Mecánica Computacional Vol XXV, pp. 933-946 Alberto Cardona, Norberto Nigro, Victorio Sonzogni, Mario Storti. (Eds.) Santa Fe, Argentina, Noviembre 2006

USO DE MÉTODOS MULTIGRILLA PARA RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE PROBLEMAS DE VALORES DE CONTORNO

Sofía S. Sarraf^a, Marta B. Bergallo^b y Victorio E. Sonzogni^a

^aCentro Internacional de Métodos Computacionales en Ingeniería (CIMEC) INTEC CONICET, Universidad Nacional del Litoral, Güemes 3450, 3000 Santa Fe, Argentina, ssarraf@ceride.gov.ar, http://www.cimec.org.ar

^bDepartamento de Matemática, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral, Santiago del Estero 2829, 3000 Santa Fe, Argentina, bergallo@math.unl.edu.ar,

http://math.unl.edu.ar

Palabras clave: Multigrilla, Métodos Iterativos, Sistemas Lineales.

Resumen. En este trabajo se presentan algunos resultados de la aplicación del método Multigrilla a la resolución en forma numérica de problemas de valores de contorno.

Los métodos tales como Elementos Finitos o Diferencias Finitas aplicados a estos problemas conducen a un sistema de ecuaciones algebraicas lineales. Cuando estos sistemas son muy grandes, ni los métodos directos ni los iterativos dan resultados satisfactorios. En cada iteración del método Multigrilla se trabaja con sistemas de distintos tamaños resultantes de distintos niveles de discretización (mallas gruesas y finas). Esto permite obtener resultados con un costo de cálculo menor que con los métodos iterativos clásicos.

Nuestro objetivo es implementar el método Multigrilla a un cluster del tipo BEOWULF para cálculo en paralelo. El presente trabajo constituye una primera etapa en la cual se construye un algoritmo secuencial para resolver la ecuación de Poisson en 1D y 2D por el método de Diferencias Finitas. Se compara el método Multigrilla con métodos de relajación clásicos como Gauss Seidel y Gradiente Conjugado, analizándose ventajas y desventajas entre los mismos.

1. INTRODUCCIÓN

Existen numerosos problemas físicos modelados mediante ecuaciones diferenciales que generalmente no pueden resolverse en forma analítica. Para estos casos, muchas veces se discretiza el problema de forma tal de reducirlo a la resolución de un sistema de ecuaciones algebraicas lineales. A medida que la discretización se hace más fina dicho sistema crece y el problema de resolverlo deja de ser simple.

Los métodos directos, de los cuales la Eliminación Gaussiana es el prototipo, determinan una solución en un número finito de pasos. Éstos, cuando son aplicados a matrices de dimensión $n \times n$, requieren $O(n^3)$ operaciones aritméticas.

Los métodos iterativos (o de relajación), representados por las iteraciones de Jacobi y Gauss Seidel, parten de una aproximación inicial de la solución. Su objetivo es mejorar la aproximación actual mediante una sucesión de pasos simples de actualización o iteraciones. Dicha sucesión de aproximaciones que se genera (idealmente) converge a la solución exacta del sistema lineal. Los métodos clásicos de relajación son fáciles de implementar y pueden ser aplicados satisfactoriamente a una mayor variedad de sistemas lineales que surgen de la discretización de PDE's que los métodos directos.

Luego de examinar práctica y teóricamente algunos de los métodos iterativos más comunmente utilizados, se puede establecer que muchos de ellos poseen la propiedad de suavizado. Esta propiedad permite que dichos métodos eliminen las componentes oscilantes o de alta frecuencia del error eficientemente; sin embargo las componentes suaves o de baja frecuencia permanecen relativamente sin cambio. Se busca entonces averiguar si estos métodos pueden modificarse de alguna manera para hacerlos efectivos en la reducción de todas las componentes del error.

Una forma de mejorar un esquema de relajación, en principio, es utilizando una aproximación inicial más adecuada. Una técnica conocida para obtenerla es llevar a cabo algunas iteraciones preliminares en una malla más gruesa. El proceso en dicha malla es menos costoso debido a que se tienen menos variables a ser actualizadas y además, la malla más gruesa tendrá una tasa de convergencia marginalmente mejorada.

Con esta línea de razonamiento, si se asume que se ha aplicado un esquema de relajación hasta que sólo se observen las componentes suaves del error, se considera luego cómo lucen dichas componentes en una malla más gruesa. Las componentes suaves del error en la malla fina lucen menos suaves en la malla gruesa, lo cual sugiere que cuando la relajación comienza a señalar predominación de componentes de baja frecuencia del error, es aconsejable moverse a una malla más gruesa, donde éstas aparecen más oscilatorias y la relajación será más efectiva. Ante el interrogante de cómo moverse de una malla a otra y relajar, es donde comienza a desarrollarse la técnica de los métodos Multigrilla (Arnold, 1999; Briggs W.L., 2000; Press W.H., 1988; Wesseling, 1992; Xu, 1995).

En este trabajo, se considerarán dos problemas test elípticos cuya discretización conduce a un sistema lineal de ecuaciones algebraicas. Para resolver este sistema, se utilizarán métodos iterativos como Gauss Seidel y Gradiente Conjugado y finalmente se resolverá dicho sistema mediante el método Multigrilla, estableciéndose ventajas y desventajas de uno frente a otro.

2. PROBLEMAS TEST EN UNA Y DOS DIMENSIONES

Se considera el problema de valores de borde unidimensional

$$\begin{cases} -u'' = f, & \text{en } (0,1); \\ u(0) = u(1) = 0 \end{cases}$$
 (1)

cuya solución se aproxima sobre una grilla uniforme de tamaño h usando diferencias finitas centradas. Esto conduce a la resolución de un sistema de ecuaciones lineales de la forma

$$Ax = b (2)$$

El tamaño de este sistema es inversamente proporcional a h y por lo tanto crece conforme h tiende a cero. La matriz de coeficientes A correspondiente a (2) es simétrica y definida positiva y tiene la forma

$$A = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$
 (3)

y el vector b corresponde a los valores de la función f en los nodos de la grilla. Luego, el problema de resolver (1) se ha cambiado por el de resolver (2) lo cual se puede realizar mediante métodos directos o iterativos aunque generalmente los métodos directos tienen limitaciones tanto en memoria como en tiempo de procesamiento.

Se analizarán en la siguiente sección algunos métodos iterativos clásicos que suelen utilizarse para los fines que se persiguen.

De igual forma se considera el siguiente problema test en dos dimensiones,

$$\begin{cases}
-\Delta u = f, & \text{en } (0,1) \times (0,1); \\
u(0,y) = u(1,y) = u(x,0) = u(x,1) = 0
\end{cases}$$

donde la discretización es uniforme en las dos variables, es decir, $h_x = h_y = h$, N = 1/h y corresponde a un esquema en diferencias finitas centradas de cinco puntos. El tamaño de este sistema es inversamente proporcional a h^2 creciendo conforme h tiende a cero, donde la matriz de coeficientes A correspondiente a la ecuación (4) es

$$A = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & \cdots & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & \cdots & 0 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ -1 & 0 & 0 & \cdots & 4 & -1 & \cdots & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \cdots & -1 & 4 & \cdots & 0 & 0 & -1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}$$
 (5)

la cual es simétrica y definida positiva y el vector b corresponde a los valores de la función f(x,y) en los nodos de la grilla.

3. ALGUNOS MÉTODOS ITERATIVOS PARA SISTEMAS LINEALES

Para resolver el sistema Ax = b, se consideraron los métodos de Gauss Seidel y Gradiente Conjugado.

3.1. Método de Gauss Seidel

Dada una solución inicial aproximada x_0 del sistema Ax = b, la solución exacta x se puede escribir entonces como $x = x_0 + e$, donde el error $e = x - x_0$ se relaciona con el residuo $r = b - Ax_0$ mediante la ecuación Ae = r. Es decir, se puede expresar x como una corrección residual de x_0

$$x = x_0 + A^{-1}(b - Ax_0) (6)$$

Esta ecuación no es útil a los fines prácticos debido a que el cálculo de e mediante la resolución de Ae = r es tan costoso de resolver computacionalmente como el problema original Ax = b.

En los métodos iterativos clásicos se aproxima a A^{-1} por una matriz B que sea menos costosa de obtener. En el caso particular de Gauss Seidel se toma $B=L^{-1}$ donde L es la parte triangular inferior de A incluyendo la diagonal. De esta manera, la ecuación para la iteración general de Gauss Seidel es:

$$x_{i+1} = x_i + L^{-1}(b - Ax_i) \quad i = 0, 1, 2, \cdots$$
 (7)

partiendo de una aproximación inicial x_0 . Este método es convergente para cualquier matriz simétrica y definida positiva pero, como se verá más adelante mediante experimentos numéricos simples, la convergencia es lenta.

3.2. Método del Gradiente Conjugado

Dado el sistema Ax = b, donde A es simétrica y definida positiva, se puede obtener su forma cuadrática asociada

$$\phi(x) = \frac{1}{2} \langle x, Ax \rangle - \langle b, x \rangle \tag{8}$$

donde el vector x que minimiza ϕ es la solución del sistema Ax = b y $\langle u, v \rangle = u^t v$ es el producto escalar usual en \mathbb{R}^n . Se busca entonces un mínimo para ϕ con iteración

$$x^{k+1} = x^k + \alpha^k \rho_k \tag{9}$$

donde dado x^k , el algoritmo busca una dirección ρ_k y un paso α^k a lo largo de dicha dirección para obtener la nueva iteración. Si se reescribe ϕ en función de α^k se tiene

$$\phi(x^{k+1}) = \phi(x^k + \alpha^k \rho_k) = \widetilde{\phi}(\alpha^k) \tag{10}$$

El paso α^k se calcula de forma tal que minimice $\widetilde{\phi}(\alpha^k)$. Luego,

$$\frac{d\widetilde{\phi}}{d\alpha^k}(\alpha^k) = \langle \rho_k, \frac{d\phi}{dx^k}(x^k + \alpha^k \rho_k) \rangle = \langle \rho_k, [A(x^k + \alpha^k \rho_k) - b] \rangle = 0$$
 (11)

Entonces,

$$\langle \rho_k, A\rho_k \rangle \alpha^k = \langle \rho_k, b - Ax^k \rangle$$

$$= \langle \rho_k, r^k \rangle$$
(12)

donde r^k es el residuo en la iteración k. De esta manera, el valor del paso puede calcularse como

$$\alpha^k = \frac{\langle \rho_k, r^k \rangle}{\langle \rho_k, A \rho_k \rangle} \tag{13}$$

Si bien hay varios métodos para encontrar la dirección ρ_k , se trabajó con el método del Gradiente Conjugado cuya iteración general es

$$x^{k+1} = x^0 + \alpha^0 \rho_0 + \alpha^1 \rho_1 + \dots + \alpha^k \rho_k$$
 (14)

donde las direcciones ρ_k son A-conjugadas, es decir

$$\langle \rho_i, \rho_j \rangle_A = \langle \rho_i, A \rho_j \rangle = 0 \quad \text{si } i \neq j$$
 (15)

Entonces, dada ρ_k en cada iteración se calcula el paso α^k , luego se arma la nueva iteración x^{k+1} mediante (9) y finalmente se calcula el residuo correspondiente a dicha iteración r^{k+1} . A continuación se computa la nueva dirección de búsqueda

$$\rho_{k+1} = r^{k+1} + \gamma^k \rho_k \tag{16}$$

donde γ^k se elige de modo que

$$\langle \rho_{k+1}, \rho_k \rangle_A = 0 \tag{17}$$

Se ve de esta manera que el método del Gradiente Conjugado busca determinar \boldsymbol{x}^{k+1} de modo que

$$\langle x^{k+1} - x, A(x^{k+1} - x) \rangle = \min_{v \in K_k(A, r^0)} \langle v - x, A(v - x) \rangle$$
 (18)

donde

$$K_k(A, r^0) = span\{r^0, Ar^0, A^2r^0, \cdots, A^kr^0\}$$
 (19)

Este método, converge en a lo sumo n+1 iteraciones para A de dimensión n.

3.3. Aplicaciones Prácticas

En una primera instancia y con el fin de calcular errores exactos, se analizan los distintos métodos de resolución sobre el problema concreto de la forma (1) cuya solución exacta es

$$u(x) = 100x(x-1)\sin((x-1/2)^2/2)$$
(20)

y se resuelve el sistema (2) mediante algunos métodos iterativos partiendo de una aproximación inicial aleatoria en todos los casos.

Primeramente se aplicó el método de Gauss Seidel al sistema Ax=b asociado a la ecuación diferencial (1) para particiones de distinto tamaño. A continuación se presentan algunas gráficas de las primeras iteraciones de este método para el caso particular $h=2^{-7}$ en las que se observa claramente la propiedad de suavizado. Es decir, partiendo de una aproximación inicial aleatoria y por lo tanto muy oscilante, puede verse cómo en las primeras iteraciones la solución es suavizada en el sentido de la disminución de las oscilaciones.

En las figuras 1 y 2 se muestran, respectivamente, la aproximación inicial y la primera iteración del método de Gauss Seidel confrontadas con la solución nodal exacta (20). En las figuras 3 y 4 se exhiben la cuarta y vigésima iteración respectivamente. En estas figuras se observa cómo las soluciones aproximadas obtenidas son suavizadas luego de unas pocas iteraciones. Si se aplica el método del Gradiente Conjugado al sistema Ax = b asociado a la ecuación diferencial (1) para el mismo b se observa claramente, al igual que en el método de Gauss Seidel, la propiedad de suavizado (véanse figuras 5 a 8).

Esta misma propiedad se aplica lógicamente sobre los errores. Sin embargo, como se muestra en la figura 9 el error no se reduce con la misma rapidez con que se produce el suavizado. En esta figura se graficó el error relativo de aproximación por iteración para ambos métodos con $h=2^{-7}$, habiéndose truncado luego de la iteración 128 el error relativo correspondiente a Gauss Seidel para llevar a cabo la comparación.

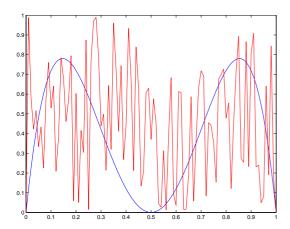


Figura 1: Aproximación inicial para el método de Gauss Seidel para $h=2^{-7}$

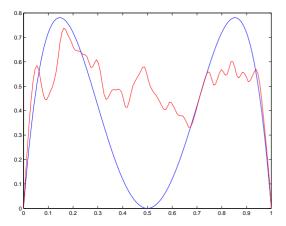


Figura 3: Iteración 4 con el método de Gauss Seidel para $h=2^{-7}$

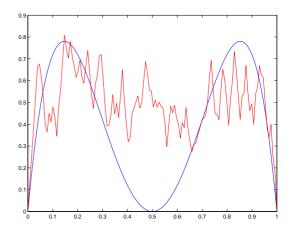


Figura 2: Primera iteración con el método de Gauss Seidel para $h=2^{-7}$

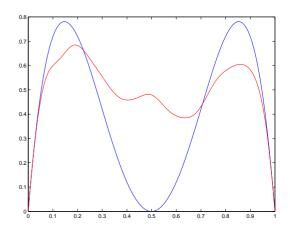


Figura 4: Iteración 20 con el método de Gauss Seidel para $h=2^{-7}$

En el método de Gradiente Conjugado, para el problema (1) en particular, cada iteración sólo requiere O(n) operaciones debido a que la matriz (3) es rala (tridiagonal). Este método es de convergencia lineal

$$||e_i|| = Cr^i, \tag{21}$$

donde la tasa es

$$r = \frac{\sqrt{\kappa(A)} - 1}{\sqrt{\kappa(A)} + 1}, \quad \kappa(A): \text{ número de condición de } A$$
 (22)

y, si se utiliza la norma $||u||_A = \sqrt{u^t A u}$, entonces $C = 2||e_0||_A$ (Arnold, 1999). Debido a que el número de condición del Laplaciano discreto en una o más dimensiones es $O(h^{-2})$ (Arnold, 1999), la tasa de convergencia lineal es sólo de 1 - O(h).

El método de Gauss Seidel, será convergente si el radio espectral de la matriz de iteración G = I - BA es menor que 1, donde la matriz B es la aproximación a la inversa de A, siempre que la matriz A sea simétrica y definida positiva. Para este problema en particular, la tasa de convergencia es $1 - O(h^2)$ (Arnold, 1999), por lo tanto es lenta y no es competitiva con Gradiente Conjugado como puede observarse en los resultados prácticos obtenidos.

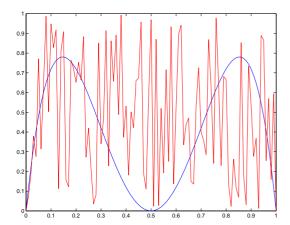


Figura 5: Aproximación inicial para el método de Gradiente Conjugado para $h=2^{-7}$

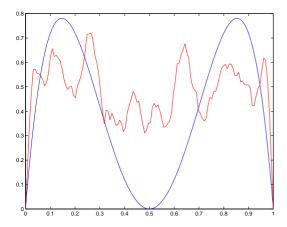


Figura 7: Iteración 4 con el método de Gradiente Conjugado para $h=2^{-7}$

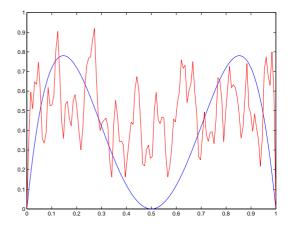


Figura 6: Primera iteración con el método de Gradiente Conjugado para $h=2^{-7}$

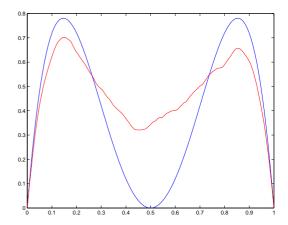


Figura 8: Iteración 20 con el método de Gradiente Conjugado para $h=2^{-7}$

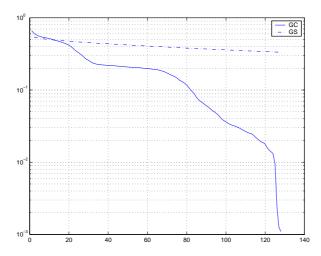


Figura 9: Error relativo en función del número de iteraciones para el método de Gauss Seidel y Gradiente Conjugado con $h=2^{-7}$

4. MÉTODO MULTIGRILLA

4.1. Descripción del Método

La idea detrás del método Multigrilla es crear una técnica iterativa que reduzca simultáneamente todas las componentes del error mediante los siguientes pasos:

- Se realizan unas pocas iteraciones de algún método iterativo que suavice al residuo, tal como Gauss Seidel u otro método iterativo clásico, el cual reducirá las componentes de alta frecuencia de dicho residuo pero lo hará en menor medida en las componentes de baja frecuencia. El nuevo residuo, siendo relativamente suave, se puede entonces aproximar adecuadamente sobre una partición más gruesa.
- El residuo se proyecta sobre la malla gruesa y la ecuación se resuelve allí, reduciéndose ahora las componentes de baja frecuencia sobre la malla más gruesa (debido a que en la malla gruesa las componentes suaves de la malla fina se comportan como componentes de alta frecuencia) donde la dimensión del sistema decrece y por ello la resolución sobre la misma es menos costosa.
- En una primera instancia, supondremos que dicha solución se realiza mediante algún método directo apropiado, pero una opción más adecuada podría ser reducir el tamaño de las mallas hasta resolver un sistema de uno por uno.
- Finalmente, esta solución sobre la malla gruesa es de alguna manera transferida a la malla fina donde se la utiliza para mejorar la aproximación suavizada que se tenía.

4.2. Iteración de Dos Grillas

El siguiente algoritmo describe los pasos que se deben realizar para obtener, a partir de una aproximación inicial x_0 , la siguiente iteración x_1 generada por el método Multigrilla de Dos Mallas.

- 1. Se parte de una aproximación inicial x_0 y se realizan algunas pocas iteraciones con algún método iterativo clásico para suavizarla. De esta manera, se obtiene una aproximación mejorada \overline{x} .
- 2. Se transfiere a la malla gruesa el residuo asociado a \overline{x} , se resuelve allí la nueva versión del problema y se vuelve a transferir esta solución a la malla fina. Se usa ésta para corregir la aproximación \overline{x} del paso anterior, resultando así una nueva aproximación $\overline{\overline{x}}$.
- 3. A partir de $\overline{\overline{x}}$ se vuelve a aplicar el suavizado para obtener una aproximación mejorada $\overline{\overline{x}}$. Se toma ésta como la siguiente iteración x_1 del método de Dos Grillas.

La inclusión de este último paso permite obtener una iteración de Dos Grillas simétrica que podria ser ventajosa de quererse utilizar Multigrilla como precondicionador de Gradiente Conjugado. Si la inversa aproximada de A utilizada para el primer paso de suavizado no es simétrica (como por ejemplo con Gauss Seidel), es necesario aplicar B^t (la cual es también una inversa aproximada de A, debido a que A es simétrica).

Para la construcción del segundo paso, se supone N=1/h par y se pretende resolver $A_hx=b$ donde A_h es la matriz correspondiente a (2) asociada a la malla de tamaño h. Se usará una malla de tamaño H=2h como grilla gruesa. El primer paso de la iteración es entonces

$$\overline{x} = x_0 + B_h(b - A_h x_0) \tag{23}$$

donde B_h es la aproximación de la inversa de A_h proveniente de una iteración suavizante tal como el método de Gauss Seidel. El residuo resultante es $b-A_h\overline{x}$, el cual está asociado a los puntos de la malla fina $h, 2h, \cdots, (N-1)h$ y una forma de proyectar dicho residuo a la malla gruesa es restringirlo a los puntos pares $2h, 4h, \cdots, (N-2)h$, es decir a los nodos $H, 2H, \cdots, (N/2-1)H$, los cuales son exactamente los puntos interiores de la malla gruesa. Este operador se denomina operador restricción de la malla fina a la gruesa y se simboliza $P_H: \mathbb{R}^{N-1} \to \mathbb{R}^{N/2-1}$. Luego, mediante un método directo se resuelve el sistema

$$A_H e_H = P_H (b - A_h \overline{x}) \tag{24}$$

cuya dimensión es claramente menor que la de A_h .

Para transferir la solución e_H de este último sistema a la malla fina, se utiliza el *operador de prolongación* $Q_H: \mathbb{R}^{N/2-1} \to \mathbb{R}^{N-1}$. Es natural tomar $Q_H e_H(jh) = e_H(jh)$ si j es par, pero cuando j es impar una elección simple de implementar es

$$Q_H e_H(jh) = [e_H((j-1)h) + e_H((j+1)h)]/2$$
(25)

es decir, se define $Q_H e_H$ en el punto medio de dos puntos adyacentes de la malla gruesa como el promedio de los valores de e_H en los mismos.

Con estos dos operadores, el segundo paso toma la forma

$$\overline{\overline{x}} = \overline{x} + Q_H e_H = \overline{x} + Q_H A_H^{-1} P_H (b - A_h \overline{x})$$
(26)

y el paso posterior de suavizado es

$$\overline{\overline{\overline{x}}} = \overline{\overline{x}} + B_b^t (b - A_b \overline{\overline{x}}) \tag{27}$$

lo cual no da una iteración simétrica. Para tener simetría, se necesita que la relación entre los operadores P_H y Q_H sea $Q_H=cP_H^t$, relación que no se verifica en la descripción anterior. En efecto, se tiene entonces

$$Q_{H} = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1/2 \end{pmatrix}$$

$$(28)$$

y el operador P_H descripto antes está formado por 0's y 1's. Luego, a fin de tener simetría, se hace la siguiente elección

$$P_H = \frac{1}{2}Q_H^t \tag{29}$$

Esto significa que la función proyectada sobre la malla gruesa no toma simplemente el valor correspondiente de la función sobre la malla fina en los nodos en común, sino que realiza un promedio ponderado de los valores de la función sobre la malla fina en estos nodos (nodos de la malla gruesa) y aquellos de la malla fina a izquierda y derecha de éstos, usando pesos 1/2, 1/4 y 1/4 respectivamente. Con tal elección, $Q_H A_h P_H$ es simétrica y se tiene que $A_H = Q_H A_h P_H$.

Para otros operadores, no sólo para el caso del Laplaciano unidimensional, se pueden utilizar estos operadores de restricción y prolongación.

En el caso particular del problema bidimensional (4), el operador de prolongación Q_H tiene la siguiente forma:

$$Q_{H} = \begin{pmatrix} 1/4 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1/4 & 1/4 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 1/4 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1/4 & 1/4 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1/4 \end{pmatrix}$$

$$(30)$$

y el operador de restricción puede adoptarse como $P_H = \frac{1}{4}Q_H^t$

4.3. Iteración de Multigrilla

Con el objetivo de obtener un algoritmo más eficiente, se piensa en resolver el problema en la malla gruesa utilizando una iteración de dos grillas allí, involucrando así una malla aún más gruesa. Se aplica esta idea recursivamente, utilizando iteraciones de multigrilla en cada nivel de malla hasta obtener una malla sufientemente gruesa (h=1/2) en la cual se resuelve de manera exacta un sistema con una de 1×1 .

Una iteración de Multigrilla desde la grilla más fina a grillas más gruesas y volviendo a la grilla fina, se denomina cycle. La estructura exacta de un cycle depende del valor de γ , el número de iteraciones de dos grillas en cada paso intermedio. El caso $\gamma=1$ se denomina V-cycle, mientras que $\gamma=2$ es llamado W-cycle (ver figura 10)

4.4. Aplicaciones Prácticas

Se aplicó el método Multigrilla al sistema Ax = b asociado a la ecuación diferencial (1) con solución exacta dada por (20) para el caso particular $h = 2^{-7}$.

Se utilizó una iteración del método de Gauss Seidel como técnica suavizante del error en los pasos 1 y 3 de cada iteración de dos grillas, partiendo de una aproximación inicial aleatoria. Para la resolución mediante un método directo del sistema sobre la malla más gruesa, se utilizó el algoritmo de Thomas (Fletcher, 1997).

En la figura 11 se muestra la aproximación inicial mientras que en las figuras 12 y 13 se muestran la primera y segunda iteración del método Multigrilla confrontadas con la solución exacta (20) del problema. En estas figuras se observan las mismas propiedades de suavizado que en los métodos anteriores.

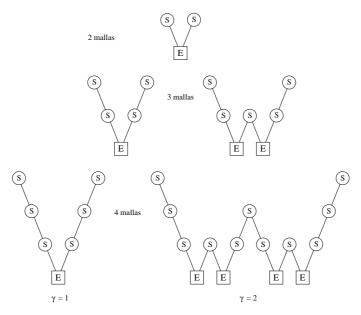


Figura 10: Diagrama del método Multigrilla

La diferencia frente a los métodos mencionados anteriormente no es sólo la cantidad de iteraciones necesarias para obtener la convergencia, sino que en cada iteración del mismo la propiedad de suavizado se observa en todas las componentes del error, no solamente en las de alta frecuencia. Para notar cómo se comporta el error, se graficó el error relativo de aproximación en cada iteración del método para ambos *cycles* y se observó cómo en las primeras iteraciones se lleva a cabo la mayor parte del suavizado (véase figura 14).

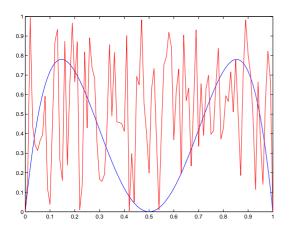


Figura 11: Aproximación inicial aleatoria para el Método Multigrilla con $h=2^{-7}$

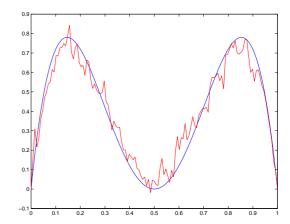


Figura 12: Primera iteración para el Método Multigrilla $h=2^{-7}$

La convergencia del algoritmo de Multigrilla es notable. Para este problema puede mostrarse que la iteración es linealmente convergente con una tasa independiente del tamaño de la malla (Arnold, 1999). Esto significa que el número de iteraciones necesarias para obtener una tolerancia deseada permanece acotado independientemente de h. Si se cuenta el número de operaciones por iteración, cada una de ellas involucra dos aplicaciones de la iteración de suavizado, más el cálculo del residuo, la restricción, prolongación y corrección sobre el nivel de la malla más fina. Todos estos procedimientos cuestan O(N) operaciones (Arnold, 1999). Pero entonces, durante

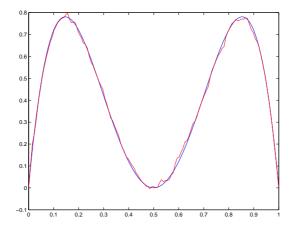


Figura 13: Segunda iteración para el Método Multigrilla con $h=2^{-7}$

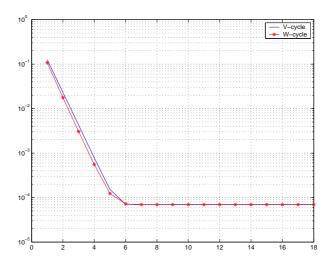


Figura 14: Error Relativo en función del número de iteraciones para el Método Multigrilla para $\emph{V-cycle}$ y $\emph{W-cycle}$ con $h=2^{-7}$

la resolución en la malla gruesa, los mismos procedimientos se aplican ahora sobre la malla de tamaño 2h, induciendo un costo adicional de O(N/2). Debido a la recursión dicho cálculo será llevado a cabo para cada malla de tamaño $h, 2h, 4h, \cdots$. Así el trabajo total por iteración será $O(N+N/2+N/4+\cdots+1)=O(N)$, es decir, el trabajo total realizado para obtener la solución del sistema discreto es de O(N) para cualquier tolerancia.

A continuación se presentan tablas comparativas de los métodos presentados para cada problema test, obteniendo la convergencia en cada caso con la norma del residuo satisfaciendo una tolerancia dada.

Como puede observarse de las tablas 1 y 2, el método de Gauss Seidel necesita $O(N^2)$ iteraciones para converger, realizando $O(N^3)$ operaciones totales para el problema test 1D. Su desventaja frente a los otros métodos es remarcable, principalmente a medida que N crece. Por esta razón no se lo incluye en la comparación para la discretización más pequeña (tabla 3).

$N = 2^7 \ tol = 10^{-6}$	tiempo [s]	iteraciones	op./it.	op. totales	$\ e^h\ $
Gauss Seidel	168.3120	27906	1271	35468526	0.0062
Gradiente Conjugado	0.0780	128	1.9210e+003	245882	0.0062
Multigrilla V-cycle	0.1560	17	9.6932e+003	164784	0.0063
Multigrilla W-cycle	0.9840	17	61840	1051280	0.0063

Tabla 1: Problema test 1D para $N=2^7$.

$N = 2^8 \ tol = 10^{-6}$	tiempo $[s]$	iteraciones	op./it.	op. totales	$\ e^h\ $
Gauss Seidel	1.2892e+003	112718	2551	287543618	0.0022
Gradiente Conjugado	0.2190	256	3.8410e+003	983290	0.0022
Multigrilla V-cycle	0.1720	18	2.0038e+004	360689	0.0022
Multigrilla W-cycle	2.0940	18	5.8404e+004	1051280	0.0022

Tabla 2: Problema test 1D para $N=2^8$.

$N = 2^{10} \ tol = 10^{-6}$	tiempo [s]	iteraciones	op./it.	op. totales	$\ e^h\ $
Gradiente Conjugado	1.8600	1024	1.5361e+004	15729658	2.7623e-004
Multigrilla V-cycle	0.2970	20	8.2731e+004	1654615	2.7663e-004
Multigrilla W-cycle	9.7340	20	312588	6251760	2.7663e-004

Tabla 3: Problema test 1D para $N = 2^{10}$.

$N = 2^7 \ tol = 10^{-6}$	tiempo [s]	iteraciones	op./it.	op. totales	$ e^h $
Gradiente Conjugado	1.1090	136	524250000	7.1298e+010	0.3140
Multigrilla V-cycle	3.0620	12	2.7570e+009	3.3084e+010	0.0437
Multigrilla W-cycle	3.2190	12	2.9123e+009	3.4948e+010	0.0437

Tabla 4: Problema test 2D para $N=2^7$.

$N = 2^8 \ tol = 10^{-6}$	tiempo [s]	iteraciones	op./it.	op. totales	$\ e^h\ $
Gradiente Conjugado	10.7810	261	8.4897e+009	2.2158e+012	0.9647
Multigrilla V-cycle	10.0780	12	4.4885e+010	5.3862e+011	0.0218
Multigrilla W-cycle	14.8440	12	4.7475e+010	5.6970e+011	0.0218

Tabla 5: Problema test 2D para $N=2^8$.

$N = 2^9 \ tol = 10^{-6}$	tiempo $[s]$	iteraciones	op./it.	op. totales	$ e^h $
Gradiente Conjugado	104.9850	561	1.3661e+011	7.6640e+013	0.8118
Multigrilla V-cycle	54	13	7.2948e+011	9.4832e+12	0.0109
Multigrilla W-cycle	75.0940	13	7.7209e+011	1.0037e+013	0.0109

Tabla 6: Problema test 2D para $N=2^9$.

El método de Gradiente Conjugado converge en O(N) iteraciones, siendo más eficiente que Multigrilla para N pequeños. A medida que N crece los métodos Multigrilla resultan menos costosos dado que el número de iteraciones hasta la convergencia permanece acotado.

Relativo a los dos métodos Multigrilla presentados, el V-cycle parece superior al W-cycle en vista de los resultados presentados. Esto se debe a que la cantidad de grillas utilizadas fue siempre $\log N/\log 2$, es decir, h=1/2 para la malla más gruesa. Empleando un número menor de mallas, el W-cycle resulta más eficiente que el V-cycle a medida que N crece.

Para el caso bidimensional, se resuelve (2) pero ahora sobre el problema concreto de la forma (4) cuya solución exacta es

$$u(x,y) = \sin(4\pi x)\sin(2\pi y) \tag{31}$$

Los resultados para este problema (tablas 4 a 6) son similares al del problema 1D recien discutidos, donde el conteo de operaciones para los métodos se realizó para matrices llenas. El método de Gauss Seidel no se incluyó en la comparación dado que el mismo realiza $O(N^4)$ operaciones en total para alcanzar la convergencia (Arnold, 1999).

5. CONCLUSIONES

En el presente trabajo fueron presentados resultados preliminares de una implementación del método Multigrilla aplicado a la resolución del sistema algebraico que surge de la discretización de dos problemas test elípticos en 1 y 2 dimensiones. El método fue confrontado con otras técnicas de relajación clásicas como Gauss Sediel y Gradiente Conjugado. Los resultados obtenidos se ajustan a los teóricos, disponibles para los test propuestos. La estrategia de Multigrilla se mostró más eficiente al aumentar el tamaño del sistema a resolver, en especial frente al método de Gradiente Conjugado, el cual posee una tasa de convergencia pobre para matrices mal condicionadas.

Se plantea como trabajo futuro el desarrollo del método Multigrilla en un contexto de Elementos Finitos como así también su implementación en paralelo a fin de aplicarlo a la resolución de problemas de interés práctico.

REFERENCIAS

D.N. Arnold. A Concise Introduction to Numerical Analysis. *University of Minnesota*, 1999. McCormick S.F Briggs W.L., Hemson V.E. *A Multigrid Tutorial*. SIAM, 2000.

C.A.J. Fletcher. *Computational Techniques for Fluid Dynamics 1: Fundamental and General Techniques*. Springer, 1997.

Teukolsky S.A. Vetterling W.T. Press W.H., Flannery B.P. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 1988.

P. Wesseling. An Introduction to Multigrid Methods. John Wiley & Sons, 1992.

Jinchao Xu. An Introduction to Multigrid Convergence Theory. Winter School on Iterative Methods in Scientific Computing and Their Applications, 1995.