
BOLLETTINO

UNIONE MATEMATICA ITALIANA

Sezione A – La Matematica nella Società e nella Cultura

ELEONORA MESSINA

Metodi paralleli per equazioni differenziali ordinarie del secondo ordine di forma speciale

*Bollettino dell'Unione Matematica Italiana, Serie 8, Vol. 3-A—La
Matematica nella Società e nella Cultura (2000), n.1S, p. 141–144.*

Unione Matematica Italiana

http://www.bdim.eu/item?id=BUMI_2000_8_3A_1S_141_0

L'utilizzo e la stampa di questo documento digitale è consentito liberamente per motivi di ricerca e studio. Non è consentito l'utilizzo dello stesso per motivi commerciali. Tutte le copie di questo documento devono riportare questo avvertimento.

*Articolo digitalizzato nel quadro del programma
bdim (Biblioteca Digitale Italiana di Matematica)
SIMAI & UMI*

<http://www.bdim.eu/>

Metodi paralleli per equazioni differenziali ordinarie del secondo ordine di forma speciale.

ELEONORA MESSINA

Problemi ai valori iniziali per equazioni differenziali ordinarie descrivono molti processi delle scienze. Modelli ambientali, circuiti elettrici, problemi di fluidodinamica e, in generale, la modellizzazione di fenomeni di movimento e crescita, ne sono alcuni esempi. I metodi numerici sono essenziali per predire l'evoluzione nel tempo di tali processi. Inoltre, aspetti come alta velocità del processo e risposta in tempo reale, giocano un ruolo importante. In questa situazione, l'uso del calcolo parallelo può fornire una soluzione accurata in un ragionevole lasso di tempo. Poiché gli algoritmi esistenti sviluppati per computer con un solo processore sono intrinsecamente sequenziali, gli algoritmi da sviluppare per il calcolo parallelo non possono essere basati sulla parallelizzazione di risolutori sequenziali già esistenti, ma dovrebbero essere appositamente ridisegnati per l'uso su architetture parallele.

Negli ultimi anni si è posta molta attenzione alla costruzione di metodi paralleli per risolvere equazioni differenziali ordinarie e sono stati proposti e sviluppati numerosi progetti su questo argomento (molti di questi descritti in [1]). Il CWI (Centre for Mathematics and Computer Science) in Amsterdam ha portato avanti, negli ultimi anni, i progetti «Parallel Codes for Circuit Analysis and Control Engineering» e «Parallel Software for Implicit Differential Equations». Il lavoro di questa tesi si è svolto nell'ambito di tali progetti e, in particolare, il contributo apportato ha riguardato la costruzione ed analisi di metodi paralleli per la risoluzione di problemi ai valori iniziali del secondo ordine di forma speciale.

Sistemi di equazioni differenziali del secondo ordine

$$(1) \quad y''(t) = f(t, y(t), y'(t)), \quad y, f \in \mathbb{R}^d.$$

sono in pratica molto comuni, questo è dovuto essenzialmente al fatto che le forze sono proporzionali all'accelerazione, e dunque alle derivate seconde. Nella risoluzione numerica di tali equazioni si potrebbe semplicemente trasformare la (1) in un sistema differenziale del primo ordine, d'altra parte, l'implementazione di un metodo applicato direttamente alla (1) è preferibile, in termini di costo computazionale, all'approccio suddetto, in quanto quest'ultimo richiede la risoluzione di un sistema di dimensione doppia. Ciò è ancora più vero nel caso del trattamento numerico di sistemi differenziali di tipo speciale, in cui il secondo membro della (1) non dipende da y' ,

$$(2) \quad y''(t) = f(t, y(t)), \quad y, f \in \mathbb{R}^d.$$

Problemi siffatti sono, per esempio, modelli di fenomeni in cui non intervengono fattori di attrito o smorzamento. Poiché, ignorando il fatto che f non contiene la derivata prima, in genere si perviene ad algoritmi che sono meno efficienti di quelli costruiti ad hoc per la forma speciale della (2), è prevedibile che anche nella classe dei metodi paralleli l'approccio diretto produca un miglioramento dell'efficienza. Alcuni autori hanno concentrato le proprie ricerche su questo argomento. Nella sua tesi di dottorato, Nguyen huu Cong [2] (CWI 1994) sviluppa metodi paralleli che risolvono direttamente il problema (2). In particolare egli mostra che i metodi paralleli Runge-Kutta-Nyström (che sono metodi di tipo Runge-Kutta direttamente disegnati per problemi del tipo (2)) migliorano notevolmente l'efficienza, sia rispetto ai migliori metodi sequenziali Runge-Kutta-Nyström, sia rispetto ai metodi Runge-Kutta paralleli. Questi risultati ci hanno motivato a continuare in questa direzione e più precisamente abbiamo concentrato le nostre ricerche su:

- (i) Costruzione ed analisi di *risolutori paralleli iterativi per sistemi lineari* per equazioni Runge-Kutta-Nyström.
- (ii) Costruzione ed analisi di metodi di *fattorizzazione approssimata* per equazioni differenziali del secondo ordine di forma speciale.
- (iii) Costruzione di *metodi generali lineari* con stadi paralleli per equazioni differenziali del secondo ordine di forma speciale.
- (iv) Costruzione di *metodi generali lineari* per problemi del secondo ordine di forma speciale con soluzione periodica.

(i) Seguendo l'approccio sviluppato in [4] per equazioni del primo ordine, è stata costruita la classe di metodi PILSRKN che consistono in una combinazione di un processo di Newton applicato ad un metodo Runge-Kutta-Nyström con un risolutore iterativo parallelo per sistemi lineari. È noto che, in genere, le equazioni non lineari che nascono dall'applicazione di un metodo Runge-Kutta-Nyström sono risolte con un procedimento di Newton modificato, che richiede la risoluzione di sistemi lineari di dimensione sd dove s è il numero degli stadi Runge-Kutta-Nyström e d la dimensione del problema. I metodi PILSRKN calcolano le soluzioni di questi sistemi lineari per mezzo di un procedimento iterativo *interno*, nel quale si risolvono s sistemi di dimensione d che sono indipendenti l'uno dall'altro e, dunque, possono essere risolti in parallelo. Per ottenere ciò, occorre approssimare la matrice Runge-Kutta-Nyström A con una matrice B con autovalori positivi e distinti. Al fine di ottenere metodi rapidamente convergenti e con alte proprietà di stabilità, sono state considerate tre diverse scelte della matrice B basate rispettivamente su: 1) decomposizione di Crout, 2) trasformazione in forma triangolare a blocchi, 3) trasformazione ortogonale di A . Il metodo più efficiente si è ottenuto scegliendo come metodo *underlying* Runge-Kutta-Nyström il metodo di Radau IIA a 4 stadi per le sue elevate proprietà di ordine e stabilità, ed approssimando la matrice A con una matrice B di tipo 3).

(ii) Sono stati considerati sistemi di equazioni differenziali ordinarie del secondo ordine di forma speciale che derivano dalla discretizzazione spaziale di equazioni differenziali alle derivate parziali multi-dimensionali. Tali sistemi sono caratterizzati da ordine alto e stiffness elevata. In questo caso persino i metodi PILSRKN possono risultare costosi. Dunque si costruiscono ed analizzano metodi iterativi, non necessariamente basati sulle formule Runge-Kutta-Nyström, ma su una classe più ampia di metodi generali lineari, che sono efficienti nei casi in cui lo jacobiano della funzione al secondo membro dell'equazione differenziale si può scomporre nella somma di matrici con una struttura più semplice. In questi metodi, i sistemi lineari di Newton sono stati risolti per mezzo di un secondo procedimento iterativo, basato sulla fattorizzazione approssimata dello jacobiano della funzione al secondo membro dell'equazione differenziale. Un'importante classe di problemi che può essere efficientemente trattata con questo approccio è costituita dai problemi ai valori iniziali che derivano dalla discretizzazione spaziale delle equazioni delle onde della forma

$$(3) \quad \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = g \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}, \dots, \frac{\partial^2 u}{\partial x_\sigma^2}, x_1, \dots, x_\sigma \right).$$

In questo caso, lo splitting dello jacobiano produce matrici J_i ognuna delle quali corrisponde ad un operatore differenziale monodimensionale, dunque la risoluzione dei sottosistemi lineari è relativamente poco costosa.

(iii) Sono stati costruiti metodi paralleli di tipo *Störmer-Cowell* di ordine alto (metodi PSC) per la risoluzione di problemi non-stiff. Ad ogni passo, tali metodi, che rientrano nella classe dei metodi generali lineari, e che sono l'analogo dei metodi paralleli di Adams per equazioni differenziali ordinarie del primo ordine proposti in [3], calcolano blocchi di k valori soluzione approssimata (o stadi) in k diversi punti usando l'intero blocco soluzione precedente. I k stadi possono essere calcolati in parallelo, così che su un computer con k processori tali metodi hanno effettivamente il costo di calcolo di un metodo ad uno stadio. Sono stati costruiti metodi PSC con ordini che vanno da 4 a 11. Si è dimostrato che per $k \geq 5$ le ascisse degli stadi possono essere scelte in modo tale che in ogni blocco devono essere calcolati solo $k - 1$ stadi, questo implica che il numero degli stadi computazionali, e quindi il numero di processori ed il numero dei valori di starting necessari, si riduce a $k - 1$. Poichè i metodi PSC sono univocamente definiti dal vettore delle ascisse, molta attenzione si è posta nella determinazione analitica di queste, ed è stato dimostrato che ascisse generanti metodi superconvergenti si possono ottenere come radici di determinati polinomi a coefficienti razionali. In più, sono stati calcolati gli intervalli di stabilità per tutti i metodi costruiti, tali intervalli risultano essere sufficientemente ampi, infatti le limitazioni sul passo di integrazione sono determinate dalla precisione e non dalla stabilità. Tra i metodi PSC costruiti, quello di ordine 10 ad 8 stadi su 7 processori risulta il più efficiente. È stato costruito il codice PSC basato su tale metodo ed è stato confrontato con DOPRIN,

uno dei codici sequenziali più efficienti attualmente disponibili, e con PIRKN un codice parallelo di ordine 12 su 6 processori. Da numerose prove numeriche effettuate su esempi test significativi, in termini del numero totale di valutazioni di funzione necessarie ad ottenere un'accuratezza prefissata, si ricava che PSC rispetto a DOPRIN riduce la quantità di calcoli da 4 nel range di accuratezze basse a 30 volte per le accuratezze alte, e rispetto a PIRKN, PSC è almeno ugualmente efficiente per accuratezze basse e riduce la quantità di calcoli di circa la metà nel caso di accuratezze alte.

(iv) È stato considerato il caso in cui le soluzioni dell'equazione differenziale del secondo ordine di forma speciale sono periodiche con frequenze che appartengono ad un intervallo $[\underline{\omega}, \overline{\omega}]$ che noi supponiamo noto e sono stati costruiti metodi efficienti che utilizzano questa ulteriore informazione per seguire l'andamento della soluzione. A tal fine sono state costruite due classi di metodi, rispettivamente basati sui metodi *classici* Störmer-Cowell e sui metodi *paralleli* Störmer-Cowell, «adattando» i parametri del metodo a $[\underline{\omega}, \overline{\omega}]$ usando una tecnica di minimax. La stima dell'errore mostra che i metodi per problemi con soluzioni periodiche hanno ordine degli stadi almeno uguale al numero degli stadi (proprio come i metodi convenzionali *underlying*) e, dall'analisi della stabilità, si deduce che gli intervalli di stabilità sono leggermente più ampi di quelli del metodo di partenza. Dagli esperimenti numerici su diversi esempi presi dalla letteratura, troviamo che: – l'approccio «adattato» fornisce accuratezze migliori fino a 20 cifre significative; – anche per bande di frequenza larghe l'approccio «adattato» fornisce prestazioni migliori di quello convenzionale e, nel caso di frequenze sparse, prestazioni equivalenti.

BIBLIOGRAFIA

- [1] BURRAGE K., *Parallel and Sequential Methods for Ordinary Differential Equations* Clarendon Press, Oxford (1995)
- [2] CONG NGUYEN H., *Parallel Runge-Kutta-Nystrom Methods*, Ph.D. thesis, CWI, Amsterdam (1994).
- [3] HOUWEN P. J. VAN DER, MESSINA E., *Parallel Adams methods*, Journal of Computational and Applied Mathematics, **101** (1999), 153-165.
- [4] HOUWEN P. J. VAN DER, SWART J. J. B. DE, *Parallel Linear System Solvers for Runge-Kutta Method*, Advances in Computational Mathematics, **7** (1997), 157-181.

Dipartimento di Matematica e Applicazioni «R. Caccioppoli»
Università degli Studi di Napoli «Federico II»

Complesso Universitario «Monte S. Angelo», via Cintia Edificio T, I-80126 Napoli
e-mail: messina@matna2.dma.unina.it

Dottorato in Matematica Applicata e Informatica (sede amministrativa: Napoli) - X Ciclo
Direttore di ricerca: Prof.ssa Elvira Russo, Università di Napoli