

ALKALMAZOTT MATEMATIKA A METEOROLÓGIÁBAN

APPLIED MATHEMATICS IN METEOROLOGY

Havasi Ágnes¹, Faragó István²

¹ELTE TTK Földrajz- és Földtudományi Intézet, Meteorológiai Tanszék, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A.

²ELTE TTK Matematika Intézet, Alkalmazott Analízis és Számításmatematikai Tanszék, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/C.

hagi@nimbus.elte.hu, faragois@cs.elte.hu

Összefoglalás: A meteorológiai folyamatok előrejelzése során gyakran nagyméretű és bonyolult parciális differenciálegyenlet-rendszerek megoldása a feladat. Erre kínál hatékony eszközt az operátorszeletelés módszere. A dolgozatban ismertetjük az operátorszeletelés elvét és összefoglaljuk az alkalmazásában elért legfontosabb eredményeinket.

Abstract: Weather forecast is usually based on the solution of huge and complicated systems of partial differential equations. Operator splitting methods are efficient tools to solve such problems. In this paper we present the principle of operator splitting and summarize our major results achieved during its applications.

Bevezetés. A légköri folyamatok megismeréséhez és a légkörben lezajló változások előrejelzéséhez elengedhetetlenül fontosak a matematikai modellek, azon belül a dinamikai légkörmodellek. Ezek olyan egyenletek megoldásán alapulnak, amelyek a légkör viselkedését meghatározó fizikai törvényeket fejezik ki matematikai formában, elsősorban parciális differenciálegyenletek alakjában (Práger, 1992). Természetesen ezek az egyenletek – mint a modellek általában – mindig valamilyen egyszerűsítést hordoznak magukban. Ezért, ha meg is tudnánk oldani őket tökéletes pontossággal, akkor sem adnák vissza pontosan és minden részletre kiterjedően a légköri állapotváltozások értékeit. Az egyenletek megoldását azonban (kevés, erősen leegyszerűsített modelltől eltekintve) nem is tudjuk pontosan meghatározni. A differenciálegyenletek pontos megoldásai a térkoordinátáktól és az időtől függő, skalár- vagy vektorértékű folytonos függvények, amelyek egyértelmű megoldhatóságához kiegészítő (kezdeti és perem-) feltételek megadása is szükséges. A kiegészítő feltételeket általában csak véges számú pontban ismerjük, azonban még ha minden pontban adva volnának, akkor sem tudnánk a differenciálegyenletek megoldását képlettel (zárt alakban) előállítani. Ezért szükségünk van olyan eszközökre, amelyek segítségével közelítő megoldást tudunk adni a kitűzött feladatra. A közelítő megoldás előállításához a feladatot először diszkrétizáljuk, azaz a modelltartományon definiálunk egy tér- és időbeli rácshálósorozatot, majd a folytonos feladatot diszkrét feladatok sorozatával helyettesítjük. A diszkrét feladatok megoldásai olyan függvények, amelyek a rácsháló pontjaiban vannak értelmezve. Célunk az, hogy elegendően finom rácsháló esetén a diszkrét feladat megoldása megfelelően közel kerüljön a folytonos feladat megoldásához. Ebben a rövid írásunkban a nyomanyagszállítási egyenletrendszer példáján sorra vesszük a numerikus megoldás során felmerülő főbb nehézségeket, és bemutatunk egy hatékony eszközt ezek megoldására: az operátorszeletelés módszerét.

A légköri folyamatok numerikus modellezésének nehézségei. Annak illusztrálására, hogy milyen nehézségekkel állunk szemben, tekintsük a szennyezőanyagok légköri terjedési és átalakulási folyamatait leíró egyenletrendszert:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\nabla(\vec{u}c_i) + \nabla(K\nabla c_i) - \sigma_i c_i + R_i(c_1, \dots, c_m) + E_i.$$

Itt $i = 1, 2, \dots, m$, ahol m jelöli az anyagfajták számát, \vec{u} a szélességsvektor, K a turbulens diffúziós együttható, σ_i az ülepedési sebesség, R_i a kémiai reakciók során bekövetkező koncentrációváltozás, és E_i a kibocsátás (Zlatev, 1995). Ez az egyenletrendszer azt fejezi ki, hogy egy kiválasztott anyagfajta koncentrációjának lokális időbeli megváltozását alapvetően öt, egyszerre végbemenő fizikai folyamat határozza meg: a széllel való szállítódás (advekción), a turbulens átkeveredés, a kiülepedés, a kémiai reakciók, valamint a kibocsátás. Az ismeretlenek a c_i koncentrációk, amelyek a helytől és az időtől függenek. Számos légszennyeződési modell ezen egyenletek megoldásán alapul (Bozó et al., 2006). Példaként említjük a Dániai Euleri Modellt (DEM), amelynek térbeli tartománya egész Európát lefedi (1. ábra), és hosszabb, akár több éves futtatásokat is végezhetünk vele. A modellel jelenleg $m = 56$ anyagfajta koncentrációja tanulmányozható, de a továbbfejlesztett változattal (UNI-DEM) már 168 különböző anyag koncentrációját modellezhetjük. Egy, a DEM-hez hasonló felépítésű modell alkalmazhatósága több matematikai problémát is felvet. A modell térbeli rácshálója $10 \text{ km} \times 10 \text{ km}$ -es horizontális felbontás és 10 vertikális szint esetén több millió rácspontból áll, és két és fél másodperces időlépcsővel dolgozva egy évi futtatáshoz több mint kétszáz ezer időlépcső szükséges. Ilyen felbontás mellett a szennyezőanyagterjedési feladat diszkrétizációja igen nagy méretű (és ráadásul nemlineáris) egyenletrendszer megoldására vezet, emellett fontos, hogy a megoldás reális időn belül rendelkezésre álljon. Nehézséget jelent továbbá az, hogy a megoldandó differenciálegyenletek alakja igen bonyolult, ugyanis az egyenletek jobb oldalán különböző matematikai tulajdonságú tagok szerepelnek. Ilyen esetben valamely ismert numerikus módszert alkalmazva nem garantálható, hogy a numerikus megoldás rendelkezni fog bizonyos a priori elvárt tulajdonságokkal, pl. stabil (konvergens) lesz, illetve megőrzi a koncentrációk nemnegativitását.

Ezért nem javasolható, hogy valamely kiválasztott numerikus módszerrel közvetlenül diszkretizáljuk az egyenleteket.

A főbb problémák felvázolása után áttekintünk egy számítási eljárást, nevezetesen az operátorszeletelést, amely hasonló méretű és bonyolultságú feladatok megoldásában sikerrel alkalmazható. Megemlítjük az alkalmazás során felmerülő főbb problémákat, és összefoglaljuk a szeletelési módszerek vizsgálatában elért legfontosabb eredményeinket.

Az operátorszeletelés módszere. Az operátorszeletelés olyan numerikus eljárás, amelynek segítségével bonyolult időfüggő egyenletrendszerek megoldását egyszerűbb részfeladatok egymás utáni megoldására vezethetjük vissza (Faragó és Havasi, 2009b). Legegyszerűbb fajtája az ún. szekvenciális szeletelés, amelynek során az egyenletrendszer jobb oldalát egyszerűbb tagokra bontjuk, és az ezekhez tartozó feladatokat időben egymás után oldjuk meg, minden egyes időlépcsőben a korábbi részfeladat megoldását használva kezdeti feltételként. Természetesen a jobb oldalt többféleképpen is részekre bonthatjuk. Itt csak egy lehetőséget említünk: a fizikai elven való szétbontást, amelynek során az alábbi részfeladatokat oldjuk meg:

$$\frac{\partial c_i^{[1]}}{\partial t} = -\nabla(\bar{u}c_i^{[1]}) , \quad \frac{\partial c_i^{[2]}}{\partial t} = \nabla(K\nabla c_i^{[2]}) ,$$

$$\frac{\partial c_i^{[3]}}{\partial t} = -\sigma_i c_i^{[3]} ,$$

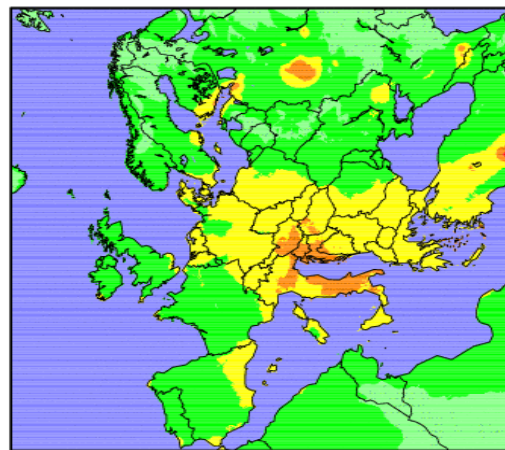
$$\frac{\partial c_i^{[4]}}{\partial t} = R_i(c_1^{[4]}, \dots, c_m^{[4]}) , \quad \frac{\partial c_i^{[5]}}{\partial t} = E_i .$$

Világos, hogy a kapott részfeladatok mindegyike jóval egyszerűbb struktúrájú, mint az eredeti feladat, és előnyös, hogy mindegyik részfeladatot a legmegfelelőbb numerikus módszerrel oldhatjuk meg. Hátrány azonban, hogy az eredeti folyamatot, amelyben az öt részfolyamat egyszerre fejti ki a hatását, olyan feladatok sorozatára cseréltük, amelyben a szóban forgó részfolyamatok minden időlépcsőben egymás után hatnak. Az ebből adódó hibát szeletelési hibának nevezzük. Ez többnyire akkor is fellép, ha az összes részfeladatot pontosan oldjuk meg, de kis időlépcső esetén már várhatóan kicsi lesz ez a hiba, azaz nem lesz lényeges eltérés a szeleteléssel kapott megoldás és a pontos megoldás között.

A szeletelés elméletének egyik fontos kérdése: milyen szeletelési módszert alkalmazunk ahhoz, hogy a lehető legkisebb szeletelési hiba terhelje a numerikus megoldást? A fenti szekvenciális módszeren kívül léteznek kisebb szeletelési hibával dolgozó módszerek is, pl. a Marcsuk–Strang-féle vagy a súlyozott szekvenciális módszer. A szeletelés elmélete a korlátos lineáris operátorokra részletesen ki van dolgozva (Bartholy et al., 2001), de ezen eredmények egy részét sikerült általánosítanunk szélesebb feladatosztályokra is (Faragó és Havasi, 2007a). Megvizsgáltuk ezen kívül a szeletelési hiba eltűnésének feltételeit a hagyományos szeletelési eljárások esetében, ezek azonban

a gyakorlati feladatokban ritkán teljesülnek (Faragó és Havasi, 2007b). A szeletelési módszereket számos tesztfeladaton tanulmányoztuk: közönséges differenciálegyenlet-rendszereken, egy egyszerűsített légköri oszlopmodellen (Botchev et al., 2004), valamint a linearizált sekélyvíz egyenletrendszeren (Havasi, 2007 és 2008), és az elméletben elvárt hibarendeket kaptuk.

Magas ózonkoncentrációjú napok száma Európában, 2003-as futtatás alapján

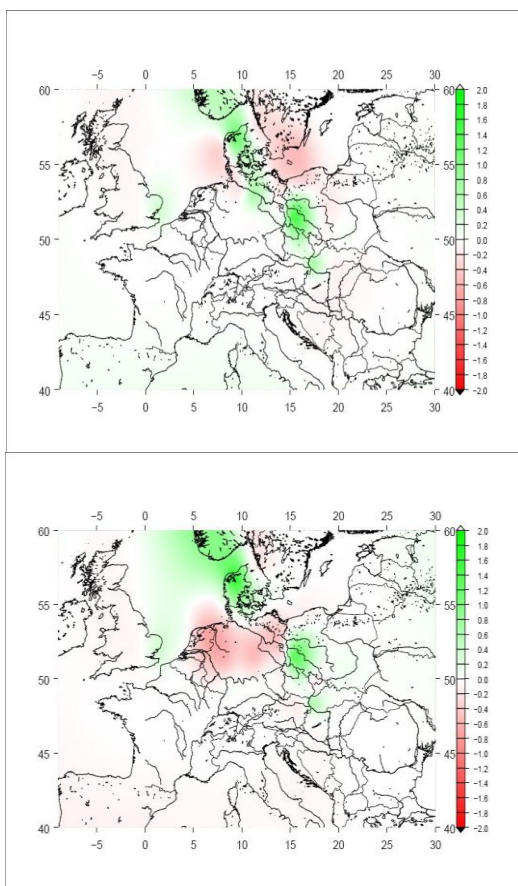


1. ábra. Ózonszennyezettség Európában a DEM alapján.

A szeletelési módszereket sikerrel alkalmaztuk valós feladatban is. 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-féle trajektóriamodell, amely pontforrás által kibocsátott szennyezőanyag közép- és hosszú távú 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 felülbecslik a koncentrációkat. A mérésekhez legközelebb álló eredményeket a szeletelés nélküli modellváltozat és a módosított additív szeletelés adta, a legkevésbé megbízhatónak pedig a Marcsuk–Strang-féle szeletelés bizonyult (2. ábra).

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-féle, a súlyozott szekvenciális és a súlyozott Marcsuk–Strang-féle szeletelés gépigényét vizsgáltuk szekvenciális és párhuzamosított számítás esetén, a Dániai Euleri Modell egyszerűsítésével kapott tesztfeladatokon. A súlyozott módszerek párhuzamosítása jelentősen csökkentheti a számítási időt.

A szeleteléssel kapott numerikus megoldás pontossága növelhető az ún. Richardson-extrapoláció módszerével, amelynek során különböző hosszúságú időlépcsővel elvégzett fut-



2. ábra: Az ETEX kísérletben mért és a különböző szeletelési módszerekkel számított koncentrációk különbsége 54 órával a kibocsátást követően (ng/m^3 értékben). (a) módosított additív szeletelés, (b) Marsuk–Strang-féle szeletelés.

tatások eredményeit kombináljuk. Ezt az eljárást sikeresen alkalmaztuk a szekvenciális szeletelési módszerre (Faragó és Havasi, 2009a). Mivel a szekvenciális szeletelés elsőrendű módszer, a Richardson-extrapolációval kombinálva másodrendű megoldó módszert kapunk, függetlenül attól, hogy a részfeladatokra hányadrendű numerikus módszert alkalmazunk. Megállapítottuk, hogy a Richardson-extrapolációval kombinált szekvenciális szeletelés pontosságban felveszi a versenyt az olyan hagyományos másodrendű szeletelési módszerekkel, mint a Marsuk–Strang-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 az UNI-DEM légszennyezés-terjedési modell kémiai almodelljén teszteltük, amely összesen 56 anyagfajttal számol. Az 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.

A Richardson-extrapolációt egydimenziós advekción feladaton is tanulmányoztuk (Zlatev *et al.*, 2011). Az advekción 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 szeletelési módszerek időjárás-előrejelző modellekben is használhatók. Napjainkban az operatív modellekben talán a szemi-implicit szemi-Lagrange-féle (SISL) módszer alkalmazása a legelterjedtebb, amely ugyan nem tartozik az operátorszeletelési módszerek közé, de szintén a különböző tulajdonságú (lineáris, valamint a nemlineáris advekción) tagok eltérő kezelésén alapul. Érdemes lehet azonban az operátorszeletelési módszerek alkalmazási lehetőségeit is fontolóra venni az operatív időjárás-előrejelző modellekben.

Köszönetnyilvánítás

A kutatás az Európai Unió támogatásával és az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg, a támogatási szerződés száma TÁMOP 4.2.1/B-09/1/KMR-2010-0003.

Irodalom

- Bartholy, J., Faragó, I., Havasi, Á., 2001: Splitting method and its application in air pollution modeling. *Időjárás* 105, 39–58.
- Botchev, M., Faragó, I., Havasi, Á., 2004: Testing weighted splitting schemes on a one-column transport-chemistry model. *Int. J. Env. Pol.* 22, Nos. 1/2, 3–16.
- Bozó, L., Mészáros, E., Molnár, Á., 2006: Levegőkörnyezet. *Akadémiai Kiadó*, Budapest, 252 p.
- Csomós, P., Dimov, I., Faragó, I., Havasi, Á., Ostromsky, Tz., 2007: Computational complexity of weighted splitting schemes on parallel computers. *International Journal of Parallel, Emergent and Distributed Systems* 22, No. 3, p. 137.
- Faragó, I., Havasi, Á., 2007a: Consistency analysis of operator splitting methods for C_0 -semigroups. *Semigroup Forum* 74, 125–139.
- Faragó, I., Havasi, Á., 2007b: Relationship between vanishing splitting errors and pairwise commutativity. *Applied Mathematics Letters*, megjelent elektronikusán: DOI: 10.1016/j.aml.2007.02.008.
- Faragó, I., Havasi, Á., 2009a: Richardson-extrapolated sequential splitting and its application. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 226, 218–227, DOI: 10.1016/j.cam.2008.08.003.
- Faragó, I., Havasi, Á., 2009b: Operator Splitting and their Applications, Mathematics Research Development Series, Nova Science Publishers, Inc., New York, 108 p.
- Havasi, Á., 2007: Wave analysis of different splitting methods in the linearized shallow water equations. *International Journal of Computational Science and Engineering* 3, No. 4, 264–270.
- Havasi, Á., 2008: Wave analysis for different splittings of the shallow water equations on the β -plane. *Computers and Mathematics with Applications* 55, 2295–2305.
- Kocsis, Zs., Ferenczi, Z., Havasi, Á., Faragó, I., 2009: Operator splitting in the Lagrangian air pollution transport model FLEXPART. *Időjárás* 113, 189–202.
- Práger, T., 1992: Numerikus prognosztika I. *Tankönyvkiadó*, Budapest, p. 327.
- Zlatev, Z., 1995: Computer treatment of large air pollution models. *Kluwer, Academic Publishers*, Dordrecht-Boston-London.
- Zlatev, Z., Dimov, I., Faragó, I., Georgiev, K., Havasi, Á., Ostromsky, Tz., 2011: Richardson Extrapolated Numerical Methods for Treatment of One-Dimensional Advection Equations, *Springer-Verlag*, LNCS 6046, Berlin, Heidelberg, 7th International Conference, NMA 2010 Borovets, Bulgaria, August 20–24, 2010, Revised Papers, 198–206.