

Présentation MPNA

Méthode des itérations simultanées

Matthias BEAUPÈRE & Pierre GRANGER

M2 CHPS

19 février 2019

Plan

- 1 Introduction
- 2 Présentation de l'algorithme
- 3 Séquentiel
- 4 Multicœurs
- 5 Multinœuds
- 6 Conclusion

Introduction

La méthode des itérations simultanées

Données d'entrée

- M : taille du sous-espace de Krylov
- k : nombre de vecteurs propres demandé
- p : précision demandé
- A : matrice de taille $N \times N$ donnée en entrée
- N_{iter} : nombre d'itérations

Description de l'algorithme

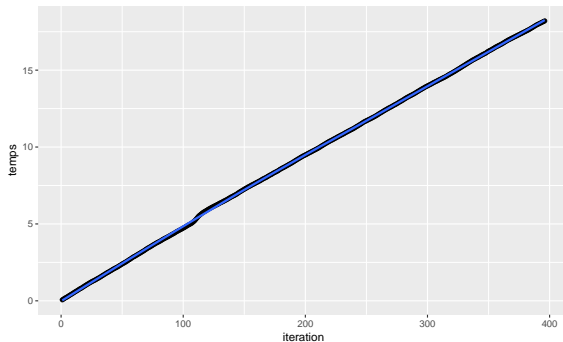
```
 $Q \leftarrow rand()$   
while  $i = 0..N_{iter} - 1$  OU  $\max(\text{precisions}) < p$  do  
     $Z = AQ$   
    Gram-Schmidt  $Q$   
    Projection  $B = Z^tAZ$   
    Décomposition de Schur  $B = Y^tRY$   
    Retour dans l'espace d'origine  $Q = ZY$   
    Calcul de la précision des vecteurs de  $Q$   
    Sélection des  $k$  vecteurs propres  
end while
```

Performances théoriques

Produit AQ	$O(N^2M)$
Gram-Schmidt	$O(NM \log(M))$
Projection	$O(N^2M)$
Décomposition de Schur	$O(1)$
Précision	$O(NM^2)$
Sélection	$O(1)$

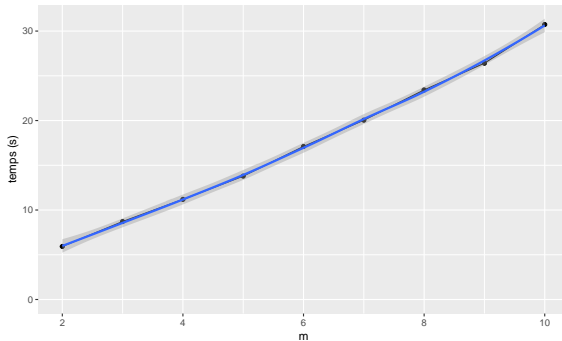
$$C^{tot} = O(N_{iter} N^2 M)$$

Nombre d'itérations



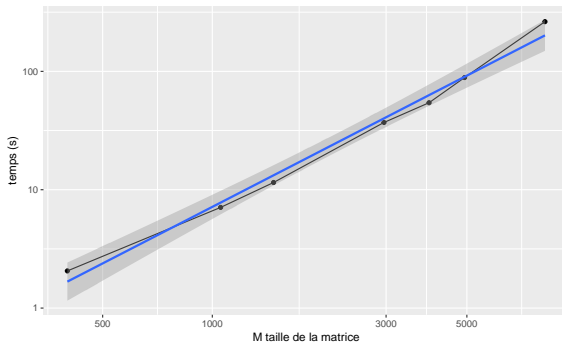
Evolution du temps de calcul en fonction du nombre d'itérations.

Taille du sous-espace de Krylov m



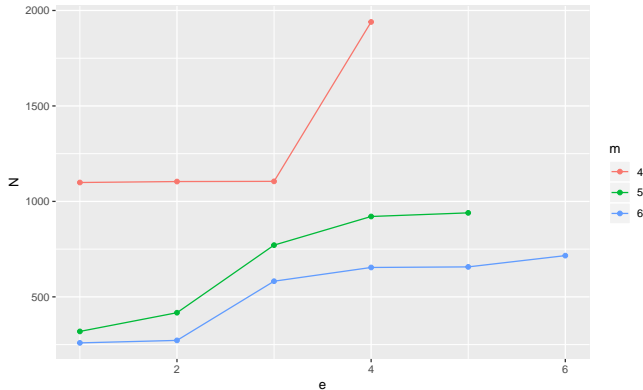
Evolution du temps de calcul en fonction de la taille du sous-espace de Krylov m .

Taille de la matrice M



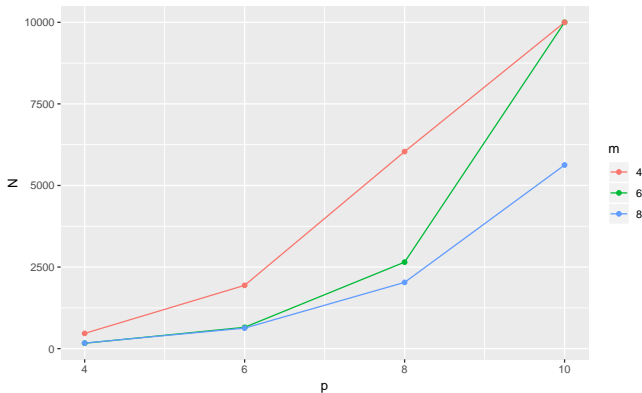
Evolution du temps de calcul en fonction de la taille de la matrice M .

Influence de m



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

Influence de p



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

Principe du locking

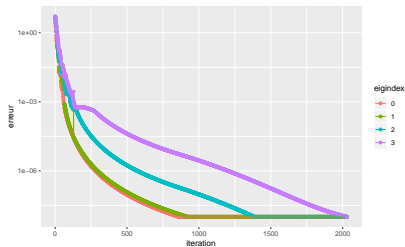
Justifications

- Vitesses de convergence différentes des vp.
- Perte de temps.
- Instabilités numériques.

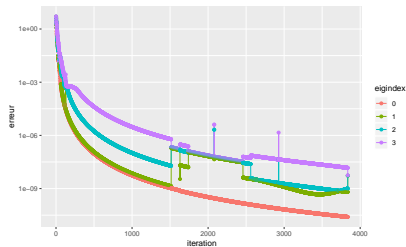
Le locking

- On verrouille les vp lorsqu'ils ont convergé.
- On ne le multiplie par A.
- On diminue m.
- On l'utilise pour l'orthonormalisation.

Performances du locking



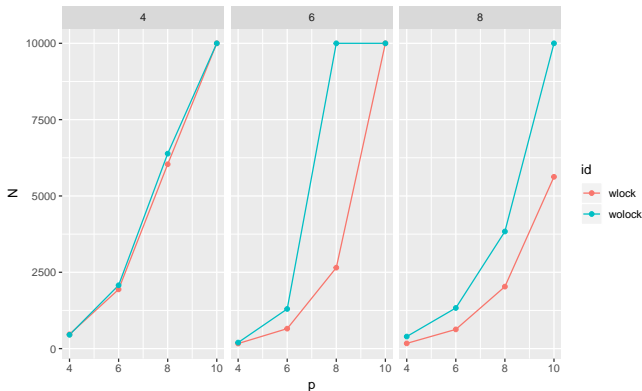
Avec locking



Sans locking

Précision au cours des itérations N pour $e = 4$ valeurs propres pour une taille de sous-espace de Krylov $m = 8$

Performances du locking



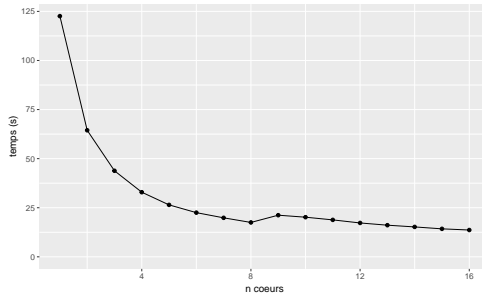
Nombre d'itérations N nécessaires pour faire converger $e = 4$ valeurs propres pour différentes tailles de sous-espace de Krylov m et une précision p avec et sans utilisation du locking

Multicœurs

Parallélisation OpenMP

- On parallélise les produits matriciels dans l'espace d'origine
- Pragmas devant les boucles parallélisables
- Pas de pénalité de communication
- Performance : $C \leftarrow \frac{C}{N_{\text{cores}}}$

Multicœurs : performances pratiques



Nœud avec 8 cœurs hyperthreadés pour un calcul de 4 valeurs propres avec
 $m = 8$ à $p = 10^{-8}$

Accélération x7 avec 8 cœurs physiques !

Multinœuds

Performances théoriques

Multinœuds : performances pratiques

Conclusion