

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Meteorológiai Tanszék

A Richardson-extrapoláció alkalmazása és matematikai vizsgálata egyszerűsített környezeti modellekben



Készítette:

Brajnovits Brigitta

Meteorológus MSc, Időjárás előrejelző szakirány

Témavezető:

Dr. Havasi Ágnes

ELTE, Meteorológiai Tanszék

Budapest, 2011

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	3. oldal
2. A Richardson-extrapoláció módszere	4. oldal
2.1. Extrapolációs módszerek	4. oldal
2.2. A Richardson-extrapoláció	4. oldal
2.2.1. A passzív Richardson-extrapoláció	5. oldal
2.2.2. Az aktív Richardson-extrapoláció	8. oldal
2.2.3. A Richardson-extrapoláció rendjének levezetése az explicit Euler módszerre	9. oldal
3. A Richardson-extrapoláció vizsgálata egyszerű közönséges differenciálegyenlet-rendszeren	12. oldal
4. A Richardson-extrapoláció alkalmazása egy egyszerűsített CO ₂ -modellben	18. oldal
4.1. A modell bemutatása	18. oldal
4.2. Numerikus kísérletek	22. oldal
4.2.1. A passzív Richardson-extrapolációval kapott eredmények	25. oldal
4.2.2. Az aktív Richardson-extrapolációval kapott eredmények	29. oldal
4.2.3. A mögöttes módszerekkel kapott eredmények	34. oldal
4.3. A számítási idők vizsgálata	38. oldal
5. A Richardson-extrapolációs módszerek stabilitása	42. oldal
6. Operátorszeletelési módszerek kombinálása Richardson-extrapolációval	50. oldal
6.1. Operátorszeletelési módszerek	51. oldal
6.2. Alkalmazás reakció-diffúziós feladaton	54. oldal
6.2.1. A nemstiff rendszerben kapott eredmények	56. oldal
6.2.2. Eredményeink a stiffnek választott rendszerben	58. oldal
7. Összefoglalás	61. oldal
További célkitűzések	63. oldal
Felhasznált irodalom	64. oldal
Mellékletek	66. oldal
Köszönetnyilvánítás	70. oldal

1. Bevezetés

Az időjárás előrejelzése és a klímakutatás során gyakran parciális differenciálegyenlet-rendszerek megoldása a feladatunk. Mivel ezek megoldása többnyire nem adható meg zárt alakban, ezért a pontos megoldás helyett közelítő numerikus megoldással kell élnünk. Ennek megfelelően törekszünk arra, hogy modelleink olyan numerikus sémákkal dolgozzanak, melyek megfizethetőek, ugyanakkor kielégítő pontosságúak.

A numerikus modellezés során gyakran merül fel problémaként az, hogy adott lépésköz esetén a numerikus megoldás nem kellően pontos. Az ilyen helyzetekben az a megszokott eljárás, hogy a nem kielégítő pontosságú eredményt figyelmen kívül hagyjuk, és újra, kisebb lépésközzel futtatjuk le a modellt az előre meghatározott pontosság elérése érdekében. Ez azonban a fölöslegesen elvégzett számítások miatt igen költséges.

E tekintetben jelent újdonságot a meteorológiai célú felhasználás körében egy olyan módszer bevezetése, melynek alkalmazása során a pontatlan megoldást felhasználva jutunk pontosabb eredményhez. Ezt a módszert Richardson-extrapolációnak nevezzük. Elkülöníthetjük a módszernek a passzív és aktív (*Faragó et al., 2010*) változatát, erről majd a későbbiekben teszünk említést. Lényegük, hogy adott numerikus módszer alkalmazása esetén az eredeti, h lépésközzel futtatott eredményt megtartjuk, majd csökkentjük a lépésközt (pl. $h/2$ -re), és megismételjük a futtatást.

Tegyük fel, hogy a felhasznált numerikus módszer p -ed rendben pontos. A Richardson-extrapoláció alkalmazása során a kétféle lépésközzel kapott megoldást megfelelően kombinálva a kapott eredményről kimutatható, hogy $(p+1)$ -ed rendben pontos lesz. Ebből láthatjuk, hogy pontosabb eredményt érünk el a kombinált megoldással, mint az egyes numerikus megoldásokkal külön-külön, és az előző számításaink sem vesznek kárba. Tehát elmondható, hogy ezáltal csökkennek a számítás költségei.

A dolgozatban megmutatjuk, hogy a módszer alkalmazása a meteorológiai modellekben rendkívül hasznos lenne, hiszen adott pontosság esetén költséghatékonyabb, illetve azonos mennyiségű számítás mellett pontosabb lehet, mint más módszerek. Ezt mutatjuk be egy egyszerű közönséges differenciálegyenlet-rendszer példáján, majd egy egyszerűsített globális széndioxid-modellen (*Griffiths et al., 2008*), mellyel már egy korábbi munkánkban (*Brajnovits és Kelemen, 2009*) dolgoztunk. Tanulmányozzuk a Richardson-extrapoláció stabilitási tulajdonságait. Kitérünk arra is, hogy a számítási idők a különböző módszerek esetén hogyan alakulnak. Majd megvizsgáljuk egy reakció-diffúziós feladaton (*Hundsdoerfer and Portero, 2006; Gnandt, 2006*), hogy a séma aktív változatát operátorszeleteléssel kombinálva milyen eredményre jutunk, ha mögöttes módszerként két elsőrendű operátorszeletelési eljárást alkalmazunk.

2. A Richardson-extrapoláció módszere

2.1. Extrapolációs módszerek

Tegyük fel, hogy egy kezdetiérték-feladatra p -ed rendben konvergens numerikus módszert alkalmazunk. Az extrapolációs módszerek lényege, hogy a globális hiba vezető tagját vagy tagjait kiejtve p -ed rendűnél gyorsabb konvergenciát érünk el (*Ellowitz, 2009*).

2.2. A Richardson-extrapoláció

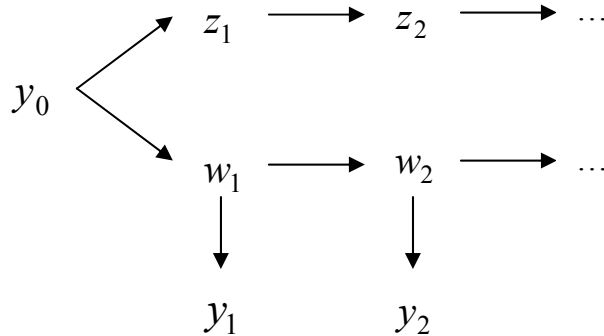
A Richardson-extrapoláció közönséges differenciálegyenletek (illetve -rendszerek) közelítő megoldásának pontosságát növelő számítási eszköz, melyet különféle numerikus módszerekkel alkalmazhatunk. A módszer lényege, hogy adott numerikus eljárást alkalmazva két időlépcsővel is kiszámítjuk a numerikus megoldást, és ezeket a megfelelő módon kombinálva a módszer rendjénél eggyel magasabb rendben pontos eredményt kapunk. Két változata ismert: a passzív és aktív Richardson-extrapoláció, melyekkel a következő két alfejezetben foglalkozunk. Léggöri kémiai modellel végzett kísérletsorozat alátámasztja (*Faragó et al., 2010*), hogy:

- valóban lehetséges a numerikus megoldás pontosságának növelése a Richardson-extrapoláció használatával,
- a Richardson-extrapoláció számítási költsége sokkal alacsonyabb, mint az eredeti numerikus módszeré, ha adott pontosság elérése a cél.

A módszer nemcsak a közelítés pontosságának a növelésére alkalmazható, hanem a kiválasztott numerikus módszer által elért pontosság automatikus kontrollálására is a numerikus modellekben.

2.2.1. A passzív Richardson-extrapoláció

Az eredeti ötlet Richardsontól ered (*Richardson, 1927*), aki egy időrétegen, két különböző időlépcsővel ugyanazon konvergens módszerrel kapott megoldásokat kombinált. Így p -ed rendben konvergens módszerekből $p+1$ -ed rendben konvergens módszert nyert. Ezt mi passzív Richardson-extrapolációnak nevezzük.



1. ábra A passzív Richardson-extrapoláció számításának menete.

Ezzel a módszerrel végezve a számításokat, a numerikus megoldást minden időrétegen a két különböző lépésközű megoldás kombinálásával kapjuk, de a továbblépéshez azt sosem használjuk fel. Ez látható az 1. ábrán.

Tekintsünk egy közönséges differenciálegyenletre vonatkozó klasszikus kezdetiérték-feladatot

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y), \quad t \in [a, b], \quad a < b, \quad y(a) = y_0, \quad (1)$$

ahol az $f(t, y)$ függvény folytonos.

A Richardson-extrapoláció alkalmazása a következőt jelenti.

Jelölje $y(t_n)$ az (1) feladat pontos megoldását valamely $t_n \in [a, b]$ időpillanatban.

Egy adott, p -ed rendű numerikus módszerrel a feladatot két, h és $\frac{h}{2}$ hosszúságú időlépcsővel is megoldjuk.

Jelölje az így kapott két közelítést z_n és w_n . Ekkor

$$y(t_n) = z_n + h^p K + O(h^{p+1}) \text{ és} \quad (2)$$

$$y(t_n) = w_n + (0.5h)^p K + O(h^{p+1}), \quad (3)$$

ahol K a z_n és w_n számítása során alkalmazott numerikus módszertől függő mennyiség. Az *I. mellékletben* példaként levezetjük K értékét az explicit Euler-módszerre, ha azt egy gyakran vizsgált tesztfeladatra alkalmazzuk. A K függ a feladattól és az időrétegtől, de nem függ az alkalmazott lépésköztől.

A K -t tartalmazó tagok kiejtésével a fenti két egyenletből az

$$y(t_n) = \frac{2^p w_n - z_n}{2^p - 1} + O(h^{p+1}) \quad (4)$$

egyenlőség adódik. A Richardson-extrapoláció azt jelenti, hogy a w_n és z_n megoldást a (4) képlet szerint kombináljuk, azaz az új numerikus megoldás

$$y_n = \frac{2^p w_n - z_n}{2^p - 1}. \quad (5)$$

lesz. Ebből egyértelműen látszik, hogy az y_n közelítés $p+1$ -ed rendjével általában pontosabb lesz w_n -nél és z_n -nél is. Így a Richardson-extrapolációt felhasználhatjuk a közelítő megoldás pontosságának növelésére.

Az (5) képlet azt jelenti, hogy p -ed rendű numerikus módszer esetén a z_n közelítő megoldást

$$c_1 = -\frac{1}{2^p - 1},$$

a w_n közelítő megoldást pedig

$$c_2 = \frac{2^p}{2^p - 1},$$

súllyal vesszük figyelembe. Speciálisan, ha elsőrendű numerikus módszerről van szó, akkor $p = 1$, ekkor tehát a megfelelő súlyok: $c_1 = -1$, $c_2 = 2$.

A Richardson-extrapolációt felhasználhatjuk a megfelelő lépésköz meghatározására is, úgy, hogy megbecsüljük a w_n közelítő megoldás számítása során fellépő globális hiba vezető tagját. Ezt ismertetjük az alábbiakban.

Hanyagoljuk el (2)-ben és (3)-ban az $O(h^{p+1})$ tagot! Ekkor (3)-at kivonva (2)-ből azt kapjuk, hogy

$$K = \frac{2^p \cdot (w_n - z_n)}{h^p \cdot (2^p - 1)}. \quad (6)$$

Ezt behelyettesítve (3)-ba, az

$$y(t_n) - w_n = \frac{(w_n - z_n)}{(2^p - 1)} + O(h^{p+1}), \quad (7)$$

egyenlőség adódik, ami azt jelenti, hogy az n -edik időlépcsőben a

$$HIBA_n = \left| \frac{w_n - z_n}{2^p - 1} \right| \quad (8)$$

mennyiség alkalmas a w_n számítása során keletkező globális csonkítási hiba vezető tagjának becslésére, ha a h lépésköz megfelelően kicsiny. Az (1) feladat megoldásának elvárt pontosságát leírhatjuk egy előre meghatározott TOL paraméterrel. Amennyiben ettől a (8)-ban számolt globális hiba jelentősen eltér, akkor $HIBA_n$ -et felhasználhatjuk egy h_{ij} új lépésköz kijelölésére, amely a TOL -hoz közelebbi értéket ad. Így automatikusan kontrollálhatjuk a lépésközt a

$$h_{ij} = \omega \cdot \sqrt[p]{\frac{TOL}{HIBA_n}} \cdot h \quad (9)$$

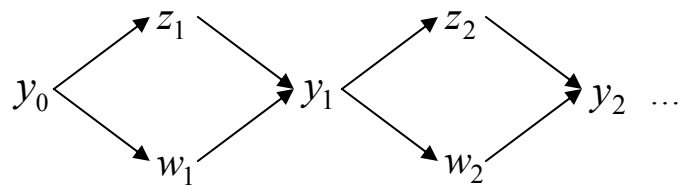
formula segítségével, ahol az ω biztonsági paraméter értékét általában 0,9-nek választják.

Ezek alapján a passzív Richardson-extrapoláció alkalmazható közönséges differenciálegyenlet-rendszereket megoldó programok automatikus lépésköz-kontrollálására.

2.2.2. Az aktív Richardson-extrapoláció

A passzív Richardson-extrapoláció ötletet ad arra, hogy hogyan gyárthatunk új módszert (Faragó *et al.*, 2010): a hosszabbik lépéssel dolgozó módszer mindegyik időlépcsőjében kombináljuk a hosszabb és a rövidebb időlépcsővel (az utóbbi esetben két lépés megtételével) nyert megoldást, és a következő időlépcsőben azzal számolunk tovább (2. ábra). Ezt aktív Richardson-extrapolációnak nevezzük. Látni fogjuk, hogy ez nem feltétlenül vezet mindig pontosabb eredményre, mint passzív társa. Olyankor is instabil megoldáshoz vezethet, ha az alkalmazott numerikus módszer stabilan viselkedik. Ilyen helyzet fordul elő, ha pl. az aktív Richardson-extrapolációt a jól ismert trapézsabállyal ötvözzük (Faragó *et al.*, 2010).

Megjegyezzük, hogy a Richardson-extrapoláció két változatáról röviden *Hundsdorfer and Verwer* (2003) is említést tesz lokális és globális Richardson-extrapoláció néven.



2. ábra Az aktív Richardson-extrapoláció számításának menete.

2.2.3. A Richardson-extrapoláció rendjének levezetése az explicit Euler módszerre

Vizsgálataink során a passzív és aktív Richardson-extrapolációt teszteljük két olyan feladaton, és három olyan numerikus módszerrel (explicit Euler-módszer, implicit Euler-módszer, középponti módszer), melyeket már egy korábbi dolgozatunkban vizsgáltunk (*Brajnovits és Kelemen, 2009*).

Az alábbiakban az explicit Euler-módszerrel kombinált Richardson-extrapoláció rendjéről megmutatjuk, hogy egy renddel magasabb, mint maga az elsőrendben pontos numerikus módszer.

Ehhez először definiálnunk kell a numerikus séma rendjét!

Egy közönséges differenciálegyenlet vagy -egyenletrendszer megoldására szolgáló numerikus séma konzisztenciarendjét a következőképpen értelmezzük.

Tekintsük a

$$\begin{cases} \frac{dy(t)}{dt} = \lambda y(t), & t > 0 \\ y(0) = y_0 \end{cases} \quad (10)$$

tesztfeladatot, ahol $\lambda < 0$. Lépünk egy lépésközt az adott numerikus sémával, és jelölje a kapott numerikus megoldást y^1 . Ha a numerikus módszer ún. stabilitási függvényét (amely az egy időlépést végzi) $R(\Delta t \lambda)$ jelöli, akkor

$$y^1 = R(\Delta t \lambda) y_0. \quad (11)$$

Hasonlítsuk ezt össze az $y(t_1)$ pontos megoldással, amely nem más, mint

$$y(t_1) = \exp(\Delta t \lambda) y_0. \quad (12)$$

1. Definíció. Egy numerikus sémát, amelynek stabilitási függvénye az (10) tesztfeladatban $R(\Delta t \lambda)$, p -edrendben konzisztensnek nevezünk, ha

$$R(\Delta t \lambda) - \exp(\Delta t \lambda) = O(\Delta t^{p+1}). \quad (13)$$

Az így definiált konzisztenciarend csak a megoldási módszerre jellemző, nem függ a konkrét feladattól. Megjegyezzük, hogy ha a numerikus módszer p -edrendben konzisztens, akkor a jobb oldali $O(\Delta t^{p+1})$ tag felírható $K \cdot \Delta t^{p+1} + O(\Delta t^{p+2})$ alakban, ahol K konstans (csak λ -tól, azaz a konkrét tesztfeladattól függ).

Példaként az explicit Euler-módszert említjük. Ismeretes, hogy erre a módszerre

$$\frac{y^1 - y_0}{\Delta t} = \lambda y_0, \quad (14)$$

vagyis

$$y^1 = (1 + \Delta t \lambda) y_0. \quad (15)$$

A módszer stabilitási függvénye tehát $R(\Delta t \lambda) = 1 + \Delta t \lambda$. Az első időlépcső végén kapott numerikus megoldást a pontos megoldással összehasonlítva az

$$y^1 - y(t_1) = \exp(\Delta t \lambda) y_0 - (1 + \Delta t \lambda) y_0 = \frac{1}{2} \Delta t^2 \lambda^2 + O(\Delta t^3) = O(\Delta t^2) \quad (16)$$

kifejezést kapjuk. Az explicit Euler-módszer tehát elsőrendben konzisztens (röviden elsőrendű) módszer. (Speciálisan, az explicit Euler-módszerre $K = \frac{1}{2} \lambda^2$.)

Legyen adva egy p -edrendben konzisztens numerikus módszer, amelynek stabilitási függvénye a (10) tesztfeladatra $R(\Delta t \lambda)$. Ekkor az előbbieket alapján

$$R(\Delta t \lambda) - \exp(\Delta t \lambda) = K \cdot \Delta t^{p+1} + O(\Delta t^{p+2}), \quad (17)$$

ahol K konstans. A passzív Richardson-extrapoláció mintájára olyan megoldási módszert szeretnénk konstruálni, amelyben a feladatot minden időlépcsőben Δt és $\Delta t/2$ lépésenként is megoldjuk, és az időlépcsők végén kombináljuk a megoldásokat. A $[0, \Delta t/2]$ intervallumhoz tartozó stabilitási függvényre

$$R\left(\frac{\Delta t}{2} \lambda\right) - \exp\left(\frac{\Delta t}{2} \lambda\right) = K \cdot \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^{p+1} + O(\Delta t^{p+2}). \quad (18)$$

A két különböző lépésközzel kapott megoldásnak úgy képezzük a súlyozott átlagát valamely c_1 és c_2 súlyokkal, hogy az új módszer, amelynek stabilitási függvénye

$$c_1 R(\Delta t \lambda) + c_2 R^2\left(\frac{\Delta t}{2} \lambda\right), \quad (19)$$

$p + 1$ -edrendű módszert adjon, azaz

$$c_1 R(\Delta t \lambda) + c_2 R^2\left(\frac{\Delta t}{2} \lambda\right) - \exp(\Delta t \lambda) = O(\Delta t^{p+2}) \quad (20)$$

legyen. Felhasználva az (17) és (18) egyenlőséget, az utóbbi kifejezés a

$$c_1 \left\{ \exp(\Delta t \lambda) + K \cdot \Delta t^{p+1} + O(\Delta t^{p+2}) \right\} + c_2 \left\{ \exp\left(\frac{\Delta t}{2} \lambda\right) + K \cdot \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^{p+1} + O(\Delta t^{p+2}) \right\}^2 - \exp(\Delta t \lambda) = O(\Delta t^{p+2}) \quad (21)$$

alakra hozható. Ahhoz, hogy a bal oldalon eltűnjön a konstans tag, amely az exponenciális függvény sorfejtésében szereplő konstans 1 tagból származik, a

$$c_1 + c_2 = 1 \quad (22)$$

feltétel teljesülése szükséges. Vegyük észre, hogy ez maga után vonja további tagok eltűnését is, mivel ekkor

$$c_1 \exp(\Delta t \lambda) + c_2 \left(\exp\left(\frac{\Delta t}{2} \lambda\right) \right)^2 - \exp(\Delta t \lambda) = 0. \quad (23)$$

A bal oldalon megmaradó kifejezésből az $O(\Delta t^{p+1})$ tagnak nullának kell lennie, ebből a

$$c_1 \Delta t^{p+1} + c_2 2 \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^{p+1} = 0 \quad (24)$$

feltételt kapjuk. Innen

$$c_1 + \frac{c_2}{2^p} = 0 \quad (25)$$

következik. Vegyük észre, hogy a kapott feltétel megegyezik azzal, amelyet a passzív Richardson-extrapolációra nyertünk.) Speciálisan, ha $p = 1$ (elsőrendű módszert alkalmazunk), akkor a kapott (23)-(25) egyenletrendszer megoldása $c_1 = -1$ és $c_2 = 2$.

3. A Richardson-extrapoláció vizsgálata egyszerű közönséges differenciálegyenlet-rendszeren

Ahhoz, hogy tanulmányozni tudjuk a Richardson-extrapoláció tulajdonságait, első lépésben azt vizsgáltuk meg, hogy hogyan viselkedik abban az esetben, ha közönséges differenciálegyenlet-rendszerekre alkalmazzuk. Az alábbiakban bemutatjuk, hogy mit tapasztaltunk egy egyszerű, állandó együtthatós lineáris közönséges differenciálegyenlet-rendszer, illetve egy bonyolultabb széndioxid-modell esetében.

Az explicit Euler-módszer, az implicit Euler-módszer és a középponti módszer mint mögöttes numerikus séma Richardson-extrapoláltjára voltunk kíváncsiak az alábbi egyszerű példán:

$$\begin{cases} \vec{y}' = \underline{\underline{A}}\vec{y} + \vec{b}, \\ y(0) = y_0, \end{cases}$$

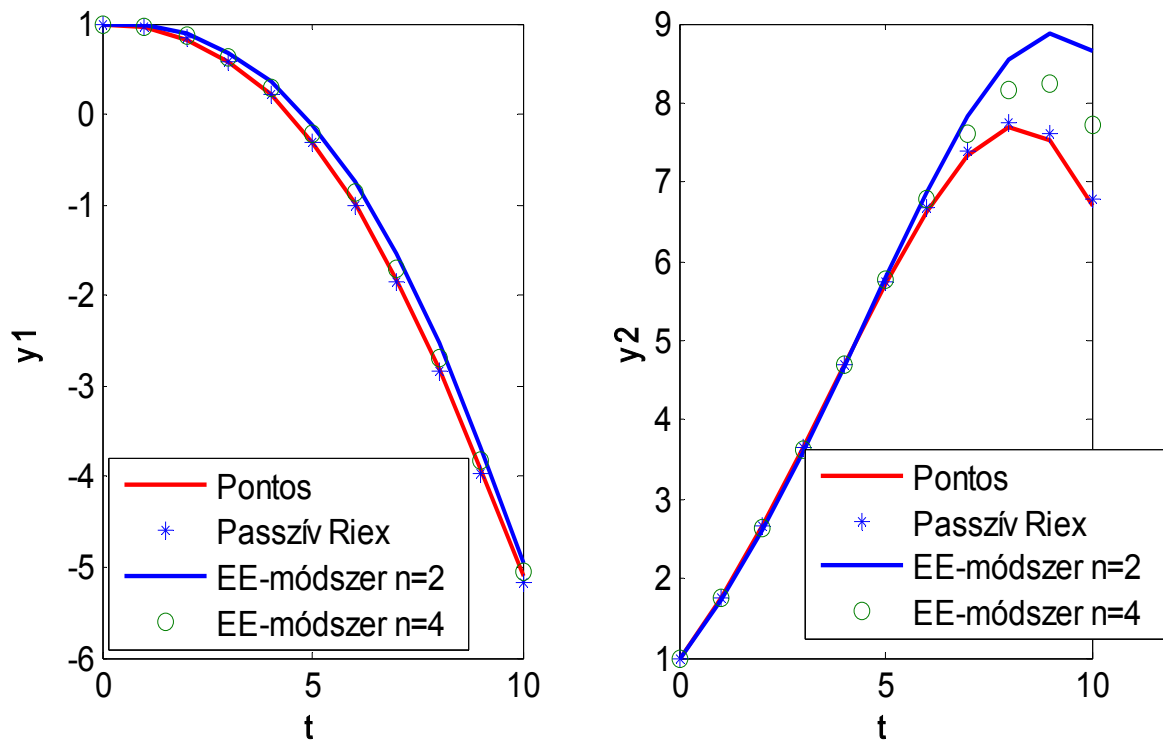
ahol

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} 0,1 & -0,1 \\ 0,5 & 0,2 \end{bmatrix}, \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{y}_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Ez egy igen egyszerű kezdetiérték-feladat, ahol a konstans vektor a nullvektor. Ebben az esetben tudjuk a pontos megoldás alakját:

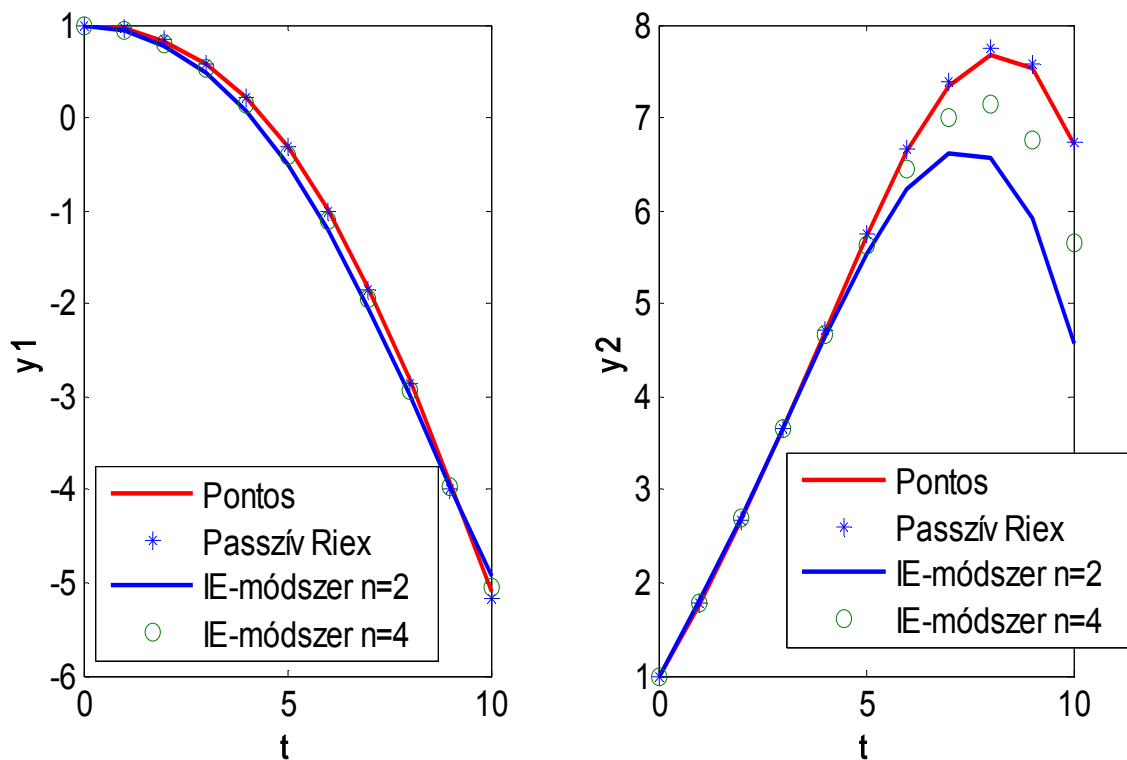
$$\vec{y} = \exp(\underline{\underline{A}}t)\vec{y}_0.$$

Összehasonlítható tehát a numerikusan kapott eredmény a pontos megoldással. A 3. ábrán bemutatjuk a passzív Richardson-extrapoláció és az explicit Euler-módszer kombinálásával kapott eredményt, a mögöttes módszerként alkalmazott explicit Euler-módszerrel kapott megoldásokat minkét felhasznált lépésköz esetén, illetve a pontos megoldást.



3. ábra. A passzív Richardson-extrapolációval és a mögöttes módszerként alkalmazott explicit Euler-módszerrel kapott megoldásvektor y_1 és y_2 komponense $n = 2$ és $n = 4$ lépésköz esetén, valamint a pontos megoldás.

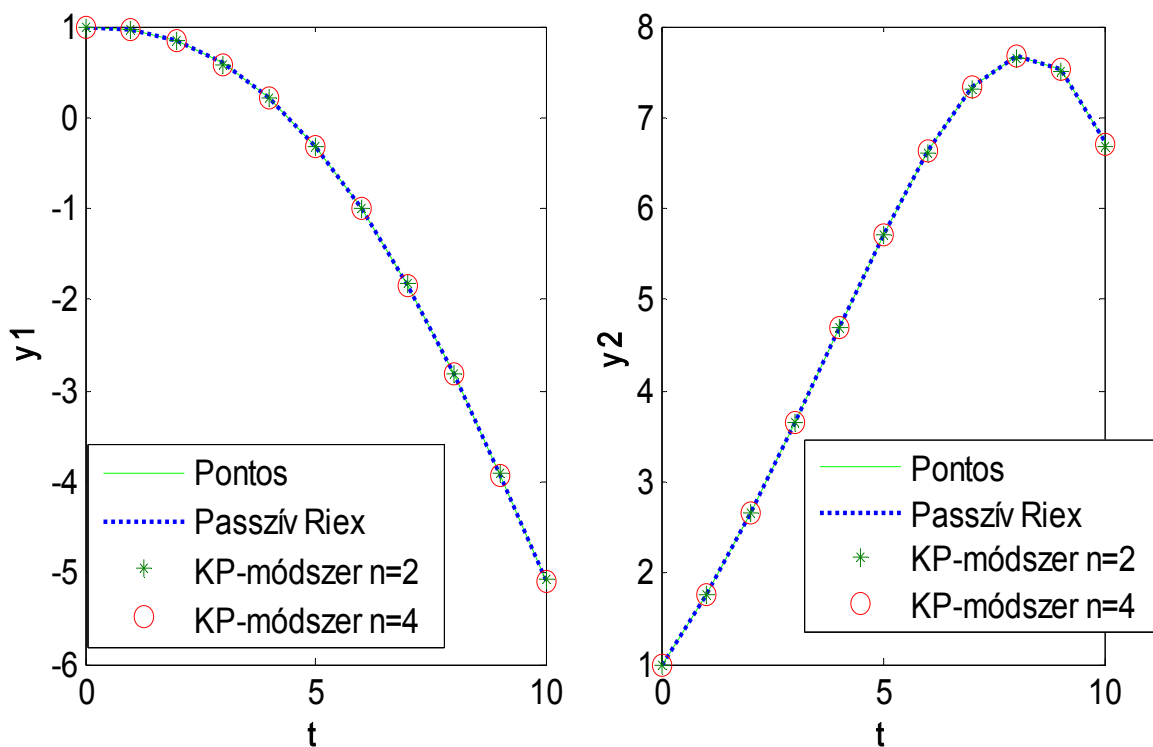
Az ábrán láthatjuk, hogy az explicit Euler-módszerrel kapott eredmények a legpontatlanabbak, míg a passzív Richardson-extrapolációval kapott megoldás a pontos megoldás görbéjéhez igen közel helyezkedik el.



4. ábra. A passzív Richardson-extrapolációval és a mögöttes módszerként alkalmazott implicit Euler-módszerrel kapott megoldásvektor y_1 és y_2 komponense $n = 2$ és $n = 4$ lépésköz esetén, valamint a pontos megoldás.

A 4. ábrán láthatjuk, hogy a mögöttes módszerként felhasznált implicit Euler-módszerrel kapott numerikus megoldások alulról közelítik a pontos megoldás görbéjét, mégpedig meglehetősen pontatlanul. Mindezzel szemben a passzív Richardson-extrapolációval kombinálva ezt a két megoldást az így kapott közelítő megoldás a pontos megoldás görbéjéhez igen közel helyezkedik el. Szemmel látható, hogy sokkal pontosabb eredményhez jutottunk, mindkét vektorkomponens esetén.

Ezzel szemben az 5. ábrán nem tapasztalunk szemmel látható különbséget a három numerikus megoldás és a pontos megoldás között.



5. ábra. A passzív Richardson-extrapolációval és a mögöttes módszerként alkalmazott középponti módszerrel kapott megoldásvektor y_1 és y_2 komponense $n = 2$ és $n = 4$ lépésköz esetén, valamint a pontos megoldás.

Habár csak az első két ábrán láthatjuk szabad szemmel, de mindhárom általunk vizsgált mögöttes módszer esetén a passzív Richardson-extrapolációval együttesen alkalmazott numerikus séma jóval pontosabbnak bizonyult, mint a mögöttes módszerek, bármely, a számításokhoz felhasznált lépésköz esetén. Ezt bemutatjuk táblázatos formában is, ahol azt láthatjuk, hogy a módszereknek milyen a konvergenciarendjük. Azt vártuk a passzív Richardson-extrapoláció definíciója alapján, hogy eggyel növekszik a konvergenciarend. Így az elsőrendű implicit és explicit Euler-módszer esetében a kombinált megoldás másodrendű konvergenciáját, míg a másodrendű középponti módszer Richardson-extrapoláltjának harmadrendű konvergenciáját várjuk.

A táblázatokban azt láthatjuk, hogy a mögöttes numerikus sémák és azok Richardson-extrapoláljainak hibái hányad részükre csökkenek, ha a lépésközt mindegyre felezzük. Ebből a konvergenciarend definíciója alapján láthatjuk, hogy a p konvergenciasebesség meghatározható a hibák arányaiból, melyek felírhatók $\frac{1}{2^p}$ alakban.

1. táblázat. A mögöttes numerikus módszerek abszolút hibái a lépésköz függvényében, és a hibák egymáshoz való aránya, ha a lépésköz a felére csökken.

n	KP-módszer	$1/2^p$	IE-módszer	$1/2^p$	EE-módszer	$1/2^p$
4	9,622E-03		1,062E+00		1,007E+00	
8	2,407E-03	0,2502	5,258E-01	0,4952	5,120E-01	0,5085
16	6,020E-04	0,2501	2,614E-01	0,4971	2,579E-01	0,5038
32	1,505E-04	0,2500	1,303E-01	0,4984	1,294E-01	0,5018
64	3,763E-05	0,2500	6,504E-02	0,4992	6,482E-02	0,5009
128	9,407E-06	0,2500	3,249E-02	0,4996	3,244E-02	0,5004

Láthatjuk, hogy az implicit Euler-módszer és az explicit Euler-módszer esetében a hibák hozzávetőleg a felükre csökkennek, ha a lépésközt a felére csökkentjük, így a vizsgált tesztfeladatban ez a két numerikus módszer elsőrendben konvergens módszerként viselkedik. Ezen az egyszerű példán a középponti módszernél ugyanezt a vizsgálatot elvégezve azt tapasztaljuk, hogy a módszer másodrendű. Ezek az eredmények nem meglepők, hiszen ezt vártuk.

Abban az esetben, ha ezeket a sémákat a passzív Richardson-extrapolációval kombináljuk, ezek az arányok megváltoznak.

2. táblázat. A felhasznált numerikus módszerek passzív Richardson-extrapoláltjának abszolút hibái a lépésköz függvényében, és a hibák egymáshoz való aránya, miközben a lépésköz a felére csökken.

n	KP-módszer + Riex	$1/2^p$	IE-módszer + Riex	$1/2^p$	EE-módszer + Riex	$1/2^p$
4	4,740E-05		7,925E-02		1,046E-01	
8	2,968E-06	0,0626	2,127E-02	0,2684	2,469E-02	0,2360
16	1,856E-07	0,0625	5,531E-03	0,2600	5,967E-03	0,2417
32	1,160E-08	0,0625	1,410E-03	0,2549	1,465E-03	0,2455
64	7,251E-10	0,0625	3,560E-04	0,2525	3,628E-04	0,2477
128	4,540E-11	0,0626	8,942E-05	0,2512	9,028E-05	0,2488

A 2. táblázatban megfigyelhetjük, hogy az elsőrendű módszerek Richardson-extrapoláltja másodrendben pontos, hiszen a hibák a negyedükre csökkentek. A középponti módszerhez képest a Richardson-extrapoláltjánál nem várt mértékű javulást tapasztalunk: a hibák az 1/16-ukra csökkentek, ez negyedrendben konvergens módszert jelent, ami nagyobb pontosságú, mint amit az elmélet szerint el kellene érnie a kombinált módszernek.

Tehát megállapítható, hogy az általunk vizsgált numerikus módszer az általunk elvárnál jobban teljesített erre a problémára. Az elsőrendű módszerek esetén a várt módon egy renddel megnövelte a pontosságot, a középponti módszerrel kombinálva pedig gyorsabban konvergál a pontos megoldáshoz, mint azt az általánosságban elvárhatnánk. Ez megalapozza azt, hogy a továbbiakban is érdemes foglalkoznunk a módszerrel, ezért egy meteorológiai jellegű problémán is teszteljük a pontosságát.

4. A Richardson-extrapoláció alkalmazása egy egyszerűsített CO₂-modellben

Szeretnénk megmutatni, hogy érdemes a meteorológiai problémák megoldása folyamán ezzel a módszerrel dolgoznunk, hiszen segítségével hatékonyan pontosítható a használni kívánt numerikus módszerrel kapott megoldás. Ezért megvizsgáljuk, hogy milyen eredményeket kapunk a mögöttes módszerekkel, valamint akkor, ha Richardson-extrapolációval alkalmazzuk őket egy egyszerűsített globális CO₂-modellben, mely napjaink fontos kérdését, az antropogén eredetű klímaváltozás témáját feszegeti a legfontosabb emberi eredetű üvegházgáz, a CO₂ koncentrációjának növekedésén, valamint a gáz egyes tározókon belüli elkeveredésén keresztül.

4.1. A modell bemutatása

Munkánk során egy angol-amerikai együttműködésben készült, egyszerűsített globális széndioxid-modellt vizsgálunk (*Griffiths et al., 2008, Brajnovits és Kelemen, 2009*), amely az emberi eredetű széndioxid-kibocsátás hosszú távú hatásait mutatja be egy hét egyenletből álló közönséges differenciálegyenlet-rendszer megoldásával. Ezt egy MATLAB-ba beépített, nagy pontosságú differenciálegyenletek megoldására alkalmas módszerrel végzi.

A modell, amellyel foglalkozunk, csak alapvető folyamatokat vesz figyelembe, és ezek alapján szimulálja a CO₂ mennyiségének alakulását.

A modell szükségszerűen leegyszerűsítése a gáz koncentrációját meghatározó folyamatoknak. Mindezek ellenére betekintést enged a gáz dinamikájába, így vizsgálhatók rajta azok a mechanizmusok, melyek a szén-dioxid szintjének időbeli változásában leginkább szerepet játszanak. A paraméterek változtatásával pedig elemezhető, hogy mennyire érzékeny a beálló széndioxid-egyensúly a bemenő adatokra. Az inputok variálásával más-más koncentrációérték jelentkezik a jövőben, amit az emissziós függvények megváltoztatásával tanulmányozhatunk. A modell előnye még, hogy mivel az egyetlen forrástag az antropogén szén-dioxid kibocsátás, könnyen kiszámítható, hogy a különböző kibocsátási függvényeknek milyen a jövőbeli hatásuk.

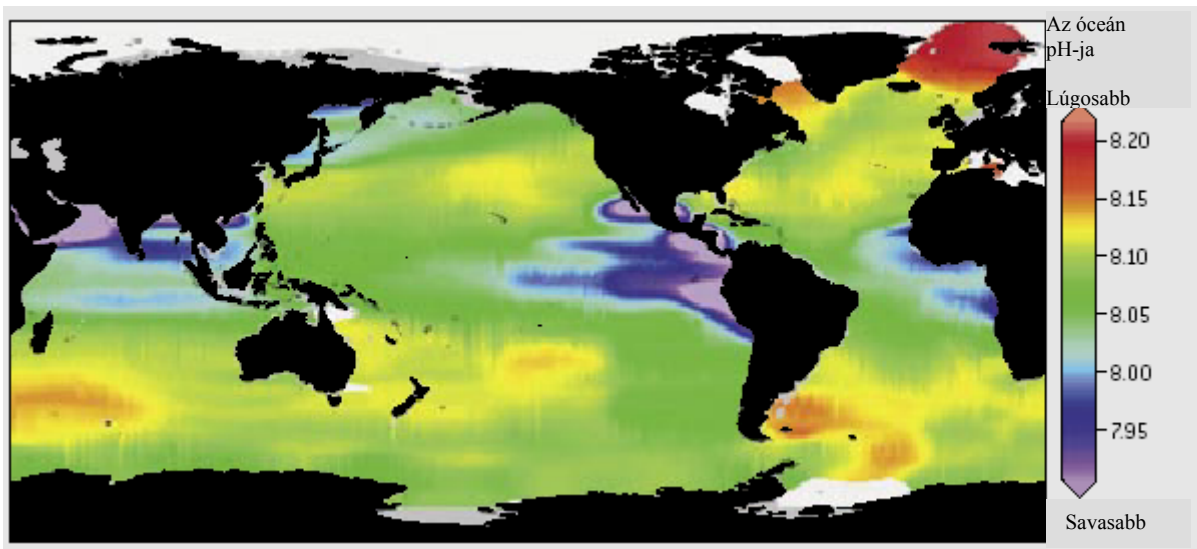
A modell egy közönséges differenciálegyenlet-rendszer numerikus megoldásán alapul, amelyhez ismert múltbeli kezdeti értékeket adunk meg. Alapbeállítás szerint az 1850-es évtől kezd integrálni.

A modell jelentősen leegyszerűsített egyenletei csak a tározókba történő elkeveredés figyelembevételét teszik lehetővé.

Mindezek mellett a modell számításokat végez az óceán pH-jára vonatkozóan is, mellyel kapcsolatban a következőket mondhatjuk el:

- Az óceánok pH-értéke csökken, és ez mérhető.
- A savasodás hatása megfigyelhető a korallokon és más szilárd vázat kiválasztó tengeri élőlényeken, amelyek fő alkotóeleme a kalcium-karbonát (*Hoegh-Guldberg, 2008*), mivel a kalcium-karbonát kiválásának nem kedvez a savas környezet.

Az óceán pH-változásának vizsgálata tehát rendkívül fontos kérdés, hiszen szoros kapcsolatban van az antropogén széndioxid-emisszióval (*Caldeira et al., 2003*). A jövőben várható értékének kiszámítása ennek megfelelően belekerült a modellbe is.



6. ábra. Az óceán pH-értéke napjainkban. Forrás: Doney, 2006.

A modellbe hét globális széndioxid-tározót ültettek be, ezekben vizsgáljuk a CO₂ körforgalmát. Ezek a következők:

- Felsőléggör (*upper atmosphere - ua*)
- Alsóléggör (*lower atmosphere - la*)
- Rövid életű élőlények (*short-lived biota - sb*)
- Hosszú életű élőlények (*long-lived biota - lb*)
- Felső óceáni réteg (*upper ocean layer - ul*)
- Mélyóceáni réteg (*deep ocean layer - dl*)
- Tengeri élővilág (*marine biota - mb*)

Mindegyik tározó fontos hatással van a CO₂ dinamikájára. A modell tározónként homogén széndioxid-eloszlást feltételez, ezért csak egy koncentrációértékkel számol minden egyes tározóban. Ezek alapján feltesszük a tározókon belül az azonnali teljes elkeveredést. A széndioxid-koncentráció minden tározóban csak az időtől függ, így a differenciálegyenlet-rendszerben is az idő az egyetlen független változó.

Az időfüggés a rendszerben azért jön létre, mert az antropogén széndioxid-kibocsátás forrásként megjelenik az alsó atmoszférában. Innen a többi tározóba is bejut elkeveredés útján.

Az egyenletekben szereplő, lényegesen eltérő koncentrációértékek változásának könnyebb összehasonlítása céljából az összes tározóhoz tartozó értéket egy közös skálára hozták a koncentrációk dimenziótlánításának segítségével:

$$C(t) = \frac{C \text{ dim}(t) - C \text{ dim}(t = 1850)}{C \text{ dim}(t = 1850)} \quad (26)$$

$$C(t = 1850) = \frac{C \text{ dim}(t = 1850) - C \text{ dim}(t = 1850)}{C \text{ dim}(t = 1850)} = 0 \quad (27)$$

Így az összes kezdeti, 1850-es koncentrációérték nullával lesz egyenlő.

A tározókra felírt koncentrációváltozások egyenletei a következők. Itt $\tau(1-2)$ az az átlagos ún. tartózkodási idő, amely alatt a CO₂ a kettős tározóból az egyesbe jut.

$$\begin{aligned} \frac{dC_{la}}{dt} = & \frac{1}{\tau(la - ua)}(C_{ua} - C_{la}) + \frac{1}{\tau(la - sb)}(C_{sb} - C_{la}) + \frac{1}{\tau(la - lb)}(C_{lb} - C_{la}) + \\ & + \frac{1}{\tau(la - ul)}(C_{ul} - C_{la}) + Q_c(t) \end{aligned} \quad (28)$$

$$\frac{dC_{ua}}{dt} = \frac{1}{\tau(ua - la)}(C_{la} - C_{ua}) \quad (29)$$

$$\frac{dC_{sb}}{dt} = \frac{1}{\tau(sb - la)}(C_{la} - C_{sb}) \quad (30)$$

$$\frac{dC_{lb}}{dt} = \frac{1}{\tau(lb - la)}(C_{la} - C_{lb}) \quad (31)$$

$$\frac{dC_{ul}}{dt} = \frac{1}{\tau(ul - la)}(C_{la} - C_{ul}) + \frac{1}{\tau(ul - dl)}(C_{dl} - C_{ul}) + \frac{1}{\tau(ul - mb)}(C_{mb} - C_{ul}) \quad (32)$$

$$\frac{dC_{dl}}{dt} = \frac{1}{\tau(dl-ul)}(C_{ul} - C_{dl}) \quad (33)$$

$$\frac{dC_{mb}}{dt} = \frac{1}{\tau(mb-ul)}(C_{ul} - C_{mb}) \quad (34)$$

$$Q_c(t) = c_1 \exp(r_1 t). \quad (35)$$

Az egyenletekből azt is kiolvashatjuk, hogy az egyes tározókba honnan kerül be, illetve belőlük hova keveredik át a CO₂. Az első, legösszetettebb egyenletünk az alsólégrére vonatkozik. Ez az a tározó, amelyben a CO₂ forrástagja megjelenik. Innen a CO₂ átkeveredik a felsőlégrébe, a rövid és hosszú életű élővilágba, valamint az óceán felső rétegébe, a forrástag pedig az emberi kibocsátás.

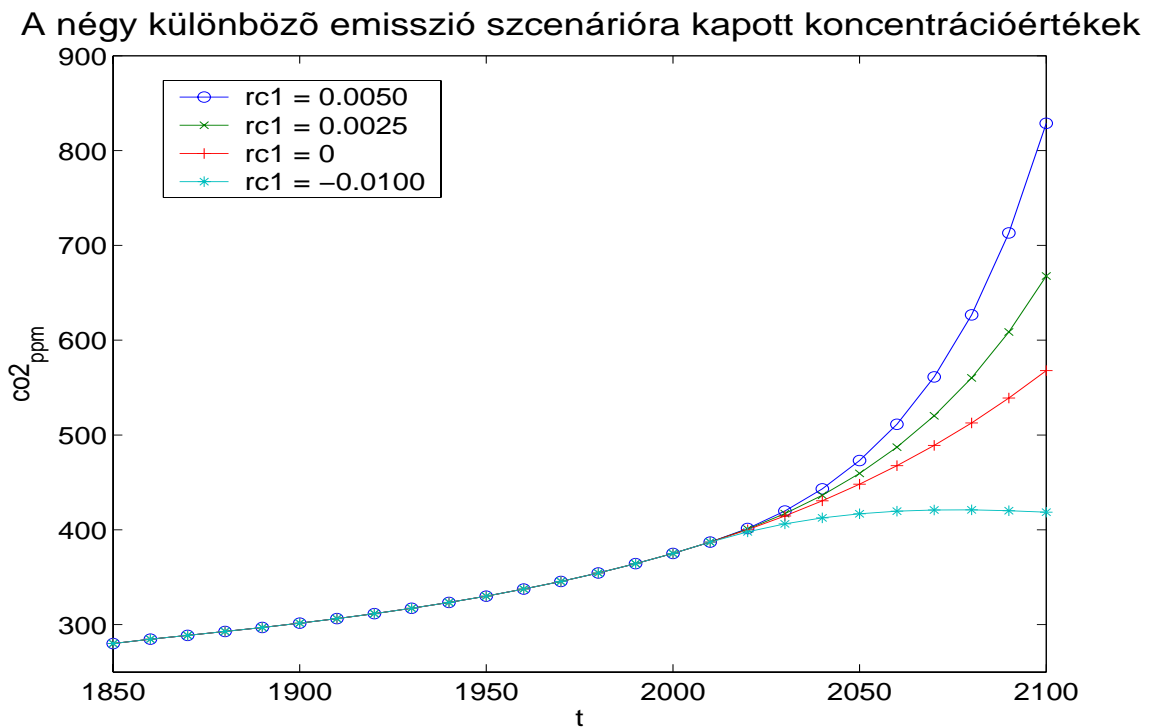
A szén-dioxid fluxusa két tározó között le van egyszerűsítve egyetlen paraméterre, a τ tartózkodási időre. Ezzel az egyszerűsítéssel azért élhetünk, mert a modell nem reagál érzékenyen a τ kis változásaira.

Az egyenletrendszer, mellyel dolgozunk, enyhén stiff. Stiff rendszerről akkor beszélünk, ha az együtthatómátrix sajátértékei között több nagyságrendbeli eltérés van. Ennek legegyszerűbben megvalósuló esete az, amikor a mátrix egyik sajátértéke a 0, mint ahogyan a mi esetünkben is. Ilyen problémánál az explicit módszerek csak elegendően kicsiny lépésköz esetén működnek, egyébként instabillá válnak, illetve oszcillációt mutatnak (*Lambert, 1991*).

A programban alapértelmezésben a MATLAB-ba beépített *ode15s* függvény a főprogramban kerül meghívásra, és itt az eredmény pontosságát is előírhatjuk. Munkánk során ezt a numerikus módszert helyettesítjük a Richardson-extrapoláció és az explicit Euler-, az implicit Euler-, illetve a középponti módszer kombinációjával, továbbá helyenként néhány egyéb modellparamétert módosítunk. Referenciamegoldásként az *ode15s* programmal előállított, nagy pontosságú numerikus megoldást használjuk. Az eredmények kiértékelésénél felhasználjuk korábbi eredményeinket (*Brajnovits és Kelemen, 2009*).

4.2. Numerikus kísérletek

A modellben, amellyel foglalkoztunk, az egyetlen forrástagot az antropogén széndioxid-kibocsátás jelenti. Ennek megfelelően minél nagyobb az alsólégkörben a gáz koncentrációjának növekedése, annál több keveredik át a többi tározóba is. Az outputokra gyakorolt hatás vizsgálata végett négy emissziós scenáriót programoztak be a modellbe (7. ábra); ezeken kívül természetesen más scenáriókat is ki lehet próbálni (Kelemen, 2009).



7. ábra. A modellbe beprogramozott négy emissziós scenárió.

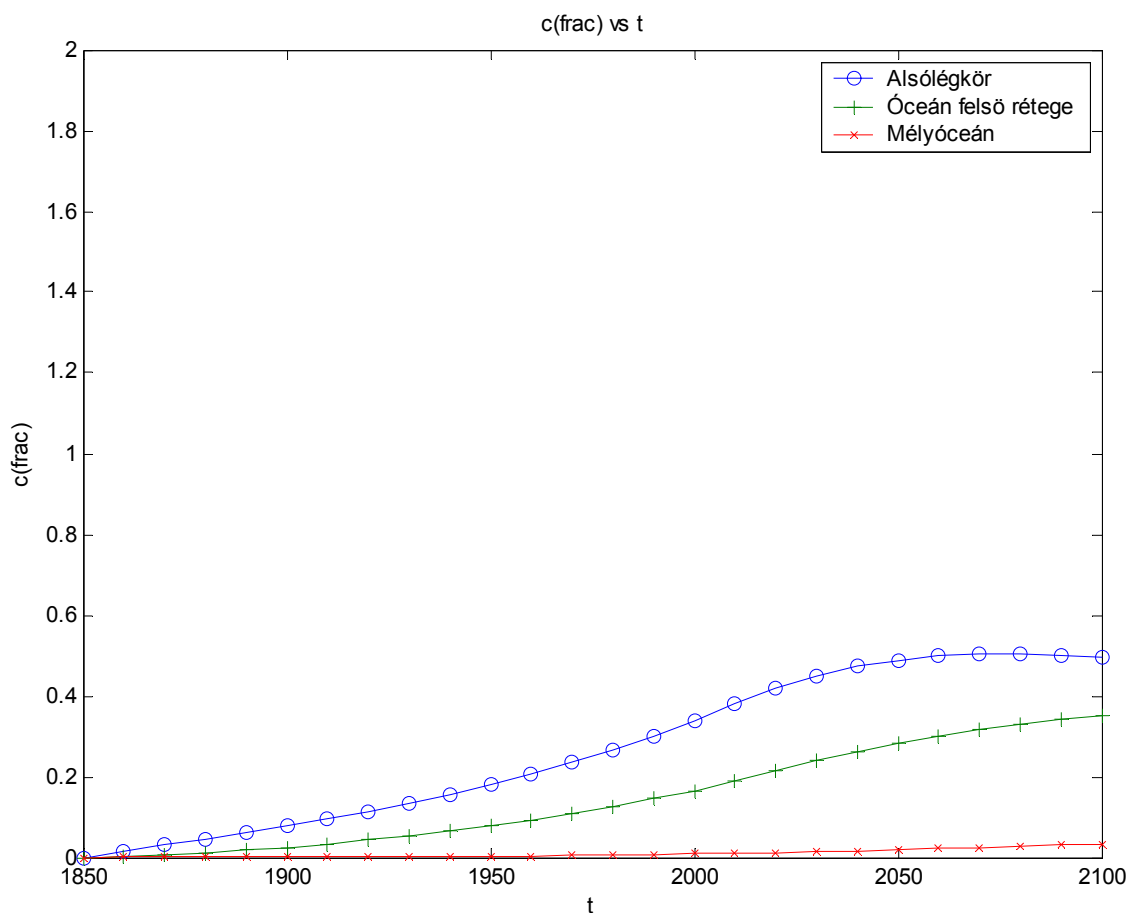
Ezek közül mi a legoptimistább verzióval foglalkoztunk futtatásaink során. Ebben a scenárióban az antropogén széndioxid-emisszió növekedésének mértéke 2010-től csökken, és 2100-ra eléri a 0-t. Ez azt jelenti, hogy 2100-tól már konstans értékkel számol.

A modell az eredményeket 1850-től egészen 2100-ig 10 évenként jeleníti meg. A továbbiakban n -nel jelöljük az ezen 10 éves perióduson belüli lépések számát, melyet a Richardson-extrapoláció beprogramozásakor megadunk. Ez jelen esetben azt jelenti, hogy a mögöttes numerikus módszert a program n és $2n$ értékre is lefuttatja – tehát egy 10 éves periódus alatt először n -et, majd $2n$ -t lép összesen –, és ezeket a közelítő megoldásokat kombinálja a végén a megadott módon. Vizsgálataink során $n = 5, 10, 20, 40, 80, \dots, 5120$ esetén is lefuttattuk a modellt. Elvárjuk, hogy minél nagyobb az n , tehát minél kisebb a

lépésköz, annál közelebb kerüljön a numerikus megoldásunk a referenciamegoldáshoz. Mivel az egyenleteket nem tudjuk pontosan megoldani, ezért a pontos megoldásnak tekintett referenciamegoldást a MATLAB-ba beépített ode15s programmal állítottuk elő, annak pontosságát 10^{-14} -re állítottuk. Az ode15s egy stiff rendszerek megoldására alkalmazható többlépéses módszerrel oldja meg az egyenletrendszert.

A továbbiakban eredményeinket három tározóra vonatkozóan mutatjuk be: az alsólégkörre, az óceán felső rétegére és a mélyóceáni rétegre. A három tározóban lévő dimenziótlan gázkoncentrációk egymáshoz viszonyított viselkedéséből az egyes tározók tehetetlenségére is következtethetünk. Ugyanis a gáz az alsólégkörből keveredik át az egyes tározókba, így az óceán felső rétegébe is, egy része pedig a mélyóceáni rétegbe már onnan keveredik tovább.

A referenciamegoldás erre a három tározóra a 8. ábrán látható.



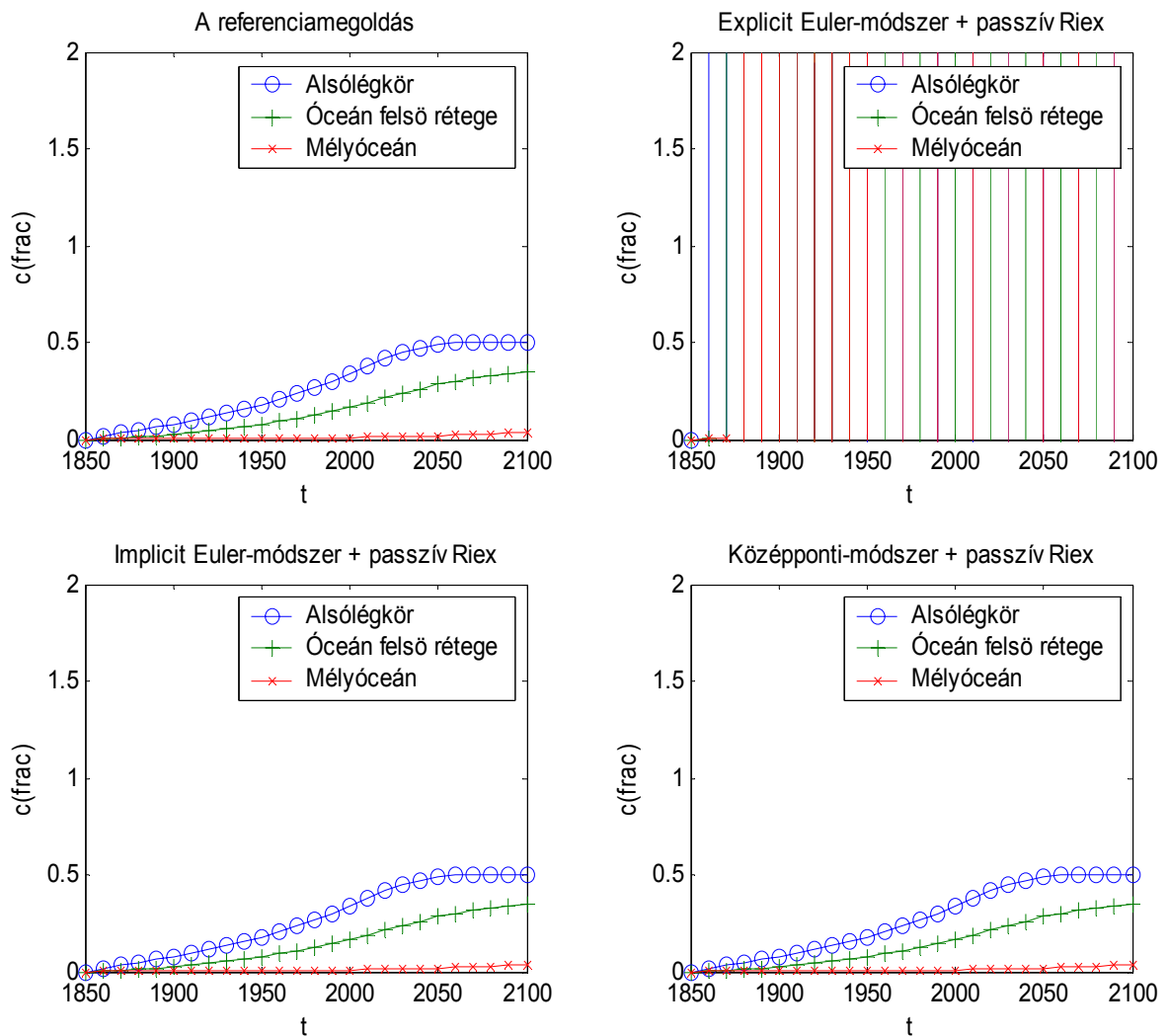
8. ábra. A referenciamegoldás a három vizsgált tározóra.

Láthatjuk, hogy az alsólégkör koncentrációváltozásaira a másik két tározó lassan reagál, a mélyóceáni réteg a leglassabban, hiszen az nem közvetlenül érintkezik azzal a tározóval, ahol a forrás van.

A következőkben bemutatjuk a három általunk vizsgált mögöttes módszer passzív Richardson-extrapoláltját, majd megvizsgáljuk az aktív Richardson-extrapoláltjaik viselkedését. Mindehhez a továbbiakban a referenciamegoldás pontosságát 10^{-14} -re állítottuk annak érdekében, hogy a középponti módszer abszolút hibáinak csökkenését is szemmel követhessük. Az ábrákon rendre a referenciamegoldást és a Richardson-extrapoláltakat láthatjuk majd.

4.2.1. A passzív Richardson-extrapolációval kapott eredmények

A 9. ábrán a referenciamegoldást és a passzív Richardson-extrapolációval kapott numerikus megoldást mutatjuk meg $n = 5$ esetén. Ez a Richardson-extrapoláltak esetében azt jelenti, hogy először 10 évente 5-öt lép a modell az adott mögöttes módszerrel, vagyis két évente számolja ki az értékeket, majd a számításokat elvégzi $n = 10$ esetén is, tehát évente lépve. Majd az ezen két lépésközzel kapott megoldást az (5) képlet szerint kombinálja, és az így kapott értékeket 10 évente jeleníti meg.

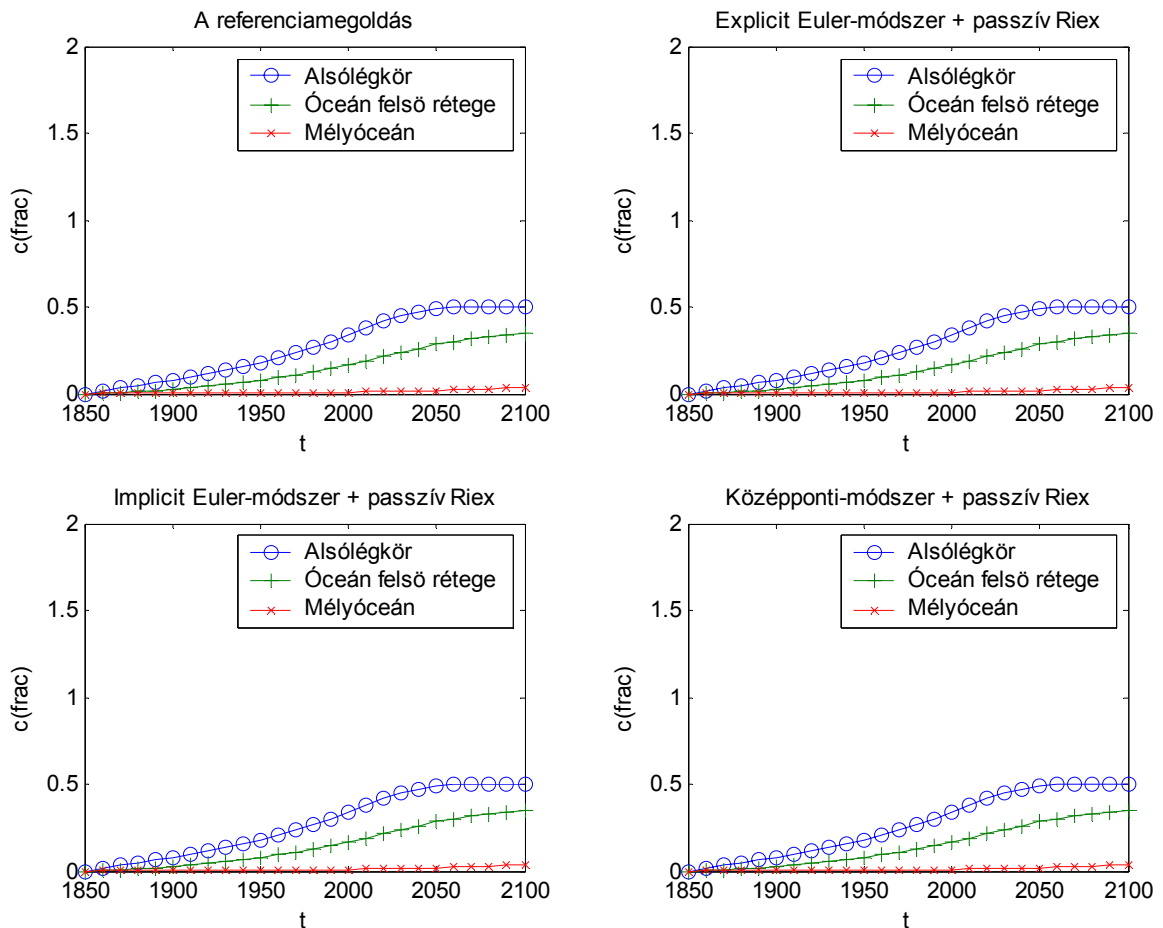


9. ábra. A különböző mögöttes módszerek passzív Richardson-extrapoláltjával kapott numerikus megoldások összehasonlítása a referenciamegoldással a három tározóra, $n = 5$ esetén.

Szembetűnő a különbség az explicit Euler-módszert felhasználó passzív Richardson-extrapolációs megoldás és a másik két numerikus megoldás között. Az explicit Euler-módszer Richardson-extrapoláltja instabil módon viselkedik, mindhárom tározó koncentrációértékei kinőnek a végtelenbe, míg a másik két mögöttes sémával kapott eredmény végig a pontos megoldás mentén halad, nincs észlelhető különbség.

Ugyanez a helyzet $n = 10$ esetén is: az explicit Euler-módszert kombinálva a passzív Richardson-extrapolációval még mindig instabil megoldást kapunk.

Minden további futtatás alkalmával a lépések számát (n) megdupláztuk, tehát a lépésköz minden alkalommal a felére csökkent. Azt tapasztaltuk, hogy $n = 20$ -tól mind a három vizsgált módszerrel kapott numerikus megoldás stabil, a pontosnak tekintett megoldás mentén halad. Ezt láthatjuk a 10. ábrán.



10. ábra. A különböző mögöttes módszerek passzív Richardson-extrapoláltjával kapott numerikus megoldások összehasonlítása a referenciamegoldással a három tározóra, $n = 20$ esetén.

Ha az explicit Euler-módszert kombináljuk a Richardson-extrapolációval, szintén explicit módszert kapunk, mely stiff problémák kezelésekor instabil módon viselkedik, amíg a lépésközt kellően kicsinek nem választjuk. Itt olyan helyzettel állunk szemben, amikor az eredmények (ill. az együtthatómátrix sajátértékei) alapján a modell differenciálegyenlet-rendszere stiff, de a vizsgált időintervallum felosztását nem kell végtelenül finomítani ahhoz, hogy stabil numerikus megoldást kapjunk. Ezt szokás enyhén stiff rendszernek nevezni.

A módszerek abszolút hibáit a 3. táblázatban közöljük két tározóra, az alsólégkörre és az óceán felső rétegre vonatkozólag. Az abszolút hibákkal kapcsolatos vizsgálataink a következőkben erre a két rezervoárra vonatkoznak, hiszen azt tapasztaltuk, hogy az alsólégkörben és az óceán felső rétegében kapott abszolút hibák azonos nagyságrendűek, míg e kettőtől a mélyóceáni rétegre kapott értékek jelentősen eltérnek.

3. táblázat. A passzív Richardson-extrapolációval kapott abszolút hibák az egyes mögöttes módszerekre különböző lépésközök esetén, az általunk vizsgált két tározóban.

n	Passzív Richardson-extrapoláció abszolút hibája					
	EE		IE		KP	
	alsólégkör	mélyóc. réteg	alsólégkör	mélyóc. réteg	alsólégkör	mélyóc. réteg
5	3,78E+61	2,95E+56	8,48E-06	5,52E-07	2,22E-10	2,24E-11
10	2,40E+11	1,88E+06	2,12E-06	1,41E-07	1,44E-11	1,40E-12
20	5,30E-07	3,63E-08	5,30E-07	3,55E-08	1,45E-12	8,69E-14
40	1,33E-07	9,02E-09	1,33E-07	8,93E-09	6,58E-13	3,40E-15
80	3,31E-08	2,25E-09	3,31E-08	2,24E-09	6,55E-13	1,24E-15
160	8,28E-09	5,62E-10	8,28E-09	5,60E-10	5,76E-13	1,89E-15
320	2,07E-09	1,40E-10	2,07E-09	1,40E-10	4,14E-13	1,47E-14
640	5,18E-10	3,50E-11	5,18E-10	3,51E-11	9,86E-13	1,26E-14
1280	1,30E-10	8,75E-12	1,32E-10	8,73E-12	1,48E-12	5,25E-14
2560	3,28E-11	2,31E-12	3,55E-11	2,23E-12	2,48E-12	1,65E-13
5120	1,01E-11	5,52E-13	1,22E-11	1,00E-12	3,65E-14	2,63E-13

A táblázatban megfigyelhető az explicit Euler-módszert felhasználó Richardson-extrapoláció instabilitása a két legnagyobb lépésközre, valamint az, hogy a mélyóceáni rétegben minden lépésközre legalább egy rendben pontosabb megoldást kapunk. Ez valószínűsíthetően annak tulajdonítható, hogy az ott kapott értékeket nagyon nagy koncentrációértékkel dimenziótlanjuk a számítások folyamán. Feltűnő továbbá az, hogy a középponti módszer passzív Richardson-extrapoláltjának pontossága mindkét vizsgált

réteg esetén nő, majd csökken a nagyságrendeket tekintve, amint a lépésközzel nullához közelítünk. Ennek oka az lehet, hogy ez a módszer már a legnagyobb lépésközre is rendkívül pontos, három nagyságrendre megközelíti a referenciamegoldás pontosságát, és n növelésével ennél még pontosabb numerikus megoldást kapunk. Ezek a hibák már meglehetősen kicsik, 0-hoz közeli, és valószínűleg a (nagy lépésszám esetén felhalmozódó) számábrázolásból adódó hibák játszanak szerepet a táblázatban látható értékek megjelenésében. Az implicit Euler-módszer az elvárásainknak megfelelően stabil módszerként viselkedik.

4. táblázat A hibák egymáshoz viszonyított aránya (az adott sor lépésközével kapott hiba osztva a fölötte lévő sor lépésközével kapott hibával) a passzív Richardson-extrapoláció esetében.

$1/2^p$ a passzív Richardson-extrapoláltak esetén						
n	EE		IE		KP	
	alsóléggör	mélyóc. réteg	alsóléggör	mélyóc. réteg	alsóléggör	mélyóc. réteg
5						
10	0,0000	0,0000	0,2500	0,2551	0,0651	0,0625
20	0,0000	0,0000	0,2500	0,2525	0,1004	0,0621
40	0,2500	0,2488	0,2500	0,2513	0,4543	0,0391
80	0,2500	0,2494	0,2500	0,2506	0,9948	0,3633
160	0,2500	0,2497	0,2500	0,2503	0,8799	1,5281
320	0,2501	0,2499	0,2500	0,2501	0,7181	7,7646
640	0,2503	0,2497	0,2499	0,2506	2,3815	0,8618
1280	0,2503	0,2498	0,2541	0,2486	1,5000	4,1587
2560	0,2531	0,2644	0,2696	0,2556	1,6774	3,1363
5120	0,3065	0,2384	0,3446	0,4483	0,0147	1,5990

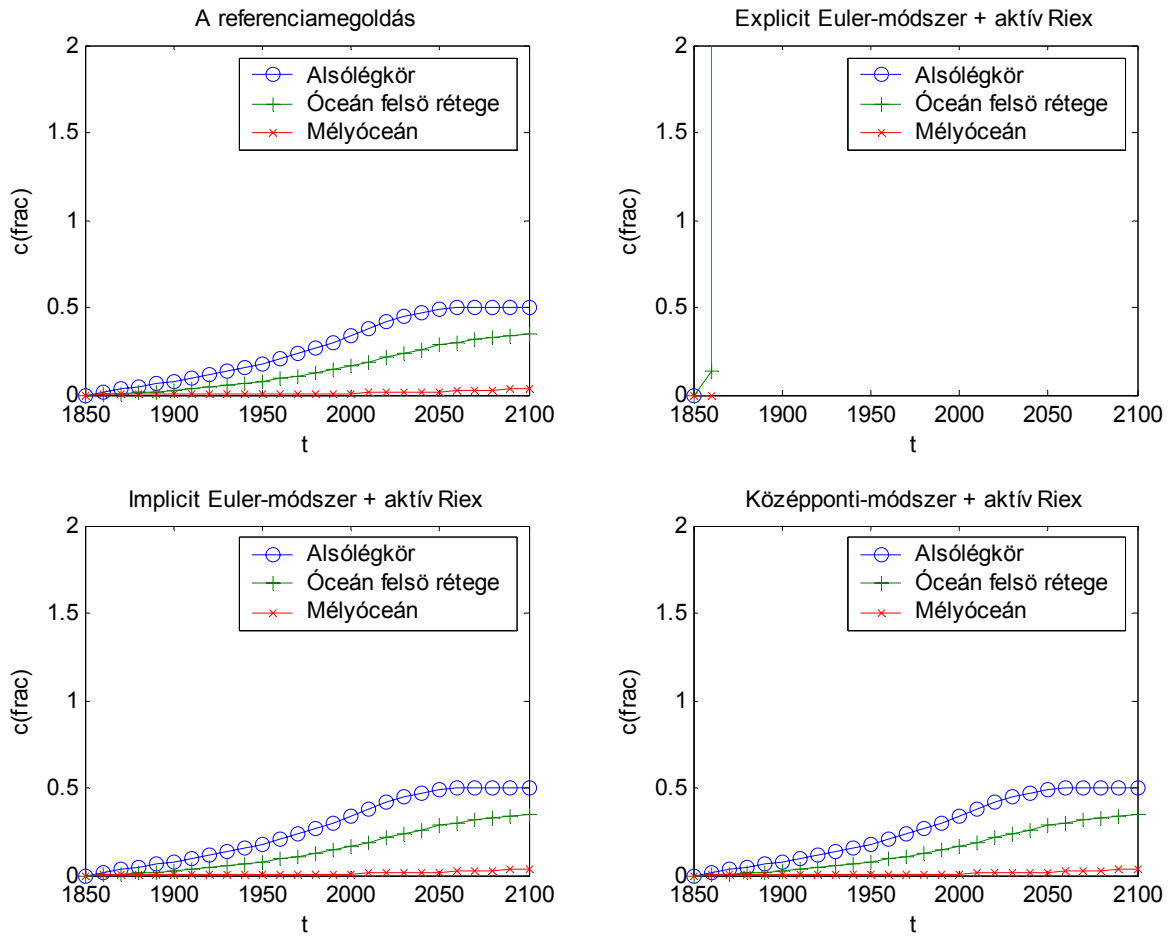
Ha szemügyre vesszük a hibák arányát, miközben a lépésközt a felére csökkentjük, kiolvasható, hogy az implicit, ill. az explicit Euler-módszer Richardson-extrapoláltjának rendje eggyel nagyobb, mint a mögöttes módszerek rendje, azaz másodrendben konvergens. A középponti módszert mögöttes módszerként alkalmazva eleinte igen gyors – a vártnál jóval gyorsabb – konvergenciát figyelhetünk meg, mely $n = 80$ -tól rohamosan csökken, majd a módszer beáll maximális pontosságára, ill. a fent említett számábrázolási hibák miatt e körül ingadozik.

4.2.2. Az aktív Richardson-extrapolációval kapott eredmények

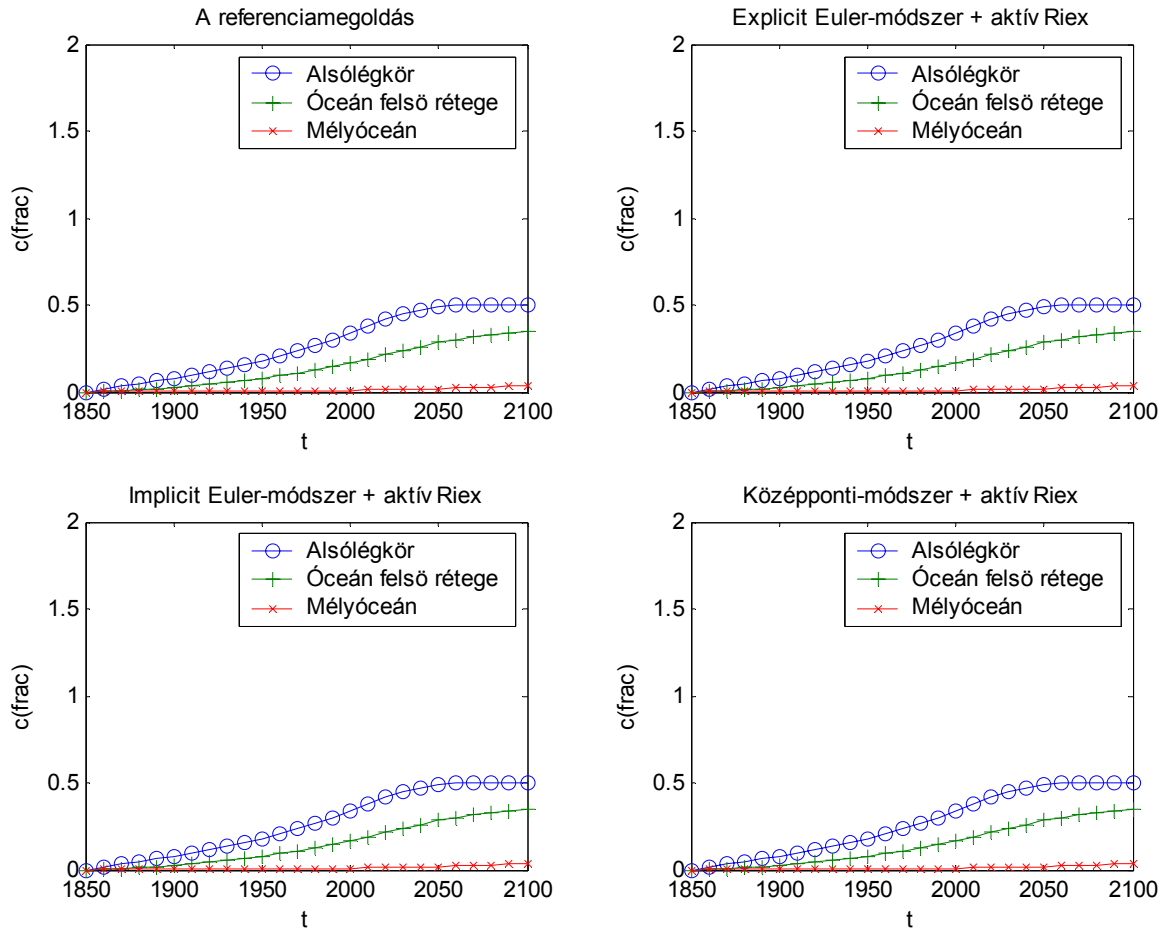
Amint azt már korábban említettük, az aktív Richardson-extrapoláció annyiban különbözik az eredeti, Richardson által kidolgozott módszertől, hogy minden h lépésköz megtétele után kombinálja a két különböző lépésközzel kapott numerikus megoldást az (5) képlet szerint, és a következő lépéshez a kezdeti értéket már ez az eredmény szolgáltatja. Ekképpen láthatóan több számítást igényel, mint a passzív Richardson-extrapoláció, tehát nagyobb számítógépes kapacitást is. Egyértelműen következik továbbá a számítások mennyiségének növekedéséből az is, hogy a számítási idők is megnövekednek, ahogyan ezt majd látni is fogjuk. Megjegyezzük, hogy mindez csak arra az esetre vonatkozik, ha számításainkat szekvenciálisan végezzük. Ha azonban a két különböző lépésközű megoldást párhuzamos processzorok alkalmazásával időben egyszerre számítjuk ki, az aktív Richardson-extrapoláció számítási ideje alig lesz valamivel több, mint a rövidebb lépésközű megoldás előállításának a gépideje!

A 11. ábrán láthatjuk, hogy $n = 5$ esetén az explicit Euler-módszer instabil módon viselkedik, ugyanúgy, mint a passzív Richardson-extrapoláció esetén. A másik két mögöttes módszer aktív Richardson-extrapoláltja a referenciamegoldás mentén halad mind a három megjelenített tározót tekintve. Ugyanez mondható el $n = 10$ esetén is, hasonlóképpen, mint a passzív Richardson-extrapoláció vizsgálatakor.

Az eddigiekkel egyező módon $n = 20$ -tól mindhárom numerikus megoldás a pontosnak tekintett megoldás mentén halad, ahogy ezt láthatjuk is a 12. ábrán.



11. ábra. A különböző mögöttes módszerek aktív Richardson-extrapoláltjával kapott numerikus megoldások összehasonlítása a referenciamegoldással a három tározóra, $n = 5$ esetén.



12. ábra. A különböző mögöttes módszerek aktív Richardson-extrapoláltjával kapott numerikus megoldások összehasonlítása a referenciamegoldással a három tározóra, $n = 20$ esetén.

Az abszolút hibák táblázatát szemlélve (5. táblázat) azt állapíthatjuk meg, hogy a hibák nagyságrendjét tekintve nincsen jelentős előrelépés a passzív Richardson-extrapolációval kapott eredményekhez képest. Látható, hogy míg az implicit Euler-módszer passzív Richardson-extrapoláltja az alsólégkörben $n = 5$ esetén 10^{-6} -os pontosságú, itt egy nagyságrenddel pontatlanabb a megoldás. Ugyanakkor azt is ki kell emelni, hogy szintén az implicit Euler-módszer aktív Richardson-extrapoláltja esetében az óceán felső rétegére a legkisebb n -től pontosabb, és bizonyos n értékekre egy nagyságrenddel is pontosabb eredményt kapunk, mint a passzív Richardson-extrapolációt alkalmazva a mögöttes módszerre. Ennek ellenére erről a modelltől elmondható, hogy nem kifizetődő az aktív Richardson-extrapoláció alkalmazása, hiszen az eredmények nem kiemelkedően jobbak, mint a passzív Richardson-extrapolációval nyert numerikus megoldások, jóval több számítás mellett. Ráadásul, mint azt a későbbiekben látni is fogjuk,

az aktív Richardson-extrapolációt alkalmazva egy-egy numerikus módszerre, a kombinált módszer stabilitását külön meg kell vizsgálnunk (Faragó et al., 2010).

Itt is tanulmányozhatjuk azt, hogy az abszolút hibák hogyan aránylanak egymáshoz, miközben a lépésközt rendre a felére csökkentjük. Ezt mutatja a 6. táblázat.

5. táblázat. Az aktív Richardson-extrapolációval kapott abszolút hibák az egyes mögöttes módszerekre különböző lépésközök esetén, az általunk vizsgált két tározóban.

Az aktív Richardson-extrapoláció abszolút hibája						
n	EE		IE		KP	
	alsóléggkör	mélyóc. réteg	alsóléggkör	mélyóc. réteg	alsóléggkör	mélyóc. réteg
5	1,93E+93	1,51E+88	1,26E-05	3,40E-07	4,74E-10	3,36E-11
10	2,10E+12	1,64E+07	3,16E-06	8,64E-08	2,84E-11	2,11E-12
20	7,59E-07	2,21E-08	7,91E-07	2,18E-08	2,21E-12	1,31E-13
40	1,93E-07	5,51E-09	1,97E-07	5,47E-09	6,98E-13	6,25E-15
80	4,86E-08	1,37E-09	4,91E-08	1,37E-09	6,56E-13	1,34E-15
160	1,22E-08	3,43E-10	1,22E-08	3,43E-10	5,81E-13	1,82E-15
320	3,04E-09	8,58E-11	3,05E-09	8,57E-11	4,08E-13	1,52E-14
640	7,62E-10	2,14E-11	7,62E-10	2,15E-11	9,78E-13	1,21E-14
1280	1,91E-10	5,35E-12	1,92E-10	5,32E-12	1,48E-12	5,32E-14
2560	4,81E-11	1,46E-12	5,07E-11	1,38E-12	2,47E-12	1,66E-13
5120	1,39E-11	3,39E-13	1,60E-11	7,85E-13	3,21E-14	2,62E-13

6. táblázat. A hibák egymáshoz viszonyított aránya (az adott sor lépésközével kapott hiba osztva a fölötte lévő sor lépésközével kapott hibával) a passzív Richardson-extrapoláció esetében.

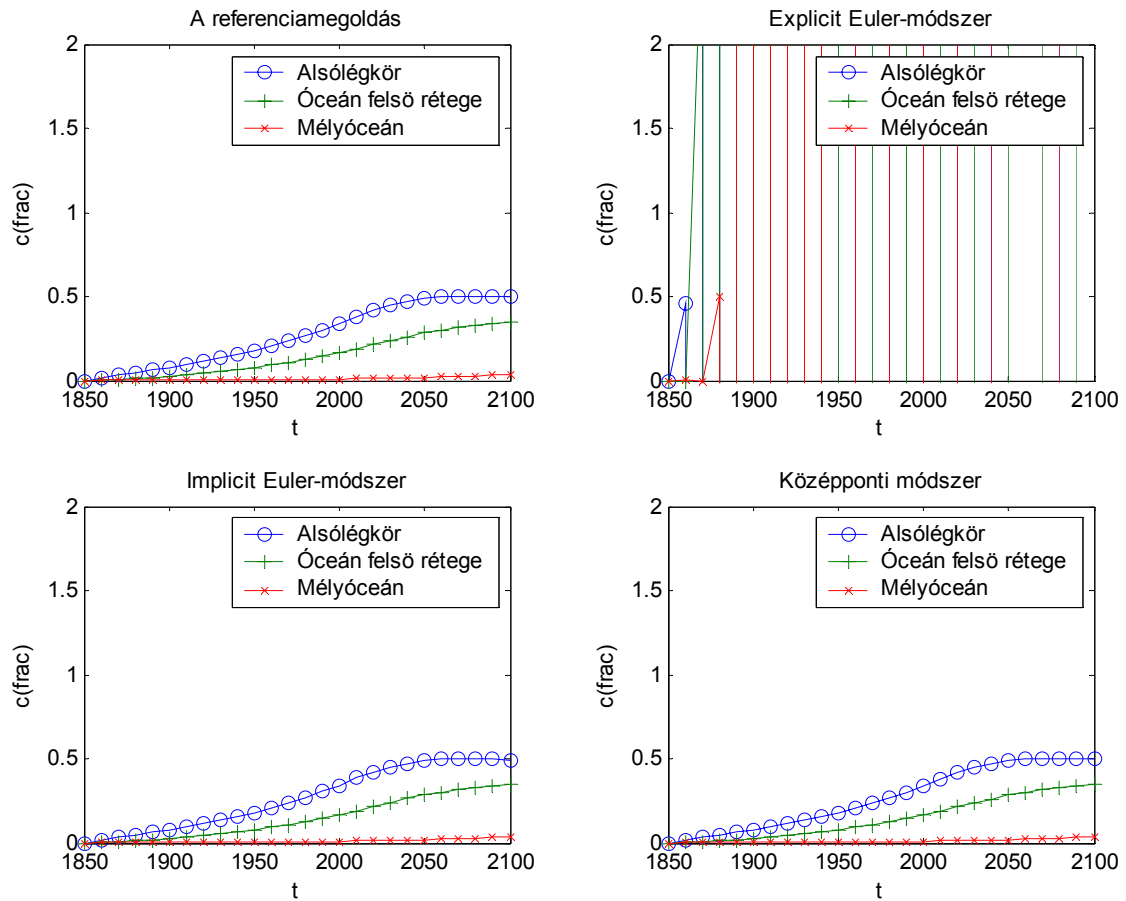
$1/2^p$ az aktív Richardson-extrapoláció esetén						
n	EE		IE		KP	
	alsóléggkör	mélyóc. réteg	alsóléggkör	mélyóc. réteg	alsóléggkör	mélyóc. réteg
5						
10	0,0000	0,0000	0,2520	0,2544	0,0599	0,0628
20	0,0000	0,0000	0,2500	0,2521	0,0778	0,0623
40	0,2548	0,2491	0,2491	0,2510	0,3161	0,0476
80	0,2512	0,2495	0,2490	0,2505	0,9392	0,2144
160	0,2504	0,2498	0,2493	0,2502	0,8859	1,3627
320	0,2502	0,2499	0,2496	0,2501	0,7021	8,3539
640	0,2503	0,2496	0,2496	0,2509	2,3974	0,7911
1280	0,2503	0,2497	0,2527	0,2475	1,5142	4,4119
2560	0,2521	0,2736	0,2633	0,2596	1,6712	3,1171
5120	0,2885	0,2318	0,3159	0,5682	0,0130	1,5825

Látható, hogy az Euler-módszereket kombinálva az aktív Richardson-extrapolációval, a módszerek konvergenciarendje eggyel megnő; ahogyan azt vártuk, másodrendű módszereket kapunk. A középponti módszert alkalmazva mögöttes módszerként megfigyelhetjük, hogy a módszer már hosszabb időlépcsővel számolva is megközelíti a maximális pontosságát, és így a hiba csak kezdetben csökken a harmadrendnek megfelelő (sőt annál nagyobb) mértékben.

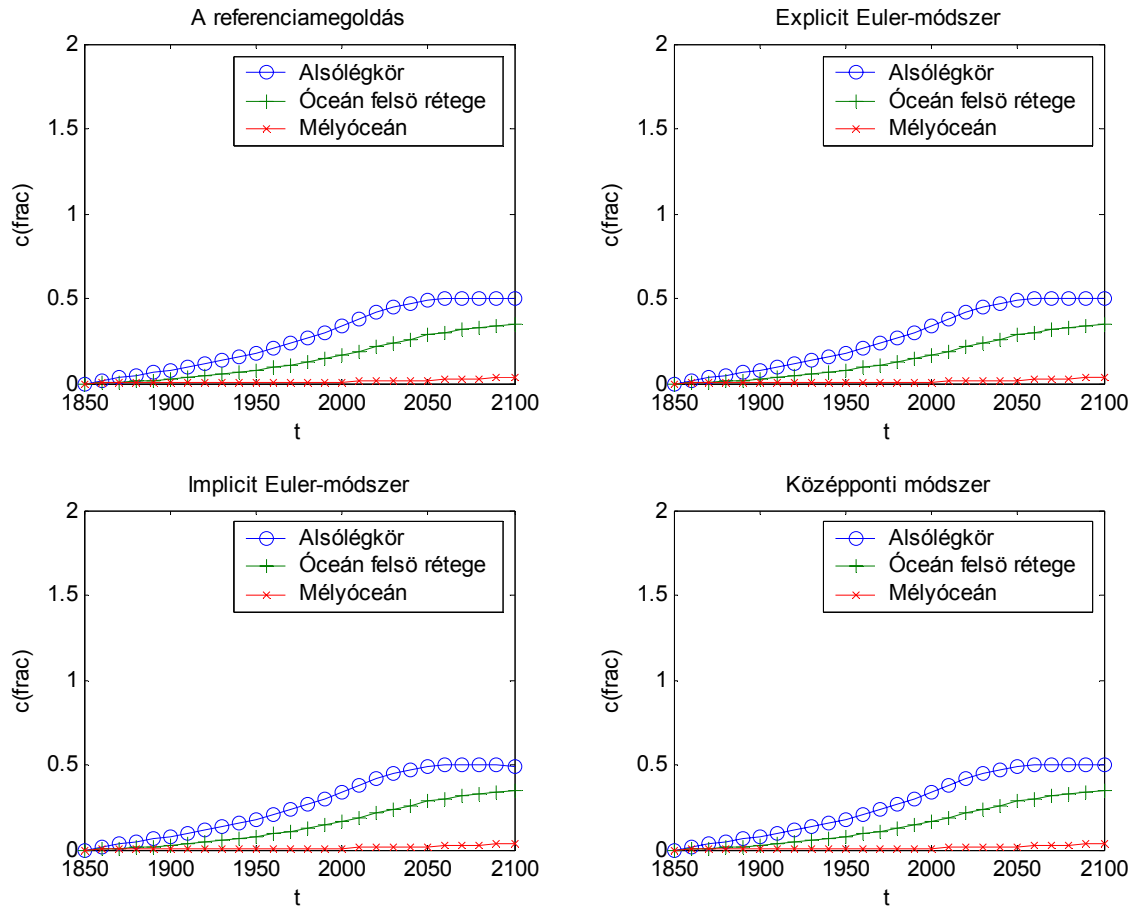
4.2.3. A mögöttes módszerekkel kapott eredmények

Ahhoz, hogy megmutassuk, hogy miért érdemes a Richardson-extrapolációt alkalmaznunk a mögöttes módszerekkel szemben, szükséges ismernünk azok viselkedését is. Így ebben a részben említést kell tennünk az eddig mögöttes módszerként alkalmazott explicit, valamint implicit Euler-módszerrel és a középponti módszerrel kapott numerikus eredményekről a vizsgált széndioxid-modellben. A következőkben tárgyalt modell-eredményeket már korábbi munkánkban (*Brajnovits és Kelemen, 2009*) is közöltük, jelen esetben az ott kapott eredményeket kiegészítve és újraértelmezve használjuk fel a Richardson-extrapoláció viselkedésének értelmezéséhez.

Az eddigiekhez hasonlóan a mögöttes módszerek esetén is megfigyelhető, hogy az explicit Euler-módszer $n = 5$ (*13. ábra*), valamint $n = 10$ esetén instabillá válik, a numerikus megoldás kinő a végtelenbe, míg a másik két módszerrel kapott eredmény még ilyen nagy lépésközök esetén is stabilnak mutatkozik. Amint azt az előző két numerikus sémát vizsgálva – ezekkel a módszerekkel – is láttuk, $n = 20$ -tól mindegyik numerikus módszer megoldása a pontos megoldás mentén fut. Ezt tekinthetjük meg a *14. ábrán*.



13. ábra. A vizsgált mögöttes módszerekkel kapott numerikus megoldások összehasonlítása a referenciamegoldással a három tározóra, $n = 5$ esetén.



14. ábra. A vizsgált mögöttes módszerekkel kapott numerikus megoldások összehasonlítása a referenciamegoldással a három tározóra, $n = 20$ esetén.

A 7. táblázatban megfigyelhetjük, hogy a vizsgált három numerikus módszer abszolút hibái hogyan alakulnak a két megfigyelt tározóban: az alsólégkörben és a mélyóceáni rétegben. Szembeötlő, hogy adott lépésközt tekintve az abszolút hibák két-három nagyságrenddel nagyobbak, mint a Richardson-extrapoláltak esetén. Az explicit Euler-módszer instabilan viselkedik nagy lépésközök alkalmazása során, az implicit módszerekkel ellentétben.

7. táblázat. A mögöttes módszerek abszolút hibája az általunk vizsgált két tározóban.

A mögöttes módszerek abszolút hibája						
	EE		IE		KP	
n	alsóléggör	mélyóc. réteg	alsóléggör	mélyóc. réteg	alsóléggör	mélyóc. réteg
5	3,78E+61	2,95E+56	1,10E-03	4,70E-04	1,72E-05	4,51E-07
10	2,40E+11	1,88E+06	5,76E-04	2,35E-04	4,31E-06	1,13E-07
20	2,91E-04	1,18E-04	2,89E-04	1,18E-04	1,08E-06	2,82E-08
40	1,45E-04	5,89E-05	1,45E-04	5,89E-05	2,69E-07	7,05E-09
80	7,26E-05	2,95E-05	7,24E-05	2,94E-05	6,73E-08	1,76E-09
160	3,63E-05	1,47E-05	3,62E-05	1,47E-05	1,68E-08	4,41E-10
320	1,81E-05	7,36E-06	1,81E-05	7,36E-06	4,20E-09	1,10E-10
640	9,06E-06	3,68E-06	9,06E-06	3,68E-06	1,05E-09	2,76E-11
1280	4,53E-06	1,84E-06	4,53E-06	1,84E-06	2,62E-10	6,88E-12
2560	2,27E-06	9,20E-07	2,27E-06	9,20E-07	6,44E-11	1,76E-12
5120	1,13E-06	4,60E-07	1,13E-06	4,60E-07	1,42E-11	5,63E-13

A következő táblázatban az abszolút hibák egymáshoz viszonyított arányát tüntetjük fel, miközben a lépésközt mindig a felére csökkentjük. Amint azt tudjuk ezekről az ismert numerikus módszerekről, az Euler-módszerek konvergenciasebesség alapján elsőrendű sémák, míg a középponti módszer másodrendű, és ezzel összhangban vannak a táblázatban szereplő értékek.

8. táblázat. A hibák egymáshoz viszonyított aránya (az adott sor lépésközével kapott hiba osztva a fölötte lévő sor lépésközével kapott hibával) a mögöttes módszerek esetében.

$1/2^p$ a mögöttes módszerek esetén						
	EE		IE		KP	
n	alsóléggör	mélyóc. réteg	alsóléggör	mélyóc. réteg	alsóléggör	mélyóc. réteg
5						
10	0,0000	0,0000	0,5235	0,5006	0,2500	0,2500
20	0,0000	0,0000	0,5018	0,5003	0,2500	0,2500
40	0,4991	0,4998	0,5009	0,5002	0,2500	0,2500
80	0,4996	0,4999	0,5005	0,5001	0,2500	0,2500
160	0,4998	0,5000	0,5002	0,5001	0,2500	0,2500
320	0,4999	0,5000	0,5001	0,5000	0,2500	0,2500
640	0,4999	0,5000	0,5001	0,5000	0,2499	0,2501
1280	0,5000	0,5000	0,5000	0,5000	0,2493	0,2497
2560	0,5000	0,5000	0,5000	0,5000	0,2458	0,2557
5120	0,5000	0,5000	0,5000	0,5000	0,2211	0,3202

4.3. A számítási idők vizsgálata

A következőkben célunk megvizsgálni, hogy mit nyerünk gépidőben, ha az extrapolációs módszereket alkalmazzuk. Ez nagyon fontos szempont a módszerek hatékonyságának megítélése szempontjából. Ebben nyújt segítséget számunkra a négy alábbi táblázat.

A 9. táblázatban a mögöttes numerikus módszerekre láthatjuk a három különböző séma számítási idejét n függvényében. A számítási idők kiíratásához a MATLAB időmérő utasítását használtuk. A táblázatból kiolvasható, hogy minden esetben a lépésköz csökkenésével párhuzamosan a számítási idő növekszik. Ezen kívül feltűnő, hogy meghatározott n esetén adott sémával mindhárom mögöttes módszernek nagyságrendileg azonos számítási időre van szüksége. Azonban a legfontosabb, amit a numerikus sémák működése alapján sejtettünk, hogy a mögöttes módszerek igénylik a legkevesebb, míg a mögöttes módszerek aktív Richardson-extrapoláltjainak kiszámítása a legtöbb időt. Ennek magyarázata egyértelműen a számítások mennyiségében rejlik.

9. táblázat. A mögöttes módszerként alkalmazott sémák számítási ideje a lépésközök függvényében, a három vizsgált esetben.

	Számítási idők (sec)								
	EE-módszer			IE-módszer			KP-módszer		
n	mögöttes	aktív R.e.	passzív R.e.	mögöttes	aktív R.e.	passzív R.e.	mögöttes	aktív R.e.	passzív R.e.
5	0,047	0,234	0,094	0,031	0,213	0,094	0,031	0,188	0,093
10	0,078	0,344	0,203	0,063	0,328	0,156	0,047	0,344	0,156
20	0,125	0,546	0,359	0,125	0,563	0,313	0,11	0,562	0,328
40	0,234	1,015	0,641	0,235	1,016	0,625	0,219	1,062	0,641
80	0,421	1,953	1,266	0,422	1,984	1,235	0,422	1,984	1,219
160	0,797	3,797	2,468	0,828	3,828	2,5	0,813	3,734	2,469
320	1,672	7,641	4,797	1,625	7,703	4,828	1,672	7,375	4,828
640	3,266	15,109	9,547	3,234	14,687	9,734	3,234	14,922	9,703
1280	6,438	29,531	19,203	6,468	29,594	19,25	6,5	29,484	19,453
2560	12,937	58,828	38,453	13,063	59	39,11	12,953	59,203	38,781
5120	25,687	139,187	77,25	25,984	118	77,859	25,844	118,063	78,641

A 10. táblázat azt mutatja meg, hogy ha előre meghatározott pontosság elérése a cél, akkor az explicit Euler-módszer, mint mögöttes módszer felhasználásával, melyik sémával mennyit kell lépünk ennek eléréséhez, és ehhez a számítások mennyi időt igényelnek. A táblázatban feltüntetett lépésközök az egyszerűség kedvéért az alsólégrére

vonatkoznak. Számunkra ez a tározó a legfontosabb, hiszen ez áll kapcsolatban a legtöbb rezervoárral, és itt jelenik meg az antropogén forrástag is.

Láthatjuk, hogy az explicit Euler-módszer önmagában alkalmazva az általunk vizsgált lépésközökre maximálisan 10^{-6} -os pontosságot ér el, az aktív és a passzív Richardson-extrapoláció sémáját alkalmazva a módszerre ez az érték 10^{-11} . Azt is kiolvashatjuk a táblázatból, hogy a Richardson-extrapoláltak már a legnagyobb stabil eredményt adó lépésköz esetén is pontosabbak, mint amilyen pontosságot a mögöttes módszerrel el tudnánk érni! A különbség a két Richardson-extrapolált között elsősorban a számítási időben mutatkozik meg, ill. a 10^{-9} -es pontosság elérésénél a passzív Richardson-extrapolációval kevesebb lépés is elegendő. Tehát elmondhatjuk, hogy ebben a helyzetben nem érdemes az aktív Richardson-extrapolációt alkalmaznunk a passzívvval szemben.

10. táblázat. Az explicit Euler-módszer számítási ideje az előírt pontosság függvényében, és az ennek eléréséhez szükséges minimális lépések száma.

Előírt pontosság vs. számítási idők és szükséges lépések száma						
Pontosság	EE-módszer					
	MÖGÖTTES		AKTÍV RIEX		PASSZÍV RIEX	
	Számítási idő (sec)	Lépésköz	Számítási idő (sec)	Lépésköz	Számítási idő (sec)	Lépésköz
[1.0E-02 , 1.0E-03]		-		-		-
[1.0E-03 , 1.0E-04]	0,125	20		-		-
[1.0E-04 , 1.0E-05]	0,421	80		-		-
[1.0E-05 , 1.0E-06]	3,266	640		-		-
[1.0E-06 , 1.0E-07]		-	0,546	20	0,359	20
[1.0E-07 , 1.0E-08]		-	1,953	80	1,266	80
[1.0E-08 , 1.0E-09]		-	7,641	320	2,468	160
[1.0E-09 , 1.0E-10]		-	15,109	640	9,547	640
[1.0E-10 , 1.0E-11]		-	58,828	2560	38,453	2560
[1.0E-11 , 1.0E-12]		-		-		-

A 11. táblázatban a fenti adatokat jelenítjük meg az implicit Euler-módszerre vonatkozólag. Itt szintén az implicit Euler-módszert önállóan alkalmazva az elérhető maximális pontosság 10^{-6} nagyságrendű. A passzív Richardson-extrapolációval kombinált módszer ebben az esetben a legnagyobb lépésköz esetén egy nagyságrenddel pontosabb, mint az aktív, ill. a 10^{-9} -es pontosság eléréséhez elegendő kétszer akkora lépést megtennie, mint az aktívnek. Tehát ez alkalommal is célszerűbbnek mutatkozik a passzív Richardson-extrapoláció alkalmazása, hiszen költséghatékonyabb, és legalább olyan pontos, mint az aktív Richardson-extrapoláció.

11. táblázat. Az implicit Euler-módszer számítási ideje az előírt pontosság függvényében, és az ennek eléréséhez szükséges minimális lépések száma.

IE-módszer						
Pontosság	MÖGÖTTES		AKTÍV RIEX		PASSZÍV RIEX	
	Számítási idő (sec)	Lépésköz	Számítási idő (sec)	Lépésköz	Számítási idő (sec)	Lépésköz
[1.0E-02 , 1.0E-03]	0,031	5		-		-
[1.0E-03 , 1.0E-04]	0,063	10		-		-
[1.0E-04 , 1.0E-05]	0,422	80	0,213	5		-
[1.0E-05 , 1.0E-06]	3,234	640	0,328	10	0,094	5
[1.0E-06 , 1.0E-07]		-	0,563	20	0,313	20
[1.0E-07 , 1.0E-08]		-	1,984	80	1,235	80
[1.0E-08 , 1.0E-09]		-	7,703	320	2,5	160
[1.0E-09 , 1.0E-10]		-	14,687	640	9,734	640
[1.0E-10 , 1.0E-11]		-	59	2560	39,11	2560
[1.0E-11 , 1.0E-12]		-		-		-

Az alábbi táblázatban a középponti módszerre feltüntetett adatokat láthatjuk. Ebben az esetben is elmondható, hogy a Richardson-extrapoláltak jóval pontosabban viselkednek, mint az önmagában alkalmazott középponti módszer; noha maga a mögöttes módszer is sokkal pontosabb, mint az eddig vizsgált Euler-módszerek – maximális pontossága 10^{-11} . Ebben az esetben azonban a Richardson-extrapoláltak nagyságrendben ugyanolyan pontosnak bizonyulnak adott lépésköz esetén, viszont a számítási idők és az elvégzendő számítások mennyisége miatt itt is a passzív Richardson-extrapoláció alkalmazása a célravezető.

12. táblázat. Az középponti módszer számítási ideje az előírt pontosság függvényében, és az ennek eléréséhez szükséges minimális lépések száma.

KP						
Pontosság	MÖGÖTTES		AKTÍV RIEX		PASSZÍV RIEX	
	Számítási idő (sec)	Lépésköz	Számítási idő (sec)	Lépésköz	Számítási idő (sec)	Lépésköz
[1.0E-02 , 1.0E-03]		-		-		-
[1.0E-03 , 1.0E-04]		-		-		-
[1.0E-04 , 1.0E-05]	0,031	5		-		-
[1.0E-05 , 1.0E-06]	0,047	10		-		-
[1.0E-06 , 1.0E-07]	0,219	40		-		-
[1.0E-07 , 1.0E-08]	0,422	80		-		-
[1.0E-08 , 1.0E-09]	1,672	320		-		-
[1.0E-09 , 1.0E-10]	6,5	1280	0,188	5	0,093	5
[1.0E-10 , 1.0E-11]	12,953	2560	0,344	10	0,156	10
[1.0E-11 , 1.0E-12]		-	0,562	20	0,328	20
[1.0E-12 , 1.0E-13]		-	1,062	40	0,641	40
[1.0E-13 , 1.0E-14]		-	118,063	5120	78,641	5120
[1.0E-14 , 1.0E-15]		-		-		-

A fentiek alapján elmondhatjuk, hogy ezekkel a numerikus módszerekkel a passzív Richardson-extrapoláció a leginkább költséghatékony, egyszersmind a legpontosabb – az aktív Richardson-extrapoláció mellett. Mindezek mellett tudjuk róla, hogy ha a mögöttes numerikus módszer stabil, akkor a passzív Richardson-extrapoláltja is stabil módszer, míg ugyanez nem mindig mondható el az aktív Richardson-extrapoláltról. Ezért szükséges az aktív Richardson-extrapoláció alkalmazása előtt stabilitásvizsgálatot végezni. Ezzel foglalkozunk a következő fejezetben.

5. A Richardson-extrapolációs módszerek stabilitása

A numerikus módszerek stabilitási tulajdonságait az alábbi, ún. Dahlquist-féle tesztfeladaton szokásos tanulmányozni (*Dahlquist, 1963*):

$$\begin{cases} y'(t) = \lambda y(t) \\ y(0) = y_0 \end{cases} \quad (36)$$

ahol $t \in [0, \infty)$ és $\lambda \leq 0$. Ezen feladat pontos megoldása az $y(t) = \exp(\lambda t)y_0$ függvény, amelyre igazak a következő tulajdonságok: i) a megoldás korlátos, ii) a megoldás $t \rightarrow \infty$ -re nullához tart.

Egy numerikus módszert stabilnak nevezünk, ha a Dahlquist-féle tesztfeladatra alkalmazva a numerikus megoldás korlátos marad, azaz létezik olyan K konstans, amelyre minden n időrétegen $|y_n| \leq K$ teljesül. Ha a módszer stabilitási függvényét $R(\tau\lambda)$ jelöli, akkor

$$y_n = (R(\tau\lambda))^n y_0, \quad (37)$$

azaz

$$|y_n| = |R(\tau\lambda)|^n |y_0|. \quad (38)$$

A mértani sorozat tulajdonságai alapján világos, hogy az $|y_n|$ sorozat korlátosságának feltétele: $-1 \leq R(\tau\lambda) \leq 1$, vagyis $|R(\tau\lambda)| \leq 1$. A továbbiakban ezen feltétel teljesülését vizsgáljuk meg az eddigiekben vizsgált numerikus módszerekre és azok Richardson-extrapoláltjára.

Az explicit Euler-módszer stabilitási feltétele

Az explicit Euler-módszer stabilitási függvénye $R_{EE}(\tau\lambda) = 1 + \tau\lambda$, következésképpen a módszer stabil, ha

$$|1 + \tau\lambda| \leq 1. \quad (39)$$

Vizsgáljuk meg, mit jelent ez adott $\lambda \leq 0$ esetén a választható időlépcső hosszára nézve!

$$|1 + \tau\lambda| \leq 1 \Leftrightarrow -1 \leq 1 + \tau\lambda \leq 1 \Leftrightarrow -2 \leq \tau\lambda \leq 0. \quad (40)$$

A $\tau\lambda$ szorzat mindig negatív, tehát a stabilitási feltétel $-2 \leq \tau\lambda$, azaz

$$\tau \leq -\frac{2}{\lambda} = \frac{2}{|\lambda|}. \quad (41)$$

Ha ennél hosszabb időlépcsőt választunk, akkor a Dahlquist-féle tesztfeladatra az explicit Euler-módszer instabillá válik, a numerikus megoldás kinő a végtelenbe. Mindez azt is jelenti, hogy az explicit Euler-módszer nem feltétel nélkül stabil (azaz nem lesz minden lépésközre stabil a megoldás), csak ún., feltételesen stabil módszer.

Az aktív Richardson-extrapolációval kombinált explicit Euler-módszer stabilitása

Ha a τ lépésközzel kiszámított megoldást pontosítani szeretnénk a korábbi, hosszabb időlépcsővel kapott megoldással az aktív Richardson-extrapoláció módszerével, akkor az $(n+1)$ -edik időrétegen kapott kombinált megoldás

$$y_{n+1} = 2(1 + \tau\lambda)^2 y_n - (1 + 2\tau\lambda)y_n. \quad (42)$$

Innen a kombinált módszer stabilitási függvénye

$$R_{EE+Riex}(\tau\lambda) = 2(1 + \tau\lambda)^2 - (1 + 2\tau\lambda) = 1 + 2\tau\lambda + 2\tau^2\lambda^2. \quad (43)$$

Vezessük be $\mu = \tau\lambda$ jelölést, amely nyilvánvalóan nempozitív értéket vehet csak fel. A stabilitási feltétel ezzel:

$$-1 \leq 1 + 2\mu + 2\mu^2 \leq 1, \quad (44)$$

azaz

$$-1 \leq \mu(1 + \mu) \leq 0. \quad (45)$$

A jobb oldali egyenlőtlenség akkor áll fenn, ha $1 + \mu \geq 0$. Ebből a

$$\mu \geq -1 \quad (46)$$

feltételt nyerjük. A bal oldali egyenlőtlenség a

$$\mu^2 + \mu + 1 \geq 0 \quad (47)$$

feltételt jelenti. Mivel a diszkrimináns negatív, így az egyenlőtlenség minden μ -re fennáll. Ezért ebből nem jutottunk további feltételhez. A τ és 2τ lépésközzel és az explicit Euler-módszerrel számoló Richardson-extrapolációs módszer stabilitási feltétele tehát

$$\mu \geq -1, \text{ azaz } \tau \leq \frac{1}{|\lambda|}. \quad (48)$$

Ez éppen az a feltétel, amely mellett a τ és 2τ lépésközű explicit Euler-módszer egyszerre stabil lesz, ugyanis ez azonos a hosszabb lépésközű explicit Euler-módszer stabilitását biztosító

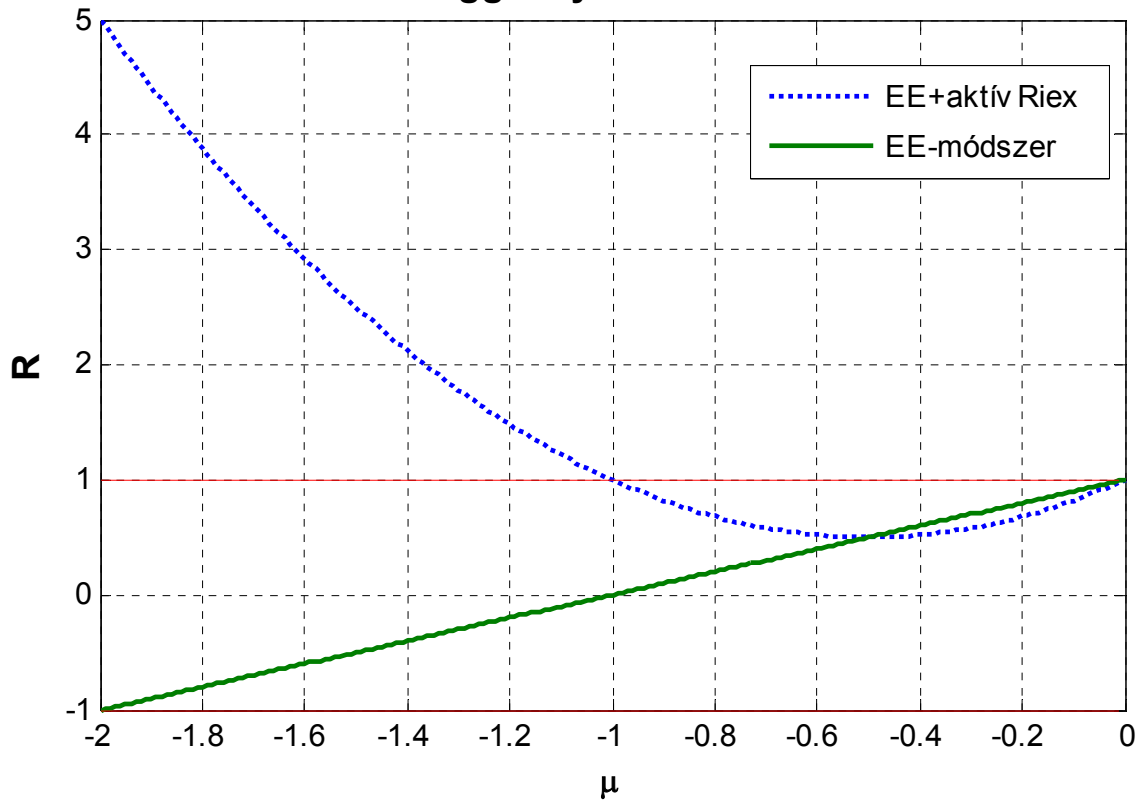
$$2\tau \leq \frac{2}{|\lambda|} \quad (49)$$

feltétellel (lásd az *Az explicit Euler-módszer stabilitási feltétele* című részt).

Következésképpen, ha a Richardson-extrapoláció során a két explicit Euler-lépés stabil, akkor a kombinált módszer is stabil lesz. Ha azonban a hosszabb időlépcsővel számított megoldás már nem stabil, akkor a Richardson-extrapolációval kapott megoldás szintén nem rendelkezik ezzel a tulajdonsággal.

Az explicit Euler-módszerre és Richardson-extrapoláltjára kapott stabilitási függvényeket a 15. ábrán tüntettük fel.

Stabilitási függvények az EE módszerhez



15. ábra. Az explicit Euler-módszernek és aktív Richardson-extrapoláltjának stabilitási függvénye.

Az implicit Euler-módszer stabilitási feltétele

Az implicit Euler-módszer stabilitási függvénye $R_{IE}(\tau\lambda) = 1/(1 - \tau\lambda)$, tehát a módszer stabil, ha

$$\left| \frac{1}{1 - \tau\lambda} \right| \leq 1. \quad (50)$$

Adott $\lambda \leq 0$ esetén a választható időlépcsőt kifejezve a

$$-1 \leq \frac{1}{1 - \tau\lambda} \leq 1 \quad (51)$$

képletből arra az eredményre jutunk, hogy a módszer bármilyen τ értékre stabil megoldást szolgáltat. Ez már abból is látszik, hogy a nevezőben álló szám nagyobb vagy egyenlő 1-gyel, így a tört értékére mindig igaz lesz az egyenlőség. Ráadásul az is látszik, hogy

amidőn $t \rightarrow \infty$ (azaz $\mu \rightarrow -\infty$), a stabilitási függvény értéke hozzásimul a konstans 0 egyeneshez. Ezt a *16. ábrán* meg is figyelhetjük. Az ilyen módszereket A_0 -stabilnak nevezzük.

Az aktív Richardson-extrapolációval kombinált implicit Euler-módszer stabilitása

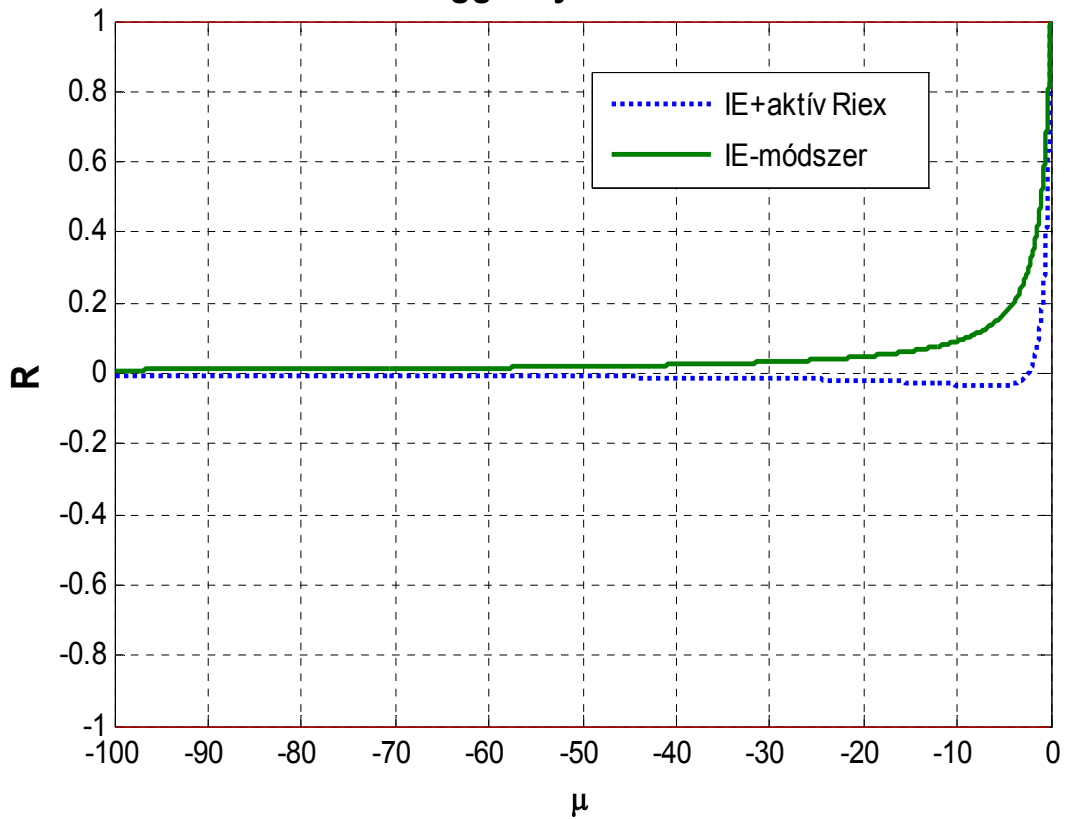
Ebben az esetben, ha pontosítani szeretnénk a megoldásunkat az aktív Richardson-extrapolációt felhasználva, a stabilitási függvény a következő alakot ölti:

$$R_{IE+Riex}(\tau\lambda) = 2\left(\frac{1}{1-\tau\lambda}\right)^2 - \frac{1}{1-2\tau\lambda}. \quad (52)$$

Az $\left|2\left(\frac{1}{1-\tau\lambda}\right)^2 - \frac{1}{1-2\tau\lambda}\right| \leq 1$ feltétel egy bonyolult, harmadfokú egyenletet eredményez,

melynek pontos megoldása igen bonyolult, ezért célszerűbb grafikonon bemutatni a stabilitási függvény viselkedését. Ezt láthatjuk a *16. ábrán*. Elmondható, hogy az implicit Euler-módszer Richardson-extrapoláltja is stabil módszert eredményez, melynek a stabilitási függvénye a mögöttes módszeréhez hasonlóan $t \rightarrow \infty$ esetén 0-hoz tart. Vegyük észre azonban, hogy a függvény alulról tart a nullához, ezért túlságosan hosszú időlépcsők esetén a numerikus megoldás lépésenként előjelet vált (oszillál), míg ez nem jellemző a sima implicit Euler-módszerre.

Stabilitási függvények az IE módszerhez



16. ábra. Az implicit Euler-módszernek és aktív Richardson-extrapoláltjának stabilitási függvénye.

A középponti módszer stabilitási feltétele

A középponti módszer stabilitási függvénye

$$R_{KP}(\tau\lambda) = \frac{1 + \frac{\tau\lambda}{2}}{1 - \frac{\tau\lambda}{2}} \quad (53)$$

alakú. A stabilitás feltétele, hogy ez a függvény abszolút értékben kisebb vagy egyenlő legyen 1-gyel, vagyis

$$-1 \leq \frac{1 + \frac{\tau\lambda}{2}}{1 - \frac{\tau\lambda}{2}} \leq 1. \quad (54)$$

Egyszerű átrendezéssel azt kapjuk, hogy

$$0.5\tau\lambda - 1 \leq 1 + 0.5\tau\lambda \leq 1 - 0.5\tau\lambda. \quad (55)$$

A bal oldali egyenlőtlenség $0.5\tau\lambda - 1 \leq 1 + 0.5\tau\lambda \Leftrightarrow 0 \leq 2$, amiből nem kapunk megszorító feltételt az időlépcsőre. Ugyanezt elmondhatjuk a jobb oldali egyenlőtlenségről is: $1 + 0.5\tau\lambda \leq 1 - 0.5\tau\lambda \Leftrightarrow 0 \leq -\tau\lambda$. Mivel $\lambda \leq 0$, ez az egyenlőtlenség is minden lépéshosszra fennáll. Ezt mutatja a 17. ábrán a zöld folytonos vonal.

Ha kiszámítjuk a stabilitási függvény határértékét, azt tapasztaljuk, hogy az a végtelenben -1 -hez tart. Ennek eredményeképpen, ha az időlépcső nem elég rövid, a középponti módszerrel kapott numerikus megoldás oszcillál.

Az aktív Richardson-extrapolációval kombinált középponti módszer stabilitása

Az eddigiekkel szemben a középponti módszer egy másodrendben pontos numerikus módszer, tehát az (5) képlet értelmében a Richardson-extrapoláltját más súlyokkal számítjuk, mint azt az Euler-módszereknél láttuk. Emiatt a stabilitási függvényben is más súlyok szerepelnek:

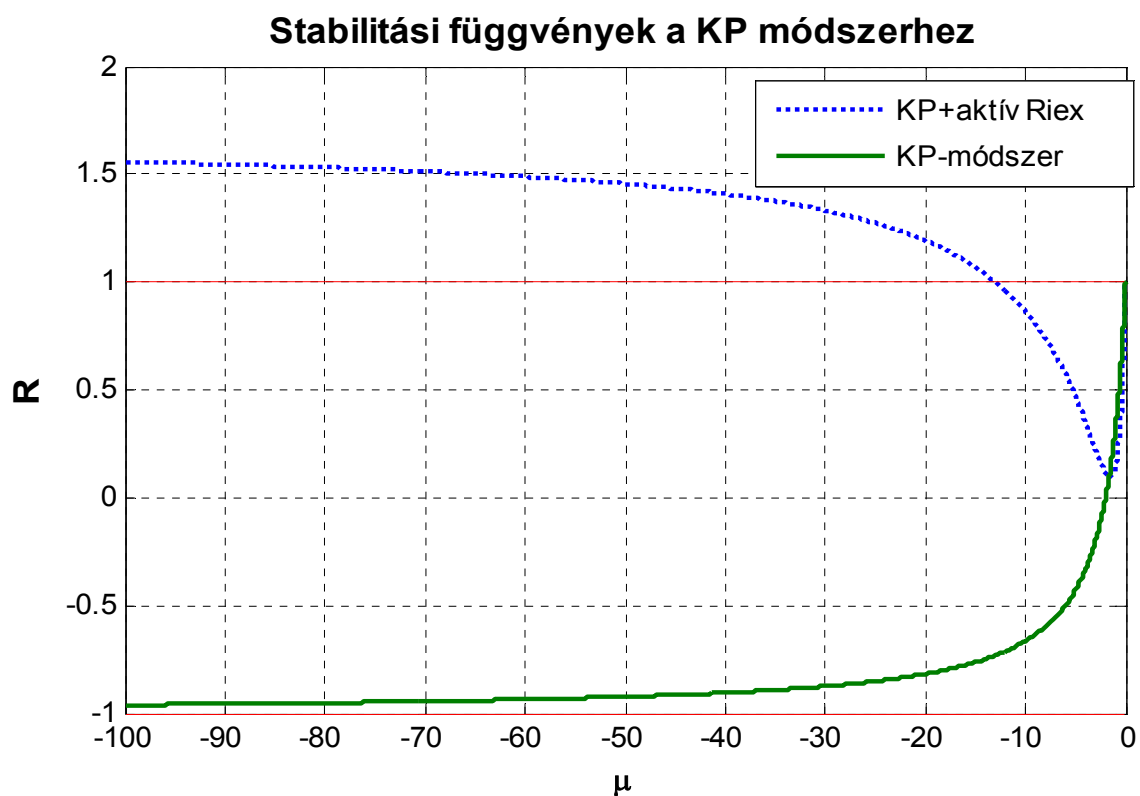
$$R_{KP+Riex}(\tau\lambda) = \frac{4}{3} \left(\frac{1 + 0.25\tau\lambda}{1 - 0.25\tau\lambda} \right)^2 - \frac{1}{3} \frac{1 + 0.5\tau\lambda}{1 - 0.5\tau\lambda}. \quad (56)$$

A stabilitásvizsgálat során az

$$\left| \frac{4}{3} \left(\frac{1 + 0.25\tau\lambda}{1 - 0.25\tau\lambda} \right)^2 - \frac{1}{3} \frac{1 + 0.5\tau\lambda}{1 - 0.5\tau\lambda} \right| \leq 1 \quad (57)$$

egyenlőtlenséget kell megoldanunk. Ez egy bonyolult harmadfokú egyenlőtlenséghez vezet, melynek pontos megoldását mellőzve grafikusán jelenítettük meg a függvényt a 17. ábrán (kék pontozott vonal).

Ha megvizsgáljuk, hogy a stabilitási függvény $t \rightarrow \infty$ esetén milyen értéket vesz fel, $5/3$ -ot kapunk eredményül, ami azt jelzi, hogy túl hosszú időlépcsőt választva már nem stabil a módszer. Ugyanakkor mentes az oszcillációtól, mert a stabilitási függvény nem vesz fel negatív értékeket. Ebben kedvezőbb tulajdonságú a sima középponti módszernél.



17. ábra. Az középponti módszernek és aktív Richardson-extrapoláltjának stabilitási függvénye.

Megjegyezzük, hogy a közönséges differenciálegyenlet-rendszerek numerikus módszereinek elméletében számos egyéb stabilitási fogalom is használatos, amelyeket a Dahlquist-féle tesztfeladat általánosabb (komplex λ együtthatójú) alakjának segítségével vezetünk be. Egy módszert A-stabillnak nevezünk, ha tetszőleges időlépcsővel stabil megoldást kapunk (más szóval, ha azon μ pontok halmaza, amelyekre a megoldás stabil, magába foglalja az egész negatív komplex félsíkot). Ha ezen felül az is teljesül, hogy a stabilitási függvény egynél kisebb abszolút értékű számhoz tart, miközben μ tart a mínusz végtelenhez, akkor a módszert erősen A-stabillnak nevezzük. Ennél is erősebb tulajdonság az L-stabilitás, vagyis a stabilitási függvény nullához tartása, ha μ tart a mínusz végtelenhez. Különösen stiff feladatok numerikus megoldásánál fontos, hogy lehetőség szerint legalább A-stabil módszert alkalmazzunk (Hundsdorfer and Verwer, 2003). Az említett stabilitási tulajdonságok részletes vizsgálata a θ -módszer és az aktív Richardson-extrapoláció kombinációjára megtalálható a Zlatev et al. (2010) publikációban, amelynek fő eredményei az alábbiakban foglalhatók össze:

1. A Richardson-extrapolációval kombinált implicit Euler-módszer L-stabil.
2. A Richardson-extrapolációval kombinált θ -módszer erősen A-stabil, ha $\theta \in [2/3, 1]$.
3. A középponti módszer Richardson-extrapoláltja nem A-stabil.

6. Operátorszeletelési módszerek kombinálása Richardson-extrapolációval

A Richardson-extrapoláció alkalmazható minden időintegrálási módszerre, így szeletelő eljárások rendjét is növelhetjük vele. Ez a meteorológiai modellezésben különösen fontos, hiszen a bonyolultabb problémák megoldására ezen eljárások alkalmazásával nyílik lehetőségünk. Sok feladat megoldásakor nagy pontosságot kívánunk elérni, és ehhez nem elég az, ha a numerikus megoldó módszer rendje magas, szükségünk van magasabb rendű szeletelési sémák használatára is. Ezek azonban időigényesebbek, továbbá ha a kapott eredmény nem elég pontos, a számításokat kisebb időlépcsővel újra el kell végezni, ami szintén költségessé teszi őket (a hosszabb időlépcsővel kapott megoldást nem használjuk fel). Mindez felveti a Richardson-extrapoláció alkalmazását a szeletelési eljárások során is (*Faragó et al., 2009*), ugyanis elvileg az extrapoláció alkalmazásával alacsonyabb rendű szeletelési módszer esetén is megfelelő pontosságot nyerhetünk.

A környezeti modellekre gyakran jellemző a széndioxid-modell kapcsán már említett stífesség. Célunk két kis számításigényű, elsőrendű szeletelési módszerek kombinálása Richardson-extrapolációval egy reakció-diffúziós modellben. Ez a modell úgy tekinthető, mint a szennyezőanyag-terjedési modellek egyszerűsített változata, amely rendelkezik az ezen modellekre általában jellemző stífességgel. Tanulmányozzuk a módszerek pontosságát, különös tekintettel arra, hogy a feladat stífessége hogyan hat ki a hiba nagyságára. A kérdés fontosságát indokolja, hogy 1) a stiff rendszerek gyakoriak az alkalmazásokban, 2) a magasabbrendű szeletelési módszerek stiff feladatokra való alkalmazásánál jól ismert jelenség az ún. rendcsökkenés, ami azt jelenti, hogy az elméletileg várt hibacsökkenésnél lassúbb csökkenést tapasztalunk, miközben az időlépcsőt rövidítjük (*Hundsorfer and Verwer, 1994; Sportisse, 1998; Verwer and Sportisse, 1998*). Kíváncsiak vagyunk arra, hogy a vizsgált elsőrendű szeletelések Richardson-módszerrel való kombinálásakor szintén fellép-e ez a jelenség. Itt csak az aktív Richardson-extrapolációval áll módunkban foglalkozni, de későbbi terveink között szerepel a passzív változat tesztelése is.

6.1. Operátorszeletelési módszerek

A továbbiakban azon két elsőrendű szeletelési eljárást ismertetjük, amelyeket a későbbiekben általunk vizsgált egydimenziós reakció-diffúziós feladatban alkalmazni fogunk: a szekvenciális és az additív szeletelést.

A szekvenciális szeletelés

A szekvenciális szeletelés a legegyszerűbb, és ezért a legelterjedtebben alkalmazott szeletelési módszer. Az eljárás során a feladat operátorát két (vagy akár több) részoperátorra bontjuk, a feladat időintervallumát pedig n db $\tau = T/n$ hosszúságú részintervallumra daraboljuk (Csomós *et al.*, 2005; Havasi *et al.*, 2001; Krüzselyi, 2009). Először az első (A) részoperátornak megfelelő feladatot oldjuk meg egy τ hosszúságú intervallumon, utána ugyanezen az intervallumon megoldjuk a második (B) részoperátornak megfelelő feladatot. Mindegyik részoperátor esetén a kezdeti feltétel mindig az előző lépésben megoldott feladatnak az intervallum végpontjában kapott megoldása lesz. Ezek alapján a szekvenciális szeletelést a következőképpen írhatjuk fel:

A megoldandó Cauchy-feladat:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{du(t)}{dt} = (A + B)u(t), \quad t \in (0, T] \\ u(0) = u_0 \end{array} \right. \quad (58)$$

ahol X egy Banach-tér, $u : [0, T] \rightarrow X$ az ismeretlen függvény, $A, B : X \rightarrow X$ az ún. részoperátorok, és $u_0 \in X$ adott kezdeti függvény.

A szeletelés sémája:

$$\left. \begin{aligned} \frac{du_k^{(1)}(t)}{dt} &= Au_k^{(1)}(t), t \in ((k-1)\tau, k\tau] \\ u_k^{(1)}((k-1)\tau) &= \omega_s((k-1)\tau), \end{aligned} \right\} \quad (59)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{du_k^{(2)}(t)}{dt} &= Bu_k^{(2)}(t), t \in ((k-1)\tau, k\tau] \\ u_k^{(2)}((k-1)\tau) &= u_k^{(1)}(k\tau), \end{aligned} \right\} \quad (60)$$

$$\omega_s(k\tau) = u_k^{(2)}(k\tau), \quad (61)$$

ahol $\omega_s(l\tau)$ az $l\tau$ -ban kapott szeletelt megoldást jelöli ($l = 1, 2, \dots, n$), és $\omega_s(0) = u_0$.

A szeletelt megoldást minden intervallum végén a második részfeladatnak az adott időpillanatra kapott megoldása jelenti. Hangsúlyozzuk: nem mindegy, hogy melyik részoperátorral kezdjük a feladat megoldását, a megoldás függ az operátorok alkalmazási sorrendjének megválasztásától.

Ezen az egyszerű szeletelési eljárásról jól lehet látni az operátorszeletelés lényegét. Minden később létrejött szeletelési eljárásnak az alapját ez a módszer jelenti.

Az additív szeletelés

A másik általunk vizsgált szeletelési eljárás az additív szeletelés (Gnandt, 2005; Gnandt, 2006; Faragó et al., 2008). A megoldandó feladat továbbra is (1). Az additív szeletelés matematikai algoritmus a $[(k-1)\tau, k\tau]$ intervallumon a következőképpen alakul:

$$\begin{aligned}\frac{du_k^{(1)}(t)}{dt} &= Au_k^{(1)}(t), t \in ((k-1)\tau, k\tau] \\ u_k^{(1)}((k-1)\tau) &= \omega_s((k-1)\tau),\end{aligned}\tag{62}$$

$$\begin{aligned}\frac{du_k^{(2)}(t)}{dt} &= Bu_k^{(2)}(t), t \in ((k-1)\tau, k\tau] \\ u_k^{(2)}((k-1)\tau) &= \omega_s((k-1)\tau),\end{aligned}\tag{63}$$

$$\omega_s(k\tau) = u_k^{(1)}(k\tau) + u_k^{(2)}(k\tau) - \omega_s((k-1)\tau),\tag{64}$$

ahol $k = 1, 2, \dots, n$, és $\omega_s(0) = u_0$.

A séma nagyban hasonlít a szekvenciális szeletelésre, azonban egy lényeges dologban mégis különbözik tőle, nevezetesen, hogy a kezdeti feltételt mindkét részfeladat esetén az előző lépésben kapott szeletelt megoldás adja. Az *additív* elnevezés a módszer lényegéből adódik: azonos kezdeti feltételből kiindulva megoldjuk mindkét részfeladatot, majd a kapott megoldásokat összeadva, és ebből a kezdeti feltételt kivonva kapjuk a szeletelt megoldást. Innen látható, hogy a két részfeladat egy lépésen belül nem hat egymásra, egymástól függetlenek. Ez ennek az eljárásnak az egyik előnye, mert ezáltal operátor szinten párhuzamosítható.

6.2. Alkalmazás reakció-diffúziós feladaton

A továbbiakban a fent említett két szeletelési eljárást alkalmazzuk az aktív Richardson-extrapolációval kombinálva (ennek leírása a *II. Mellékletben* található) egy reakció-diffúziós feladaton. Ez a térben egydimenziós parciális differenciálegyenlet-rendszer betekintést enged abba, hogy stiff rendszereknél hogyan működnek ezek a módszerek, tanulmányozhatjuk a sémák pontosságát. Elsősorban az érdekel minket, hogy a rendszer merevsége mennyire befolyásolja a hiba nagyságát.

Az általunk vizsgált tesztfeladatot az alábbi egyenletrendszer írja le (*Hundsdofer and Portero, 2006*):

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= D_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - k_1 u + k_2 v + s_1(x), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= D_2 \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + k_1 u - k_2 v + s_2(x), \end{aligned} \right\} \quad (65)$$

ahol $0 < x < 1$, és $0 \leq T \leq \frac{1}{2}$. Itt D_1 és D_2 jelöli a diffúziós együtthatókat. A reakciósebességi állandók k_1 és k_2 , valamint a rendszerben megjelenő forrástagokat s_1 és s_2 jelöli. A kezdeti és peremfeltételek a rendszerben a következők:

$$\left\{ \begin{aligned} u(x,0) &= 1 + \sin\left(\frac{1}{2}\pi x\right), \\ v(x,0) &= \frac{k_1}{k_2} u(x,0). \end{aligned} \right. \quad (66)$$

$$\left\{ \begin{aligned} u(0,t) &= 1, \\ v(0,t) &= \frac{k_1}{k_2}, \\ \frac{\partial u}{\partial x}(1,t) &= \frac{\partial v}{\partial x}(1,t) = 0. \end{aligned} \right. \quad (67)$$

$$D_1 = 0,1; \quad D_2 = 0; \quad s_1(x) \equiv 1; \quad s_2(x) \equiv 0; \quad k_1 = 1.$$

A másik reakciósebességi állandó értékét többféleképpen választottuk meg, ahogyan arról a későbbiekben részletesen szó lesz.

A feladatot először (hagyományos módon) térben diszkretizáljuk, így időfüggő közönséges differenciálegyenlet-rendszert nyerünk. Ez utóbbira alkalmazzuk a szeletelési eljárásokat és a Richardson-extrapolációt.

A feladat egyik érdekes tulajdonsága, hogy a k_2 reakciósebességi állandó megfelelő beállításával a feladat stiffnesse szabályozható. A diffúziós operátor térbeli diszkretizációja megfelelően kis térbeli lépésköz esetén szintén merevvé teszi a feladatot. A vizsgálatok során a referenciamegoldást a MATLAB-ba beépített ode45 függvénnyel kapott numerikus megoldás szolgáltatja, melynek pontosságát 10^{-14} -re állítottuk be, tehát maximalizáltuk. A továbbiakban ehhez viszonyítva tanulmányozzuk az egyes szeletelési eljárások, ill. azok Richardson-extrapoláltjainak a globális hibáját. A szeletelés során a kiválasztott numerikus séma, amellyel a részfeladatokat megoldjuk, az implicit Euler-módszer, hiszen korábban láttuk, hogy ennek a stabilitási tulajdonságai megfelelőek. Elvárásunk, hogy a két elsőrendű operátorszeletelő módszer az aktív Richardson-extrapolációval kombinálva rendnövekedést mutasson, így másodrendben konvergens legyen.

A rendvizsgálat során először úgy teszteltük az extrapolációs módszer viselkedését a modellben, hogy az egyenletrendszer a már fent említett konstansok értékeinek beállítását követően nemstiff rendszert alkosson, majd úgy, hogy ezek meghatározott értékeivel az egyenletrendszert stiffé tettük. A fejezet további részében az így kapott eredményeink bemutatásával foglalkozunk.

6.2.1. A nemstiff rendszerben kapott eredmények

A (65)-(67) feladatot megoldottuk két elsőrendű operátorszeletelő módszerrel, az additív és szekvenciális szeleteléssel, ill. ezek aktív Richardson-extrapoláltjával. A feladatban $k_2 = 1$ és $N = 5$ megválasztásával (N jelöli a térbeli rácspontok számát) biztosítjuk, hogy az egyenletrendszer ne alkosson merev rendszert. Az így kapott eredményeinket a 13. táblázat mutatja.

13. táblázat. Az additív és a szekvenciális szeletelés RD operátorsorrendben vett változatának, ill. azok aktív Richardson-extrapoláltjainak abszolút hibái a lépésköz függvényében.

τ	Additív	Additív + Riex	Szekv. RD	Szekv. RD + Riex
1/10	2,32E-02	2,55E-03	1,90E-02	1,19E-03
1/20	1,27E-02	7,65E-04	9,84E-03	3,69E-04
1/40	6,62E-03	2,13E-04	5,01E-03	1,05E-04
1/80	3,39E-03	5,67E-05	2,53E-03	2,80E-05
1/160	1,71E-03	1,46E-05	1,27E-03	7,27E-06
1/320	8,62E-04	3,72E-06	6,37E-04	1,85E-06
1/640	4,32E-04	9,39E-07	3,19E-04	4,68E-07
1/1280	2,16E-04	2,36E-07	1,60E-04	1,18E-07
1/2560	1,08E-04	5,91E-08	7,98E-05	2,95E-08
1/5120	5,42E-05	1,48E-08	3,99E-05	7,37E-09

Látható, hogy mindkét esetben a Richardson-extrapolált már a legnagyobb lépésköz esetén is legalább egy nagyságrendben pontosabb, mint az eredeti operátorszeletelési eljárás. A legkisebb általunk vizsgált lépésközt tekintve elmondhatjuk, hogy a Richardson-extrapoláció három nagyságrenddel jobb a mögöttes módszernél az additív szeletelést tekintve, és négy nagyságrenddel a szekvenciális szeletelés esetében, az általunk vizsgált operátorsorrendben. Egyértelműen látszik, hogy minden esetben pontosabb módszert nyerünk a Richardson-extrapolációt használva.

14. táblázat. Az abszolút hibák arányai (az adott sor lépésközével kapott hiba osztva a fölötte lévő sor lépésközével kapott hibával) az additív és a szekvenciális RD szeletelésre, ill. azok aktív Richardson-extrapoláltjaira. – nemstiff eset.

τ	Additív	Additív + Riex	Szekv. RD	Szekv. RD + Riex
1/10				
1/20	0,5450	0,2998	0,5182	0,3097
1/40	0,5231	0,2788	0,5094	0,2835
1/80	0,5117	0,2658	0,5048	0,2680
1/160	0,5059	0,2583	0,5024	0,2594
1/320	0,5030	0,2543	0,5012	0,2548
1/640	0,5015	0,2522	0,5006	0,2524
1/1280	0,5007	0,2511	0,5003	0,2512
1/2560	0,5004	0,2505	0,5002	0,2506
1/5120	0,5002	0,2504	0,5001	0,2502

A 14. táblázatban azt láthatjuk, hogy az abszolút hibák hányad részükre csökkennek, miközben a lépésközt a felére csökkentjük. Ebből következtethetünk az egyes módszerek konvergenciasebességére. Ezek alapján a kombinált módszereket szemlélve megállapítható, hogy a vizsgált nemstiff rendszerben mindegyik séma másodrendben konvergens. Így kijelenthetjük, hogy ebben a feladatban érdemes a Richardson-extrapolációval kombinált módszereket használnunk, hiszen jóval pontosabbak, és a konvergenciasebességük is nagyobb, mint a mögöttes módszereké.

6.2.2. Eredményeink a stiffnek választott rendszerben

A (65)-(67) egyenletrendszer egy stiff beállítása az az eset, amikor $k_2 = 10^4$, és a térbeli rácspontok számát 100-ra növeljük. Mivel stiff rendszerről beszélünk, ezért körültekintően kell eljárunk a numerikus módszer megválasztásánál.

Az alábbi táblázatban az abszolút hibákat láthatjuk a négy általunk vizsgált esetben. Ugyanúgy, mint a nem merev rendszernél, itt is a Richardson-extrapoláltak rögtön a legnagyobb lépésköz esetén már legalább egy nagyságrenddel pontosabbak, mint a mögöttes operátorszeletelési eljárások. A maximális pontosság nagyságrendileg is egyező a nemstiff rendszerbeli értékkel, ha a szekvenciális szeletelés RD operátorsorrendjét (először a reakciós, majd a diffúziós operátorral hatunk a függvényre) alkalmazzuk Richardson-extrapolációval. Viszont a másik extrapolált módszerünk nem éri el azt a maximális pontosságot, mint az előző feladatban – két-három nagyságrenddel felette marad.

15. táblázat. Az additív és a szekvenciális szeletelés RD operátorsorrendben vett változatának, ill. azok aktív Richardson-extrapoláltjainak abszolút hibái a lépésköz függvényében.

τ	Additív	Additív + Riex	Szekv. RD	Szekv. RD + Riex
1/10	9,67E-02	7,06E-03	1,08E-02	5,87E-04
1/20	4,84E-02	3,67E-03	5,58E-03	1,78E-04
1/40	2,42E-02	1,86E-03	2,83E-03	4,99E-05
1/80	1,21E-02	9,21E-04	1,43E-03	1,33E-05
1/160	6,05E-03	4,59E-04	7,16E-04	3,45E-06
1/320	3,03E-03	2,21E-04	3,58E-04	8,80E-07
1/640	1,51E-03	1,08E-04	1,79E-04	2,25E-07
1/1280	7,57E-04	4,71E-05	8,97E-05	5,85E-08
1/2560	3,78E-04	1,80E-05	4,49E-05	1,59E-08
1/5120	1,89E-04	6,10E-06	2,22E-05	4,57E-09

A 16. táblázatból kimutatható, hogy az RD sorrendben vett elsőrendű szekvenciális szeletelés Richardson-extrapoláltjával másodrendben konvergens módszert nyerünk. Ugyanezt nem mondhatjuk el a DR sorrendben vett Richardson-extrapoláltról, ami elsőrendű konvergenciát mutat, ezért csak a jobb eredményt adó szeleteléssel foglalkozunk. Innen is látszik, hogy nem mindegy, hogy a szeletelés során milyen sorrendben hatunk a részoperátorokkal a függvényre. Az aktív Richardson-

extrapolációval kombinált additív szeletelés nem viselkedik elvárásainknak megfelelően, továbbra is elsőrendű, akárcsak a mögöttes módszer, viszont a vizsgált időlépcsők mellett legalább egy, legfeljebb négy nagyságrenddel pontosabb eredményt ad, mint a mögöttes módszer. Ezek alapján elmondhatjuk, hogy ebben a stiff rendszerben csak egy extrapolált séma másodrendben konvergens, ellentétben a nemmerev rendszerben tapasztaltakkal.

16. táblázat. Az abszolút hibák arányai (az adott sor lépésközével kapott hiba osztva a fölötte lévő sor lépésközével kapott hibával) az additív és a szekvenciális RD szeletelésre, ill. azok aktív Richardson-extrapoláltjaira – stiff eset.

τ	Additív	Additív + Riex	Szekv. RD	Szekv. RD + Riex
1/10				
1/20	0,5005	0,5201	0,5150	0,3031
1/40	0,5003	0,5056	0,5075	0,2804
1/80	0,5001	0,4956	0,5038	0,2667
1/160	0,5001	0,4981	0,5019	0,2590
1/320	0,5000	0,4828	0,5009	0,2554
1/640	0,5000	0,4888	0,5005	0,2554
1/1280	0,5000	0,4348	0,5002	0,2600
1/2560	0,5000	0,3829	0,5001	0,2712
1/5120	0,5000	0,3384	0,4957	0,2880

A fenti jellemzőkből megállapíthatjuk, hogy habár a várt konvergenciát nem mutatja a módszer, de minden esetben pontosabb, mint a mögöttes numerikus sémák. Viszont mivel konvergenciasebessége nem éri el a várt mértéket, valószínűleg nem éri meg alkalmazni a stiff modellfeladatokon ezekkel az időintegrálási módszerekkel, ugyanis nem költséghatékony. Jóval több számítást kell elvégezni, ami jelentősen növeli a futtatás idejét, ill. költségeit.

Összességében kijelenthetjük, hogy mindkét típusú modellfeladatban az operátorszeletelést kombinálva az aktív Richardson-extrapolációval jóval pontosabb módszert kaptunk, mint maguk az operátorszeletelési eljárások voltak. Mindezek mellett fontos eredmény az, hogy stiff feladatok esetén az általunk vizsgált additív szeletelés Richardson-extrapoláltját nem érdemes használnunk, mert nem mutatja a várt konvergenciasebességet, viszont jóval költségesebb az alkalmazása, mint extrapoláció nélkül. A stiff feladatban az is egyértelműen kiderült, hogy a szekvenciális szeletelésnél nagyon fontos a részoperátorok sorrendje a műveletek végrehajtása során.

Nemstiff rendszerekre alkalmazva módszereinket, mindkét szeletelési eljárás Richardson-extrapoláltja a várt konvergenciasebességet mutatja, nagy pontosság mellett, emiatt kifizetődő az alkalmazásuk.

7. Összefoglalás

Célunk volt bebizonyítani és megmutatni meteorológiai példán is, hogy érdemes a Richardson-extrapolációt alkalmazni a meteorológia területén. Noha az eredeti ötlet L. F. Richardson meteorológustól származik, eddig előnyeire a tudományterületen belül még nem figyeltek fel. Ezért meg szeretnénk volna mutatni, hogy egy költséghatékony, és a mögöttes numerikus séma pontosságát növelő módszerrel állunk szemben. Gyakorta előfordul, hogy egy adott időlépcsőre megoldva a problémát nem kapunk kielégítő pontosságú eredményt. Ilyenkor mindenképpen el kell végezni a számításokat még egyszer, egy finomabb lépésközre is. Újdonságot jelent ilyen szempontból, hogy a Richardson-extrapoláció alkalmazásával nem kell figyelmen kívül hagynunk a nem megfelelően pontos eredményt, hanem azt felhasználva még a finomabb lépésközzel kapott megoldásnál is pontosabbat nyerhetünk, még hozzá a passzív Richardson-extrapoláció esetén lényegében ugyanannyi számítás mellett. Ennek a közelítő megoldásnak a konvergenciarendje egy renddel nagyobb, mint a mögöttes numerikus módszeré. Az aktív Richardson-extrapoláció alkalmazásakor minden időrétegen kombináljuk a két különböző lépésközzel kapott megoldást, így költségesebb módszer, mint a passzív Richardson-extrapoláció. Ráadásul itt a mögöttes módszer stabilitása nem garancia az extrapolációval kapott megoldás stabilitására.

Megmutattuk egy közöséges differenciálegyenlet-rendszer példáján, hogy Richardson módszerét alkalmazva valóban növekszik a rend, sőt, a középponti módszert vizsgálva azt tapasztaltuk, hogy annak két renddel növekedett a konvergenciája. Így a passzív Richardson-extrapolációval a vártnál pontosabb megoldást nyertünk.

Annak illusztrálására, hogy meteorológiai problémáknál is érdemes bevezetni ennek a módszernek a használatát, egy egyszerűsített globális széndioxid-modellen is elvégeztük a vizsgálatainkat. Azt tapasztaltuk mindkét változat esetén, hogy az explicit Euler- és implicit Euler-módszert alkalmazva egy renddel növekedett a konvergenciasebesség, és az abszolút hibák is kisebbek lettek minden lépésközre. Meglepő eredmény mutatkozott a középponti módszer Richardson-extrapoláltját tekintve, ugyanis azt tapasztaltuk, hogy már a legnagyobb lépésköznél is a referenciamegoldás pontosságához közeli eredményeket kapunk. Az első lépésközváltásnál negyedrendű konvergenciát tapasztalunk, majd ahogy közelítünk a referenciamegoldás pontosságához, egyre csökken a rend.

Összességében tehát megállapíthatjuk, hogy a passzív Richardson-extrapoláció alkalmas módszernek kínálkozik megoldásunk pontosságának növeléséhez, és mindezt igen költséghatékony módon teszi. Az aktív Richardson-extrapoláció a passzíval nagyságrendben azonos pontosságú eredményeket ad ebben a modellben, így a jóval több szükséges számítás miatt nem költséghatékony.

A szükséges stabilitásvizsgálatot elvégeztük az aktív Richardson-extrapoláció és az általunk vizsgált numerikus módszerek kombinációjára. Azt tapasztaltuk, hogy az explicit Euler-módszer Richardson-extrapoláltja feltételesen stabil, csakúgy, mint a középponti módszer extrapoláltja, míg az implicit Euler-módszer esetében feltétel nélkül stabil módszerhez jutunk.

Ezt követően egy másik modelfeladaton – egy reakció-diffúziós egyenletrendszeren – tanulmányoztuk az egyik eddig vizsgált módszer, az implicit Euler-módszer operátorszeleteléssel kombinált aktív Richardson-extrapoláltjának a viselkedését. Két eset képezte vizsgálat tárgyát, az elsőben nemstiff, a másodikban pedig stiff egyenletrendszert oldottunk meg. Azt tapasztaltuk, hogy nemmerev feladaton kifizetődő az általunk beprogramozott operátorszeletelő eljárásokat alkalmazni, ellenben a merev feladat megoldására az additív szeletelés extrapoláltja nem költséghatékony, ugyanis az elméletből következő magasabbrendű konvergenciát reális lépésköz választása esetén nem tudtuk elérni.

Összefoglalva, munkánkban megmutattuk, hogy a Richardson-extrapoláció alkalmazása ígéretesnek tűnik a meteorológia területén, ahol különösen nagy a számításigény egyébként is, hiszen a klímakutatásban és az időjárás-előrejelzésben igen nagy számú időrétegre és térbeli rácspontra számítjuk ki több változó közelítő értékét. Ehhez kellően pontos, és ugyanakkor hatékony numerikus módszerekre van szükségünk. A pontosság növeléséhez többnyire az időlépcső finomítását alkalmazzák, ami tovább növeli a számításigényt, és ezzel a költségeket is. Munkánkban egy olyan eljárást mutattunk be, amely lehetővé teszi, hogy mindezen költségek elkerülése mellett is elérhető legyen a pontosabb megoldás.

További célkitűzések

A továbbiakban szeretnénk megvizsgálni a passzív Richardson-extrapoláció működését a bemutatott reakció-diffúziós feladaton, valamint a különböző szelelési módszerekkel kombinált aktív Richardson-extrapoláció viselkedését a sekélyvízi egyenletrendszeren. Érdekes lehet továbbá a Richardson-extrapoláció alkalmazása parciális differenciálegyenlet-rendszerek megoldására olyan módon, hogy nemcsak az időbeli, hanem a térbeli diszkretizáció során is extrapolációt végzünk (*Burg and Erwin, 2009*).

Felhasznált irodalom

Bjørhus, M.: Operator splitting for abstract Cauchy-problems, *IMA Journal of Numerical Analysis*, **18** (1998), pp.419-443.

Brajnovits, B. és Kelemen, F.: Egy egyszerűsített globális széndioxid-modell numerikus vizsgálata, *OTDK-dolgozat* (2009)

Burg, C., Erwin, T., Applications of Richardson Extrapolation to the Numerical Solution of Partial Differential Equations. *Numerical Methods for Partial Differential Equations* **25** (2009), 810-832.

Caldeira, K. and Wickett, M.E.: Anthropogenic Carbon and Ocean pH, *Nature*, Vol. **425** (2003), p. 365.

Csomós, P., Faragó, I. és Havasi, Á.: Weighted sequential splittings and their analysis, *Comput. Math. Appl.*, **50** (2005), pp. 1017-1031.

Dahlquist, G.: A special stability problem for linear multistep methods, *BIT* **3** (1963), pp. 27-43.

Doney, S.C.: The Dangers of Ocean Acidification, *Scientific American*, **294** (2006), pp. 58-65.

Elowitz, J., Numerical solutions to partial differential equations and extrapolation techniques, 2009, személyes közlés.

Faragó, I., Gndt, B. és Havasi, Á.: Additive and iterative methods and their numerical investigation, *Computers and Mathematics with Applications*, **55** (2008), pp. 2266-2279.

Faragó, I., Havasi, Á. és Zlatev, Z.: Richardson-extrapolated sequential splitting and its application, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **226** (2009), pp. 218-227.

Faragó, I. és Havasi, Á.: Operator splitting and their Applications, Mathematics Research Development Series, Nova Science Publishers, Inc., New York (2009), 108 p.

Faragó, I., Havasi, Á. és Zlatev, Z.: Efficient implementation of stable Richardson Extrapolation algorithms, *Computers and Mathematics with Applications*, **60** (2010), pp. 2309-2325.

Gndt, B., A new operator splitting method and its numerical investigation, NATO Science Series IV. Earth and Environmental Sciences, **54**, Faragó, I., Georgiev, K. and Havasi, Á. (eds.) (2005), pp. 229-241.

Gndt, B.: Additív és iteratív operátorszeletelési módszerek meteorológiai alkalmazásokkal, *diplomamunka*, Budapest (2006), 61 p.

Griffiths, G.W., McHugh, A.J. and Schiesser, W.E.: An Introductory Global CO₂ Model, Internal report, City University, London, UK, Lehigh University, USA, University of Pennsylvania, (2008), 43 p.

Havasi, Á., Bartholy, J. és Faragó, I.: Splitting method and its application in air pollution modeling, *Időjárás*, **105** (2001), pp. 39-58.

Hoegh-Guldberg, O., Coral Reefs under Climate Change and Ocean Acidification, *Science*, Vol. **319** (2008), p. 1729.

Hundsdoerfer, W., Verwer, J. G., A note on splitting errors for advection-reaction equations, *Appl. Numer. Math.* **18** (1994) 191-199.

Hundsdoerfer, W., Verwer, J.G.: Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations, Springer Series in Computational Mathematics Vol. 33, Springer-Verlag, Berlin, (2003), 471 p.

Kelemen, F., Számítógépes modell a légköri szén-dioxid-mennyiség hosszú távú változásainak vizsgálatára, *szakdolgozat*, (2009), p 37.

Krüzseli, I.: Egydimenziós végesesemes módszerek alkalmazása advekciós feladatokra, *diplomamunka*, (2009), p. 59.

Lambert, J. D.: Numerical Methods for Ordinary Differential Equations, Wiley, New York, (1991), 304 p.

Richardson, L. F.: The deferred approach to the limit, I – Single lattice, *Philosophical Transactions of the Royal Society*, London, Ser. A, Vol. **226** (1927), pp. 299-349.

Sportisse, B., An analysis of operator splitting techniques in the stiff case, *CERMICS Report* (1998) 98-127.

Verwer, J. G. , Sportisse, B., A note on operator splitting in a stiff linear case, MAS-R9830, CWI (1998).

Zlatev, Z., Faragó, I. és Havasi, Á.: Stability of the Richardson Extrapolation applied together with the θ -method, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **235** (2010), pp. 507-517.

Mellékletek

I. Melléklet

A K együttható kiszámítása egy speciális esetben

Az alábbiakban az explicit Euler-módszerrel kombinált Richardson-extrapoláció esetén megnézzük, hogyan adható meg a K együttható a (2) képletben.

Belátandó, hogy

$$u(t^*) = y_\tau(t^*) + K(t^*)\tau^p + O(\tau^{p+1}), \quad (68)$$

ahol $t^* := n \cdot \tau$, és feladatunk az $K(t^*)$ meghatározása. Az egyszerűség kedvéért ezt csak a közönséges differenciálegyenlet-megoldó módszerek gyakran használt teszfeladatára, az

$$\begin{cases} u' = \lambda u, & t > 0 \\ u(0) = u_0 \end{cases}, \quad (69)$$

feladatra vezetjük le. Ekkor az explicit Euler-módszerrel kapott numerikus megoldás a következő alakot ölti:

$$y_\tau(t^*) = (1 + \lambda\tau)^n \cdot u_0, \quad (70)$$

míg a pontos megoldás

$$u(t^*) = \exp(\lambda t^*) u_0 = \exp(\lambda n \tau) \cdot u_0. \quad (71)$$

A pontos és a numerikus megoldást felírjuk τ egyre növekvő hatványainak összegeként, $u(t^*)$ -ot az exponenciális függvény Taylor-sora, $y_\tau(t^*)$ -ot a binomiális tétel segítségével. Ezután képezzük az $u(t^*) - y_\tau(t^*)$ különbséget.

$$\blacksquare \quad u(t^*) = u_0 e^{\lambda t^*} \quad (72)$$

$$u(0) = u_0 \quad (73)$$

$$u(t^*) = u_0 + \lambda u_0 t^* + \frac{\lambda^2 u_0 t^{*2}}{2!} = u_0 + \lambda n \tau u_0 + \frac{1}{2} \lambda^2 n^2 \tau^2 + O(\tau^3) \quad (74)$$

$$\blacksquare \quad y_\tau(t^*) = (1 + \lambda\tau)^n \cdot u_0 \quad (75)$$

$$y_\tau(t^*) = u_0 \cdot 1^n + u_0 \cdot \binom{n}{1} \cdot \lambda\tau + u_0 \cdot \underbrace{\binom{n}{2}}_{\frac{n(n-1)}{2!}} \cdot 1^{n-1} (\lambda\tau)^2 + O(\tau^3) \quad (76)$$

Így képezve a (16)-(18) különbséget,

$$u(t^*) - y_\tau(t^*) = \frac{u_0 \lambda^2 t^*}{2} \tau + O(\tau^2), \quad (77)$$

azaz valóban fennáll a (10) képlet $p = 1$ és

$$K(t^*) = \frac{u_0 \lambda^2 t^*}{2} \quad (78)$$

mellett.

II. Melléklet

Tegyük fel, hogy a Cauchy-feladat megoldása során alkalmazandó operátort két részoperátor összegeként írjuk fel, ezek legyenek A és B . Jelöljük az A részoperátorral kapott megoldást a $[t_n, t_n + \tau]$ intervallumon $S_1(t_n, \tau)$ -val, és $S_2(t_n, \tau)$ -val a B részoperátorral kapott eredményt ugyanezen az intervallumon. Megjegyezzük, hogy $S_1(t_n, \tau)$ és $S_2(t_n, \tau)$ megegyezhetnek az alproblémák pontos megoldásoperátorával (Bjørhus, 1998), ill. lehetnek a numerikus megoldások operátorai, hogyha ezeket a részfeladatokat numerikusan oldjuk meg (Faragó és Havasi, 2009). A továbbiakban az általunk vizsgált két szeletelési eljárást, a szekvenciális, ill. az additív szeletelés képletét, majd ezek aktív Richardson-extrapolációval vett kombinációját mutatjuk be adott t_{n+1} időrétegre.

A szekvenciális szeletelés esetében jelölje az operátorszeletelés során kapott megoldást a t_n időrétegen $y_{seq}(t_n)$. Ekkor

$$y_{seq}(t_{n+1}) = S_2(t_n, \tau)S_1(t_n, \tau)y_{seq}(t_n) \quad (79)$$

a következő időrétegen kapott megoldás.

Az additív szeletelésnél a t_n időrétegen kapott numerikus megoldást $y_{add}(t_n)$ -nel jelölve a következő időrétegre számított megoldás alakja

$$y_{add}(t_{n+1}) = (S_2(t_n, \tau) + S_1(t_n, \tau) - I)y_{add}(t_n), \quad (80)$$

ahol I az identitásoperátor.

A fenti szeletelések Richardson-extrapoláltjait rendre az alábbi képletek jelölik:

$$y_{Ri_seq}(t_{n+1}) = \left\{ -S_2(t_n, \tau)S_1(t_n, \tau) + 2(S_2(t_n, \tau/2)S_1(t_n, \tau/2))^2 \right\} y_{Ri_seq}(t_n) \quad (81)$$

a szekvenciális szeletelés Richardson-extrapoláltja esetén, és

$$y_{Ri_add}(t_{n+1}) = \left\{ -(S_2(t_n, \tau) + S_1(t_n, \tau) - I) + 2(S_2(t_n, \tau/2) + S_1(t_n, \tau/2) - I)^2 \right\} y_{Ri_add}(t_n) \quad (82)$$

az additív szeletelést Richardson-extrapolációval kombinálva, lévén, hogy ezek elsőrendű módszerek ($c_1 = -1$, $c_2 = 2$). Így mindkét Richardson-extrapolált módszernél másodrendű konvergenciát várhatunk.

Felhívjuk a figyelmet arra, hogy a szekvenciális szeletelésnél az $S_1(t_n, \tau)$ és $S_2(t_n, \tau)$ részoperátorok fordított sorrendben is alkalmazhatók, így értelemszerűen egy más numerikus megoldást szolgáltatva.

Köszönetnyilvánítás

Szeretnék köszönetet mondani témavezetőmnek, dr. Havasi Ágnesnek a sok segítségért, és dr. Faragó Istvánnak a tanácsokért, javaslatokért.