

Exercício 4 - Precondicionadores e Reordenamento

Lorena B. Bassani

2021

Abstract

Este documento relata os resultados do terceiro exercício da disciplina de Algoritmos Numéricos II, no semestre 2021/01 EARTE. O objetivo é observar o comportamento do Método dos Gradientes Conjugados e GMRES para um conjunto de matrizes esparsas da *SuiteSparse Matrix Collection*¹ considerando preconditionamento e reordenamento.

1 Introdução

Para a primeira etapa deste exercício, foram utilizadas quatro matrizes quadradas esparsas, a *mesh3em5* de 289 linhas e colunas, a *662_bus* com 662, a *pdb1HYS* com 36.417 e a *Dubcova3* de dimensão 146.689, e para a segunda etapa, foram utilizadas três matrizes quadradas esparsas, a *cavity05* com 1.182 linhas e colunas, a *cz2548* com 2.548 e a *epb3* de dimensão 84.617, obtidas da coleção de matrizes esparsas *SuiteSparse Matrix Collection*. Nessas sete matrizes, foram realizadas análises quanto ao comportamento da aplicação de diferentes preconditionadores, com e sem reordenamento, utilizando a ferramenta Octave. Na seção 2 são relatadas algumas observações sobre a utilização deste método para resolução de sistemas lineares, e na última parte do trabalho, nas seções 3 e 4, se encontram as figuras e as tabelas com os resultados obtidos, respectivamente.

2 Exercício Proposto – Precondicionadores e Reordenamento

O objetivo deste exercício é observar o comportamento de matrizes esparsas na solução de sistemas lineares via métodos iterativos não estacionários, considerando preconditionamento e reordenamento. Para isto, as matrizes escolhidas foram submetidas a métodos de preconditionamento e reordenamento e utilizadas como matriz de coeficientes para solução de sistemas lineares através de método nativo do Octave, e foram observados uma série de fatores quanto ao comportamento das matrizes a respeito da convergência da resposta e seu número de condicionamento.

¹<https://sparse.tamu.edu>

2.1 Fatoração Incompleta de Cholesky – ICC

Na primeira parte do exercício, foi estudado o método da fatoração incompleta de Cholesky-ICC. Para isto, cada uma das quatro primeiras matrizes eram submetidas a duas configurações diferentes do método: a fatoração ICC(0), ou *incomplete Cholesky with zero-fill*², e a fatoração *incomplete Cholesky with threshold dropping*. Cada uma foi realizada com e sem reordenamento. O resultado foi testado aplicando-o como entrada para o método dos gradientes conjugados, estudado no Exercício 2.

O método dos gradientes conjugados é um dos métodos que levariam a uma resposta exata em n passos, a menos de erros de arredondamento, porém, levando em consideração que a maior parte do decrescimento do erro ocorre nos passos primários, ele é tratado como método iterativo, parando após atingir critérios de tolerância do erro. Isso faz com que o método, para matrizes bem condicionadas, convirja rapidamente, em pouquíssimas iterações quando comparado a dimensão da própria matriz. A ideia do uso de preconditionadores é melhorar o condicionamento da matriz de entrada, para melhorar a convergência do método.

Um dos passos realizados nas duas menores matrizes para verificar a diferença entre a matriz original e a matriz resultante do preconditionamento foi calcular o número de condicionamento delas³. Na *mesh3em5*, o preconditionamento não alterou o número de condicionamento de forma significativa, de forma que este permaneceu o mesmo até as primeiras quatro casas decimais. O número de condicionamento dessa matriz ficou, assim, próximo de 4,9659 tanto na original quanto nas preconditionadas. Já na matriz *662.bus*, o método de preconditionamento diminuiu o número de preconditionamento, levando de $7,941 \times 10^5$ para seu menor número em $5,903 \times 10^3$ com o preconditionamento ICC(0) sem reordenamento.

Outras observações realizadas antes de submeter as matrizes ao método dos gradientes conjugados foi a alteração do número de elementos não nulos. A matriz *mesh3em5* possuía originalmente 1.377 elementos não nulos, atingindo um máximo de 1.891 com o preconditionamento ICC(0) sem reordenamento, e um mínimo de 833 no ICC, tanto com quanto sem reordenamento. Na matriz *662.bus*, que tinha originalmente 2.474 elementos não nulos, encontrou um máximo de 5.910 no preconditionamento ICC sem reordenamento. A matriz *pdb1HYS* saiu de 4.344.765 elementos não nulos para um máximo de 10.409.889 com o preconditionamento ICC(0) sem reordenamento. Por fim, a matriz *Dubcova3* partindo de 3.636.643 elementos não nulos, conseguiu aumentar até 52.898.003 no preconditionamento ICC sem reordenamento. Com exceção da *mesh3em5* que conseguiu diminuir o número de elementos não nulos com o ICC, as matrizes tiveram aumentos significativos de elementos não nulos.

Ao aplicar os métodos de preconditionamento nas matrizes, foram encontrados problemas no ICC para a matriz *pdb1HYS*. Em ambos casos, o método retornou com

²De acordo com a documentação do método Octave `ichol`, disponível em: <https://octave.sourceforge.io/octave/function/ichol.html>

³As matrizes *pdb1HYS* e *Dubcova3* não permitiram o cálculo do número de condicionamento por serem muito grandes, causando fechamento forçado do programa Octave depois de certo tempo do início da operação. A operação de cálculo de condicionamento é tão ou até mais custosa do que a própria solução do sistema linear, podendo até não ser possível em alguns casos, como observado.

o erro *negative pivot encountered*. Dessa forma, esta matriz foi estudada apenas quanto a aplicação do ICC(0) com e sem reordenamento. Além de gerar gráficos para comparação da solução para a melhoria na convergência das matrizes, algumas matrizes menores puderam ser observadas quanto ao preenchimento através do método spy⁴.

2.2 Fatoração LU incompleta – ILU

Na segunda parte do exercício, foi estudado o método da fatoração LU incompleta–ILU. Para isto, as três últimas matrizes da lista foram submetidas a duas configurações diferentes do método: a fatoração ILU(0), ou *ILU factorization with no fill-in*⁵, e a *Crout version of ILU factorization*. Cada uma foi realizada com e sem reordenamento. O resultado foi testado aplicando-o como entrada para o método do resíduo mínimo generalizado, ou GMRES, estudado no Exercício 3.

O método do resíduo mínimo generalizado é um método iterativo não estacionário para resolver sistemas com matrizes quadradas esparsas não-simétricas, que baseia-se nos métodos de projeção ortogonal sobre um subespaço de Krylov. Sua versão pura garante convergência em no máximo n iterações, porém sua complexidade temporal é de $\mathcal{O}(n^3)$ e complexidade espacial é de $\mathcal{O}(n^2)$, tornando-o computacionalmente muito custoso para n muito grande. Dessa forma, neste trabalho utiliza-se a versão reiniciada, onde se considera um subespaço de krylov de dimensão k , iterando sob a diminuição do resíduo. Sua complexidade temporal se torna $\mathcal{O}(kn^2)$ e complexidade espacial $\mathcal{O}(kn)$. Infelizmente, essa versão perde a garantia de convergência e ainda possui a dificuldade inerente de encontrar um valor ideal para k . Para esta atividade, foram utilizados os valores de k retirados dos resultados do experimento do Exercício 3.

Um dos passos realizados das duas menores matrizes para verificar a diferença entre a matriz original e a matriz resultante do condicionamento foi calcular o número de condicionamento delas⁶. A matriz *cavity05* possuía um número de condicionamento igual a $5,77 \times 10^5$ originalmente, e conseguiu diminuir para $7,245 \times 10^4$ com o condicionamento ILU sem reordenamento. Enquanto a matriz *cz2548* conseguiu diminuir seu número de condicionamento de $2,564 \times 10^6$ para um mínimo de $1,026 \times 10^5$ com o condicionamento ILU(0) sem reordenamento.

Outras observações realizadas antes de submeter as matrizes ao método do resíduo mínimo generalizado foi a alteração do número de elementos não nulos. Na matriz *cavity05*, com originalmente 32.632 elementos não nulos, teve um aumento para 133.644 elementos não nulos com o condicionamento ILU sem reordenamento. A matriz *cz2548*, partindo de 25.674 elementos não nulos, teve um aumento pequeno para 39.000 elementos não nulos, quando comparado com a *cavity05*. Por último, a matriz *epb3*, que tinha originalmente 463.625 elementos não nulos, chegou a 1.500.473 elementos

⁴Não foi possível gerar visualização da matriz *Dubcova3* por questões de limitação de memória da máquina utilizada para o trabalho

⁵De acordo com a documentação do método Octave *ilu*, disponível em: <https://octave.sourceforge.io/octave/function/ilu.html>

⁶A matriz *epb3* não permitiu o cálculo do número de condicionamento por ser muito grande, da mesma forma que as matrizes *pdb1HYS* e *Dubcova3*, observadas anteriormente.

não nulos no condicionamento ILU com reordenamento.

Durante a aplicação dos condicionadores, a matriz *cavity05* teve problema em todos os casos menos para o condicionamento ILU sem reordenamento. Para a mesma versão com reordenamento, foi obtido o erro *encountered a pivot equal to 0*, enquanto que para o condicionamento ILU(0) foi encontrado o erro *A has a zero on the diagonal* tanto com quando sem reordenamento. Dessa forma, a matriz foi estudada apenas quanto a aplicação do ILU sem reordenamento. Além de gerar gráficos para comparação da solução quanto a melhoria na convergência das matrizes, foram geradas imagens para observação do preenchimento das matrizes através do método spy.

3 Figuras dos resultados observados

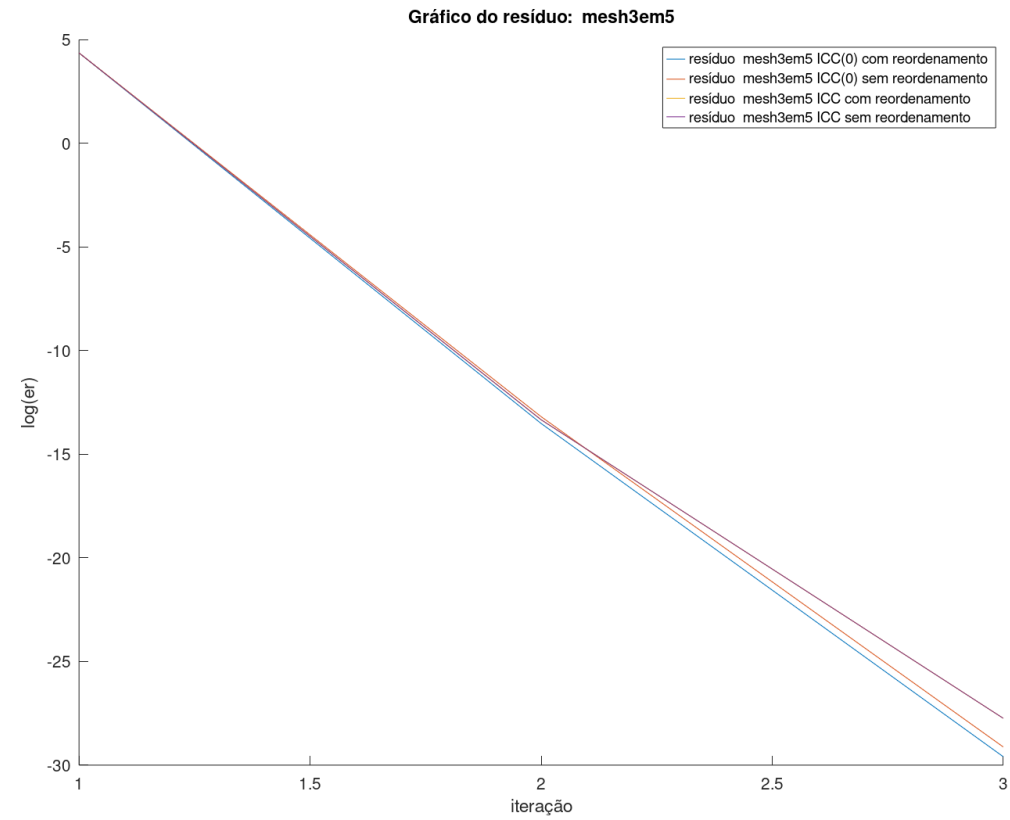


Figure 1: Gráfico do Resíduo da matriz *mesh3em5*

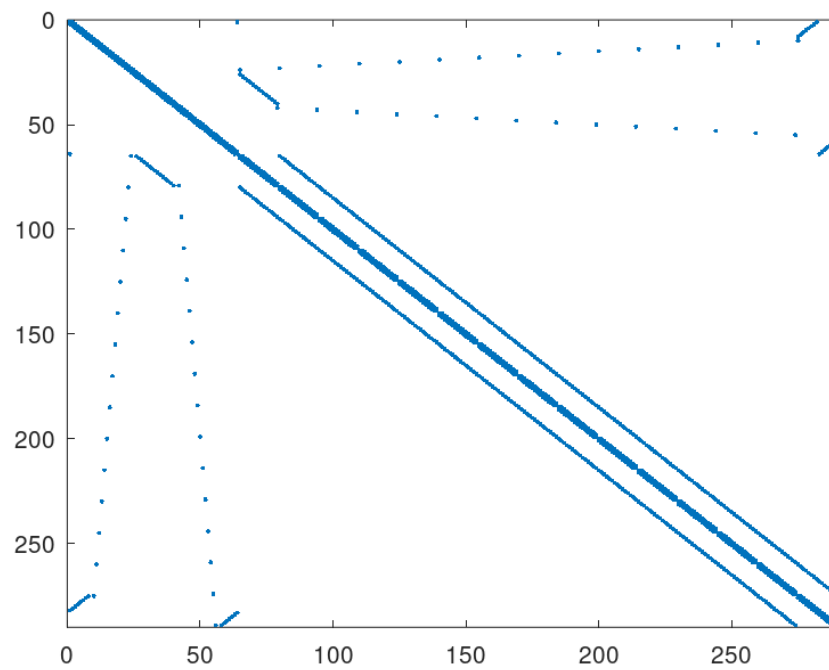
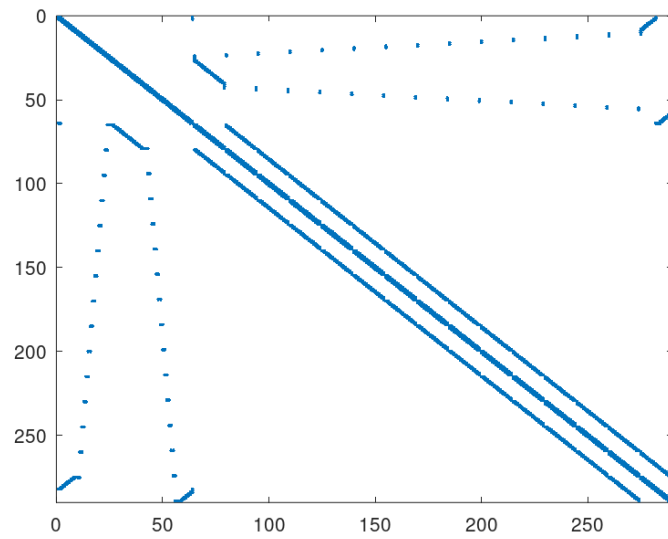
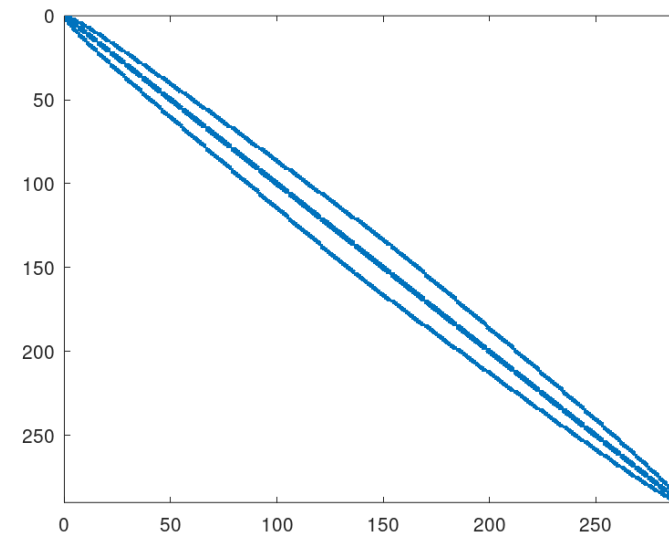


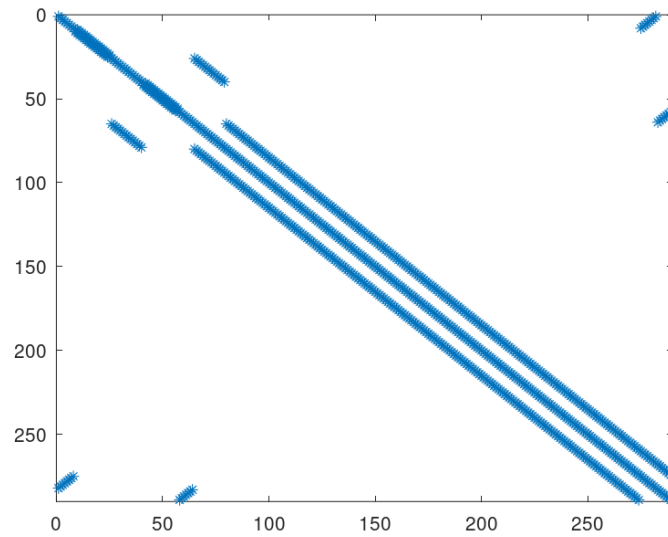
Figure 2: Spy de da matriz *mesh3em5*



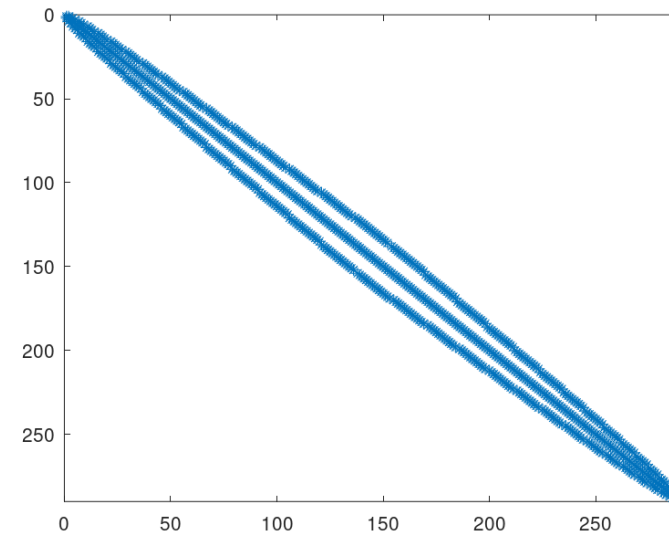
(a) Spy após ICC(0) sem reordenamento



(b) Spy após ICC(0) com reordenamento



(c) Spy após ICC sem reordenamento



(d) Spy após ICC com reordenamento

Figure 3: Gráficos do preenchimento de *mesh3em5*.

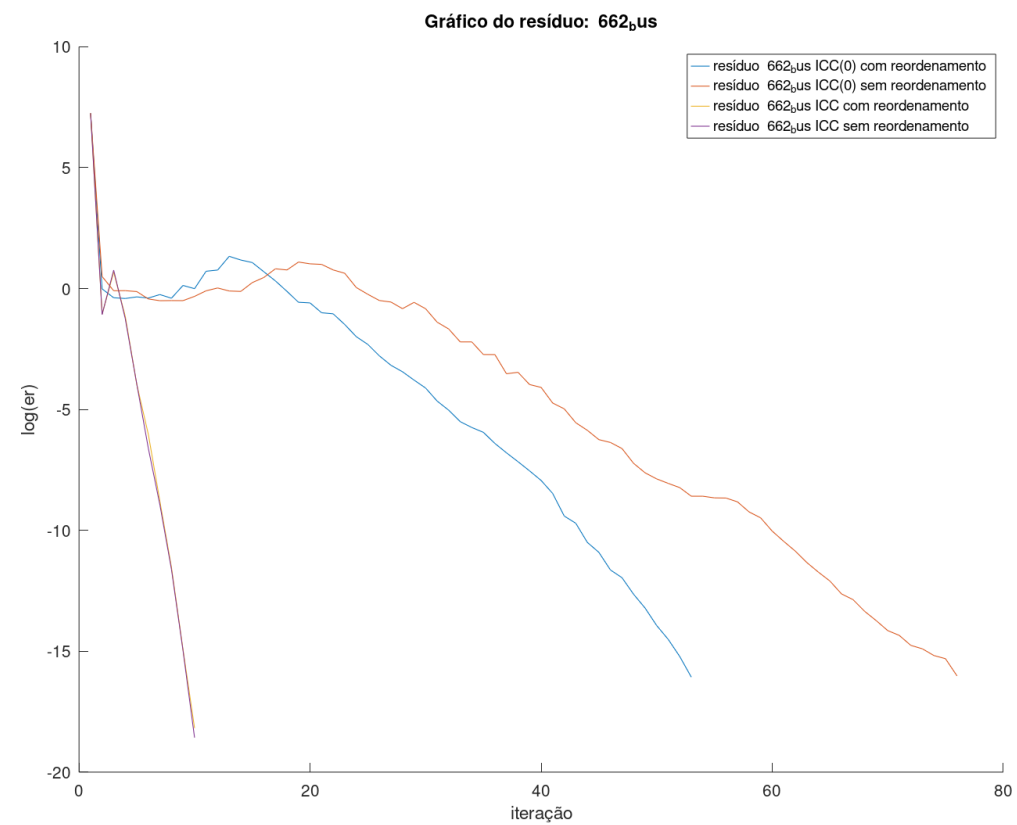


Figure 4: Gráfico do Resíduo da matriz 662_{bus}

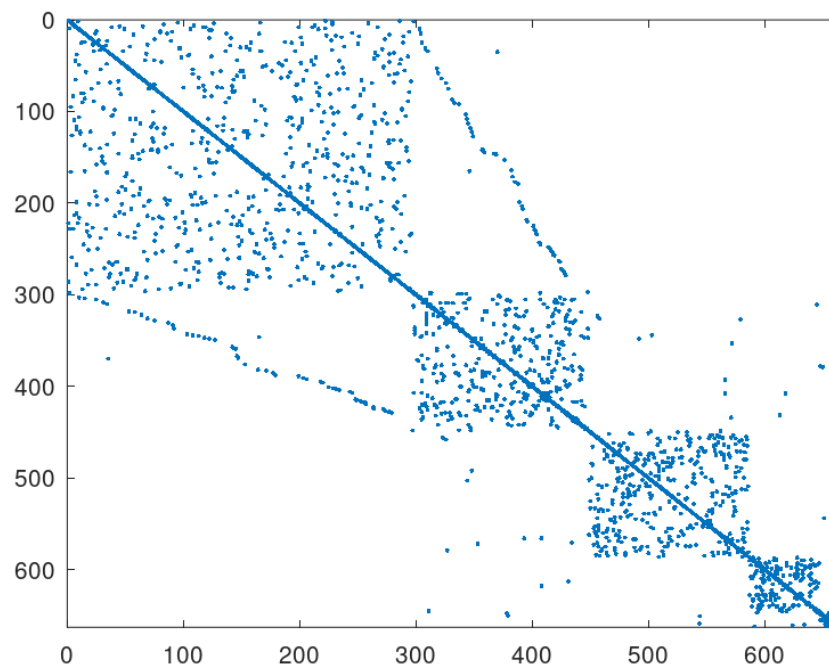
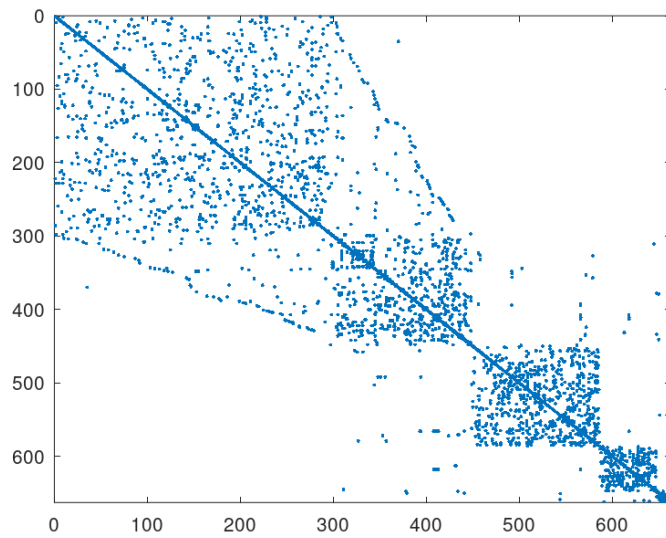
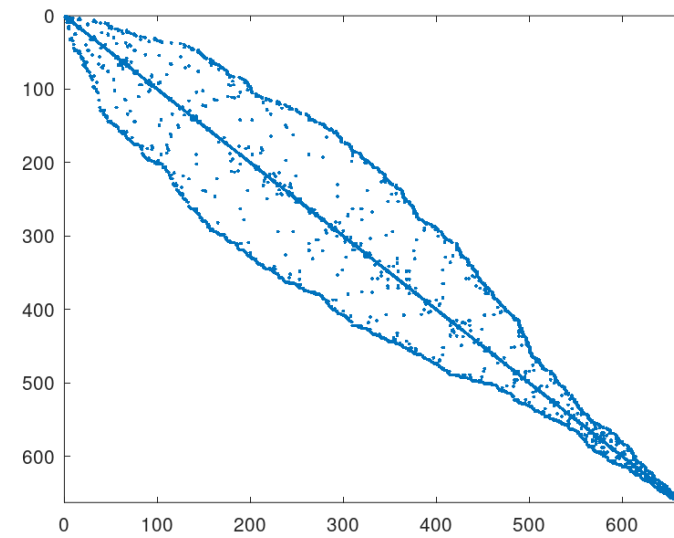


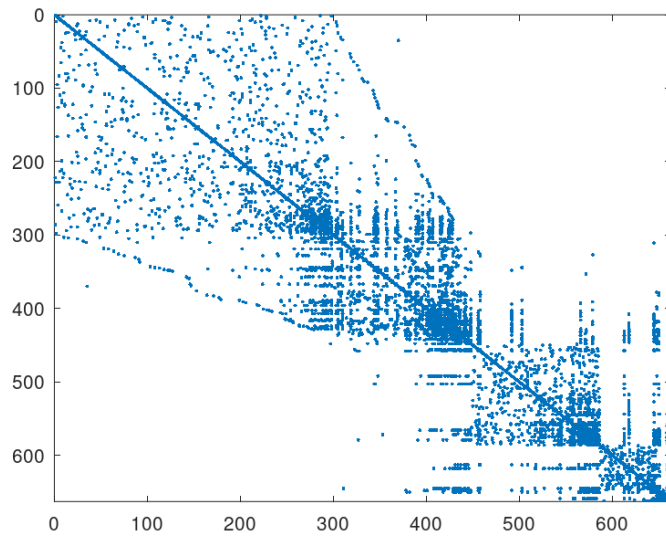
Figure 5: Spy de da matriz *662_bus*



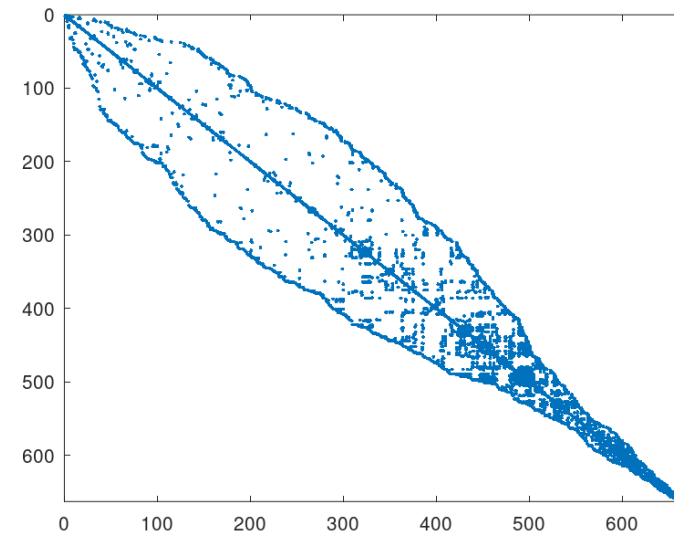
(a) Spy após ICC(0) sem reordenamento



(b) Spy após ICC(0) com reordenamento



(c) Spy após ICC sem reordenamento



(d) Spy após ICC com reordenamento

Figure 6: Gráficos do preenchimento de *662_bus*.

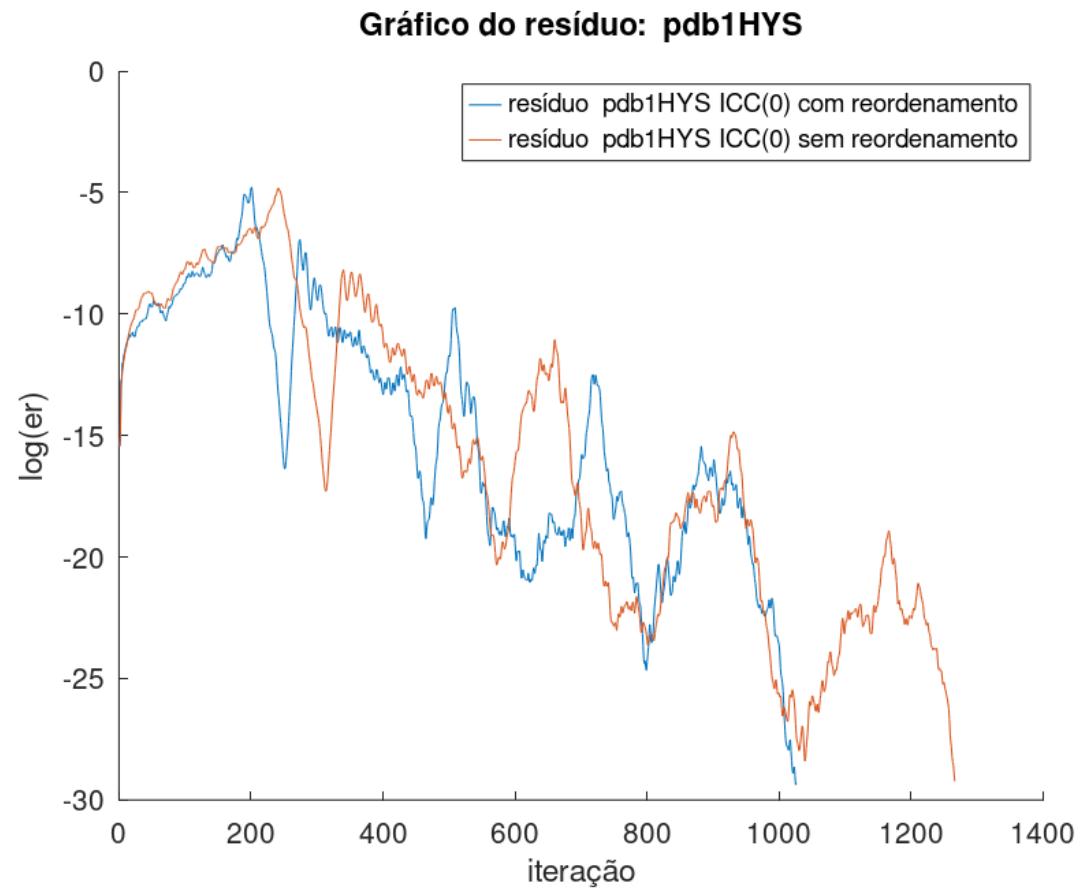


Figure 7: Gráfico do Resíduo da matriz *pdb1HYS*

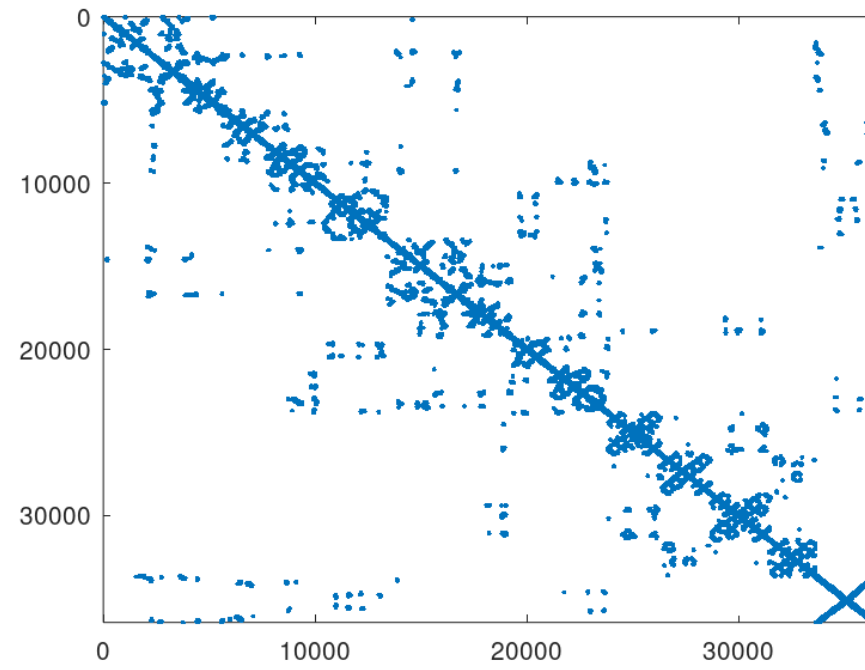
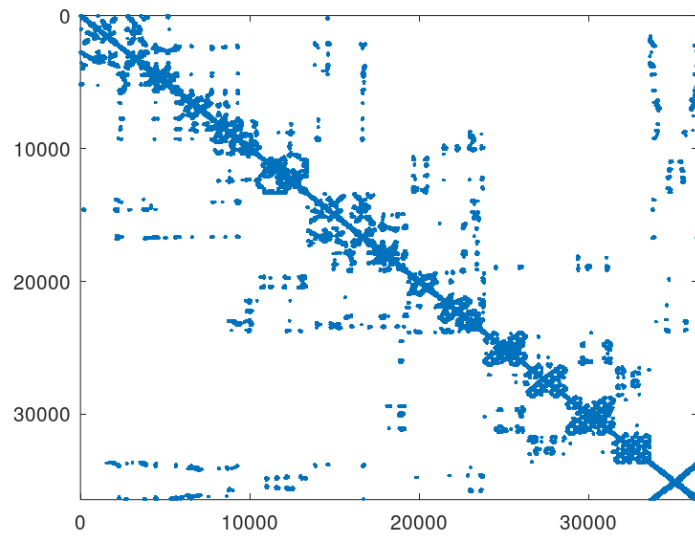
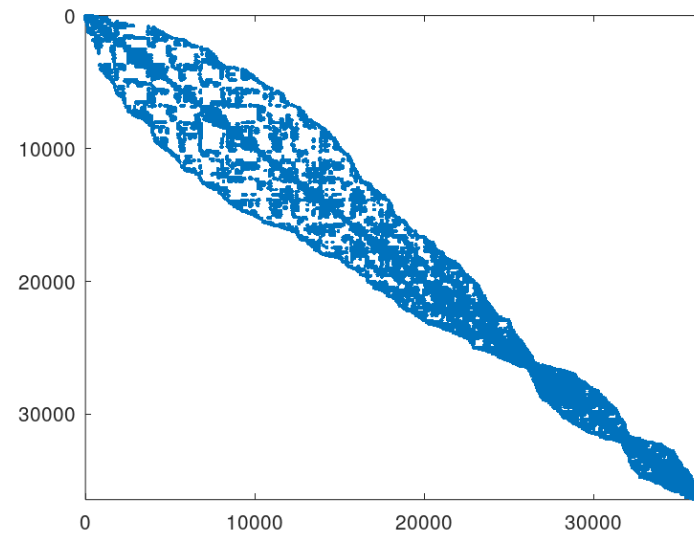


Figure 8: Spy de da matriz *pdb1HYS*



(a) Spy após ICC(0) sem reordenamento



(b) Spy após ICC(0) com reordenamento

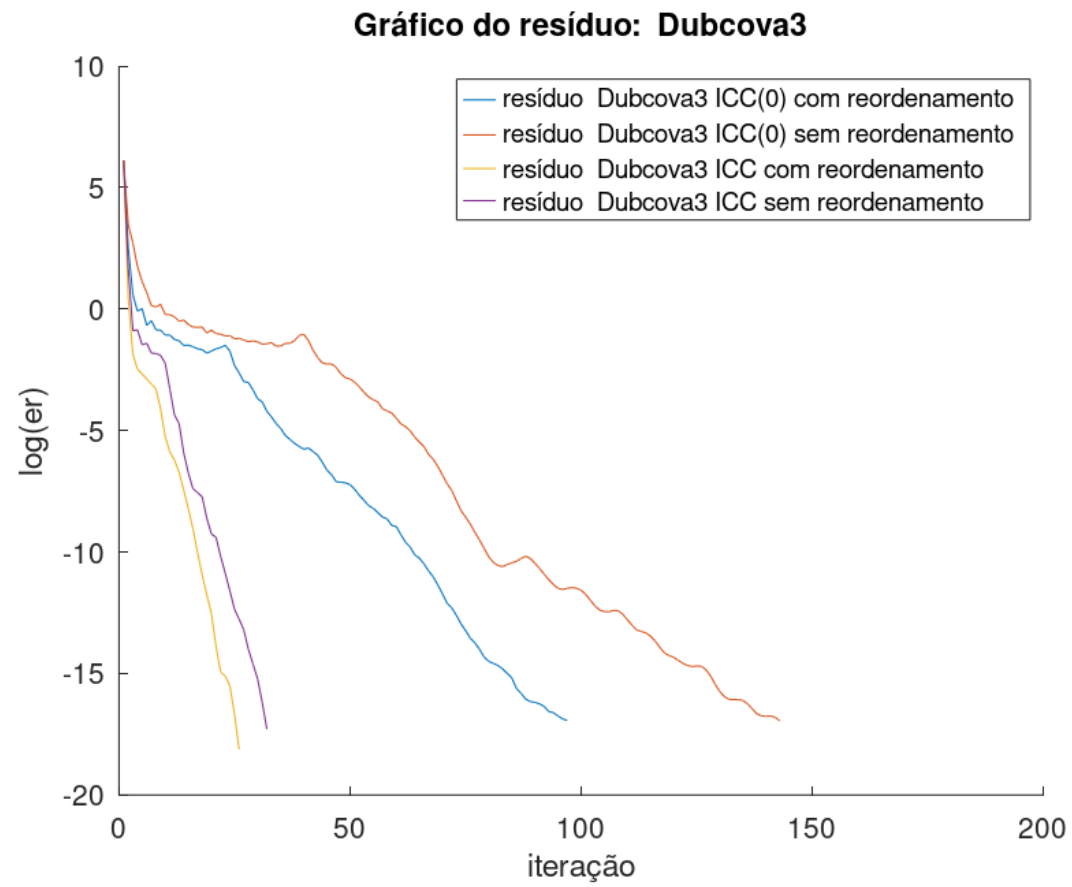


Figure 10: Gráfico do Resíduo da matriz *Dubcova3*

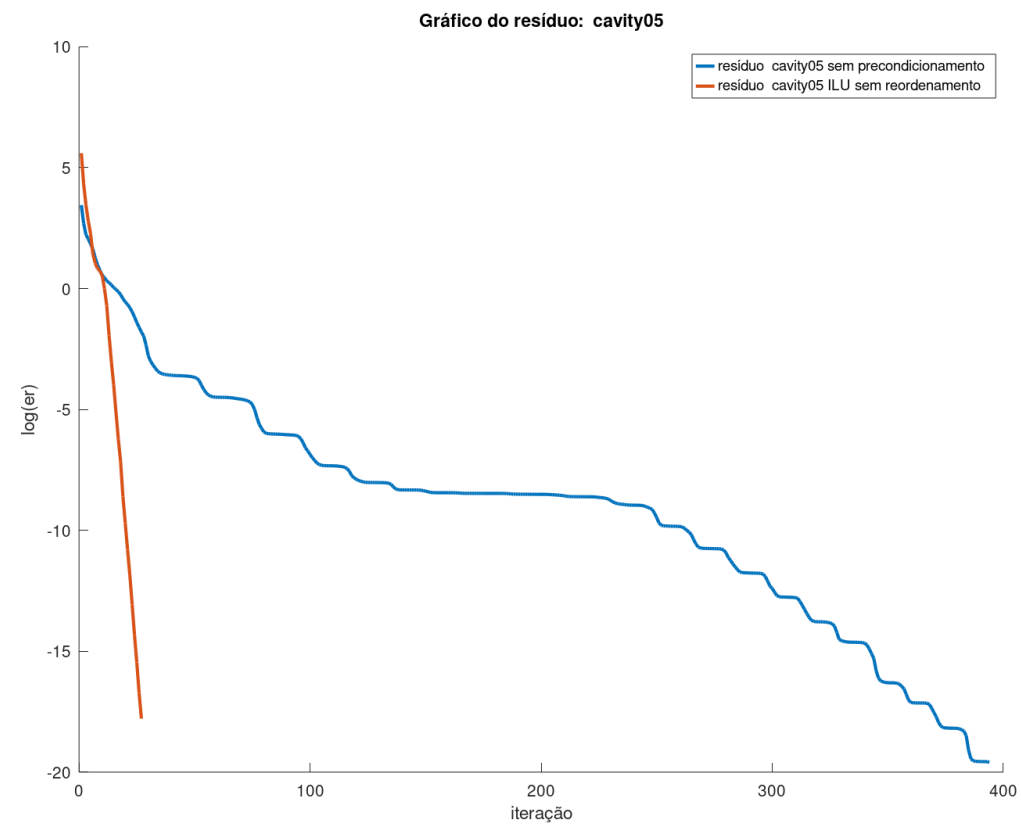


Figure 11: Gráfico do Resíduo da matriz *cavity05*

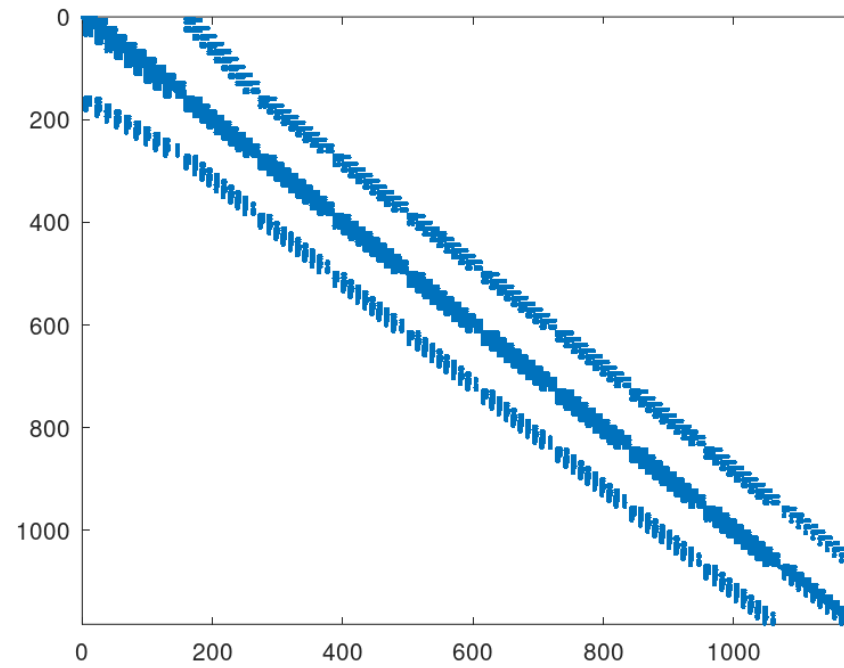
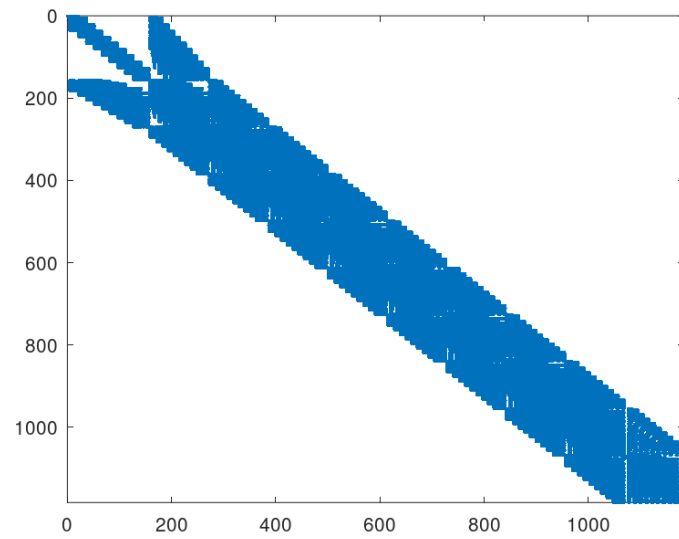
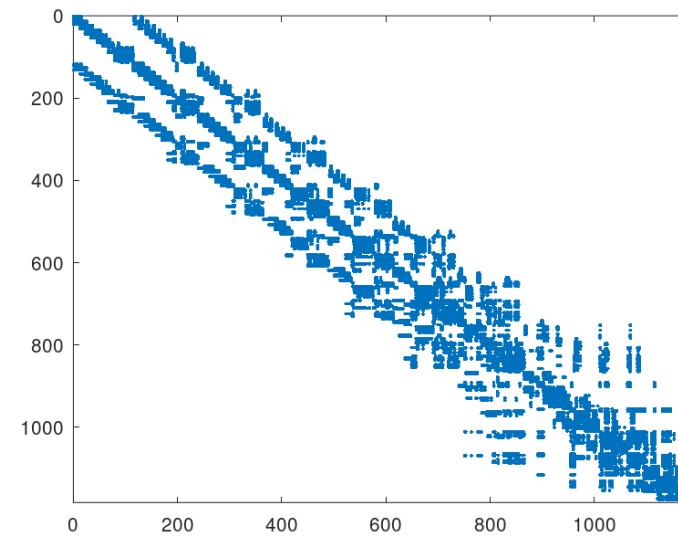


Figure 12: Spy de da matriz *cavity05*



(a) Spy após ILU sem reordenamento



(b) Spy após ILU com reordenamento

Figure 13: Gráficos do preenchimento de *cavity05*.

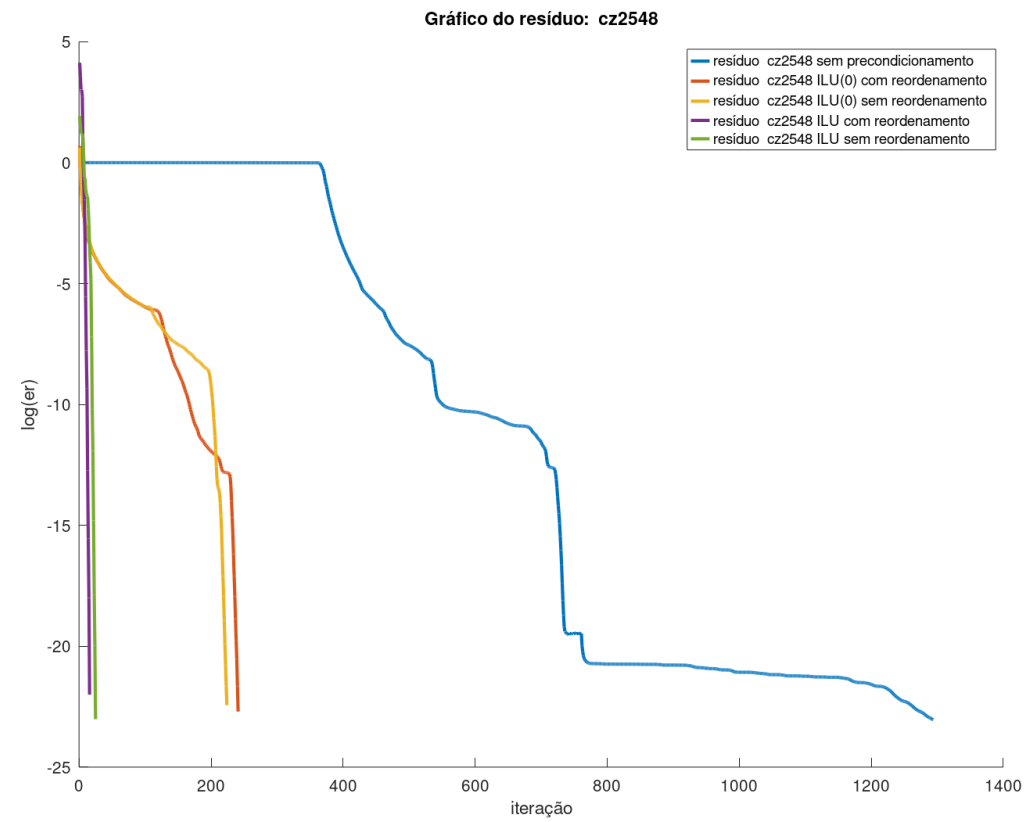


Figure 14: Gráfico do Resíduo da matriz *cz2548*

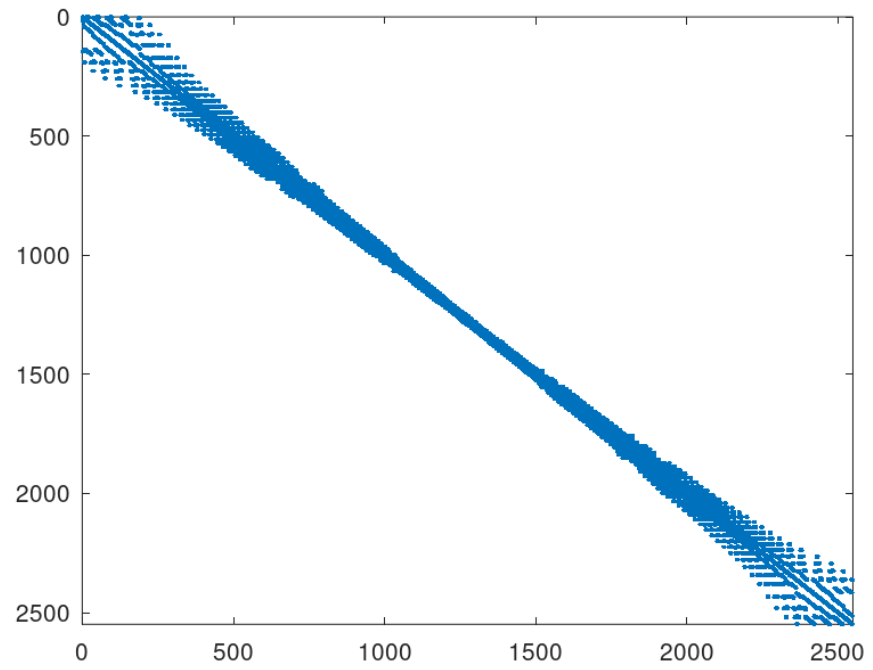
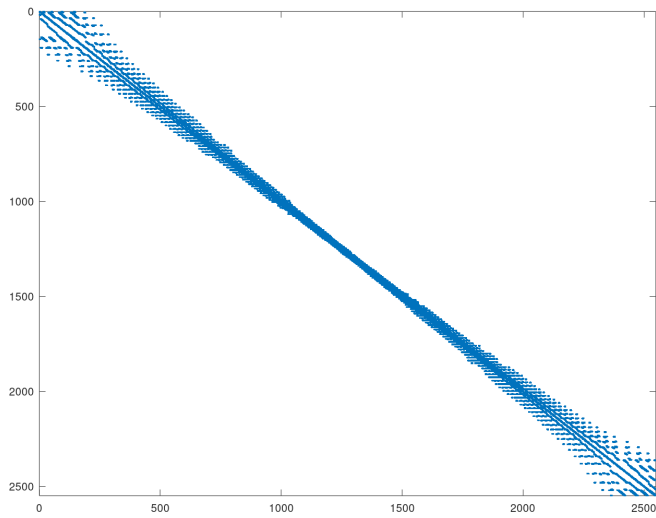
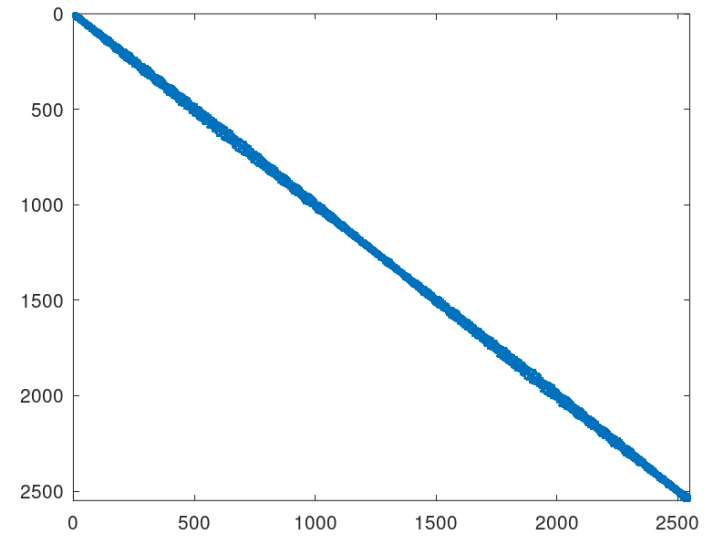


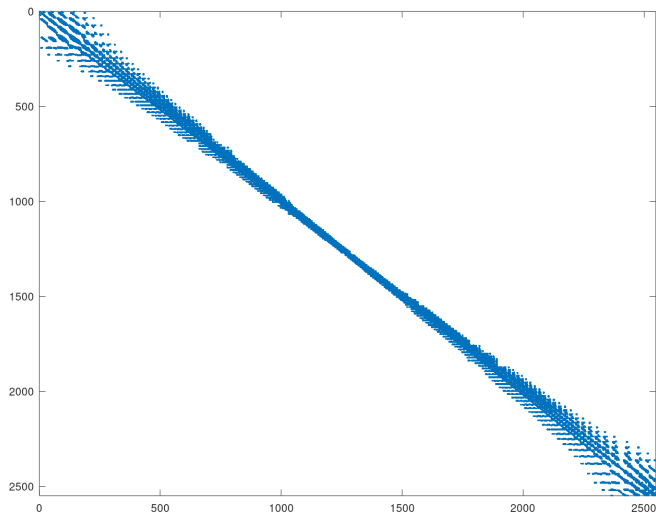
Figure 15: Spy de da matriz *cz2548*



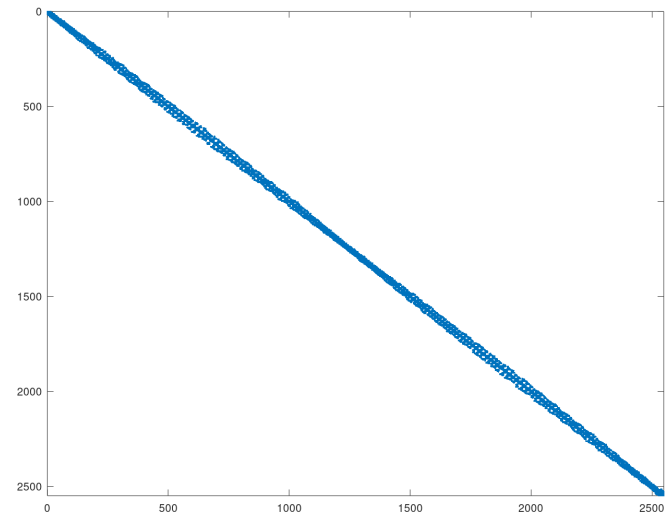
(a) Spy após ILU(0) sem reordenamento



(b) Spy após ILU(0) com reordenamento



(c) Spy após ILU sem reordenamento



(d) Spy após ILU com reordenamento

Figure 16: Gráficos do preenchimento de *cz2548*.

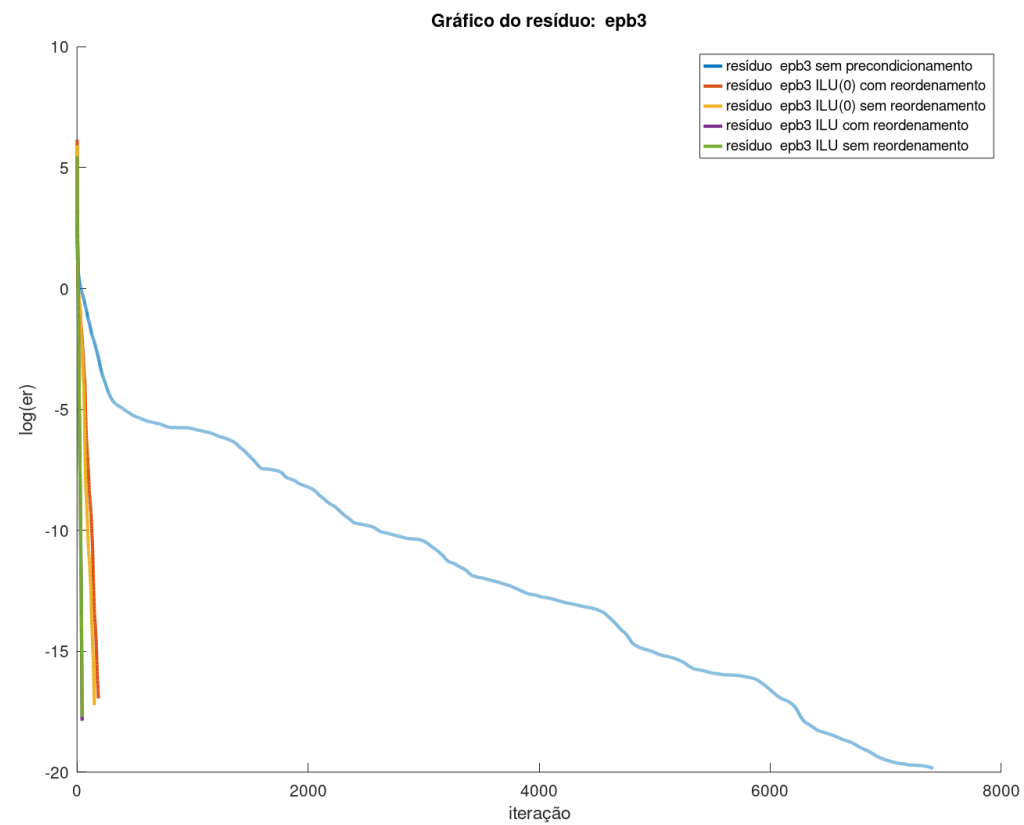


Figure 17: Gráfico do Resíduo da matriz *epb3*

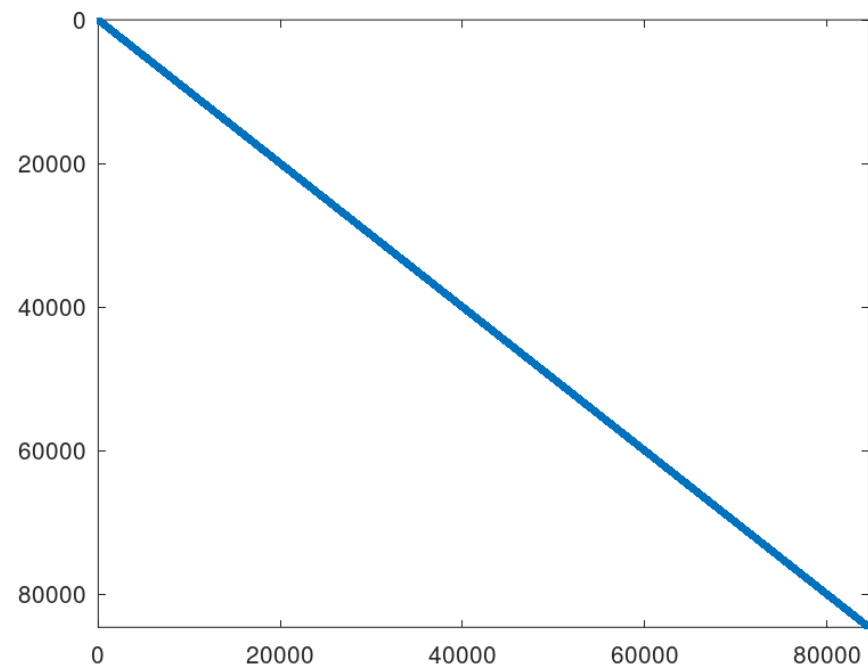
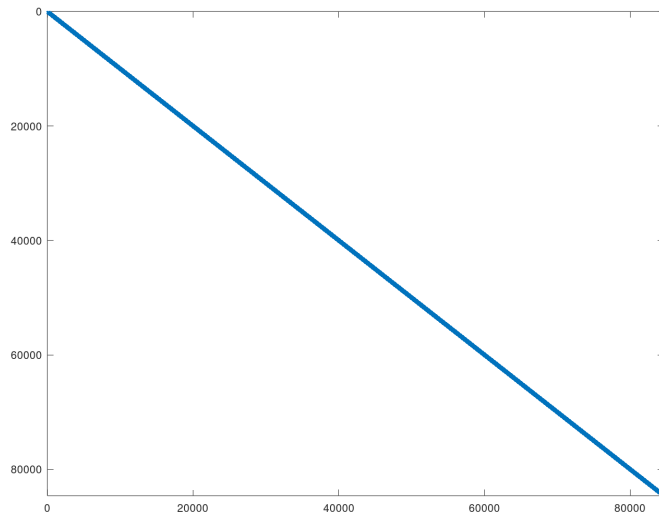
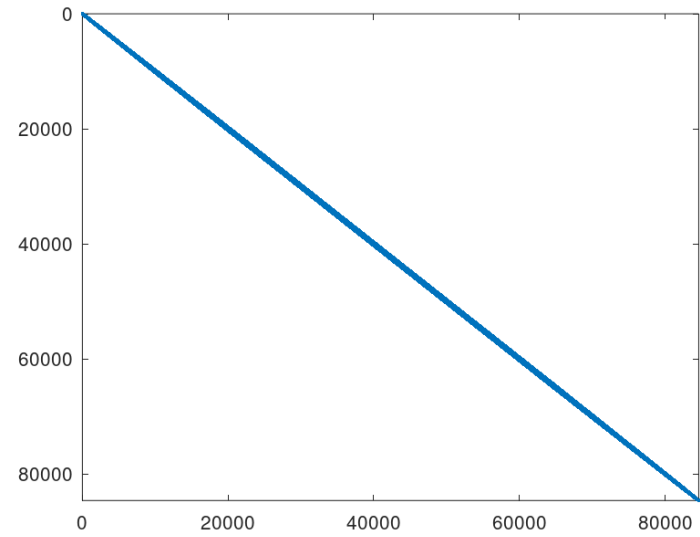


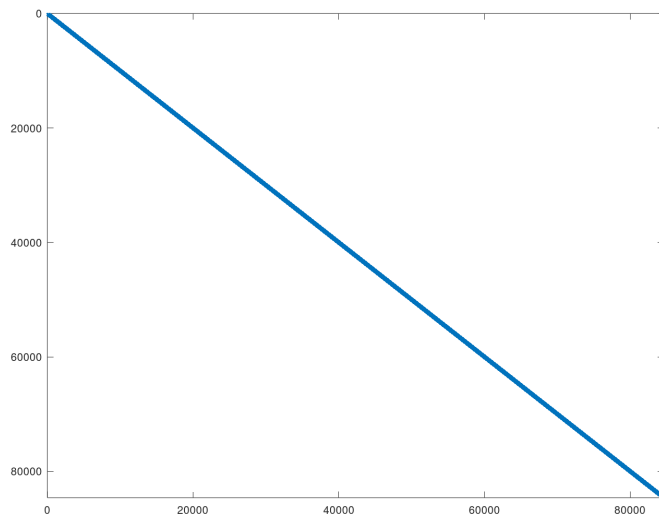
Figure 18: Spy de da matriz *epb3*



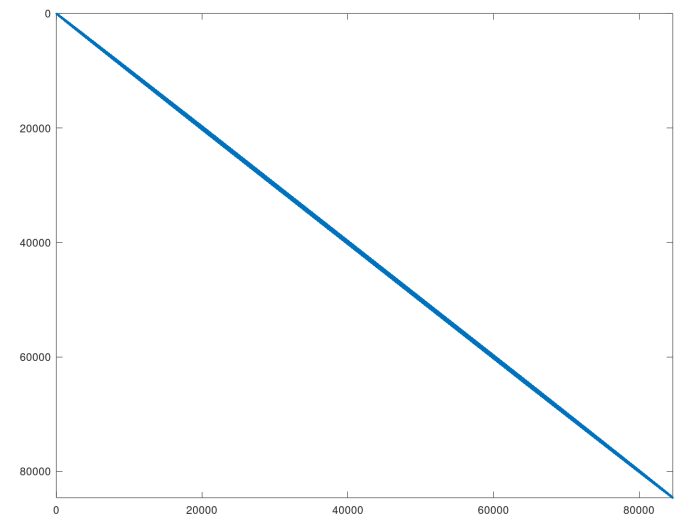
(a) Spy após ILU(0) sem reordenamento



(b) Spy após ILU(0) com reordenamento



(c) Spy após ILU sem reordenamento



(d) Spy após ILU com reordenamento

Figure 19: Gráficos do preenchimento de $epb3$.

4 Tabelas dos resultados observados

Tabela de análise dos preconditionadores								
Informações da matriz				Informações do preconditionamento				
Nome	n	Não-nulos	k = cond(A)	Precondicionador	Reordenamento	Não-nulos	k = cond(A)	tempo (s)
mesh3em5	289	1377	4.965950e+00	ICC(0)	com	1889	4.965948e+00	0.000751972 s
mesh3em5	289	1377	4.965950e+00	ICC(0)	sem	1891	4.965948e+00	0.000439167 s
mesh3em5	289	1377	4.965950e+00	ICC	com	833	4.965944e+00	0.000847816 s
mesh3em5	289	1377	4.965950e+00	ICC	sem	833	4.965944e+00	0.000476837 s

Table 1: Tabela de análise dos preconditionadores utilizados na matriz *mesh3em5*

Tabela do Método dos Gradientes Conjugados com tolerância 10^{-11} e máximo de iterações 10.000								
Informações da matriz		Resultados do método						
Nome	n	Precond.	Reordenamento	flag	iterações	erro relativo	$\ x\ _{\infty}$	tempo (s)
mesh3em5	289	-	-	0	20	6.495063e-12	1.000000e+00	0.00497293 s
mesh3em5	289	ICC(0)	com	0	3	1.789972e-15	1.000000e+00	0.00606489 s
mesh3em5	289	ICC(0)	sem	0	3	2.865405e-15	1.000000e+00	0.00613403 s
mesh3em5	289	ICC	com	0	3	1.142175e-14	1.000000e+00	0.00574207 s
mesh3em5	289	ICC	sem	0	3	1.142175e-14	1.000000e+00	0.00563097 s

Table 2: Tabela de resultados observados na resolução da matriz *mesh3em5* pelo Método Gradientes Conjugados com tolerância 10^{-11} e máximo de iterações 10.000.

Tabela de análise dos preconditionadores								
Informações da matriz				Informações do preconditionamento				
Nome	n	Não-nulos	k = cond(A)	Precondicionador	Reordenamento	Não-nulos	k = cond(A)	tempo (s)
662_bus	662	2474	7.941311e+05	ICC(0)	com	2918	6.574479e+03	0.0118921 s
662_bus	662	2474	7.941311e+05	ICC(0)	sem	3702	5.903236e+03	0.000622034 s
662_bus	662	2474	7.941311e+05	ICC	com	4564	3.104181e+04	0.00163412 s
662_bus	662	2474	7.941311e+05	ICC	sem	5910	3.131869e+04	0.0014472 s

Table 3: Tabela de análise dos preconditionadores utilizados na matriz *662_bus*

Tabela do Método dos Gradientes Conjugados com tolerância 10^{-11} e máximo de iterações 10.000								
Informações da matriz		Resultados do método						
Nome	n	Precond.	Reordenamento	flag	iterações	erro relativo	$\ x\ _{\infty}$	tempo (s)
662_bus	662	-	-	0	678	8.627720e-11	1.000000e+00	0.100955 s
662_bus	662	ICC(0)	com	0	53	7.447388e-11	1.000000e+00	0.0568819 s
662_bus	662	ICC(0)	sem	0	76	7.837325e-11	1.000000e+00	0.0569861 s
662_bus	662	ICC	com	0	10	9.035513e-12	1.000000e+00	0.0133121 s
662_bus	662	ICC	sem	0	10	6.091978e-12	1.000000e+00	0.014411 s

Table 4: Tabela de resultados observados na resolução da matriz *662_bus* pelo Método Gradientes Conjugados com tolerância 10^{-11} e máximo de iterações 10.000.

Tabela de análise dos preconditionadores								
Informações da matriz				Informações do preconditionamento				
Nome	n	Não-nulos	k = cond(A)	Precondicionador	Reordenamento	Não-nulos	k = cond(A)	tempo (s)
pdb1HYS	36417	4344765	-1.000000e+00	ICC(0)	com	9347919	-1.000000e+00	2.12236 s
pdb1HYS	36417	4344765	-1.000000e+00	ICC(0)	sem	10409889	-1.000000e+00	1.30761 s

Table 5: Tabela de análise dos preconditionadores utilizados na matriz *pdb1HYS*

Tabela do Método dos Gradientes Conjugados com tolerância 10^{-11} e máximo de iterações 10.000								
Informações da matriz		Resultados do método						
Nome	n	Precond.	Reordenamento	flag	iterações	erro relativo	$\ x\ _{\infty}$	tempo (s)
pdb1HYS	36417	-	-	3	6205	3.618273e-06	1.000001e+00	106.573 s
pdb1HYS	36417	ICC(0)	com	3	1026	8.864919e-07	1.000001e+00	3281.42 s
pdb1HYS	36417	ICC(0)	sem	3	1266	1.024893e-06	1.000001e+00	4548.05 s

Table 6: Tabela de resultados observados na resolução da matriz *pdb1HYS* pelo Método Gradientes Conjugados com tolerância 10^{-11} e máximo de iterações 10.000.

Tabela de análise dos preconditionadores								
Informações da matriz				Informações do preconditionamento				
Nome	n	Não-nulos	k = cond(A)	Precondicionador	Reordenamento	Não-nulos	k = cond(A)	tempo (s)
Dubcova3	146689	3636643	-	ICC(0)	com	4769297	-	0.913333 s
Dubcova3	146689	3636643	-	ICC(0)	sem	16025173	-	1.03894 s
Dubcova3	146689	3636643	-	ICC	com	8061119	-	1.71888 s
Dubcova3	146689	3636643	-	ICC	sem	52898003	-	7.16305 s

Table 7: Tabela de análise dos preconditionadores utilizados na matriz *Dubcova3*

Tabela do Método Gradientes Conjugados com tolerância 10^{-11} e máximo de iterações 10.000								
Informações da matriz		Resultados do método						
Nome	n	Precond.	Reordenamento	flag	iterações	erro relativo	$\ x\ _\infty$	tempo (s)
Dubcova3	146689	-	-	0	215	9.438705e-11	1.000000e+00	4.30956 s
Dubcova3	146689	ICC(0)	com	0	97	9.742899e-11	1.000000e+00	299.55 s
Dubcova3	146689	ICC(0)	sem	0	143	9.606530e-11	1.000000e+00	1575.17 s
Dubcova3	146689	ICC	com	0	26	2.954087e-11	1.000000e+00	138.95 s
Dubcova3	146689	ICC	sem	0	32	6.821619e-11	1.000000e+00	1842 s

Table 8: Tabela de resultados observados na resolução da matriz *Dubcova3* pelo Método GMRES com tolerância 10^{-11} e máximo de iterações 10.000.

Tabela de análise dos preconditionadores								
Informações da matriz				Informações do preconditionamento				
Nome	n	Não-nulos	k = cond(A)	Precondicionador	Reordenamento	Não-nulos	k = cond(A)	tempo (s)
cavity05	1182	32632	5.770648e+05	ILU	sem	133644	7.245709e+04	0.024977 s

Table 9: Tabela de análise dos preconditionadores utilizados na matriz *cavity05*

Tabela do Método GMRES com tolerância 10^{-11} e máximo de iterações 10.000									
Informações da matriz		Resultados do método							
Nome	n	Precond.	Reordenamento	k	flag	iterações	erro relativo	$\ x\ _\infty$	tempo (s)
cavity05	1182	-	-	447	0	394	9.841954e-11	1.000001e+00	25.7365 s
cavity05	1182	ILU	sem	447	0	27	6.987364e-11	1.000000e+00	2.76892 s

Table 10: Tabela de resultados observados na resolução da matriz *cavity05* pelo Método GMRES com tolerância 10^{-11} e máximo de iterações 10.000.

Tabela de análise dos preconditionadores								
Informações da matriz				Informações do condicionamento				
Nome	n	Não-nulos	k = cond(A)	Precondicionador	Reordenamento	Não-nulos	k = cond(A)	tempo (s)
cz2548	2548	25674	2.563753e+06	ILU(0)	com	33225	1.083267e+05	0.00527596 s
cz2548	2548	25674	2.563753e+06	ILU(0)	sem	36815	1.026009e+05	0.00266695 s
cz2548	2548	25674	2.563753e+06	ILU	com	25958	3.156199e+06	0.0166929 s
cz2548	2548	25674	2.563753e+06	ILU	sem	39000	3.479452e+05	0.0171821 s

Table 11: Tabela de análise dos preconditionadores utilizados na matriz *cz2548*

Tabela do Método GMRES com tolerância 10^{-11} e máximo de iterações 10.000									
Informações da matriz		Resultados do método							
Nome	n	Precond.	Reordenamento	k	flag	iterações	erro relativo	$\ x\ _\infty$	tempo (s)
cz2548	2548	-	-	760	0	1294	9.880078e-11	1.000000e+00	259.886 s
cz2548	2548	ILU(0)	sem	760	0	224	9.635935e-11	1.000000e+00	8.27269 s
cz2548	2548	ILU(0)	com	760	0	241	6.971360e-11	1.000000e+00	9.5068 s
cz2548	2548	ILU	sem	760	0	25	1.471816e-11	1.000000e+00	0.514301 s
cz2548	2548	ILU	com	760	0	16	4.466133e-12	1.000000e+00	0.219451 s

Table 12: Tabela de resultados observados na resolução da matriz *cz2548* pelo Método GMRES com tolerância 10^{-11} e máximo de iterações 10.000.

Tabela de análise dos preconditionadores								
Informações da matriz				Informações do condicionamento				
Nome	n	Não-nulos	k = cond(A)	Precondicionador	Reordenamento	Não-nulos	k = cond(A)	tempo (s)
epb3	84617	463625	-1.000000e+00	ILU(0)	com	565126	-1.000000e+00	0.101275 s
epb3	84617	463625	-1.000000e+00	ILU(0)	sem	571799	-1.000000e+00	0.052027 s
epb3	84617	463625	-1.000000e+00	ILU	com	1500473	-1.000000e+00	10.6831 s
epb3	84617	463625	-1.000000e+00	ILU	sem	1187509	-1.000000e+00	10.1404 s

Table 13: Tabela de análise dos preconditionadores utilizados na matriz *epb3*

Tabela do Método GMRES com tolerância 10^{-11} e máximo de iterações 10.000									
Informações da matriz		Resultados do método							
Nome	n	Precond.	Reordenamento	k	flag	iterações	erro relativo	$\ x\ _\infty$	tempo (s)
epb3	84617	-	-	800	0	7411	9.991353e-11	1.000001e+00	3933.55 s
epb3	84617	ILU(0)	sem	800	0	150	8.829092e-11	1.000000e+00	101.365 s
epb3	84617	ILU(0)	com	800	0	185	9.210646e-11	1.000000e+00	174.184 s
epb3	84617	ILU	sem	800	0	44	8.526528e-11	1.000000e+00	157.286 s
epb3	84617	ILU	com	800	0	44	7.579705e-11	1.000000e+00	209.548 s

Table 14: Tabela de resultados observados na resolução da matriz *epb3* pelo Método GMRES com tolerância 10^{-11} e máximo de iterações 10.000.