

Abstract

We propose a two-phase acceleration technique for the solution of Symmetric and Positive Definite (SPD) linear systems with multiple right-hand sides. In the first phase we compute some partial spectral information related to the ill conditioned part of the given coefficient matrix and, in the second phase, we use this information to improve the convergence of the Conjugate Gradient (CG) algorithm.

This approach is adequate for large scale problems, like the simulation of time dependent differential equations, where it is necessary to solve consecutively several linear systems with the same coefficient matrix (or with matrices that present very close spectral properties) but with changing right-hand sides.

To compute the spectral information, we combine the block Conjugate Gradient algorithm with the Subspace Iteration to build a purely iterative algorithm, that we call Block-CGSI. We analyze the convergence of the blockCG algorithm and exploit the possibility of reducing the total amount of computational work by controlling in a same appropriate manner the accuracy during the solution of linear systems at each subspace iteration.

We also improve the global convergence of this algorithm by using Chebyshev polynomials as a spectral filtering tool when building the starting vectors. The concept of “*sliding window*” was also introduced as an algorithmic feature that enables the computation of a *near*-invariant subspace of any dimension.

The spectral information computed by the BlockCGSI algorithm is then used to remove the effect of the smallest eigenvalues in two different ways: either by building a Spectral Low Rank Update (SLRU) preconditioner that basically adds the value 1 to the approximated eigenvalues, or by performing a deflation of the initial residual in order to remove part of the solution corresponding to the smallest eigenvalues. Both techniques yield important reductions of the total number of iterations and computational work in each subsequent runs of the Conjugate Gradient algorithm.

We report on experiments on a 2D diffusion equation as well as on two applications coming from Computational Fluid Dynamics (CFD). The analysis of costs and benefits, in terms of floating point operations, helps to validate the strategy as a good way to speed up the solution of symmetric and positive definite linear systems.

Key words: Numerical simulations, sparse matrices, block iterative methods, preconditioning, Conjugate Gradient, block Conjugate Gradient, inexact subspace iteration, partial spectral factorization, eigenvalues and eigenvector approximation, Chebyshev polynomials, convergence analysis, stopping criterion.

Resumo

Propomos uma técnica em duas fases para acelerar a resolução de sistemas de equações lineares, simétricos e definidos positivos, com vários termos independentes. Na primeira fase uma parte da informação espectral, associada ao mau condicionamento da matriz do sistema, é extraída e, numa segunda fase, esta informação é utilizada para melhorar a convergência do método do Gradiente Conjugado (CG).

Esta abordagem tem interesse particular na resolução de problemas de grande dimensão, como por exemplo na simulação numérica de equações diferenciais dependentes do tempo, onde se resolvem sequencialmente vários sistemas de equações algébricas com matrizes idênticas ou com aproximadamente as mesmas propriedades espectrais, mas com diferentes termos independentes.

Para a extração da informação espectral, propomos uma combinação do algoritmo do Gradiente Conjugado por blocos (blockCG) com a iteração de sub-espço. O resultado consiste num algoritmo puramente iterativo, chamado BlockCGSI. Analisamos a convergência do blockCG a fim de reduzir o número total de cálculos através do controlo apropriado da resolução dos sistemas em cada iteração de sub-espço.

Melhoramos também a convergência global do algoritmo BlockCGSI através de filtros espectrais, baseados nos polinómios de Tchebycheff, aplicados sobre os vectores de partida. Introduzimos também no algoritmo o conceito de “*janela deslizante*” para permitir o cálculo de sub-espços invariantes cuja dimensão não é antecipadamente conhecida.

A informação espectral, calculada com o algoritmo BlockCGSI, é então utilizada para retirar o efeito provocado pelos valores próprios mais pequenos de duas maneiras diferentes: através da construção de um segundo nível de pré-condicionamento chamado *Spectral Low Rank Update* (SLRU) que adiciona o valor 1 aos valores próprios mais pequenos pré-calculados; ou através da projecção do resíduo inicial para retirar a parte da solução correspondente aos valores próprios mais pequenos. As duas técnicas permitem reduções importantes sobre o número total de operações efectuadas pelo CG.

O conjunto é validado através de um problema de difusão heterogénea bi-dimensional, e em duas aplicações provenientes da Mecânica dos Fluidos Computacional. A análise de custos/benefícios, em termos de número total de operações, valida a estratégia, mostrando

que a abordagem proposta permite acelerar eficientemente a resolução de sistemas lineares simétricos e definidos positivos.

Palavras chave: Simulação numérica, matrizes esparsas, métodos iterativos por blocos, précondicionamento, Gradiente Conjugado e Gradiente Conjugado par blocos, iteração de sub-espço inexacta, factorização espectral parcial, valores próprios e vectores próprios aproximados, polinómios de Tchebycheff, análise de convergência, critério de paragem.