

Relazione finale Progetto di ricerca - GNCS 2016

Metodi numerici per operatori non-locali nella simulazione di fenomeni complessi

Responsabile: Roberto Garrappa
(Università degli studi di Bari “Aldo Moro”)

Descrizione del progetto

Tra gli obiettivi principali del progetto di ricerca vi era lo sviluppo e lo studio di metodi numerici per la discretizzazione di operatori non standard, principalmente di natura non-locale, impiegati nella descrizione e simulazione di alcuni fenomeni complessi.

Partendo dagli ormai più comuni operatori differenziali ed integrali frazionari (più precisamente di ordine non intero), sui quali il gruppo di ricerca aveva già avviato esperienze in passato, e per i quali si è proseguito lo studio secondo le linee che si descriveranno meglio nel seguito della relazione, si è affrontato il problema del trattamento numerico di nuovi operatori il cui utilizzo è emerso negli ultimi anni in relazione alla descrizione di alcuni fenomeni complessi, quali ad esempio quelli legati alla propagazione di onde elettromagnetiche in materiali complessi.

Si tratta di argomenti abbastanza innovativi, sia dal punto di vista teorico che numerico, e verso i quali è stato manifestato vivo interesse da parte della comunità scientifica, in particolare fisici ed ingegneri, in vista delle potenziali applicazioni pratiche.

Composizione del gruppo di ricerca

Il gruppo di ricercatori impegnato nell’ambito del progetto di ricerca è stato così composto:

- Aceto Lidia, Professore Associato, Università degli Studi di Pisa
- Garrappa Roberto, Professore Associato, Università degli studi di Bari

- Magherini Cecilia, Ricercatore Universitario, Università degli Studi di Pisa
- Messina Eleonora, Professore Associato, Università di Napoli
- Moret Igor, Professore Associato in quiescenza, Università di Trieste
- Novati Paolo, Professore Associato, Università degli Studi di Trieste
- Popolizio Marina, Ricercatore Universitario, Università del Salento
- Vecchio Antonia, Dirigente di Ricerca, CNR-IAC “M. Picone”, Napoli

Principali risultati ottenuti

Per quanto attiene ai metodi numerici per operatori differenziali di ordine frazionario, il progetto di ricerca ha consentito di proseguire lo studio circa l'utilizzo di approssimazioni razionali delle funzioni generatrici di metodi multistep. L'approssimazione razionale proposta ha permesso di ricondurre la soluzione del problema differenziale alla risoluzione di sistemi lineari con matrici a banda. Tale tecnica sembra essere particolarmente promettente soprattutto in vista di applicazioni di tipo *real-time*, dove la velocità di esecuzione risulta essere un fattore determinante da privilegiare rispetto anche all'ordine di convergenza dei metodi. All'aumentare dell'ampiezza della banda, però, si riscontrano difficoltà nella risoluzione numerica dei sistemi lineari dovute al malcondizionamento delle matrici. Per superare tali difficoltà sono stati pertanto sviluppati algoritmi efficienti in grado di sfruttare le proprietà di struttura delle matrici coinvolte [AN2].

L'approccio basato su approssimazioni di tipo razionale è stato quindi esteso a problemi che coinvolgono il Laplaciano frazionario. Si è sfruttata la formulazione integrale di A^α , $A \in R^{N \times N}$, $0 < \alpha < 1$, e quindi formule di quadratura di tipo Gauss-Jacobi, per permettere l'applicazione alla risoluzione di modelli di diffusione anomala [AN3].

Per lo stesso tipo di modelli sono stati inoltre studiati metodi sul sottospazio di Krylov per il calcolo di funzioni di operatori frazionari, nell'ottica della risoluzione del problema discretizzato nello spazio attraverso metodi di Runge-Kutta o integratori esponenziali [MN].

In tale ottica si è studiata in dettaglio anche l'applicazione di metodi di Krylov ad un particolare tipo di equazione, l'equazione di Schrödinger frazionaria rispetto al tempo. Si tratta di un problema che presenta alcune difficoltà dal punto di vista computazionale in quanto la discretizzazione spaziale conduce a sistemi con matrici aventi lo spettro sul bordo della regione di stabilità; la presenza di una memoria persistente, tipica delle equazioni di ordine non frazionario, ne rende quindi estremamente problematico il trattamento numerico. Attraverso una analisi teorica, si è pertanto operato uno splitting della soluzione in una parte oscillante, ma priva di memoria, e in una parte più regolare, con decadimento di tipo sostanzialmente

monotonico, esprimibile mediante una formulazione integrale e che racchiude tutto l'effetto memoria del problema originario. Si sono pertanto potute applicare, con risultati promettenti, tecniche differenti per il trattamento delle diverse componenti della soluzione, permettendo così di tenere sotto controllo, anche a seguito di opportune analisi teoriche, la convergenza dei metodi sul sottospazio di Krylov [GMP].

E' stato inoltre affrontato il problema della propagazione di perturbazioni nel caso di problemi differenziali di ordine non intero. Spesso infatti i parametri principali e le funzioni coinvolte nei modelli frazionari sono noti solo in maniera approssimata e talvolta con poca accuratezza. Le equazioni da risolvere sono dunque affette da perturbazioni il cui impatto sulla soluzione analitica, e conseguentemente su quella numerica, può non essere trascurabile, specialmente se si integra su tempi lunghi.

Per questo motivo è stato studiato l'effetto sulla soluzione, sia analitica che numerica, di perturbazioni sui dati del problema per una classe di equazioni differenziali frazionarie non autonome e sono state determinate condizioni per la limitatezza degli errori. Tale studio, non condotto sino ad ora per le equazioni differenziali frazionari, ha reso possibile non solo l'analisi della stabilità numerica di metodi di integrazione prodotto rispetto ad un'equazione test non parametrica, ma anche di stabilire a priori una tolleranza ammissibile per gli errori sui dati che garantisca un'approssimazione numerica entro i limiti di una prescritta accuratezza. [GMV]

Un altro campo di investigazione è stato quello relativo alla approssimazione degli autovalori di un problema di Sturm-Liouville frazionario definito su dominio limitato con derivata frazionaria definita nel senso di Riesz di ordine $\alpha \in (0, 2)$. Lo schema proposto, consistente in un metodo spettrale di tipo Galerkin, consente di discretizzare il problema continuo con un problema di autovalori generalizzato. L'ordine di convergenza della procedura rispetto alla dimensione delle matrici è stato studiato teoricamente ed i risultati di alcuni test numerici presentati mostrano la competitività dell'approccio proposto rispetto ad altre tecniche numeriche attualmente disponibili. [GM2]

Si è quindi dedicata attenzione allo studio di nuovi operatori di natura non locale. In particolare ci si è dedicati alla definizione ed allo studio di operatori integrali e differenziali atti a trattare, nel dominio temporale, leggi costitutive osservate sperimentalmente nello studio della propagazione di onde elettromagnetiche in materiali complessi compositi, quali ad esempio i tessuti biologici.

Il punto di partenza è stato il modello di Havriliak-Negami, studiato sino ad ora principalmente solo nel dominio delle frequenze, per il quale è stato possibile derivare una formulazione del corrispondente operatore differenziale in termini di operatori di tipo Grünwald-Letnikov i quali si sono rilevati utili anche per il trattamento numerico e l'utilizzo nell'ambito di simulazioni numeriche [G1]. Si è quindi analizzato e studiato anche un approccio di tipo product-integration per problemi di questo tipo [GM1].

Lo studio, dal punto di vista più teorico, è stato esteso ad altri operatori di questo tipo, mediante una analisi approfondita dei diversi modelli introdotti per la descrizione dei fenomeni di rilassamento nei dielettrici, approfondendo e studiandone la loro rappresentazione matematica [GMM].

Publicazioni

- [AN1] Abdelsheed I.G.A., Novati P., *The solution of fractional order epidemic model by implicit Adams methods*, Appl. Math. Model. 43 (2017) pp. 78–84.
- [AN2] Aceto L., Novati P., *Efficient implementation of rational approximations to fractional differential operators*, Submitted.
- [AN3] Aceto L., Novati P., *Rational approximation to the fractional Laplacian operator in reaction-diffusion problems*, SIAM J. Sci. Comput., 39 (2017) pp. A217-A228.
- [G1] Garrappa R., *On Grünwald-Letnikov operators for fractional relaxation in Havriliak-Negami models*, Communications in Nonlinear Sciences and Numerical Simulation, 2016, 38, 178-191
- [GMM] Garrappa R., Mainardi F., Maione G., *Models of dielectric relaxation based on completely monotone functions*, Fractional Calculus & Applied Analysis, 2016, 19(5), 1105-1160
- [GM1] Garrappa R., Maione G., *Fractional Prabhakar derivative and applications in anomalous dielectrics: a numerical approach*, Chapter book in “Theory and Applications of Non-Integer Order Systems” (editors: Babiar, A., Czornik, A., Klamka, J., Niezabitowski, M.), Springer 2017, 429-439
- [GMV] Garrappa R., Messina E., Vecchio A., *Effect of perturbation in the numerical solution of fractional differential equations*, accettato per la pubblicazione in Discrete and Continuous Dynamical System - B.
- [GMP] Garrappa R., Moret I., Popolizio M., *On the time-fractional Schrödinger equation: theoretical analysis and numerical solution by matrix Mittag-Leffler functions*, Computers & Mathematics with Applications, (2016) in press
- [GM2] Ghelardoni P., Magherini C., *A matrix method for fractional Sturm-Liouville problems on bounded domain*, Adv. Comput. Math. (2017) in press
- [MN] Moret I., Novati P., *Krylov subspace methods for functions of fractional differential operators*. Submitted.

Comunicazioni Scientifiche

Nell'ambito delle attività riconducibili al progetto di ricerca sono state presentate le seguenti comunicazioni scientifiche:

- Aceto L., *Rational approximation to the fractional Laplacian operator in anomalous diffusion problems*. SIMAI 2016, Milano, 13-16/09/2016.
- Aceto L., Novati P., *Rational approximation to the fractional Laplacian*, International Conference on Fractional Differentiation and its Applications (ICFDA '16), Novi Sad (Serbia), July 18-20, 2016.
- Aceto L., *Metodi numerici per problemi di diffusione anomala*. Convegno GNCS, Montecatini Terme, 02-04/02/2016.
- Garrappa R., *On the Prabhakar derivative: theory, numerical treatment and applications*, Workshop on Operational methods in Fractional Dynamics, Crakow (Poland), November 7-9, 2016.
- Garrappa R., *Fractional Prabhakar derivative and applications in anomalous dielectrics: a numerical approach*, 8th Conference on Non-integer Order Calculus and its Applications (RRNR 2016), Zakopane (Poland), September 20-21, 2016.
- Garrappa R., *Numerical solution of Maxwell's equations in fractional dielectrics of Havriliak-Negami type?*, International Conference on Fractional Differentiation and its Applications (ICFDA '16), Novi Sad (Serbia), July 18-20, 2016.
- Garrappa R., *On the Prabhakar derivative: applications, theory and numerics*, Giornata sul "Fractional Calculus and its Applications", Roma (Italy), January 27, 2017.
- Garrappa R., Messina E., Vecchio A.: *Effect of perturbation in the numerical solution of fractional differential equations*, 9th Workshop SDS2016 STRUCTURAL DYNAMICAL SYSTEMS: Computational Aspects, Capitolo, Monopoli, Italy, June 14-17, 2016.
- Garrappa R., Messina E., Vecchio A.: *Stability of numerical solutions to Abel-Volterra integral equations of the second kind*, THE XIII BIENNIAL CONGRESS OF SIMAI 13-16 SEPTEMBER 2016 MILAN, ITALY.
- Garrappa R., Popolizio M., Moret I., *On the numerical solution of the time-fractional Schrödinger equation*, 9th Workshop SDS2016 STRUCTURAL DYNAMICAL SYSTEMS: Computational Aspects, Capitolo, Monopoli, Italy, June 14-17, 2016.

- Garrappa R., Popolizio M., Moret I., *On the numerical solution of time-fractional Schrödinger*, International Conference on Fractional Differentiation and its Applications (ICFDA '16), Novi Sad (Serbia), July 18-20, 2016.
- Popolizio M., *On the computation of Mittag-Leffler functions with matrix arguments*, Giornata sul "Fractional Calculus and its Applications", Roma (Italy), January 27, 2017.

Per il dettaglio delle missioni direttamente effettuate (in parte o totalmente) sui fondi del presente progetto GNCS si rimanda all'apposito rendiconto economico

Bari, 1 Giugno 2017

Roberto Garrappa

