

VERSIÓN MODIFICADA DE LOS MÉTODOS TIPO QMR

M.D. García*, E. Flórez, A. Suárez y G. Montero

* Instituto Universitario de Sistemas Inteligentes y Aplicaciones Numéricas en Ingeniería,
Universidad de Las Palmas de Gran Canaria.
Edificio Central del Parque Científico-Tecnológico. Campus Universitario de Tafira.
35017-Las Palmas de Gran Canaria.
e-mail: lgarcia@dma.ulpgc.es, web <http://www.iusiani.ulpgc.es>

Palabras clave: Sistemas lineales no simétricos, matrices sparse, métodos de Krylov, métodos de cuasi-mínimo residuo, reordenación, preconditionamiento.

Resumen. *Los métodos de cuasi-mínimo residuo QMR [6], TFQMR [5] y QMRCGSTAB [1], son métodos de biortogonalización para la resolución de sistemas de ecuaciones lineales no simétricos que mejoran el comportamiento irregular de los algoritmos BiCG, CGS y BiCGSTAB [9], respectivamente.*

En este trabajo, el problema de cuasi-minimización es resuelto de forma análoga a la desarrollada por Galán y otros [7], para la minimización en el método GMRES. Consiste en la resolución directa del problema de mínimos cuadrados que plantean estos métodos, haciendo una factorización LU en lugar de la tradicional QR. En la convergencia de las nuevas versiones, no sólo reduce el número de iteraciones, sino que logran converger en algunos casos en que el algoritmo original no lo hace.

Este trabajo también estudia el efecto de la reordenación [3] y el preconditionamiento [10] en la convergencia de los algoritmos propuestos y se presentan algunos experimentos numéricos que permiten comparar los resultados obtenidos con los algoritmos clásicos y con los modificados.

donde la primera fila de $\overline{\mathbf{T}}_k$ es un vector \mathbf{d}_k^t , de dimension k y el resto forma una matriz triangular superior \mathbf{U}_k ,

Esto es,

$$\mathbf{d}_k = (\alpha_1 \quad \beta_2 \quad 0 \quad . \quad . \quad . \quad 0)$$

$$\mathbf{U}_k = \begin{pmatrix} \delta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & . & . & . & . \\ & \delta_3 & \alpha_3 & \beta_4 & . & . & . \\ & . & . & . & . & . & . \\ & . & . & . & \delta_{k-1} & \alpha_{k-1} & \beta_k \\ (0) & . & . & . & . & \delta_k & \alpha_k \\ & . & . & . & . & . & \delta_{k+1} \end{pmatrix}$$

donde,

$$\{\mathbf{d}_k\}_i = d_i = \{\overline{\mathbf{T}}\}_{1i} \quad i = 1, \dots, k \quad (7)$$

$$\{\mathbf{U}_k\}_{ij} = u_{ij} = \begin{cases} \{\overline{\mathbf{T}}\}_{i+1,j} & 1 \leq i \leq j \leq k \\ 0 & \text{en el resto} \end{cases} \quad (8)$$

lo que sugiere la descomposición del producto $\overline{\mathbf{T}}_k^T \overline{\mathbf{T}}_k$ que aparece en la ecuación (6) como una suma, de la forma,

$$\{\overline{\mathbf{T}}_k^T \overline{\mathbf{T}}_k\}_{ij} = d_i d_j + \sum_{m=1}^k u_{mi} u_{mj} \quad (9)$$

La ecuación (6), teniendo en cuenta esta descomposición de $\overline{\mathbf{T}}_k^T \overline{\mathbf{T}}_k$, se puede escribir como,

$$(\mathbf{d}_k \mathbf{d}_k^T + \mathbf{U}_k^T \mathbf{U}_k) \mathbf{u} = \overline{\mathbf{T}}_k^T \gamma \mathbf{e}_1 \quad (10)$$

Y teniendo en cuenta que $\overline{\mathbf{T}}_k^T \mathbf{e}_1 = \mathbf{d}_k$, obtenemos la siguiente expresión,

$$(\mathbf{d}_k \mathbf{d}_k^T + \mathbf{U}_k^T \mathbf{U}_k) \mathbf{u} = \gamma \mathbf{d}_k \quad (11)$$

Si hacemos uso de las propiedades asociativa y distributiva de las matrices, entonces la ecuación anterior quedará,

$$\mathbf{U}_k^T \mathbf{U}_k \mathbf{u} = \mathbf{d}_k (\gamma - \langle \mathbf{d}_k, \mathbf{u} \rangle) \quad (12)$$

y haciendo,

$$\lambda_i = \gamma - \langle \mathbf{d}_k, \mathbf{u} \rangle \quad (13)$$

$$\mathbf{u} = \lambda_i \mathbf{p}_k \quad (14)$$

obtenemos,

$$\mathbf{U}_k^T \mathbf{U}_k \mathbf{p}_k = \mathbf{d}_k \quad (15)$$

que es un doble sistema triangular, ya que \mathbf{U}_k^T y \mathbf{U}_k son matrices triangulares y sólo requiere dos procesos de sustitución, uno por descenso y otro por remonte, para su resolución.

Después de resolver (15), calculamos λ_i para obtener finalmente \mathbf{u} a partir de la ecuación (14),

$$\lambda_i = \gamma - \langle \mathbf{d}_k, \mathbf{u} \rangle = \gamma - \lambda_i \langle \mathbf{d}_k, \mathbf{p}_k \rangle \quad (16)$$

y de este modo,

$$\lambda_i = \frac{\gamma}{1 + \langle \mathbf{d}_k, \mathbf{p}_k \rangle} \quad (17)$$

Nótese que $1 + \langle \mathbf{d}_k, \mathbf{p}_k \rangle \neq 0$, ya que,

$$\langle \mathbf{d}_k, \mathbf{p}_k \rangle = \langle \mathbf{U}_k^T \mathbf{U}_k \mathbf{p}_k, \mathbf{p}_k \rangle = \|\mathbf{U}_k \mathbf{p}_k\|_2^2 \geq 0 \quad (18)$$

y por tanto λ_i nunca degenera.

En resumen, el método propuesto requiere:

1. Dados \mathbf{d}_k y \mathbf{U}_k definidos en (7) y (8), resolver en doble sistema triangular dado en (15) haciendo,

$$\mathbf{U}_k^T \bar{\mathbf{p}}_k = \mathbf{d}_k \quad (19)$$

$$\mathbf{U}_k \mathbf{p}_k = \bar{\mathbf{p}}_k \quad (20)$$

2. Calcular λ_i en la expresión (17).

3. Obtener \mathbf{u} resolviendo la ecuación (14)

El vector residuo cuya norma viene definida en (3) se puede obtener de,

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{V}_{k+1} \hat{\mathbf{r}}_i \quad (21)$$

siendo $\hat{\mathbf{r}}_i$ el $(k+1)$ -vector,

$$\hat{\mathbf{r}}_i = \gamma \mathbf{e}_1 - \bar{\mathbf{T}}_k \mathbf{u} \quad (22)$$

y sus componentes se pueden calcular de la siguiente forma,

$$\{\hat{\mathbf{r}}_i\}_j = \begin{cases} \lambda_i & \text{if } j = 1 \\ -\lambda_i \bar{\mathbf{p}}_k & \text{if } j = 2, \dots, k+1 \end{cases} \quad (23)$$

Ya que de la partición de $\bar{\mathbf{T}}_k$, la primera componente del $(k+1)$ -vector $(\bar{\mathbf{T}}_k \mathbf{u})$ es $\langle \mathbf{d}_k, \mathbf{u} \rangle$, y el resto de las componentes vienen dadas por el k -vector $(\mathbf{U}_k \mathbf{u})$. De este modo, la primera componente de $\hat{\mathbf{r}}_i$ es λ_i , y las otras,

$$-\mathbf{U}_k \mathbf{u} = -\lambda_i \mathbf{U}_k \mathbf{p}_k = -\lambda_i \bar{\mathbf{p}}_k \quad (24)$$

donde $\bar{\mathbf{p}}_k$ se puede conservar en la resolución del primer sistema triangular dado en (19).

Téngase en cuenta que ahora los residuos no son equivalentes (como ocurría en el GMRES), ya que los vectores \mathbf{v}_i no son ortonormados. Es decir que,

$$\|\mathbf{r}_i\|_2 \neq \|\hat{\mathbf{r}}_i\|_2 \quad (25)$$

La aplicación de la resolución directa del problema de cuasi-minimización planteado en el QMR, da como resultado el siguiente algoritmo que se presenta preconditionado por la izquierda.

ALGORITMO MQMR PRECONDICIONADOAproximación inicial \mathbf{x}_0 . $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$; $\beta_1 = \delta_1 = 0$; $\mathbf{v}_0 = \mathbf{w}_0 = \mathbf{0}$;Resolver $\mathbf{M}\mathbf{z}_0 = \mathbf{r}_0$ $\gamma = \|\mathbf{z}_0\|$; $\mathbf{v}_1 = \mathbf{w}_1 = \frac{1}{\gamma}\mathbf{z}_0$;Mientras $\frac{\gamma}{\sqrt{k+1}} \|\widehat{\mathbf{r}}_{k-1}\| / \|\mathbf{r}_0\| \geq \varepsilon$ ($k = 1, 2, 3, \dots$), hacer $\mathbf{A}\mathbf{v}_k = \mathbf{y}_k$;Resolver $\mathbf{M}\mathbf{s}_k = \mathbf{y}_k$;Resolver $\mathbf{M}^T\mathbf{f}_k = \mathbf{w}_k$; $\mathbf{A}^T\mathbf{f}_k = \mathbf{t}_k$; $\alpha_k = \langle \mathbf{s}_k, \mathbf{w}_k \rangle$; $\widehat{\mathbf{v}}_{k+1} = \mathbf{s}_k - \alpha_k\mathbf{v}_k - \beta_k\mathbf{v}_{k-1}$; $\widehat{\mathbf{w}}_{k+1} = \mathbf{t}_k - \alpha_k\mathbf{w}_k - \delta_k\mathbf{w}_{k-1}$; $\delta_{k+1} = |\langle \widehat{\mathbf{v}}_{k+1}, \widehat{\mathbf{w}}_{k+1} \rangle|^{1/2}$; $\beta_{k+1} = \langle \widehat{\mathbf{v}}_{k+1}, \widehat{\mathbf{w}}_{k+1} \rangle / \delta_{k+1}$; $\mathbf{v}_{k+1} = \widehat{\mathbf{v}}_{k+1} / \delta_{k+1}$; $\mathbf{w}_{k+1} = \widehat{\mathbf{w}}_{k+1} / \beta_{k+1}$;Resolver $\mathbf{U}_k^T \bar{\mathbf{p}} = \mathbf{d}_k$ y $\mathbf{U}_k \mathbf{p} = \bar{\mathbf{p}}$;

$$\text{donde } \begin{cases} \{\mathbf{d}_k\}_m = \{\overline{\mathbf{T}}\}_{1m} \\ \{\mathbf{U}_k\}_{lm} = \{\overline{\mathbf{T}}\}_{l+1m} \end{cases} \quad l, m = 1, \dots, k;$$

$$\lambda_k = \frac{\gamma}{1 + \langle \mathbf{d}_k, \mathbf{p} \rangle};$$

 $\mathbf{u}_k = \lambda_k \mathbf{p}$; $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_0 + \mathbf{V}_k \mathbf{u}_k$, con $\mathbf{V}_k = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k]$; $\mathbf{z}_k = \mathbf{V}_{k+1} \widehat{\mathbf{r}}_k$, con $\mathbf{V}_{k+1} = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_{k+1}]$; $\mathbf{r}_k = \mathbf{M}\mathbf{z}_k$;

$$\text{donde } \begin{cases} \{\widehat{\mathbf{r}}_k\}_1 = \lambda_k \\ \{\widehat{\mathbf{r}}_k\}_{l+1} = -\lambda_k \{\bar{\mathbf{p}}\}_l \end{cases} \quad l = 1, \dots, k;$$

Fin

Se debe tener en cuenta que el criterio de convergencia se formula ahora en función de $\widehat{\mathbf{r}}_k$, que representa el residuo calculado del QMR-modificado.

3. MÉTODO TFQMR-MODIFICADO

La aproximación obtenida con el TFQMR en un subespacio de Krylov de dimensión k , es de la forma,

$$\mathbf{x}_0 + \mathbf{Y}_k \mathbf{u}_k \tag{26}$$

donde $\mathbf{Y}_k = [\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_k]$, $\mathbf{y}_k = \mathbf{t}_{i-1}$ si $k = 2i - 1$ es impar, e $\mathbf{y}_k = \mathbf{q}_i$ si $k = 2i$ es par, y \mathbf{u}_k minimiza la norma $\|(\delta_1 \mathbf{e}_1 - \bar{\mathbf{T}}_k \mathbf{u})\|_2$, lo que representa un cuasi-mínimo de la norma del residuo (ver p.e. Saad [11]),

$$\|\mathbf{r}_k\|_2 = \|\mathbf{W}_{k+1} \Delta_{k+1}^{-1} (\delta_1 \mathbf{e}_1 - \Delta_{k+1} \bar{\mathbf{B}}_k \mathbf{u}_k)\|_2 \quad (27)$$

siendo,

$$\bar{\mathbf{T}}_k = \Delta_{k+1} \bar{\mathbf{B}}_k \quad (28)$$

Donde \mathbf{W}_{k+1} es la matrix que tiene por columnas los vectores,

$$\mathbf{W}_{k+1} = [\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \dots, \mathbf{w}_{k+1}] \quad (29)$$

Y Δ_{k+1} es una matrix diagonal, tal que \mathbf{W}_{k+1} queda escalada ($\delta_k = \|\mathbf{r}_i\|$, si $k = 2i + 1$ es impar, o $\delta_k = \sqrt{\|\mathbf{r}_{i-1}\| \|\mathbf{r}_i\|}$, si $k = 2i$ es par),

$$\Delta_{k+1} = \begin{pmatrix} \delta_1 & & & & \\ & \delta_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \delta_k & \\ & & & & \delta_{k+1} \end{pmatrix} \quad (30)$$

y $\bar{\mathbf{B}}_k$ es la matrix de orden $(k + 1) \times k$,

$$\bar{\mathbf{B}}_k = \begin{pmatrix} \alpha_0^{-1} & & & & & \\ -\alpha_0^{-1} & \alpha_0^{-1} & & & & \\ & -\alpha_0^{-1} & \alpha_1^{-1} & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \alpha_{(k-1)/2}^{-1} & \\ & & & & -\alpha_{(k-1)/2}^{-1} & \alpha_{(k-1)/2}^{-1} \\ & & & & & -\alpha_{(k-1)/2}^{-1} \end{pmatrix} \quad (31)$$

El algoritmo TFQMR-modificado que se ha obtenido y que se presenta preconditionado por la izquierda es,

ALGORITMO MTFQMR PRECONDICIONADO

Aproximación inicial \mathbf{x}_0 . $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$;

\mathbf{r}_0^* es arbitrario, tal que $\langle \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0^* \rangle \neq 0$;

Resolver $\mathbf{M}\mathbf{z}_0 = \mathbf{r}_0$;

$\mathbf{s}_0 = \mathbf{t}_0 = \mathbf{z}_0$;

$\mathbf{f}_0 = \mathbf{A}\mathbf{s}_0$;

Resolver $\mathbf{M}\mathbf{v}_0 = \mathbf{f}_0$;

$\rho_0 = \langle \mathbf{z}_0, \mathbf{r}_0^* \rangle$;

$\delta_1 = \|\mathbf{z}_0\|$;

Mientras $\sqrt{i+1} \|\hat{\mathbf{r}}_{i-1}\| / \|\mathbf{r}_0\| \geq \varepsilon$ ($i = 1, 2, 3, \dots$), hacer:

$\sigma_{i-1} = \langle \mathbf{v}_{i-1}, \mathbf{r}_0^* \rangle$;

$\alpha_{i-1} = \rho_{i-1}/\sigma_{i-1};$
 $\mathbf{q}_i = \mathbf{t}_{i-1} - \alpha_{i-1}\mathbf{v}_{i-1};$
 $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_{i-1} - \alpha_{i-1}\mathbf{A}(\mathbf{t}_{i-1} + \mathbf{q}_i);$
 Resolver $\mathbf{M}\mathbf{z}_i = \mathbf{r}_i;$
 Desde $k = 2i - 1, 2i$ hacer
 Si k es impar hacer
 $\delta_{k+1} = \sqrt{\|\mathbf{z}_{i-1}\| \|\mathbf{z}_i\|}; \mathbf{y}_k = \mathbf{t}_{i-1};$
 En caso contrario hacer
 $\delta_{k+1} = \|\mathbf{z}_i\|; \mathbf{y}_k = \mathbf{q}_i;$
 Fin
 Fin
 Resolver $\mathbf{U}_k^T \bar{\mathbf{p}} = \mathbf{d}_k$ y $\mathbf{U}_k \mathbf{p} = \bar{\mathbf{p}};$
 donde $\begin{cases} \{\mathbf{d}_k\}_m = \{\bar{\mathbf{T}}\}_{1m} \\ \{\mathbf{U}_k\}_{lm} = \{\bar{\mathbf{T}}\}_{l+1m} \end{cases} \quad l, m = 1, \dots, k;$
 $\lambda_k = \frac{\delta_1}{1 + \langle \mathbf{d}_k, \mathbf{p} \rangle};$
 $\mathbf{u}_k = \lambda_k \mathbf{p};$
 $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_0 + \mathbf{Y}_k \mathbf{u}_k;$ con $\mathbf{Y}_k = [\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_k];$
 $\begin{cases} \{\hat{\mathbf{r}}_i\}_1 = \lambda_{2i} \\ \{\hat{\mathbf{r}}_i\}_{l+1} = -\lambda_{2i} \{\bar{\mathbf{p}}\}_l \end{cases} \quad l = 1, \dots, 2i;$
 $\rho_i = \langle \mathbf{z}_i, \mathbf{r}_0^* \rangle;$
 $\beta_i = \rho_i/\rho_{i-1};$
 $\mathbf{t}_i = \mathbf{z}_i + \beta_i \mathbf{q}_i;$
 $\mathbf{s}_i = \mathbf{t}_i + \beta_i(\mathbf{q}_i + \beta_i \mathbf{s}_{i-1});$
 $\mathbf{f}_i = \mathbf{A}\mathbf{s}_i$
 Resolver $\mathbf{M}\mathbf{v}_i = \mathbf{f}_i;$
 Fin

Al igual que para el QMR-modificado, se debe tener en cuenta que el criterio de convergencia se formula ahora en función de $\hat{\mathbf{r}}_k$, que representa el residuo calculado del TFQMR-modificado.

4. MÉTODO QMRCGSTAB-MODIFICADO

El algoritmo QMRCGSTAB propuesto por Chan y otros [1], realiza dos cuasi-minimizaciones por iteración. Si definimos $\mathbf{Y}_k = [\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_k]$, siendo $\mathbf{y}_{2l-1} = \mathbf{g}_l$ para $l = 1, \dots, [k+1/2]$ ($[k+1/2]$ es la parte entera de $k+1/2$) y $\mathbf{y}_{2l} = \mathbf{s}_l$ para $l = 1, \dots, [k/2]$ ($[k/2]$ es la parte entera de $k/2$). La solución aproximada del sistema $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$, a partir del k -ésimo subespacio de Krylov, se construye como $\mathbf{x}_0 + \mathbf{Y}_k \mathbf{u}_k$, donde \mathbf{u}_k minimiza la norma $\|(\delta_1 \mathbf{e}_1 - \bar{\mathbf{T}}_k \mathbf{u})\|_2$, que es otra vez un cuasi-mínimo de la norma del residuo,

$$\|\mathbf{r}_k\|_2 = \|\mathbf{W}_{k+1} \Delta_{k+1}^{-1} (\delta_1 \mathbf{e}_1 - \Delta_{k+1} \bar{\mathbf{B}}_k \mathbf{u}_k)\|_2 \quad (32)$$

$$\begin{aligned}
& \text{Resolver } \mathbf{M}\mathbf{t}_i = \mathbf{h}_i; \\
& \omega_i = \frac{\langle \mathbf{t}_i, \mathbf{s}_i \rangle}{\langle \mathbf{t}_i, \mathbf{t}_i \rangle}; \\
& \mathbf{z}_i = \mathbf{s}_i - \omega_i \mathbf{t}_i; \\
& \delta_{2i+1} = \|\mathbf{z}_i\|; \mathbf{y}_{2i} = \mathbf{s}_i; \\
& \text{Resolver } \mathbf{U}_{2i}^t \bar{\mathbf{p}} = \mathbf{d}_{2i} \text{ y } \mathbf{U}_{2i} \mathbf{p} = \bar{\mathbf{p}}; \\
& \text{donde } \begin{cases} \{\mathbf{d}_{2i}\}_m = \{\bar{\mathbf{T}}\}_{1m} \\ \{\mathbf{U}_{2i}\}_{lm} = \{\bar{\mathbf{T}}\}_{l+1m} \end{cases} \quad l, m = 1, \dots, 2i; \\
& \lambda_{2i} = \frac{\delta_1}{1 + \langle \mathbf{d}_{2i}, \mathbf{p} \rangle}; \\
& \mathbf{u}_{2i} = \lambda_{2i} \mathbf{p}; \\
& \mathbf{x}_i = \mathbf{x}_0 + \mathbf{Y}_{2i} \mathbf{u}_{2i}; \text{ con } \mathbf{Y}_{2i} = [\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_{2i}]; \\
& \begin{cases} \{\hat{\mathbf{r}}_i\}_1 = \lambda_{2i} \\ \{\hat{\mathbf{r}}_i\}_{l+1} = -\lambda_{2i} \{\bar{\mathbf{p}}\}_l \end{cases} \quad l = 1, \dots, 2i; \\
& \text{Fin}
\end{aligned}$$

Igual que en los casos anteriores, el criterio de convergencia se formula ahora en función de $\hat{\mathbf{r}}_k$, que representa el residuo calculado del QMRCGSTAB-modificado.

5. EXPERIMENTOS NUMERICOS

5.1. Ejemplo 1: *ORSREGI*

Este problema, extraído de *Harwell-Boeing Sparse Matrix Collection* [2], corresponde a un modelo de reserva petrolífera en un acuífero con tres pozos. La matriz obtenida dió lugar a un sistema no simétrico de 2205 ecuaciones con 14133 entradas no nulas.

La figura 1 muestra las curvas de convergencia correspondientes a las distintas estrategias para los métodos BiCGSTAB, QMRCGSTAB y MQMRCGSTAB sin preconditionar. En la figura 2, son aplicadas las mismas estrategias preconditionadas con ILU(0). Podemos ver cómo se reduce considerablemente el número de iteraciones y se suavizan las curvas, especialmente para el algoritmo BiCGSTAB que ahora converge en menos iteraciones que el QMRCGSTAB. El número de iteraciones para el MQMRCGSTAB es menor que las del QMRCGSTAB y del BiCGSTAB.

5.2. Ejemplo 2: *WATTI*

Este ejemplo extraído de la *Harwell-Boeing Sparse Matrix Collection* [2], es una simulación de un problema de ingeniería del petróleo que generó un sistema de 1856 ecuaciones con 11360 entradas no nulas.

La figura 3 muestra las curvas de convergencia correspondiente a las distintas estrategias para los métodos de cuasi-mínimo residuo clásicos y modificados con preconditionador Aproximada

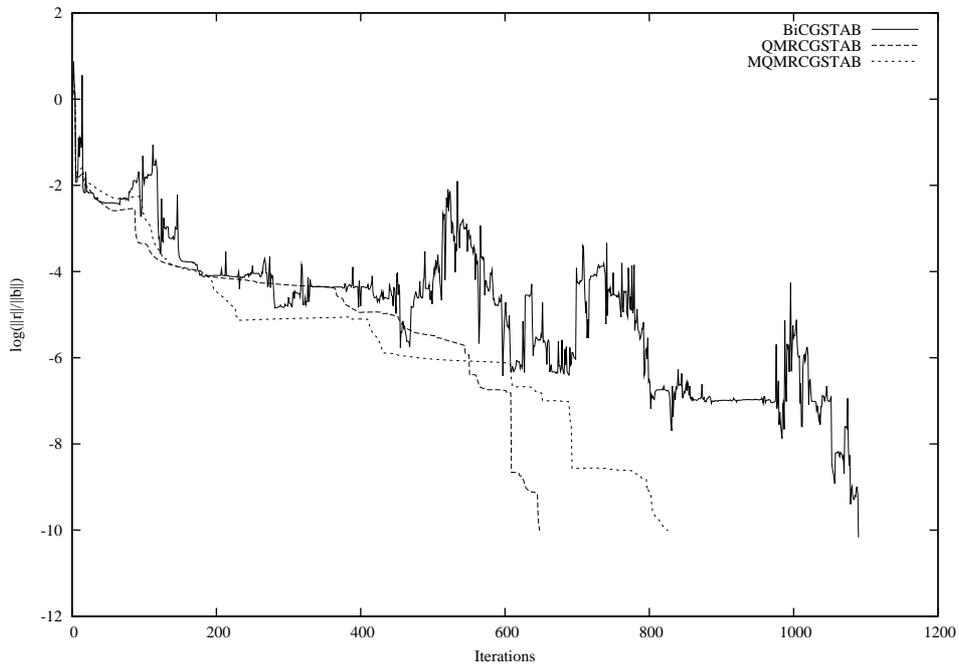


Figura 1. Convergencia de distintos métodos sin preconditionar para *ORSREG1*

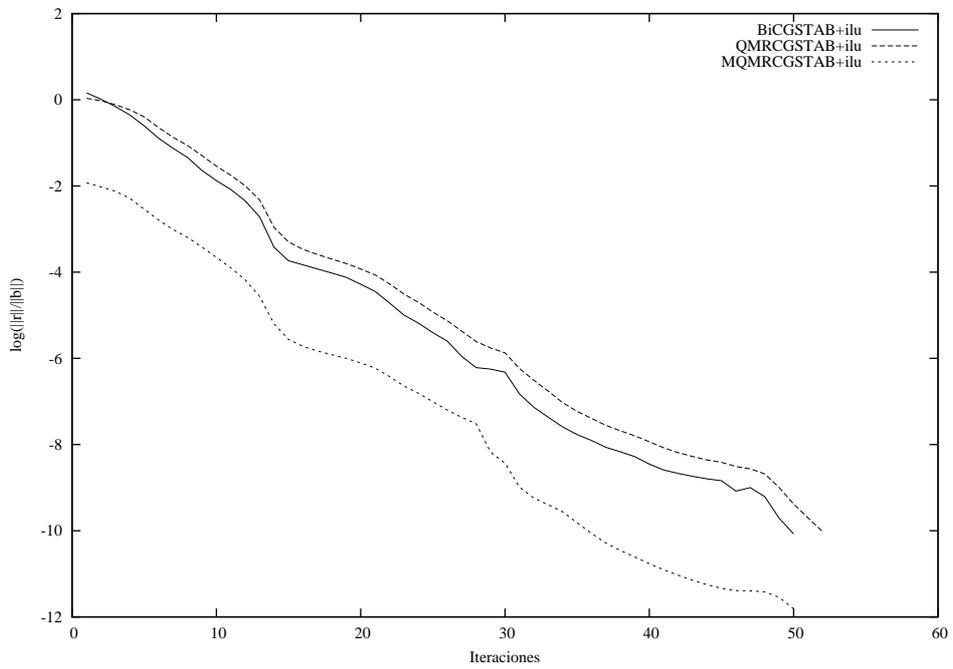


Figura 2. Convergencia de distintos métodos preconditionados con $ILU(0)$ para *ORSREG1*

inversa de estructura diagonal. Los Modificados QMR y TFQMR convergen en menos iteraciones que los correspondientes implementados clásicamente, aunque en el caso del Modificado QMRCGSTAB esto no ocurre.

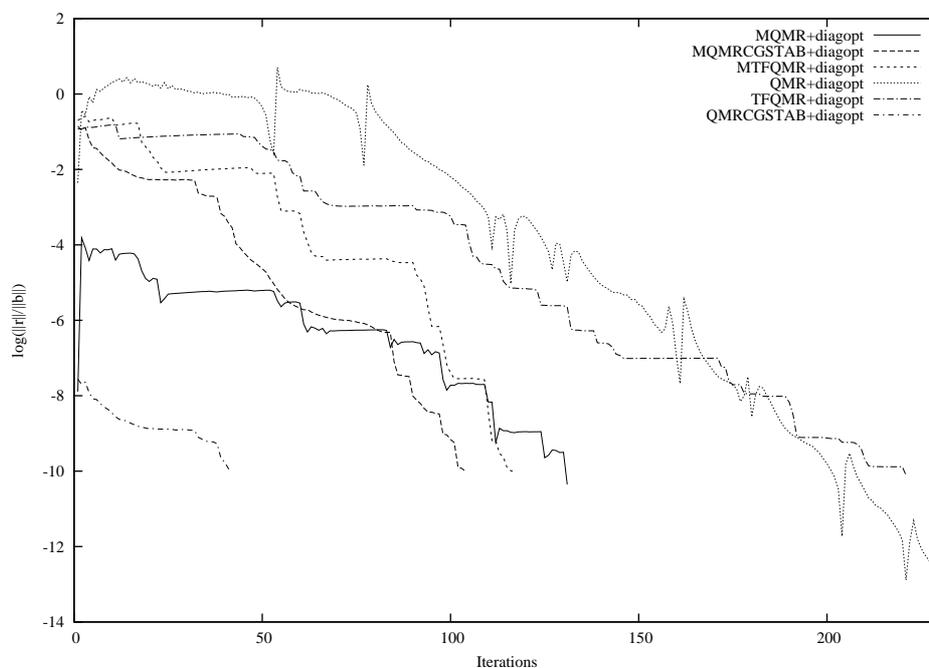


Figura 3. Convergencia de distintos métodos tipo QMR preconditionados con *Aproximada Inversa de estructura diagonal* para *WATT1*

5.3. Ejemplo 3: *cuaref*

Se trata de un problema en $2 - D$ de convección-difusión estacionario de un fluido sometido a un campo circular de velocidades, de ecuación $v_1 \frac{\partial u}{\partial x} + v_2 \frac{\partial u}{\partial y} - K \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = 0$ sobre un dominio cuadrado Ω , con condiciones de tipo Dirichlet $u = 0$ en $x = 1$ y $u = 1$ en $x = 0$, y de Neumann, $\frac{\partial u}{\partial n} = 0$ en el resto de la frontera, siendo $K = \frac{\lambda}{c\rho}$, el coeficiente de difusión dado en $\left[\frac{m^2}{h} \right]$, y v_1, v_2 , la componentes del campo de velocidades,

$$v_1 = C (y - 1/2) (x - x^2), \quad v_2 = C (1/2 - x) (y - y^2)$$

Se ha tomado $K = 1$ y para el coeficiente C de la velocidad un valor de 10^5 . La discretización con elementos finitos da lugar a un sistema no simétrico de 7520 ecuaciones.

En la figura 4 se observa que el número de iteraciones necesario para converger es menor para el método MQMRCGSTAB que para el resto. Además, la curva de convergencia del MQMRCGSTAB es cercana a la del VGMRES y presenta un comportamiento similar a la del QMRCGSTAB. Este fenómeno se repite en otros experimentos realizados y no incluidos aquí.

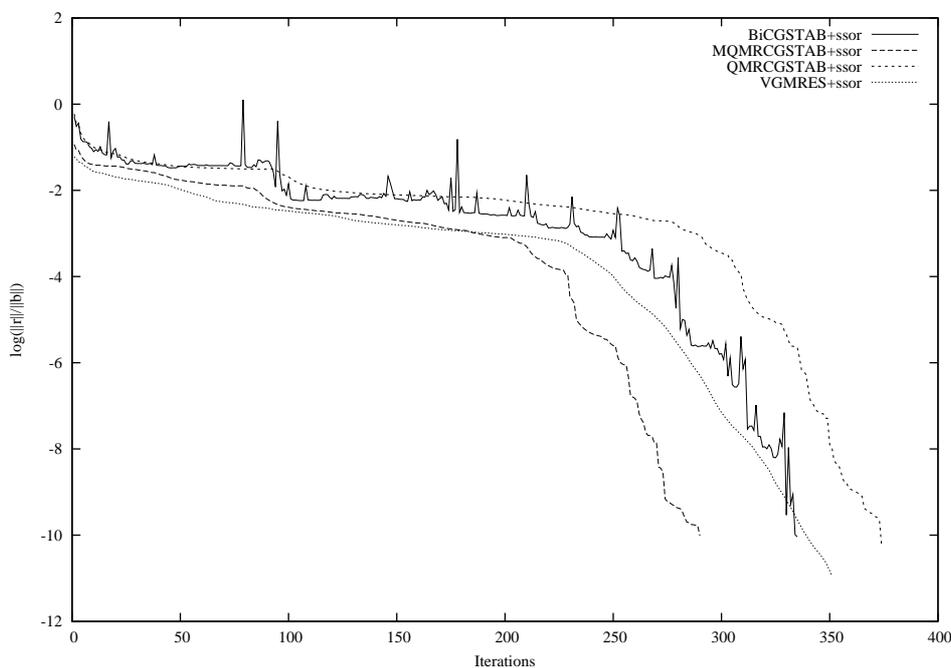


Figura 4. Convergencia de diferentes métodos preconditionados con *SSOR* para *cuaref*

5.4. Ejemplo 4: *convdifhor*

Consideramos un problema de convección-difusión en $2 - D$ definido en un dominio cuadrado Ω por la ecuación,

$$v_1 \frac{\partial u}{\partial x} - K \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = F$$

con un campo de velocidades horizontal dado por,

$$v_1 = 10^4 (y - 1/2) (x - x^2) (1/2 - x)$$

siendo K , el coeficiente de difusión dado en $\left[\frac{m^2}{h} \right]$ y $F = \frac{f}{c\rho}$, el término fuente que depende de las fuentes volumétricas y de las características del medio, $\left[\frac{^\circ C}{h} \right]$.

Los valores de K varían en Ω desde 10^{-5} a 10^2 , y los de F desde 10^3 a 1. Las condiciones de contorno son Dirichlet $u = 0$ en $x = 1$ y $u = 1$ en $x = 0$, y Neumann, $\frac{\partial u}{\partial n} = 0$ en el resto de la frontera.

El proceso adaptativo de refinamiento de mallas, ha dado lugar a un sistemas no simétrico con 3423 ecuaciones. La figura 5 muestra el efecto de la reordenación en la convergencia del método MTFQMR preconditionado con ILU(0). En este ejemplo se han aplicado tres algoritmos de reordenación, Grado Mínimo, Mínimo Vecino y Cutthill-MaKee Inverso (ver p.e. [4]). Los resultados muestran que la reordenación reduce casi a la mitad el número de iteraciones.

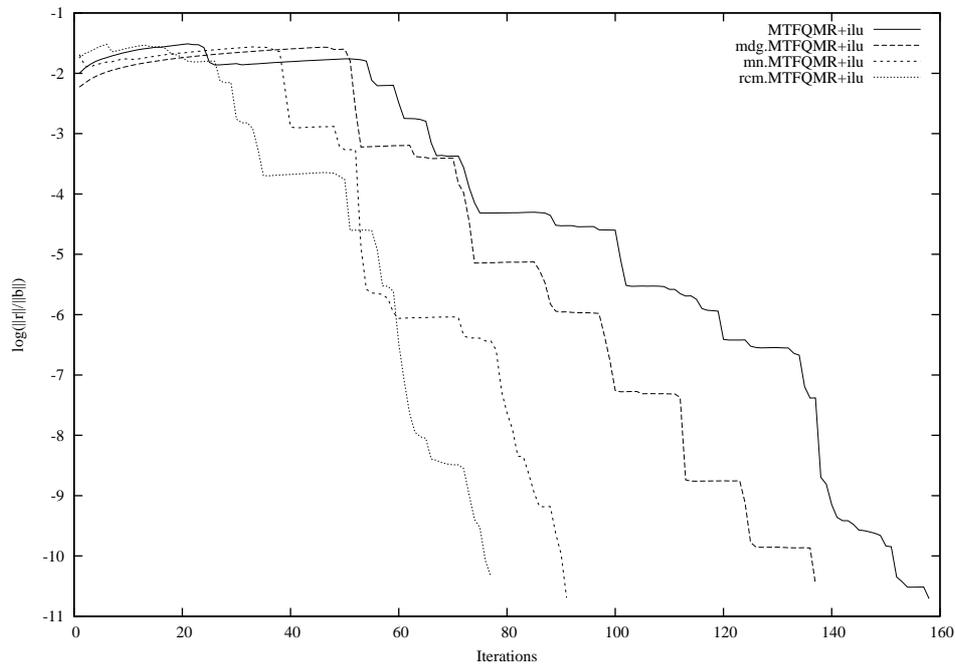


Figura 5. Efecto de la reordenación en la convergencia del MTFQMR preconditionado con $ILU(0)$ para *convdifhor*

6. CONCLUSIONES

- Las versiones modificadas de los métodos de cuasi-minimo residuo proporcionan curvas de convergencias más suaves que las versiones originales, aunque el coste computacional suele estar por encima. En los ejemplos analizados se ha comprobado que los algoritmos Modificados poseen características similares a las del GMRES, pero con un menor coste computacional que éste. Este comportamiento más robusto de los métodos de tipo QMR Modificados ha permitido alcanzar la convergencia en algunos casos en que los métodos originales no lo consiguieron.
- Se ha comprobado, asimismo, que el efecto de la renumeración mejora sensiblemente la velocidad de convergencia y, en particular, reduce el coste computacional cuando se utilizan los preconditionadores $ILU(0)$ y $SSOR$, ya que se mejora las características de los mismos. Por otro lado, el tiempo requerido para la reordenación es siempre muy inferior al total del proceso.

7. AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido desarrollado en el marco del proyecto REN2001-0925-C03-02/CLI, subvencionado por el Ministerio de Ciencia y Tecnología y FEDER.

REFERENCIAS

- [1] T.F. Chan, E. Gallopoulos, V. Simoncini, T. Szeto, C.H. Tong, A Quasi-Minimal Residual Variant of the Bi-CGSTAB Algorithm for Nonsymmetric Systems, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, **15**, 2, 338-347 (1994).
- [2] I.S. DUFF, R.G. GRIMES Y J.G. LEWIS, Sparse Matrix Test Problems, *ACM Trans. Math. Sof.*, **15**, 1, pp. 1-14 (1989).
- [3] E. Flórez, D. García, L. González, G. Montero, The effect of Ordering on Sparse Approximate Inverse Preconditioners for Nonsymmetric Problems, *Advances in Engineering Software*, **33**, 611-619 (2002).
- [4] E. Flórez, D. García, L. González, G. Montero, A. Suárez, Effect of Ordering on the Performance of Sparse Approximate Inverse Preconditioners *The Second International Conference on Engineering Computational Technology, Leuven (Belgium)*, (2000).
- [5] R.W. Freund, A Traspose-Free Quasi-Minimal Residual Algorithm for non-Hermitian Linear Systems, *SIAM J. Sci. Comput.*, **14**, 470-482 (1993).
- [6] R.W. Freund and N.M. Nachtigal, QMR: A Quasi-minimal Residual Method for non-Hermitian Linear Systems, *Numerische Math.*, **60**, 315-339 (1991).
- [7] M. Galán, G. Montero y G. Winter, A Direct Solver for the Least Square Problems Arising from GMRES(k), *Com. Num. Meth. Eng.*, **10**, 743-749 (1994).
- [8] M.D. García, *Estrategias para la Resolución de Grandes Sistemas de Ecuaciones Lineales. Métodos de Cuasi-Mínimo Residuo Modificados*, PhD., University of Las Palmas de Gran Canaria (2003).
- [9] G. Montero, A. Suárez, Left-Right Preconditioning Versions of BCG-Like Methods *Int. J. Neur., Par. & Sci. Comput.*, **3**, 487-501 (1995).
- [10] G. Montero, L. González, E. Flórez, M.D. García, A. Suárez, Approximate Inverse Computation Using Frobenius Inner Product *Num. Lin. Alg. Appl.*, **9**, 239-247 (2002).
- [11] Y.Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, PWE Publishing Company, Boston (1996).