

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Meteorológiai Tanszék

A Richardson-extrapoláció numerikus alkalmazásai

Tudományos Diákköri Dolgozat



Készítette: Mona Tamás
Meteorológus MSc.

Témavezetők:

Dr. Lagzi István László
BME Fizikai Intézet

Dr. Havasi Ágnes
ELTE-TTK Alkalmazott Analízis Tanszék

Budapest, 2012.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	3
2. Richardson-extrapoláció	4
2.1. Extrapolációs módszerek	4
2.2. Passzív Richardson-extrapoláció	4
2.3. Aktív Richardson-extrapoláció	5
3. Modell alkalmazások	6
3.1. Diffúzió	7
3.1.1. Diffúzió változatai	12
3.2. Advekción	14
3.3. Cahn-Hilliard-féle reakció-diffúzió	17
4. Összefoglalás	18
A. Függelék (ábrák)	19
B. Függelék (táblázatok)	23
Hivatkozások	25

1. Bevezetés

A tudományos munka során gyakran ütközünk abba az akadályba, habár a természeti jelenségeket leíró parciális differenciálegyenleteket ismerjük ugyan, de nem tudjuk azok megoldását analitikus úton vagy zárt alakban megadni. Ezért kénytelenek vagyunk közelítő eljárásokat kidolgozni az adott problémára vonatkozó egyenlet megoldására. Az ilyen eljárásokat nevezzük numerikus modelleknek.

A numerikus modellek számtalan közelítési taktikát alkalmaznak, de legáltalánosabban a parciális differenciál hányadosok véges különbséges közelítése terjedt el. Ez alatt azt értjük, hogy az egyébként infinitezimális megváltozásokon alapuló differenciálhányadosokat, úgynevezett véges különbségek hányadosaként szemléljük. Egy ilyen módszer eredménye hibával terhelt, vagyis nem feltétlenül ad eléggé pontos eredményt. Az, hogy mit nevezünk *eléggé pontosnak*, az adott feladattól függ. Triviális, hogy minél kisebbek a hányadosban szereplő különbségek, annál pontosabb az eredmény. Vagyis ha csökkentjük a lépésközt, a valóságnak jobban megfelelő eredményt kapunk. Ezeket az eljárásokat hatékonyan csak numerikus úton lehet kivitelezni. Tehát a pontosságnak csupán a számítási kapacitás szab határt.

Ám nincsen köbe vésett módszer arra, hogy egy véges differenciálokon alapuló modellt hogyan kell felépíteni. Számtalan közelítési módszer létezik, melyek pontossága azonos számítási kapacitás mellett más és más. Vannak eljárások, melyek pontossága igen nagy, de olyan nagy a számítási igényük, hogy inkább egy kevésbé pontos, de kisebb gépigénnyel dolgozó módszert vagyunk kénytelenek választani. Tehát az ideális módszer az lenne, ami képes a lehető legvalóságosabb eredményt produkálni, miközben elfogadható erőforrásigénnyel lép fel.

Az egyik ilyen jól használható módszert Richardson-extrapolációnak nevezzük. Az elmúlt években számos elméleti és részben gyakorlati munka született ennek az eljárásnak a taglalásával kapcsolatosan (*Brajnovits*, 2011; *Faragó et al.*, 2010). Viszont részletes numerikus alkalmazásokról ez eddig nem igen esett szó. Érdekes tehát megvizsgálni, hogy eme ígéretes eljárás vajon a gyakorlatban is teljesíti-e az elméleti úton hozzá fűzött reményeket.

Az alábbiakban górcső alá vesszük a Richardson-féle módszer hatékonyságát egyszerű egydimenziós numerikus problémákon keresztül (diffúzió, advekció, reakció-diffúzió). Látni fogjuk, hogy az extrapolációs eljárás rendkívül meggyőző eredményeket mutat fel, ha összevetjük az adott problémára vonatkozó hagyományosnak nevezhető euleri megoldással. A Richardson-extrapoláció sok esetben több nagyságrenddel is pontosabb, mint az utóbb említett módszer azonos futási idők mellett.

2. Richardson-extrapoláció

Egy indokolatlanul nagy lépésközzel futtatott modell nem biztos, hogy megfelelően pontos eredményt ad, ezért célszerű kisebb lépésközzel is lefuttatni az eljárást. Ilyenkor a korábbi futási eredményeket figyelmen kívül hagyjuk, csak növelnénk az erőforrásigényt. Keresnünk kell egy olyan eljárást, ahol nem végzünk felesleges számításokat, vagyis sokkal hatékonyabban használjuk ki a rendelkezésünkre álló számítási erőforrásokat.

Ennek a dilemmának a feloldására alkalmas a Richardson által kidolgozott rendkívül ötletes extrapolációs módszer (*Richardson, 1927*). Az eljárás lényege abból áll, hogy újra lefuttatja a modellt fele akkora lépésközzel, de nem hagyja veszendőbe menni az előző – kevésbé pontos – futtatás eredményeit sem. A két különféle lépésközzel megkreált eredményt a folyamat végén megfelelő logikával *összefésüli*. Ennek köszönhetően, ha az eredeti futtatás eredménye p -ed rendben pontos volt, az extrapolációs eljárással minimum $2p$ -ed rendben pontos eredményt fogunk kapni.

A Richardson-extrapolációnak két változata van, az aktív és a passzív. Szemléljük elsőként a passzív módszer elméleti hátterét. Ehhez előbb még meg kell értenünk az eljárás magját képező extrapolációs elv matematikai lényegét.

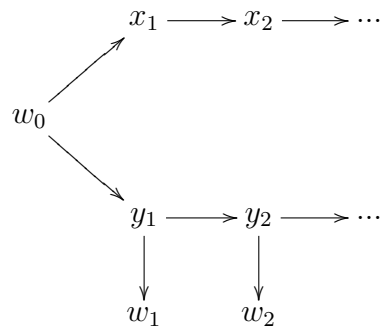
2.1. Extrapolációs módszerek

Amennyiben egy p -ed rendben konvergens numerikus modellt alkalmazunk egy kezdetiérték-feladatra; az extrapoláció segítségével kiejthetjük az ez esetben óhatatlanul fellépő globális hiba vezető tagját vagy akár tagjait és ezzel p -ed rendűnél jóval gyorsabb konvergenciát produkálhatunk (*Brajinovits, 2011*).

2.2. Passzív Richardson-extrapoláció

Richardson eredetileg két eltérő lépésközü időréteg kombinációjával kívánt elérni a p -ed rendű pontosságból $p+1$ -ed rendben konvergens megoldást. Ez az alapötlet viseli a passzív Richardson-extrapoláció elnevezést.

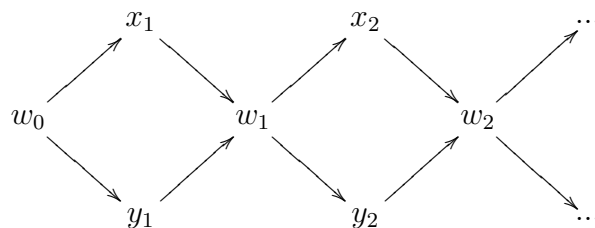
Lényege, hogy a két időréteg megoldásait rendre kombinálva jutunk a jobb eredményre, de ezeket az eredményeket nem használjuk fel az újabbak kidolgozása során. Vagyis mindig csupán a két időréteg adott megoldását vetjük össze és származtatjuk belőlük a végső megoldást (1. ábra).



1. ábra. Passzív Richardson-extrapoláció

2.3. Aktív Richardson-extrapoláció

A passzív módszer továbbgondolása, hogy nem csak legyártjuk az eredményeket, hanem felhasználjuk az újabbak elkészítéséhez. Vagyis a két időréteg eredményéből kapott végső eredményből léptetjük tovább mindkét időréteget az eltérő lépésközzel, és az így kapott újabb eredményeket kombinálva haladunk tovább hasonlóképpen (2. ábra).



2. ábra. Aktív Richardson-extrapoláció

Azt várnánk, hogy ez a logikus továbbfejlesztés pontosabb eredményeket képez, azonban ahogy a későbbiekben látni fogjuk, ez nem feltétlen teljesül. A gyakorlat azt mutatja, hogy az aktív változat hatékonysága elmarad a passzív *egyszerű* tökéletessége mögött.

3. Modell alkalmazások

Az alábbiakban megvizsgáljuk a Richardson-extrapoláció passzív és aktív változatának hatékonyságát egydimenziós modellek esetében. Az egyik legegyszerűbb explicit euleri közelítést választjuk az eljárások alapsémájának. A módszer attól explicit, hogy a megoldás során kizárólag olyan adatokat használunk fel, amelyek az adott időlépcsőben a rendelkezésünkre állnak. A deriváltakat a következőképpen közelítjük:

$$\frac{dc}{dt} = \frac{c(t_{n+1}) - c(t_n)}{\Delta t}$$

ahol $c(t_{n+1})$ és $c(t_n)$, c t_{n+1} -dik és t_n -dik időpillanatban felvett értéke, illetve Δt az időlépték. Kifejezve $c(t_{n+1})$ -t, láthatjuk, hogy a kapott összefüggés, csak ismert t_n -dik időpillanathoz tartozó értékeket tartalmaz.

$$c(x_m, t_{n+1}) = c(x_m, t_n) - f(x_m, t_n) \cdot \Delta t$$

ahol $f(x_m, t_n)$ az adott problémára vonatkozó differenciál egyenletből származó függvény az x_m helyen és természetesen a vizsgált t_n idő pillanatban. Minden modellszimuláció során Neumann-féle peremfeltételt alkalmaztunk.

A vizsgálataink során ügyeltünk arra, hogy az időintervallum hossza és az időlépték szorzata állandó maradjon, a pontosabb eredmény érdekében csökkentettük az időléptéket, arányosan növeltük az iterációs időt.

Minden modellszimuláció esetében mértük, hogy az adott beállítások mellett a program mennyi idő alatt fut le effektíve. Ezt nevezhetjük a számítás gépigényének, mivel az igen egyszerű modellek esetében eltekintettünk a memória optimális kihasználásától. Csupán arra összpontosítottunk, hogy minél gyorsabb, egyszerűbb, illetve áttekinthetőbb programokat kapjunk. A modellprogramok hagyományos *C* programnyelven íródtak. A futási időt a *time.h* header által tartalmazott *clock()* függvény segítségével mértük.

Nagyon fontos megjegyezni, hogy a számításokat kizárólag egyazon *Toshiba Satellite L750-1n3* laptopon végeztük Ubuntu 12.04 LTS operációs rendszerben futtatott terminál segítségével, a használt *C* fordító pedig a Linux terminálban könnyen használható *g++* volt. Tehát az időmérés során kapott eredményeket némi bizonytalansággal kell szemlélnünk, mert a futtatások során nem küszöböltük ki az operációs rendszer számtalan belső algoritmusából származtatható hibaforrásokat. A mérés azonos feltételek mellett más-más időeredményt adott, mert kapacitást vonhattak el háttérben futó

programok is. A szimulációkat az ELTE-TTK egyik Linux alapú gépén is elvégeztük, melyben ez a bizonytalanság nem jelent meg – az újra futtatott programok rendre azonos időmérési eredményt adtak, azonban a rendelkezésünkre álló egyetemi gépnek legalább másfélszer annyi időre volt szüksége a programok lefuttatásához. Ezért döntöttünk a nagyságrendileg pontos, ám nem egzakt időmérés mellett.

3.1. Diffúzió

Alapfeladatunk egy egydimenziós diffúziós probléma.

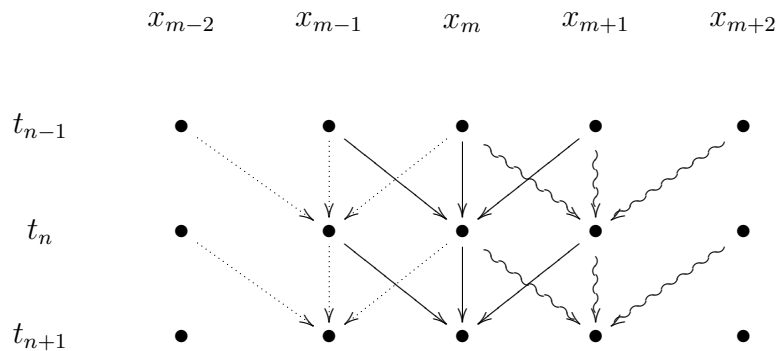
$$\frac{\partial c}{\partial t} - D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0 \quad (1)$$

ahol D az adott problémára vonatkozó diffúziós-állandó. Az egyszerűség kedvéért a számításokban ezt mindenütt egynek vettük.

A fenti feladat explicit Euler-sémával történő diszkretizációja az alábbi összefüggéshez vezet:

$$c(x_m, t_{n+1}) = c(x_m, t_n) + D \cdot \frac{c(x_{m-1}, t_n) - 2 \cdot c(x_m, t_n) + c(x_{m+1}, t_n))}{\Delta x^2} \cdot \Delta t \quad (2)$$

Vagyis egy adott x_m helyen egy újabb időpillanatban szereplő érték kiszámításához szükségünk van az előző időpillanatban felvett, és azzal helyileg közvetlen szomszédos értékekre is (3. ábra).



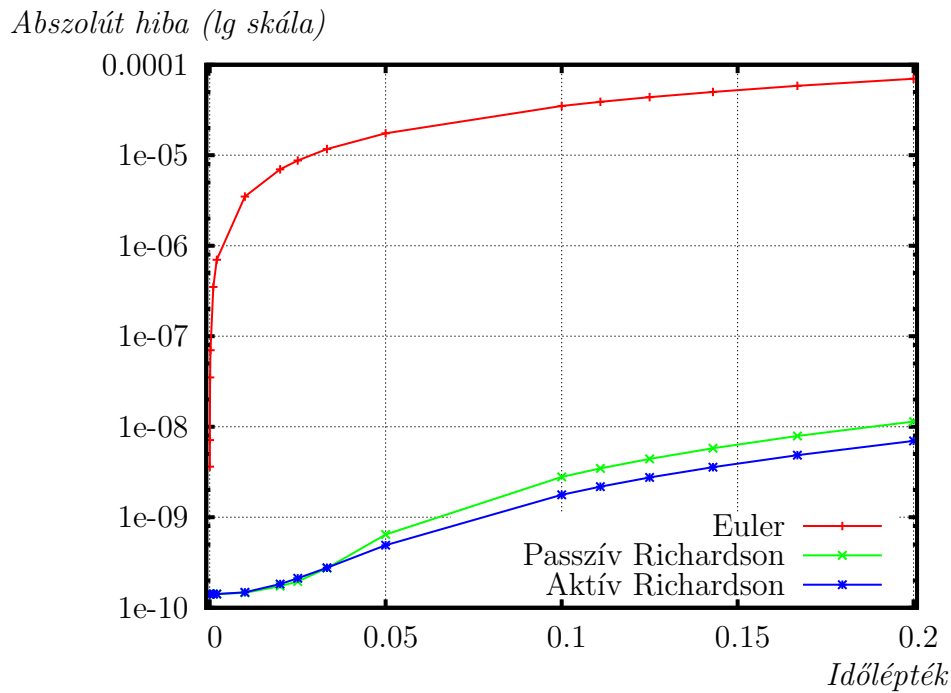
3. ábra. Explicit Euler-séma diffúzió esetén

A peremérték-feltételekre komoly figyelmet kell fordítanunk. A számítások során egy 1000 fix rácspontból álló rendszert vizsgáltunk, melynek felezőpontjánál kezdetben egy *tűske* helyezkedett el.

A nulladik időpillanatban minden rácspont értéke nulla volt, egyedül a tartomány közepén helyezkedett el egyetlen rácspont, amelyben a kezdeti érték egyre lett beállítva.

Az időlépték (*timestep*) és az iterációs idő szorzata a szimulációk során szintén változatlan volt. Úgy választottuk meg mindkettőt, hogy a szorzat értéke pontosan 1000 maradjon. Ha finomabb becslést akartunk elérni, akkor csökkentettük az időléptéket és ezzel arányosan megnöveltük az iterációs időt.

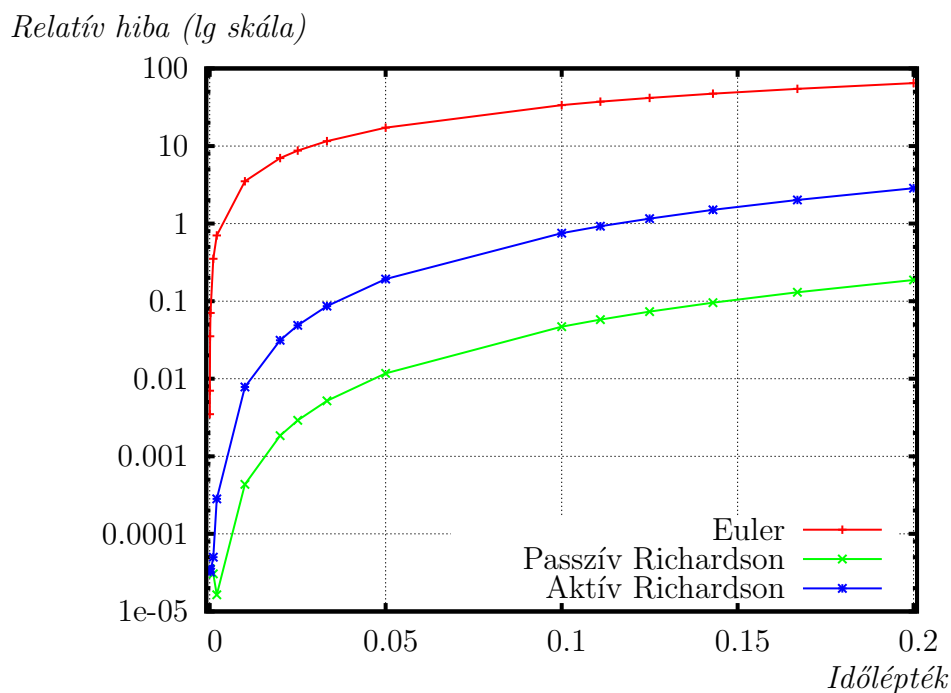
Az eltérő időlépték mellett elkészített modelleredmények haranggörbék formájában jelentek meg, melyeket statisztikai vizsgálatnak vetettük alá. Kiszámítottuk az egyes eredmények abszolút és relatív hibáját egy igen nagy pontosságú *referenciafuttatáshoz* képest. (Referencia alatt egy 10^{-7} -es időléptékű euleri megoldást értünk.) Megnéztük a csúcs értékének eltérését is a referencia csúcsához képest. A 4.-6. ábrákon ezek a futtatási hibák szerepelnek az időlépték függvényében.



4. ábra. Abszolút hibák diffúzió esetén

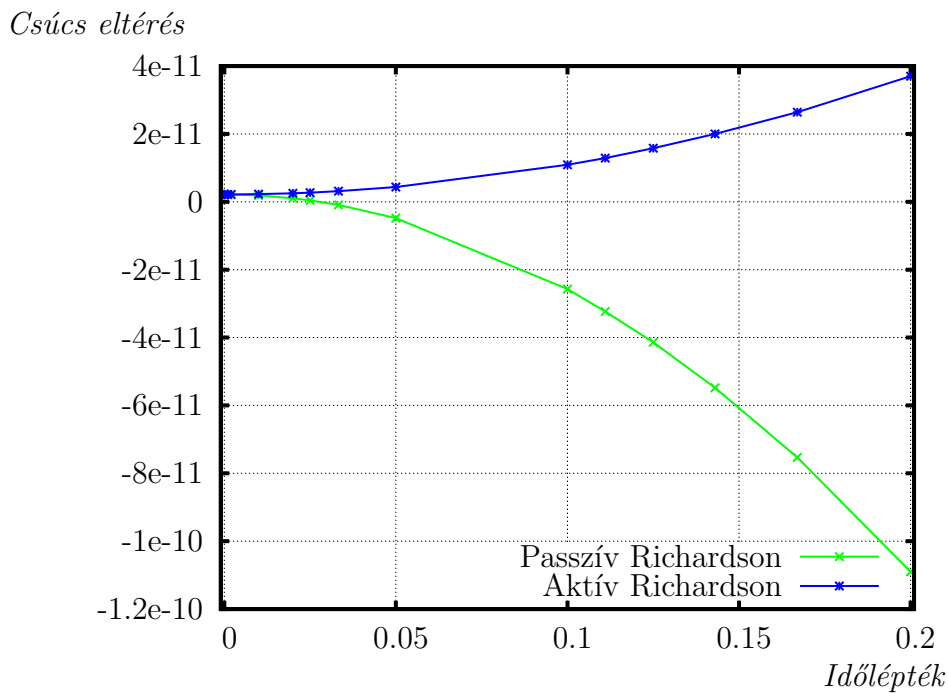
Az abszolút és a relatív hiba esetében látványosan kitűnik, hogy mennyivel pontosabb eredményt kapunk, ha valamely Richardson-módszert használjuk azonos időlépték mellett. Mindkét statisztika alapján megállapítható, hogy bizonyos időléptéknél kisebbet nem hatékony felvenni, nem eredményez jelentősen nagyobb pontosságot – ezt a 4. ábra szemlélteti a legjobban.

Az 5. ábrán nincs feltüntetve az euleri módszer csúcs eltérése, ábrázolása esetén a két extrapolációs eljárás nem mutatna látható változékonyságot. A passzív Richardson-módszer túlbecsli a csúcs értékét, nyújtottabb haranggörbét eredményez, mint a másik két módszer. Relatív hibája egyértelműen kisebb, és abszolút hiba tekintetében sem marad el az aktív Richardson eljárástól.



5. ábra. Relatív hibák diffúzió esetén

Az ábrákról leolvasható, hogy bizonyos időléptéktől kezdve már nem figyelhető meg számottevő pontosság javulás az extrapolációs módszerek esetében. Nem érdemes a Richardson-féle modelleket kicsiny időlépték mellett futtatni, csupán a futtatási idő nő.



6. ábra. Csúcs eltérés diffúzió esetén

Ezzel el is jutottunk a következő vizsgálati szemponthoz. Nem elegendő ugyanis azt látnunk, hogy adott időléptékek mellett milyen pontosságot produkálnak az eljárások. Nagyon lényeges, hogy mekkora gépigény szükséges a szimulációk elkészítéséhez. Az 1. táblázat összefoglalja a módszerek futtatási idejét és az időléptéket. Látható, hogy az extrapolációk futtatásai nagyjából kétszer annyi időt vesznek igénybe, ám nagyságrendekkel pontosabbak (7. ábra).

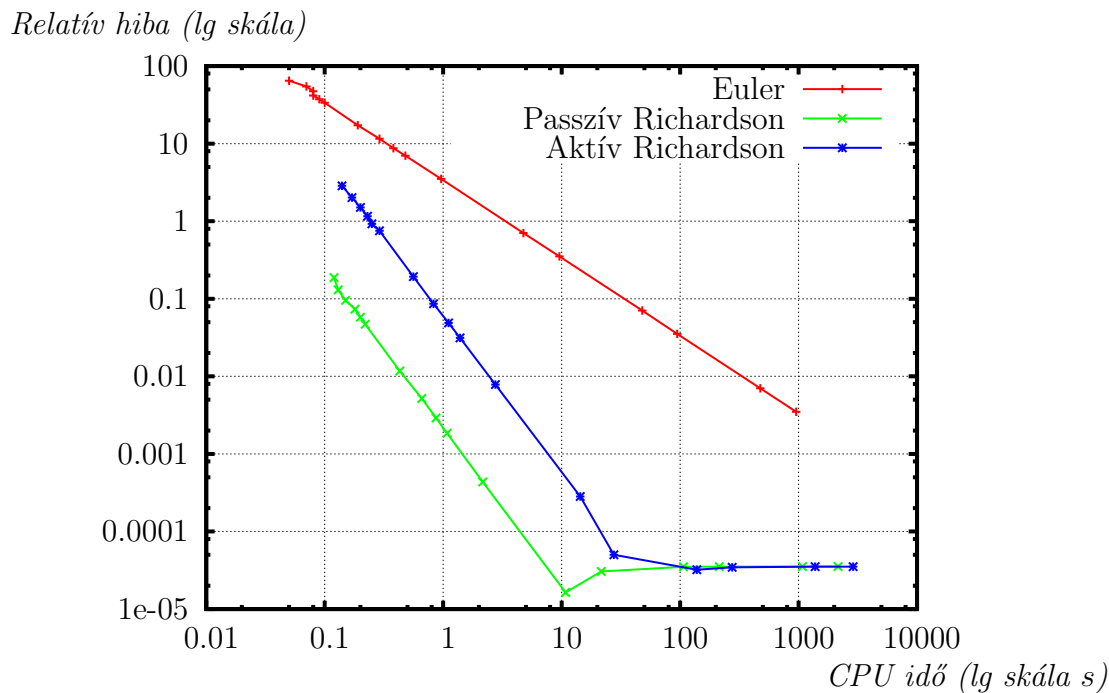
Időlépték	CPU idő (s)		
	Euler	Passzív Richardson	Aktív Richardson
$2.00 \cdot 10^{-1}$	0.05	0.12	0.14
$1.67 \cdot 10^{-1}$	0.07	0.13	0.17
$1.43 \cdot 10^{-1}$	0.08	0.15	0.2
$1.25 \cdot 10^{-1}$	0.08	0.18	0.23
$1.11 \cdot 10^{-1}$	0.09	0.2	0.25
$1.00 \cdot 10^{-1}$	0.1	0.22	0.29
$5.00 \cdot 10^{-2}$	0.19	0.43	0.56
$3.33 \cdot 10^{-2}$	0.29	0.66	0.83
$2.50 \cdot 10^{-2}$	0.38	0.87	1.11
$2.00 \cdot 10^{-2}$	0.48	1.08	1.39
$1.00 \cdot 10^{-2}$	0.96	2.16	2.76
$2.00 \cdot 10^{-3}$	4.76	10.79	14.36
$1.00 \cdot 10^{-3}$	9.57	21.64	27.62
$2.00 \cdot 10^{-4}$	47.95	106.92	138.5
$1.00 \cdot 10^{-4}$	94.58	213.67	275.3
$2.00 \cdot 10^{-5}$	474.86	1077.5	1381.5
$1.00 \cdot 10^{-5}$	953.78	2153.56	2885.96

1. táblázat. Diffúziós modellek futási időtartamai

Például, ha 0.7-es relatív hibájú futtatást követelünk meg, akkor 4.76 másodperc alatt áll elő az euleri, 0.12 másodperc alatt a passzív Richardson-extrapolációs, és 0.29 másodperc alatt az aktív Richardson-féle megoldás. Tehát az utóbbi Richardson módszer 16-szoros, az előbbi közel 40-szeres gyorsulást eredményez.

Ennél nagyobb gyorsulásokat mutat a 7. ábra, amelyen a diffúziós szimulációk relatív hibáját láthatjuk a futtatási idő függvényében. Megfigyelhető, hogy bizonyos pontosságnál nagyobb nem

tudunk megkövetelni az extrapolációktól. Továbbá az 5. ábrához hasonlóan itt is szembeűnő, hogy a passzív módszer a legpontosabb, és felvesz egy minimális hiba értéket is, aminek eléréséhez 10.79 másodperc szükséges. Ennek a futtatásnak az eredménye több mint két nagyságrenddel pontosabb, mint a legkisebb lépésközzel készített euleri megoldás.



7. ábra. Diffúzió relatív hibái a futási idők szerint

Az eredmények alapján egyértelműen kijelenthető, a Richardson-extrapolációs eljárásokat érdemes használni egy általános diffúziós probléma numerikus megoldása során. Az időléptéket pedig annak függvényében érdemes megválasztani, milyen pontosságot várunk el az eredményektől, illetve várhatóan mely időléptéktől kezdve válik a hiba stacionáriussá.

3.1.1. Diffúzió változatai

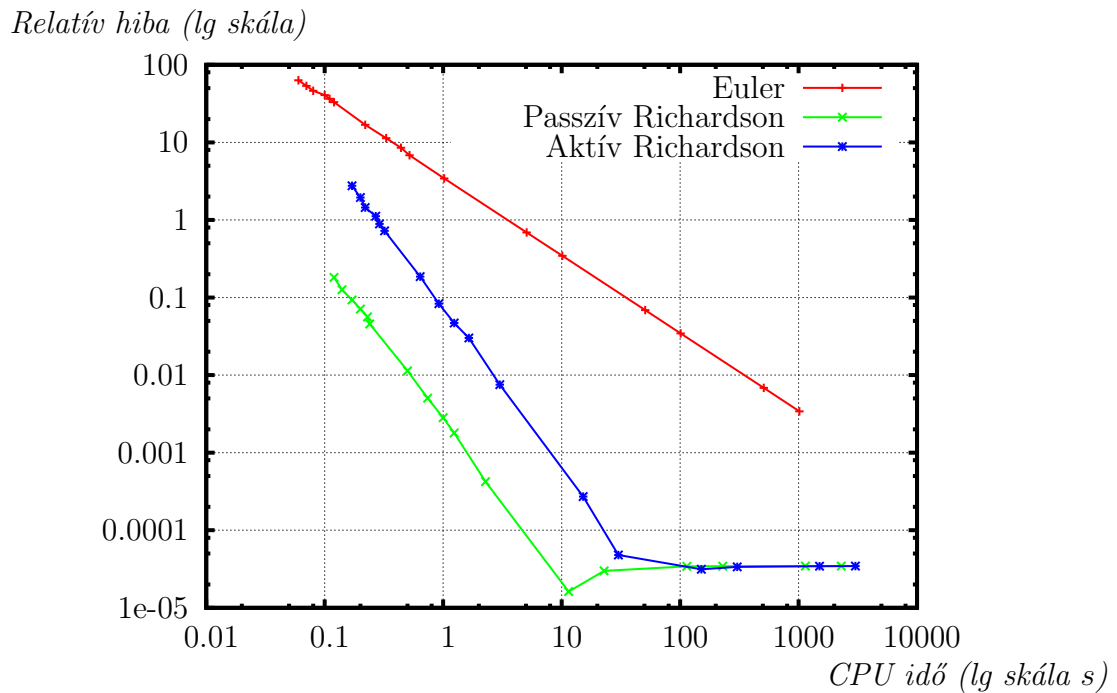
A diffúziós probléma részletesebb vizsgálatához tekintsük az eddigi feladat két lehetséges változatát.

$$\frac{\partial c}{\partial t} - D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + k \cdot c = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} - D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + k \cdot c^2 = 0 \quad (4)$$

ahol k egy szabad paraméter, aminek értéke a számítások során egynek lett választva. A diffúziós-állandón, a rácson, az iteráción, és a kezdeti jelen nem változtattunk.

Az A.1.-A.3. ábrákon láthatók a diffúziós probléma $+k \cdot c$ taggal kiegészített változatának hiba görbéi. Ezeket összevetve a B.1. táblázat megfelelő adataival, láthatjuk, hogy a Richardson-féle extrapolációs módszerek ez esetben is sokkal hatékonyabbak, mint az általános euleri metódus (8. ábra). Az ábrák nagyon hasonlítanak az előző diffúziós feladatnál kapott eredményekhez.



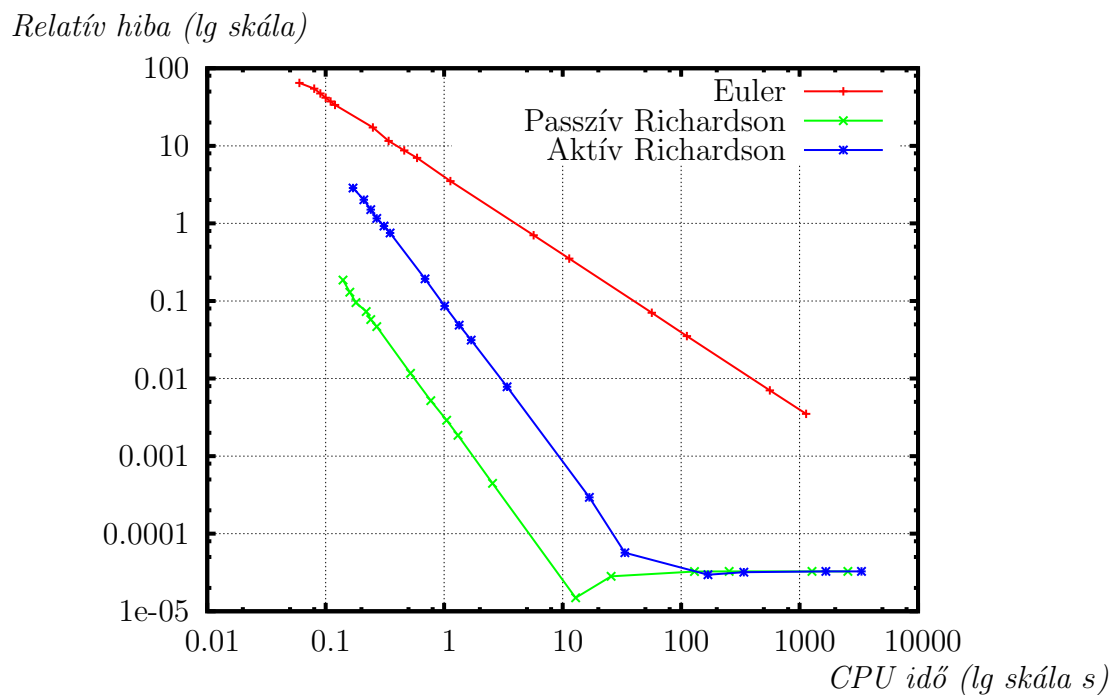
8. ábra. $k \cdot c$ diffúzió relatív hibái a futási idők szerint

A diffúziós feladat $+k \cdot c^2$ taggal megtoldott változatánál már megfigyelhetünk néhány eltérést, melyek egyértelműen a négyzetes tag megjelenéséből származnak.

Az első ilyen érdekesség, hogy nem látható a Richardson-féle extrapolációk abszolút hibájában megfigyelhető *platószerű* viselkedés a kis időléptéknél (A.4. ábra). Ha alaposabban megvizsgáljuk, akkor tapasztalhatjuk, hogy ez esetben sem érdemes végletekig hajszolnunk az extrapolációs eljárásokat,

mert itt is van egy bizonyos időlépték, aminél kisebbhez már nem tartoznak pontosabb szimulációk. Ezt az A.5. ábra is alátámasztja.

A másik figyelemre méltó eredmény az A.6. ábrán látható. Az eddigiektől eltérően nem csak a passzív Richardson-féle eljárás becsli felül a csúcs értékét, hanem a másik extrapoláció is. Természetesen – habár ez az ábrán itt sincs feltüntetve – még így is sokkal pontosabb eredményt ad mindkettő a csúcs értékére, mint ami az euleri megoldásból származna.



9. ábra. $k \cdot c^2$ diffúzió relatív hibái a futási idők szerint

A B.1. táblázat és a 9. ábra alapján a diffúzió ezen változatáról is elmondható, hogy extrapolációkkal sokkal pontosabb eredmény érhető el, vagy jelentősen csökkenthető a szimuláció futási ideje.

3.2. Advekcio

Nagyon hasonló, mint az előzőekben ismertetett diffúzió. Ám itt nem másodrendű differenciál szerepel az időbeli parciális derivált mellett.

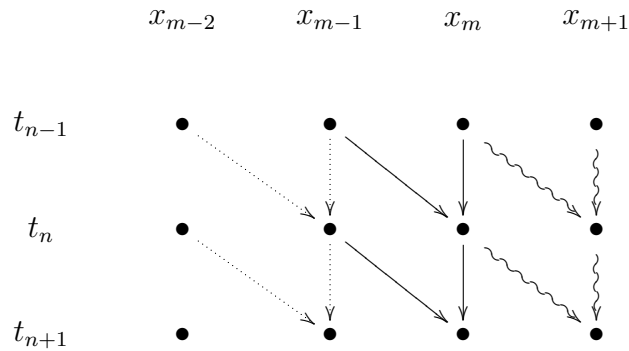
$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad (5)$$

itt u az advektálódási sebesség, amit – a diffúziós-állandóhoz hasonlóan – szintén egynek vettünk a számítások során.

Az explicit Euler-séma alkalmazása a következő egyenletre vezet:

$$c(x_m, t_{n+1}) = c(x_m, t_n) - u \cdot \frac{c(x_m, t_n) - c(x_{m-1}, t_n)}{\Delta x} \cdot \Delta t \quad (6)$$

Tehát (6) képletben egy adott x_m helyen egy újabb időpillanatban szereplő érték kiszámításához szükségünk van az előző időpillanatban felvett értékre, és az azt helyileg megelőző közvetlen szomszédosra is (10. ábra).



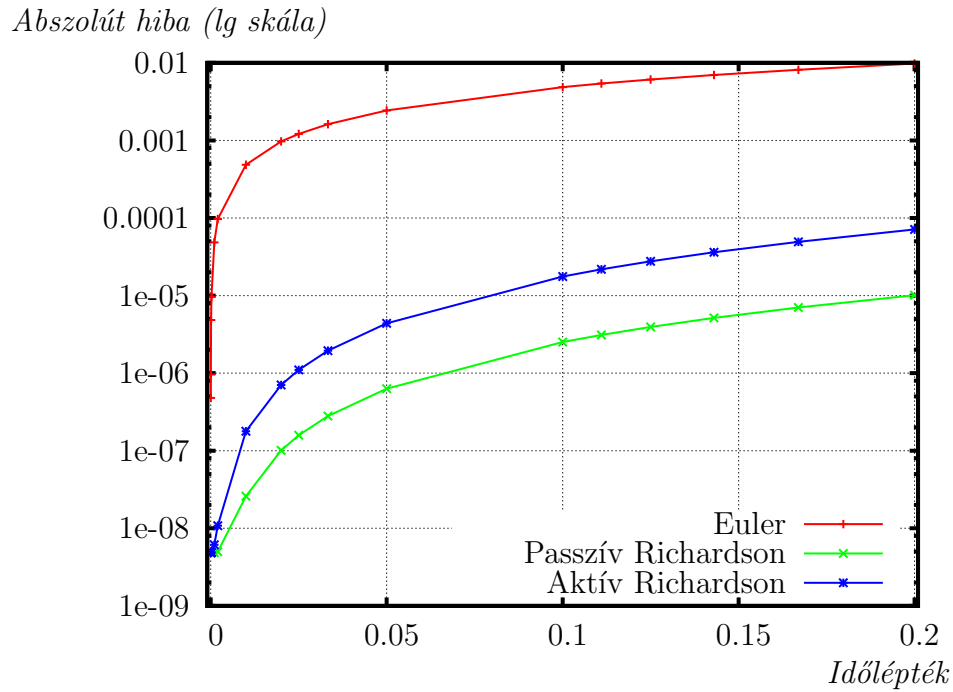
10. ábra. Explicit Euler-séma advekcio esetén

Itt is oda kell figyelni a peremértékek pontos megadására, különösen a perem elülső határainál. A számítások során a 3.1. résznél leírt *tüskét* használtuk kezdeti görbe gyanánt. A referenciamegoldás időlépcsőjénél is megtartottuk az előzőekben használt paramétereket.

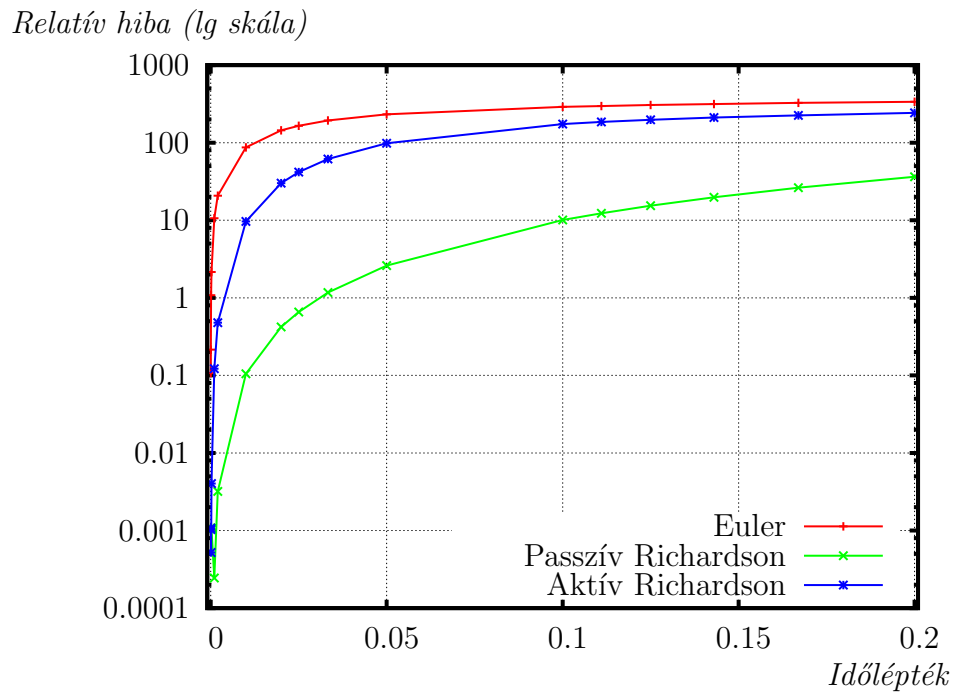
Az első, amit észre lehet venni a hibagörbék elemzése során, hogy a passzív Richardson-extrapolációval kapott eredmények abszolút (11. ábra) és relatív hibája (12. ábra) is kisebb, mint a másik két módszerrel kapott eredményeké. Továbbá, a 3.1.1. résznél vizsgált abszolút hibához hasonlóan itt sem nyilvánvaló, hogy a hiba nem csökkenthető tovább az időlépték csökkentésével.

A relatív hiba ábrájánál is érdemes elidőzni egy keveset (12. ábra). Talán a legérdekesebb, hogy az aktív Richardson-féle eljárás kezdetben milyen kis mértékben ad pontosabb megoldást, mint az

euleri. A 13. ábrán ez még szembetűnőben látszik, ahogy az is, hogy az időlépték csökkenésével egyre pontosabb és pontosabb eredményeket kapunk, végül beáll a stacionárius állapot.

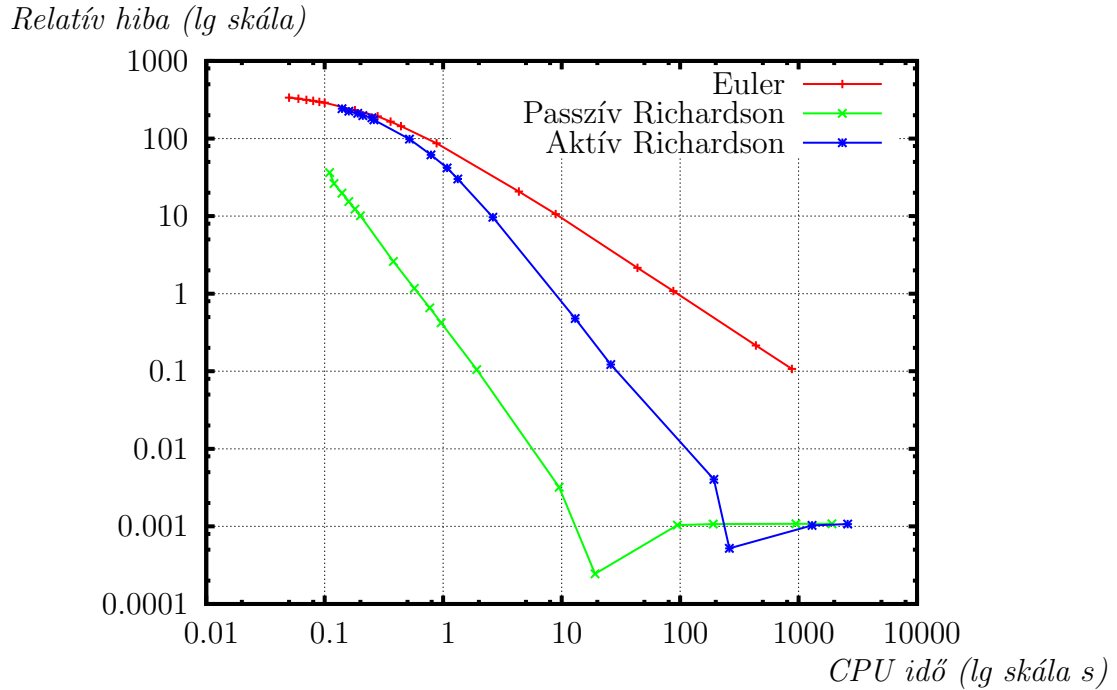


11. ábra. Abszolút hibák advekció esetén



12. ábra. Relatív hibák advekció esetén

Az A.7. ábrán látható csúcs eltérések esetében is a passzív Richardson módszer okoz meglepetéseket azzal, hogy milyen kismértékben becsli túl a csúcs értékét. Az aktív eljárás eredményei is sokkal jobbakk ezen a téren, mint az eulerek.



13. ábra. Advekciónak relatív hibái a futási idők szerint

Ha mindezeket összevetjük B.2. táblázat alapján elkészített 13. ábrával, akkor egyértelműen megállapítható, az aktív Richardson-extrapoláció jobb becslést ad ugyan, mint az euléri, de közel sem olyan jó, mint a passzív módszer, melynek 19.16 másodpercra van szüksége a legprecízebb megoldás előállításához. Az ehhez tartozó eredmény közel 500-szor pontosabb, mint a legjobb euléri eredmény.

A fentiek alapján kijelenthető, mindkét Richardson-extrapoláció alkalmas az advekciónak precíz megoldására, de a passzív módszer alkalmazása számottevően gazdaságosabb.

3.3. Cahn-Hilliard-féle reakció-diffúzió

Végezetül vizsgáljunk meg egy összetett, reakció-diffúziós esetet, a Cahn-Hilliard-féle reakció diffúziót.

Az eljárás a fázis szeparáció leírására alkalmas, ezért a természettudomány számos területén alkalmazzák. Leginkább kémiai folyamatok szimulációját teszi lehetővé, de megfelel a biológiai mintázatok, vagy akár a meteorológiában a nukleáció és a gócképződés modellezésére is.

A Cahn-Hilliard-féle reakció diffúziót leíró egyenlet a következő általános alakban írható fel:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\lambda \nabla^2 (\epsilon c - \gamma c^3 + \sigma \nabla^2 c) \quad (7)$$

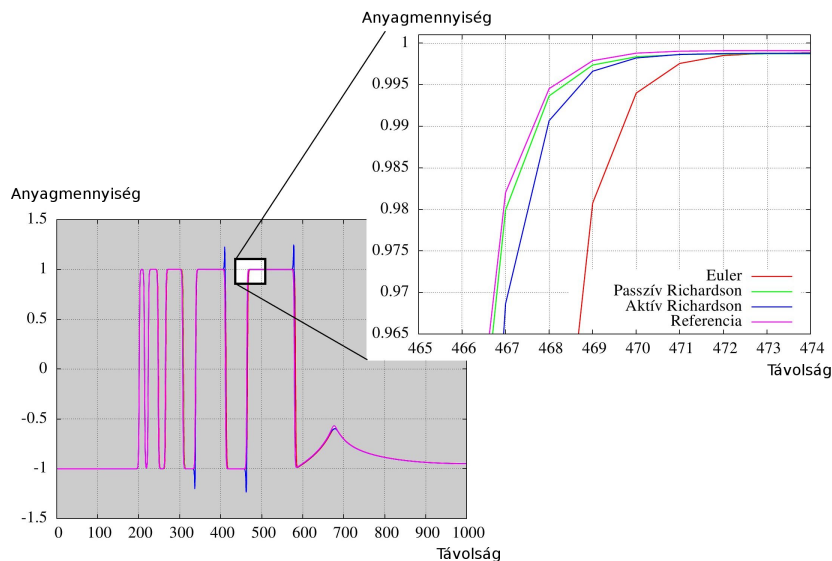
ahol λ , ϵ , γ , és σ az adott folyamatra jellemző állandók.

Azért választottuk a fenti egyenlettel leírható feladatot, mert negyedrendű deriváltat is tartalmaz. Kíváncsiak voltunk, hogy vajon mutatnak-e a Richardson-féle extrapolációs módszerek valami szembetűnő különbséget a magasabb rendű differenciáltagok megjelenésének következtében.

A szimulációk során két anyag reakcióját vizsgáltuk. Melyek eltérő anyagmennyiséggel rendelkeztek és egyikük mozgó frontként viselkedett. A mozgó anyagi tartomány és a stacionárius anyag találkozása során keletkező harmadik anyag mennyiségét, keletkezését modelleztük.

Az eddigiekhez hasonlóan, ez esetben is egy igen finom időlépcsővel futtatott explicit Euler-sémát használtunk a referencia megoldás elkészítéséhez.

Az eredmények alapján azt mondhatjuk, hogy a módszerek nem mutatnak komoly érzékenységet a reakció-diffúzió problémájára. A referencia futást jóval inkább megközelítő eredményeket produkálnak, mint ha csak az euleri eljárást alkalmaznánk (14. ábra).



14. ábra. Cahn-Hilliard-féle reakció diffúzió futási eredményei

4. Összefoglalás

A dolgozatban ismertettük a Richardson-extrapoláció elméleti háttérét és numerikus alkalmazhatóságát. Bemutattuk a passzív és az aktív Richardson-féle eljárások közötti különbséget.

Az egydimenziós numerikus Euler-sémánál megvizsgáltuk az eljárások hatékonyságát a számítás-technikai gyakorlatban. Górcső alá vettük a diffúziós problémát és néhány változatát, egy advekciós feladatot, és végezetül egy reakció-diffúziós esetet is.

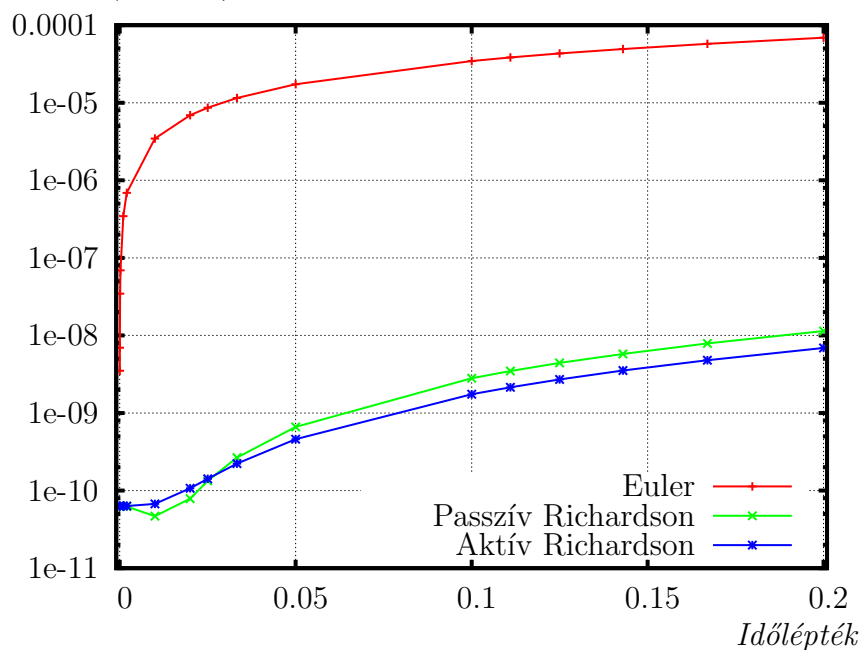
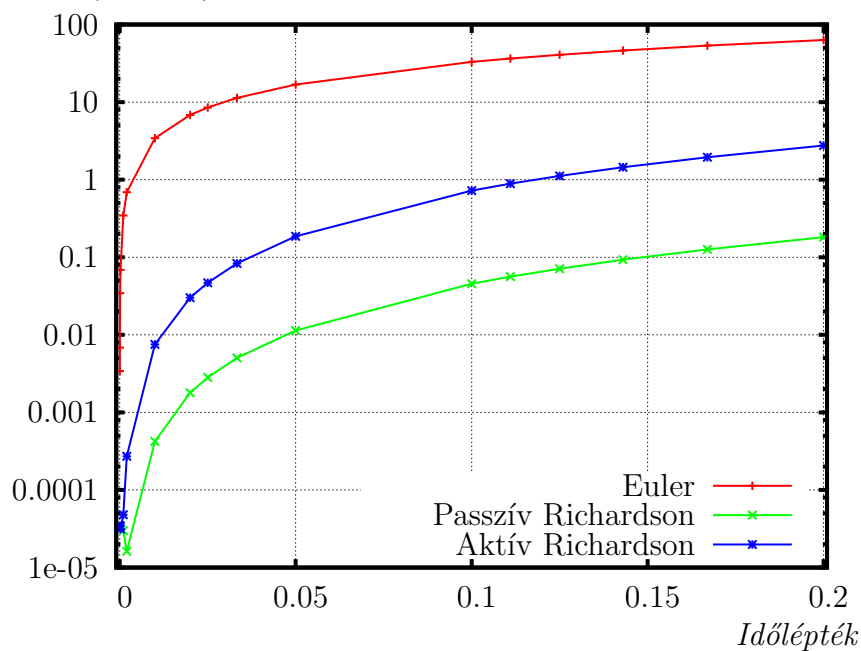
Minden eredmény kétségtelenül alátámasztotta, hogy a Richardson-féle extrapolációs eljárás kellő biztonsággal használható a numerikus gyakorlatban. Azonos futtatási beállítások mellett nagyságrendekkel pontosabb eredményt biztosít, mintha a hagyományos euleri sémát alkalmaznánk. Meghatározott pontosság mellett pedig elegendő az extrapolációs eljárások valamelyikét alacsonyabb időlépték mellett lefuttatni, ezzel nagy mértékben csökkentve a gépigényt, vagyis a futtatási időt.

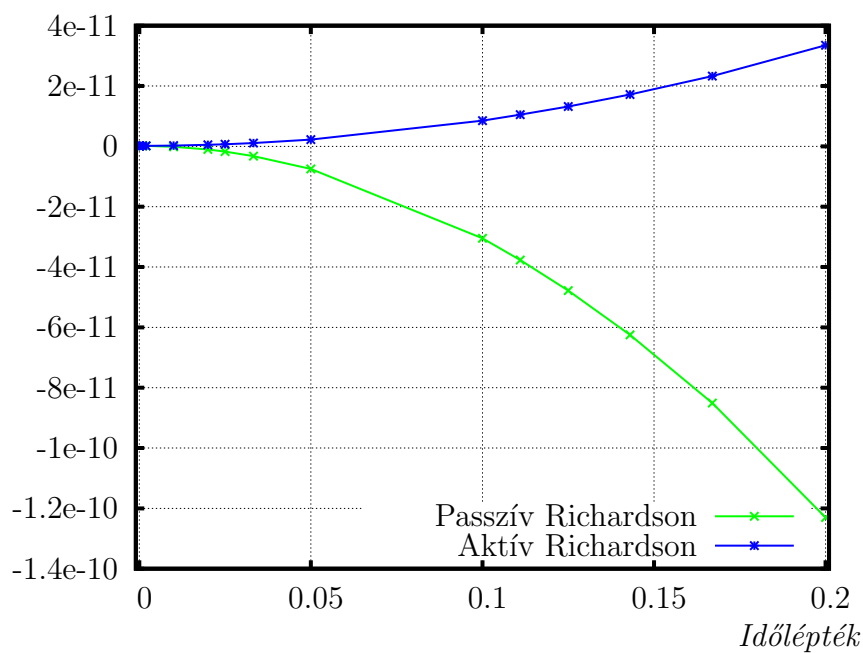
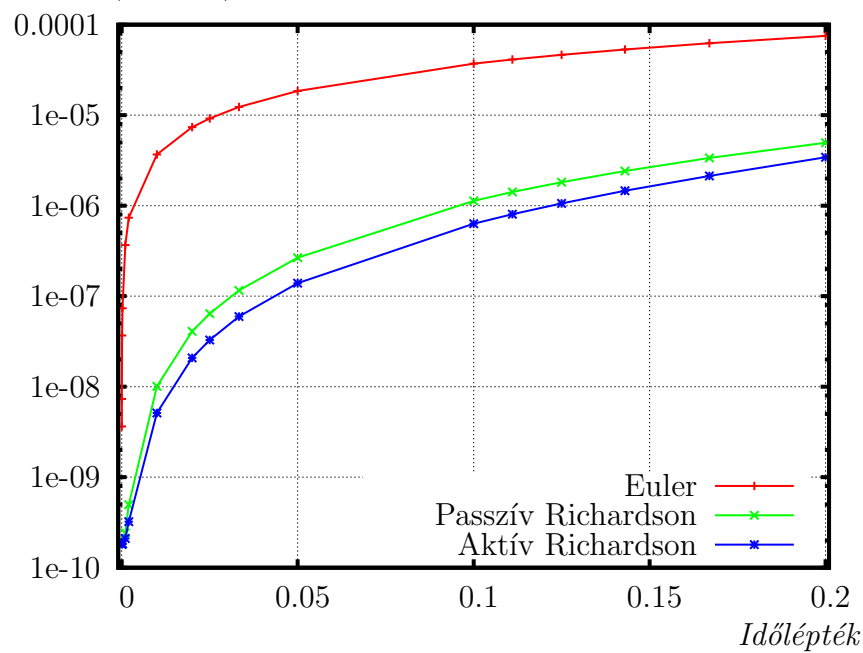
Diffúziós feladatok megoldására mindkét extrapoláció közel egyaránt hatékony, viszont advekció esetében egyértelműen kijelenthető, hogy a passzív módszerrel hamarabb érhetünk el nagy pontosságú eredményeket.

A reakció-diffúziós feladat esetében nem tapasztaltuk, hogy az extrapolációs módszerek érzékenyek lennének a magasabb rendű deriváltak megjelenésére és továbbra is nagyságrendekkel pontosabb eredményeket produkálnak.

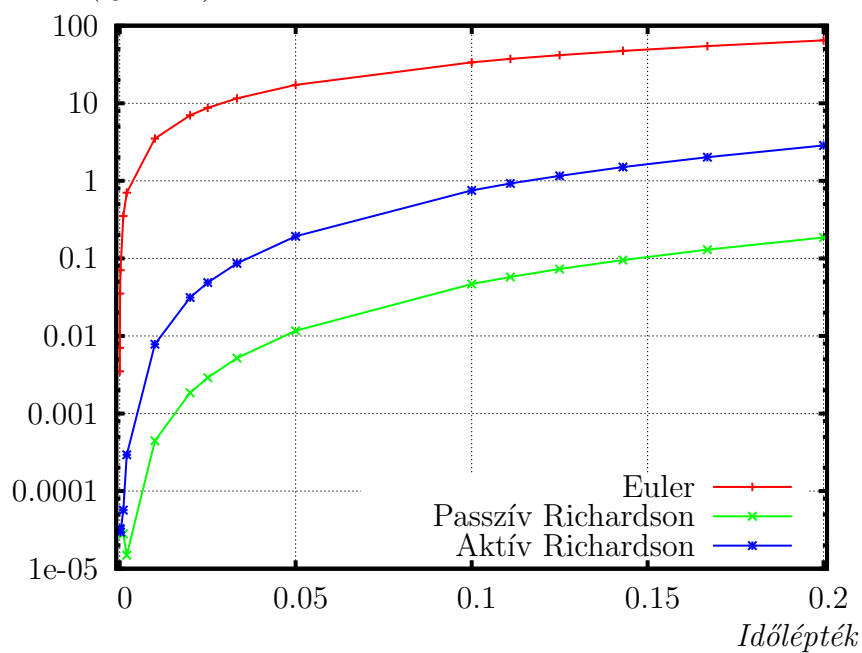
Mindezek alapján azt mondhatjuk, hogy a Richardson-féle extrapolációs módszerek – átfogó numerikus szimulációk során – maximálisan teljesítették az elméleti úton hozzájuk fűzött reményeket.

A. Függelék (ábrák)

Abszolút hiba (lg skála)A.1. ábra. Abszolút hibák $k \cdot c$ diffúzió esetén*Relatív hiba (lg skála)*A.2. ábra. Relatív hibák $k \cdot c$ diffúzió esetén

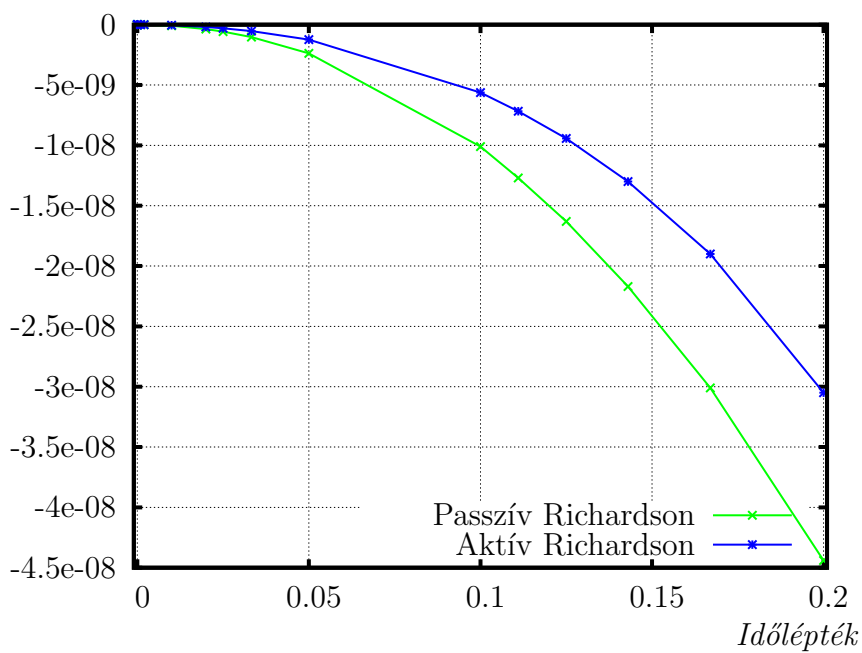
Csúcs eltérésA.3. ábra. Csúcs eltérés $k \cdot c$ diffúzió esetén*Abszolút hiba (lg skála)*A.4. ábra. Abszolút hibák $k \cdot c^2$ diffúzió esetén

Relatív hiba (lg skála)

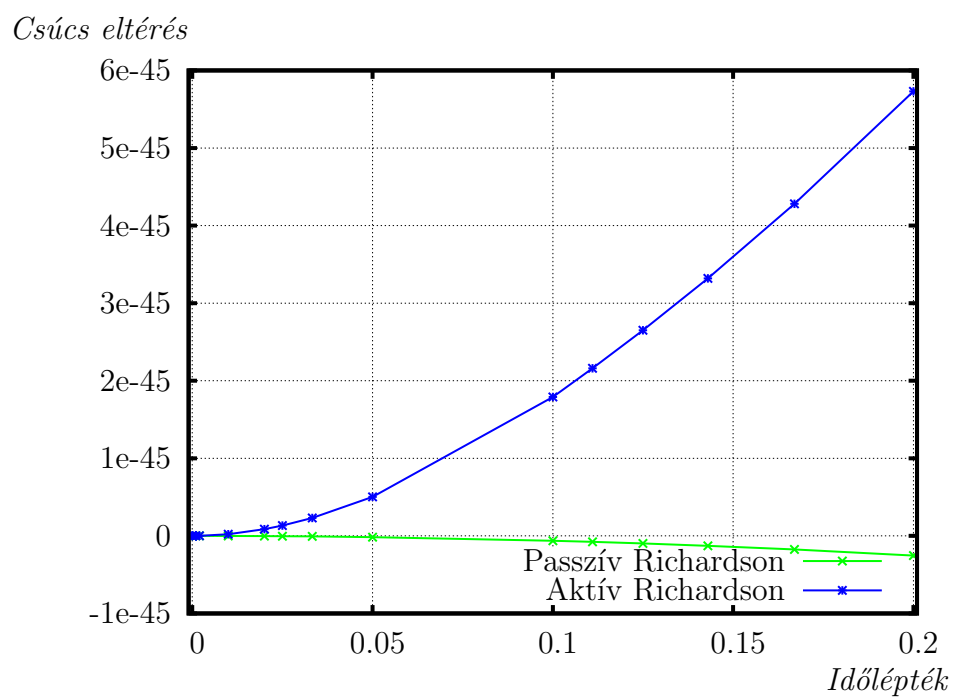


A.5. ábra. Relatív hibák $k \cdot c^2$ diffúzió esetén

Csúcs eltérés



A.6. ábra. Csúcs eltérés $k \cdot c^2$ diffúzió esetén



A.7. ábra. Csúcs eltérés advekció esetén

B. Függelék (táblázatok)

Időlépték	$k \cdot c$ CPU idő (s)			$k \cdot c^2$ CPU idő (s)		
	Euler	Passzív Richardson	Aktív Richardson	Euler	Passzív Richardson	Aktív Richardson
$2.00 \cdot 10^{-1}$	0.06	0.12	0.17	0.06	0.14	0.17
$1.67 \cdot 10^{-1}$	0.07	0.14	0.2	0.08	0.16	0.21
$1.43 \cdot 10^{-1}$	0.08	0.17	0.22	0.09	0.18	0.24
$1.25 \cdot 10^{-1}$	0.1	0.2	0.27	0.1	0.22	0.27
$1.11 \cdot 10^{-1}$	0.11	0.23	0.29	0.11	0.24	0.31
$1.00 \cdot 10^{-1}$	0.12	0.24	0.32	0.12	0.27	0.35
$5.00 \cdot 10^{-2}$	0.22	0.5	0.64	0.25	0.52	0.69
$3.33 \cdot 10^{-2}$	0.33	0.74	0.92	0.34	0.77	1.01
$2.50 \cdot 10^{-2}$	0.44	1	1.24	0.46	1.05	1.34
$2.00 \cdot 10^{-2}$	0.52	1.24	1.65	0.59	1.31	1.69
$1.00 \cdot 10^{-2}$	1.02	2.28	3.01	1.13	2.56	3.4
$2.00 \cdot 10^{-3}$	5.06	11.45	15.19	5.69	12.87	16.82
$1.00 \cdot 10^{-3}$	10.14	22.83	30.12	11.37	25.65	33.48
$2.00 \cdot 10^{-4}$	50.8	113.91	151.12	56.59	129.59	168.53
$1.00 \cdot 10^{-4}$	101.22	228.67	303.42	111.96	254.79	338.1
$2.00 \cdot 10^{-5}$	508.34	1141.94	1504.9	560.96	1272.8	1666.55
$1.00 \cdot 10^{-5}$	1017.37	2292.52	3016.33	1137.23	2559.09	3332.6

B.1. táblázat. Elterő diffúziós modellek futási időtartamai

Időlépték	CPU idő (s)		
	Euler	Passzív Richardson	Aktív Richardson
$2.00 \cdot 10^{-1}$	0.05	0.11	0.14
$1.67 \cdot 10^{-1}$	0.06	0.12	0.16
$1.43 \cdot 10^{-1}$	0.07	0.14	0.19
$1.25 \cdot 10^{-1}$	0.08	0.16	0.21
$1.11 \cdot 10^{-1}$	0.09	0.18	0.25
$1.00 \cdot 10^{-1}$	0.1	0.2	0.26
$5.00 \cdot 10^{-2}$	0.18	0.38	0.52
$3.33 \cdot 10^{-2}$	0.28	0.57	0.79
$2.50 \cdot 10^{-2}$	0.36	0.77	1.08
$2.00 \cdot 10^{-2}$	0.44	0.96	1.33
$1.00 \cdot 10^{-2}$	0.88	1.92	2.63
$2.00 \cdot 10^{-3}$	4.36	9.53	13
$1.00 \cdot 10^{-3}$	8.92	19.16	25.98
$2.00 \cdot 10^{-4}$	43.66	94.9	192.84
$1.00 \cdot 10^{-4}$	87.78	190.16	260.65
$2.00 \cdot 10^{-5}$	436.56	950.42	1299.1
$1.00 \cdot 10^{-5}$	878.32	1914.15	2600.42

B.2. táblázat. Advekcións modellek futási időtartamai

Hivatkozások

- Brajnovits, B.*, 2011: A Richardson-extrapoláció alkalmazása és matematikai vizsgálata egyszerűsített környezeti modellekben *MSc diplomamunka*, Budapest, 6-62.
- Faragó, I., Havasi, Á. and Zlatev, Z.*, 2010: Efficient implementation of stable Richardson Extrapolation algorithms *Computers and Mathematics with Applications*, **60**, pp. 2309-2325.
- Richardson, L. F.*, 1927: The deferred approach to the limit, I – Single lattice *Philosophical Transactions of the Royal Society*, **226**, pp. 299-349.