha(t^*)\tau_1{}^p + o(\tau^{p+1}),$$

$$y(t^*) = y_{\tau_2}(t^*) + \alpha(t^*)\tau_2{}^p + o(\tau^{p+1})$$

Cél: (p + 1)-ed rendű pontosság.

A Richardson-extrapoláció általánosabb megközelítésben

$$y_{komb}(t^*) = c_1 y_{\tau_1}(t^*) + c_2 y_{\tau_2}(t^*) \qquad c_1, c_2 = ?$$

$$y_{komb}(t^*) = (c_1 + c_2) y(t^*) - (c_1 \tau_1^p + c_2 \tau_2^p)\alpha(t^*) + o(\tau^{p+1})$$

A konvergenciához szükséges: (1) $c_1 + c_2 = 1$

A (p + 1)-edrendű pontosság feltétele:

(2) $c_1 \tau_1^p + c_2 \tau_2^p = 0$

A Richardson-extrapoláció általánosabb megközelítésben

(1)-(2) megoldása:

$$c_1 = -\frac{\tau_2^p}{\tau_1^p - \tau_2^p}, \qquad c_2 = 1 - c_1$$

Speciális esetek:

Legyen $\tau_2 = \tau_1/2$.

- $p = 1$ (elsőrendű módszer): $c_1 = -1$, $c_2 = 2$
- $p = 2$ (másodrendű módszer): $c_1 = -1/3$, $c_2 = 4/3$.

A RE alkalmazása a lépésköz megválasztására

$$y(t^*) = z_n + \tau^p K + o(\tau^{p+1})$$

$$y(t^*) = w_n + (0.5\tau)^p K + o(\tau^{p+1})$$

- K közelítőleg kifejezhető:

$$K \approx \frac{2^p (w_n - z_n)}{\tau^p (2^p - 1)}$$

- W_n hibáját a 2. egyenletből kifejezve:

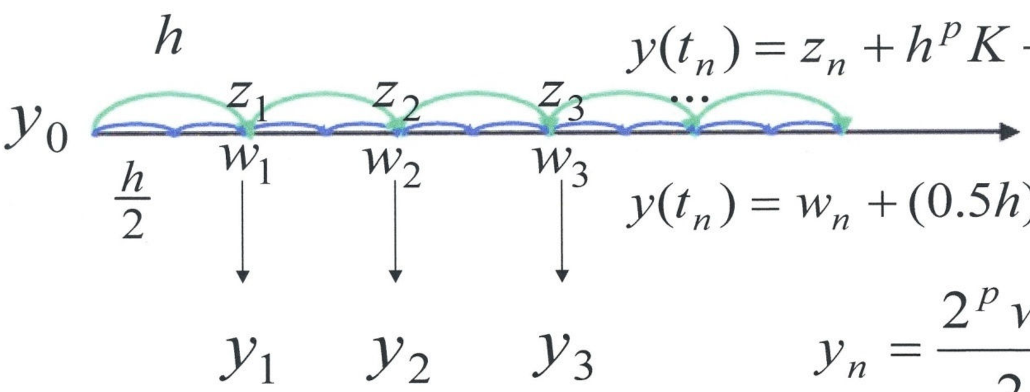
$$y(t^*) - w_n \approx \frac{w_n - z_n}{2^p - 1} =: E_n$$

→ A két különböző lépésközzel kapott megoldásból becsülhető az egyik megoldás hibája. Új lépésköz választása:

$$\tau_{új} = \gamma \sqrt[p]{\frac{TOL}{E_n}} \tau$$

A RE két módja

- passzív:

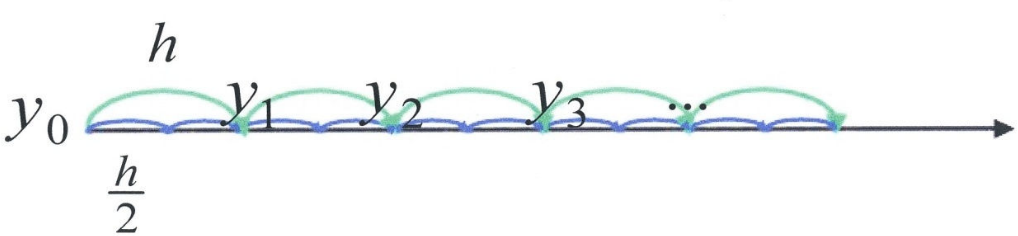


$$y(t_n) = z_n + h^p K + O(h^{p+1})$$

$$y(t_n) = w_n + (0.5h)^p K + O(h^{p+1})$$

$$y_n = \frac{2^p w_n - z_n}{2^p - 1}$$

- aktív:



Passzív Richardson-extrapoláció

$$\begin{array}{ccccccc} & & z_1 & \longrightarrow & z_2 & \longrightarrow & \ldots \\ & \nearrow & & & & & \\ y_0 & & & & & & \\ & \searrow & & & & & \\ & & w_1 & \longrightarrow & w_2 & \longrightarrow & \ldots \\ & & \downarrow & & \downarrow & & \\ & & y_1 & & y_2 & & \end{array}$$

Aktív Richardson-extrapoláció

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

A RE konvergenciája

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

Mi a helyzet az aktív RE-val?

Legyen a mögöttes módszer egy Runge–Kutta-módszer!

Explicit RK (ERK):

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{m} b_i k_i$$

$$k_1 = f(x_n, y_n), \qquad k_i = f(x_n + c_i\tau, y_n + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j) \qquad i = 2,\dots,m$$

Diagonálisan implicit RK (DIRK): $k_i = f(x_n + c_i\tau, y_n + \tau \sum_{j=1}^{i} a_{ij} k_j)$

A RE konvergenciája – folyt.

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

$$\left\| f(t_n, y_n) - f(t_n, y_n^*) \right\| \le L \left\| y_n - y_n^* \right\|$$

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

Tétel (Faragó, H, 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

Kérdés: a RE megőrzi-e a mögöttes módszer stabilitási tulajdonságait?

Válasz: függ a RE módjától.

Stabilitási fogalmak

Dahlquist-féle tesztfeladat (valós eset):

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

(Ekkor a pontos m.o. korlátos.)

Numerikus módszer alkalmazása:

$$y_n = R(\tau\lambda) y_{n-1} \;\Rightarrow\; y_n = (R(\tau\lambda))^n y_0$$

R(τλ) – a módszer stabilitási függvénye

Stabilitás: $\exists K > 0: \quad |y_n| \le K \quad \forall n \in \mathrm{N}$

Feltétele: $|R(\tau\lambda)| \le 1.$

Stabilitási fogalmak

Jelölés: $\mu := \tau\lambda.$

Kérdés: μ mely értékeire lesz $|R(\mu)| \leq 1$?

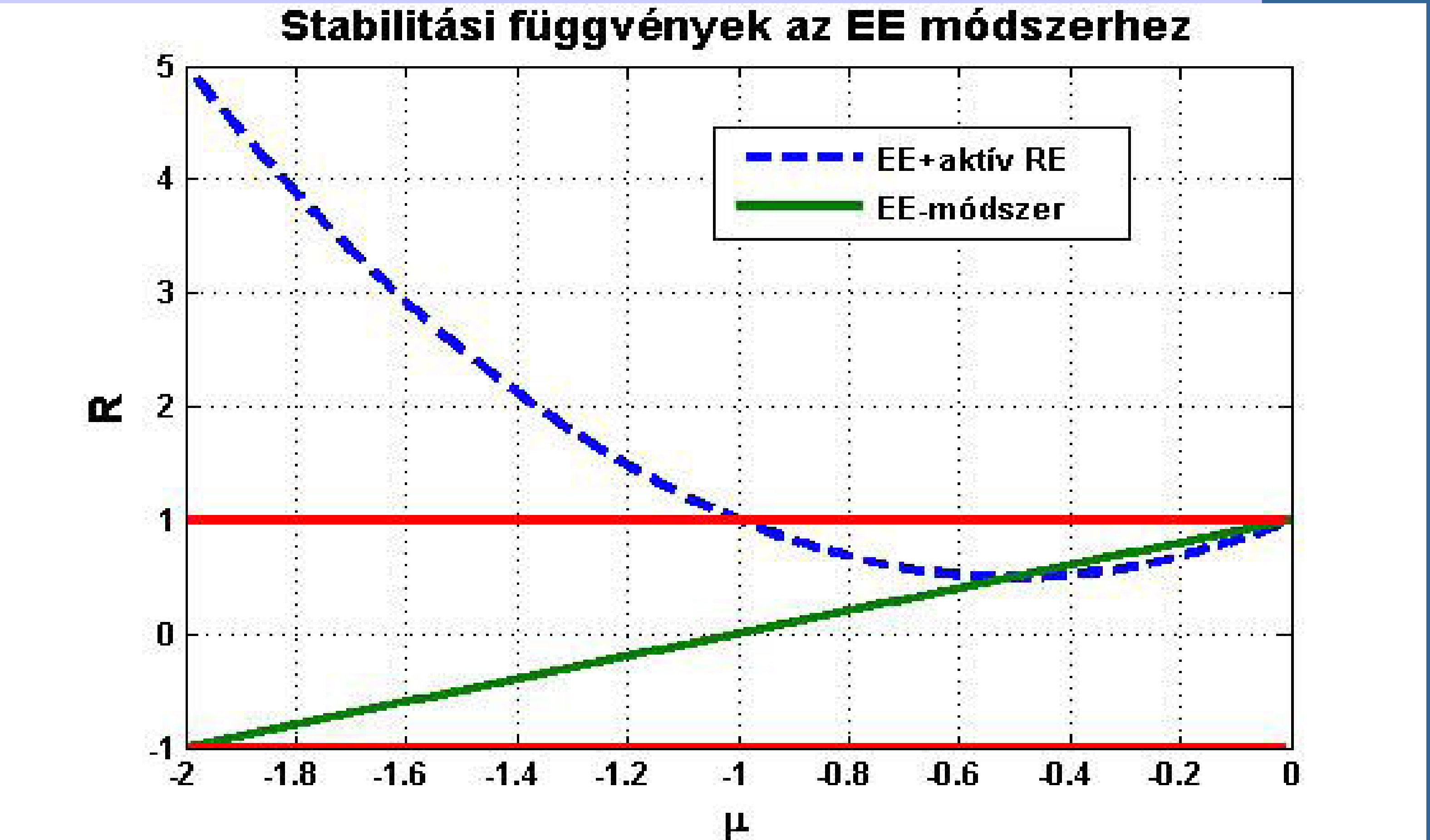
Passzív RE: örökli a mögöttes módszer stabilitását.

Aktív RE?

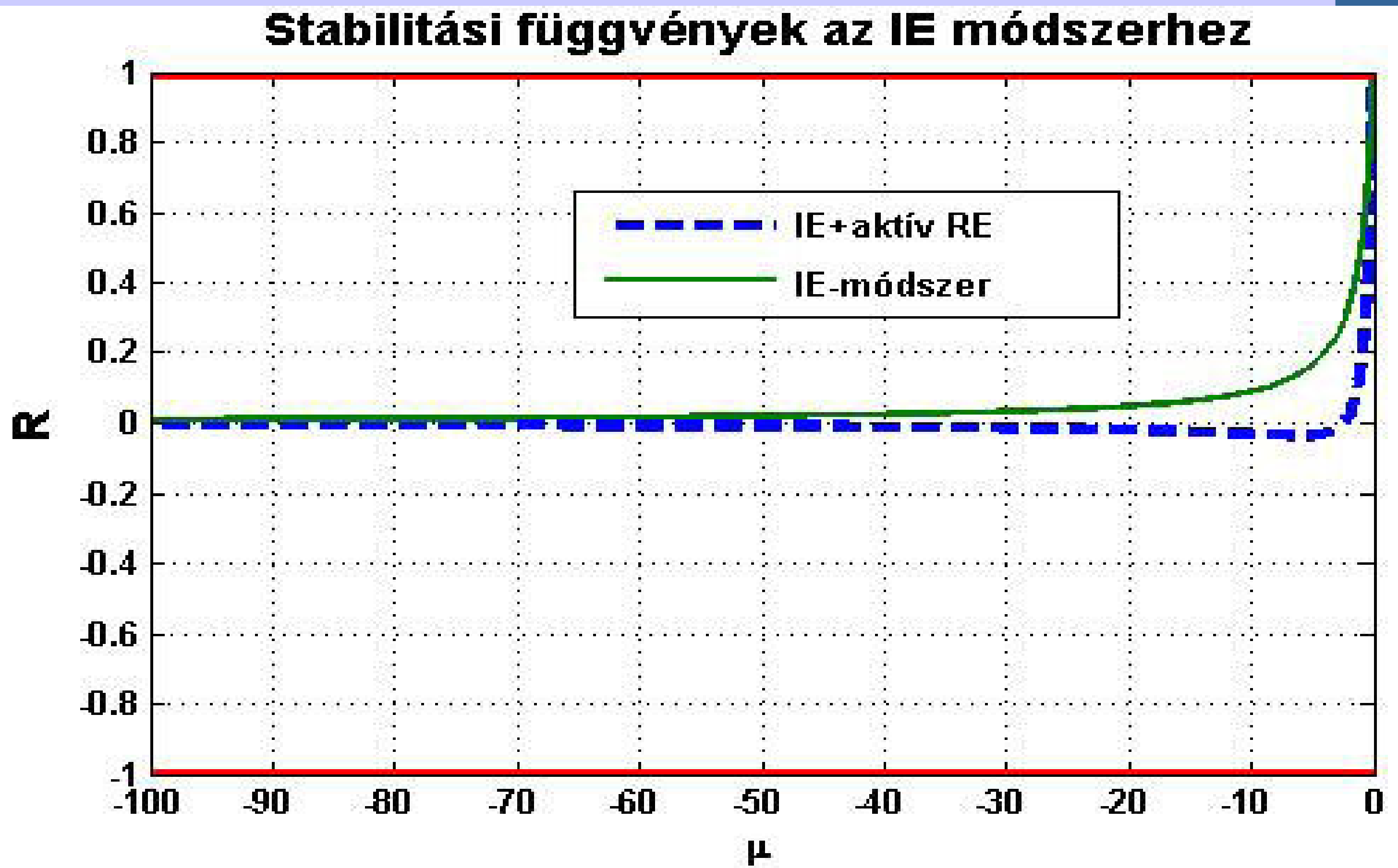
Vizsgáljuk meg különböző mögöttes módszerekre (EE, IE, KP)!

Megjegyzés: előnyös, ha $R(\mu) \geq 0,$ ugyanis $R(\mu) < 0$ esetén a megoldás lépésenként előjelet vált (oszcilláció).

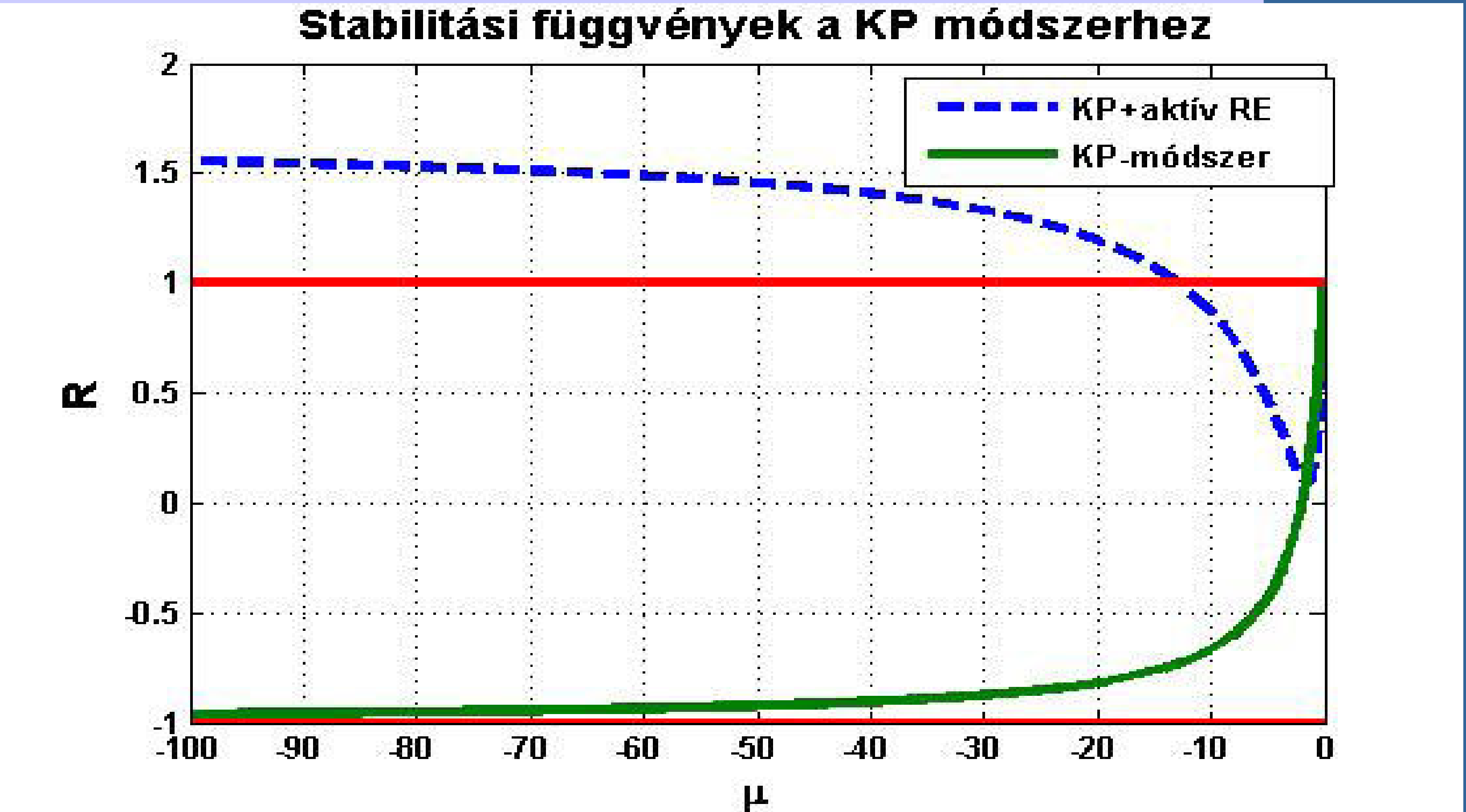
Az EE módszer feltételesen stabil.
Az EE + aktív RE módszer pontosan akkor stabil, ha a két EE-lépés külön-külön is az.



Az IE módszer feltétel nélkül stabil.
Az IE + aktív RE módszer mindig stabil, de nagy lépésközre a stabilitási függvény negatív → oszcilláció.



A KP módszer feltétel nélkül stabil, de a stab. fv. túl nagy lépésközre negatív → oszcilláció.
A KP + aktív RE módszer feltételesen stabil, de oszc.mentes



Stabilitási fogalmak általánosabb tárgyalásban

Dahlquist-féle tesztfeladat (komplex eset):

$$y'(t) = \lambda y(t),\ t \in [0, \infty), \quad y(0) = y_0, \quad \lambda \in C^-$$

Numerikus módszer alkalmazása:

$$y_n = (R(\mu))^n y_0$$

A-stabil módszer: tetszőleges lépésközzel korlátos marad a megoldás,

azaz $|R(\mu)| \le 1$ minden $\mu \in C^-$ esetén.

L-stabil: A-stabil és $\lim\limits_{\mathrm{Re}\,\mu \to -\infty} R(\mu) = 0.$

L-stabil $\Longrightarrow$ A-stabil

A RE stabilitása

Tételek:

- Tegyük fel, hogy a mögöttes módszer A-stabil (L-stabil), ekkor a passzív RE-val kombinálva is A-stabil (L-stabil) módszert nyerünk.
- KP + aktív RE nem A-stabil.
- IE + aktív RE L-stabil.
- Θ-módszer + aktív RE $\theta \in [2/3,1]$ esetén A-stabil.

A módszerek időigénye

- Az N és 2N lépéssel dolgozó passzív és aktív RE kb. másfélszer annyi műveletet igényel, mint a mögöttes módszer 2N lépése.
- Ha N lépésközre már rendelkezésre áll a megoldás, akkor a passzív RE alkalmazása alig igényel több műveletet, mint a mögöttes módszer alkalmazása 2N lépésközzel.
- Párhuzamos számítógépeken az aktív RE nem igényel lényegesen több időt, mint a mögöttes módszer 2N lépése.

A RE alkalmazása

A RE két változatát a köv. feladatok megoldására alkalmaztuk:

1. Egyszerűsített globális CO_2-modell (Brajnovits Brigitta)
2. Légkörkémiai modell (Faragó István, Zahari Zlatev)
3. Üzemanyagcella-modell (Szabó Tamás)
4. Reakció-diffúziós modellek biokémiai alkalmazásokkal (Lagzi István, Mona Tamás)

Alkalmazás egy egyszerűsített CO_2-modellben

A modell hét tározó között írja le a szén-dioxid körforgalmát:

- Felsőlégkör (ua)
- Alsólégkör (la)
- Rövid életű élőlények (sb)
- Hosszú életű élőlények (lb)
- Felső óceáni réteg (ul)
- Mélyóceáni réteg (dl)
- Tengeri élővilág (mb)

Alkalmazás egy egyszerűsített CO_2-modellben

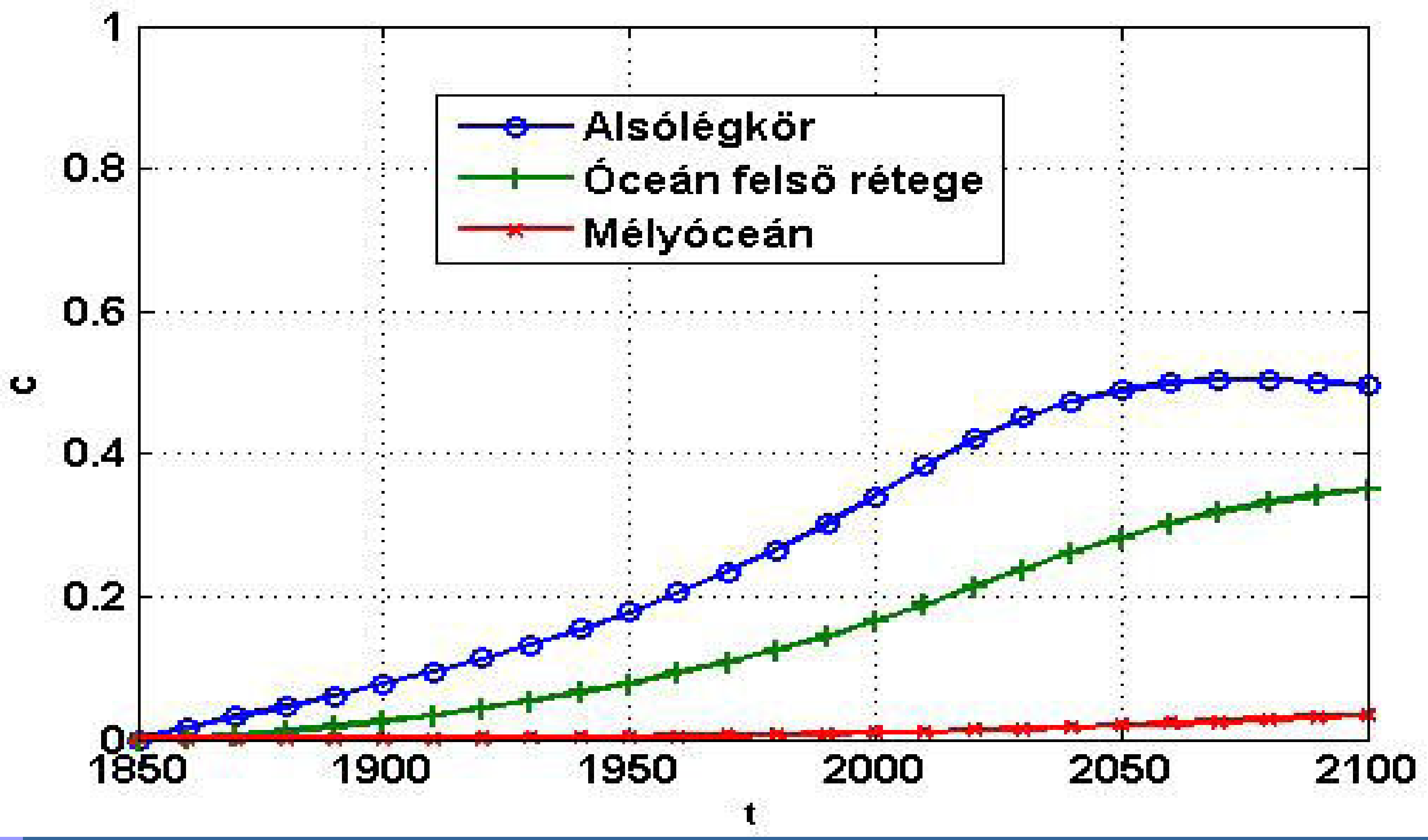
Homogén eloszlás a tározókban → hét KDE-ből álló (időfüggő) rendszer.

Pl. az alsólégkör egyenlete:

$$\frac{dc_{la}}{dt} = \frac{c_{ua} - c_{la}}{\tau_{ua,la}} + \frac{c_{sb} - c_{la}}{\tau_{sb,la}} + \frac{c_{lb} - c_{la}}{\tau_{lb,la}} + \frac{c_{ul} - c_{la}}{\tau_{ul,la}} + Q(t)$$

$$t \in [1850, 2100]$$

A referenciamegoldás három kivá-lasztott tározóra



Abszolút hibák t = 2100**-ban az alsólégköri CO_2-koncentrációra**

Explicit Euler (EE) módszerrel (p =1)

n	**EE**	**EE + passzív RE**
10	2,40E+11	2,40E+11
20	2,91E-04 (-)	5,30E-07 (-)
40	1,45E-04 (2,0036)	1,33E-07 (4,0000)
80	7,26E-05 (2,0016)	3,31E-08 (4,0000)
160	3,63E-05 (2,0008)	8,28E-09 (4,0000)

Abszolút hibák t = 2100**-ban az alsólégköri CO**2**-koncentrációra**

Implicit Euler (IE) módszerrel (p =1)

n	IE	IE + passzív RE
10	5,76E-04	2,12E-06
20	2,89E-04 (1,9928)	5,30E-07 (4,0000)
40	1,45E-04 (1,9964)	1,33E-07 (4,0000)
80	7,24E-05 (1,9980)	3,31E-08 (4,0000)
160	3,62E-05 (1,9992)	8,28E-09 (4,0000)

Abszolút hibák t = 2100**-ban az alsólégköri CO**2**-koncentrációra**

Középponti (KP) módszerrel (p =2)

n	KP	KP + passzív RE
10	4,31E-06	1,44E-11
20	1,08E-06 (4,0000)	1,45E-12 (9,9602)
40	2,69E-07 (4,0000)	6,58E-13 (2,2012)
80	6,73E-08 (4,0000)	6,55E-13 (1,0052)
160	1,68E-08 (4,0000)	5,76E-13 (1,1365)

Adott pontosság eléréséhez szükséges időlépések száma (KP módszer)

Globális hiba	KP	KP + RE
[1.0E-04 , 1.0E-05]	5	-
[1.0E-05 , 1.0E-06]	10	-
[1.0E-06 , 1.0E-07]	40	-
[1.0E-07 , 1.0E-08]	80	-
[1.0E-08 , 1.0E-09]	320	-
[1.0E-09 , 1.0E-10]	1280	15
[1.0E-10 , 1.0E-11]	2560	30
[1.0E-11 , 1.0E-12]	-	60
[1.0E-12 , 1.0E-13]	-	120

Alkalmazás az UNI-DEM légkörkémiai almodelljében

- az EMEP modellben is alkalmazott kémiai reakcióséma 56 anyagfajtával
- nemlineáris KDER
- egyes anyagfajták lassan, mások gyorsan alakulnak át → erősen merev rendszer
- 24 órás időintervallum
- referenciamegoldás: négylépéses,ötödrendű 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 gépidő (s) és lépésszám (IE módszer)

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

A RE alkalmazása PDE megoldására

Advekciós feladat:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -u\frac{\partial c}{\partial x} \qquad x \in [a_1, b_1] \qquad t \in [a, b]$$

+ kiegészítő feltételek

Crank-Nicolson-módszer (p = 2 térben és időben):

$$\frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\tau} = \frac{1}{2}\left(-u_i^{n+0.5}\frac{c_{i+1}^{n+1} - c_{i-1}^{n+1}}{2h}\right) + \frac{1}{2}\left(-u_i^{n+0.5}\frac{c_{i+1}^{n} - c_{i-1}^{n}}{2h}\right)$$

A RE alkalmazása PDE megoldására folyt.

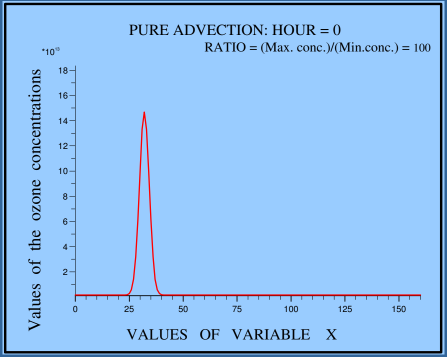
Kombináljuk a CN módszert RE-val! (A sűrűbb rácson τ-t és h-t is felezzük.)

Állítás: Tegyük fel, hogy c = c(x,t) x és t szerint is négyszer folytonosan differenciálható. Ekkor a kombinált CN + RE módszer térben és időben is negyedrendben pontos.

Testfeladat

$$x \in [0,50000000] \qquad t \in [43200,129600]$$

$$u(x,t) = 320 \quad cm/s$$



Kezdeti feltétel:

$$f(x) = 1.4679 \cdot 10^{12}[1 + 99.0e^{-10^{-12}(x-10000000)^2}]$$

Pontos megoldás:

$$c(x,t) = f(x - u(t-43200))$$

A CN + RE módszerrel kapott hibák

NT	NX	CN	CN + RE
168	160	7.373E-01	1.454E-01
336	320	4.003E-01 (1.842)	1.741E-02 (8.350)
672	640	1.254E-01 (3.142)	1.224E-03 (14.220)
1344	1280	3.080E-02 (4.135)	7.730E-05 (15.837)
2688	2560	7.765E-03 (3.967)	4.841E-06 (15.970)
5376	5120	1.954E-03 (3.974)	3.026E-07 (15.999)
10752	10240	4.892E-04 (3.994)	1.891E-08 (16.004)
21504	20480	1.224E-04 (3.999)	1.181E-09 (06.011)

Összefoglalás

- A RE egyszerű és hatékony eszköz egy numerikus módszer pontosságának a javítására.
- A passzív és aktív RE is eggyel magasabb rendű pontosságot bíztosít, mint a mögöttes módszer.
- Ha a mögöttes módszer konvergens, akkor a passzív RE-val kombinálva is az lesz.
- f lipschitessége esetén bármely ERK/DIRK módszer az aktív RE-val kombinálva konvergens módszert eredményez.
- Megvizsgáltuk az EE, IE ill. általános θ-módszer + aktív RE stabilitási feltételeit.
- Légköri modellekben sikerrel alkalmaztuk a RE mindkét változatát.

További tervek

- Az elméleti eredmények kiterjesztése egyéb mögöttes módszerekre (általános RK módszer)
- Kombinálás operátorszeleteléssel
- A RE alkalmazási lehetőségei PDE-k megoldására