Daniel Ribeiro Favoreto

Renato Menezes Machado

Estudo Sobre a Influência do Reordenamento e Precondicionamento Aplicados a Sistemas Esparsos de Grande Porte Utilizando Métodos Iterativos Não Estacionários

Vitória, Espírito Santo
2016

Daniel Ribeiro Favoreto

Renato Menezes Machado

Estudo Sobre a Influência do Reordenamento e Precondicionamento Aplicados a Sistemas Esparsos de Grande Porte Utilizando Métodos Iterativos Não Estacionários

Relatório apresentado como requisito parcial para a obtenção de aprovação na disciplina Algoritmos Numéricos II, no curso de Ciência da Computação, na Universidade Federal do Espírito Santo.

Universidade Federal do Espírito Santo

Departamento de Informática

Vitória, Espírito Santo
2016

Resumo

O presente trabalho analisa a influência do precondicionamento e reordenamento aplicados a sistemas esparsos de grande porte, utilizando métodos iterativos não estacionários. Através da medição de tempos computacionais, tal influência é analisada.

Sumário

Introdução

O objetivo deste trabalho é apresentar um estudo sobre a influência das técnicas de ordenamento e precondicionamento aplicados a sistemas lineares esparsos de grande porte, através de métodos iterativos não estacionários como o método GMRES (Método do Resíduo Mínimo Generalizado).

Através de experimentos numéricos, observa-se a influência do ordenamento e precondicionamento sobre tais matrizes.

Em primeira mão, apresenta-se brevemente as técnicas e métodos utilizados para a realização do trabalho.

Em seguida, os experimentos são conduzidos e por fim, apresenta-se conclusões a cerca das técnicas e métodos utilizados através dos experimentos realizados na etapa anterior.

Referencial Teórico

Em sistemas lineares do tipo Ax = b, onde a matriz A é considerada esparsa de grande porte, uma das soluções disponíveis e eficientes é por meio de métodos iterativos não estacionários. De modo que para uma maior eficiência, há a utilização de um armazenamento compacto da matriz A, um reordenamento de linhas e colunas adequado, juntamente com o uso de um precondicionador.

Técnicas de compactação

Sendo a matriz dos coeficientes A esparsa, o sistema Ax = b pode ser resolvido de maneira mais eficiente caso os elementos nulos de A não sejam armazenados, sendo a técnica de compactação utilizada neste trabalho chamada de CSR (Compressed Sparse Row).

Esta técnica consiste na fragmentação da matriz A em 3 vetores: AA (contendo todos os elementos não nulos da matriz A), JA (contendo a coluna correspondente que cada coeficiente não nulo ocupa em A) e IA (que mapeia em AA o primeiro elemento não nulo de cada linha de A).

Técnicas de ordenamento

O reordenamento consiste na troca de linhas e colunas da matriz esparsa do sistema linear, sendo que o objetivo principal é a redução do preenchimento de posições originalmente nulas por elementos não nulos durante o processo de precondicionamento. Esse preenchimento é dito fill-in. Quanto maior o número de fill-ins, pior o desempenho das técnicas de compactação de matrizes, já que a estimativa de valores não nulos armazenados na matriz original tende a crescer de maneira significativa.

Neste trabalho, a técnica de reordenamento utilizada é chamada de RCM (Reverse Cuthill Mckee), sendo que o objetivo principal é a redução de fill-ins através da aproximação dos elementos não-nulos da diagonal principal.

Precondicionamento

O objetivo do precondicionamento é transformar o sistema linear original em um sistema equivalente que demande uma menor quantidade de iterações para ser solucionado. De forma mais clara, a transformação consiste no sistema Ax = b ser substituído por $M^{-1}Ax = M^{-1}b$.

Mas, ao invés da determinação de M^{-1} de forma explícita, o precondicionador utiliza a operação produto matriz-vetor $p = M^{-1}z$ calculando primeiramente z = Av e em seguida Mp = z. Resolver Mp = z é empiricamente mais eficiente e menos custoso do que a determinação de M^{-1} de forma explícita.

Utiliza-se a seguinte forma para a matriz de precondicionamento:

$$M = \tilde{L}\tilde{U} \text{ sendo } \tilde{L} \text{ e } \tilde{U} \text{ fatores da decomposição } ILU(p)$$

GMRES

O GMRES (Generalized Minimal Residual Method) é um método iterativo não estacionário para resolver sistemas lineares não simétricos. Em suma, seu objetivo é a minimização da norma do resíduo do sistema. Tomando por base um X0 como solução inicial conhecida, soluções aproximadas podem ser tiradas: Xk = X0 + z, onde z é o vetor do espaço de Krylov.

Entretanto, as iterações deste método são muito custosas computacionalmente, podendo ser amenizadas com a reinicialização da formação dos vetores da base a cada m iterações. A versão proposta neste trabalho está de acordo com este critério.

Experimentos Numéricos

De posse das matrizes fornecidas:

Matriz	Área de Aplicação	n	nnz
rail_5177	Transferência de Calor	5177	35185
aft01	Problema de Acústica	8205	125567
FEM_3D_thermal1	Problema Térmico	17880	430740
Dubcova2	Problema 2D/3D	65025	1030225

Tabela 1 - Matrizes utilizadas nos experimentos

Os testes foram realizados com os valores de tolerância iguais a 0.0000001, fill-in = 10 com exceção da matriz Dubcova2 para o caso sem reordenamento, em que foi utilizado fill-in = 3 devido ao elevado tempo de execução.

	GMRES (s/precon)		GMRES + ILU(0)		GMRES + ILU(10)	
k	Iterações	Tempo (s)	Iterações	Tempo (s)	Iterações	Tempo (s)
20	100	1.573827	100	2.056316	100	3.605541
50	100	6.334922	100	7.503214	100	11.37181
100	100	21.10428	88	20.68274	3	0.423403

Tabela 2 – Matriz rail_5177: Utilização do GMRES com ordenamento RCM

	GMRES (s/precon)		GMRES + ILU(0)		GMRES + ILU(10)	
k	Iterações	Tempo (s)	Iterações	Tempo (s)	Iterações	Tempo (s)
20	100	1.553802	100	2.061638	100	6.453943
50	100	6.323953	100	7.574081	100	0.814084
100	100	21.423582	88	23.966883	3	0.601735

Tabela 3 – Matriz rail_5177: Utilização do GMRES sem ordenamento RCM

Dos resultados acima, podemos observar que quando k = 20 não há convergência para o sistema linear. Assim como um número alto de fill-in afeta negativamente o tempo de solução, vide as colunas com fill-in = 0 e fill-in = 10.

Comparando-se todos os outros casos com os casos em que a convergência foi obtida em 3 iterações, observamos que a diferença de tempo de execução com ou sem reordenamento é bastante alta.

	GMRES (s/precon)		GMRES + ILU(0)		GMRES + ILU(10)	
k	Iterações	Tempo (s)	Iterações	Tempo (s)	Iterações	Tempo (s)
20	2	0.048962	2	0.067392	2	0.318170
50	2	0.049528	2	0.067689	2	0.318503
100	2	0.051168	2	0.068802	2	0.318585

Tabela 4 – Matriz aft01: Utilização do GMRES com ordenamento RCM

	GMRES (s/precon)		GMRES + ILU(0)		GMRES + ILU(10)	
k	Iterações	Tempo (s)	Iterações	Tempo (s)	Iterações	Tempo (s)
20	2	0.004778	2	0.023228	2	0.379346
50	2	0.005750	2	0.023518	2	0.380990
100	2	0.007544	2	0.047850	2	0.380920

Tabela 5 – Matriz aft01: Utilização do GMRES sem ordenamento RCM

Para os testes com a matriz aft01 observa-se tempos de execução e número de iterações muito baixos, entretanto, a qualidade da solução ficou aquém do esperado com a norma do resíduo igual a 90.254.

	GMRES (s/precon)		GMRES + ILU(0)		GMRES + ILU(10)	
k	Iterações	Tempo (s)	Iterações	Tempo (s)	Iterações	Tempo (s)
20	47	13.067626	5	2.657303	2	3.923407
50	11	10.550674	3	2.584967	2	3.927885
100	4	7.548383	2	2.733439	2	3.928155

Tabela 6 – Matriz dubcova2: Utilização do GMRES com ordenamento RCM

	GMRES (s/precon)		GMRES + ILU(0)		GMRES + ILU(3)	
k	Iterações	Tempo (s)	Iterações	Tempo (s)	Iterações	Tempo (s)
20	47	12.124148	13	4.973515	3	14.818430
50	11	9.651845	4	2.961879	2	13.712070
100	4	6.459496	2	2.811349	2	14.777911

Tabela 7 – Matriz dubcova2: Utilização do GMRES sem ordenamento RCM

Observa-se que para os casos sem precondicionamento há uma rapidez da ordem de 1 segundo em relação aos casos onde há o uso do precondicionador.

Também nota-se que o uso de reordenamento RCM nos casos em que fill-in = 0 interfere de maneira negativa em relação ao não reordenamento. A diferença gritante pode ser comprovada nos testes nos casos em que K = 20 e fill-in = 0, onde o número de iterações é significativamente menor e o tempo de execução sensivelmente menor sem o uso de precondicionador.

Em contrapartida, o uso de precondicionador se mostra importante para todos os valores de k quando p = 10, notando-se um ganho de desempenho com tempos de execução menores comparados ao caso sem o uso de precondicionador.

Um outro ponto a se destacar com esses testes, é que quando a matriz possui uma largura de banda muito grande, a influência do fill-in é significativamente importante. Uma vez que para fill-in = 3 os tempos de execução se aproximam da ordem de 15 segundos.

	GMRES (s/precon)		GMRES + ILU(0)		GMRES + ILU(10)	
k	Iterações	Tempo (s)	Iterações	Tempo (s)	Iterações	Tempo (s)
20	12	1.124789	2	0.371063	2	12.557121
50	5	1.170429	2	0.371404	2	12.566239
100	3	1.465628	2	0.302642	2	13.563287

Tabela 8 – Matriz fem_3D_thermal1: Utilização do método GMRES com ordenamento RCM

	GMRES (s/precon)		GMRES + ILU(0)		GMRES + ILU(10)	
k	Iterações	Tempo (s)	Iterações	Tempo (s)	Iterações	Tempo (s)
20	12	0.985400	2	0.134467	2	13.063950
50	5	1.032569	2	0.132143	2	13.064091
100	3	1.323548	2	0.113317	2	13.462018

Tabela 9 – Matriz fem_3D_thermal1: Utilização do método GMRES sem ordenamento RCM

O número de iterações para os testes dessa matriz são iguais tanto para o caso com precondicionamento quanto para o caso sem precondicionamento.

Porém, os tempos de execução são menores para o uso sem precondicionador até o momento em que fill-in = 10, quando k = 20 e k = 50 se mostram mais rápidos.

De maneira geral, existe pouca influência do reordenamento no cálculo da matriz precondicionadora.

Conclusões

Embora os resultados obtidos dos experimentos fossem de acordo com a peculiaridade de cada matriz, observou-se a importância do uso de reordenamento RCM, precondicionadores assim como a fatoração Incompleta ILU(p).

Em particular, os resultados dos experimentos para a matriz FEM_3D_thermal1 mostraram que a técnica RCM não impactou de forma eficiente sobre esta matriz, de igual forma, a maioria dos resultados para a matriz rail_5177 não apresentaram diferenças significativas.

Para a matriz Dubcova2 quanto maior o nível de fill-in escolhido, a diferença de tempo foi significativamente maior quando estivesse em uso o não reordenamento.

Assim, todas as técnicas utilizadas são importantes quando aplicadas a um método como o GMRES para uma computação mais eficiente de sistemas lineares esparsos. Porém, o uso das técnicas aqui apresentadas não garantem a contínua otimização do método iterativo utilizado.

Referências

SAAD, Y., SCHULTZ, M. H. GMRES: A GENERALIZED MINIMAL RESIDUAL ALGORITHM FOR SOLVING NONSYMMETRIC LINEAR SYSTEMS*, 1986.

Disponível em: http://www.stat.uchicago.edu/lekheng/courses/324/saad-schultz.pdf
Acesso em 10.06.2016.

BARRET, R, ET AL. TEMPLATES FOR THE SOLUTION OF LINEAR SYSTEMS: BUILDING BLOCKS FOR ITERATIVE METHODS

Disponível em: http://www.netlib.org/templates/templates.pdf
Acesso em 10.06.2016.