Universidade Federal do Espírito Santo
DI/PPGI
1º Trabalho de Algoritmos Numéricos II / Computação Científica - 18/1

Sistemas Esparsos de Grande Porte Utilizando Métodos Iterativos Não Estacionários

Data de entrega: 04 de maio de 2018

1 Introdução

Frequentemente os processos de solução de problemas das mais diversas áreas do conhecimento recaem na necessidade de resolver sistemas lineares. Na maioria das vezes esses sistemas são esparsos e de grande porte. Nesse contexto, o uso de métodos diretos torna-se desaconselhável, por limitações de tempo e memória. Por outro lado, as abordagens iterativas tornam-se mais atraentes.

Os métodos iterativos são divididos em duas classes: estacionários, como Jacobi, Seidel e SOR, e não estacionários, como Gradientes Conjugados, GMRES e LCD. Os métodos iterativos não estacionários são formas alternativas que utilizam a minimização do resíduo em *Espaços Vetoriais de Krylov*. Geralmente, convergem mais rapidamente que os métodos iterativos estacionários.

2 Resolução de Sistemas Esparsos de Grande Porte

Seja $Ax = b$ um sistema linear, onde A é uma matriz esparsa de grande porte. Para resolver tal sistema de forma eficiente utilizando métodos iterativos não estacionários faz-se necessário armazenar a matriz A compactada.

2.1 Técnica de Compactação

Quando a matriz A dos coeficientes é esparsa, o sistema linear correspondente pode ser resolvido de forma mais eficiente se os elementos nulos não forem armazenados. Uma série de esquemas de armazenamento de matrizes esparsas foram idealizados para alocar memória de forma contígua com o objetivo de armazenar os elementos não nulos da matriz e, talvez, um número limitado de zeros. Isto, naturalmente, requer uma maneira de saber onde os elementos se encaixam no interior da matriz original. Dentre esses esquemas, podem ser citados o *Compressed Sparse Row* (CSR), *Compressed Column Storage* (CCS), armazenamento Diagonal e o armazenamento Skyline.

Neste trabalho vamos utilizar a técnica de compactação CSR. A matriz A é substituída por três vetores auxiliares AA, JA e IA. O vetor AA armazena todas as contribuições não nulas da matriz A, o vetor JA armazena a coluna correspondente que cada coeficiente não nulo ocuparia em A e o vetor IA mapea em AA o primeiro elemento não nulo de cada linha de A. A Fig. 1 apresenta um exemplo de aplicação da técnica de compactação CSR em uma matriz A de ordem 5×5, esparsa, composta por apenas 13 coeficientes não nulos.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 5 & 0 & 0 \\ 3 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & 0 & 7 & 8 & 9 \\ 0 & 0 & 3 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 5 \end{bmatrix}$$

$$AA \; \boxed{1 \quad 1 \quad 5 \quad 3 \quad 4 \quad 6 \quad 7 \quad 8 \quad 9 \quad 3 \quad 6 \quad 2 \quad 5}$$

$$JA \; \boxed{1 \quad 2 \quad 3 \quad 1 \quad 2 \quad 1 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \quad 3 \quad 4 \quad 3 \quad 5}$$

$$IA \; \boxed{1 \quad 4 \quad 6 \quad 10 \quad 12 \quad 14}$$

Figura 1: Exemplo de uma matriz A representada no formato CSR.

3 Objetivos

- Implementar os métodos iterativos GMRES(k) e LCD(k).
- Realizar um estudo sobre a utilização de métodos iterativos não estacionários no contexto de matrizes esparsas de grande porte.
- Verificar a influência do número de vetores na base, k, para a convergência dos métodos GMRES(k) e LCD(k).

4 Experimentos Numéricos

Para alcançar os objetivos do presente trabalho deve ser feito um relatório detalhado sobre alguns experimentos numéricos. Siga exatamente os passos descritos a seguir para realizar os experimentos.

4.1 Matrizes para Experimentos

Utilize as matrizes esparsas descritas na Tab. 1 oriundas do Repositório de Matrizes da *University of Florida/Department of Computer and Information Science and Engineering (CISE)*[1]. O formato indicado do arquivo para todas as matrizes é <nome da matriz>.mtx.

Matriz	Área de Aplicação	n	nnz
Plat1919	Modelo Oceanográfico	1919	32399
sherman5	Recuperação de Petróleo	3312	20793
rail_5177	Transferência de Calor	5177	35185
aft01	Problema de Acústica	8205	125567
FEM_3D_ thermal1	Problema Térmico	17880	430740
wathen100	Problema randômico 2D/3D	30401	471601
Dubcova2	Problema 2D/3D	65025	1030225

Tabela 1: Matrizes a serem utilizadas nos experimentos numéricos

Importante: As matrizes listadas na Tab. 1 encontram-se armazenadas no arquivo `matrizes.tgz`.

[1] http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/

4.2 Leitura das Matrizes

Utilize a função `MATRIX_readCSR` (função definida dentro do arquivo `matrix.c`) para ler os arquivos .mtx e carregar as informações nos vetores AA, JA e IA correspondentes ao armazenamento CSR de cada matriz definida na Tab. 1. A figura 2 apresenta todos os campos que serão utilizados no formato CSR. Note que além dos vetores convencionais AA, JA e IA, a estrutura nomeada tipo MAT, ainda armazena separadamente os elementos da diagonal no vetor de double D e inteiros m, n, e nz.

```
typedef struct
{
        double*     AA;
        double*      D;
        int*        JA;
        int*        IA;
        int     m,n,nz;
} MAT;
```

Figura 2: Estrutura de dados MAT: contendo os vetores do CSR

Observe que os coeficientes não nulos estão listados coluna a coluna e não existe informações sobre os coeficientes do vetor de termos independentes b. Nesse trabalho será considerada a matriz transposta (A^t) como a matriz dos coeficientes do sistema

$$A^t x = b \tag{1}$$

Considerando a solução do sistema conhecida, ou seja, tomando $x = (1, 1, ..., 1)^t$, o vetor b será obtido da seguinte forma:

$$b = A^t x \implies b_i = \sum_{i=1}^{n} a_{ij}. \tag{2}$$

Sendo A^t a transposta da matriz oriunda do arquivo .mtx.

4.3 Resolução dos Sistemas Lineares

Nesse passo, a função que solucionará o sistema receberá como parâmetros de entrada a matriz dos coeficientes no formato CSR, o vetor de termos independentes, a tolerância, o número máximo de vetores na base de Krylov e por fim o número máximo de iterações. Os parâmetros de saída serão a solução do sistema linear e o número total de iterações realizadas pelo GMRES (ou LCD).
Importante: Você deverá implementar as funções `gmres.c` e `lcd.c` bem como as operações de produto matriz-vetor em CSR.

4.4 Experimentos

Para cada uma das matrizes listadas na Tab. 1, resolva o sistema linear associado utilizando os métodos GMRES e LCD. Varie a quantidade de vetores na base de Krylov com valores 5, 20, 50 e 100 (parâmetro k). Anote em uma tabela o número de

	GMRES		LCD	
k	**Iterações**	**Tempo**	**Iterações**	**Tempo**
5				
20				
50				
100				

Tabela 2: Matriz rail_5177

iterações e o tempo de processamento, em segundos, de cada conjunto de parâmetros. A Tab. 2 ilustra como apresentar os dados da matriz rail_5177.

Para uma melhor compreensão do estudo da convergência, escolha para cada uma das matrizes apresentadas na Tab. 1 o valor de k que resultou em um menor tempo de processamento utilizando o método GMRES ou o método LCD. Para cada configuração escolhida, faça um gráfico do número de iterações em função da logaritmo do resíduo da solução (iter $\times \log(||r||)$) comparando os métodos GMRES e LCD.

5 Estrutura do relatório

O relatório deve ser escrito observando as normas do padrão ABNT e salvo em pdf. A divisão do relatório deve ser de acordo com as seguintes seções:

- **Introdução:** apresentar a estrutura do trabalho e os objetivos
- **Referencial Teórico** um pequeno resumo considerando todos os métodos e técnicas abordados.
- **Experimentos Numéricos:** onde serão apresentadas tabelas, gráficos bem como seus respectivos comentários. É imperativo descrever nessa seção qual foi o *software* e *hardware* utilizado.
- **Conclusão:** onde serão discutidos os resultados obtidos.

6 Considerações gerais sobre o trabalho

- O trabalho (relatório e códigos) deve ser enviado por e-mail para luciac@inf.ufes.br até o dia 04/05/2018.
- inclua no seus códigos um arquivo `readme.txt` com indicações de como rodar o seu código.
- Os códigos serão testados no Linux.
- Para os alunos da disciplina Algoritmos Numéricos II: O assunto do e-mail deve ser AN2181:TRAB1:<nome1>-<nome2>, contendo em anexo, um arquivo do tipo TRAB1<nome1>-<nome2>.zip. Neste caso <nome1><nome2> deve conter o nome e último sobrenome os participantes do trabalho (por exemplo, AN2181:TRAB1:LuciaCatabriga-JoseSilva)

- Para os alunos da disciplina Computação Científica: O assunto do e-mail deve ser CC181:TRAB1:<nome1>-<nome2>, contendo em anexo, um arquivo do tipo TRAB1<nome1>-<nome2>.zip. Neste caso <nome1><nome2> deve conter o nome e último sobrenome os participantes do trabalho (por exemplo, CC81:TRAB1:LuciaCatabriga-JoseSilva)
- Qualquer código que você tenha implementado deve ser anexado ao arquivo .zip descrito no item anterior.
- Caso o arquivo seja enviado múltiplas vezes, apenas a última versão enviada será considerada.