

Antonio Suárez Sarmiento, Gustavo Montero García y Manuel Galán Moreno

ESTUDIO DEL COMPORTAMIENTO DE DIFERENTES
PRECONDICIONADORES PARA DOBLE GRADIENTE CONJUGADO EN
PROBLEMAS DE CONVECCIÓN-DIFUSIÓN

1.- INTRODUCCION

En la aplicación del M.E.F. a problemas de contorno, resultan grandes sistemas de ecuaciones lineales cuyas matrices son "sparses" y con frecuencia mal condicionadas. Uno de los métodos más utilizados para resolverlos, cuando la matriz correspondiente es de parte simétrica definida positiva, es el Doble Gradiente Conjugado (BCG).

Se propone en este trabajo plantear una variante de este método que nos permita utilizar preconditionadores no simétricos con el menor coste computacional posible.

2.- DOBLE GRADIENTE CONJUGADO CON PRECONDICIONADOR NO SIMETRICO

Sea el sistema $Ax = b_1$, donde A es una matriz no singular, de parte simétrica definida positiva, y M cierta matriz de preconditionamiento, no singular, factorizable de la forma $M = LU$.

Multiplicando por M^{-1} , resulta el sistema preconditionado:

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b_1 \quad (2.1)$$

$$U^{-1}L^{-1}Ax = U^{-1}L^{-1}b_1 \quad (2.2)$$

$$L^{-1}AU^{-1}Ux = L^{-1}b_1 \quad (2.3)$$

Llamando

$$L^{-1}AU^{-1} = \underline{A} \quad Ux = \underline{x} \quad L^{-1}b_1 = \underline{b}_1$$

se obtiene,

$$\underline{A}x = \underline{b}_1 \quad (2.4)$$

Aplicando el BCG, construimos el sistema simétrico,

$$\begin{pmatrix} 0 & \underline{A} \\ \underline{A}^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{b}_1 \\ \underline{b}_2 \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

equivalente al doble sistema

$$\begin{aligned} \underline{A}x &= \underline{b}_1 \\ \underline{A}^T y &= \underline{b}_2 \end{aligned} \quad (2.6)$$

Relaciones de los vectores y parámetros asociados a la resolución del sistema preconditionado con los correspondientes del sistema inicial:

Vectores residuos,

$$\underline{r}_k = \underline{b}_1 - \underline{A}x_k = L^{-1}r_k \quad \tilde{r}_k = \underline{b}_2 - \underline{A}^T y_k = U^{-T} \tilde{r}_k \quad (2.7)$$

Direcciones conjugadas,

$$\underline{d}_k^T \underline{A} d_k = 0 \quad \tilde{d}_k^T \underline{A} d_k = 0 \quad (2.8)$$

Comparando resulta:

$$\underline{d}_k = L^T \tilde{d}_k \quad \underline{d}_k = U d_k \quad (2.9)$$

Expresiones para el cálculo de las sucesivas iteraciones:

$$\underline{\rho}_k = \frac{(\tilde{r}_k)^T \underline{r}_k}{(\underline{d}_k)^T \underline{A} d_k} = \frac{(\tilde{r}_k)^T M^{-1} r_k}{(\tilde{d}_k)^T \underline{A} d_k} \quad \underline{\alpha}_k = \frac{(\tilde{r}_{k+1})^T \underline{r}_{k+1}}{(\tilde{r}_k)^T \underline{r}_k} = \frac{(\tilde{r}_{k+1})^T M^{-1} r_{k+1}}{(\tilde{r}_k)^T M^{-1} r_k} \quad (2.10)$$

$$d_{k+1} = M^{-1} r_{k+1} + \underline{\alpha}_k d_k \quad \tilde{d}_{k+1} = M^{-T} \tilde{r}_{k+1} + \underline{\alpha}_k \tilde{d}_k \quad (2.11)$$

$$r_{k+1} = r_k - \underline{\rho}_k A d_k \qquad \tilde{r}_{k+1} = \tilde{r}_k - \underline{\rho}_k A^T \tilde{d}_k \qquad (2.12)$$

$$x_{k+1} = x_k + \underline{\rho}_k d_k \qquad (2.13)$$

ALGORITMO

Inicialización

Dado un cierto x_0 , $r_0 = b_1 - Ax_0$

$$\tilde{r}_0 = r_0 \qquad d_0 = M^{-1}r_0 \qquad \tilde{d}_0 = M^{-T}\tilde{r}_0$$

Solución corregida y residuos

$$\underline{\rho}_k = \frac{(\tilde{r}_k)^T M^{-1}r_k}{(\tilde{d}_k)^T A d_k} \qquad x_{k+1} = x_k + \underline{\rho}_k d_k$$

$$r_{k+1} = r_k - \underline{\rho}_k A d_k \qquad \tilde{r}_{k+1} = \tilde{r}_k - \underline{\rho}_k A^T \tilde{d}_k$$

Verificación de convergencia

$$\dot{\iota} \ \|r_{k+1}\| < \delta \|r_0\| \ ?$$

Direcciones conjugadas corregidas

$$\underline{\alpha}_k = \frac{(\tilde{r}_{k+1})^T M^{-1}r_{k+1}}{(\tilde{r}_k)^T M^{-1}r_k} \qquad d_{k+1} = M^{-1}r_{k+1} + \underline{\alpha}_k d_k \qquad \tilde{d}_{k+1} = M^{-T}\tilde{r}_{k+1} + \underline{\alpha}_k \tilde{d}_k$$

3.- ASPECTOS COMPUTACIONALES

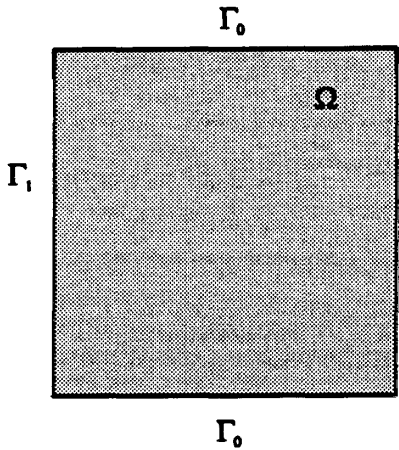
Almacenamos la matriz del sistema en forma compacta, disponiendo los elementos distintos de cero en una tabla, cuya primera columna está formada por los elementos de la diagonal, y señalando las posiciones respectivas de estos valores no nulos en otra tabla auxiliar. Como la posición del elemento diagonal es trivial, la primera columna de la tabla auxiliar es aprovechada para almacenar el número de elementos no nulos de cada fila.

Los resultados numéricos están referidos a un ordenador TITAN 3000 de KUBOTA PACIFIC, dotado de tres CPU, que nos ha permitido comparar el

comportamiento en compilación escalar, vectorial y vectorial-paralelo del algoritmo descrito para los diferentes preconditionadores estudiados..

4.- RESULTADOS NUMÉRICOS

Se ha estudiado el problema de convección-difusión de la distribución de temperaturas en régimen estacionario en un fluido sometido a un campo circular de velocidades:



$$\bar{v} \cdot \bar{\nabla} u - \bar{\nabla} \cdot (k \bar{\nabla} u) = 0 \text{ en } \Omega \quad (4.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial n} &= 0 \text{ en } \Gamma_0 \\ u &= 1 \text{ en } \Gamma_1 \\ u &= 0 \text{ en } \Gamma_2 \end{aligned} \quad (4.2)$$

donde el campo de velocidades viene dado por las ecuaciones:

$$v_1 = C_v \left(y - \frac{1}{2}\right)(x - x^2) \quad v_2 = C_v \left(\frac{1}{2} - x\right)(y - y^2) \quad (4.3)$$

siendo el coeficiente de amplificación $C_v = 10.000$.

Se ha resuelto el problema con cuatro mallas diferentes que han dado lugar a sistemas de 255, 1023, 4095 y 16333 incógnitas respectivamente. En las gráficas se presentan los resultados obtenidos con las versiones escalar, vectorial y vectorial/paralelo del BGC preconditionado ($\delta = 10^{-9}$). SP representa el algoritmo sin preconditionar ($M = I$), PD con preconditionador diagonal ($M = \text{diag}[A]$), ILU con Factorización Incompleta LU, y SSOR con dicho preconditionador.

Para sistemas de orden relativamente pequeño (p.e. 255), los resultados muestran un mejor comportamiento del SSOR e ILU frente al Diagonal, aunque en coste computacional son similares. A medida que el orden crece (p.e. 1023) se observa una mejora computacional considerable cuando se utiliza preconditionamiento, así como una disminución sustancial del tiempo necesario cuando se utiliza la paralelización. Para los casos estudiados de 4095 y 16333

Figura 1. Tiempo de CPU (255 ecuac.)

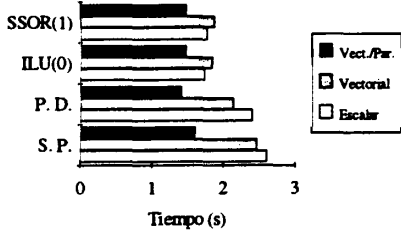


Figura 2. Iteraciones (255 ecuac.)

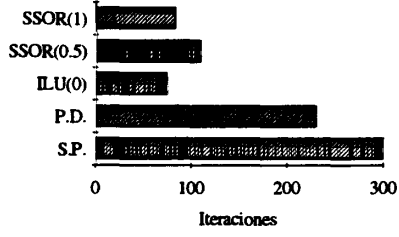


Figura 3. Tiempo de CPU (1023 ecuac.)

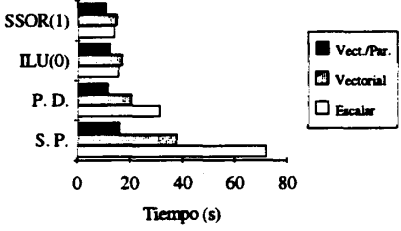


Figura 4. Iteraciones (1023 ecuac.)

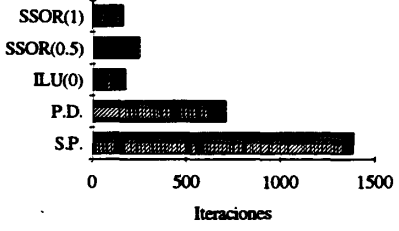


Figura 5. Tiempo de CPU (4095 ecuac.)

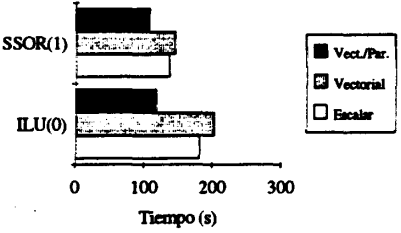


Figura 6. Iteraciones (4095 ecuac.)

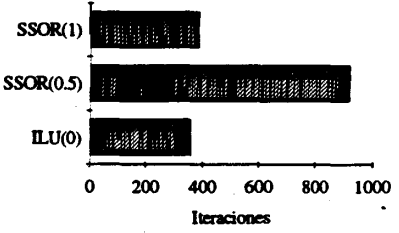


Figura 7. Tiempo de CPU (16333 ecuac.)

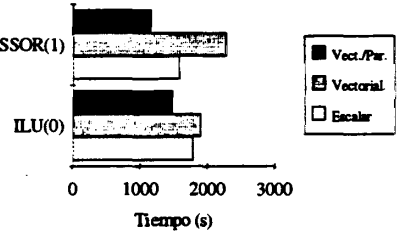
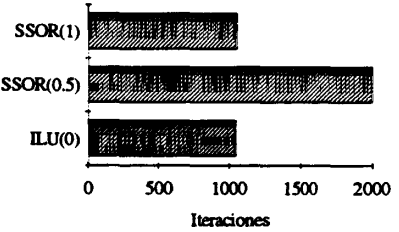


Figura 8. Iteraciones (16333 ecuac.)



ecuaciones no se obtiene convergencia sin preconditionar ni con el preconditionador Diagonal. Los resultados obtenidos para el SSOR e ILU son similares, con ligera ventaja para el segundo en cuanto a iteraciones, pero con mayor coste computacional frente al SSOR. Los mejores resultados se dan en todos los casos con la versión vectorial/paralela, siendo los resultados de la vectorial no satisfactorios para el SSOR e ILU.

5.- CONCLUSIONES

Se presentan en este trabajo algunos resultados obtenidos con BCG preconditionado aplicado a sistemas que resultan de la discretización por FEM de problemas de convección-difusión. Se observan mejores resultados para el SSOR y el ILU frente a las versiones sin preconditionar y con preconditionador Diagonal, sobretodo, si utilizamos compilación vectorial/paralela en sistemas de orden elevado. Por otro lado, en la construcción de los preconditionadores SSOR e ILU(0), se utiliza el mismo tipo de almacenamiento compacto que para la matriz del sistema, con la ventaja computacional que esto conlleva.

REFERENCIAS

- Axelsson, O. [1980]: Conjugate gradient type methods for unsymmetric and inconsistent systems of linear equations, *Linear Algebra and its applications*, **29**.
- Cook, R. [1991]: A reformulation of preconditioned conjugate gradients suitable for a local memory multiprocessor, *Proceedings of IMACS international symp. on iterative methods in linear algebra*, Bruselas.
- A.Jennings, G.M.Malik, 'The solution of sparse linear equations by conjugate gradient method', *Int. Jour. Num. Meth. Eng.*, Vol 12, 141-158,(1978).
- Lascaux, P.; Théodor, R. [1987]: *Analyse numérique matricielle appliquée a l'art de l'ingénieur*, Ed.Masson S.A., París.
- Montero, G.; Winter, G.; Almeida, P.; Cuesta, P. [1991]: Resolución de sistemas no simétricos con doble gradiente conjugado preconditionado en procesos adaptativos, *XII CEDYA, II Congreso Matemática Aplicada*, Oviedo.
- Tsun-zee, M. [1993]: Modified Lanczos method for solving large sparse linear systems, *Communicat.in Numerical methods in engineering*, **9**, 67-79.

A. Suárez Sarmiento, G. Montero García, M. Galán Moreno
 C.E.A.N.I.
 Universidad de Las Palmas de Gran Canaria
 Edificio Departamental de Ingenierías I
 Campus Universitario de Tafira, Las Palmas de Gran Canaria, ESPAÑA