Projet de MPNA :
Méthode des itérations simultanées

Matthias Beaupère, Pierre Granger

Rapport MPNA - CHPS - 18 février 2019

Table des matières

1 Introduction

2 Problématique

3 Approche utilisée

4 Cas séquentiel

4.1 Description de l'algorithme général

Données du problèmes :
— m : taille du sous-espace de Krylov
— k : nombre de vecteurs propres demandé
— p : précision demandé
— A : matrice de taille $n * n$ donnée en entrée

— N : nombre d'itérations

Algorithm 1 Algorithme général

$Q \leftarrow rand()$
while $i = 0..N-1$ OU min(precisions) $<$ p **do**
  $Z = AQ$
  Gram-Schmidt Q
  Projection $B = Z^t AZ$
  Décomposition de Schur $B = Y^t RY$
  Retour dans l'espace d'origine $Q = ZY$
  Sélection des k vecteur propres
  Calcul de la précision
  Locking
end while

Dans les paragraphes suivant sont détaillés chaque étape de l'algorithme.

4.1.1 Procédé de Gram-Schmidt

On utilise une décomposition QR avec le procédé de Gram-Schmidt pour orthonormalisé la matrice Q. L'ortogonalisation consiste chaque vecteur de la matrice Z dans un vecteur temporaire tout en lui soustrayant son projeté sur chaque vecteur déjà ajouté. On normalise ensuite en divisant chaque vecteur par sa norme.

Algorithm 2 Algorithme de Gram-Schmidt

for $i = 0..m-1$ **do**
  $q_i^{temp} \leftarrow q_i$
  for $k = 0..i$ **do**
    $q_i^{temp} \leftarrow q_i^{temp} - q_k(q_k.q_i)$
  end for
end for
$Q \leftarrow Q^{temp}$

4.1.2 Décomposition de Schur

La décomposition de Schur permet de calculer les valeurs et vecteurs propre de l'espace de Krylov, aussi appelés valeurs et vecteurs de Ritz. Pour ce calcul a été utilisé la bibliothèque `lapacke`.

4.1.3 Sélection de k vecteurs propres

En entrée du programme est précisé le nombre k de vecteurs propres désirés. La précision est calculé uniquement sur les k vecteurs de plus grande valeur propre associée. Pour sélectionner ces vecteur, on range les vecteurs par valeur propre associée puis on ne garde que les k premiers.

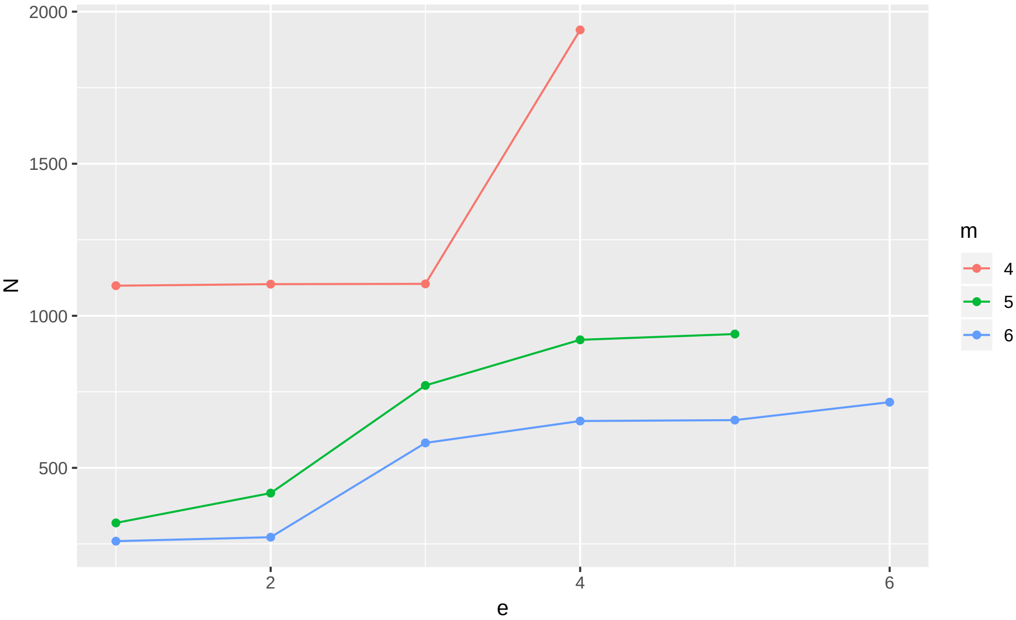

FIGURE 1 – Nombre d'itérations N nécessaires pour faire converger e valeurs propres pour différentes tailles de sous-espace de Krylov m et une précision $p = 10^{-6}$

4.1.4 Calcul de la précision

4.1.5 Locking

4.2 Étude de performances théorique

4.3 Étude de performances pratique

4.4 Ajout d'une méthode de déflation "Locking"

4.5 Conclusions

5 Cas parallèle

5.1 Approche utilisée

5.2 Étude de performances théorique

5.3 Étude de performances pratique

5.4 Conclusions

6 Conclusion générale

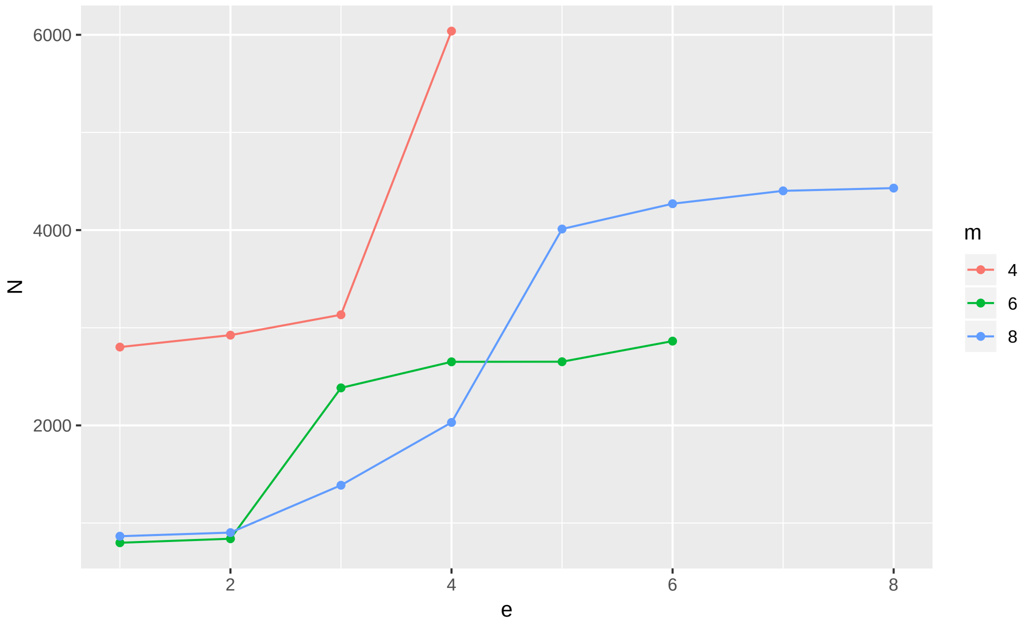

FIGURE 2 – Nombre d'itérations N nécessaires pour faire converger e valeurs propres pour différentes tailles de sous-espace de Krylov m et une précision $p = 10^{-8}$

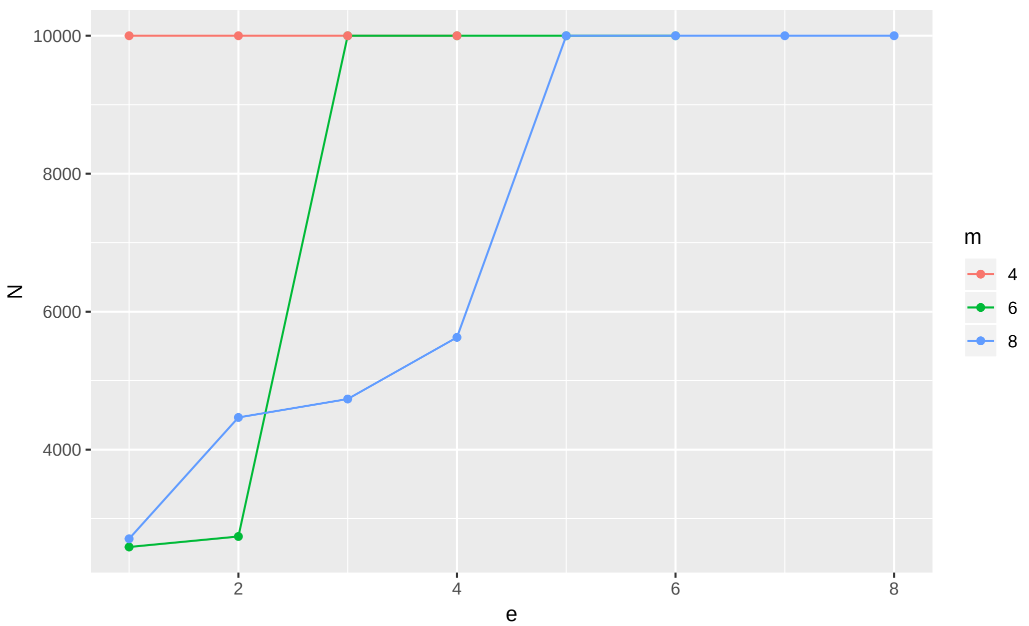

FIGURE 3 – Nombre d'itérations N nécessaires pour faire converger e valeurs propres pour différentes tailles de sous-espace de Krylov m et une précision $p = 10^{-10}$

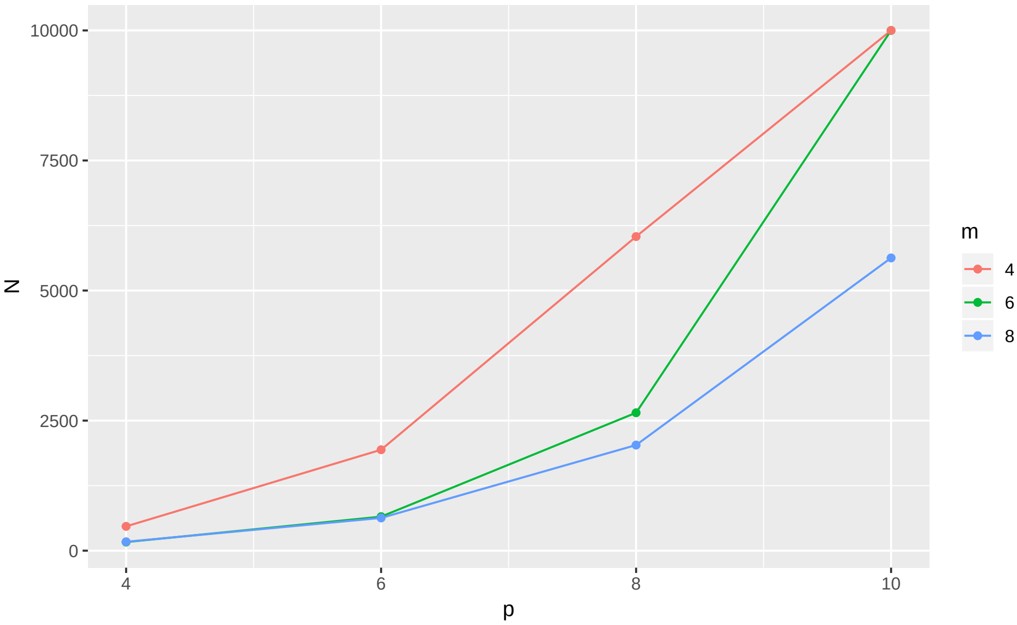

FIGURE 4 – Nombre d'itérations N nécessaires pour faire converger $e = 4$ valeurs propres pour différentes tailles de sous-espace de Krylov m et une précision p