Az ismételt Richardson-extrapoláció adaptív alkalmazása légkörkémiai modellben

Havasi Ágnes

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

TKP Workshop, 2022. január 13-14.

NATIONAL RESEARCH, DEVELOPMENT AND INNOVATION OFFICE HUNGARY
PROGRAM FINANCED FROM THE NRDI FUND

Vázlat

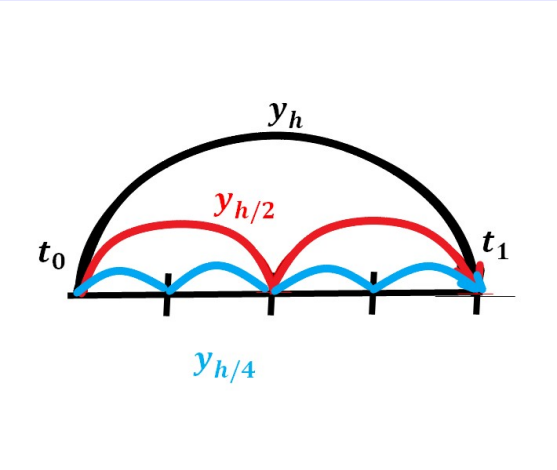
- Az ismételt Richardson-extrapoláció (RE) elve
- Adaptív alkalmazás
- Numerikus kísérletek lineáris tesztfeladaton
- Alkalmazás légkörkémiai modellben
- További kutatási irányok
- Konferenciaelőadások, publikációk

Az ismételt RE elve

KDER Cauchy-feladata:

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

Választunk egy p-ed rendű alapmódszert.
CRE (Klasszikus RE): h és $h/2$ lépésközzel is megoldjuk a feladatot, és a megoldásokat lineárisan kombináljuk úgy, hogy $p+1$-ed rendű módszert nyerjünk.
Egyik továbbfejlesztés: ismételt RE (RRE)



Általánosítás: q-szor ismételt RE (qTRRE)

- $q+2$ rácsot használunk ($q=0$: CRE; $q=1$: RRE)
- Ha f $p+q+1$-szer folytonosan differenciálható, akkor a kombinált módszer pontossági rendje $p+q+1$. (Pl. ha $p=2$, és $q=8$, akkor 11-ed rendű módszert nyerünk.)
- A qTRRE tehát annál nagyobb pontosságot biztosít, minél nagyobb q. De a módszer annál költségesebb is.
- Kisebb lépésköz $\rightarrow$ nagyobb pontosság (nagyobb költség).
- Úgy kellene megválasztani q-t és h-t minden időlépcsőben, hogy az előírt pontosságot a legkisebb ráfordítással érjük el.
- Belső hibabecslést dolgoztunk ki, és ez alapján választjuk meg q-t és h-t.

Példák hibabecslő formulákra

- CRE:

$$EST_n^{[0]} = \frac{z_n^{[1]} - z_n^{[0]}}{2^p - 1} \tag{2}$$

- RRE:

$$EST_n^{[1]} = \frac{2^p z_n^{[2]} - (2^p + 1) z_n^{[1]} + z_n^{[0]}}{2^{2p+1} - 3 \cdot 2^p + 1} \tag{3}$$

- 2TRRE:

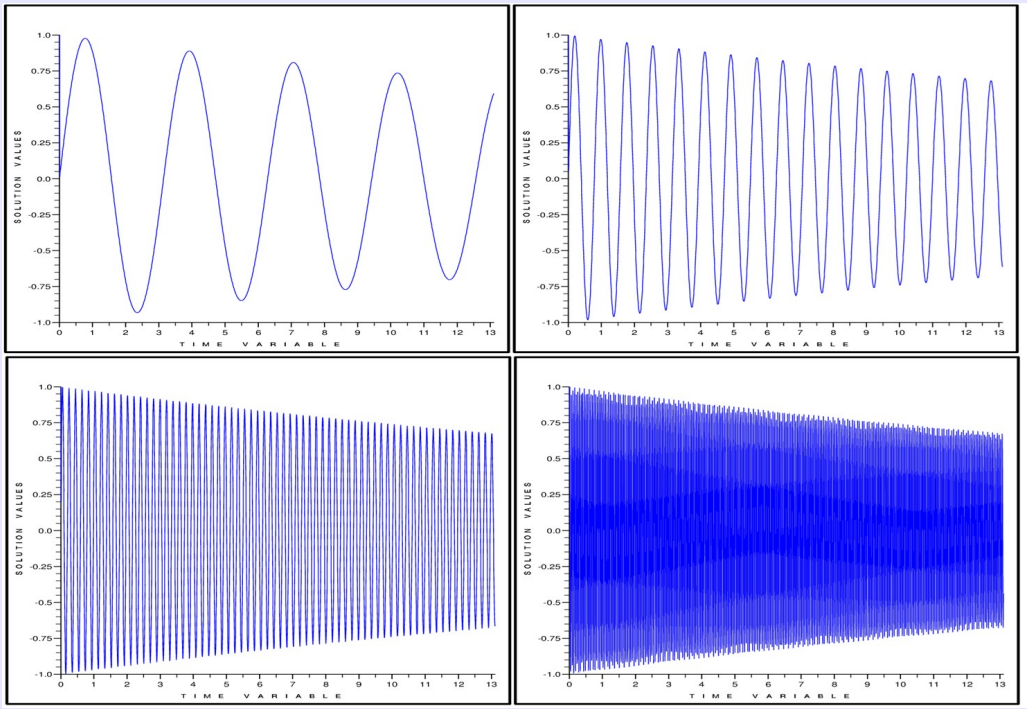
$$EST_n^{[2]} = \frac{2^{3p+3} z_n^{[3]} - 7 \cdot 2^{2p+1} z_n^{[2]} + 7 \cdot 2^p z_n^{[1]} - z_n^{[0]}}{2^{3p+3} - 7 \cdot 2^{2p+1} + 2^p - 1} \tag{4}$$

Az adaptív algoritmus kulcsparamétere:

$$RATIO = \delta \left(\frac{TOL}{EST_n^{[q]}} \right)^{\frac{1}{p+q+1}} \tag{5}$$

Numerikus kísérletek lineáris tesztfeladaton

- A cél kémiai modellben való alkalmazás $\rightarrow$ alapmódszernek implicit módszereket választottunk: IE ($p = 1$), DIRK23, FIRK35.
- Háromparaméteres lineáris tesztfeladat - egy paraméter megfelelő megválasztásával szabályozható, hogy a megoldás mennyire sűrűn oszcilláljon.



A tesztfeladat

$$\frac{dy}{dx} = Ay, \qquad x \in [0, 13.1072], \qquad y = (y_1, y_2, y_3)^T, \qquad A \in \mathbb{R}^{3\times 3}$$

Kezdeti vektor:

$$\eta = y(0) = (1, 0, 2)^T,$$

Az A mátrix elemei:

$$a_{11} = -\gamma - \xi - 2\delta \qquad a_{12} = -\gamma - \delta \qquad a_{13} = \gamma + \xi + \delta$$
$$a_{21} = \gamma - 2\xi + \delta \qquad a_{22} = \gamma - \xi \qquad a_{23} = -\gamma + \xi - \delta$$
$$a_{31} = -\gamma - 3\xi - \delta \qquad a_{32} = -\gamma - \xi - \delta \qquad a_{33} = \gamma + 2\xi$$

Pontos megoldás:

$$y_1(x) = e^{-\delta x}\sin\xi x + e^{\gamma x},$$
$$y_2(x) = e^{-\delta x}\cos\xi x + e^{\gamma x},$$
$$y_3(x) = e^{-\delta x}(\sin\xi x + \cos\xi x) + e^{\gamma x}$$

Az A mátrix sajátértékei:

$$\lambda_1 = \gamma \le 0, \qquad \lambda_2 = -\delta + \xi i, \qquad \lambda_3 = -\delta - \xi i, \qquad \delta \ge 0$$

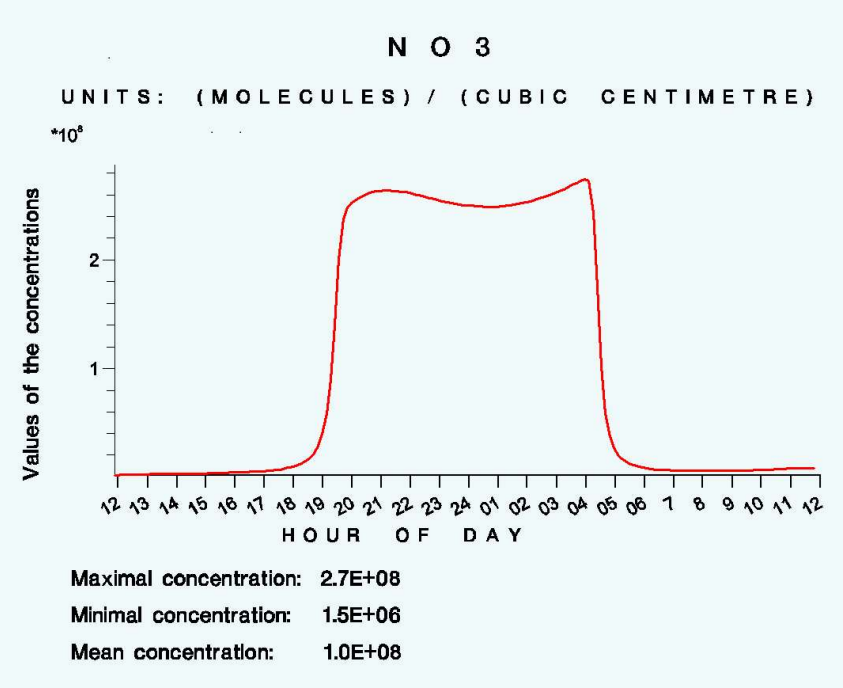
Hányszor hívta meg az algoritmus a RRE különböző verzióit?

ξ	CRE	RRE	2TRRE	3TRRE	4TRRE	5TRRE	6TRRE	7TRRE	8TRRE
2	15	513	76	0	0	0	0	0	0
4	0	8	297	117	0	0	0	0	0
8	0	0	4	39	239	0	0	0	0
16	0	0	0	42	50	239	25	21	0
32	0	0	0	0	19	27	4	248	21
64	0	0	0	0	0	4	5	124	265
128	0	0	0	0	0	0	51	630	1008
256	0	0	0	0	0	0	403	1946	2253
512	0	0	0	0	0	0	352	2832	3805

- Nagy pontossági elvárás esetén szükség van a nagyobb ismétlésszámú verziókra.
- Ez utóbbiak valóban csak akkor hívódnak meg, amikor szükséges.

Alkalmazás légkörkémiai modellben

- UNI-DEM légkörkémiai almodellje
- 56 anyagfajta
- nemlineáris, erősen merev rendszer
- a koncentrációk gyorsan változhatnak
- 24 órás időintervallumon oldottuk meg az előbbi implicit módszerekkel



FIRK35 módszer - időlépések száma a pontos és a becsült hibával

TOL	Sikeres lépések	Elvetett lépések	Pontos max. hiba	Becsült max. hiba
10^{-10}	349	0	1.528E−11	4.770E−11
10^{-11}	359	0	5.188E−12	7.807E−12
10^{-12}	430	3	7.031E−13	8.479E−13
10^{-13}	532	6	7.531E−14	8.337E−14
10^{-14}	571	8	1.014E−14	9.979E−15
10^{-15}	786	9	4.947E−15	9.475E−16
10^{-16}	1074	13	3.184E−16	9.933E−17
10^{-17}	619	9	2.593E−17	4.544E−19
10^{-18}	1245	9	1.602E−17	6.809E−19
10^{-19}	1381	20	1.059E−18	9.332E−20
10^{-20}	1023	17	5.133E−19	9.507E−21

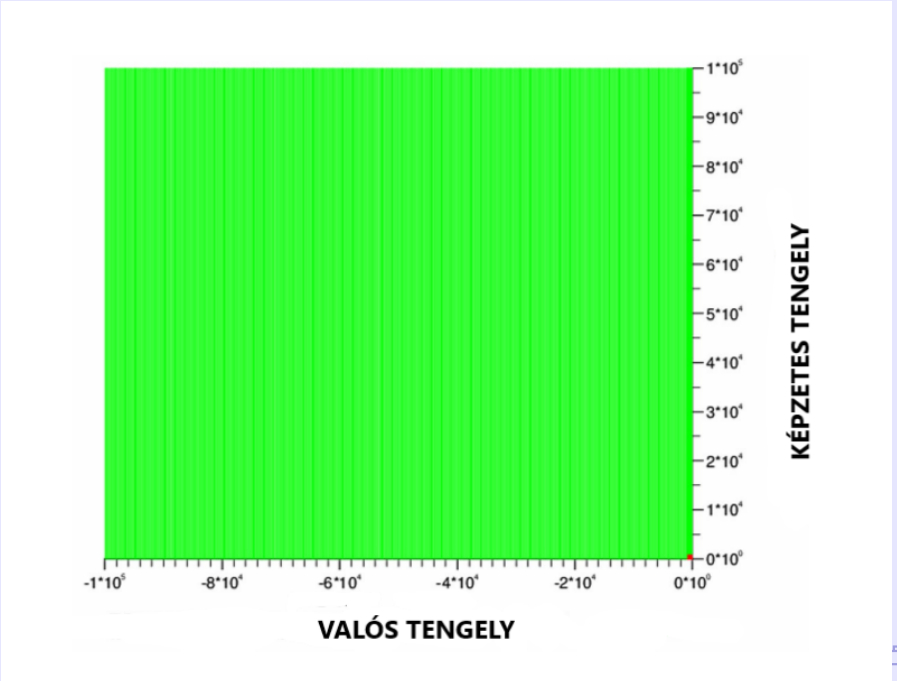
FIRK35 módszer - hányszor hívta meg az algoritmus a RRE különböző verzióit?

TOL	CRE	RRE	2TRRE	3TRRE	4TRRE	5TRRE	6TRRE	7TRRE	8TRRE
10^{-11}	213	93	21	15	8	3	1	3	2
10^{-20}	3	156	96	266	221	136	95	49	18

- Az elvégzett időlépések száma kevéssé változik TOL változtatásával.
- Kisebb TOL esetén inkább nagyobb ismétlésszámot választ a program, mintsem rövidebb lépésközt.
- A legköltségesebb verzió nagyon ritkán hívódik meg.

Az abszolút stabilitás kérdése

- Az abszolút stabilitás már a RRE alkalmazásánál elromlik.
- qTRRE: A stabilitási tartományhoz tartozó pontokat numerikusan határoztuk meg egy 10^5 oldalhosszúságú négyzeten belül.
- Példa: FIRK35 + 7TRRE: Csak a pirossal jelölt pixelben merülhet fel stabilitási probléma. (A többinél hasonló.)
- A numerikus kísérletekben nem lépett fel instabilitás.



Együttműködés Fekete Imrével és Lóczi Lajossal

Kérdések:

1. Lehet/érdemes-e a CRE módszerét többlépéses módszerekre alkalmazni?

2. Javítható-e a belső hibabecslés az ismételt RE adaptív alkalmazása során?

Konferenciaelőadások

T. Bayleyegn, Á. Havasi: The method of multiple Richardson extrapolation, Developments In Computer Science Conference, Budapest, 2021. június 17-19.

T. Bayleyegn, I. Faragó, Á. Havasi: On the consistency order of Runge–Kutta methods combined with active Richardson Extrapolation, 13th International Conference on Large-Scale Scientific Computations, 2021. június 7 - 11, Szozopol, Bulgária (előadás és cikk).

Z. Zlatev, I. Dimov, I. Faragó, K. Georgiev, Á. Havasi: Running an atmospheric chemistry scheme from a large air pollution model by using advanced versions of the Richardson Extrapolation, 13th International Conference on Large-Scale Scientific Computations, 2021. június 7 - 11, Szozopol, Bulgária (előadás és cikk).

További publikációk

Z. Zlatev, I. Dimov, I. Faragó, K. Georgiev, Á. Havasi: Efficient implementation of advanced Richardson Extrapolation in an atmospheric chemical scheme, J. Math. Chem. (0259-9791 1572-8897): (2021)

T. Bayleyegn, Á. Havasi: Multiple Richardson Extrapolation Applied to Explicit Runge–Kutta Methods In: Fidanova, Stefka; Dimov, Ivan (szerk.) Advances in High Performance Computing Springer International Publishing (2021) pp. 262-270. Paper: Chapter 22, 9 p.