Adaptatividad temporal de métodos de descomposición para ecuaciones de evolución

XVII Congreso Dr. Antonio Monteiro

Lisandro A. Raviola[1] y Mariano F. De Leo[2]

[1] Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Universidad Nacional de Rosario

[2] Instituto de Matemática de Bahía Blanca, Universidad Nacional del Sur

Bahía Blanca, 8 de junio de 2023

XVII Congreso
Dr. Antonio Monteiro
7, 8 y 9 de junio de 2023
Bahía Blanca, Argentina

Contenido

Planteo del problema

- Objetivo: resolver el problema de valores iniciales

$$\begin{cases} \mathrm{i}\partial_t\, u(x,t) = Au(x,t) + B(u(x,t)), & x \in \mathbb{R}, t \geq 0, \\ u(x,0) = u_0(x), & \end{cases}$$

- Equivalentemente, determinar el *flujo* $\phi(t)$ tal que $u(x,t) = \phi(t)u_0(x)$ es solución
- A es un operador lineal definido como *multiplicador de Fourier*

$$\widehat{Au}(k,t) = \mathcal{A}(k)\widehat{u}(k,t), \quad \widehat{u}(k,t) := \mathcal{F}\{u(x,t)\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} u(x,t)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\, \mathrm{d}x$$

- $\mathcal{A}(k) \in \mathbb{C}$ es el *símbolo* del operador A
- B es un operador posiblemente no lineal
- Ecuaciones de evolución semilineales: reacción-difusión, Schrödinger lineal / no lineal, Gross-Pitaevskii, Ginzburg-Landau, ...

Contenido

2 Métodos numéricos

Descomposición de operadores

- En los métodos de descomposición de operadores o *splitting* el problema original se divide en dos subproblemas de valores iniciales que se resuelven separadamente

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{i}\partial_t u(x,t) = Au(x,t), \qquad && u(x,0) = u_0(x) \quad / \quad u(x,t) = \phi_A(t)u_0(x) \\
&\mathrm{i}\partial_t u(x,t) = B(u(x,t)), \qquad && u(x,0) = u_0(x) \quad / \quad u(x,t) = \phi_B(t)u_0(x)
\end{aligned}
$$

- ϕ_A y ϕ_B son los flujos parciales asociados a cada operador (propagadores)
- Los problemas parciales son más *simples* o *convenientes* de resolver
- Esta división permite aplicar métodos especializados a cada subproblema, obteniéndose los propagadores parciales en forma exacta o aproximada
- ¿Cómo aproximo el propagador ϕ del problema original a partir de ϕ_A y ϕ_B?
- Vamos a estudiar dos clases: métodos *multiplicativos* y métodos *aditivos*

Métodos multiplicativos (simplécticos)

- Aproximación de Lie-Trotter (primer orden)

$$\Phi_1(h) = \phi_B(h) \circ \phi_A(h), \quad \phi(h) = \Phi_1(h) + \mathcal{O}(h^2)$$

- Aproximación de Strang-Marchuk (segundo orden)

$$\Phi_2(h) = \phi_A(\frac{1}{2}h) \circ \phi_B(h) \circ \phi_A(\frac{1}{2}h), \quad \phi(h) = \Phi_2(h) + \mathcal{O}(h^3)$$

- Aproximaciones de orden superior

$$\Phi_n(h) = \phi_B(b_m h) \circ \phi_A(a_m h) \circ \cdots \circ \phi_B(b_1 h) \circ \phi_A(a_1 h), \quad \phi(h) = \Phi_n(h) + \mathcal{O}(h^{n+1})$$

$$a_1 + a_2 + \cdots + a_m = b_1 + b_2 + \cdots + b_m = 1$$

Métodos multiplicativos (simplécticos)

- Lie-Trotter (orden 1):

$$b_1 = 1, a_1 = 1$$

- Strang-Marchuk (orden 2):

$$a_2 = \frac{1}{2}, b_1 = 1, a_1 = \frac{1}{2}$$

- Ruth (orden 3):

$$b_3 = \frac{7}{24}, a_3 = \frac{2}{3}, b_2 = \frac{3}{4}, a_2 = -\frac{2}{3}, b_1 = -\frac{1}{24}, a_1 = 1$$

- Neri-Yoshida (orden 4):

$$a_1 = a_4 = \frac{1}{2(2-2^{1/3})}, a_2 = a_3 = -\frac{2^{1/3}-1}{2(2-2^{1/3})}, b_1 = b_3 = 2a_1, b_2 = -2^{1/3}b_1, b_4 = 0$$

Métodos multiplicativos (simplécticos)

- Para esquemas de orden mayor a 2, uno o más de los a_m, b_m son *negativos* $\implies$ no son aptos para problemas irreversibles (la evolución hacia atrás está mal planteada)
- ¿Cómo conservamos la versatilidad de los métodos de descomposición en problemas irreversibles con integradores de orden superior a 2?

Métodos aditivos (afines)

IMA Journal of Numerical Analysis (2015) Page 1 of 25
doi:10.1093/imanum/drv058

High-order time-splitting methods for irreversible equations

MARIANO DE LEO

Instituto de Ciencias, Universidad de General Sarmiento, Juan María Gutiérrez 1150, Los Polvorines, Pcia de Buenos Aires C1613EGA, Argentina
mdeleo@ungs.edu.ar

AND

DIEGO RIAL AND CONSTANZA SÁNCHEZ DE LA VEGA*

Departamento de Matemática, FCEyN, Universidad de Buenos Aires, Intendente Güiraldes 2160, Ciudad Universitaria, Pabellón I, Buenos Aires C1428EGA, Argentina and Instituto de Matemática Luis Santaló, IMAS–CONICET, Buenos Aires, Argentina
*Corresponding author: drial@dm.uba.ar csfvega@dm.uba.ar

Métodos aditivos (afines)

- En De Leo et al. (2016) se presentan métodos de descomposición de orden arbitrario basados en combinaciones afines aditivas de esquemas de Lie-Trotter que no contienen pasos negativos (los denominamos *métodos afines*)
- Ese trabajo prueba rigurosamente la convergencia de los métodos para un amplio rango de problemas semilineales que incluye tanto modelos hamiltonianos como ecuaciones de reacción-difusión y modelos disipativos
- En un trabajo reciente (`https://arxiv.org/abs/2305.18568`), mostramos a partir de una exploración numérica exhaustiva que el desempeño de los métodos afines es en muchos casos equivalente o superior al de los métodos multiplicativos en la solución de ecuaciones tipo Schrödinger no lineal y Ginzburg–Landau

Métodos aditivos (afines): definición

- En los métodos afines, se parte del par adjunto de propagadores de Lie-Trotter...

$$\Phi_1^+(h) = \phi_B(h) \circ \phi_A(h), \quad \Phi_1^-(h) = \phi_A(h) \circ \phi_B(h),$$

- Se construyen recursivamente las composiciones

$$\Phi_m^\pm(h) = \Phi_1^\pm(h) \circ \Phi_{m-1}^\pm(h), \qquad m = 2, 3, \ldots$$

- ... y se definen las combinaciones afines (simétricas)

$$\Phi_{\mathrm{SA}}^\sigma(h) = \sum_{j=1}^{\sigma} \gamma_j \Big(\Phi_j^+(h/j) + \Phi_j^-(h/j) \Big),$$

que aproximan ϕ a orden $q = 2n$ si los γ_j satisfacen las *condiciones de orden*

$$\sum_{j=1}^{\sigma} \gamma_j = \frac{1}{2}, \quad \sum_{j=1}^{\sigma} \frac{\gamma_j}{j^{2k}} = 0, \qquad 1 \leq k \leq n-1.$$

Métodos afines simétricos

$$\boxed{q=2} \quad \phi(h) = +\frac{1}{2}\Big(\phi_A \circ \phi_B(h) + \phi_B \circ \phi_A(h)\Big) + \mathcal{O}(h^3)$$

$$\begin{aligned}\boxed{q=4} \quad \phi(h) = &-\frac{1}{6}\Big(\phi_A\phi_B(h) + \phi_B\phi_A(h)\Big)\\ &+\frac{2}{3}\Big(\phi_A\phi_B\phi_A\phi_B(h/2) + \phi_B\phi_A\phi_B\phi_A(h/2)\Big) + \mathcal{O}(h^5)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\boxed{q=6} \quad \phi(h) = &+\frac{1}{48}\Big(\phi_A\phi_B(h) + \phi_B\phi_A(h)\Big)\\ &-\frac{8}{15}\Big(\phi_A\phi_B\phi_A\phi_B(h/2) + \phi_B\phi_A\phi_B\phi_A(h/2)\Big)\\ &+\frac{81}{80}\Big(\phi_A\phi_B\phi_A\phi_B\phi_A\phi_B(h/3) + \phi_B\phi_A\phi_B\phi_A\phi_B\phi_A(h/3)\Big) + \mathcal{O}(h^7)\end{aligned}$$

Métodos aditivos (afines): potencialidades

- Su propia estructura algorítmica los hace potencialmente paralelizables
- Cada método de orden q lleva incorporados (*embebidos*) los métodos de orden par inferiores en sus primeras etapas (módulo constantes)
- Cada método puede considerarse como un par embebido y permite estimar el error local, permitiendo adaptatividad temporal

Contenido

3 Adaptatividad temporal

- Dependiendo de la solución, un tamaño de paso fijo Δt puede ser
  - demasiado largo: se pierde exactitud, incrementando el error global
  - demasiado corto: se pierde eficiencia, incrementando el costo computacional
- Las técnicas de adaptatividad temporal utilizan un tamaño de paso variable para lograr un balance razonable entre exactitud y costo computacional
- Se utilizan en integradores Runge-Kutta de "caja negra" incluidos en los entornos de computación científica (Matlab, Python, R, Julia) o en librerías de lenguajes de programación (RK45, DOPRI5, DOP853, etc.)

Estimación del error local y control de tamaño de paso

- Se basan en la estimación del error local mediante *pares embebidos de métodos* de distinto orden $q > \hat{q}$

$$\hat{\mathbf{e}}_{n+1} \approx \mathbf{u}_{n+1} - \hat{\mathbf{u}}_{n+1} = \Phi_q(\mathbf{u}_n, \Delta t_n) - \Phi_{\hat{q}}(\mathbf{u}_n, \Delta t_n)$$

- El tamaño de paso “conveniente” se determina mediante un algoritmo $\mathbf{P}$ para mantener el error local debajo de una tolerancia τ (en alguna norma oportuna), p.e.

$$e_n = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \hat{\mathbf{e}}_{n,i}^2} < \tau$$

$$\Delta t_{n+1} = \mathbf{P}(\Delta t_n, \tau, e_{n+1}, \hat{q}, \Delta t_{n-1}, \ldots, e_n, \ldots)$$

Pares embebidos

- Pares embebidos de esquemas multiplicativos han sido construidos recientemente, pero requieren una teoría sofisticada y la resolución del problema de optimización de encontrar los mejores coeficientes compatibles con las condiciones de orden (SE polinomial)
- Compararemos el desempeño de ambas clases de métodos, en particular considerando los presentados en los trabajos de Auzinger et al. (2019)

1. Establecer tamaño de paso inicial Δt_0 (manual o automáticamente)
2. Realizar un paso de integración Δt_n con $\Phi_q, \Phi_{\hat{q}}$ y estimar el error local e_{n+1}
3. Calcular el tamaño de paso máximo Δt_{n+1} compatible con τ usando e_{n+1}
4. Si $\Delta t_{n+1} < \Delta t_n$ *rechazar* el paso apenas realizado y repetir 2 y 3 asignando $\Delta t_n \leftarrow \Delta t_{n+1}$, de otro modo aceptar el paso e inicializar el paso siguiente con $\Delta t_{n+1} \leftarrow \Delta t_n$
5. Repetir desde 2 hasta finalizar la integración $\left(\sum_n \Delta t_n = T\right)$.

Algoritmo de control de paso

- Los distintos esquemas adaptativos difieren en la implementación de $\mathbf{P}$, esto es, en cómo determinan el nuevo tamaño de paso
- Esquema básico con factores de seguridad

$$\Delta t_{n+1} = \mathbf{P}(\Delta t_n, \tau, e_{n+1}, \hat{q}) = \text{mín}\left(\alpha_{\max}, \text{máx}\left(\alpha_{\min}, \alpha\left(\frac{\tau}{e_{n+1}}\right)^{\frac{1}{\hat{q}+1}}\right)\right)\Delta t_n$$

- Esquema PI basado en teoría de control

$$\Delta t_{n+1} = \text{mín}\left(\alpha_{\max}, \text{máx}\left(\alpha_{\min}, \alpha\left(\frac{\tau}{e_{n+1}}\right)^{\frac{\beta_{\mathrm{I}}}{\hat{q}+1}}\left(\frac{e_n}{e_{n+1}}\right)^{\frac{\beta_{\mathrm{P}}}{\hat{q}+1}}\right)\right)\Delta t_n$$

- etc.

Contenido

4 Resultados

- Ecuación de Schrödinger no lineal cúbica (NLSE3)

$$\mathrm{i}\partial_t u = \frac{1}{2}(-\partial_x^2)u \pm |u|^2 u$$

- La NLSE3 describe la propagación de paquetes de ondas cuasi-monocromáticos en medios dispersivos y débilmente no lineales
- En el caso *enfocante* (-) admite soluciones localizadas y estables de tipo *solitón*

Modelo

- Ecuación de Schrödinger no lineal cúbica (NLSE3)

$$\mathcal{A}(k) = \frac{1}{2}|k|^2, \quad B(u) = \pm|u|^2 u$$

- La NLSE3 describe la propagación de paquetes de ondas cuasi-monocromáticos en medios dispersivos y débilmente no lineales
- En el caso *enfocante* (-) admite soluciones localizadas y estables de tipo *solitón*

Métricas

- Resolvemos numéricamente la NLSE3 vía discretización pseudoespectral y descomposición de operadores con esquemas adaptativos
- Calculamos el error de la solución numérica u_{num} respecto a una solución de referencia u_{ref} exacta

$$\mathcal{E}_{\infty}(t) = \max_{x \in \mathbb{R}} \left| u_{\text{num}}(x,t) - u_{\text{ref}}(x,t) \right|$$

- Estimamos el *costo computacional* de cada método mediante el *número de evaluaciones* de los propagadores ϕ_A y ϕ_B hasta el tiempo final de simulación

$$u_{\text{ref}}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{-\gamma}}\left[\Psi_1(x,t) + \Psi_2(x,t)\right]$$

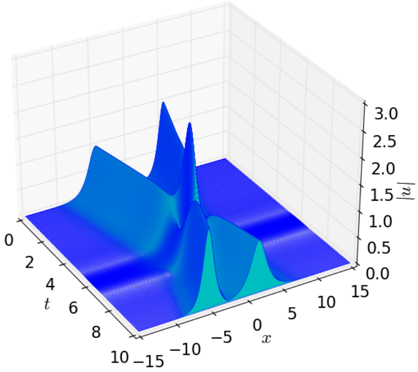
$$\Psi_1(x,t) = \frac{M_{12}\left(\gamma_1^{-1} + \gamma_2^*\right) - M_{22}\left(\gamma_2^{-1} + \gamma_2^*\right)}{M_{12}M_{21}\left(\gamma_1^* + \gamma_2^{-1}\right)\left(\gamma_1^{-1} + \gamma_2^*\right) - M_{11}M_{22}\left(\gamma_1^{-1} + \gamma_1^*\right)\left(\gamma_2^{-1} + \gamma_2^*\right)},$$

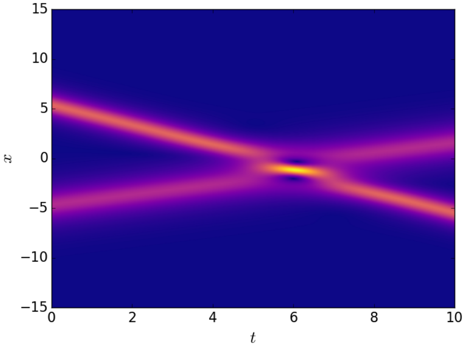
$$\Psi_2(x,t) = \frac{M_{21}\left(\gamma_1^* + \gamma_2^{-1}\right) - M_{11}\left(\gamma_1^{-1} + \gamma_1^*\right)}{M_{12}M_{21}\left(\gamma_1^* + \gamma_2^{-1}\right)\left(\gamma_1^{-1} + \gamma_2^*\right) - M_{11}M_{22}\left(\gamma_1^{-1} + \gamma_1^*\right)\left(\gamma_2^{-1} + \gamma_2^*\right)},$$

$$M_{jk} = 1/\left(\lambda_j + \lambda_k^*\right),\ \lambda_j = \alpha_j + \mathrm{i}v_j,$$

$$\gamma_j(x,t) = \exp\left(\lambda_j\left(x - x_{0j}\right) + \mathrm{i}\left[\lambda_j^2\left(t - t_0\right)/2 + \phi_{0j}\right]\right)$$

Ejemplo numérico: solución de referencia





Ejemplo numérico: resultados

4 Resultados

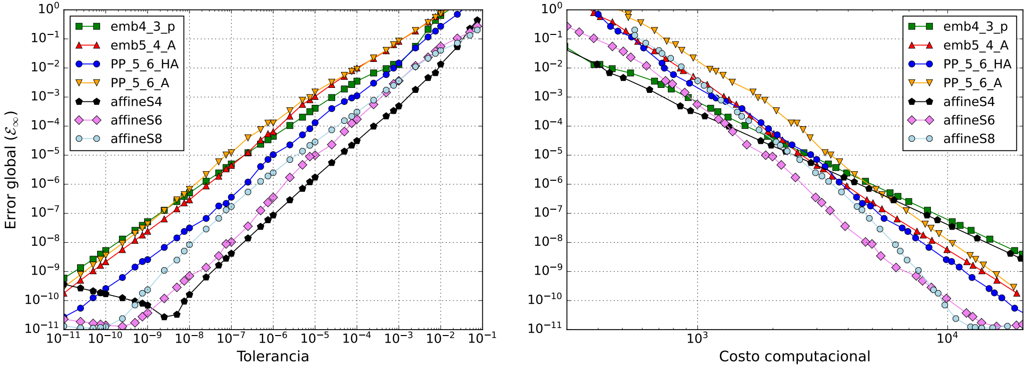


Figura: (Izquierda) Error $\mathcal{E}_\infty(t = 10)$ vs. τ. (Derecha) Error vs. costo computacional.

Ejemplo numérico: resultados

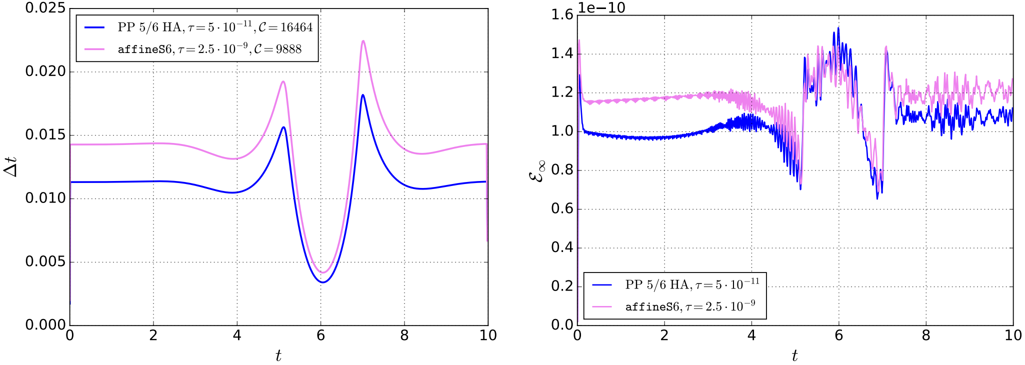


Figura: (Izquierda) Tamaño de paso Δt vs. t. (Derecha) Error global $\mathcal{E}_\infty$ vs. t.

$$\mathrm{i}\partial_t u = (\frac{1}{2} - \mathrm{i}\beta)(-\partial_x^2)u + \mathrm{i}\delta u + (\gamma + \mathrm{i}\varepsilon)|u|^2 u + (-\nu + \mathrm{i}\mu)|u|^4 u.$$

- Es una generalización disipativa de la NLSE3
- Tiene aplicaciones en óptica no lineal
- Admite soluciones tipo *soliton disipativo*

Ejemplo numérico no conservativo: CGLE5

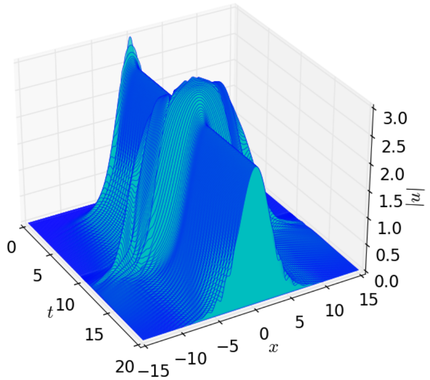


Figura: Soliton *explosivo* de la CGLE5.

Ejemplo numérico no conservativo: CGLE5

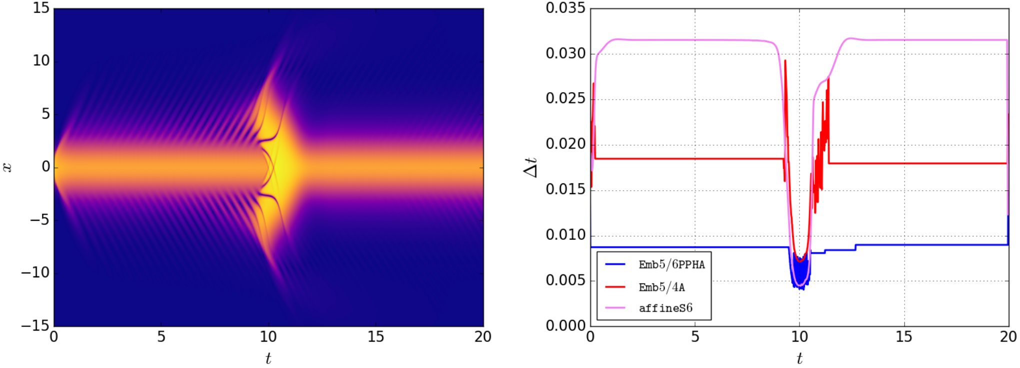


Figura: (Izquierda) Curvas de nivel de $|u|$. (Derecha) Tamaño de paso Δt vs. t

Contenido

Conclusiones

- Los esquemas de descomposición afín de alto orden adaptativos (particularmente para $q = 6$) son superiores a los multiplicativos en términos de exactitud y costo computacional
- Poseen la versatilidad de los métodos de descomposición sin los riesgos de inestabilidad de los esquemas multiplicativos de alto orden en problemas irreversibles
- A diferencia de los multiplicativos, no requieren una laboriosa construcción de pares especiales para estimar el error (los pares de distinto orden se encuentran naturalmente “embebidos”)
- Combinados con métodos pseudoespectrales de discretización, dan lugar a esquemas de solución robustos y eficientes para ecuaciones de evolución no lineales

Perspectivas

- Mejoras en los algoritmos para aumentar eficiencia
  - Implementación de estrategias más robustas de control de paso
  - Paralelización (se justifica en problemas muy grandes)
  - Adaptatividad espacial y espectral (adecuar la base a la solución dinámicamente)
- Generalización a problemas en 2D y 3D
- Combinación con otras discretizaciones (diferencias finitas, funciones de base radial)
- Consolidación en un paquete (librería) para Python amable al usuario
- Buenas prácticas de desarrollo, orientación a objetos
- Implementación más eficiente en Python mediante Cython/Numba o con lenguajes especializados para cálculo numérico (Julia, Fortran)

¡Gracias por su atención!
¿Preguntas?

`raviola@fceia.unr.edu.ar`