

INVERSAS APROXIMADAS USANDO EL PRODUCTO ESCALAR DE FROBENIUS

E. Flórez^{*}, M.D. García, L.González 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: eflorez@dma.ulpgc.es, web <http://www.iusiani.ulpgc.es>

Palabras clave: Inversas aproximadas sparse, preconditionamiento, sistemas lineales no simétricos, técnicas de reenumeración, métodos iterativos.

Resumen. *Se presentan preconditionadores en paralelo para la solución general de sistemas de ecuaciones lineales obtenidas mediante proyecciones ortogonales relacionadas con el producto escalar de Frobenius, [1] minimizando la norma Frobenius $\|AM - I\|$, buscando M en un subespacio cualquiera de matrices cuadradas con coeficientes reales. La norma Frobenius mínima $\|AN - I\|$ y la matriz N del mínimo anterior se calculan explícitamente. La principal aplicación se desarrolla para el subespacio de las matrices con un patrón de sparsidad dado. Se muestran experimentos numéricos que ilustran tanto el efecto del preconditionador inversa aproximada sobre la convergencia de los Métodos de Krylov como el efecto de la reordenación [2] para sistemas sparse no simétricos.*

1. INTRODUCCIÓN

La aplicación de métodos de discretización para la resolución de problemas de contorno en derivadas parciales da como resultado la solución de sistemas de ecuaciones lineales,

$$Ax = b ; A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R}) ; x, b \in \mathbb{R}^n \quad (1)$$

donde A es una matriz de orden elevado, *sparse*, no simétrica y no singular. Los métodos basados en subespacios de Krylov han demostrado ser eficaces en la resolución de estos sistemas. Es sabido que la convergencia de estos métodos mejora con el preconditionamiento, existiendo diferentes formas de preconditionamiento así como diferentes formas de elegir la matriz preconditionadora M . Las inversas aproximadas se han convertido en una buena alternativa a los preconditionadores implícitos debido a su naturaleza paralelizable (ver referencias [4, 5, 6, 7, 8]). En el presente trabajo se encuentra una generalización de la inversa aproximada *sparse* (SPAI) y hemos utilizado el preconditionador ILU(0) para contrastar nuestros resultados con SPAI.

También es sabido que el preconditionamiento mejora con la reordenación por lo que hemos aplicado diferentes técnicas de reordenación para comprobar su efecto sobre nuestro preconditionador inversa aproximada.

2. INVERSA APROXIMADA

Precondicionar un sistema es encontrar una matriz M tal que la matriz preconditionada AM sea lo más cercana a la identidad, esta cercanía se mide usando normas matriciales por lo que nuestra búsqueda consistirá en resolver el siguiente problema de minimización,

$$\min_{M \in \mathcal{S}} \|AM - I\| = \|AN - I\| \quad (2)$$

La Teoría de Aproximación en espacios normados garantiza la existencia y unicidad del problema de minimización en subespacios de dimensión finita cuando la norma es estrictamente convexa, de todas las normas estrictamente convexas hemos escogido la norma Frobenius

$$\|A\|_F^2 = tr(AA^t) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^2, \forall A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R}) \quad (3)$$

por ser prehilbertiana, esto es, satisface la identidad del paralelogramo y proviene de un producto escalar,

$$\langle A, B \rangle_F = tr(AB^t) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}b_{ij}, \forall A, B \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R}) \quad (4)$$

y además es paralelizable pudiendo calcularse por columnas [5, 6, 7].

$$\|AM - I\|_F^2 = \sum_{j=1}^n \|(AM - I) e_j\|_2^2; \quad e_j = (0, \dots, 0, \overset{j}{1}, 0, \dots, 0)^T \quad (5)$$

Planteamos ahora nuestro problema de minimización usando norma Frobenius en el espacio

prehilbertiano de las matrices cuadradas reales.

$$\min_{M \in \mathcal{S}} \|AM - I\|_F = \|AN - I\|_F \quad (6)$$

Sabemos por la Teoría de Aproximación en convexos cerrados que la solución del problema (6) existe y es única y que, en el subespacio \mathcal{S} de dimensión finita el Teorema de la Proyección ortogonal nos caracteriza la solución de dicho problema de minimización, así, en el espacio prehilbertiano $\mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ con el producto escalar de Frobenius, minimizar equivale a proyectar,

$$\min_{M \in \mathcal{S}} \|AM - I\|_F = \|AN - I\|_F \iff AN = P_{AS}I; AS \subset \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$$

$$\langle AN - I, AM \rangle_F = 0; \quad \forall M \in \mathcal{S}$$

y la mínima distancia viene dada por la expresión,

$$\|AN - I\|_F^2 = \|I\|_F^2 - \langle I, AN \rangle_F = n - \text{tr}(AN)$$

Para obtener las expresiones explícitas de la proyección ortogonal es necesario usar una base de \mathcal{S} , el siguiente teorema nos da las expresiones explícitas de la proyección ortogonal AN sobre el subespacio AS generado por una base ortogonal.

Teorema 1

Sea $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ una matriz no singular, sea \mathcal{S} un subespacio vectorial de $\mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ de dimensión p , y $\{M_1, \dots, M_p\}$ una base de \mathcal{S} tal que $\{AM_1, \dots, AM_p\}$ es una base ortogonal de AS . Entonces, la solución al problema (6) es

$$N = \sum_{i=1}^p \frac{\text{tr}(AM_i)}{\|AM_i\|_F^2} M_i \quad (7)$$

$$\|AN - I\|_F^2 = n - \sum_{i=1}^p \frac{[\text{tr}(AM_i)]^2}{\|AM_i\|_F^2} \quad (8)$$

Para una demostración completa ver [3]

Este teorema puede generalizarse para cualquier base del subespacio \mathcal{S} aplicando el algoritmo de Gram-Schmidt a una base no ortogonal de AS tal y como se muestra en el siguiente teorema.

Teorema 2

Sea $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ una matriz no singular, sea \mathcal{S} un subespacio vectorial de $\mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ de dimensión p y $\{M_1, \dots, M_p\}$ una base de \mathcal{S} . Entonces, la solución al problema (6) es

$$N = \sum_{i=1}^p \frac{\det(T_i)}{\det(G_{i-1}) \det(G_i)} \widetilde{M}_i \quad (9)$$

$$\|AN - I\|_F^2 = n - \sum_{i=1}^p \frac{[\det(T_i)]^2}{\det(G_{i-1}) \det(G_i)} \quad (10)$$

donde, $\det(G_0) = 1$, G_i es la matriz de Gram del sistema $\{AM_1, \dots, AM_i\}$ con respecto al producto escalar de Frobenius, T_i es la matriz que resulta de reemplazar la última fila de G_i por $\text{tr}(AM_1), \dots, \text{tr}(AM_i)$, y \widetilde{M}_i es la matriz obtenida evaluando el determinante simbólico que resulta de reemplazar la última fila de $\det(G_i)$ por M_1, \dots, M_i , con $1 \leq i \leq p$.

El teorema anterior está demostrado detalladamente en [3]

Atendiendo al coste computacional, el teorema 2 presenta el problema del cálculo de los determinantes $\det(G_i)$, $\det(T_i)$ y \widetilde{M}_i . El mayor orden de estos puede reducirse considerablemente con una adecuada descomposición del subespacio \mathcal{S} como suma directa de subespacios, idea que se recoge en el siguiente teorema cuya demostración detallada puede encontrarse en [3]

Teorema 3

Sea $A \in M_n(\mathbb{R})$ una matriz no singular, sea \mathcal{S} un subespacio vectorial de $M_n(\mathbb{R})$ de dimensión p , $\mathcal{S} = \mathcal{S}_1 \oplus \dots \oplus \mathcal{S}_q$ con $\dim \mathcal{S}_j = p_j$ y $\{M_1^j, \dots, M_{p_j}^j\}$ una base de \mathcal{S}_j ; $\forall j = 1, \dots, q$. Supongamos que los subespacios $A\mathcal{S}_j$ ($1 \leq j \leq q$) son mutuamente ortogonales. Entonces, la solución al problema (6) es

$$N = \sum_{j=1}^q \sum_{k=1}^{p_j} \frac{\det(T_k^j)}{\det(G_{k-1}^j) \det(G_k^j)} \widetilde{M}_k^j \quad (11)$$

$$\|AN - I\|_F^2 = n - \sum_{j=1}^q \sum_{k=1}^{p_j} \frac{[\det(T_k^j)]^2}{\det(G_{k-1}^j) \det(G_k^j)} \quad (12)$$

donde, $\forall j = 1, \dots, q$: G_k^j , T_k^j y \widetilde{M}_k^j son los mismos del teorema 2 para la base $\{M_i^j\}_{i=1}^{p_j}$ de \mathcal{S}_j .

La aplicación del teorema 3, en lugar del teorema 2, reduce el máximo orden de los determinantes a calcular de $p = \sum_{j=1}^q p_j$ a $\max(p_1, \dots, p_q)$.

Los resultados anteriores pueden aplicarse a los preconditionadores que se utilizan frecuentemente para resolver sistemas de ecuaciones lineales. Se ha estudiado por muchos autores una inversa aproximada con un patrón de *sparsidad* fijo (ver [7]). Aunque nuestro camino está definido por un patrón de *sparsidad* fijo, esto también nos permite capturar el mejor patrón de *sparsidad* para un número dado de entradas no nulas. Sea K un subconjunto de $\{1, 2, \dots, n\} \times \{1, 2, \dots, n\}$ y

$$\mathcal{S} = \{M \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R}) / m_{i,j} = 0; \forall (i, j) \notin K\}$$

En lo que sigue, denotaremos por J el conjunto de índices de columna j para el cual existe al menos un índice de fila i tal que $(i, j) \in K$, y

$$K = \bigcup_{j \in J} \left\{ (i_1^j, j), (i_2^j, j), \dots, (i_{p_j}^j, j) \right\}, 1 \leq i_1^j < i_2^j < \dots < i_{p_j}^j \leq n$$

y sea $M_{i,j}$ una matriz de orden $n \times n$, cuya única entrada no nula es $m_{i_j} = 1$.

Con esta notación, se resume a continuación la solución al problema (6) para un patrón de sparsidad K .

Teorema 4

Sea $A \in M_n(\mathbb{R})$ una matriz no singular y sea S el subespacio de las matrices con patrón de sparsidad K . Entonces, la solución al problema (6) es

$$N = \sum_{j \in J} \sum_{k=1}^{p_j} \frac{\det(D_k^j)}{\det(G_{k-1}^j) \det(G_k^j)} \widetilde{M}_{k,j} \quad (13)$$

$$\|AN - I\|_F^2 = n - \sum_{j \in J} \sum_{k=1}^{p_j} \frac{[\det(D_k^j)]^2}{\det(G_{k-1}^j) \det(G_k^j)} \quad (14)$$

donde, $\forall j \in J$, $\det(G_0^j) = 1$ y G_k^j es la matriz de Gram de las columnas $i_1^j, i_2^j, \dots, i_k^j$ de la matriz A con respecto al producto escalar euclídeo, D_k^j es la matriz que resulta de reemplazar la última fila de G_k^j por $a_{j i_1^j}, a_{j i_2^j}, \dots, a_{j i_k^j}$, y $\widetilde{M}_{k,j}$ es la matriz que se obtiene evaluando el determinante simbólico que resulta de reemplazar la última fila de $\det(G_k^j)$ por $M_{i_1^j, j}, M_{i_2^j, j}, \dots, M_{i_k^j, j}$, con $1 \leq k \leq p_j$.

La demostración detallada del teorema anterior puede verse en [3]

Quedando listas las ecuaciones (13) y (14) para su implementación en paralelo.

3. INVERSA APROXIMADA SPARSE

Un trabajo reciente de Grote y otros [7] nos da un algoritmo eficiente para obtener una inversa aproximada tan cercana a una matriz no singular A como se requiera. Hemos seguido dicha técnica pero variando el método de selección de las entradas en N y el algoritmo usado para resolver el problema (6). La construcción de N se realiza en paralelo, independizando el cálculo de cada columna por lo que, el problema de minimización se separa en n problemas de mínimos cuadrados independientes,

$$\min_{m_k} \|Am_k - e_k\|_2; k = 1, 2, \dots, n$$

donde e_k son los vectores de la base canónica de \mathbb{R}^n . Aunque nuestro algoritmo nos permite comenzar desde cualquier entrada de la columna k , se acepta comúnmente el uso de la diagonal como primera aproximación. Además, la expresión del preconditionador diagonal óptimo es bien conocida. La siguiente entrada a considerar se selecciona dentro del conjunto de entradas candidatas, el cual se define siguiendo el criterio propuesto por Grote y otros [7]

Sea $r_k = Am_k - e_k$ el residuo correspondiente a la columna k -ésima.

Sean

\mathcal{I}_k : el conjunto de entradas llenas de $r_k = \{i \in \{1, 2, \dots, n\} / r_{ik} \neq 0\}$

\mathcal{L}_k : el conjunto de entradas llenas de $m_k = \{l \in \{1, 2, \dots, n\} / m_{lk} \neq 0\}$; $\text{card}(\mathcal{L}_k) = p_k$

\mathcal{J}_k : las posiciones candidatas a llenar en $m_k = \{j \in \mathcal{L}_k^C / a_{ij} \neq 0; \forall i \in \mathcal{I}_k\}$

Para cada posición candidata j se calcula,

$$\|Am_k - e_k\|_2^2 = 1 - \sum_{l=1}^{p_k} \frac{[\det D_l^k]^2}{\det(G_{l-1}^k) \det(G_l^k)}$$

donde, $\forall k$, $\det(G_0^k) = 1$, G_l^k con $i_1^k, i_2^k, \dots, i_l^k$ es la matriz de Gram de las columnas de A con respecto al producto escalar euclídeo, D_l^k es la matriz que resulta de reemplazar la última fila de la matriz G_l^k por $a_{k i_1^k}, a_{k i_2^k}, \dots, a_{k i_l^k}$, con $1 \leq l \leq p_k$. Se selecciona el índice j_k que minimiza el valor de $\|Am_k - e_k\|_2$, y m_k se busca en el conjunto,

$$\mathcal{S}_k = \{m_k \in \mathbb{R}^n / m_{ik} = 0; \forall i \notin \mathcal{L}_k \cup \{j_k\}\}$$

$$m_k = \sum_{l=1}^{p_k} \frac{\det(D_l^k)}{\det(G_{l-1}^k) \det(G_l^k)} \tilde{m}_l$$

donde \tilde{m}_l es el vector con entradas no nulas i_h^k ($1 \leq h \leq l$). Cada una de ellas se obtiene evaluando el determinante correspondiente que resulta de reemplazar la última fila de $\det(G_l^k)$ por e_h^t , con $1 \leq l \leq p_k$.

Evidentemente, los cálculos de $\|Am_k - e_k\|_2^2$ y m_k pueden actualizarse añadiendo la contribución de la última entrada $j \in \mathcal{J}_k$ a la suma previa de 1 a $p_k - 1$. En la práctica, $\det(G_l^k)$ se calcula usando la descomposición de Cholesky puesto que G_l^k es una matriz simétrica y definida positiva. Esto sólo involucra la factorización de la última fila y columna si aprovechamos la descomposición de G_{l-1}^k . Por otra parte, $\det(D_l^k) / \det(G_l^k)$ es el valor de la última incógnita del sistema $G_l^k d_l = \left(a_{k i_1^k}, a_{k i_2^k}, \dots, a_{k i_l^k}\right)^t$ necesitándose solamente una sustitución por descenso. Finalmente, para obtener \tilde{m}_l debe resolverse el sistema $G_l^k v_l = e_l$, con $\tilde{m}_{i_h^k} = v_{hl}$, ($1 \leq h \leq l$).

4. EFECTO DE LA REORDENACIÓN

Hemos considerado diferentes técnicas de reordenación para mostrar su efecto sobre la solución iterativa de sistemas de ecuaciones lineales usando los preconditionadores SPAI. La ordenación original corresponde a las matrices provenientes de la aplicación del Método de Elementos Finitos con mallas no estructuradas y refinamiento adaptativo de mallas. El algoritmo de Grado mínimo se utilizó para reducir el efecto de llenado en la factorización de matrices con patrón de *sparsidad* simétrico según muestra [13]. El algoritmo de Cuthill-McKee Inverso (RCM) [14] es una modificación del algoritmo de Cuthill-McKee [17] que toma simplemente el reordenamiento inverso del obtenido en último lugar. Estos algoritmos se caracterizan por reducir el ancho de banda y el perfil de la matriz. El algoritmo de Mínimo Vecino (MN) [15] es una variante del algoritmo de Grado Mínimo que elimina los nodos seleccionados en la estructura del grafo asociado a la matriz A , tal que no se inserte ni se defina ninguna nueva arista en el grafo. Este selecciona el nodo que tiene el mínimo número de nodos adyacentes o vecinos. Este algoritmo es muy útil en la factorización incompleta con el mismo patrón de *sparsidad* de la matriz A , por ejemplo el preconditionador ILU(0) que se utiliza en los experimentos numéricos de este trabajo. Todos estos algoritmos están resumidos en [16]. En todos ellos comenzamos con un nodo pseudoperiférico utilizando el algoritmo de George [18].

Nuestro principal objetivo es investigar si la reordenación reduce la cantidad de entradas en el preconditionador SPAI y si el uso de los preconditionadores SPAI mejora la convergencia del método iterativo.

Sea P la matriz de permutación asociada a un algoritmo de reordenación. Como $(P^T A P)^{-1} = P^T A^{-1} P$, es decir, la inversa de la matriz reordenada es la reordenada de la matriz inversa, cuando reordenamos una matriz, su inversa aproximada debe tender a la reordenada de la inversa.

Si la tolerancia de la inversa aproximada está dada por ε , en el subespacio $\mathcal{S} \subset M_n(\mathbb{R})$,

$$\min_{M \in \mathcal{S}} \|MA - I\|_F = \|NA - I\|_F < \varepsilon \quad (15)$$

entonces,

$$\min_{M' \in P^T \mathcal{S} P} \|M' P^T A P - I\|_F = \min_{M' \in P^T \mathcal{S} P} \|P M' P^T A - I\|_F = \min_{M \in \mathcal{S}} \|MA - I\|_F < \varepsilon \quad (16)$$

Sea \mathcal{S}' un subespacio de $M_n(\mathbb{R})$ correspondiente al mismo número de entradas no nulas que \mathcal{S} , donde la inversa aproximada óptima es obtenida para dicho número de entradas no nulas. Cabe destacar, también, que el número de entradas no nulas en \mathcal{S} es el mismo que el de $P^T \mathcal{S} P$. En este caso obtenemos,

$$\|N' P^T A P - I\|_F = \min_{M' \in \mathcal{S}'} \|M' P^T A P - I\|_F \leq \min_{M' \in P^T \mathcal{S} P} \|M' P^T A P - I\|_F < \varepsilon \quad (17)$$

Evidentemente, el número de entradas no nulas necesarias en \mathcal{S}' será menor o igual que el número de entradas no nulas en $P^T \mathcal{S} P$ y en \mathcal{S} . Concluimos que la reordenación reduce la cantidad de entradas no nulas en la inversa aproximada para una tolerancia dada ε , o, al menos, no lo aumenta.

Debido a los resultados dados en (17), los preconditionadores tipo inversa aproximada reordenados adquieren mejores propiedades desde el punto de vista de su utilización para mejorar la convergencia de los métodos iterativos. La cercanía del número de condición de $M' P^T A P$ a 1 se caracteriza por,

$$K_2(M' P^T A P) \leq \frac{1 + \|M' P^T A P - I\|_2}{1 - \|M' P^T A P - I\|_2} \quad (18)$$

La desviación de la normalidad de $(M' P^T A P)$ está acotada por,

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (|\lambda_k| - \sigma_k)^2 \leq \frac{2}{n} \|M' P^T A P\|_F^2 (1 - \sigma_n) \quad (19)$$

siendo $\{\lambda_k\}_{k=1}^n, \{\sigma_k\}_{k=1}^n$ los autovalores y valores singulares de $P^T A P M'$ (en secuencia de módulos decreciente). Finalmente, la agrupación de los autovalores y valores singulares estará dada por,

$$\sum_{k=1}^n (1 - \sigma_k)^2 \leq \|M' P^T A P - I\|_F^2 \quad (20)$$

$$\sum_{k=1}^n (1 - \lambda_k)^2 \leq \|M' P^T A P - I\|_F^2 \quad (21)$$

Vea más detalles en [1]

5. EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

A continuación mostramos los experimentos numéricos realizados con problemas obtenidos de la colección Harwell Boeing [10] y otros resueltos por el Grupo de Análisis Numérico Aplicado [3]. Mostraremos la efectividad de los preconditionadores *sparse* con tres de los métodos iterativos más usados hoy en día basados en los subespacios de Krylov para sistemas lineales no simétricos: Bi-CGSTAB [11] y una variante del GMRES [12], con preconditionamiento [9]. Todos los cálculos numéricos se realizaron en FORTRAN con doble precisión. Se tomó siempre como aproximación inicial $x_0 = 0$, $\tilde{r}_0 = r_0 = b$, y como criterio de parada $\frac{\|b - Ax_i\|_2}{\|b\|_2} < 10^{-9}$. A continuación mostramos una breve descripción de los problemas:

convdifhor: matriz obtenida de un problema convección-difusión en dos dimensiones resuelto mediante elementos finitos con una malla adaptativa refinada, de tamaño $n = 441$ y entradas no nulas $nz = 2927$.

orsreg: matriz de simulación de una reserva de petróleo para una malla completa $21 \times 21 \times 5$ de tamaño $n = 2205$ y $nz = 14133$.

sherman1-4: simulador del almacenamiento de petróleo en medio con paredes de lajas, con malla $10 \times 10 \times 10$, de tamaños: $n = 1000$ y $nz = 3750$, $n = 1080$ y $nz = 23094$, $n = 5005$ y $nz = 20033$, $n = 1104$ y $nz = 3786$, $n = 3312$ y $nz = 20793$.

pores: problema de modelización de depósitos con matriz no simétrica de tamaños $n = 1224$ y $nz = 9613$, $n = 532$ y $nz = 3474$.

orsirr: matrices no simétricas de tamaño $n = 1030$ y $nz = 6858$ y $n = 886$ y $nz = 5970$.

El cuadro 1 muestra cómo se mejora la convergencia del BiCGSTAB cuando se usa el preconditionador *sparse* para *convdifhor*. El número de iteraciones disminuye claramente con ε_k . Sin embargo, para obtener una inversa aproximada de A , las entradas por columnas deben aumentarse a 200.

$\max nz(m_{0k})$	ε_k	<i>Iter.</i>	$nz(N)$	$\frac{nz(N)}{nz(A)}$	$\ NA - I\ _F$
50	0,5	86	949	0,32	9,38
50	0,4	68	1905	0,65	8,00
50	0,3	34	3646	1,24	5,99
50	0,2	22	7736	2,64	4,06
50	0,05	11	20106	6,86	2,01
200	0,05	7	43390	14,82	0,99

Cuadro 1. Resultados de convergencia para *convdifhor* con BiCGSTAB preconditionado por la izquierda

En la figura 1 se muestra que las inversas aproximadas tipo *sparse* pueden mejorar el comportamiento de algunos preconditionadores clásicos como el ILU(0) y ser competitivas cuando se realizan los cálculos en paralelo.

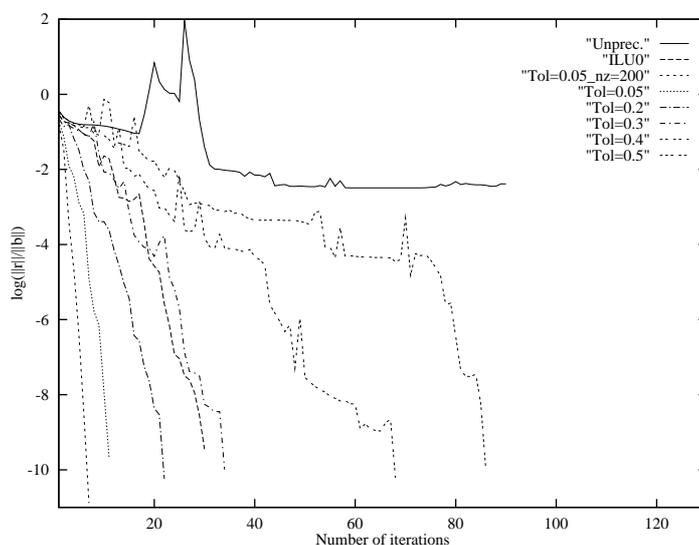


Figura 1. Comportamiento de los preconditionadores con BiCGSTAB para *convdifhor*, $n = 441$.

En la figura 2 se muestran los gráficos de la estructura *sparse* de A (parte superior izquierda) y M , respectivamente, para este problema. Podemos observar que los patrones de sparsidad de A y A^{-1} son totalmente diferentes y no podemos, por tanto, definir la estructura de M igual a la de A , ni en general a la de una matriz fija.

En el cuadro 2 se presentan la relación de entradas no nulas $nz(N)/nz(A)$, los tiempos de CPU para el cálculo de M y para resolver los sistemas con BiCGSTAB y GMRES, debemos aclarar que los tiempos de CPU no son representativos al no realizarse los cálculos en paralelo.

<i>Matriz</i>	n	$nz(A)$	máx nz (m_{0k})	ε_k	$\frac{nz(M_0)}{nz(A)}$	M_0 t	<i>Bicgstab</i> $t/iter$	<i>Gmres(m)</i> $t/iter/m$
Orsreg1	2205	14133	50	0.4	0.647	2.42	0.14/114	0.40/5/51
Orsirr1	1030	6858	50	0.4	0.711	0.64	0.04/69	0.16/3/50
Orsirr2	886	5970	50	0.36	0.661	0.61	0.04/72	0.12/14/20
Pores2	1224	9613	150	0.2	2.225	56.50	0.17/38	0.15/1/50
Pores3	532	3474	50	0.2	4.250	10.09	0.04/23	0.12/31/50
Sherman1	1000	3750	100	0.4	0.722	0.19	0.02/45	0.16/1/64
Sherman2	1080	23094	200	0.4	0.409	41052	0.03/8	0.04/1/20
Sherman3	5005	20033	200	0.2	1.883	50.87	0.39/94	2.25/2/100
Sherman4	1104	3786	100	0.2	1.970	1.44	0.03/30	0.15/5/30
Sherman5	3312	20793	200	0.2	0.880	39.33	0.16/40	0.45/3/50

Cuadro 2. Coste computacional del preconditionador inversa aproximada y resultados de convergencia

Por otra parte se muestran los experimentos numéricos para estudiar el efecto de la reorde-

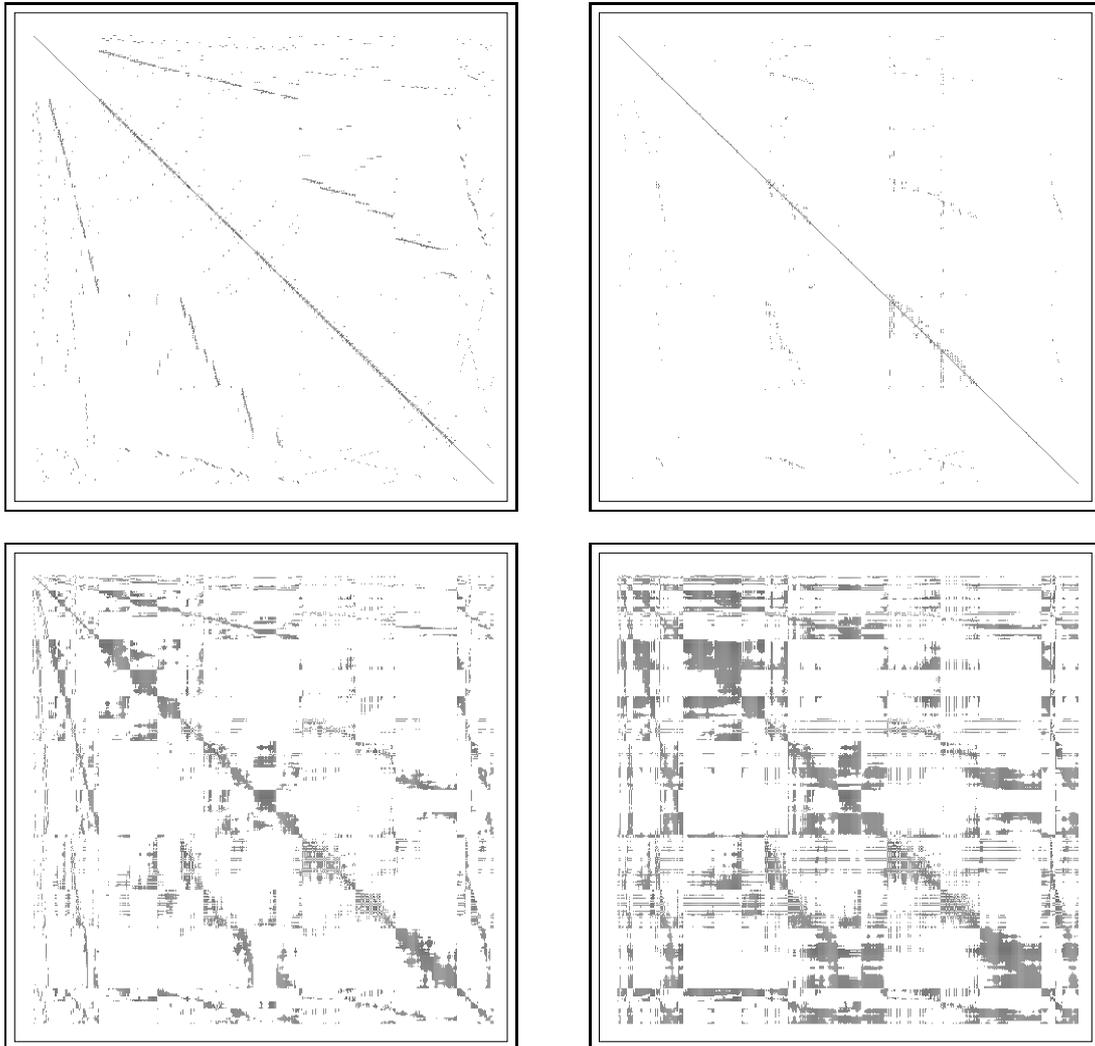


Figura 2. Patrón de *sparsidad* de A e inversas aproximadas para *convdifhor*, $n = 441$.

nación sobre los Métodos de Krylov con preconditionadores tipo inversa aproximada *sparse*.

En la figura 3 se muestra el patrón de *sparsidad* de la matriz A original y las matrices SPAI(0.3) correspondientes a los algoritmos de reordenación Grado Mínimo, Cuthill-McKee inverso y Mínimo Vecino respectivamente. Las entradas no nulas se representan con un punto.

El cuadro 3 resume el comportamiento de los preconditionadores ILU(0) y SPAI (0.2) para *cuaref* con diferentes reordenaciones. Se observa que el número de iteraciones con SPAI es menor que con ILU(0) y que la reducción del número de entradas en SPAI para una tolerancia dada para la aproximada inversa, es también evidente aquí (del 20 al 30 % aproximadamente para Grado Mínimo y Cuthill-McKee Inverso).

Por último mostramos en la figura 4 el comportamiento de BiCGSTAB preconditionado con SPAI para diferentes reordenaciones y se observa cómo el número de iteraciones de

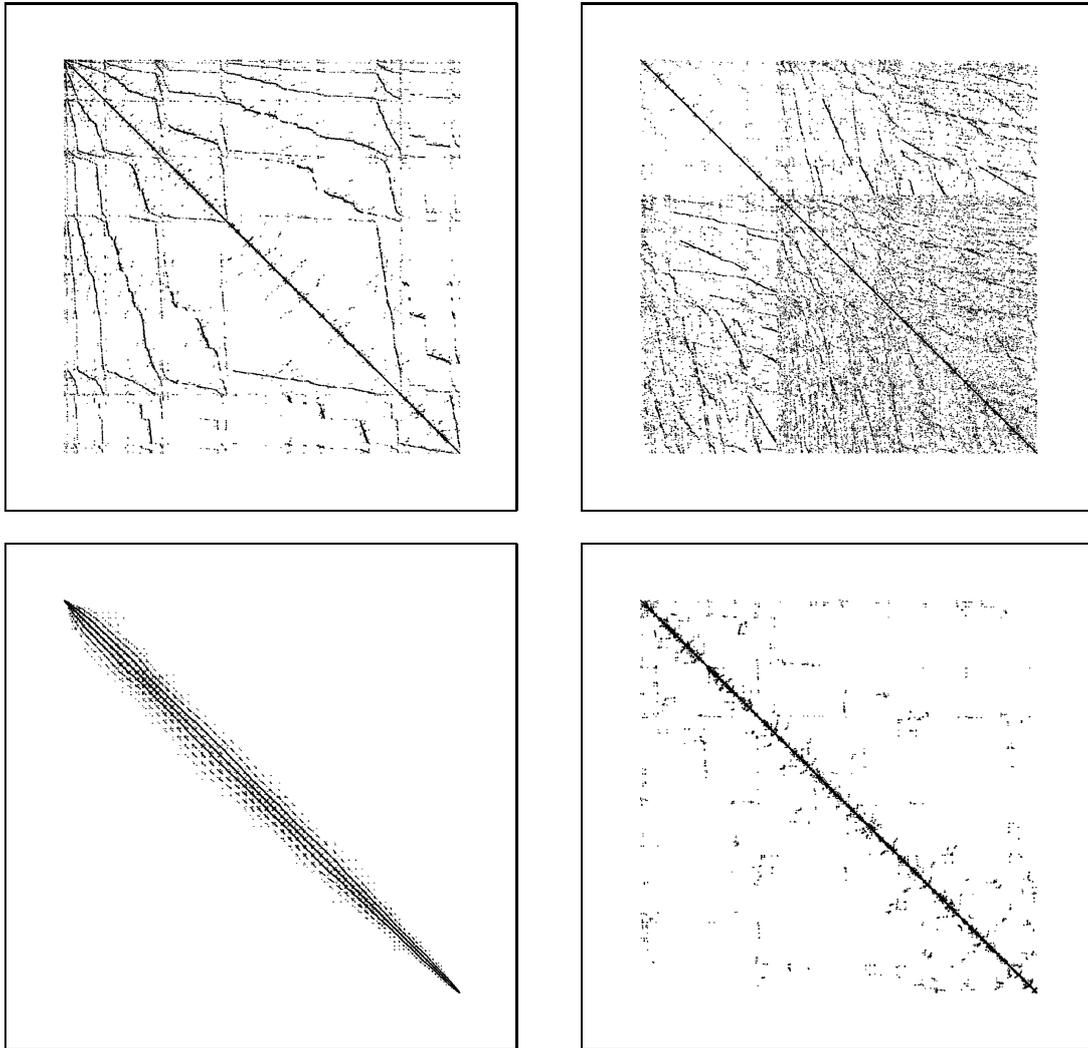


Figura 3. Patrón de *sparsidad* de la matriz SPAI(0.3) con diferentes reordenaciones para *cuaref*, $n = 7520$.

BiCGSTAB se reduce drásticamente un 75-85 % reordenando con Grado Mínimo y un 60-70 % utilizando Cuthill-McKee inverso por lo que podemos concluir que la estructura *sparse* de SPAI

Precondicionador	OO Iter	MDG Iter	RCM Iter	MN Iter
Sin Precondicionar	1740	395	> 7520	1739
ILU(0)	378	69	20	102
SPAI $\varepsilon_k(0,2)$	214	51	72	209
$nz(M)/nz(A)$	2.92	2.04	1.98	2.92

Cuadro 3. Resultados de convergencia para *cuaref* con diferentes reenumeraciones y BiCGSTAB preconditionado por la izquierda

parece partir de una estructura similar a la típica de A obtenida de la reordenación, y tiende a una matriz llena a medida que aumentamos la precisión.

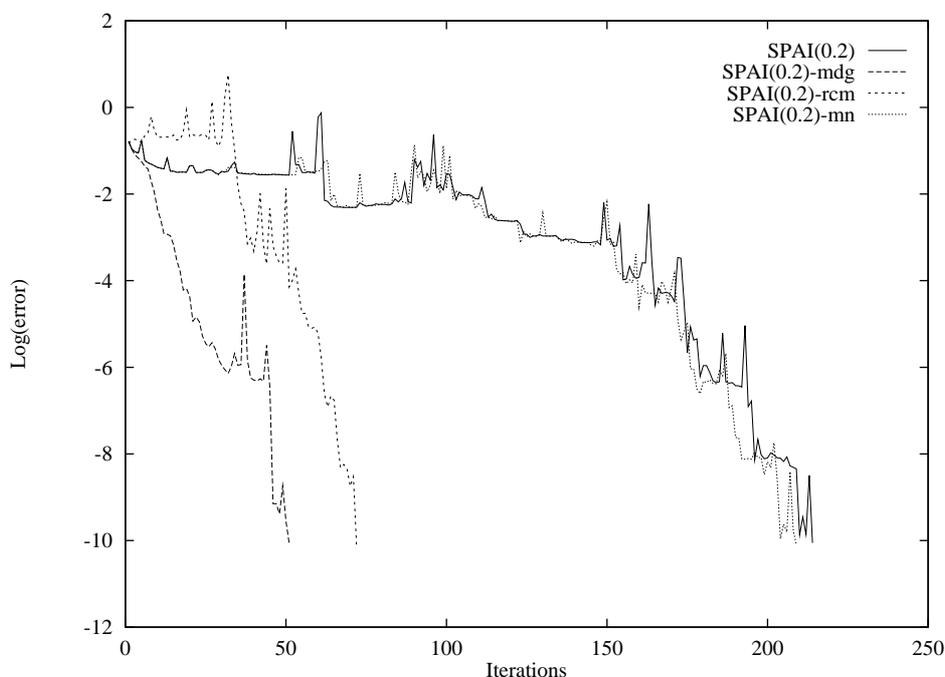


Figura 4. Comparación del comportamiento de BiCGSTAB-SPAI con reordenación para *cuaref*, $n = 7520$.

Los algoritmos de Grado Mínimo y de Cuthill-McKee Inverso son preferibles al Mínimo Vecino o a la ordenación Original. Sin embargo, hemos notado que si nz aumenta, las diferencias entre Grado Mínimo y Cuthill-McKee Inverso son más apreciables a favor del primero.

6. CONCLUSIONES

El carácter prehilbertiano de la norma matricial de Frobenius permite obtener el mejor preconditionador N para el sistema (2) en cada subespacio \mathcal{S} de $\mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ mediante la proyección ortogonal de la identidad sobre el subespacio $A\mathcal{S}$. Consecuentemente, se obtiene la ecuación (3), que representa la distancia mínima $d(I, A\mathcal{S})$. Estas consideraciones hacen posible el desarrollo de expresiones explícitas tanto para N como para $\|AN - I\|_F$ usando una base ortogonal de $A\mathcal{S}$. Posteriormente, el método de ortogonalización de Gram-Schmidt generaliza estas fórmulas para cualquier base de \mathcal{S} . Además, el coste computacional de las últimas expresiones se reduce considerablemente usando la descomposición de $A\mathcal{S}$ como suma directa de espacios mutuamente ortogonales $A\mathcal{S}_j$.

La aplicación de los resultados anteriores al caso de los preconditionadores *sparse* nos lleva evidentemente a expresiones cuyos cálculos son inherentemente paralelos, puesto que las columnas n_j de N pueden obtenerse independientemente unas de otras. Asimismo, el patrón de

sparsidad del preconditionador N se captura automáticamente (no es un patrón de *sparsidad* fijo) puesto que cada nueva entrada n_{ij} es equivalente a extender el subespacio preconditionador \mathcal{S} a $\mathcal{S} \oplus \text{span} \{M_{i,j}\}$.

El algoritmo propuesto en la sección 3 permite calcular un preconditionador *sparse* N de una matriz *sparse* no simétrica A . Como las columnas (o filas) de N se obtienen independientemente unas de otras, los cálculos pueden realizarse en paralelo. El patrón de *sparsidad* de estos preconditionadores se construye dinámicamente partiendo del diagonal aumentando el número de entradas no nulas. Evidentemente, este preconditionador puede ser competitivo, si se trabaja en paralelo, con los tradicionales preconditionadores implícitos. Esto dependerá en gran medida del problema y de la arquitectura del ordenador. No obstante, se ha demostrado de forma teórica y práctica la eficacia de este preconditionador en la mejora la convergencia de los métodos iterativos en nuestros experimentos numéricos.

En la sección 4 hemos probado experimentalmente que las técnicas de reordenación tienen efectos beneficiosos en la ejecución de inversas aproximadas *sparse* utilizadas como preconditionadores en los métodos iterativos basados en subespacios de Krylov. La reducción del número de entradas no nulas debido a la reordenación permite obtener inversas aproximadas *sparse* con una exactitud similar a las obtenidas sin reordenación, pero con menores requerimientos de almacenamiento y coste computacional. Además, la reordenación produce preconditionadores con mejores cualidades puesto que generalmente se reduce el número de pasos para alcanzar la convergencia de los métodos iterativos. Los experimentos numéricos, pues, parecen indicar que un orden adecuado puede mejorar la eficiencia de las inversas aproximadas aquí propuestas.

7. AGRADECIMIENTOS

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

REFERENCIAS

- [1] G. Montero, L. González, E. Flórez, M.D. García and A. Suárez, Approximate inverse computation using Frobenius inner product, *Num. Lin. Algebra with Appl.* **9**, 239-247 (2002).
- [2] E. Flórez, M.D. García, L. González, G. Montero, The effect of orderings on sparse approximate inverse preconditioners for non-symmetric problems, *Advances in Engineering Software*, **33**, 611-619 (2002)
- [3] E. Flórez, *Construcción de inversas aproximadas tipo sparse basada en la proyección ortogonal de Frobenius para el preconditionamiento de sistemas de ecuaciones no simétricos*, PhD., University of Las Palmas de Gran Canaria (2003)
- [4] Benzi M, Tũma M. A sparse approximate inverse preconditioner for nonsymmetric linear systems, *SIAM J Sci Statist Comput.* 1998; **19**(3):968-994.
- [5] D.J.F Cosgrove, J.C Díaz, A.Griewank Approximate inverse preconditionings for sparse linear systems, *Int J Comput Math.* 1992; **44**:91-110.

- [6] J.C. Díaz, C.G. Macedo. Fully vectorizable block preconditionings with approximate inverses for non-symmetric systems of equations, *Int J Num. Meth. Eng.* 1987; **27**:501-522.
- [7] M. Grote, T. Huckle. Parallel preconditioning with sparse approximate inverses. *SIAM J Sci Comput.* 1997; **18**(3):838-853.
- [8] Benzi M, Tũma M. A comparative study of sparse approximate inverse preconditioners, *Appl. Num. Math.* 1999; **30**:305-340.
- [9] A. Suárez, D. García, E. Flórez, G. Montero. Preconditioning Krylov Methods. In *Algorithms for Large Scale Linear Algebraic Systems. Applications in Science and Engineering*, Winter Althaus, G. and Espedicato, E., (eds). Kluwer:Netherlands, 1998; **508**:151-174.
- [10] I.S. Duff, R.G. Grimes, J.G. Lewis. Users' Guide for the Harwell-Boeing Sparse Matrix Collection (Release 1), *Tech. report RAL-92-086*, Rutherford Appleton Laboratory, Chilton, UK, 1992.
- [11] H.A. Van der Vorst. Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems, *SIAM J Sci Statist Comput.* 1992; **13**:631-644.
- [12] M.J. Galán, G. Montero, G. Winter. A direct solver for the least-squares problem arising from GMRES(k), *Com. in Num Meth Eng.* 1994; **10**:743-749.
- [13] A. George and J.W. Liu, The evolution of the minimum degree ordering algorithms, *SIAM Rev.* **31** (1989) 1-19.
- [14] A. George, *Computer implementation of the finite element method* (Ph. D. thesis, Department of Computer Science, Stanford University, Stanford, CA, 1971).
- [15] G. Martin, Méthodes de préconditionnement par factorisation incomplete. *Mémoire de Maîtrise* (Université Laval, Québec, Canada, 1991).
- [16] P. Almeida, *Direct solution of sparse systems by graphs* (Ph. D. thesis, Mathematics Department, University of Las Palmas de Gran Canaria, Las Palmas, Spain, 1990, in Spanish).
- [17] E.H. Cuthill and J.M. Mckee, Reducing the bandwidth of sparse symmetric matrices, in: *Proc. 24th National Conference of the Association for Computing Machinery* (Bronson Press, New Jersey, 1969) 157-172.
- [18] A. George and J.W. Liu, An implementation of a pseudo-peripheral node finder, *ACM Trans. Math. Software* **5** (1979) 284-295.