
BOLLETTINO

UNIONE MATEMATICA ITALIANA

Sezione A – La Matematica nella Società e nella Cultura

BENEDETTA MORINI

Metodi di Newton inesatti nella risoluzione di problemi ai valori iniziali di tipo stiff

Bollettino dell'Unione Matematica Italiana, Serie 8, Vol. 2-A—La Matematica nella Società e nella Cultura (1999), n.1S (Supplemento Tesi di Dottorato), p. 189–191.

Unione Matematica Italiana

[<http://www.bdim.eu/item?id=BUMI_1999_8_2A_1S_189_0>](http://www.bdim.eu/item?id=BUMI_1999_8_2A_1S_189_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 di Newton inesatti nella risoluzione di problemi ai valori iniziali di tipo stiff.

BENEDETTA MORINI

Un tema importante ed attuale nell'ambito dell'Analisi Numerica è lo studio della risoluzione di problemi ai valori iniziali stiff di grandi dimensioni. L'interesse computazionale per questi problemi deriva dal fatto che molte equazioni differenziali ordinarie di rilevanza applicativa, originate direttamente da modelli di sistemi fisici o indirettamente dalla discretizzazione di equazioni alle derivate parziali, sono di tipo stiff e costituite da un gran numero di equazioni, ovvero sono di grandi dimensioni.

A motivo delle proprietà di stabilità, i metodi più adatti alla risoluzione dei problemi ai valori iniziali di tipo stiff sono impliciti. L'uso di un metodo implicito è tuttavia complesso e costoso e in particolare la sua applicazione ad un problema non lineare richiede, ad ogni passo di integrazione, la soluzione di un sistema di equazioni non lineari. Per risolvere tale sistema si applica un procedimento iterativo di tipo Newton e questo a sua volta necessita, ad ogni iterazione, della soluzione di un opportuno sistema lineare algebrico.

L'esperienza ha ampiamente mostrato che gran parte del lavoro computazionale nella risoluzione dei problemi ai valori iniziali è costituito dalla risoluzione dei sistemi lineari e che l'efficienza del procedimento numerico di integrazione dipende dal metodo di tipo Newton utilizzato. Nel caso di problemi ai valori iniziali di grande dimensione, frequentemente la matrice Jacobiana è sparsa e assumono grande importanza i cosiddetti metodi di Newton Inesatti nei quali si utilizzano procedimenti iterativi per l'algebra lineare. Più chiaramente, con il termine «Inesatti» si indicano quei procedimenti di tipo Newton in cui si risolve ad ogni iterazione il sistema lineare algebrico in modo approssimato [1]. Per costruzione, nei metodi Inesatti in cui i sistemi lineari sono risolti iterativamente, si hanno due livelli di iterazioni: le iterazione «esterne» relative al metodo di Newton e quelle «interne» corrispondenti al procedimento iterativo usato per la risoluzione del sistema lineare algebrico. L'efficienza e robustezza di questi metodi dipende considerevolmente dal criterio usato per controllare la convergenza delle iterazioni interne. Pertanto risulta cruciale una scelta opportuna dei termini forzanti, cioè delle quantità che controllano ad ogni iterazione il residuo relativo nella risoluzione dei sistemi lineari.

Numerosi autori hanno studiato, nell'ambito di varie applicazioni, il problema della scelta dei termini forzanti che equivale a «costruire» il metodo Inesatto [1]. Nel contesto di problemi ai valori iniziali con Jacobiana sparsa, un vasto lavoro di

ricerca teorica e sperimentale ha evidenziato i grandi miglioramenti, nell'efficienza del procedimento di integrazione, derivanti dall'uso di metodi Inesatti (cfr. ad es. [2], [3]). Tuttavia la questione di come scegliere i termini forzanti è un argomento di grande attualità che riveste una notevole importanza sia teorica che applicativa.

Nella prima parte della tesi, dopo una attenta analisi dei metodi Inesatti, viene dato un contributo originale definendo condizioni di convergenza locale di interesse applicativo. Un primo risultato dà le condizioni per ottenere la convergenza lineare in funzione del numero di condizionamento del problema nonlineare e permette di dedurre limitazioni superiori calcolabili per i termini forzanti che dipendono dal numero di condizionamento delle matrici di iterazione misurato nelle usuali norme compatibili. Questo ha una notevole rilevanza computazionale in quanto i risultati presenti in letteratura per la convergenza lineare sono espressi in funzione di una norma che dipende dalla soluzione e quindi non è calcolabile [1]. Un altro risultato è stato ottenuto definendo nuovi metodi Inesatti con residuo relativo scalato. L'uso di tali metodi è particolarmente efficace per problemi malcondizionati e ha permesso di svolgere una analisi invariante affine della convergenza. Un'applicazione di questi risultati nell'ambito dei metodi Inesatti con metodi iterativi per l'algebra lineare, è data dalle tecniche del preconditionamento destro e/o sinistro. L'effetto dell'uso dei preconditionatori sui termini forzanti è dettagliatamente analizzato.

Nella seconda parte della tesi è introdotto un procedimento risolutivo per problemi ai valori iniziali stiff e di grandi dimensioni in cui si usano metodi Inesatti. In particolare, sono stati studiati procedimenti di tipo *predictor-corrector* per i quali il correttore BDF (backward differentiation formula) è risolto con metodi Inesatti sulla base dei risultati precedentemente esposti. Dopo aver analizzato il legame che intercorre tra l'errore di troncamento del procedimento di integrazione e quello commesso nell'arresto del procedimento iterativo dei metodi Inesatti, è stata proposta una nuova scelta dei termini forzanti. A tal fine sono esaminate le strategie di integrazione numerica realizzate nei codici più comunemente usati e quindi sono scelti i termini forzanti in funzione dell'accuratezza richiesta per la soluzione numerica del problema ai valori iniziali. In questo modo si definisce un procedimento di integrazione originale la cui robustezza ed efficienza è stata analizzata modificando opportunamente il noto codice LSODE [4]; il codice ottenuto è detto LSODEIN (LSODE con metodi INesatti). L'ampia sperimentazione numerica documenta la validità del procedimento proposto che costituisce una strategia di integrazione meno conservativa rispetto a quella proposta in LSODE. Per stimare l'affidabilità di LSODEIN rispetto a LSODE è stato usato il Programma Stiff Detest ([5]) di Enright e Price che fornisce una stima del numero di valutazioni di funzione e Jacobiane necessarie per ottenere una soluzione con un dato errore globale. I risultati sono stati inoltre confrontati con quelli di un differente procedimento di integrazione basato sui metodi Inesatti e proposto in [3].

BIBLIOGRAFIA

- [1] R.S. DEMBO, S.C.EISENSTAT and T.STEihaug, *Inexact Newton Methods*, *SIAM J. Numer. Anal.*, **19** (1982), 400-408.
- [2] P.N. BROWN, A.C. HINDMARSH, *Reduced storage matrix methods in stiff ODE systems*, *Appl. Math. Comp.*, **31** (1989), 40-91.
- [3] T.F.CHAN, K.R.JACKSON, *The use of iterative linear equation solvers in codes for large systems of stiff IVPs for ODEs*, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, **7** (1986), 378-417.
- [4] A.C. HINDMARSH, *LSODE and LSODI, two new initial value ordinary differential equation solvers*, *ACM Newsletter*, **15** (1980), 10-11.
- [5] W.H. ENRIGHT, J.D. PRICE, *Two FORTRAN packages for assessing initial value methods*, *ACM Transaction on Mathematical Software*, **13** (1987), 1-27.

Dipartimento di Energetica «S. Stecco», Università di Firenze
e-mail: morini@risemat.de.unifi.it

Dottorato in Matematica Computazionale ed Informatica Matematica
(sede amministrativa: Padova) - Ciclo X

Relatore: Prof. Ilio Galligani, Università di Bologna

Correlatore: Prof. Maria Macconi, Università di Firenze