

# Affine combination of splitting type integrators implemented with parallel computing methods

Grupo 11 | 93.75 - Métodos Numéricos Avanzados | Noviembre de 2019

Nagelberg Martin (56698) [mnagelberg@itba.edu.ar](mailto:mnagelberg@itba.edu.ar), Gonzalez Lautaro (54315) [lagonzal@itba.edu.ar](mailto:lagonzal@itba.edu.ar)

Grabina Martin (57360) [mgrabina@itba.edu.ar](mailto:mgrabina@itba.edu.ar), Grethe Juan (57370) [jgrethe@itba.edu.ar](mailto:jgrethe@itba.edu.ar)

## I. Resumen

En este trabajo práctico se presentan los detalles de la implementación del *método afín simétrico* con el objetivo de resolver la ecuación de Korteweg–de Vries:

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} + \mu \frac{\partial^3 v}{\partial x^3}$$

De esta forma, pudimos aprovechar las ventajas que nos ofrece el cómputo en paralelo y compararlas con el cómputo en serie, obteniendo resultados empíricos que ratifican los conceptos teóricos mencionados en [3].

## II. Palabras clave

Ecuaciones diferenciales parciales, Spectral Splitting Methods (SSM), Fourier Transform, Ley de Amdahl, Korteweg–de Vries (KdV), Parallel computing.

## III. Introducción

Habitualmente para establecer modelos en la ciencia y la tecnología se utilizan ecuaciones diferenciales en derivadas parciales semilineales, pues proveen una descripción más abarcadora y detallada que sus contrapartes ordinarias ya que vinculan a las magnitudes con sus tasas de variación respecto de direcciones parciales específicas, pero el problema que conlleva es que la matemática en muy pocos casos puede obtener respuestas exactas siendo casi la única alternativa la que provee la informática.

Un modo eficiente y preciso de resolver este tipo de ecuaciones resultan ser los Spectral Splitting Methods (SSM) que consisten en operar la ecuación a partir de las transformadas discretas de Fourier [1], separándola en dos subproblemas correspondientes a la parte lineal y a la no lineal. De este modo se obtiene una aproximación

computacional de la solución aplicando sucesivamente ambos [2].

Cabe destacar que las ondas viajeras como solución a la ecuación KdV son de interés desde hace más de 150 años y actualmente sigue siendo temática de estudio.

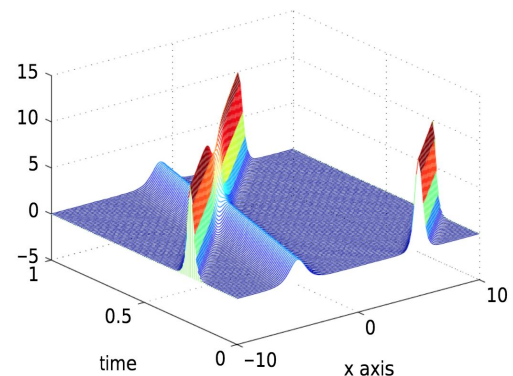


Fig. 1 dos solitones en tiempo final

## IV. Metodología

La base del código implementado fue tomada del contenido de la cátedra; en particular, de un archivo provisto por A. Álvarez donde se resuelve la ecuación pertinente mediante Lie-Trotter. A partir de éste, y utilizando como referencia el artículo científico [3], se procedió a implementar el *método afín simétrico* capaz de parametrizar distintos órdenes de resolución y con la posibilidad de realizar procesamiento en paralelo por su característica algebraica. Finalmente, se procedió a aplicar las técnicas de paralización requeridas para el trabajo, utilizando la última versión del estándar MPI.

Una vez terminado el algoritmo, procedimos a realizar comparaciones. Para esto, tuvimos que estimar errores locales a partir de la diferencia entre la aproximación obtenida con un orden y su consecutivo.

El desarrollo demandó dos semanas y fue hecho en MATLAB y utilizando versionado GIT.

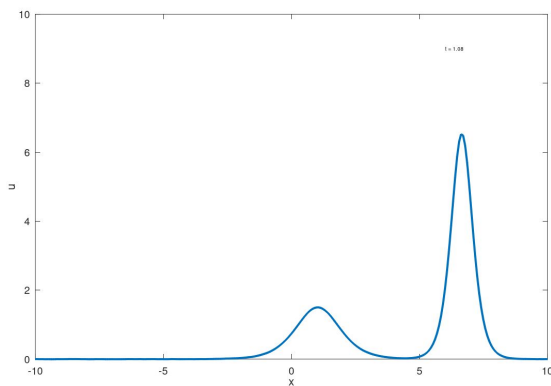


Fig. 2 doble soliton en t=1.08

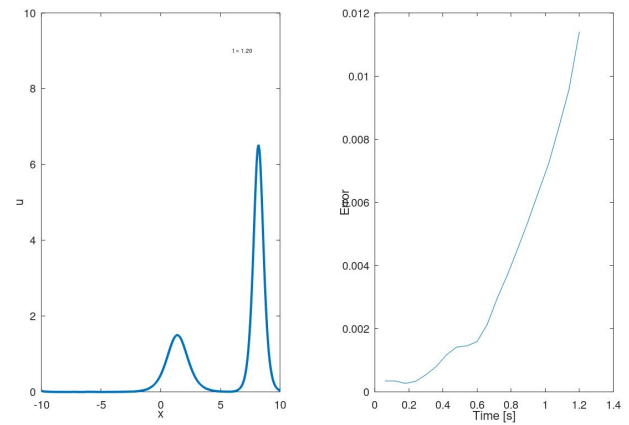


Fig. 4 Dif punto a punto entre orden 4 y 6

## V. Resultados

En base a las pruebas realizadas, denotadas previamente en la sección Metodología, se obtuvieron los siguientes resultados:

### Exactitud y su relación con los órdenes

A partir del cálculo de los errores locales realizado con la técnica mencionada en la sección de metodología, podemos ver que a medida que incrementamos el orden, no solo el procesamiento es mayor, sino que el error es menor. Es decir, si tomamos la norma infinito de la diferencia entre la función en orden 2 y la función en orden 6 y posteriormente entre orden 4 y orden 6, podemos ver que la diferencia es bastante menor en el segundo caso.

$$Error = \left| (\phi_{S,q} - \phi_{S,q+1}) \right|_{\infty}$$

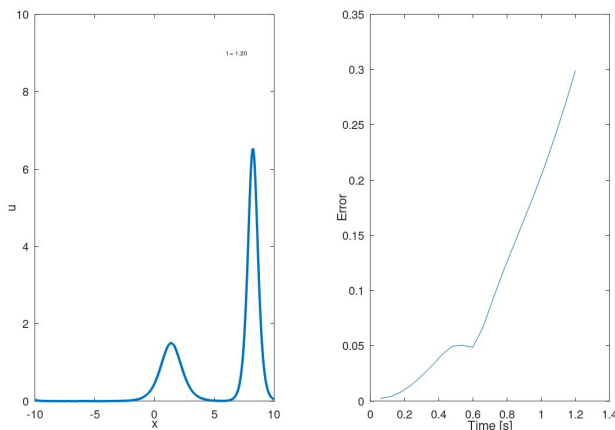


Fig. 3. Dif. punto a punto entre orden 2 y 6

### Exactitud y su relación con el paso utilizado

Al realizar la misma prueba de error, pero con dos pasos distintos (el brindado por la cátedra y uno 5 veces más chico) en un mismo orden (4, en este caso) y comparándolo con un orden mayor, pudimos notar que el error decrece a menor paso. A pesar de esto también observamos que el tiempo de procesamiento aumentó considerablemente.

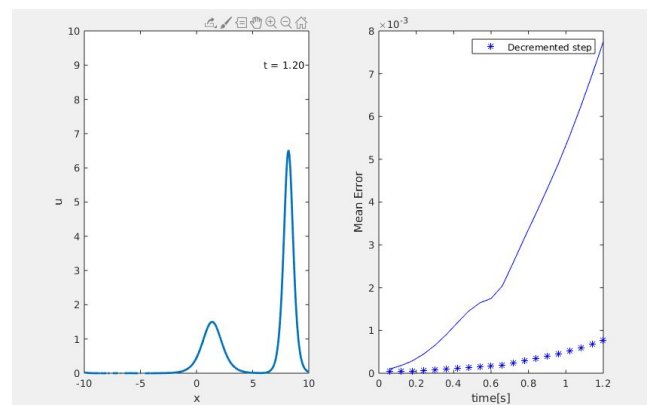


Fig. 5 Dif utilizando paso de la cátedra (línea continua) y paso 5 veces menor (línea con asteriscos) en orden 4

### Comparación con otros métodos

Nuevamente, a partir del cálculo de los errores locales, comparamos los resultados entre el método implementado en orden 2 y el método de Strang (que es de segundo orden).

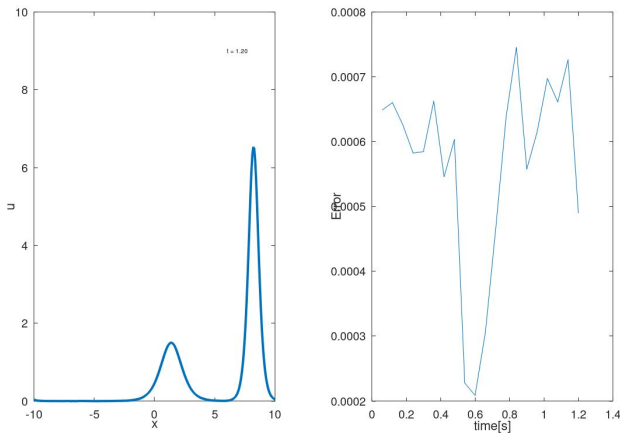


Fig. 6 Dif punto a punto entre afin orden 2 y Strang

Como se puede observar, la diferencia es mínima. La ventaja extra del algoritmo afin es que ni Strang ni ningún otro método de composición son paralelizables. Individualmente cada integrador ya sea lineal o no lineal podría paralizarse, pero no la estrategia.

### Speedup según el orden

Una de las cosas interesantes de este algoritmo es su capacidad de paralelizar parte del procesamiento (las composiciones en este caso). Sabemos por la Ley de Amdahl que el incremento de velocidad del algoritmo frente a esta capacidad de paralelización, estará limitada por la fracción secuencial del mismo.

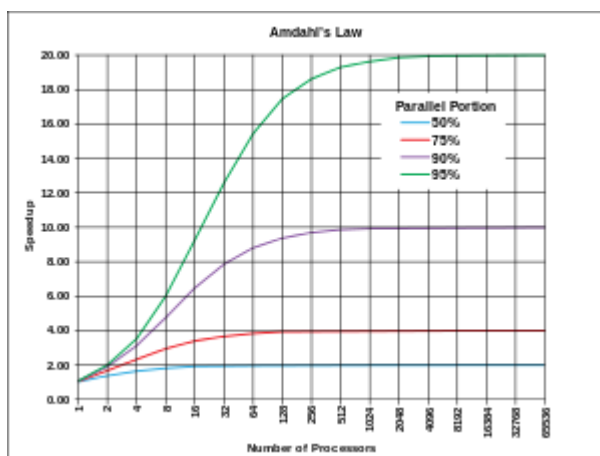


Fig. 7 Ley de Amdahl

Podemos entonces definir el Speedup en este caso particular, como la mejora que tendrá el procesamiento del algoritmo al agregar el cómputo paralelo para la parte de las composiciones.

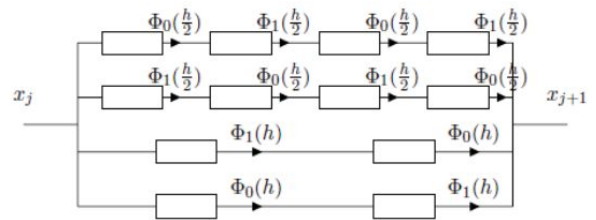


Fig. 8 Ejemplo de paralelización en orden 4

Al realizar la distintas pruebas con una cantidad fija de procesadores (4 particularmente), pudimos notar que, al menos hasta el orden 6 que es el máximo que pudimos terminar de ejecutar, no hubo una mejora de performance, al contrario, el tiempo para terminar fue superior. De todas formas, estimamos que el comportamiento esperado es aquel en el cual S baja al comienzo, pero luego, a partir de un determinado punto (orden k), comienza a subir, apreciándose así la mejora obtenida por el cómputo en paralelo, hasta estancarse por lo mencionado en la Ley de Amdahl.

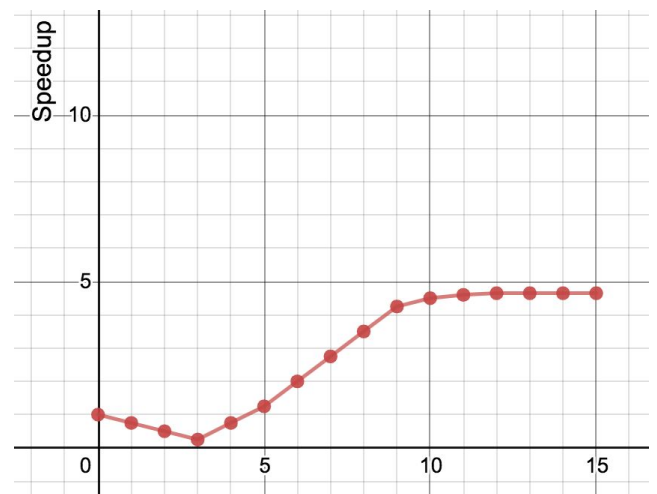


Fig. 9 Comportamiento esperado del Speedup

## Conclusiones

De los resultados obtenidos en el punto anterior, podemos concluir entonces que:

- 1) A medida que incrementamos el orden de ejecución del algoritmo, la precisión aumenta al igual que el tiempo de procesamiento.
- 2) Con un step menor se obtiene un error mas chico pero el tiempo de procesamiento incrementa.
- 3) La posibilidad que nos da el algoritmo de realizar cálculos en paralelo brinda una mejora importante para órdenes elevados, pues para órdenes bajos empeora.
- 4) Idealmente habría que correr el método en cuestión en un cluster para poder apreciar las mejoras de performance de una mejor manera.
- 5) De igual forma en la que se comporta gran cantidad de los recursos informáticos, **no siempre “más”, es mejor**. Hay un punto en el cual ya no conviene paralelizar (Ley de Amdahl).

## Bibliografía

1. Cooley J. W. Tukey J. W. An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series. Math. Comput., 19:297–301, 1965.
2. Trotter H.F. On the product of semigroups of operators. 10:545–551, 1959. Proc. Amer. Math. Soc.
3. Alvarez A. Rial D. Affine combination of splitting type integrators implemented with parallel computing methods. International Journal of Mathematical, Computational, Physical, Electrical and Computer Engineering, 9(2):146–149, 2015.
4. Merson R. H. An operational method for the study of integration processes. Proc. Symp. Data Processing , Weapons Res. Establ. Salisbury, I:110–125, 1957.
5. Trefethen L.N. Kassam A.K. Fourt order time stepping for stiff PDE's., volume 26 No 4 pages: 1214-1233. SIAM J. SCI Comput., 2005.
6. Neri F. Lie algebras and canonical integration. Department of Physics report, University of Maryland, pages 1489–1500, 1987.
7. Ruth R. D. A canonical integration technique. IEEE Transactions on Nuclear Science, NS 30(4):2669–2671, 1983.
8. Strang G. Accurate partial difference methods ii: Non-Linear problems. Numerische Math., 6:37–46, 1963.
9. Farrés A. Laskar J. Blanes S. Casas F Makazaga J. Murua A. High precision symplectic integrators for the Solar System. Springer Verlag Netherlands ISSN 0923-2958 DOI <https://doi.org/10.1007/s10569-013-9479-6>, 2013.