Algoritmos Numéricos e Computação Paralela

Mestrado em Matemática e Computação
2023/2024

Departamento de Matemática (DMat)
Universidade do Minho

Carla Ferreira
caferrei@math.uminho.pt

Gab. EC3.39 (Edifício 6, Gualtar) Telef: 253604090

Horário de atendimento: quarta-feira das 12h às 13h (presencial)
(via BbCU [sala do curso], mediante marcação prévia)

Página da UC disponível em http://elearning.uminho.pt

Plataforma Blackboard

Programa resumido

— Transformações elementares com matrizes.
— Algoritmos para as fatorizações LU, de Cholesky, QR e SVD.
— Métodos de cálculo de valores próprios (bisseção, de Jacobi, QR e de Lanczos).
— Noções básicas da computação paralela.

Assume-se que o aluno tenha conhecimentos básicos de Álgebra Linear e de programação computacional em Matlab.

Objetivos

Esta unidade curricular é especializada na área da computação com matrizes. Compreender as decomposições matriciais comuns, os algoritmos para as construir e aplicações dessas decomposições são objetivos desta unidade curricular.

Resultados de aprendizagem

- Classificar algoritmos de cálculo matricial do ponto de vista da eficiência computacional (sequencial) e da stabilidade numérica.
- Selecionar algoritmos que se adequem às especificidades (por exemplo, a estrutura) das matrizes que ocorrem nas aplicações.
- Desenvolver implementações computacionais de alguns dos métodos estudados.
- Analisar de forma crítica as soluções obtidas no computador e interpretar eventuais erros numéricos em termos do condicionamento do problema e/ou da estabilidade numérica do algoritmo implementado.
- Desenvolver versões paralelas adaptadas ao modelo "message passing" dos algoritmos sequenciais estudados e estimar os custos de comunicação num sistema de memória distribuída.

Bibliografia

1. *Matrix Computations*, 3rd edition, G. H. Golub and C. F. Van Loan, Johns Hopkins Univ. Press (1996).

2. *Numerical Linear Algebra*, L. Trefethen and D. Bau, Elsevier (2015).

3. *Aplied Numerical Linear Algebra*, J. W. Demmel, SIAM (1997).

4. *Fundamentals of Matrix Computations*, 3rd edition, D. Watkins, Wiley (2002).

5. *Matlab guide.* D. J. Higham and N. J. Higham. SIAM (2005).

6. *GNU Octave*
   Scientific Programming Language
   `https://www.gnu.org/software/octave`

Mathworks

O Matlab® é um sistema de cálculo numérico, programação e visualização gráfica de dados num ambiente interativo bastante agradável. O seu uso é muito comum quer nas universidades quer na indústria.

Escola de Engenharia (EEUM) e a parceria Bosch-UMinho disponibilizam a toda a comunidade UMinho uma **Campus-Wide Licence** do Matlab.

É possível fazer o processo de instalação do **MatLab R2023a** a partir de `http://matlab.eng.uminho.pt` (clicando em "Sign in to get started" e seguindo as instruções).

Alguns links úteis:

- Site oficial da Mathworks `https://www.mathworks.com/`
- Help Center Documentation (examples, vídeos, tutorials...) `https://www.mathworks.com/help/matlab/index.html`
- Matlab Central - community of users (open exchange) `https://www.mathworks.com/matlabcentral/`

Método de avaliação

Avaliação periódica

1. Avaliação com base em trabalhos de natureza teórico-prática
   (estudo teórico e resultados computacionais,
   implementação em Matlab)

   - Trabalho 1 [semana 5]
   - Trabalho 2 [semana 9]
   - Trabalho 3 [semana 15]

   – 3 trabalhos obrigatórios (25% + 25% + 40%)
   – realização em grupos de 2 elementos, com discussão individual
   – participação presencial (10%)

Conselho Pedagógico da EEUM

Calendário Escolar Ano Letivo 2023/2024
1º Ciclo de Estudos, Ciclo de Estudo Integrado, 2º Ciclo e 3º Ciclo de Estudos

2.º Semestre 2023/2024

Semana	2º semestre	2ª Feira	3ª Feira	4ª Feira	5ª Feira	6ª Feira	Sábado
1	05/02 a 10/02						
2	12/02 a 17/02		Carnaval				
3	19/02 a 24/02						
4	26/02 a 02/03						
5	04/03 a 09/03					**Trabalho 1**	
6	11/03 a 16/03						
7	18/03 a 23/03						
	25/03 a 30/03						
8	01/04 a 06/04						
9	08/04 a 13/04						
10	15/04 a 20/04						
11	22/04 a 27/04				25 de Abril	**Trabalho 2**	
12	29/04 a 04/05			1.º de Maio			
13	06/05 a 11/05			**Seminário + Aula (Convidado Erasmus)**			
14	13/05 a 18/05						
15	20/05 a 25/05						**Fim das aulas**
16	27/05 a 01/06			**Aula extra**			
17	03/06 a 08/06	*					
18	10/06 a 15/06	**Trabalho 3**					
19	17/06 a 22/06	Discussão dos trabalhos				**Exame de recurso**	
	24/06 a 29/06						

Livro termos 2.º semestre 27/06/2024

Época Especial 8 a 20 de julho/2024

Férias /Feriados
Exames - Recurso
Enterro da gata
Divulgaçãdo das classificações

Neste calendário consideram-se :
15 semanas de contacto

Álgebra linear numérica

Estudo de algoritmos numéricos para resolução de problemas envolvendo matrizes (problemas em Álgebra Linear).

Principais problemas:

1. Sistemas de equações lineares

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

2. Problemas de valores próprios

$$A\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{x} \neq \mathbf{0}$$

   λ - valor próprio, $\boldsymbol{x}$ - vetor próprio

3. SVD (decomposição em valores singulares)

$$A = U\Sigma V^T$$

   U, V - matrizes ortogonais, Σ - matrix diagonal

Importância de se estudar álgebra linear numérica

- A maior parte dos probleams em computação científica (e mesmo em machine learning) assentam num problema linear
  - por ser a única maneira de lidar com a dimensão dos problemas que enfrentamos hoje;
  - porque para problemas lineares muito se compreende e para os quais existem algoritmos confiáveis.

- $\boldsymbol{Ax = b}$

  Por exemplo, método de Newton para $F(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}$, com $F\colon \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^n$ não linear.
  - começar com uma aproximação inicial $\boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbf{R}^n$
  - determinar a matrix Jacobiana $J \in \mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^n$,

$$J_{ij} = \left.\frac{\partial F_i(\boldsymbol{x})}{\partial x_j}\right|_{\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^{(0)}}$$

  - atualizar $\boldsymbol{x}^{(1)} := \boldsymbol{x}^{(0)} - J^{-1} F\big(\boldsymbol{x}^{(0)}\big)$

- $Ax = \lambda x$ Por exemplo, *Principal Component Analysis (PCA)*, compressão de dados, *Google pagerank*, equação de *Schrödinger*

- Outra fontes: equações diferenciais, otimização, regressão, análise de dados, ...

- A maior parte dos fenómenos naturais são descritos por equações diferenciais. A modelação destes fenómenos requer a resolução destas equações diferenciais o que raramente é possível fazer-se de forma explícita.

  O que se faz é discretizar e resolver as equações numericamente. Isto usualmente significa escolher um conjunto de pontos e chegar a um problema linear para [volume, temperatura, pressão, etc.] nestes pontos.

- Eficiência
  Eficiência tem que ver com a realização do mínimo número de operações aritméticas para executar uma determinada tarefa computacional.

- Precisão dos resultados
  Os cálculos são realizados em aritmética de vírgula flutuante IEEE. Isto significa que quase todos os números são arredondados antes de serem armazenados e cada operação de vírgula flutuante resulta num erro de arredondamento. Estes erros são muito pequenos, mas podem acumular, e muito.
  Rearranjar a ordem da computação pode ajudar a reduzir os erros.

- Objetivo: reconhecer as potencialidades e as limitações dos algoritmos da Álgebra Linear Numérica.

Conceitos básicos de álgebra linear

Para uma matrix $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ (ou $\mathbb{C}^{n \times n}$; quase não faz diferença), as seguintes afirmações são equivalentes:

(a) A é não singular.

(b) A é invertível, ou seja, A^{-1} existe.

(c) A aplicação $A \colon \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^n$ linear é uma bijeção.

(d) Todos os valores próprios de A são não nulos.

(e) Todos os valores singulares de A são positivos.

(f) car$(A) = n$ (característica de A)

(g) As linhas de A são linearmente independentes.

(h) As colunas de A são linearmente independentes.

(i) $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ tem solução única para qualquer $\boldsymbol{b} \in \mathbb{C}$.

(j) O núcleo de A reduz-se ao vetor nulo; igual para A^T.

(k) det$(A) \neq 0$.

(l) A^{-1} existe tal que $A^{-1}A = AA^{-1} = I_n$.

(m) ...