Operátorszeletelés és variációs adatasszimiláció szennyezőanyag-terjedési és dinamikai légkörmodellekben

OTKA kutatói zárójelentés

Havasi Ágnes, F61016

Az operátorszeletelés egy numerikus eljárás, amelynek segítségével bonyolult parciális differenciálegyenletek vagy egyenletrendszerek megoldását egyszerűbb részfeladatok egymás utáni megoldására vezetjük vissza. A variációs adatasszimiláció feladata a numerikus modellek kezdeti feltételeinek minél pontosabb előállítása. Ezen két kutatási témában az alábbi elméleti és számítógépes vizsgálatokat végeztem.

1. Elméleti vizsgálatok

1.1. A szeletelési hiba eltűnésének elméleti vizsgálata

Az operátorszeletelési módszerek pontosságát a lokális szeletelési hibával szokásos jellemezni. Elméleti vizsgálatokat végeztünk több hagyományos szeletelési eljárás lokális szeletelési hibájára vonatkozóan, és vizsgáltuk a szeletelési hiba eltűnésének feltételeit. Ismeretes, hogy a szeletelési hiba a hagyományos szeletelési módszereknél (szekvenciális, Marcsuk–Strang és szimmetrikusan súlyozott szekvenciális szeletelés) eltűnik, ha a részfeladatok operátorai kommutálnak. Ez a feltétel a szekvenciális szeletelés esetén – két részoperátort véve – nemcsak elégséges, hanem szükséges feltétel is a hiba eltűnéséhez. Természetes módon vetődik fel a szükségesség kérdése a másik két módszer esetében is. A [Faragó és Havasi, 2007a] cikkben megmutatjuk, hogy a kommutálás a Marcsuk-Strang-féle és a szimmetrikusan súlyozott szekvenciális szeletelés alkalmazásakor nem szükséges a szeletelési hiba nullává válásához, tehát ezen módszerek az operátorpárok szélesebb osztálya esetében biztosítanak pontos megoldást, mint a szekvenciális módszer. Mindez azt is eredményezi, hogy kettőnél több operátor esetén a szekvenciális szeletelésnél sem szükséges feltétel a páronkénti kommutálás. Ezek az eredmények a gyakorlat szempontjából azért fontosak, mert a páronkénti kommutálás a valós feladatokban igen ritkán teljesül.

1.2. A szeletelési módszerek konzisztenciája

A lokális szeletelési hiba egyenletes nullához tartása a szeletelés mint idődiszkretizációs módszer konzisztenciáját jelenti. A lokális hiba korlátos operátorok esetén a pontos megoldás és a szeleteléssel kapott megoldás hagyományos Taylor-sorfejtésével vizsgálható. Ez a sorfejtéses módszer nemkorlátos operátorokra általában nem alkalmazható. A nemkorlátos operátoroknak egy osztályára, az erősen folytonos félcsoportok generátoraira azonban a félcsoportelmélet eszközeivel sikerült belátnunk a másodrendű konzisztenciát a Marcsuk–Strang-féle és a szimmetrikusan súlyozott szekvenciális szeletelésre [Faragó és Havasi, 2007b].

A fenti eredmények időtől független részoperátorok esetére vonatkoznak. A gyakorlatban azonban fontos az időfüggő operátorok esete is. A Magnus-sorfejtéses módszer alkalmazásával megmutattuk, hogy meglehetősen általános feltételek mellett a hagyományos szeletelési módszerek rendje az időfüggő mátrixok esetére is megőrződik [Faragó, Havasi, Horváth, 2010]. Eredményünket reakciós-diffúziós feladaton numerikusan is ellenőriztük.

1.3. A Richardson-extrapoláció alkalmazása operátorszeletelési módszerekre

Korábbi kutatásainkban több új sémát konstruáltunk a szeletelés pontosságának javítása céljából. A szeleteléssel kapott numerikus megoldás azonban az ún. Richardson-extrapoláció módszerével is megjavítható, amelynek során különböző hosszúságú időlépcsővel elvégzett futtatások eredményeit kombináljuk. Ezt az eljárást sikeresen alkalmaztuk a szekvenciális szeletelési módszerre [Faragó és Havasi, 2008; Faragó et al., 2009]. Mivel a szekvenciális szeletelés elsőrendű módszer, a Richardson-extrapolációval kombinálva másodrendű megoldó módszert kapunk, függetlenül attól, hogy a részfeladatokra hányadrendű numerikus módszert alkalmazunk. Mátrixpéldákon elvégzett numerikus kísérleteink igazolták az elméletileg bebizonyított másodrendű konvergenciát. Megállapítottuk, hogy a Richardson-extrapolációval kombinált szekvenciális szeletelés pontosságban felveszi a versenyt az olyan hagyományos másodrendű szeletelési módszerekkel, mint a Strang-Marcsuk-féle és a szimmetrikusan súlyozott szekvenciális szeletelés. Fontos kiemelni, hogy a másodrendű konvergencia akkor is megőrződik, ha a részfeladatokat elsőrendű numerikus módszerrel oldjuk meg, ellentétben az említett másodrendű szeletelési technikákkal. A módszert először olyan diffúziós-reakciós feladaton teszteltük, amelyben mindkét részfeladat stiff feladat volt. Ebben az esetben a hagyományos módszerekhez hasonlóan rendcsökkenést tapasztaltunk. A második kísérletsorozatban az UNI-DEM légszennyezés-terjedési modell kémiai almodelljét használtuk, amely összesen 56 anyagfajtával számol. A eredmények azt mutatják, hogy a Richardson-extrapolációval kombinált szekvenciális szeletelést alacsonyabb rendű numerikus módszerekkel érdemes kombinálni. Megfelelő módszerrel (pl. implicit Euler-módszer) sikerült másodrendű konvergenciát elérnünk.
Közlésre elfogadott publikációnkban [Faragó et al., 2010c] a Richardson-extrapolációt egydimenziós advekciós feladaton tanulmányoztuk. Az advekciós egyenletek a meteorológiai modellek kulcsfontosságú részei, megoldásukhoz tehát hatékony algoritmusokra van szükség. A tanulmányban megmutatjuk, hogy a Crank–Nicolson-sémával kapott numerikus megoldás hatékonyan javítható a Richardson-extrapoláció alkalmazásával.

A Richardson-extrapoláció alkalmazása során felléphetnek stabilitási problémák. A módszer stabilitási tulajdonságait egyes jól ismert numerikus módszerekkel kombinálva (implicit Euler-módszer, trapézszabály, illetve az általános Θ-módszer) operátorszeletelés alkalmazása nélkül is megvizsgáltuk, és megállapítottuk, hogy míg az implicit Euler-módszerrel kombinálva a megoldás abszolút stabil lesz, a trapézszabály esetén instabil megoldást is kaphatunk [Faragó et al., 2010a, 2010b].

1.4. Operátorszeletelés és variációs adatasszimiláció

A négydimenziós variációs adatasszimilációt (4DVAR) széles körben alkalmazzák a meteorológiai modellek kezdeti feltételeinek minél pontosabb előállítására. Az eljárás során az előrejelző modell adjungált változatát használják az előrejelzés és a mérések eltérését mérő veszteségfüggvény minimalizálására. A modell integrálása során gyakran operátorszeletelést alkalmaznak, és ilyenkor a megfelelő adjungált modell is függ az alkalmazott szeletelési módszertől. Munkámban [Havasi, 2008a] azt tanulmányoztam, hogy a szeletelés alkalmazása hogyan hat az adatasszimilációval előállított kezdeti mezőre, illetve az abból indított előrejelzésre. Ezt a hatást egy egyszerűsített diffúziós-reakciós modellen vizsgáltam különböző szeletelési módszerek alkalmazásával. A szeletelés hatásának elkülönítésére a mért értékeket a feladat pontos megoldásával helyettesítettem. Megállapítottam, hogy az adatasszimiláció hatékony alkalmazásához megfelelő rendű numerikus módszert és szeletelést kell együtt alkalmazni. Az adatasszimiláció során figyelembe vett megfigyelések eloszlása jobban kihat az asszimilációval kapott megoldásra, mint a kezdeti perturbáció megválasztása. A megoldás sokszor akkor is hatékonyan javítható, ha az adatasszimiláció során csak bizonyos anyagfajtákra vonatkozó méréseket veszünk figyelembe (szelektív adatasszimiláció).

2. Számítógépes vizsgálatok, alkalmazások

2.1. Az operátorszeletelési módszerek alkalmazása a sekélyvízi egyenletrendszerben

A különböző operátorszeletelési módszereket egy egyszerűsített dinamikai légkörmodellen, a sekélyvízi egyenletrendszeren teszteltem. Megvizsgáltam, hogyan módosítja a szeletelés alkalmazása a linearizált rendszer hullámmegoldásainak különféle karakterisztikáit, ha f-sík közelítésben dolgozunk. Ez az egyszerűsítő feltevés azt jelenti, hogy nem vesszük figyelembe a földforgás hatását leíró Coriolis-paraméter földrajzi szélességtől való függését. Ekkor az eredeti rendszernek minden körfrekvenciára három különböző hullámmegoldása van: egy advektív és két ellentétes irányban terjedő gravitációs hullám, és mindhárom módus változatlan amplitúdóval terjed. Arra az eredményre jutottunk, hogy ha operátorszeletelést alkalmazunk, akkor ezek a hullámok torzulnak. A legnagyobb torzulást az elsőrendű additív szeletelés okozta, míg a valóságot legjobban közelítő megoldásokat a szintén elsőrendű szekvenciális szeleteléssel kaptuk. Megmutattam, hogy a másodrendű Marcsuk-Strang-féle szeletelés ebben a vizsgálatban a szekvenciális módszerrel megegyező eredményeket ad. Ez a meglepő tény a szeletelések spektrum-approximációs tulajdonságaival magyarázható. Az eredményeket a [Havasi, 2007] publikáció tartalmazza.
Hasonló vizsgálatot végeztem a β-sík közelítésben felírt sekélyvízi egyenletrendszerre. Ez a közelítés már figyelembe veszi a Coriolis-paraméter földrajzi szélességtől való függését, és így tanulmányozhattam, hogyan befolyásolja a szinoptikus skálájú időjárási

rendszerek fejlődésében nagy szerepet játszó Rossby-hullámok és inerciális-gravitációs hullámok tulajdonságait az operátorszeletelés alkalmazása [Havasi, 2008]. Ebben a vizsgálatban a részoperátorokat fizikai és geometriai alapon különítettem el. Az inerciális-gravitációs hullámok fázissebessége nem mutatott érzékenységet a szeletelési módszer megválasztására, a Rossby-hullámok sebessége azonban esetenként jelentősen módosult. Ha a szetelelés során az advekciós tagot különítettük el a többitől, mindegyik szeletelési módszer jó pontosságú megoldást adott. A többi felbontás esetén a szekvenciális szeletelés adta a legjobb, az additív pedig a legrosszabb eredményeket. Ugyanez a megállapítás vonatkozik a hullámok mesterséges erősödésére/csillapodására is.

2.2. Az operátorszeletelés és a numerikus módszer kölcsönhatásának vizsgálata

Az operátorszeletelés alkalmazása során az egyes részfeladatokat valós feladatok esetén csak numerikusan tudjuk megoldani. Ez a helyzet az olyan nagyléptékű euleri szennyezőanyag-terjedési modellekben is, mint amilyen például a Dániai Euleri Modell (DEM) továbbfejlesztésével kapott UNI-DEM. Ezzel a modellel számos numerikus kísérletet végeztünk – lineáris és nemlineáris tesztfeladatokon egyaránt – a szeletelési módszer és a részrendszerekre alkalmazott numerikus módszerek megválasztására, valamint a szeletelési hiba hatására vonatkozóan [Dimov et al., 2008]. Négy különböző szeletelési sémát vizsgáltunk: a szekvenciális, a Marcsuk-Strang, a súlyozott szekvenciális és a súlyozott Marcsuk-Strang módszereket. Három különböző esetet tanulmányoztunk ismert analitikus megoldással rendelkező tesztfeladatokon:
a) csak szeletelési hiba terheli a megoldást;
b) a szeletelési, a térbeli diszkretizációs és az időbeli diszkretizációs hiba egyszerre jelentkezik;
c) nincs szeletelési hiba.
Megállapítottuk többek között, hogy p-edrendű szeletelési módszerrel együtt nem érdemes p-nél magasabb rendű numerikus módszert alkalmazni. Az elsőrendű implicit Euler-módszer például a szintén elsőrendű szekvenciális szeleteléssel adta a legjobb eredményeket. Továbbá, ha p-edrendű szeletelési módszerrel p-edrendű konvergenciát kívánunk elérni, akkor ehhez legalább p-edrendű numerikus módszerre van szükség.

A szeletelést egy újonnan kidolgozott véges különbséges sémával együtt is alkalmaztuk háromdimenziós advekciós-diffúziós modellen. Irányok szerinti operátorfelbontást alkalmazva a feladat egydimenziós advekciós-diffúziós feladatokra bomlik, amelyek konzisztenciája és stabilitása könnyen vizsgálható. Az eredményeket a [Dorosenko et al., 2006] közlemény tartalmazza.

2.3. A szeletelési módszerek gépigényének vizsgálata szekvenciális és párhuzamos számítógépeken

A gyakorlatban előforduló modellfeladatok megoldása során a pontosság mellett a hatékonyság is alapvető követelmény. A [Csomós et al., 2007] közleményben a szekvenciális, a Marcsuk–Strang, a súlyozott szekvenciális és a súlyozott Marcsuk–Strang szeletelés gépigényét vizsgáltuk szekvenciális és párhuzamosított számítás esetén, a nagyléptékű légszennyeződés vizsgálatában alkalmazott Dániai Euleri Modell egyszerűsítésével kapott tesztfeladatokon. A súlyozott módszerek párhuzamosítása jelentősen csökkentheti a számítási időt.

2.4. A szeletelés alkalmazása valós feladatokban

Az operátorszeletelés egyik fontos alkalmazási területe a légszennyeződés-terjedés numerikus modellezése. Munkánkban [Kocsis et al., 2009] megvizsgáltuk a különböző szeletelési módszerek (szekvenciális, Strang-Marcsuk-féle, additív és módosított additív szeletelés) alkalmazhatóságát az Országos Meteorológiai Szolgálatnál futtatott FLEXPART modellben. A FLEXPART egy lagrange-i trajektóriamodell, amely pontforrás által kibocsátott szennyezőanyag közép- és hosszútávú terjedésének előrejelzésére alkalmas. A szeleteléssel kapott eredményeket az ETEX (European Tracer Experiment) mérési program keretében gyűjtött adatokkal is összevetettük többféle statisztikai indikátor vizsgálatával. Azt tapasztaltuk, hogy a szeletelési módszerek többnyire felülbecsülik a koncentrációkat. A mérésekhez legközelebb álló eredményeket a szeletelés nélküli modellváltozat és a módosított additív szeletelés adta, a legkevésbé megbízhatónak pedig a Strang–Marcsuk-féle szeletelés bizonyult. A szeletelés azonban minden esetben csökkentette a számítási időt, a legnagyobb mértékben a módosított additív szeletelés alkalmazásakor.

A pályázati időszak alatt 15 angol nyelvű cikkem jelent meg ill. került elfogadásra. Ebből 12 referált, nemzetközi folyóiratban, 3 pedig konferenciakiadványban. Jelenleg további két dolgozatom benyújtás előtt áll. Külön kiemelem, hogy a Nova Science Publisher (USA) kiadta egy, társszerzővel írt monográfiámat az operátorszeletelés elméleti és gyakorlati vizsgálatának legfontosabb eredményeiről [Faragó és Havasi, 2009]. Emellett két, nemzetközileg elismert folyóiratban társszerkesztőként az alábbi különszámok szerkesztésében vettem részt:

Advanced Splitting Techniques and their Applications, Special Issue of Int. J. Computational Science and Engineering, eds: István Farago, Ágnes Havasi and Zahari Zlatev, Interscience, Vol. 3, No. 4 (2007)

Journal of Computational and Applied Mathematics, Special Issue on Advanced Computational Algorithms, eds: István Faragó, Ágnes Havasi and Zahari Zlatev (2010)

Munkám során több hazai és külföldi szakemberrel folytattam sikeres együttműködést:

- Faragó István (ELTE)
- Ferenczi Zita, Kocsis Zsófia (Országos Meteorológiai Szolgálat)
- Zahari Zlatev (Dánia)
- Ivan Dimov (Nagy-Britannia)