La Matematica nella Società e nella Cultura

RIVISTA DELL'UNIONE MATEMATICA ITALIANA

MARILENA MUNTEANU

Metodi di Schwarz additivi per problemi parabolici nonlineari di reazione diffusione

La Matematica nella Società e nella Cultura. Rivista dell'Unione Matematica Italiana, Serie 1, Vol. **2** (2009), n.2 (Fascicolo Tesi di Dottorato), p. 263–266.

Unione Matematica Italiana

<http://www.bdim.eu/item?id=RIUMI_2009_1_2_2_263_0>

La Matematica nella Società e nella Cultura. Rivista dell'Unione Matematica Italiana, Unione Matematica Italiana, 2009.

La Matematica nella Società e nella Cultura
Rivista dell'Unione Matematica Italiana
Serie I, Vol. II, Agosto 2009, 263-266

Metodi di Schwarz additivi per problemi parabolici nonlineari di reazione diffusione

MARILENA MUNTEANU

La risoluzione numerica delle equazioni alle derivati parziali spesso richiede la soluzione di grandi sistemi lineari o nonlineari di equazioni algebriche. La disponibilità crescente di sistemi di calcolo paralleli ad alta performance ha consentito la ricerca di metodi iterativi per la soluzione numerica di questi sistemi discreti. In particolare, i metodi riguardanti la decomposizione del dominio (DD) sono tra i risolutori paralleli per equazioni alle derivati parziali quelli più efficienti e scalabili. L'idea principale dei metodi basati sulla decomposizione del dominio è quella di decomporre il problema discreto originale in problemi piu piccoli, risolvere questi sottoproblemi in parallelo e ricombinare le soluzioni locali per ottenere uno schema iterativo che converga rapidamente alla soluzione del problema originario. Oltre al calcolo parallelo, i metodi DD sono utilizzati quando è necessario modellare differenti fenomeni fisici in differenti sottoregioni e quando è opportuno semplificare problemi definite su geometrie complesse. Molti algoritmi DD sono stati definiti, analizzati e implementati negli ultimi vent'anni. Un framework generale basato sulla formulazione variazionale è stato sviluppato per analizzare metodi DD per problemi lineari ellittici facendo ricorso a sottospazi e proiezioni [4]. Negli ultimi anni i metodi della decomposizione dei domini sono stati estesi in modi differenti ai problemi nonlineari riguardanti diverse aree applicative. Come primo approccio i metodi di decomposizione del dominio forniscono precondizionatori per il sistema Jacobiano in una iterazione di tipo Newton. I metodi Schwarz sono stati utlizzati non solo nelle componenti iterative piu interne dello schema Newton-Krylov-Schwarz (NKS) ma anche come iterazione esterna nei risolutori annidati tipo ASPIN o nei metodi nonlineari additivi Schwarz proposti da Dryja e Hackbusch.

In questa tesi studieremo i metodi di sovrapposizione Schwarz per la risoluzione di problemi parabolici nonlineari, soffermando l'attenzione su problemi di reazione-diffusione di complessità crescente come l'equazione scalare Nagumo, il sistema FitzHugh-Nagumo e i sistemi Monodomain-LR1 e Bidomain-LR1. Nel caso delle equazioni evolutive, non solo il precondizionatore del risolutore iterativo gioca un ruolo importante ma anche lo schema di discretizzazione temporale. La maggior parte degli studi numerici utilizzano per la discretizzazione temporale metodi espliciti oppure semi-impliciti (IMEX) dove il termine di reazione nonlineare è trattato esplicitamente mentre il termine di diffusione implicitamente. I metodi IMEX sono ancora soggetti ai vincoli di stabilità sul passo temporale consentito e questo pone grossi limiti nella risoluzione dei sistemi stiff di reazione-diffusione. Per superare queste limitazioni sono stati studiati metodi impliciti (Backward Euler), linearmente-impliciti (Rosenbrock 3P) e metodi disaccoppiati.

1. – Additive Schwarz-Richardson

Partendo dal lavoro di Cai e Dryja [1] definiamo e studiamo un algoritmo scalabile di tipo overlapping additive Schwarz-Richardson (ASR) per problemi monotoni parabolici nonlineari discretizzati in modo implicito nel tempo. Ad ogni passo temporale, il precondizionatore additivo di Schwarz viene costruito utilizzando la parte lineare dell'operatore nonlineare, partizionando il dominio del problema in sottodomini sovrapposti, risolvendo i problemi locali su questi sottodomini e risolvendo un aggiuntivo coarse-problem associato alla mesh formata dai sottodomini. Questo precondizionatore è applicato all'operatore nonlineare usando un'iterazione Richardson. Si dimostra la convergenza del metodo, la velocità di convergenza e la scalabilità dell'algoritmo ASR. I risulatati degli esperimenti numerici condotti su domini bi-dimensionali confermano i risultati teorici ed evidenziano la performance dell'algoritmo ASR con uno o due livelli in presenza di coefficienti discontinui nell'operatore parabolico [2].

Si consideri il seguente problema parabolico nonlineare: per $u_0 \in L^2(\Omega)$ e $f \in L^2((0,T), V^*)$, trova $u \in \{u \in L^2((0,T), V),\ u \in L^2((0,T), V^*)\}$ tale che

$$\begin{cases} \langle u'(t), w\rangle + b(u(t), w) = \langle f(t), v\rangle, \ \forall t \in (0,T)\backslash E_w, \ \forall w \in V \\ u(0) = u_0 \end{cases}$$

dove $E_w \subset (0,T)$ è un sottoinsieme di misura nulla che dipende di w, V^* è lo spazio duale di $V = \{v \in H^1(\Omega): \ v = 0 \text{ su } \Gamma_1 \subset \partial\Omega, \ means(\Gamma_1) > 0\}$ e $\langle\cdot,\cdot\rangle$ è il prodotto in dualità tra V e V^* e $b: H^1(\Omega) \times H^1(\Omega) \longrightarrow R$ una forma nonlineare, Lipshitz countinua e strettamente monotona. Supponiamo che esista una forma biliniare $a: V \times V \longrightarrow R$ tale che $b(u,v) = a(u,v) + \tilde{b}(u,v)$ con $\tilde{b}(u,v)$ nonlineare e strettamente monotona e definiamo a_τ come $a_\tau(u,v) = (u,v) + \tau a(u,v)$.

A seguito della discretizzazione spaziale tramite il metodo agli elementi finiti e la discretizzazione temporale tramite il metodo di Backward Euler, ad ogni passo temporale dobbiamo risolvere il sistema nonlineare

$$B(u) = \hat{g}.$$

Considerando una famiglia di sottospazi V_i dello spazio agli elementi finiti V_h definiamo le forme locali, bilineari, simmetriche e definite positive $\tilde{a}_{\tau,i}: V_i \times V_i \longrightarrow R$ che soddifano

- l'ipotesi di decomposizione stabile, i.e. esiste una costante C_0 tale che ogni elemento $u \in V_h$ ammette una decomposizione $u = \sum R_i^T u_i, \ u_i \in V_i$ tale che

$$\sum \tilde{a}_{\tau,i}(u_i, u_i) \leq C_0^2 a_\tau(u,u)$$

- la disuguaglianza di Cauchy-Schwarz rinforzata, i.e. esiste $\varepsilon_{ij} \in (0,1)$ tale che $a_\tau(R_i^T u_i, R_j^T u_j) \leq \varepsilon_{ij} a_\tau(R_i^T u_i, R_i^T u_i)^{1/2} a_\tau(R_i^T u_j, R_i^T u_j)^{1/2}$
- stabilità locale, i.e. esiste $\omega > 0$ tale che $a_\tau(R_i^T u_i, R_i^T u_i) \leq \omega \tilde{a}_{\tau,i}(u_i, u_i)$.

Definiamo il metodo ASR: data l'iterazione iniziale u^0, $r^0 = \sum (R_i^T \tilde{A}_{\tau,i}^{-1} R_i) B(u^0) - g$ ed un criterio d'arresto, itera per $k = 0, 1, \ldots$ fino alla convergenza

- risolvi il sistema precondizionato $\left(\sum R_i^T \tilde{A}_{\tau,i}^{-1} R_i\right) r^k = B(u^k) - g$
- aggiorna la soluzione $u^{k+1} = u^k - \lambda r^k$ con λ scelto in modo appropriato.

TEOREMA 1. – *Se* $0 < \lambda < 2\delta_0/\delta_1^2$ *allora il metodo ASR converge, i.e.*

$$\|u^k - u^*\|^2 \leq P(\lambda)^k \|u^0 - u^*\|^2$$

dove $P(\lambda) = 1 - 2\lambda\delta_0 + \lambda^2\delta_1^2$, $\|\cdot\|$ *e la norma indotta dalla matrice* $\sum R_i^T \tilde{A}_{\tau,i}^{-1} R_i$, $\delta_1 = C \cdot C_0^2$, $\delta_0 = \dfrac{1}{C_0^2}$.

Per un problema parabolico, la costante C_0^2 (e di conseguenza anche il numero di condizionamento per il precondizionatore di Schwarz additivo ad un livello) è limitata dall' alto dal $\max\left\{1 + \dfrac{H}{\delta},\ 1 + \dfrac{\tau}{H\delta}\right\}$ dove H e la dimensione del sottodominio, δ e la dimensione del overlap e τ e la dimensione del passo temporale. Nel caso del precondizionatore di Schwarz additivo a due livelli, $C_0^2 \leq 1 + \dfrac{H}{\delta}$. La tabella successiva presenta il test di *scaled speedup* (il numero di iterazioni e l'errore relativo) per il metodo ASR ad un livello e per il metodo ASR a due livelli nel caso in cui $\lambda = 0.4$, l'overlap $\delta = h$ tenedo fissa la dimensione del sottodominio $H/h = 4$ e facendo crescere il numero di sottodomini (e nodi). In accordo con la previsione teorica, il numero di iterazioni per il metodo ASR con il precondizionatore ad un livello è crescente mentre il numero di iterazioni per il metodo ASR con il precondizionatore a due livelli rimane limitato.

N	iter-one level	iter-two levels	err
2×2	40	43	6.73e-3
4×4	70	36	1.67e-3
6×6	123	35	7.44e-4
8×8	197	36	4.18e-4
10×10	293	36	2.67e-4
12×12	410	36	1.86e-4
14×14	549	36	1.36e-4
16×16	709	36	1.04e-4
18×18	891	36	8.26e-5

2. – Metodi per i sistemi Monodominio-LR1 e Bidominio-LR1

La seconda parte della tesi è rivolta ai risolutori paralleli per sistemi di reazione-diffusione piu complessi, in particolare viene descritta l'attività bioelettrica del cuore in tre dimensioni medianti sistemi Monodomain-LR1 e Bidomain-LR1. La soluzione numerica di questi modelli multiscala è computazionalmente molto costosa a causa di diversi fattori come scale diverse nello spazio e del tempo, la nonlinearità presente e il malcondizionamento del sistema discreto in ogni passo temporale. Vengono prese in esame discretizzazioni temporali completamente implicite come Backward-Euler e metodi di Rosenbrock linearmente-implicite come Ros3P. Inoltre vengono presi in esame metodi disaccoppiati che prendono in considerazione l'avanzamento separato nel tempo di qualche variabile del sistema. I sistemi lineari che scaturiscono ad ogni passo Newton o Ros3P sono risolti mediante il metodo di Krylov con un precondizionatore overlapping additive Schwarz. Viene determinato un limite superiore per il numero di condizionamento dell'operatore precondizionato legando la scalabilità alla grandezza del passo temporale. I risultati di molti esperimenti numerici su cluster di grandi dimensioni evidenziano la scalabilità dei metodi proposti e la performance dell'algoritmo parallelo [3].

BIBLIOGRAFIA

[1] Cai X-C. e Dryja M., *Domain decomposition methods for monotone nonlinear elliptic problems*, Contemp. Math. 180 Amer. Math. Soc. (1994), 21-27.

[2] Munteanu M. e Pavarino L., *An Overlapping Additive Schwarz/Richardson Method for Monotone Nonlinear Parabolic Problems*, ETNA, **30** (2008), 359-376.

[3] Munteanu M. e Pavarino L., *Decoupled Schwarz Algorithms for Implicit Discretizations on Nonlinear Monodomain and Bidmain Systems*, Math. Mod. Meth. Appl. Sci, **19** (7) (2009).

[4] Toselli A. e Widlund O., *Domain Decomposition Methods- Algorithms and Theory*, Springer-Verlag, **34** (2005).

Dipartimento di Matematica, Università di Milano
e-mail: marilena_munteanu@hotmail.com
Dottorato in Matematica e Statistica per le Scienze Computazionali
con sede presso l'Università di Milano – Ciclo XIX
Direttore di ricerca: Luca Franco Pavarino