

**Universidade Federal do Espírito Santo**

Departamento de Informática

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

César Henrique Bernabé

Josias Alexandre Oliveira

Vitória, 24 de junho de 2016

## 1. Introdução

Métodos Iterativos são frequentemente usados para resolução de sistemas lineares em que o uso de Métodos Diretos torna-se desaconselhável por apresentar diversas limitações, principalmente limitações técnicas e de tempo. Este trabalho apresenta um estudo sobre técnicas de compactação e matrizes de condicionamento aplicadas no processo de solução de sistemas lineares resolvidos através do Método Iterativo Não Estacionário conhecido como Método de Resíduo Mínimo Generalizado (*Generalized Minimal Residual Method* – GMRES).

As próximas seções deste trabalho são:

- Referencial Teórico, onde são abordados os métodos e técnicas usados neste estudo.
- Experimentos Numéricos: onde são apresentados os testes de desempenho dos métodos apresentados.
- Conclusão: onde são discutidos os resultados dos experimentos realizados.

## 2. Referencial Teórico

Métodos Iterativos Não Estacionários foram apresentados à computação científica muito recentemente se comparados ao tempo em que os Métodos Diretos foram elaborados. Em geral, estes métodos mais modernos baseiam-se em algum tipo de processo de projeção de subespaço para encontrar a solução.

Este trabalho apresenta um estudo do Método GMRES, que possui a propriedade de minimizar a cada passo a norma de um vetor residual ao longo de um subespaço de Krylov (SAAD & SCHULTZ, 1986). Este método, assim como todos os Métodos Não Estacionários, em alguns casos, pode ser ineficiente no quesito tempo de convergência, demandando um grande espaço de tempo para atingi-la. Por isso, introduz-se o uso de matrizes de pré-condicionamento do sistema linear. Essas matrizes têm por objetivo aplicar mudanças no sistema para transformá-lo num conjunto de equações equivalente porém com uma solução que pode ser obtida mais rapidamente do que a solução do sistema linear original (CARVALHO *et al*, 2008).

Neste estudo, será usado a matriz ILU de condicionamento. A matriz ILU é obtida a partir da fatoração da matriz original, onde  $A = LU - R$ , sendo A a matriz original, L é a matriz com elementos abaixo da diagonal principal de A e U é a matriz com elementos acima da diagonal principal de A (pelo menos L ou U deve conter a diagonal principal).

Além do uso de condicionadores, este trabalho usa de um artifício de compactação de matrizes esparsas chamado Linha Esparsa Comprimida (*Compressed Sparse Row* – CSR), onde a matriz original é substituída por três vetores, sejam eles AA, JA e IA, onde AA é o vetor contendo

todos os elementos não nulos da matriz original, JA um vetor que armazena a posição (coluna) a qual cada elemento não nulo pertence na matriz original e IA o vetor que armazena a posição (coluna) em que está localizado o primeiro elemento não nulo de cada linha da matriz original.

## 2.1 Método GMRES

Como mencionado na introdução dessa seção, o método GMRES consiste em gerar um vetor que minimaliza o resíduo  $\|b - Ax\|$  no subespaço de Krylov ( $K_m$ ). A cada iteração, calcula-se  $X_k = X_0 + Y_k$  onde  $Y_k$  é a base ortonormal de  $K_m$  (MARTINOTTO *et al*, 2002). O processo de escolha do vetor  $Y_k$  é conhecido como escolha do espaço de restrições, onde são impostas condições para avançar no processo iterativo; em outras palavras, nesse processo é montado a base ortonormal (processo de Gram-Schmidt) para o  $K_m$  da próxima iteração.

O método GMRES garante convergência em no máximo  $n$  iterações, onde  $n$  é o tamanho da matriz  $A$ , porém, em casos em que  $n$  é muito grande, isso não será vantagem (JUNIOR & GOMES-RUGGIERO, 2011). Por isso, foi proposta em 1986 uma versão chamada de reinicializada, GMRES( $x$ ), onde se produz uma base do subespaço de Krylov de tamanho  $x$  (onde  $x < n$ ), e a partir dessa base resolve-se o problema de mínimos quadrados, e se o resíduo não for suficientemente pequeno, faz-se nova iteração (SAAD & SCHULTZ *apud* GONÇALEZ, 2005). Vale salientar que  $x$  deve ser convenientemente escolhido de acordo com o problema a ser abordado, pois pode implicar na perda da convergência (GONÇALEZ, 2005).

## 2.2 Reordenamento RCM

Em busca de atingir tempos menores de convergência para métodos iterativos, é comum o uso de matrizes preconditionadoras que tem por objetivo aplicar mudanças a matriz de coeficientes de modo a torná-la mais simples para obtenção de solução equivalente. O reordenamento de Cuthill Mckee consiste em aplicar reordenamento a matrizes esparsas de modo a reduzir sua largura de banda. A heurística desse processo mais comumente utilizada é Reverse Cuthill Mckee, por apresentar boa qualidade de solução, baixo tempo de execução e facilidade de implementação. O processo consiste em fazer uma busca de largura no grafo que representa os índices da matriz esparsa e rotulá-los, invertendo a ordem de numeração ao fim do processo. É importante observar que a qualidade desse método depende da escolha do vértice inicial (LUGON & CATABRIGA, 2013).

### 3. Experimentos Numéricos

As amostras para os testes são matrizes esparsas obtidas no site MatrixMarket<sup>1</sup>, identificadas na Tabela 1:

Matriz	Área de Aplicação	Tamanho	Número de Elementos Não Nulos
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

Os testes foram realizados em um computador com Sistema Operacional Mac OS X El Capitan com processador Intel Core i5 de 1.3Ghz, memória RAM DDR3 de 4GB e Disco Rígido SSD. Os resultados são apresentados individualmente a seguir para cada matriz mencionada na Tabela 1. Todos os experimentos consideraram o método GMRES sem condicionamento e com condicionamento ILU, com e sem ordenamento RCM, e o número máximo de iterações do laço mais externo foi fixado em 500. Além disso, foram usados vetores de tamanho 20, 50 e 100 para a base de Krylov e número de níveis de *fill-in* iguais a 0, 2 e a 4. O objetivo de incluir outro nível de *fill-in* é de ampliar o entendimento sobre o impacto desse parâmetro na resolução de sistemas lineares.

#### 3.1 Problema de Transferência de Calor (Matriz rail\_5177)

K	GMRES (sem preconditionamento)		GMRES + ILU(0)		GMRES + ILU(2)		GMRES + ILU(4)	
	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo
20	301	3,974	301	5,637	301	7,660	301	18.618
50	301	19.221	301	21,512	295	27,081	16	1.821
100	301	63,791	301	73,623	2	0.567	2	0.391

Tabela 2 – Matriz rail\_5177 – Método GMRES sem reordenamento RCM

<sup>1</sup> <http://math.nist.gov/MatrixMarket/>

K	GMRES (sem preconditionamento)		GMRES + ILU(0)		GMRES + ILU(2)		GMRES + ILU(4)	
	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo
20	301	3,6975	301	5,394	301	6.1385	301	9.152
50	301	16,882	301	20.244	110	8.251	301	43.100
100	301	59.280	73	16.121	2	0.330	207	53.884

Tabela 3 – Matriz rail\_5177 – Método GMRES com reordenamento RCM

Comparando os resultados mostrados nas tabelas 2 e 3, concluímos que os melhores valores de  $k$  e  $p$  para GMRES sem reordenamento são respectivamente 100 e 4, e para GMRES com reordenamento os melhores valores para  $k$  e  $p$  são 100 e 2.

O gráfico abaixo mostra o comportamento do resíduo ao longo das iterações do GMRES sem reordenamento. Como já pode ser identificado nas tabelas e agora corroborado pelo gráfico, o uso de *fill in* igual a 2 e a 4 garantiu uma convergência em tempo muito menor.

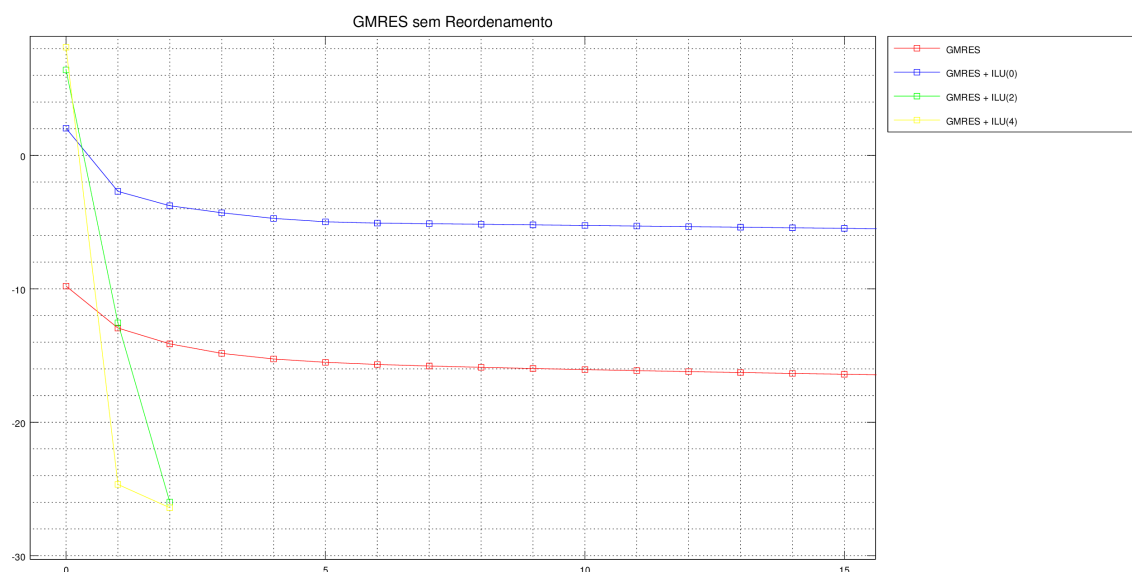


figura 1: Matriz rail\_5177 - Método sem reordenamento –  $k = 100$

O gráfico abaixo mostra o comportamento do resíduo ao longo das iterações do GMRES com reordenamento, onde percebe-se o ganho em eficiência com uso de *fill in* igual a 2.

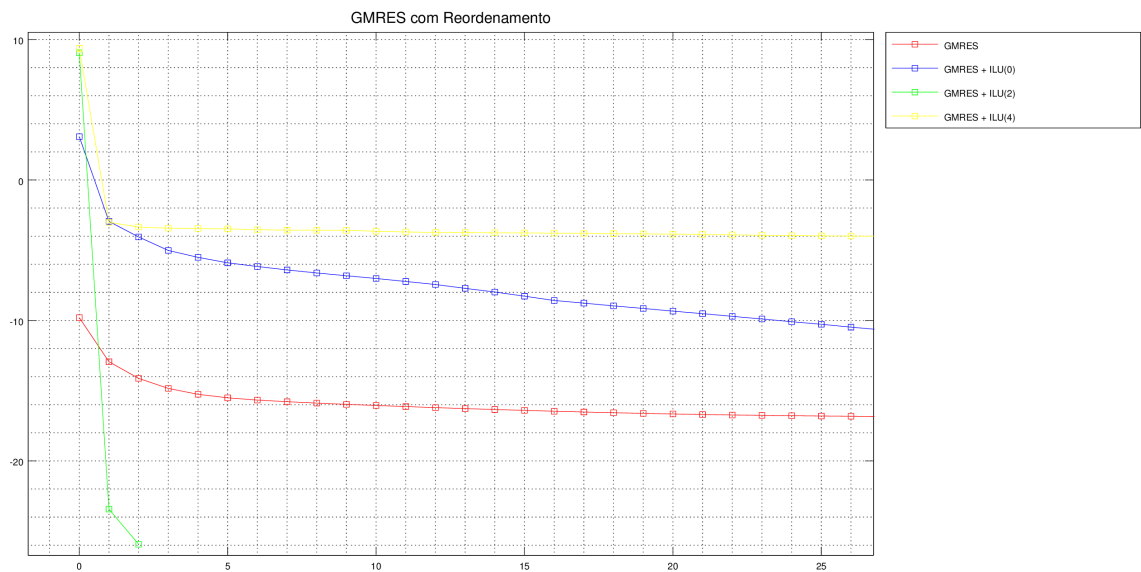


figura 2: Matriz rail\_5177 - Método com reordenamento – k = 100

### 3.2 Problema Acústica (Matriz aft01)

	GMRES (sem preconditionamento)		GMRES + ILU(0)		GMRES + ILU(2)		GMRES + ILU(4)	
K	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo
20	301	7,988	22	0.893	5	0.354	2	0.254
50	301	33.250	5	0.707	1	0.1925	1	0.218
100	301	146,657	1	146,657	1	146,657	1	0.219

Tabela 4 – Matriz aft01 – Método GMRES sem reordenamento RCM

	GMRES (sem preconditionamento)		GMRES + ILU(0)		GMRES + ILU(2)		GMRES + ILU(4)	
K	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo
20	301	7,498	1	1,048	8	0.465	3	0.279
50	301	30.273	7	1.067	1	0.232	1	0.235
100	301	109.263	1	0.500	1	0.236	1	0.237

Tabela 5 – Matriz aft01 – Método GMRES com reordenamento RCM

Comparando os resultados mostrados nas tabelas 4 e 5, concluímos que os melhores valores de  $k$  e  $p$  para GMRES com e sem reordenamento são respectivamente 50 e 2.

O gráfico abaixo mostra o comportamento do resíduo ao longo das iterações do GMRES sem reordenamento, onde pode-se claramente perceber a vantagem do GMRES + ILU(2) perante as outras configurações.

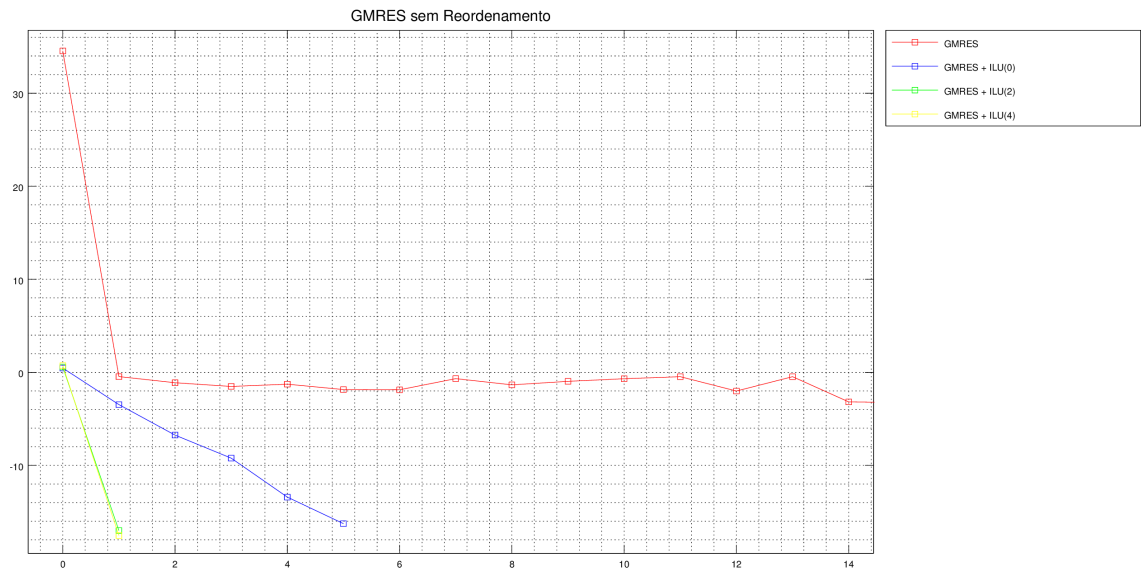


Figura 3: Matriz aft01 - Método sem reordenamento –  $k = 50$

O gráfico abaixo mostra o comportamento do resíduo ao longo das iterações do GMRES com reordenamento.

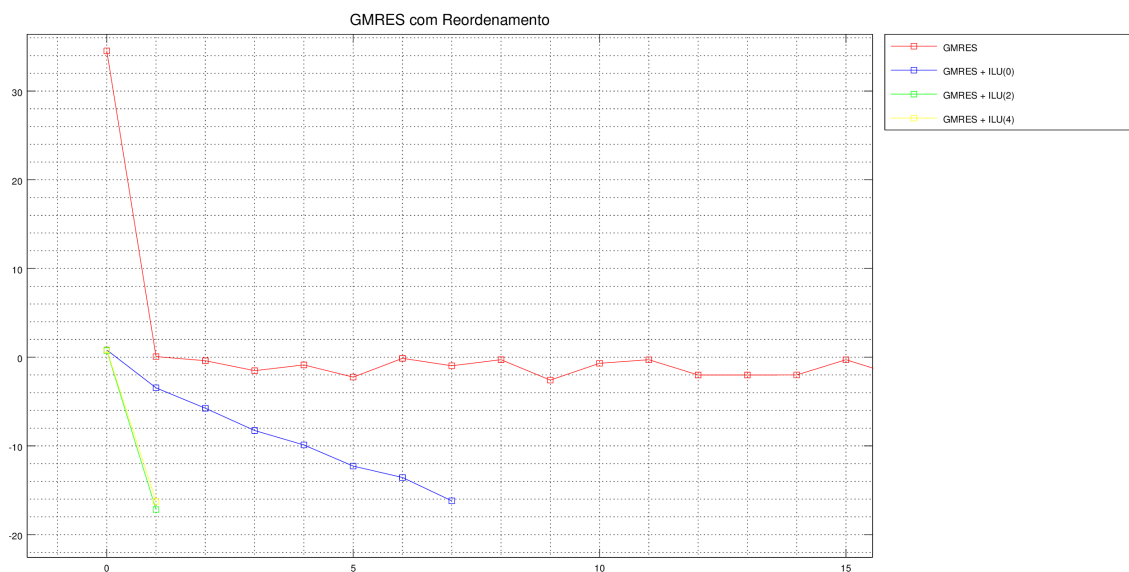


Figura 4: Matriz aft01 - Método com reordenamento – k = 50

### 3.1 Problema Térmico (Matriz FEM\_3D\_thermal1)

K	GMRES (sem preconditionamento)		GMRES + ILU(0)		GMRES + ILU(2)		GMRES + ILU(4)	
	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo
20	15	1.106	1	0.218	1	1.370	1	3.372
50	5	1.207	1	0.155	1	1.140	1	3.375
100	2	1.820	1	0.154	1	1.152	1	3.363

Tabela 6 – Matriz FEM\_3D\_thermal1 – Método GMRES sem ordenamento RCM

K	GMRES (sem preconditionamento)		GMRES + ILU(0)		GMRES + ILU(2)		GMRES + ILU(4)	
	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo
20	15	1.297	1	0.445	1	1.368	1	3.241
50	5	1.396	1	0.403	1	1.288	1	3.247
100	2	1.851	1	0.431	1	1.287	1	3.282

Tabela 7 – Matriz FEM\_3D\_thermal1 – Método GMRES com ordenamento RCM



Comparando os resultados mostrados nas tabelas 6 e 7, concluímos que os melhores valores de  $k$  e  $p$  para GMRES com e sem reordenamento são respectivamente 50 e 0.

O gráfico abaixo mostra o comportamento do resíduo ao longo das iterações do GMRES sem reordenamento, nesse caso nota-se uma desvantagem do GMRES sem *restart* em comparação aos outros métodos.

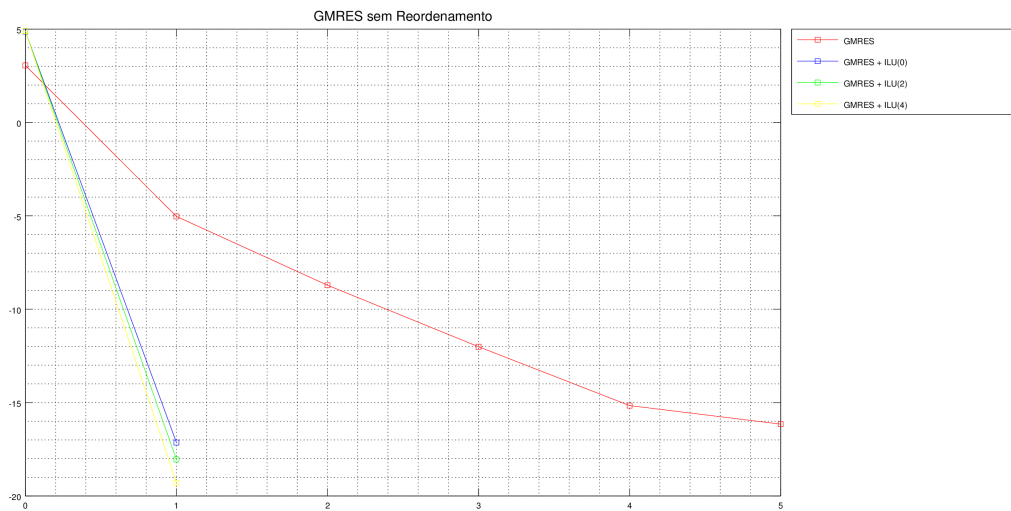


Figura 5: Matriz FEM\_3D\_thermal1 - Método sem reordenamento –  $k = 50$

O gráfico abaixo mostra o comportamento do resíduo ao longo das iterações do GMRES com reordenamento, onde observa-se um comportamento muito parecido ao GMRES sem ordenamento.

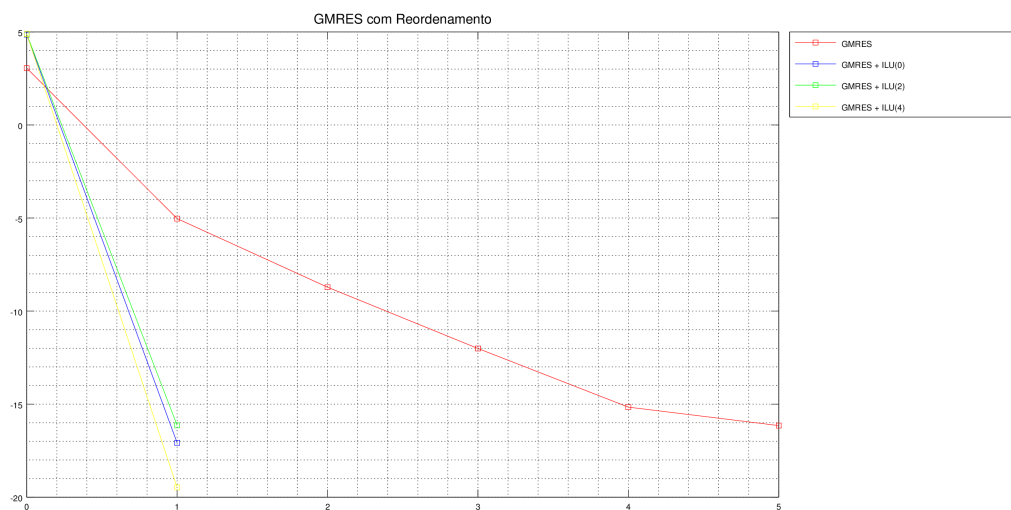


Figura 6: Matriz FEM\_3D\_thermal1 - Método com reordenamento –  $k = 50$

### 3.1 Problema 2D/3D (Matriz Dubcova2)

<b>K</b>	<b>GMRES (sem preconditionamento)</b>		<b>GMRES + ILU(0)</b>		<b>GMRES + ILU(2)</b>		<b>GMRES + ILU(4)</b>	
	<b>Iterações</b>	<b>Tempo</b>	<b>Iterações</b>	<b>Tempo</b>	<b>Iterações</b>	<b>Tempo</b>	<b>Iterações</b>	<b>Tempo</b>
<b>20</b>	74	15.438	19	6.785	4	9.375	2	42.265
<b>50</b>	16	13.196	4	4.776	1	8.886	1	52.489
<b>100</b>	4	9.962	2	4.476	1	9.016	1	54.823

Tabela 8 – Matriz Dubcova2 – Método GMRES sem reordenamento RCM

<b>K</b>	<b>GMRES (com preconditionamento)</b>		<b>GMRES + ILU(0)</b>		<b>GMRES + ILU(2)</b>		<b>GMRES + ILU(4)</b>	
	<b>Iterações</b>	<b>Tempo</b>	<b>Iterações</b>	<b>Tempo</b>	<b>Iterações</b>	<b>Tempo</b>	<b>Iterações</b>	<b>Tempo</b>
<b>20</b>	74	17.700	7	3.875	3	2.909	2	2.919
<b>50</b>	16	14.402	2	3.611	1	2.921	1	3.057
<b>100</b>	4	11.191	1	4.014	1	2.831	1	3.321

Tabela 9 – Matriz Dubcova2 – Método GMRES com reordenamento RCM

Comparando os resultados mostrados nas tabelas 8 e 9, concluímos que os melhores valores de  $k$  e  $p$  para GMRES sem reordenamento são respectivamente 50 e 100, e para GMRES sem reordenamento os melhores valores de  $k$  e  $p$  são 100 e 2.

O gráfico abaixo mostra o comportamento do resíduo ao longo das iterações do GMRES sem reordenamento:

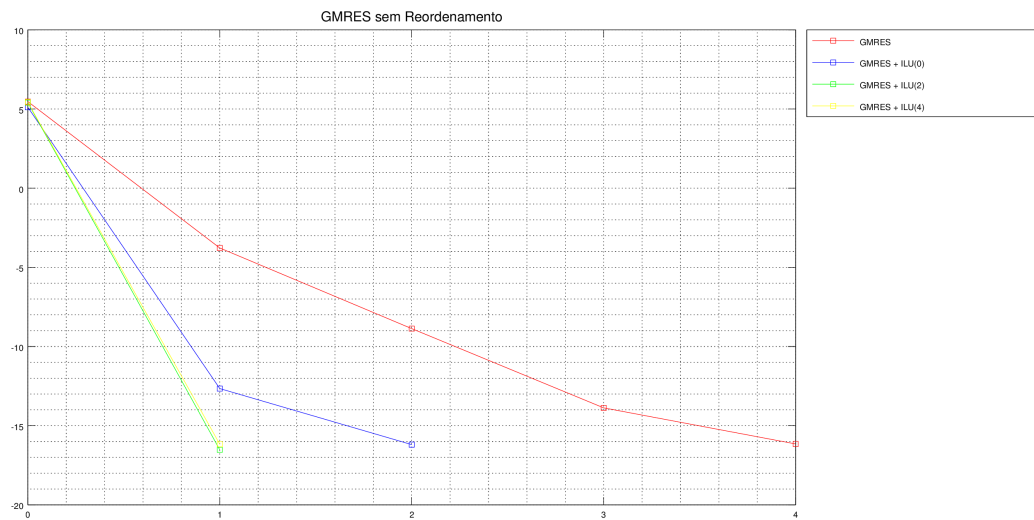


Figura 7: Matriz Dubcova2 - Método sem reordenamento –  $k = 50$

O gráfico abaixo mostra o comportamento do resíduo ao longo das iterações do GMRES com reordenamento. Comparando o gráfico abaixo com o gráfico acima com o gráfico a seguir, vê-se que o uso de reordenamento favoreceu o desempenho dos processos de GMRES com uso de *fill in*.

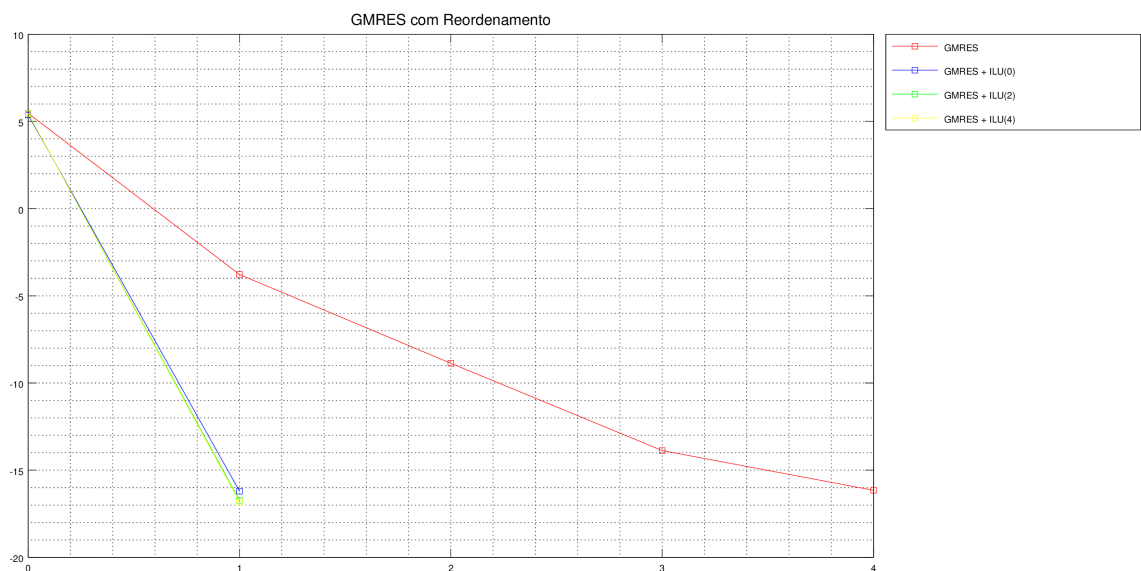


Figura 8: Matriz Dubcova2 - Método com reordenamento –  $k = 100$

## 4. Conclusões

Após análise dos tempos de experimentos gastos, assim como dos gráficos de comparação das melhores soluções obtidas, conclui-se primeiramente que problemas resolvíveis através de métodos iterativos são, na sua maioria, sensíveis as configurações do método GMRES. Em outras palavras, alguns problemas podem atingir convergência maior usando preconditionares, enquanto outros acabam gastando mais tempo para convergir na presença desses, por exemplo. Em geral, o uso de preconditionadores e coeficientes de *restart* para o método implica em processo de convergência mais rápido, como foi o caso das matrizes *rail\_5177*, *aft01* e *Dubcova2*. Por outro lado, a matriz *FEM\_3D\_thermal1* mostrou tempos menores durante processo iterativo sem ordenamento e, além disso, apresentou tempos praticamente similares para uso de preconditionamento ou não (com e sem *restart*), usando mais iterações quando gastou seu menor tempo.

Conclui-se então que o estudo do uso de condicionadores e coeficientes de *restart* está também ligado a natureza do problema. Em geral, essas ferramentas apresentam boa qualidade de solução, mas devem ser usadas com necessária criticidade e correta avaliação do contexto.

## 5. Referências

CARVALHO, Luiz Mariano; FORTES, Wagner R.; MANGIAVACCHI, Norberto. Precondicionadores e solucionadores para problemas de reservatório.

GONÇALEZ, Tífani Teixeira. Algoritmos adaptativos para o método GMRES (m). 2005.

LUGON, Brenno; CATABRIGA, Lucia. Algoritmos de reordenamento de matrizes esparsas aplicados a preconditionadores ILU (p).

MARTINOTTO, André Luis et al. Paralelização do Método do GMRES com MPI e Threads. **SCIENTIA, São Leopoldo**, v. 1, 2002.

JUNIOR, Nelson Gomes Brasil; GOMES-RUGGIERO, Márcia A. MÉTODOS ITERATIVOS PARA SISTEMAS LINEARES. 2011.

SAAD, Youcef; SCHULTZ, Martin H. GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. **SIAM Journal on scientific and statistical computing**, v. 7, n. 3, p. 856-869, 1986.