

Szakdolgozat
Földtudományi alapszak
Meteorológus szakirány

A sekélyvízi egyenletrendszer megoldása a Magnus-módszerrel



Készítette: Farkas Rita

Témavezetők: dr. Csomós Petra

MTA-ELTE Numerikus Analízis és Nagy Hálózatok Kutatócsoport
dr. Havasi Ágnes

ELTE Alkalmazott Analízis és Számításmatematikai Tanszék

Tanszéki konzulens: dr. Breuer Hajnalka

ELTE Meteorológiai Tanszék

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Földrajz- és Földtudományi Intézet
Meteorológiai Tanszék

Budapest, 2015

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	3
2. Irodalmi áttekintés	4
3. A sekélyvízi egyenletrendszer	8
3.1. A mozgásegyenletek	8
3.1.1. Kontinuitás	9
3.1.2. Sztatika	9
3.1.3. Az Euler-egyenletek	10
4. A Magnus-módszer	12
5. A mátrixexponenciális számítási módjai	15
6. Eredmények	16
6.1. Kisméretű mátrix	16
6.2. Hővezetés	17
6.3. Advekción egyenlet	22
7. 1D lineáris sekélyfolyadék-egyenletek	29
8. 1D nemlineális sekélyfolyadék-egyenletek	35
9. Összefoglalás	38
10. Irodalomjegyzék	40

1. Bevezetés

Az időjárás-előrejelzési modellek használatához és ezáltal az előrejelzés elkészítéséhez nélkülözhetetlen ismernünk a légkörben fellépő hidro-termodinamikai folyamatokat, kölcsönhatásokat. A kezdeti mező ismeretében a fizikai összefüggések alapján felállíthatjuk azokat a matematikai egyenleteket, amelyek segítségével számszerűsíthető a rendszer, meghatározható az időbeli fejlődés. Természetesen a légköri folyamatok nem mindig az előrejelzett módon változnak az idővel, de nagyon fontos a kiindulási feladat pontos definiálása (*Weidinger et al.*, 2013, chap. 13.). A dolgozatban elsőként megmutatjuk, hogy az ismert fizikai törvényeket használva hogyan jutunk el a sekélyfolyadék-egyenletekhez. A légkör horizontális kiterjedése jóval nagyobb, mint a magassága, ezért – és más, a dolgozatban felsorolt egyszerűsítő feltevések figyelembe vételével – jó közelítéssel a légkör is sekélyvíz rendszernek tekinthető. Az egyenletek jellemzik például az egész Földet körülölelő Rossby-hullámokat, amelyek alapvető szerepet játszanak a nagyskálájú folyamatok leírásában, a légköri kölcsönhatások alakításában. Tehát a sekélyvízi-egyenletrendszer leírja a prognosztika szempontjából fontos légköri, dinamikai folyamatokat, azonban matematikailag egy olyan parciális differenciálegyenletrendszer, melynek egzakt megoldását gyakorlatilag lehetetlen megadni, azonban különböző numerikus módszerekkel közelíthető (*Horányi et al.*, 1998).

Ilyen a Magnus-féle numerikus módszer is, melyet ismertetünk, továbbá rámutatunk, hogy a Magnus-módszer központi kérdése a mátrixexponenciális-vektor szorzat minél hatékonyabb kiszámítása. A gyakorlatban erre sajnos csak igen jó közelítés adható, ezt a MATLAB programrendszer segítségével kívánjuk előállítani. Egyszerűbb időfüggő differenciálegyenlet-rendszerre, majd a térfüggő hővezetési és advekción egyenletekre elvégezzük a megfelelő diszkretizációt. Adott kezdeti és peremfeltételek mellett, elsőrendű Magnus-féle numerikus módszert alkalmazva kétféleképpen, az `expm` és `expmv` függvények használatával megoldjuk az említett feladatokat, vizsgáljuk azok pontosságát és gyorsaságát.

Munkánk során rámutatunk az advekción és a sekélyfolyadék-egyenletek kapcsolatára, az `expm` és `expmv` függvények adott matematikai problémához kapcsolódó előnyeire és hátrányaira. A hővezetés másodrendű és az advekción elsőrendű parciális differenciálegyenletének numerikus közelítése során szerzett tapasztalatainkat felhasználjuk a sekélyvízi egyenletrendszer minél hatékonyabb megoldására. Az egydimenziós egyenlet-rendszert térben és időben diszkretizáljuk, majd elsőként a lineáris, ezt követően pedig a nemlineáris megoldást ismertetjük.

2. Irodalmi áttekintés

Az időjárás előrejelzése napjainkban egy olyan tudományos tevékenység, amely nagyban hozzájárul az ipari, gazdasági tevékenységekhez és a társadalmi jóléthez. A szakemberek célja, hogy a légkör pillanatnyi állapota által meghatározott kezdeti mezőből modellek futtatásával minél pontosabb információkat szolgáltatassanak a várható időjárásról. Szinte az összes használatban lévő előrejelző modell folyadékként közelíti a légkört, az itt zajló kis- és mezoskálájú folyamatok tehát leírhatók valamilyen folyadékdinamikai egyenlettel, ahogyan a nagyskálájú folyamatok is (*Belousov et al.*, 2009). Ilyen az időjárás egyik fontos befolyásolója, a globális Rossby-hullám is, amely jól közelíthető a sekélyfolyadék-egyenletekkel, útja és változása ezáltal az egyenletrendszer megoldásával szimulálható. Természetesen minél pontosabban le tudjuk írni egy ilyen légköri objektum tulajdonságait – horizontális méretét, karakterisztikus idejét, vagy akár a vertikális sebességét –, azaz minél pontosabb a szóban forgó szimuláció, az előrejelzésünk annál jobb lesz.

Számos kutató foglalkozott és foglalkozik jelenleg is a sekélyvízi egyenletrendszerrel, hiszen egy adott felület felett áramló folyadék jelensége egyike a tudósok és mérnökök által gyakran használt fizikai folyamatnak. Az említett meteorológiai vonatkozás mellett széles körben használják még az árhullámok, árapály jelenségek leírására, gátszakadás modellezésére is. Annak ellenére, hogy az áramló víz mindennapos jelenség, a mozgást leíró egyenletek túl bonyolultak a gyakorlati használathoz. Az egyszerűsítő feltevéseket alkalmazva kapott egyenletrendszer csak nagyon ritkán oldható meg pontosan, és még a numerikus közelítésekben is nehézségek adódhatnak, nem szólva az olyan gyakorlati akadályokról, mint például a változó domborzatú meder. Nagyon sok numerikus módszer születik, azonban kevés olyan van, amely megbízható minden típusú sekélyfolyadék-egyenletekre; egy erős és jó numerikus módszer úgy képes megoldani az egyenletrendszert, hogy figyelembe veszi a változó talajt, és minden más nehezítő körülményt is (*George*, 2004).

A kutatók körében a szóban forgó hiperbolikus egyenletek problémájára nagyon elterjedtek a Godunov- és a Riemann módszerek használatával alkotott numerikus megoldások. Népszerűségük oka lehet, hogy könnyen kezelhető velük több, a hiperbolikus tulajdonságaikból adódó akadály.

LeVeque (*LeVeque*, 2004) a Godunov-módszer nagy felbontású verzióit készítette el, ezzel olyan, a sekélyvízi egyenletrendszerhez hasonló egyenletek megoldásait vizsgálta, melyek leírják a hullámterjedés és transzport jelenségeket. Sémáit eredetileg a légkör-

ben is gyakran kialakuló lökéshullámok vizsgálatára készítette, de a módszerei használhatóak más hullámterjedési problémák leírására is. Jakeman szintén – másodrendű centrális upwind sémára épülő – Godunov-módszerrel, emellett másodrendű Runge-Kutta-módszerrel is megoldta az egydimenziós egyenletrendszer megoldását (*Jakeman, 2006*).

Több numerikus kísérlet irányult arra, hogy az egyenletrendszer mellett figyelembe vegyenek egy ún. forrástagot is, amely a különböző mederaljzat tulajdonságait hordozza magában. Ezáltal a folyadék nem egy teljesen homogén felszín felett áramlik, hanem például a lejtő vagy más domborzati viszonyok hatásai is megjelennek, a gyakorlati problémától függően. George egy olyan, Godunov típusú numerikus megoldást dolgozott ki, amely igen pozitív eredményeket ad nagyon sekély áramlás esetén, a meder figyelembevételével is (*George, 2004*).

A Godunov típusú módszerek előnyei mellé fontos megjegyeznünk egy hátrányukat is: nagy számításigényüket. Broomans kutatása során nagy hangsúlyt helyezett azon numerikus módszerek vizsgálatára, amelyekkel a memória és számításigény minimalizálható, emellett a megoldás pontossága növelhető (*Broomans, 2003*). A numerikus sémák célja tehát a minél pontosabb és gyorsabb megoldások szolgáltatása, ennek érdekében a Godunov mellett számos más módszerrel is próbálkoztak. Delis és Katsaounis (*Delis and Katsaounis, 2005*) relaxációs módszereket alkalmaztak. Ez a séma a klasszikus módszereket és a Runge-Kutta-módszer időlépcsőit ötvözi. Hatalmas előnye, hogy alkalmazása során semmilyen Riemann-féle megoldóképlet nem szükséges, számításigénye ezáltal lecsökken. A relaxációs mellett a véges különbséges módszerek is igen jónak bizonyulnak a sekélyvízi egyenletrendszer megoldására, azaz a hullám magasságának megadására és a sebesség meghatározására (*Crowhurst and Li, 2013; Hudson, 2009*). Ezen módszer használatának további előnye, hogy a rácsháló finomításával a megoldás folyamatosan javul, a hiba így minimálisra csökkenthető.

Az eddigiekben említett összes numerikus módszer a megoldás során horizontális lépésközöket alkalmazott, azonban felmerülhet a kérdés, hogy egy vertikális lépés beépíthető-e valamelyik numerikus modellbe, ezzel is javítva a megoldást. A felszíni gradiens módszer a medret lejtőnek tekinti és amennyiben a lejtő elég meredek, a módszer hasonlíthat a vertikális lépéssel való megoldásra. Zhou munkatársaival a valós vertikális lépés kezelése céljából kiterjesztette a felszíni gradiens módszert, ezzel egy újabb hatékony és stabil sémával bővítve a megoldások tárházát (*Zhou et al., 2002*).

Jelen dolgozat célja a halmaz kiegészítése egy újabb numerikus módszer, a Magnus-módszer vizsgálatával. A séma megoldásvektorát egy mátrixexponenciális és egy vek-

tor szorzatának közelítésével kapjuk. A megoldás integrátorok végtelen soraként áll elő, melynek minél több tagját tekintjük, annál bonyolultabb, de pontosabb sémát kapunk (*Magnus*, 1954). A Magnus-integrátorok megfelelően csonkolt változata időben szimmetrikus, továbbá több teszt eredményeként elmondható, hogy a megoldás képes önmagát stabillá tenni, ezáltal hatékonyabb séma például a Runge-Kutta-módszernél (*Iserles et al.*, 2001).

A Magnus-féle közelítést eredetileg matematikai problémák megoldására mutatták be, azonban Magnus munkájában leírja, hogy a módszer kvantummechanikában is használatos. A módszer előnye, hogy bármilyen rendű közelítést szeretnénk számolni attól függően, hogy milyen az adott fizikai vagy anyagi minőség, a pontos megoldást kapjuk meg (*Blanes et al.*, 2009). Az integrátorok konvergenciájának problémája Magnus eredeti cikkében elég homályosan kezelt, azonban erre több kutatást végeztek, az alacsonyabb és magasabb rendű sémákra egyaránt (*Pechukas and Light*, 1966; *Wei*, 1963; *Wei and Norman*, 1963; *Bátkai and Sikolya*, 2012). A Magnus-módszert a fizika sok területén alkalmazták, ilyen például a nukleáris- és az atomfizika is, de a numerikus eszközt a híres időfüggő Schrödinger-egyenletek megoldására is használták (*Chang and Light*, 1969; *Hochbruck and Lubich*, 2003). A Magnus-módszer az elektrodinamika területén is bizonyította hatékonyságát. Általa ismert egy olyan, másodrendben pontos, a Maxwell-egyenletek megoldására vonatkozó numerikus módszer, amely képes időfüggő anyagi paramétereket – permeabilitást és permittivitást – is kezelni (*Faragó et al.*, 2012).

A legtöbb kutatás célja a módszer működtetése és konvergenciájának vizsgálata az újabb és újabb egyenletekre (*Blanes et al.*, 1998; *Casas*, 2007). Annak ellenére, hogy a sémát eredetileg elsőrendű, közönséges differenciálegyenlet-rendszerek megoldására alkották, a megoldott feladatok halmaza idő közben folyamatosan szélesedett például Sturm-Liouville-problémák nemlineáris egyenleteivel is (*Blanes et al.*, 2009). A legfontosabb, hogy a módszer egy fontos eszköz a fizikusok számára, úton-útfélen bizonyítja, hogy sok jó tulajdonsága miatt érdemes a kutatás tárgyává tenni.

A Magnus-féle közelítés tehát egy olyan elegáns módszer, a mátrixexponenciális végtelen sorának újragondolásán és kiszámításán alapul. Egy mátrix exponenciálisa a gyakorlatban általában sokféleképpen kiszámítható. A különféle módszerek stabilitását és hatékonyságát összehasonlítva látjuk, hogy egyik sem tökéletes, csupán van, amelyik pontosabb, ezzel együtt van, amelyik bonyolultabb algoritmusokat használ a többinél. Moler és VanLoan összeszedték a gyakorlatban leggyakrabban alkalmazott tizenkilenc darab mátrixexponenciális számítási módot (*Moler and Van Loan*, 2004). Kiemelték:

az, hogy melyik módszer a legjobb, nagyban függ a kezelendő problémától. Az felsorolásukban megtalálható többek között a Taylor- és a Csebisev-féle közelítés, a Newton-vagy Lagrange-féle interpolációs eljárással számított exponenciális is, azonban nem szerepel az igen hatékony és új Al-Mohy és Higham féle expmv függvény (*Al-Mohy and Higham, 2011*). A módszer az átskálázó és a Taylor módszert ötvözi, stabilan működik problémák széles körére, ezen felül a számítási igényeket tekintve is jobbnak bizonyul, mint az említett tizenkilenc számítási mód.

Tekintsünk úgy a Magnus-módszerre, mint egy sok oldalú térbeli alakzatra. Jelentően minden oldala egy újabb, feltárásra kerülő alkalmazási lehetőséget. Láttuk, hogy megannyi gyors, stabil, tehát hatékony megoldást dolgoztak ki a séma használatával. Az elképzelt objektumunk további újabb oldala a másodrendű Magnus-integrátorok vizsgálata parabolikus parciális differenciálegyenletekre. González ennek kapcsán munkatársaival igazolta, hogy a kidolgozott módszerük, amely minden lépés során kétszer követeli meg a mátrixexponenciális számítást – ezzel is növelve a pontosságot – stabil és konvergens (*González et al., 2006*), és ez a konvergencia akár másodrendű is lehet (*González and Thalhammer, 2007*).

Ezen szakdolgozattal célunk újat fordítani képzeletbeli alakzatunkon, és a parabolikus kutatások után hiperbolikus parciális differenciálegyenlet-rendszerre, a sekélyfolyadék-egyenletekre tesztelni a Magnus-módszert.

3. A sekélyvízi egyenletrendszer

Elsőként megmutatjuk, hogy a sekélyvízi egyenletrendszer (shallow water equations) miként kapható meg a megfelelő fizikai és matematikai összefüggések felhasználásával (*Csomós and Winckler, 2014; Havasi, 2000*).

Tekintsünk egy $M \subset \mathbb{R}^2$ tartomány felett áramló folyadékot. Az áramlás közben egy tetszőleges $t \geq 0$ időpontban egy választott folyadékelem helyzetét a térben az $(x, y, z) \subset M \times [0, H] \subset \mathbb{R}^3$ irányvektor adja meg, ahol x a kelet-nyugati, y az észak-déli irányú komponens, z pedig az (x, y) -síkra merőleges, függőleges irányú komponens úgy, hogy $H > 0$ a folyadék legnagyobb magassága. A folyadék mozgását minden pontban meghatározzák az x, y, z irányú $u(t, x, y, z), v(t, x, y, z), w(t, x, y, z)$ sebességkomponensek. Ez a descartes-i jelölésrendszer használható a mozgásegyenletek leírására, amelyek különböző változóikban egyszerűsödnek, ha alkalmazzuk a következő feltevéseket.

- i. Az áramló folyadék horizontális kiterjedése jóval nagyobb, mint a magassága.
- ii. A folyadék összenyomhatatlan, sűrűsége egy trajektória mentén állandó.
- iii. A felső, szabad határfelület nyomása állandó.
- iv. A belső súrlódástól eltekintünk.
- v. A folyadék hidrosztatikus egyensúlyban van, azaz a gravitációs erő egyensúlyt tart a vertikális nyomási gradiens erővel.
- vi. A horizontális sebességkomponensek nem függenek a magasságtól.

Ezen egyszerűsítő feltevések mellett a légkör is sekélyfolyadék rendszernek tekinthető. A dolgozat további részeiben amennyiben ezek egyértelműek, eltekintünk a bevezetett függvények koordináta függéseitől.

3.1. A mozgásegyenletek

A sekélyfolyadék közelítés egyszerűsége miatt igen elterjedt, segítségével lehetőség nyílik többek között a légköri nagyskálájú folyamatok leírására is (*Weidinger et al., 2013*). Ahhoz, hogy a modellt a későbbiekben mi is használni tudjuk, megmutatjuk, hogyan jutunk el az egyenletrendszerig.

Alkalmazzuk a fent felsorolt egyszerűsítő feltételeket a mozgásegyenlet általános alakjára.

3.1.1. Kontinuitás

Zárt rendszerben a teljes folyadék mennyisége nem változik, érvényes tehát a kontinuitási egyenlet:

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) = 0, \quad (1)$$

ahol $\rho(t, x, y, z)$ a folyadék sűrűsége az (x, y, z) pontban, valamely t időpontban. Az egyenlet a (ii.) $\left(\frac{d\rho}{dt} = konst\right)$ feltétel miatt

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (2)$$

alakban írható fel. Fejezzük ki $\frac{\partial w}{\partial z}$ -t és integráljuk z szerint:

$$w(t, x, y, z) = -z \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right). \quad (3)$$

Jelölje $h = h(t, x, y)$ a folyadékréteg magasságát. Használjuk fel, hogy $z = h$ -ra (Nagy, 1985)

$$w(t, x, y, z) = -h \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right), \quad w(t, x, y, z) = \frac{\partial h}{\partial t} + u \frac{\partial h}{\partial x} + v \frac{\partial h}{\partial y}. \quad (4)$$

Innen a két egyenletet egyenlővé téve kapjuk a következőt:

$$-h \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = \frac{\partial h}{\partial t} + u \frac{\partial h}{\partial x} + v \frac{\partial h}{\partial y}. \quad (5)$$

Szorozzuk meg mindkét oldalt a g -vel, amely a gravitációs gyorsulás állandó értéke. Látható, hogy megjelenik a gh szorzat. Legyen $\Phi = \Phi(t, x, y) = gh(t, x, y)$ a szabad határfelület geopotenciálja. Ezt felhasználva, és az egyenlőséget egy oldalra rendezve jutunk el a

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} + v \frac{\partial \Phi}{\partial y} + \Phi \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = 0 \quad (6)$$

összefüggésig.

3.1.2. Sztatika

Tekintsük a (iii.) feltételt, miszerint a nyomás állandó, h a folyadék magassága. Ezek alapján:

$$p(t, x, y, h) = p_0, \quad (7)$$

a szabad határfelület nyomása, úgy, hogy a koordináta-rendszer $z = 0$ szintjét a folyadék felszínéhez rögzítjük. Az (v.) feltételből következik, hogy érvényes a sztatika alapegyenlete:

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g. \quad (8)$$

Ezt z szerint integrálva a

$$p(t, x, y, z) = -\rho g z + c(t, x, y) \quad (9)$$

egyenletet kapjuk, ahol $c(t, x, y)$ az integrációs állandó. Mivel z szerint integráltunk, jelenleg c független z -től. A (7), (9) összefüggések alapján látható, hogy:

$$-\rho g h + c(t, x, y) = p_0. \quad (10)$$

Ebből $c(t, x, y)$ -t kifejezve, és (9)-ba helyettesítve kapjuk a következő egyenletet:

$$p(t, x, y, z) = -\rho g z + p_0 + \rho g h = \rho g (h - z) + p_0. \quad (11)$$

A nyomás tehát a folyadék egy (x, y, z) pontjában egyenlő, a hidrosztatikai nyomás és a szabad határfelület nyomásának összegével. Differenciáljuk az imént kapott egyenletet x és y változók szerint, majd használjuk a (6)-ban is alkalmazott feltételt, így itt is megjelenik a már említett $\Phi(t, x, y)$ függvény.

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \rho g \frac{\partial h}{\partial x} = \rho \frac{\partial \Phi}{\partial x}, \quad (12)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = \rho g \frac{\partial h}{\partial y} = \rho \frac{\partial \Phi}{\partial y}. \quad (13)$$

3.1.3. Az Euler-egyenletek

Nincs más hátra, mint felhasználni az Euler-féle horizontális mozgásegyenletek ismert alakját (Czelnai et al., 1991):

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\mathbf{v} \nabla u - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + f v - \frac{1}{\rho} F_x, \quad (14)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -\mathbf{v} \nabla v - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} - f u - \frac{1}{\rho} F_y, \quad (15)$$

ahol $\mathbf{v} = (u, v, w)^\top$, F_x és F_y az F súrlódási erő x és y irányú komponensei, ezeket a tagokat a (iv.) feltétel miatt elhagyhatjuk. Az $f = 2\omega \sin \phi$ a Coriolis-paraméter, ahol ω jelöli a Föld forgási szögsebességét, ϕ pedig a földrajzi szélességet. Továbbá eltűnnek mindkét egyenletben a gradienst kifejezve kapott $w \frac{\partial u}{\partial z}$ és $w \frac{\partial v}{\partial z}$ tagok az u és v függvények z -től való függetlensége miatt ((vi.) feltétel). Rendezzük a tagokat egy oldalra, és helyettesítsük be a (12) összefüggéseket, így a horizontális mozgásegyenletek a következő alakra egyszerűsödnek:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial \Phi}{\partial x} - f v &= 0, \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial \Phi}{\partial y} + f u &= 0. \end{aligned} \quad (16)$$

Fejezzük ki (6), (16) egyenletekből $\frac{\partial h}{\partial t}$, $\frac{\partial u}{\partial t}$, $\frac{\partial v}{\partial t}$ deriváltakat.

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} = -u \frac{\partial h}{\partial x} - v \frac{\partial h}{\partial y} - h \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right), \\ \frac{\partial u}{\partial t} = -u \frac{\partial u}{\partial x} - v \frac{\partial u}{\partial y} - g \frac{\partial h}{\partial x} - fv, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = -u \frac{\partial v}{\partial x} - v \frac{\partial v}{\partial y} - g \frac{\partial h}{\partial y} + fu. \end{cases} \quad (17)$$

A kapott (17) rendszer egyenletei alkotják a sekélyvízi egyenletrendszert, amely egy elsőrendű nemlineáris parciális differenciálegyenlet-rendszer. A későbbi felhasználás miatt a geopotenciált ismét kifejeztük, így az egyenletrendszer ismeretlen függvényei $h(t, x, y)$, $u(t, x, y)$ és $v(t, x, y)$. A feladatot a $u_0(x, y)$, $v_0(x, y)$ és $h_0(x, y)$ kezdeti és megfelelő peremfeltételek mellett szeretnénk numerikusan megoldani az ún. Magnus-módszerrel.

4. A Magnus-módszer

A Magnus-féle numerikus módszer segítségével differenciálegyenlet-rendszerek megoldásait állíthatjuk elő, alkalmazását különböző példákon keresztül ismertetjük (*Magnus*, 1954).

Legyen a megoldandó Cauchy-feladat egy n db egyenletből álló lineáris differenciálegyenlet-rendszer a következő alakban:

$$\begin{cases} b'(t) = A(t)b(t) \\ b(0) = b_0. \end{cases} \quad (18)$$

Keressük az $b(t) = (b_1(t), b_2(t), \dots, b_n(t))$ függvényt, amely egy n komponensű vektorértékű függvény. Az A egy t -től függő $n \times n$ -es mátrix, és a kezdeti feltételben megadott b_0 egy \mathbb{R}^n -beli vektor. A probléma megoldása n értékétől függően több esetre bomlik.

1. Először tekintsük az $n = 1$ esetet, azaz A egy 1×1 -es mátrix, vagyis $A(t) = a$, $a \in \mathbb{R}$ szám, és tételezzük most fel, hogy ez az a szám nem függ t -től. A feladat ekkor

$$\begin{cases} b'(t) = ab(t) \\ b(0) = b_0 \end{cases} \quad (19)$$

alakban írható fel, mely igen egyszerűen megoldható. A keresett függvény az exponenciális, hiszen ez a függvény rendelkezik azzal a tulajdonsággal, hogy deriváltja önmaga (jelen esetben egy a valós számmal szorozva). Tehát $b(t) = e^{at}b_0$. Ellenőrizzük ezt: $b'(t) = ae^{at}(at)$, $b_0 = b(0) = e^{a \cdot 0}b_0 = e^0b_0 = b_0$.

2. A második esetben legyen $n > 1$, ekkor A már egy $n \times n$ -es mátrix, de tegyük fel újra, hogy elemei t -től független, adott számok.

Például $n = 2$ -re egy egyenletrendszer és a hozzá tartozó A mátrix:

$$\begin{cases} b'_1 = 4b_1 - b_2 \\ b'_2 = 5b_1 + 8b_2 \end{cases} \quad (20)$$
$$A = \begin{pmatrix} 4 & -1 \\ 5 & 8 \end{pmatrix}.$$

A megoldás – a példától eltekintve is – az első esethez hasonlóan az $b(t) = e^{tA}b_0$ alakban áll elő. Itt viszont az e^{tA} már nem egy szám, hanem egy $n \times n$ mátrix exponenciálisa. Egy mátrix exponenciálisán a következő végtelen összeget értjük:

$$e^A = I + A + \frac{1}{2!}A^2 + \frac{1}{3!}A^3 + \dots, \quad (21)$$

ahol I az $n \times n$ -es identitásmátrix. Ez alapján tehát a megoldásban szereplő e^{At} is felírható egy végtelen sor összegeként, mely összeg szintén egy $n \times n$ -es mátrix lesz.

$$e^{tA} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(tA)^k}{k!}. \quad (22)$$

Az A egy mátrix, normája tehát véges, ezért a (22) sornak létezik összege, melyet az A mátrix exponenciálisának nevezünk.

3. Az előző két esetben $a \in \mathbb{R}$ és $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ t -től függetlenek voltak. Vizsgáljuk most azt az esetet, amikor az A egy t -től függő mátrix. Ekkor a (18) feladat az alábbi alakban írható fel:

$$\begin{cases} b'(t) = A(t)b(t) \\ b(0) = b_0. \end{cases} \quad (23)$$

Az első két esetből kiindulva gondolhatnánk, hogy a megoldás újra előáll $b(t) = e^{tA(t)}b_0$ formában. 1954-ben Magnus foglalkozott azzal, hogy az exponenciális argumentumában lévő szorzatot, és ezáltal a keresett $b(t)$ függvényt hogyan közelíthetnénk (*Magnus*, 1954). Az általa kidolgozott és róla elnevezett Magnus-módszer lényege, hogy a (23) egyenletrendszer megoldását az

$$b(t) = e^{\Omega(t)}b_0 \quad (24)$$

alakban keressük, ahol $\Omega(t)$ egy t -től függő mátrix, amely előáll egy végtelen sor összegeként. Ez a Magnus-sorfejtés, melynek első néhány tagja (*Bátkai and Sikolya*, 2012):

$$\begin{aligned} \Omega(t) &= \int_0^t A(s_1)ds_1 - \frac{1}{2} \int_0^t \left[\int_0^{s_1} A(s_2)ds_2, A(s_1) \right] ds_1 \\ &+ \frac{1}{4} \int_0^t \left[\int_0^{s_1} \left[\int_0^{s_2} A(s_3)ds_3, A(s_2) \right] ds_2, A(s_1) \right] ds_1 \dots, \end{aligned} \quad (25)$$

ahol $[U, V] = UV - VU$ az U és V mátrix kommutátorát jelöli. Az $\Omega(t)$ mátrix tagjait ezen analógia szerint a végtelenig írhatnánk, és minél több tagot tartalmaz, annál bonyolultabb, de természetesen annál pontosabban is kapjuk meg a megoldás numerikus közelítését. Látjuk, hogy a végtelen sor az A mátrix integráljaiból és A különböző helyeken vett kommutátorainak integráljaiból áll. A második tagban $A(s_1), A(s_2)$ kommutátorát kell integrálnunk, vagyis az $A(s_1)A(s_2) - A(s_2)A(s_1)$ kifejezést, figyelembe véve, hogy egy mátrixot elemenként integrálunk. A Magnus-integrátorokat nem mindig szükségszerű az említett kommutátor-integrálással kifejeznünk, megadhatóak közelítő módszerekkel is, ahogy a dolgozat további részeiben is tesszük.

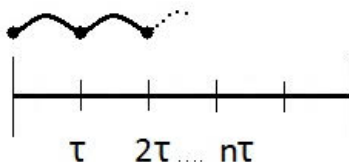
Keressük tehát az $\Omega(t)$ mátrix valamilyen egyszerűbb alakú közelítését. A Magnus-sorfejtés első tagjában szereplő integrált a középponti módszerrel közelítve az

$$\Omega(t) \approx t \cdot A\left(\frac{t}{2}\right) \quad (26)$$

közelítéshez jutunk. Ekkor

$$b(t) = e^{\Omega(t)} b_0 \approx e^{tA(\frac{t}{2})} b_0. \quad (27)$$

Osszuk fel a számegeyenesen a $[0, t]$ intervallumot $N \in \mathbb{N}$ darab $\tau = t/N$ hosszúságú lépésközre, így $n\tau$ az a hely, ahol n lépésszám után állunk (1. ábra).



1. ábra: A $[0, t]$ intervallum felosztása τ hosszúságú lépésközökkel.

Alkalmazzuk az n -edik részintervallumon is a középponti módszert. Ekkor a (23) feladat megoldásvektora felírható $b(n\tau) = e^{n\tau A(n\tau + \frac{\tau}{2})} b_0$ alakban, mely a hatványozás azonosságait felhasználva előáll $b(n\tau) = e^{\tau A(n\tau + \frac{\tau}{2})} b((n-1)\tau)$ formában. Legyen $b(n\tau) =: b_n$, ezt bevezetve az előzőek alapján felírható az y_{n+1} megoldásvektor is:

$$b_{n+1} = e^{\tau \cdot A(n\tau + \frac{\tau}{2})} b_n \quad n = 0, 1, 2 \dots \quad (28)$$

Ez a megoldásvektor elsőrendű Magnus-féle közelítés. Munkánk során alkalmaztuk még az eggyel bonyolultabb iterációs eljárást is. Ez először az $(n + \frac{1}{2})$ -edik lépésben számítja a megoldást, majd ezt használja az $(n+1)$ -edik lépés megoldásához, a következő módon:

$$\begin{cases} b_{n+\frac{1}{2}} = e^{\frac{1}{2}\tau \cdot A(n\tau + \frac{\tau}{2})} b_n \\ b_{n+1} = e^{\tau \cdot A(n\tau + \frac{\tau}{2})} b_{n+\frac{1}{2}} \end{cases} \quad n = 0, 1, 2 \dots \quad (29)$$

A numerikus megoldás egy olyan vektort eredményez, amely függ a τ lépésköztől. A (29) összefüggéshez megadunk egy b_0 kezdeti értéket, ebből számítjuk b_1, b_2, \dots, b_{n+1} megoldásvektorokat, ahol n értékét természetesen mi választjuk meg. Látható, hogy a számításaink során szükségünk van egy – az adott feladattól függő – mátrix exponenciálisának megadására, ezt követően pedig az exponenciális-vektor szorzat minél hatékonyabb kiszámítására, amely a gyakorlatban csak közelítéssel lehetséges.

A dolgozat további részeiben vizsgáljuk a Magnus-módszert. Egy numerikus közelítés akkor jó, ha konvergens, azaz kisebb τ lépésközökre (vagyis nagyobb n értékekre) a numerikus megoldás egyre közelebb kerül a pontos megoldáshoz. Példákon keresztül elemezzük a mátrixexponenciális számítási módjait kisméretű mátrixoktól egyre nagyobb méretűek felé haladva. Mindezt a MATLAB programrendszer segítségével tesszük, figyelemmel kísérve a pontosságon túl a futás gyorsaságát is.

5. A mátrixexponenciális számítási módjai

A cél a Magnus-módszer alkalmazásához szükséges mátrixexponenciálisok kiszámítása a pontosság és a gyorsaság együttes igényével. A MATLAB programrendszerrel dolgozunk, ezért vizsgáljuk a beépített `expm` függvényt, majd a MATLAB-ban eredetileg nem megtalálható, azonban igen hatékony `expmv` függvényt.

A beépített `expm` függvény

Nézzük elsőként a MATLAB beépített függvényét: az `expm` függvényt. Egy mátrix exponenciálisán a (21)-ben feltüntetett végtelen sor összegét értjük, az exponenciális értéke egy mátrix. Az `expm` függvény egy mátrixot kér az argumentumába, és egy mátrixot ad vissza, azonban nekünk a Magnus-módszer kimenete vektor értékű, tehát az `expm` parancs után szükségünk van még a kapott mátrixexponenciális vektorral való szorzására.

Az `expmv` függvény

Az előzőekben ismertetett `expm` függvénnyel szemben az `expmv` nem a mátrixexponenciális számítja ki, hanem közvetlenül a mátrixexponenciális szorzatát valamely vektorral. Az `expmv` az argumentumába kéri a mátrixot, és azt a vektort is, amivel az első esetben „kézzel” szoroztunk. Fontos előnye az `expm`-el szemben, hogy kimenetele egy vektor (*Al-Mohy and Higham, 2011*). Számunkra ez sokkal kézenfekvőbb, hiszen a mátrix exponenciálására önmagában nincs szükségünk, csak a kimeneti megoldásvektorra. A kérdés az, hogy vajon melyik függvény ad pontosabb megoldást, és mennyi időbe telik azt kiszámolni.

6. Eredmények

Induljunk el egyszerű, kisméretű mátrixoktól a bonyolultak felé. A feladatokat MATLAB-ban megírt .m fájlokkal valósítjuk meg. Vizsgáljuk az egyes megoldások pontosságát és gyorsaságát is. Mérlegetljük, hogy a későbbiekben a sekélyvízi egyenletrendszer megoldásához melyik exponenciális-számítási módszert a legcélszerűbb használnunk.

6.1. Kisméretű mátrix

A megoldandó feladatunk a (18)-ban definiált n darab egyenletből álló egyenletrendszer a megfelelő kezdeti feltételekkel ellátva.

Elsőként tekintsünk egy példát az $n = 2$ esethez, azaz a megoldandó egyenletrendszerünk legyen:

$$\begin{cases} b_1'(t) = tb_1 + b_2 \sin t, \\ b_2'(t) = t^2 b_1 + 3b_2, \\ b_1(0) = 4, \\ b_2(0) = 6. \end{cases} \quad (30)$$

Ebben az esetben a keresett megoldásvektor két komponensből áll, a kezdeti érték egy szintén 2 elemből álló vektor: $u_0 = (4, 6)$, $A(t)$ pedig a következő mátrix:

$$A(t) = \begin{pmatrix} t & \sin t \\ t^2 & 3 \end{pmatrix}. \quad (31)$$

A kérdés egy adott t időpillanatban, például $t = 0, 1$ -ben az $u(t)$ megoldásvektor és a számításhoz szükséges idő.

A megvalósítás során vizsgáljuk mindkét exponenciális-számítási módszerrel a kapott értéket és a futási időt. A programot megírva és futtatva a kapott $u(t)$ vektor mind az `expm`, mind az `expmv` felhasználásával ugyanaz: $u(t) = (4, 0551, 8, 1003)$, tehát azonos pontosságúak, a CPU időben azonban eltérés tapasztalható. Az `expm` függvény körülbelül 1,37-szer hamarabb kiszámolja ugyanazt az értéket, mint az `expmv` függvény. Természetesen az u_0 kezdeti érték vektor és az $A(t)$ mátrix tetszőlegesen változtatható. Eddig egy adott t értékre vizsgáltuk az exponenciálisokat. Tekintsük most újra a (30) feladatot, de vezessünk be $\tau > 0$ lépésközt. A numerikus megoldás pontossága így is azonos az `expm` és `expmv` függvényekben, ez a későbbiekben is minden feladatra hasonlóan alakul. Azonban a megoldás CPU idejében újra eltérést tapasztalunk, szintén az `expm` javára. Kis mátrixokra az eddigiek alapján megállapítható, hogy az `expm` függ-

vény ugyanolyan pontosság mellett gyorsabb, azaz összességében hatékonyabb, mint az `expmv` függvény.

6.2. Hővezetés

Az eddigiek során kisméretű, elsőrendű differenciálegyenlet-rendszerek megoldásával foglalkoztunk. Haladjunk most a nehezebb feladatok felé, és tekintsük a hővezetésre vonatkozó másodrendű parciális differenciálegyenletet:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}. \quad (32)$$

Keressük azt a $T(t, x)$ kétváltozós függvényt, mely kielégíti ezt az egyenletet a

$$T(0, x) = T_0(x) \quad (33)$$

a kezdeti feltétel, és a

$$T(t, 0) = T(t, 1) = 0 \quad (34)$$

homogén Dirichlet-féle peremfeltétel mellett. Az előző két feladatban a megoldás csak az idő függvénye volt, most viszont T már nem csak t -től, hanem x -től is függ, így a tértartományon is definiálnunk kell egy rácshálót. Legyen τ időbeli lépcső mellett $\Delta x > 0$ a térbeli ugrás.

Ha a $[0, 1]$ intervallumot J db részre osztjuk, akkor a j -edik osztópont az $x_j := (j - 1) \cdot \Delta x$ pont lesz ($j = 1, 2, \dots, J + 1$).

Diszkrétizáljuk térben az $T(t, x)$ függvényt, és vezessük be az

$$m_j(t) := T(t, x_j) \quad (35)$$

jelölést, valamint definiáljuk az $m(t)$ vektort a következőképpen:

$$m(t) = \begin{pmatrix} m_1(t) \\ m_2(t) \\ \vdots \\ m_J(t) \end{pmatrix}. \quad (36)$$

A feladatban a Magnus-módszer alkalmazásával keressük a (18)-ban már bevezetett alakban az $m(t)$ vektort. Ezek alapján $m(t)$ időderiváltja és a megoldás a következő módon írható fel:

$$\begin{aligned} m'(t) &= Am(t), \\ m(t) &= e^{tA} m(0). \end{aligned} \quad (37)$$

A (33)-ból $T(0)$ ismert, $m(0)$ ezen $T(0)$ kezdeti, tértől függő függvény rácsponti értékeiből álló vektor. A kérdés: hogyan áll elő az A mátrix?

A $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$, t -től és x -től függő függvényt a (t, x_j) pont körül Taylor-sorba fejtve a

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(t, x_j) \approx \frac{T(t, x_{j-1}) - 2 \cdot T(t, x_j) + T(t, x_{j+1}))}{(\Delta x)^2} \quad (38)$$

közelítő egyenlőséghez jutunk, amely a fent bevezetett jelöléssel a

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(t, x_j) \approx \frac{1}{(\Delta x)^2} \cdot (m_{j-1}(t) - 2m_j(t) + m_{j+1}(t)) \quad (39)$$

alakba írható. Az együtthatókból leolvasható, hogy az $m(t)$ vektort milyen mátrixszal kell szoroznunk ahhoz, hogy a (39) közelítés jobb oldalát kapjuk. Látható, hogy a mátrix-vektor szorzat j -edik eleméhez csak az $m(t)$ vektor $(j-1)$ -edik, j -edik és $(j+1)$ -edik eleme ad járulékot. Az A mátrix tehát egy tridiagonális mátrix, melynek a főátlóbeli elemei -2 -esek, a két mellékátlóbeli elemei pedig 1 -esek. Nem szabad elfeledkeznünk a mátrix $\frac{1}{(\Delta x)^2}$ szorzójáról sem, és a (34) peremfeltételről. Ahhoz, hogy az egyenlet ezt kielégítse, a hővezetés A mátrixa helyesen

$$A(t) = \frac{1}{(\Delta x)^2} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \quad (40)$$

alakú, tehát $(J+2) \times (J+2)$ méretű. A mátrix-vektor szorzathoz szükséges dimenzióbeli egyeztetés – a peremfeltétel által kapott nulla sorok és oszlopok – miatt a $T(t, x)$ függvény térbeli diszkretizációjával kapott $m(t)$ vektor $J+2$ elemű:

$$m(t) = \begin{pmatrix} m_1(t) \\ m_2(t) \\ \vdots \\ m_{J+2}(t) \end{pmatrix}, \quad (41)$$

és a j -edik osztópontot $x_j = (j-1)\Delta x$ jelöli. A függvény diszkretizációjával kapott (35) összefüggés továbbra is igaz $j = 1, 2, \dots, J+2$ mellett.

A kapott A mátrix már a feltételeknek megfelelő, és függ a térbeli lépésközök nagyságától. Minél kisebb Δx felosztást tekintünk, annál nagyobb az A mátrix. Emellett

elvárásaink alapján a numerikus módszer annál jobb, minél finomabb a felosztás, azaz minél nagyobb a mátrix, amelynek az exponenciálisával szoroznunk kell. Tehát az előző két eset kis mátrixaival szemben most nagy mátrixok exponenciálisát kell kiszámítanunk. A továbbiakban megvizsgáljuk, hogyan viselkednek ebben az esetben az `expm` és `expmv` függvények.

Megvalósítás

A megoldás hatékonyságának növelése érdekében érdemes kihasználnunk, hogy az A mátrix ún. ritka mátrix. Lehetőségünk van csak a nullától különböző elemek helyét eltárolni, így a számítás nagy mértékben gyorsul.

A hővezetés parciális differenciálegyenletének ismerjük a pontos megoldását is a $T_0(x) = \sin x$ kezdeti és az adott peremfeltételek mellett:

$$T(x, t) = e^{-t} \cdot \sin(x). \quad (42)$$

Ezt alkalmazzuk a numerikus megoldásban a (33) kezdeti feltétel megadásához. A lépések között, ezáltal a mátrix nagysága az eddigié analógiájára itt is változtatható, azonban figyelembe kell vennünk a

$$\Delta t < \frac{(\Delta x)^2}{2} \quad (43)$$

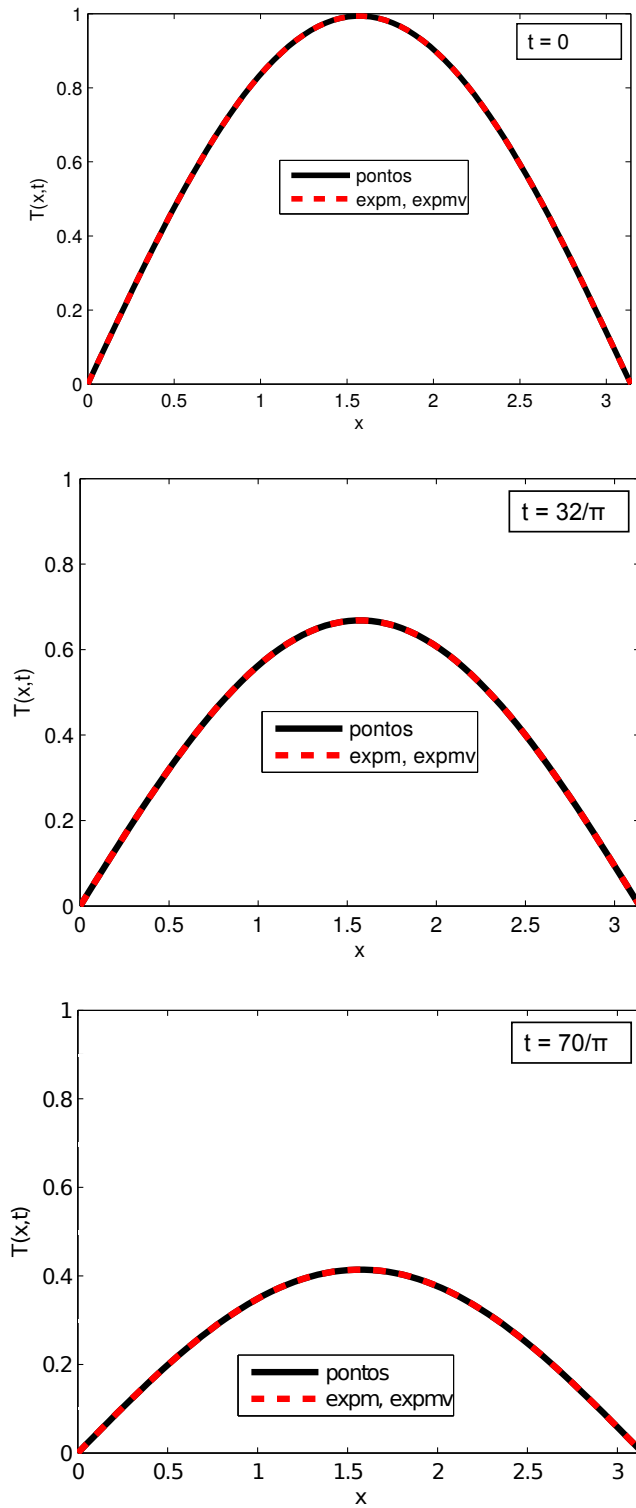
stabilitási feltételt (*Stoyan and Takó, 2008*).

Pontosság

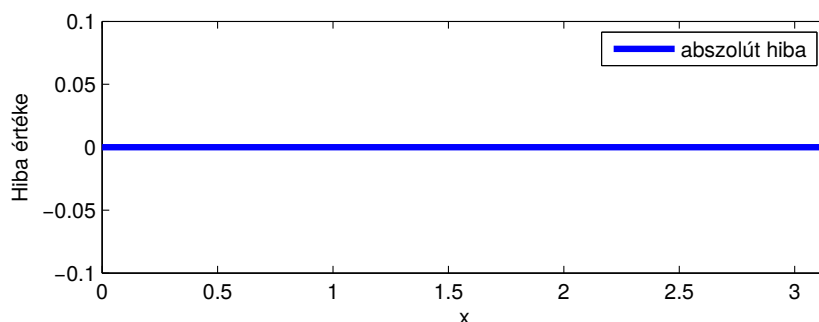
Teszteljük a numerikus módszer pontosságát a hővezetés fent említett pontos megoldásával, ahol $T_0(x) = \sin(x)$, $x \in [0, \pi]$ a kezdeti feltétel. A J felosztás értéket elég nagyra választva a függvények megfelelően simák lesznek, menetük jól követhető.

A 2a., a 2b. és a 2c. ábra szemlélteti három időrétegen, azaz $t = t_1^*$, $t = t_2^*$ és $t = t_3^*$ időpillanatokban, hogy hogyan viselkednek a pontos megoldás és a numerikus közelítések értékei, végigkövethető az időbeli változás és a konvergencia. Az `expm` és `expmv` használatával újra ugyanazokat a megoldásvektorokat kapjuk.

Észrevehető, hogy egy, a kezdethez közeli időpontban a pontos megoldás és a numerikus megoldás görbéi teljesen együtt vannak. Ahogy a 2b. és a 2c. ábrák is mutatják, minél több lépést teszünk az időben, annál közelebb kerülnek az azonosan nulla függvényhez, azonban ezt teljesen együtt mozogva teszik meg, nem tapasztalható tehát eltérés a két megoldás között.



2. ábra: A hővezetési feladat pontos és numerikus megoldása a) $t = 1$, b) $t = 32/\pi$, c) $t = 70/\pi$ érték mellett.



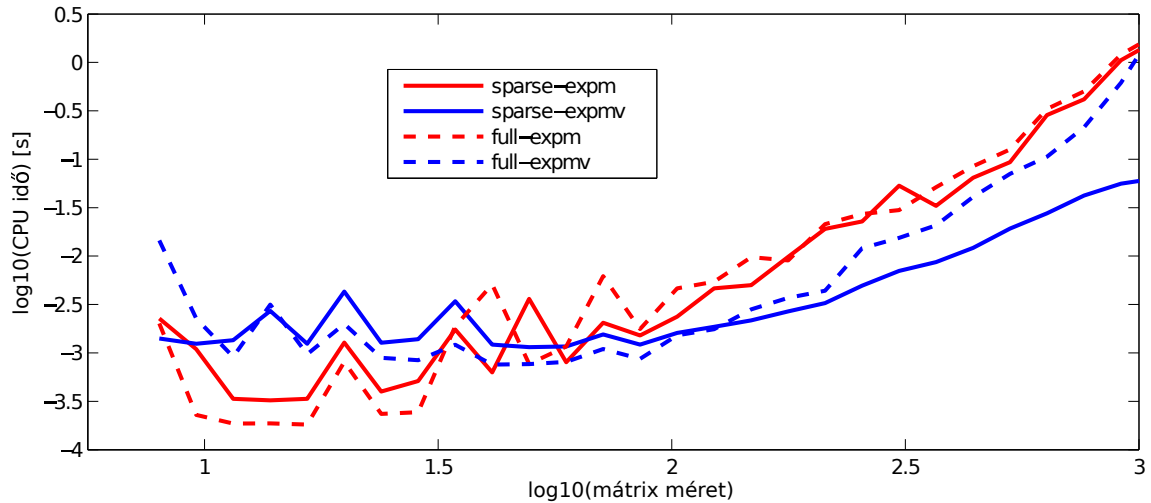
3. ábra: A numerikus közelítések abszolút hibája a hővezetés megoldására $t = \frac{32}{\pi}$ érték mellett.

A 3. ábra egy $t = 32/\pi$ időpontban mutatja a numerikus közelítés abszolút hibáját, amely láthatóan nulla. Több felosztást kipróbálva igazolódik, hogy a Magnus-módszerrel számolt numerikus megoldás tökéletesen azonos az ismert pontos megoldással.

Gyorsaság

A következőkben vizsgáljuk a program futási idejét, ehhez gondoljuk végig a használatban lévő `expm` és `expmv` függvények feladatát. Az ismertetett tér- és időlépcsők a mi megválasztásunktól függenek, és azt is tudjuk, hogy minél sűrűbb a felosztás, azaz minél több lépcsőben számolunk, annál pontosabb a Magnus-módszer megoldása. Azonban észrevehető, hogy a (40) tridiagonális mátrix mérete a térbeli diszkretizáció miatt függ a térbeli lépések számától, nagysága minden időlépcsőben $(J + 2) \times (J + 2)$. Tetszőleges J értékről indulva egyre növekvő J -kre vizsgáljuk meg a futási időket. Nyilvánvaló, hogy minél nagyobb a mátrix, annál többet számol az `expm` és `expmv`. Láttuk, hogy kimeneti értékük minden esetben azonos, a cél tehát megtalálni a gyorsabbat, hiszen a gyorsaságot és a pontosságot egyszerre szem előtt tartva állapíthatjuk meg, hogy melyik függvény a hatékonyabb.

A 4. ábrán négy görbe mutatja a CPU idők alakulását. Az elemzés teljessége kedvéért A -t ritka és teli mátrixként kezelve is kipróbáltuk a kódokat, az ábrán ezek a `sparse` és `full` megjelölésű görbék. Az ábra x tengelyén a mátrixok méretét olvashatjuk le tízes alapú logaritmikus skálán, az y tengelyen pedig a mérethez tartozó futási időt. Minél nagyobb a mátrix, annál több időt vesz igénybe a számítás. Eleinte hasonló idő-



4. ábra: Az expm és expmv függvények CPU ideje, logaritmikuskálán.

vel dolgoznak, de az 1000×1000 -es mátrixnál az értékek eltávolodnak. Látható, hogy mind az `expm`, mind az `expmv` esetében a `sparse` mátrix gyorsabb, és a két függvényt külön összevetve az `expmv` győz. Az 1000×1000 -es mátrix esetén az `expm full` kb. 1,58 másodperc alatt, míg az `expmv` lényegesen, körülbelül 36-szor hamarabb szolgál eredménnyel.

Egyértelmű tényként kezelhető tehát, hogy nagy méretű mátrixokra az `expmv` függvénnyel számított Magnus-közelítés a hatékonyabb.

6.3. Advekción egyenlet

Tekintsük az advekción egyenletet, amely egy elsőrendű parciális differenciálegyenlet. Keressük azt a ξ függvényt, amely kielégíti a

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = -c \cdot \frac{\partial \xi}{\partial x}, \quad c \in \mathbb{R}, \quad x \in [0, \pi] \quad (44)$$

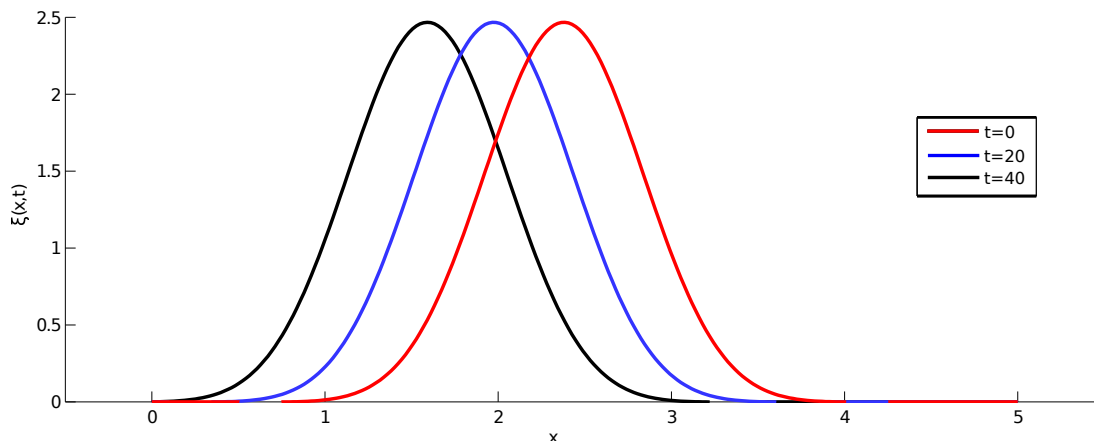
egyenletet a

$$\xi(0, x) = \xi_0(x) \quad (45)$$

kezdeti feltétel mellett. A peremfeltételt pedig $c > 0$ esetén bal oldalon kell megadni, értéke legyen $\xi(t, 0) = 0$, $c < 0$ esetén pedig jobb oldalon adjuk meg szintén nulla értékkel, azaz $\xi(t, \pi) = 0$. Ismert, hogy a feladat pontos megoldása előáll a kezdeti feltételként megadott ξ_0 differenciálható függvény $(x - ct)$ pontban vett értékeként. Legyen

$$\xi_0(x) = e^{-2,5(x-x_0)^2} \cdot x \cdot (\pi - x) \quad x_0, b \in \mathbb{R}, \quad (46)$$

így egy tetszőleges helyen és időpillanatban $\xi(t, x)$ megadható $\xi(t, x) = \xi_0(x - c \cdot t)$ alakban. Ez azt jelenti, hogy a kiindulási függvényünk az idő előrehaladtával c értéktől függően változik. Helyben marad, ha $c = 0$, ha $c > 0$, akkor az x tengelyen pozitív irányba, ha pedig $c < 0$, akkor negatív irányba tolódik el.



5. ábra: A pontos megoldás időbeli változása $c = -2$ esetén.

Az 5. ábrán látható a Gauss-csúcs áthelyeződése három időre: $t = 1, t = 20, t = 40$. Észrevehető, hogy a csúcs középpontja mindig más x értéknél van. A pontos megoldás ismeretében most szeretnénk a (44) egyenletet a hővezetés analógiájára diszkrétizálni, majd a Magnus-módszerrel numerikusan megoldani.

A cél tehát egy olyan m függvény megfeleltetése a $\xi(x, t)$ -nek, melynek segítségével a feladat ismét egy

$$\frac{dm}{dt} = A \cdot m. \quad (47)$$

alakú szemidiszkrét feladat megoldására vezet. A térbeli diszkrétizáció a (35) képletben ismertetett formában történik, a ξ függvény értékét itt is minden x_j pontban az $m_j(t)$ jelöli, a J darab ilyen m_j függvény együttesen adja ki az $m(t)$ vektort. Ezt az $m(t)$ -t szeretnénk meghatározni a Magnus-módszer alkalmazásával, ehhez azonban újra kérdés az A mátrix, és a felhasználásával számított exponenciális-vektor szorzat.

A $\frac{\partial \xi}{\partial x}$ deriváltat $c < 0$ esetén jobb oldali, $c > 0$ esetén pedig bal oldali véges különbségekkel érdemes közelíteni (upwind séma):

- ha $c < 0$:

$$Am = -c \cdot \frac{m_{j+1} - m_j}{\Delta x}, \quad (48)$$

- ha $c > 0$:

$$Am = -c \cdot \frac{m_j - m_{j-1}}{\Delta x}. \quad (49)$$

A c sebesség előjelétől függően kell a bejövő oldalon peremfeltételt megadni, azaz $c > 0$ esetén a bal oldalon, $c < 0$ esetén a jobb oldalon. Mindkét esetben Δx jelöli a választott intervallum felosztásának nagyságát; J darab ugrást teszünk Δx lépésközönként. A (48) és (49) egyenletekből a hővezetéshez hasonlóan újra leolvasható az az A mátrix, amellyel az m -et szoroznunk kell. Negatív c esetén a mátrix a főátlójában az m_j , felső mellékátlójában az m_{j+1} együtthatóit, az alsóban pedig nullákat tartalmaz, $c > 0$ esete hasonló, itt azonban a főátló és az alsó mellékátló elemei különböznek nullától. Vagyis ezek is tridiagonális mátrixok, és itt sem szabad megfedkezniük a $-\frac{c}{\Delta x}$ szorzótényezőről.

A mátrixok $c < 0$ és $c > 0$ esetén rendre:

$$A_1(t) = -\frac{c}{\Delta x} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & \dots & \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & \dots & \\ 0 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}, \quad (50)$$

$$A_2(t) = -\frac{c}{\Delta x} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & & \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (51)$$

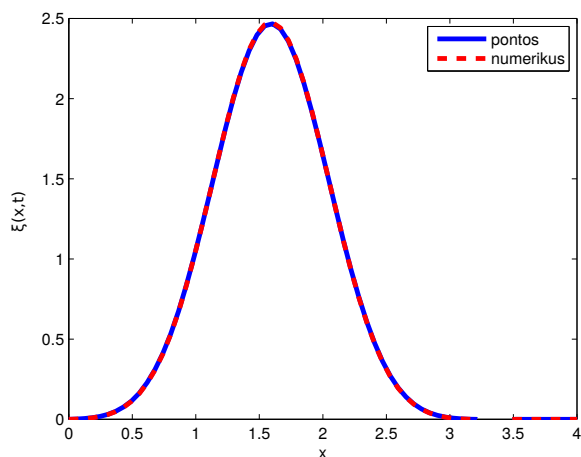
ez alapján a megoldáshoz szükséges mátrix-vektor szorzat felírható $A_1 m$ és $A_2 m$ alakban. Ezek után elemezzük itt is az `expm` és az `expmv` függvényekkel számított numerikus megoldás pontosságát és gyorsaságát, vigyázva a következő stabilitási feltételre (*Stoyan and Takó, 2008*):

$$\Delta t < \frac{\Delta x}{|c|}. \quad (52)$$

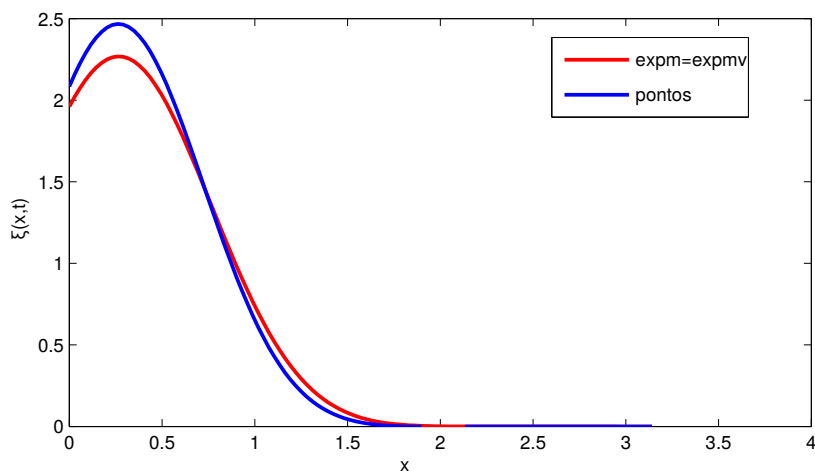
Amennyiben ez nem teljesül, a 6. ábrán követhető áthelyeződés során a függvények nem lesznek simák, oszcillációk lépnek fel.

Pontosság

Nézzük meg, hogyan viselkednek egymáshoz képest a pontos és a numerikus megoldások. Az expm és expmv függvények által számított értékek újra tökéletesen megegyez-



6. ábra: Gauss-csúcs a kezdeti időpillanatban.

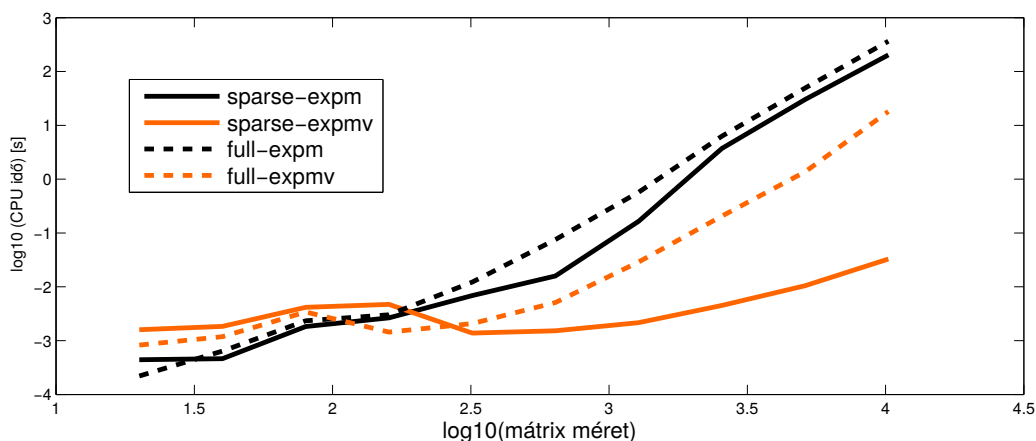


7. ábra: Gauss-csúcs egy későbbi időpillanatban.

nek. A 6. ábrán a pontos és numerikus megoldások gyakorlatilag teljesen együtt vannak – hiszen a kezdeti függvényük azonos –, a 7. ábrán egy későbbi időpillanatban láthatóan eltávolodtak egymástól. Elmondható, hogy a pontostól való eltérésük az időben nő, de csupán ezred nagyságrendű, és az is igazolható, hogy a felosztást finomítva ez az eltérés egyre közelebb kerül a nullához.

Gyorsaság

Mivel a pontosságot tekintve az `expm` és `expmv` is kedvező a későbbi használathoz, vizsgáljuk meg ebben az esetben is a gyorsaságot. Elvárásaink alapján a hővezetéshez képest rövidebb idő alatt jutunk a megoldásvektorhoz, hiszen az A mátrixot ritka mátrixként kezeljük, mivel jelen esetben az A olyan tridiagonális mátrix (c valós szám bármilyen értékére), amelyben csak a főátlóban és az egyik mellékátlójában találunk nullától különböző elemeket.



8. ábra: CPU idő logaritmikus skálán.

A 8. ábra is igazolja, hogy valóban kevesebb a számításhoz igénybe vett idő. Az x tengelyen a mátrix nagysága szerepel logaritmikus skálán, az y tengelyen pedig maga a CPU idő. A hővezetéshez hasonlóan itt is vizsgáltuk a teljes és a ritka mátrixokkal kapott számítási gyorsaságot. Kisebb, 1000×1000 -as mátrixokra az `expmv` körülbelül 1000-szer gyorsabban dolgozik, mint az `expm`, azonban 10000×10000 -as mátrixokra már körülbelül 10000-szeres ez az érték. Látható, hogy logaritmikus skálán arányosság áll fenn a mátrix mérete és a CPU idők között, azaz minél nagyobb mátrixot tekintünk, annál hatékonyabb az `expmv` függvény alkalmazása a Magnus-módszerben.

Kapcsolat a sekélyfolyadék-egyenletekkel

Eredeti célunk a sekélyvízi egyenletrendszer sikeres megoldása a Magnus-módszerrel. Miután láttuk a kellő eszközöket írjuk át a 3. fejezetben ismertetett egyenletrendszert

a következő alakra:

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} = -u \frac{\partial h}{\partial x} - v \frac{\partial h}{\partial y} - h \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right), \\ \frac{\partial u}{\partial t} = -u \frac{\partial u}{\partial x} - v \frac{\partial u}{\partial y} - g \frac{\partial h}{\partial x} - f v, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = -u \frac{\partial v}{\partial x} - v \frac{\partial v}{\partial y} - g \frac{\partial h}{\partial y} + f u. \end{cases} \quad (53)$$

Keressük a $h(t, x, y)$, $u(t, x, y)$, $v(t, x, y)$ függvényeket $t \geq 0$, $(x, y) \in M \subset \mathbb{R}^2$ mellett. Az egyenletekben szereplő f a Coriolis-paraméter, $f = 2\omega \sin \varphi$.

Végezzünk el az (53) egyenletrendszerre is egy megfelelő diszkretizációt, mely után a kapott feladatot kompaktabb formában írhatjuk fel. Legyen $\mathcal{U} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ az alábbi:

$$\mathcal{U}(t, x, y) = \begin{pmatrix} h(t, x, y) \\ u(t, x, y) \\ v(t, x, y) \end{pmatrix}, \quad t \geq 0, \quad (x, y) \in M \subset \mathbb{R}^2 \quad (54)$$

Az (53)-ben felírt egyenletrendszer az (54)-ban szereplő függvények parciális deriváltjait tartalmazza, azaz szükségünk van az \mathcal{U} idő szerinti deriváltjára. Ezt a kifejezést fel tudjuk írni az advekción egyenlet esetében is ismertetett módon, tehát egy megfelelő mátrix és az \mathcal{U} szorzataként. Ismét felírható a keresett \mathcal{A} mátrix, ez egy olyan 3×3 -as operátormátrix, amellyel az \mathcal{U} -t megszorozva az (53)-ben felírt parciális differenciálegyenletrendszert kapjuk. \mathcal{A} elemei azok az operátorok, amellyekkel h , u és v függvények „szorozódnak”:

$$\mathcal{A}(\mathcal{U}) = \begin{pmatrix} -u \frac{\partial}{\partial x} - v \frac{\partial}{\partial y} & -h \frac{\partial}{\partial x} & -h \frac{\partial}{\partial y} \\ -g \frac{\partial}{\partial x} & -u \frac{\partial}{\partial x} - v \frac{\partial}{\partial y} & -f \\ -g \frac{\partial}{\partial y} & f & -u \frac{\partial}{\partial x} - v \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix}. \quad (55)$$

Ismertettük a (44) advekción egyenletet, amely

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = \left(-c \cdot \frac{\partial}{\partial x} \right) \xi \quad (56)$$

alakban is felírható, ahol c egy állandó valós szám, és tudjuk, hogy az (56) jobb oldalának zárójelében lévő kifejezés pedig c értékétől függően (50) és (51) alakban írható fel.

Definiáltunk tehát egy mátrix-vektor szorzatot a Magnus-módszerhez, és ez a célunk a sekélyfolyadék egyenletekkel is. Vegyük észre, hogy az említett (56) zárójeles kifejezése nagyon hasonlít az (55) egyes elemeire. Az advekción egyenlet esetében definiált mátrixok segítségével előállítható egy olyan 3×3 -as blokkmátrix, melynek egyes blokkjai rendre tridiagonális mátrixok, különböző szorzókkal. Az eddigiekben időtől független teszt példákkal dolgoztunk, azonban az advekción egyenlet c valós száma helyett az \mathcal{A} elemei függenek a keresett h, u, v függvényektől, tehát implicit módon az időtől is, így az egyes blokkok előállítása nem olyan egyszerű, mint az upwind séma esetében.

Az \mathcal{A} operátormátrixból térbeli diszkretizáció után tehát egy nagy méretű $\tilde{\mathcal{A}}$ blokkmátrix áll elő, mellyel alkalmazható lesz a Magnus-módszer. Láttuk, hogy a blokkokban lévő tridiagonális mátrixok mérete változik aszerint, hogy mennyire finomítjuk a felosztást. Az advekción esetben is már 1000×1000 -es mátrixokkal számoltunk, ez azt jelenti, hogy minden egyes ilyen blokkban 1000×1000 -es vagy még nagyobb mátrix lesz, hatalmas blokkmátrixot és ezzel nagy számítási igényt eredményezve. Fontos tehát tudnunk, hogy MATLAB-ban ilyen esetben a leghatékonyabban a `expmv` függvény segítségével dolgozhatunk.

7. 1D lineáris sekélyfolyadék-egyenletek

Tekintsük az (53) egyenletrendszer egydimenziós alakját

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} = -u \frac{\partial h}{\partial x} - h \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial t} = -u \frac{\partial u}{\partial x} - g \frac{\partial h}{\partial x}, \end{cases} \quad (57)$$

a

$$\begin{cases} h(0, x) = e^{-x^2} \\ u(0, x) = 0 \end{cases} \quad (58)$$

kezdeti, és a következő periodikus peremfeltételek mellett:

$$\begin{cases} h(t, 0) = h(t, \ell) \\ u(t, 0) = u(t, \ell) \end{cases} \quad x \in [0, \ell]. \quad (59)$$

Ekkor a mozgás független az y koordinátától, csak egy síkban történik. Ha ezt a Földön lejátszódó folyamatként értelmezzük, akkor most egy kelet-nyugati irányú mozgást egy adott x pontban és $t > 0$ időpillanatban leíró $h(t, x)$ és $u(t, x)$ az ismeretlen függvények. Keressük tehát a magasságváltozást leíró h függvényt és az u horizontális sebességkomponenst.

Végezzük most el az (57) egyenletrendszer linearizálását a dinamikus meteorológiában legelterjedtebb módszerrel, az ún. kis perturbációk módszerével. Ez a módszer olyan légköri hullámmozgások leírására használható, amelyeknek az állapotváltozók mezőiben lényegesen kisebb az amplitúdója, mint az adott állapotváltozó átlagos értéke a légkörben. Ezt a viszonylagos kicsinységi feltételt a légköri hullámok többsége kielégíti. Így tehát az egyenletrendszerben szereplő állapotváltozók felbonthatók az átlagos mezők (alapállapot) és az ezekhez viszonyított kis perturbációk mezőinek összegére (Práger, 1982). Az egydimenziós egyenletrendszerben szereplő sebesség és magasság értékek tehát $u = \bar{u} + u_{pt}$ és $h = \bar{h} + h_{pt}$ alakban írhatóak fel. A perturbációs tagokról feltesszük, hogy legalább egy nagyságrenddel kisebbek, mint az átlagolt tagok. Az egyenletrendszerbe behelyettesítve ezeket az értékeket, a tagok különböző csoportokra esnek szét. Ilyen az átlagértékekből és azok szorzataiból álló csoport, a perturbációs mennyiségek és azok szorzataiból képzett csoport és a számunkra fontos perturbációs mennyiségek és ezek átlagértékekkel vett szorzataiból álló csoport. Az egyenletrendszert egy oldalra rendezve belátható, hogy az azonos csoportba tartozó tagok közelítőleg kompenzálják egymást, ez alapján egy új egyenletrendszert nyerünk, ezt tekintjük

a kis perturbációkra vonatkozó sekélyfolyadék-egyenleteknek, azaz a lineáris sekélyvízi egyenletrendszernek:

$$\begin{cases} \frac{\partial h_{pt}}{\partial t} = -\bar{u} \frac{\partial h_{pt}}{\partial x} - \bar{h} \frac{\partial u_{pt}}{\partial x} \\ \frac{\partial u_{pt}}{\partial t} = -\bar{u} \frac{\partial u_{pt}}{\partial x} - g \frac{\partial h_{pt}}{\partial x}, \end{cases} \quad (60)$$

ennek megfelelően kell megadnunk a kezdeti és a peremfeltételeket is. Az (60) egyenletrendszerben u_{pt} és h_{pt} jelzi, hogy az egyenletek a perturbációkra vonatkoznak, felírásuk után célunk megadni a h_{pt} és u_{pt} függvények, mint megoldásvektorok értékét– tehát a perturbációk viselkedését. Az egyenletekben láthatóan csak az x szerinti deriváltak szerepelnek, hiszen észak-dél irányú változás hiányában az y szerinti parciális deriváltak rendre nullák. A Magnus-módszer alkalmazásához újra keressük azt a mátrixot, amelynek exponenciálisát közelítenünk kell.

Ez az \mathcal{A} blokkmátrix, amelyet az (55)-ben láttunk, most egy 2×2 -es operátormátrix.

$$\mathcal{A}_{1Dlin} \begin{pmatrix} h_{pt} \\ u_{pt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\bar{u} \frac{\partial}{\partial x} & -\bar{h} \frac{\partial}{\partial x} \\ -g \frac{\partial}{\partial x} & -\bar{u} \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}. \quad (61)$$

Ekkor a (61) mátrix minden eleme az (56) jobb oldalához hasonlít. Az advekción egyenletben az áthelyeződés sebességét választhattuk tetszőlegesen, tehát szemléltethettük a $c = 0$, $c > 0$, $c < 0$ értékekre a Gauss-csúcs helyben maradását, a pozitív, illetve a negatív irányba tolódását. Azaz megadhatjuk, hogy az általunk választott magasságú és sebességű folyadék mozgása hogyan alakul az idő előrehaladtával, ügyelve arra, hogy \bar{h} értéke megfelelően kicsi legyen a horizontális kiterjedéshez képest, például egy Rossby-hullám mozgását figyelve a \bar{h} legyen körülbelül az $\frac{1}{100}$ -ad része a horizontális kiterjedésnek.

A numerikus megoldáshoz tehát szükség van a (61) operátormátrix diszkrétizálásával kapott blokkmátrix exponenciálisának közelítésére. Miután tudjuk, hogy az advekción egyenlet mátrixai hogyan állnak elő előjeltől függően, így az egyes blokkok mátrixai most is meghatározhatók.

Ha $\bar{u} > 0$, akkor

$$A_{\bar{u}>0}(t) = -\frac{\bar{u}}{\Delta x} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ -1 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & -1 & 1 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ \dots & 0 & -1 & 1 & \end{pmatrix} = \frac{1}{\Delta x} \cdot \begin{pmatrix} -\bar{u} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \bar{u} & -\bar{u} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \bar{u} & -\bar{u} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ \dots & 0 & \bar{u} & -\bar{u} & \end{pmatrix}, \quad (62)$$

ha pedig $\bar{u} < 0$,

$$A_{\bar{u}<0}(t) = -\frac{\bar{u}}{\Delta x} \cdot \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & -1 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & -1 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ \dots & 0 & 0 & -1 & \end{pmatrix} = \frac{1}{\Delta x} \cdot \begin{pmatrix} \bar{u} & -\bar{u} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \bar{u} & -\bar{u} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \bar{u} & -\bar{u} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ \dots & 0 & 0 & \bar{u} & \end{pmatrix} \quad (63)$$

alakú a mátrix, amelyet a blokkmátrix előállításához fel kell használnunk. Mivel $g > 0$, ezért a g által meghatározott blokk előáll a (62) alakban, természetesen itt az \bar{u} helyett g szerepel, továbbá \bar{h} értékét is mi választhatjuk meg, és mivel az egyenletek a perturbációra vonatkoznak, \bar{h} értéke lehet pozitív és negatív is, tehát ez esetben is kétféle mátrix lehet, ugyanúgy, ahogy az előzőekben \bar{u} értékeire láttuk.

A mátrixok természetesen függenek a térbeli felosztástól, rendre $J \times J$ nagyságúak. Azonban nem szabad elfeledkeznünk a kezdeti és peremfeltételekről sem.

A periodikus perem értelmében a térintervallum bal és jobb oldali végpontját egyenlővé tesszük. A sekélyfolyadék modell fontos tulajdonsága, hogy a horizontális kiterjedése jóval nagyobb, mint a vertikális. A geoid alakú Földön lejátszódó mozgásformák modellezéséhez ez a peremfeltétel természetes választás: a bal oldal „összeér” a jobb oldallal, ha az x koordináta egy szélességi kör mentén változik. A Magnus-módszerrel kapott megoldás meghatározásához a peremfeltétel miatt az ismertett blokkmátrixban apró változtatásokra van szükség.

Tekintsük most az (57) $-\bar{u} \frac{\partial h_{pt}}{\partial x}$ tagját. Amennyiben $\bar{u} > 0$, a véges különbség, amellyel ezt a tagot közelítjük:

$$-\bar{u} \frac{h_{pt_j} - h_{pt_{j-1}}}{\Delta x}, \quad (64)$$

ha pedig $\bar{u} < 0$, akkor

$$-\bar{u}_1 \frac{h_{pt_{j+1}} - h_{pt_j}}{\Delta x}. \quad (65)$$

Az első lépésben (tehát $j = 1$ -re) ha $\bar{u}_1 > 0$ akkor:

$$-\bar{u}_1 \frac{h_{pt_1} - h_{pt_0}}{\Delta x}, \quad (66)$$

ha pedig $\bar{u}_1 < 0$:

$$-\bar{u} \frac{h_{pt_2} - h_{pt_1}}{\Delta x} \quad (67)$$

véges különbségeket kaptunk. Térfelosztásunk $j = 1 \dots J$ között változik, látható tehát, hogy pozitív esetben a h_{pt_0} , azaz a nulladik ponthoz tartozó tag az ismeretlen. Negatív esetben a másik oldalon tapasztalunk ilyen problémát, hiszen a J -edik rácspont értékének közelítéséhez, $\bar{u}_J < 0$ esetén a

$$-\bar{u} \frac{h_{pt_{J+1}} - h_{pt_J}}{\Delta x} \quad (68)$$

hányadost alkalmazzuk, itt azonban $h_{pt_{J+1}}$ nem ismert. A periodikus peremfeltétel értelmében ezt a $h_{pt_0} = h_{pt_J}$ és $h_{pt_{J+1}} = h_{pt_1}$ megválasztással küszöböljük ki, ami új elemeket eredményez a mátrix egyes helyein. Tételizzük fel, hogy az általunk megválasztott \bar{h} és \bar{u} pozitív. Ekkor a blokkmátrix a következőképpen alakul:

$$A_{1Dlin} = \frac{1}{\Delta x} \cdot \left(\begin{array}{cccc|cccc} -\bar{u} & 0 & 0 & \dots & \bar{u} & -\bar{h} & 0 & 0 & \dots & \bar{h} \\ \bar{u} & -\bar{u} & 0 & \dots & 0 & \bar{h} & -\bar{h} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\bar{u} & 0 & 0 & 0 & \dots & -\bar{h} \\ -g & 0 & 0 & \dots & g & -\bar{u} & 0 & 0 & \dots & \bar{u} \\ g & -g & 0 & \dots & 0 & \bar{u} & -\bar{u} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -g & 0 & 0 & 0 & \dots & -\bar{u} \end{array} \right). \quad (69)$$

Mivel g értéke is pozitív, mind a négy blokkban az alsó mellékátló elemei különböznek nullától. Látható, hogy a peremfeltételek jelen esetben a négy mátrix felső sorának utolsó elemében mutatkoznak meg, ha \bar{h} és \bar{u} értékei közül valamelyiket negatívnak választjuk, akkor az öt reprezentáló mátrix utolsó sorának első elemében jelenik meg a peremfeltétel okozta változás. Mivel g értéke sosem negatív, a rá vonatkozó mátrixban az utolsó sor első eleme mindig nulla.

A Magnus-módszer használata előtt az utolsó kérdés, hogy a már ismerttetett (69) blokkmátrixot, amely $2J \times 2J$ nagyságú, az (58) kezdeti feltételek ismeretében milyen vektorral szorozzuk, hogy a lineáris egyenletrendszert visszkapjuk. Leolvasható, hogy a $h(x, t)$ és $u(x, t)$ függvényeket térben diszkrétizálva egy hosszú oszlopvektorba

rendezhetjük

$$p(t) = \begin{pmatrix} p_1(t) \\ p_2(t) \\ \vdots \\ p_J(t) \\ p_{J+1}(t) \\ \vdots \\ p_{2(J)}(t) \end{pmatrix} \quad (70)$$

módon, ahol

$$\begin{aligned} p_j(t) &:= h(t, (j-1) \cdot \Delta x), & j = 1, 2, \dots, J \\ p_j(t) &:= u(t, (j-1) \cdot \Delta x), & j = J+1, \dots, 2(J), \end{aligned} \quad (71)$$

azaz a vektor első részében a h_{pt} , második részében pedig az u_{pt} értékek szerepelnek. Ez a vektor már megfelelő dimenziójú, képezhető tehát a mátrixexponenciális-vektor szorzat, megadható a Magnus-féle numerikus közelítés.

A számítást a fenti fejezetekben belátott hatékonysága alapján az `expmv` függvény használatával végeztük.

9. ábra: Az 1D lineáris sekélyvízi egyenletrendszer megoldása fix térbeli felosztással, az idő előrehaladtával.

A 9. ábrán látható a magasság és a sebesség változása az idő előrehaladtával ($t = 1 - 1000$), továbbá $\bar{h} = 10m$, $\bar{u} = 10\frac{m}{s}$, $g = 9,81\frac{m}{s^2}$. Megfigyelhető, hogy a kezdeti egy Gauss-csúcs a negatív irány felé sodródik, ennek oka a kezdetben megadott negatív érték, hiszen ez indokolja a folyamatos áthelyeződést, illetve ahogyan az advekciónál láttuk, itt is meghatározza a mozgás irányát. A kezdeti egy csúcs később kettéválik,

ezen tömegeket megtartva haladnak tovább, laposodnak, a periodikus perem miatt folyamatosan távolodnak egymástól.

Az egydimenziós, lineáris sekélyvízi egyenletrendszer ismert megoldása az utazóhullámok. Itt azonban két eltérést is megfigyelhetünk: az asszimmetrikus csúcsok, és a disszipáció. Mivel lineáris problémákra a Magnus-integrátor pontos, illetve az időbeli diszkretizációnk is pontos, a fent említett két problémát a térbeli diszkretizáció okozza. A megoldást kisebb Δx értékekre – azaz nagyobb J -re – lefuttatva a pontos megoldással jobb egyezést figyeltünk meg.

8. 1D nemlineális sekélyfolyadék-egyenletek

Tekintsük most újra az egyenletrendszer előzőekben már látott egydimenziós alakját, ugyanazon kezdeti és peremfeltételek mellett.

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} = -u \frac{\partial h}{\partial x} - h \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial t} = -u \frac{\partial u}{\partial x} - g \frac{\partial h}{\partial x}, \end{cases} \quad (72)$$

$$\begin{cases} h(0, x) = \bar{h} + e^{-x^2} \\ u(0, x) = 0, \end{cases} \quad (73)$$

$$\begin{cases} h(t, 0) = h(t, \ell) \\ u(t, 0) = u(t, \ell) \end{cases} \quad x \in [0, \ell] \quad (74)$$

A lineáris megoldáshoz képest fontos változás, hogy a (72) rendszerben szereplő $h(x, t)$ és $u(x, t)$ értékek már nem a perturbációkra vonatkoznak, hanem az adott pontban vett tényleges értékeket jelölik. A lineáris eset nagy mátrixához képest újra változtatásokat kell tennünk.

A lineárizált A mátrixban szereplő nullától különböző tagok állandó értékek voltak. A nemlineáris A mátrixban viszont a négy blokkból háromban, a h és az u blokkjaiban az értékek időfüggőek, a főátlóban, a mellékátlóban és a peremfeltétel által meghatározott helyeken már \bar{h} és \bar{u} helyett $h(x, t)$ és $u(x, t)$ szerepelnek. A helyfüggést a mátrixban meghatározott indexük adja meg, az időfüggésük miatt viszont minden lépésben a Magnus-módszerrel kapott megoldásvektort kell felhasználnunk. Az ismertített iterációs eljárásból adódóan az n -edik időrétegen a megoldás függ az $(n - 1)$ -edik rétegen vett értékektől. Ne feledkezzük el arról, hogy ez a megoldásvektor egy hosszú vektor, amely h és u értékeit egymás alá rendezve tartalmazza. Ahhoz tehát, hogy az n -edik időlépcsőben is megkapjuk a nemlineáris egyenletrendszer megoldását, szét kell szednünk az $(n - 1)$ -edik lépésben kapott hosszú vektort, és h és u értékeit beültetnünk az A mátrix megfelelő helyeire. Ne feledkezzünk meg arról sem, hogy u értéke lehet pozitív és negatív is, és ettől függ, hogy az u -hoz tartozó blokkban a főátló mellett az alsó vagy a felső mellékátlóban lesz nullától különböző elem. A beépíteni kívánt vektorok J hosszúságúak, tehát pontosan megfelelnek, a peremfeltétel értelmében vizsgálunk kell még az első és a J -edik értékét a sebességre vonatkozó megoldásvektornak. Ezek előjeleitől függően kap az u blokkja nemnulla elemeket az első és az utolsó soraiban. A

g értéke továbbra is állandó és pozitív, emiatt a g blokkjához tartozó mátrix a nemlineáris változatba változtatás nélkül ültethető át.

A nagy méretű, időfüggő blokkmátrix tehát

$$A_{1Dnemin} = \frac{1}{\Delta x} \cdot \left(\begin{array}{cccc|cccc} -u & 0 & 0 & \dots & u & -h & 0 & 0 & \dots & h \\ u & -u & 0 & \dots & 0 & h & -h & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ u & 0 & 0 & \dots & -u & 0 & 0 & 0 & \dots & -h \\ \hline -g & 0 & 0 & \dots & g & -u & u & 0 & \dots & 0 \\ g & -g & 0 & \dots & 0 & u & u & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -g & u & 0 & 0 & \dots & -u \end{array} \right) \quad (75)$$

alakban írható fel. A h és u értékekhez tartozó blokkok elemeit minden időpontban az előző megoldásvektor értékei felülírják, így számolódik az újabb mátrix, ezzel pedig a numerikus megoldás az újabb időrétegen. A mátrixban a főátló és a mellékátlótól különböző nemnulla elemek mutatják, hogy a g és h pozitív értékei miatt a peremfeltétel mindig az első sor utolsó elemét érinti, azonban az u blokkjaira ez nem igaz. Előfordulhat olyan eset, hogy az $(n-1)$ -edik időpont u vektorának első eleme pozitív, ekkor abban a mátrixban, amely az n -edik időpont megoldásvektorának számításához szükséges, az első sor utolsó eleme különbözik nullától, és ezzel egyidejűleg az is lehetséges, hogy az u vektor utolsó, J -edik eleme negatív, ekkor az utolsó sor első eleme is különbözik nullától. Ez mind-mind attól függ, hogy milyen előjelűek az előző időlépcső megoldásvektorának elemei.

A kezdeti feltételek megadásával a vektor, amellyel az ismert (75) mátrixot szoroznunk kell, a lineáris változathoz hasonlóan áll elő. Minden adott a Magnus-féle numerikus közelítés elvégzéséhez, a számítások során itt is az `expmv` függvényt alkalmaztuk.

A 10. ábrán az idő előrehaladtával, $t = 1 - 1000$ értékek mellett követhető végig az egyenletrendszer megoldása, azaz a magasság és a sebesség változása. A 11. ábrán csak a magasság változása látható, míg az idő szintén $t = 1 - 1000$ között változik. A megoldásról elmondható, hogy a kezdeti egy csúcs jelen esetben is elindul, hiszen a kezdeti sebességet pozitívnak választottuk, ennek megfelelően jobbra halad. Az idő előrehaladtával szétválik, két csúcs mozog tovább, melyek a peremfeltételnek megfelelően folyamatosan távolodnak egymástól.

A két púp laposodik, azonban szélesedik is, a numerikus módszerről elmondható, hogy megőrzi a tömeget, azonban fellép benne a mesterséges diffúzió, ez okozza a csúcsok szétkenődését. Ez magyarázható a módszer hibájával, hiszen a térbeli diszkretizáció

10. ábra: Az 1D időfüggő sekélyvízi egyenletrendszer megoldása fix térbeli felosztással, az idő előrehaladtával.

miatt a hiba Δx -szel arányos, továbbá a Magnus-sor elsőrendű közelítését választottuk, ez időben elég alacsony rendű.

A szétválás után a bal oldali púp láthatóan nagyobb, mint a jobb oldali, a megoldás tehát nem szimmetrikus a térbeli felosztás szempontjából. Az asszimmetria magyarázata lehet a g és h pozitivitásából adódó balról jövő advekción. A nemlineáris megoldásban is megjelenik a lineárisban észlelt két hiba, melyek szintén a térbeli diszkretizációval magyarázhatóak. Az időfüggő esetet is megoldottuk a (29) alapján is, ez a közelítés már nem a legegyszerűbb Magnus-módszer.

11. ábra: Az 1D időfüggő sekélyvízi egyenletrendszer megoldása fix térbeli felosztással, az idő előrehaladtával.

9. Összefoglalás

A dolgozatban különböző differenciálegyenletek Magnus-módszerrel történő megoldásával foglalkoztunk. A numerikus közelítéseket a MATLAB programnyelvben valósítottuk meg, eközben vizsgáltuk a Magnus-féle numerikus módszer konvergenciáját is. Továbbá összehasonlítottuk az `expm` és az `expmv` függvények hatékonyságát. Észrevehető, hogy a két függvény pontossága mindig teljesen azonos, legyen a megoldandó feladat közönséges vagy parciális differenciálegyenlet. Ismert megoldású kiinduló feladatokat választottunk, így a pontos értékektől való eltérés hibája is megállapítható volt. Természetesen a numerikus közelítés egy egzakt megoldást nem tud teljesen visszaadni, de a hiba igen kicsi, ezred nagyságrendű.

Mivel pontosságuk szerint mindkét függvény ugyanolyan jó, a gyorsaságuk dönt arról, hogy az adott feladat megoldásához melyiket érdemes használnunk. Megfigyeltük a futási időt a teljes tridiagonális mátrixokkal és az ezekből kapott ritka mátrixokkal is. Megállapítottuk, hogy kis mátrixokra az `expm` a gyorsabb, azonban megmutattuk, hogy a hővezetés és az advekción egyenlet nagy mátrixaira már az `expmv` a hatékonyabb. Rámutattunk a sekélyfolyadék-egyenletek és az advekción egyenlet közötti kapcsolatra, hiszen az utóbbihoz megírt Magnus-féle közelítés szerves része az egyenletrendszer megoldásának. Megállapítottuk, hogy ezentúl csak nagy méretű blokkmátrixokkal kell dolgoznunk, ezeket ritka mátrixokként kezeljük, a Magnus-módszerhez pedig az `expmv` függvényt használjuk.

Ezen eredmények birtokában tekintettük az egydimenziós a sekélyfolyadék-egyenleteket a megfelelő kezdeti- és peremfeltételekkel. Elsőként a linearizált egyenletrendszer feladataira végeztük el a numerikus közelítést. A véges különbségekkel történő diszkretizálást követően ismertettük a numerikus megoldást, azaz a magasság és a sebesség időbeli változását egy adott térbeli felosztás mellett. A lineáris változat után az időfüggő, azaz a nemlineáris megoldásba ültettük át a megszerzett tapasztalatainkat, természetesen a megfelelő változtatásokkal. Eredményeink igazolják, hogy a Magnus-módszer és az időbeli diszkretizációnk pontos, a megoldásban a térbeli diszkretizáció hiába dominál. A dolgozatban tehát vizsgáltuk azokat az eszközöket, amelyekkel a sekélyfolyadék-egyenletek megoldása hatékonyra tehető. Különböző feladatokon értelmeztük a Magnus-módszert és az ehhez kapcsolódó exponenciális-számítási módokat, kísérleteink eredményeit használtuk fel az egyenletrendszer megoldásához. További céljaink között szerepel a numerikus módszer összehasonlítása más sémákkal nyert közelítésekkel, illetve jobb térbeli diszkretizáció alkalmazása.

Köszönetnyilvánítás

Sok-sok köszönet illeti Csomós Petrát munkám folyamatos irányításáért és figyelemmel kíséréséért. Köszönöm, hogy bevezetett a differenciálegyenletek világába, utánozhatatlan ötleteivel és lelkesedésével szüntelenül motivált. Nagyon köszönöm Havasi Ágnesnek a témaválasztásban és a programozásban nyújtott segítséget. Külön köszönöm precízségét, a dolgozat matematikai háttérének koordinálását, továbbá a tőle kapott állandó hitet és biztatást. Nem lehetek elég hálás Breuer Hajnalkának, a technikai részletekben, képi megjelenítésben nyújtott segítségéért és a folyamatos támogatásáért.

Mindháromuknak köszönöm a dolgozatom többszöri átnézését és végtelen türelmüket, amivel segítették munkámat. Mindannyiunk életében vannak példaképek, azok, akik miatt törekszünk saját magunk legyőzésére, jobbá tételére. Számomra ők testesítik meg a szakmai és emberi példaképet és ez mindennél többet ér.

Szeretném megköszönni az apróbb részletekben nyújtott segítséget Bán Beatrixnak, továbbá hálás vagyok Karsai Krisztinának, aki az edzéseken aktív kikapcsolódással segítette a felmerülő programozási problémáim megoldását.

A dolgozatot Édesapámnak ajánlom.

10. Irodalomjegyzék

- Al-Mohy, A. H., Higham, N. J., 2011: Computing the action of the matrix exponential, with an application to exponential integrators, *SIAM journal on scientific computing*, 33(2), 488–511.
- Bátkai, A., Sikolya, E., 2012: The norm convergence of a Magnus expansion method, *Central European Journal of Mathematics*, 10, 150–158.
- Belousov, S. L., Berkovich, L. V., Sitnikov, I. G., Shnaidman, V. A., 2009: Mathematical Modeling in Meteorology and Weather Forecasting. In: *Mathematical Models of Life Support Systems* (Szerk.: Agoshkov, V. I., Puel, J.-P.) in *Encyclopedia of Life Support Systems (EOLSS)*, Developed under the Auspices of the UNESCO, Eolss Publishers, Paris, France, [<http://www.eolss.net>]. 10 p.
- Blanes, S., Casas, F., Oteo, J. A., Ros, J., 2009: The Magnus expansion and some of its applications, *Physics Reports*, 470(5-6), 151–238.
- Blanes, S., Casas, F., Oteo, J. A., Ros, J., 1998: Magnus and Fer expansions for matrix differential equations: the convergence problem, *J. Phys. A: Math, Gen.*, 22, 259–268.
- Broomans, P., 2003: Numerical Accuracy in Solutions of the Shallow-Water Equations, Master Thesis, TU Delft and WL, 94 p.
- Casas, F., 2007: Sufficient conditions for the convergence of the Magnus expansion, *J. Phys. A: Math. Theor.*, 40, 15001–15017.
- Chang, D., Light, J. C., 1969: Exponential solution of the Schrödinger equation: potential scattering, *J. Chem. Phys.*, 50, 2517–2525.
- Czelnay, R., Götz, G., Iványi, Zs., 1991: Bevezetés a meteorológiába II.: A mozgó légkör és óceán, *Egyetemi Tankönyv, ELTE, Budapest*, 403 p.
- Crowhurst, P., Li, Z., 2013: Numerical Solutions of One-Dimensional Shallow Water Equations. In: *Computer Modelling and Simulation (UKSim)*, 2013 UKSim 15th International Conference on Computer Modelling and Simulation. 10.1109/UKSim.2013.63, pp 55–60.
- Csomós, P., Winckler, J., 2014: On the well-posedness of the linearised shallow water equations, *megjelenés alatt*.

- Delis, I., Katsaounis, T. 2005: Numerical solution of the two-dimensional shallow water equations by the application of relaxation methods, *Applied Mathematical Modelling*, 29(8), 754–783.
- Faragó, I., Havasi, Á., Horváth, R., 2012: Numerical solution of the Maxwell equations in time-varying media using Magnus expansion, *Central European Journal of Mathematics*, 10(1), 137–149.
- George, D., L. 2004: Numerical Approximation of the Nonlinear Shallow Water Equations with Topography and Dry Beds : A Godunov-Type Scheme, Thesis, University of Washington, Washington, 54 p.
- González, C., Ostermann, A., Thalhammer, M., 2006: A second-order Magnus-type integrator for nonautonomous parabolic problems, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 189(1-2), 142–156.
- González, C., Thalhammer, M., 2007: A second-order Magnus-type integrator for quasi-linear parabolic problems, *Mathematics of Computation*, 76(257), 205–232.
- Havasi, Á., 2000: A spektrális barotróp modell matematikai vizsgálata és adjungált változata, Diplomamunka, ELTE, Budapest, 80 p.
- Hochbruck, M., Lubich, C., 2003: On Magnus Integrators for Time-Dependent Schrödinger Equations, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 41(3), 945–963.
- Horányi, A., Ihász, I., Radnóti, G., 1998: Az időjárás számszerű előrejelzése, *Természet Világa*, 129, különszám, 39–42.
- Hudson, J., 2009: Numerical Techniques for the Shallow Water Equations, Thesis, University of Reading, Reading, 64 p.
- Iserles, A., Nørsett, S. P., Rasmussen, A. F., 2001: Time symmetry and high-order Magnus methods, *Applied Numerical Mathematics*, 39(3-4), 379–401.
- Jakeman, J., 2006: On Numerical Solutions of the Shallow Water Wave Equations, Bachelor Thesis, 118 p.
- LeVeque, R. J., 2004: Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems, Cambridge Texts in Applied Mathematics, Cambridge University Press, 580 p.
- Magnus, W., 1954: On the exponential solution of differential equations for a linear operator, *Comm. Pure Appl. Math.*, 7, 649–673.

- Moler, C. B., Van Loan, C. F., 2004: Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix, *Siam Review*, 20(4), 801–836.
- Nagy, K., 1985: *Elméleti mechanika*, Tankönyv, Tankönyvkiadó, Budapest, 476 p.
- Pechukas, P., Light, J. C., 1966: On the exponential form of time-displacement operators in quantum mechanics, *J. Chem. Phys.*, 44, 3897–3912.
- Práger, T., 1982: *Numerikus prognosztika I.: A hidrodinamikai előrejelzés elmélete*, Tankönyvkiadó, Budapest, 327 p.
- Stoyan, G., Takó, G., 2008: *Numerikus módszerek III*, Tankönyv, ELTE Informatikai Kar, Budapest, 449 p.
- Wei, J., 1963: Note on global validity of the Baker-Hausdorff and Magnus theorems, *J. Math. Phys.*, 4, 1337–1341.
- Wei, J., Norman, E., 1963: Lie algebraic solution of linear differential equations, *J. Math. Phys.*, 4, 575–581.
- Weidinger, T., Baranka, Gy., Bordás, Á., Gyuró, Gy., Havasi, Á., Leelőssy, Á., Mészáros, R., Szépszó, G., Tasnádi, P., 2013: *Klasszikus dinamikus meteorológiai feladatgyűjtemény II*, E-Tankönyv, ELTE Természettudományi Kar, Budapest.
- Zhou, J. G., Causon, D. M., Ingram, D. M., Mingham, C. G., 2002: Numerical solutions of the shallow water equations with discontinuous bed topography, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 38(8), 769–788.