

Metodi Numerici ad alte prestazioni per Equazioni Integrali di Volterra

Dajana Conte

Il lavoro di tesi si colloca nell'ambito dello sviluppo e l'analisi di metodi efficienti per il trattamento numerico di problemi evolutivi con memoria, modellizzati da equazioni integrali di Volterra (VIEs).

La prima parte della tesi riguarda la costruzione di metodi efficienti per equazioni integrali di tipo Hammerstein di convoluzione

$$(1) \quad y(t) = f(t) + \int_0^t k(t - \tau)g(y(\tau))d\tau \quad t \in [0, T].$$

Le VIEs, ed in particolare equazioni del tipo (1), nascono in molte aree della matematica applicata come ad esempio in problemi di dinamica delle popolazioni, di diffusione di epidemie, viscoelasticità, studio del comportamento di reattori nucleari, processi di rallentamento di neutroni, meccanica dei fluidi, teoria del controllo. Inoltre, in molte applicazioni, è la trasformata di Laplace del nucleo, piuttosto che il nucleo stesso, ad essere nota a priori. Ciò accade ad esempio nella determinazione delle “non reflecting boundary conditions”, in problemi di cinetica dell'assorbimento chimico, ed ogni qualvolta si utilizzano tecniche basate sulla trasformata di Laplace per ridurre sistemi di equazioni differenziali in VIEs. I metodi sviluppati nella tesi sono particolarmente adatti per quest'ultimo tipo di equazioni, in quanto essi non utilizzano le valutazioni del nucleo, bensì quelle della sua trasformata di Laplace.

Com'è noto, il trattamento numerico di VIEs è molto oneroso dal punto di vista computazionale, per la presenza del “lag-term”, che contiene tutta la storia passata del fenomeno, e deve essere ricalcolato per intero in ciascun passo dell'evoluzione temporale. Ciò comporta che un'implementazione naive di un metodo classico per un'equazione del tipo (1), che non tenga conto della particolarità del nucleo, porterebbe ad un costo computazionale dell'ordine di $O(N_t^2)$, se N_t è il numero dei punti di rete, ed ad una richiesta di memoria pari a $O(N_t)$.

In letteratura, nei lavori [5] e [6] sono stati già proposti dei metodi per equazioni del tipo (1), che presentano una riduzione del costo computazionale. Più precisamente, in [5] è stato costruito un metodo Runge-Kutta veloce a 4 stadi che, sfruttando la natura di tipo convoluzione dell'equazione, ed utilizzando tecniche di Fast Fourier Transform, abbassava il costo computazionale ad $O(N_t(\log N_t)^2)$, con ordine di accuratezza $p = 4$. Più tardi in [6] è stata costruita una formula di quadratura per integrali di convoluzione di tipo evolutivo, che può essere applicata ad una VIE come metodo di quadratura diretta, portando ad una ulteriore riduzione del costo computazionale pari ad $O(N_t \log N_t)$, ad una riduzione dell'occupazione di memoria a $O(\log N_t)$, ed ad un ordine di accuratezza $p = 2$.

L'obiettivo della tesi è stato quello di costruire, rispettivamente, metodi di tipo “collocazione veloce” e “Runge–Kutta (RK) veloce” che potessero ridurre il costo computazionale a $O(N_t \log N_t)$ con occupazione di memoria pari a $O(\log N_t)$, pur mantenendo un ordine di accuratezza elevato. La caratteristica principale di tali metodi è stata quella di utilizzare la trasformata di Laplace del nucleo ed il fatto che l'equazione (1) è di convoluzione. Più precisamente, si è ottenuto un calcolo veloce del lag-term grazie all'utilizzo, per le valutazioni del nucleo k , di una opportuna formula di quadratura per l'inversione numerica della trasformata di Laplace [6]. Tale formula di inversione presenta un errore che decresce esponenzialmente con il numero M dei nodi di quadratura, uniformemente in $[0, T]$. I metodi veloci così costruiti, quando $M \rightarrow \infty$, tendono ai corrispondenti metodi classici.

L'analisi dell'errore dei metodi di collocazione e RK veloci rivela che l'ordine di convergenza dipende da M , e, più precisamente, come ci si aspettava, si è provato che tale ordine viene a coincidere con quello dei corrispondenti metodi classici se M è sufficientemente grande:

TEOREMA 1 *Sia $u(t)$ la soluzione approssimata di (1) ottenuta mediante un metodo di collocazione veloce. L'errore $e(t) = y(t) - u(t)$ soddisfa*

$$(2) \quad \|e\|_\infty = O(h^p) + O(e^{-c\sqrt{M}})$$

dove p è l'ordine di convergenza del corrispondente metodo classico.

Un teorema analogo è stato dimostrato per i metodi RK veloci.

Si sono poi studiate le proprietà di stabilità dei metodi RK veloci rispetto all'equazione test di convoluzione

$$(3) \quad y(t) = 1 + \int_0^t [\mu + \sigma(t - \tau)]y(\tau)d\tau \quad t \in [0, T], \quad \mu, \sigma \in R_-,$$

equazione usualmente considerata in letteratura per lo studio della stabilità dei metodi RK classici. Per i metodi RK veloci si è trovata una caratterizzazione delle regioni di stabilità, provando che anch'esse dipendono da M , e, come ci si aspetta, al crescere di M tendono a quelle dei corrispondenti metodi classici. Gli esperimenti numerici confermano che, il numero di punti che garantisce il raggiungimento dell'ordine e delle regioni di stabilità classiche è, in genere, non molto grande.

La seconda parte della tesi riguarda la costruzione di metodi paralleli per sistemi di equazioni integrali di Volterra a grandi dimensioni di tipo Abel

$$(4) \quad y(t) = f(t) + \int_0^t \frac{k(t, s, y(s))}{(t - s)^\alpha} ds, \quad t \in [0, T], \quad 0 < \alpha < 1,$$

con $y, f, k \in R^d, d \gg 1$.

In molte applicazioni, infatti, i modelli matematici derivanti da problemi evolutivi con memoria non sono costituiti da una singola VIE, bensì da sistemi di VIEs, che possono assumere anche dimensioni molto elevate. Ad esempio questo accade in modelli di problemi di reazione e diffusione in piccole celle, o quando si considera la semidiscretizzazione rispetto allo spazio di equazioni integrali di tipo

Fredholm–Volterra, o di equazioni integro–differenziali alle derivate parziali (ad esempio modelli di processi di diffusione anomala o propagazione di onde in materiali viscoelastici).

In questi casi il costo computazionale dei metodi di collocazione e RK veloci dovrebbe essere moltiplicato per la dimensione ($d \gg 1$) del sistema ed i tempi di calcolo potrebbero essere proibitivi. L’utilizzo di metodi paralleli lungo il sistema può fornire una soluzione in tempi di calcolo ragionevoli. A tal fine è stato costruito un metodo waveform–relaxation (WR) pienamente parallelo e veloce, in particolare per sistemi di VIEs con debole singolarità (4) e con nucleo costante lineare:

$$(5) \quad y(t) = f(t) + \int_0^t \frac{A}{(t-s)^\alpha} y(s) ds, \quad t \in [0, T], \quad 0 < \alpha < 1,$$

con $A \in R^{d \times d}$, $d \gg 1$.

L’idea base della tecnica WR consiste nel cercare la soluzione $y(t)$ del sistema, mediante uno schema iterativo, come limite di una successione di funzioni $\{y^{(i)}(t)\}_{i \in N}$, dette waveforms, ottenute dalla risoluzione di sistemi “più semplici”. Affinchè questo approccio sia vantaggioso è necessario che si abbia un basso costo computazionale per il calcolo di ciascuna waveform e che la successione delle waveforms sia rapidamente convergente. Il primo scopo può essere raggiunto mediante l’utilizzo di metodi pienamente paralleli, in modo tale che in ciascuna iterazione le equazioni del sistema risultino indipendenti e possano essere risolte in parallelo su processori diversi. Ma in generale questi tipi di metodi sono lentamente convergenti. Pertanto in letteratura si sono studiate diverse tecniche di accelerazione dei metodi classici, tra cui si veda ad esempio [3], in cui, in contrapposizione ai metodi di accelerazione di tipo stazionario dipendenti da un parametro fissato, sono stati costruiti dei WR pienamente paralleli di tipo Richardson non stazionari (NSWR–Richardson). Tali metodi sono rapidamente convergenti in quanto la non stazionarietà permette di scegliere i parametri del metodo in modo da minimizzare l’errore in ciascuna iterazione ma purtroppo hanno delle limitazioni nella loro applicabilità in quanto bisogna stabilire a priori il numero di iterazioni da effettuare e la matrice A in (5) deve avere autovalori reali.

Al fine di superare queste limitazioni nella tesi è stato costruito un nuovo metodo NSWR pienamente parallelo, detto di Chebyshev–Richardson. Il metodo si è ottenuto considerando la trasformata di Laplace dell’equazione (5) ed applicando, nello spazio delle trasformate, la relazione di ricorrenza a tre termini data dall’accelerazione polinomiale di Chebyshev per sistemi lineari algebrici. Tornando nello spazio dei tempi si ottiene, per il calcolo delle waveforms, una relazione di ricorrenza a tre termini che richiede in ciascuna iterazione non più la risoluzione di un sistema di VIEs, ma il calcolo di integrali di convoluzione di cui è nota soltanto la trasformata di Laplace del nucleo. Per tale calcolo in è stato usato l’algoritmo di quadratura di convoluzione veloce [6]. Il metodo NSWR di Chebyshev–Richardson verifica la stessa stima dell’errore del metodo di Richardson, pertanto conserva la proprietà di essere rapidamente convergente:

TEOREMA 2 *Sia $\{y^{(i)}(t)\}_{i \in N}$ la successione di waveforms ottenuta mediante il metodo NSWR di Chebyshev–Richardson. Allora l’errore $e^{(i)}(t) = y^{(i)}(t) - y(t)$ è minimo*

per ogni $i \in N$, nel senso che esso verifica la seguente maggiorazione:

$$(6) \quad \|e^{(i)}\|_T \leq \|P_i(A)\| \frac{T^{i(1-\alpha)}\Gamma(1-\alpha)^i}{\Gamma[i(1-\alpha)+1]} \|e^{(0)}\|_T$$

dove $P_i(z) = c^i/2^{i-1} \cdot T_i((z-\delta)/c)$ il polinomio monico di Chebyshev traslato di grado i , per ogni $i \in N$.

Esperimenti numerici confermano che il metodo NSW di Chebyshev–Richardson dà ottimi risultati in termini di accelerazione della convergenza rispetto ai metodi stazionari, anche nei casi in cui il metodo di Richardson non è applicabile. Inoltre la implementazione parallela presenta risultati molto incoraggianti in termini di speedup ed efficienza. La sperimentazione numerica è stata effettuata sul cluster IBM SP4/512 del CINECA e su un cluster di 32 PC del laboratorio didattico del dipartimento di Matematica ed Informatica dell’Università degli Studi di Salerno.

I metodi di collocazione e RK veloci sono stati pubblicati in [4] e [2], mentre il metodo NSW di Chebyshev–Richardson è stato pubblicato in [1].

Riferimenti bibliografici

- [1] CAPOBIANCO G.e CONTE D., *An efficient and fast parallel method for Volterra integral equations of Abel type* J. Comput. Appl. Math., **189/1-2**, (2006), 481–493.
- [2] CAPOBIANCO G., CONTE D., DEL PRETE I. e E. RUSSO, *Fast Runge–Kutta Methods for nonlinear convolution systems of Volterra Integral Equations*, (in stampa sulla rivista BIT. Numerical Mathematics e pubblicato on-line all’url <http://dx.doi.org/10.1007/s10543-007-0120-5>).
- [3] CAPOBIANCO G., CRISCI M.R. e RUSSO E., *Non stationary waveform relaxation methods for Abel integral equations*, J. Integ. Eq. Appl., **16, No.1**, (2004), 53–66.
- [4] CONTE D. e DEL PRETE I., *Fast collocation methods for Volterra integral equations of convolution type*, J. Comput. Appl. Math., **196/2**, (2006), 652–663.
- [5] HAIRER E., LUBICH CH. e SCHLICHTE M., *Fast numerical solution of nonlinear Volterra convolution equations*, SIAM J. Sci. Statist. Comput., **6**, (1985) 532–541.
- [6] LUBICH CH. e SCHÄDLE A. *Fast convolution for non-reflecting boundary conditions*, Siam. J. Sci. Comput., **24**, (2002), 161–182.

Dipartimento di Matematica e Informatica, Università di Salerno

e-mail: dajconte@unisa.it

Dottorato in Matematica (sede amministrativa: Università di Salerno) - Ciclo IV (Nuova Serie)

Direttore di ricerca: Prof.ssa B. Paternoster, Università di Salerno