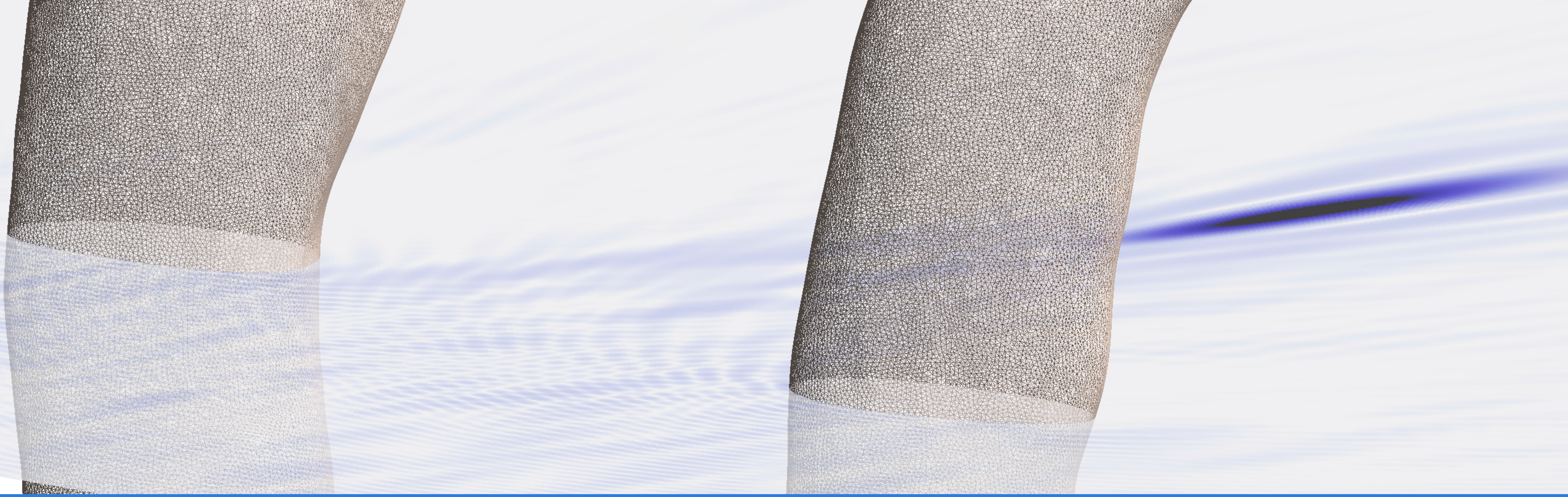


IMT2112 - Algoritmos Paralelos en Computación Científica

Métodos iterativos paralelos

Elwin van ‘t Wout

15 de octubre de 2019

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE

Facultad de Matemáticas • Escuela de Ingeniería

imc.uc.cl

Clase previa

- Resolver sistemas lineales *sparse* con métodos directos y métodos iterativos

Agenda

- ¿Como mejorar la eficiencia de métodos iterativos?

Métodos iterativos para resolver sistemas lineales

Sección 5.5 del libro de Eijkhout

Métodos para resolver sistemas lineales

- Métodos directos son eficientes para
  - matrices densas
  - tamaños pequeños
  - solución de alta precisión

- Métodos iterativos son eficientes para
  - matrices ralas
  - tamaños grandes
  - flexibilidad en precisión

Métodos del subespacio de Krylov

- La familia más popular de métodos iterativos
- Las estimaciones pertenecen al subespacio de Krylov

$$x_m \in \mathcal{K}_m = \mathrm{span}\{b, Ab, A^2 b, \ldots, A^{m-1} b\}$$

- Estrategias para encontrar estimaciones "buenas"
  - residuos ortogonal al subespacio de Krylov (CG)
  - minimización de residuos en todo el subespacio de Krylov (GMRes)

Métodos del subespacio de Krylov

- Gradientes Conjugados (*CG*)
  - limitado a matrices simétricas positivas definidas (*spd*)
  - algoritmo de recurrencia corta

- Residuo mínimo generalizado (*GMRes*)
  - matrices generales
  - algoritmo de recurrencia larga
    - todos los residuos anteriores son necesarios
    - se puede reiniciar GMRes

El teorema de Gershgorin

- Matriz es positiva definita si $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} > 0$ para todos $\boldsymbol{x} \neq 0$
  - Para matrices simétricas: valores propios positivos

- El teorema de Gershgorin puede demostrar que una matriz tiene valores propios positivos
  - Todos los valores propios de una matriz se ubican en el conjunto de los 'discos de Gershgorin' en el plano de valores complejos
  - Los discos de Gershgorin son definidos como
    - el centro es el valor en el diagonal
    - el radio es la suma de los valores absolutos en una fila, salvo el diagonal

Convergencia de CG

- CG encuentra la solución exacta en *n* iteraciones
  - en el caso de aritmética exacta

- Para encontrar una precisión dada, normalmente se require menos iteraciones
  - la convergencia de CG depende del número de acondicionamiento
  - igual a la fracción del valor propio máximo y mínimo, en el caso de una matriz simétrica
    - se puede usar Gershgorin para acotar este

$$||\mathbf{u} - \mathbf{u}_k||_A \leq 2 \left(\frac{\sqrt{\kappa_2(A)} - 1}{\sqrt{\kappa_2(A)} + 1} \right)^k ||\mathbf{u} - \mathbf{u}_0||_A$$

Métodos iterativos en paralelo

Sección 6.6 del libro de Eijkhout

Métodos iterativos paralelos

- Hay dependencias entre las iteraciones
  - son basados en mejoramiento de la aproximación de forma iterativo
  - entonces, ¡no se puede paralelizar la iteración!

- Variables básicas en cada iteración:
  - estimación, residuo y dirección de búsqueda

Gradientes Conjugados para $K^{-1}Ax = K^{-1}b$

Compute $r^{(0)} = Ax^{(0)} - b$ for some initial guess $x^{(0)}$

for $i = 1, 2, \ldots$

    solve $Kz^{(i-1)} = r^{(i-1)}$

    $\rho_{i-1} = r^{(i-1)^T} z^{(i-1)}$

    if $i = 1$

        $p^{(1)} = z^{(0)}$

    else

        $\beta_{i-1} = \rho_{i-1}/\rho_{i-2}$

        $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$

    endif

    $q^{(i)} = Ap^{(i)}$

    $\delta_i = \rho_{i-1}/p^{(i)^T} q^{(i)}$

    $x^{(i)} = x^{(i-1)} - \delta_i p^{(i)}$

    $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \delta_i q^{(i)}$

    check convergence; continue if necessary

end

Métodos iterativos para resolver sistemas lineales

- Las dependencias entre iteraciones reducen la capacidad de paralelizar

- Cada iteración consta de operaciones básicas
  - actualizaciones de vectores (*vector update*)
  - productos puntos
  - productos de matriz-vector

- La parte más cara de CG es típicamente el producto matriz-vector

- Estrategia de paralelización: paralelizar las operaciones de álgebra lineal en cada iteración

Preacondicionamiento

Sección 6.7 del libro de Eijkhout

Eficiencia de métodos iterativos

- La complejidad de resolver sistemas lineales
  - métodos directos: $O(n^3)$
  - métodos iterativos: $O(N_{\text{iter}}\, n^2)$
  - mejor rendimiento para matrizes ralas

- Mejoramiento del rendimiento
  - paralelizar: solo álgebra lineal
  - preacondicionamiento: menos iteraciones

Preacondicionamiento de métodos iterativos

- La convergencia de métodos iterativos depende del espectro (todos valores propios) de la matriz
  - primer medida de convergencia: número de acondicionamiento

- Resolver el sistema $M^{-1}Ax=M^{-1}b$ en lugar de $Ax=b$
  - la solución no cambia
  - ahora la convergencia depende del espectro de $M^{-1}A$, lo cual es distinto
  - ahora la matvec $M^{-1}Ax$ tiene dos componentes: $y=Ax$ y $z=M^{-1}y$, en lo cual el segundo es resolver el sistema
  - la matriz M se llama el preacondicionador

Preacondicionamiento de métodos iterativos

- Elegir el preacondicionador M es responsabilidad del programador
  - dado que $M^{-1}A$ tiene un espectro mejor que A
    - en la práctica: un número de acondicionamiento menor
  - dado que M^{-1} es simple para calcular
    - en la práctica: resolver el sistema lineal de forma exacta

- Preacondicionadores extremos
  - perfecto: $M=A$
  - trivial: $M=I$

- Guía para elegir el preacondicionador
  - M parecida a A
  - M sencilla para resolver

Preacondicionador de Jacobi

- Un preacondicionador común es el de Jacobi
  - M es el diagonal de A
  - también conocido como `escalamiento diagonal'

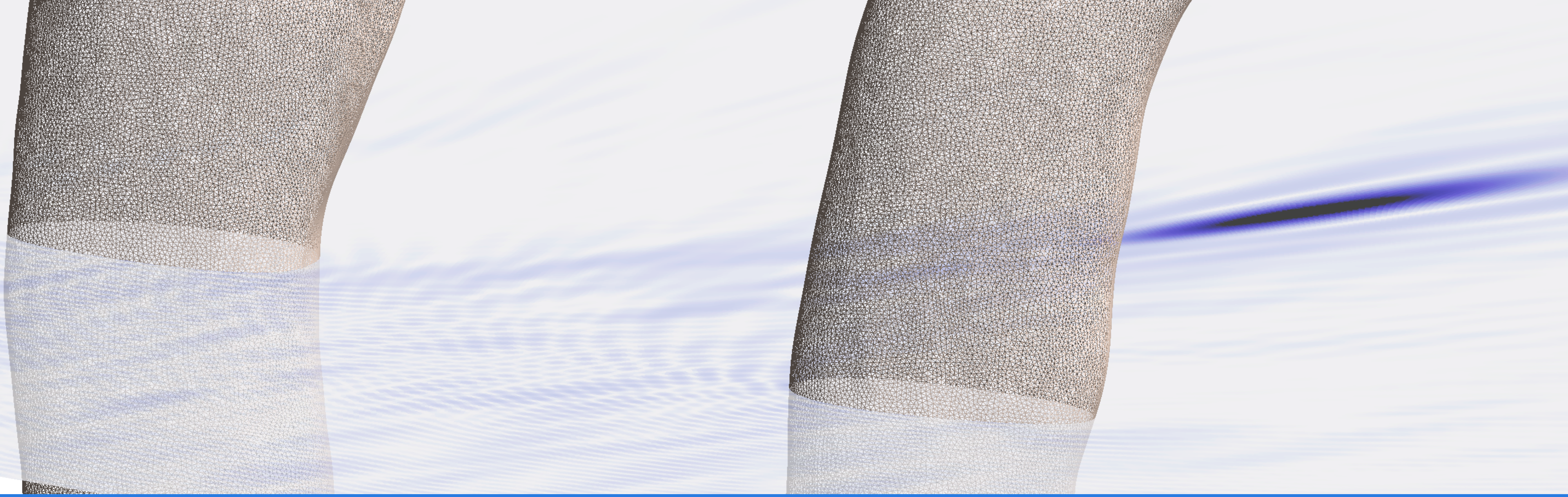
- Gershgorin: todos los valores propios `cerca' de uno

Resumen

- Resolver sistemas lineales con métodos iterativos paralelos
- El método de gradientes conjugados preacondicionado

Clase siguiente

- Preacondicionamiento de ILU



IMT2112 - Algoritmos Paralelos en Computación Científica

Métodos iterativos paralelos

Elwin van ‘t Wout

15 de octubre de 2019

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE

Facultad de Matemáticas • Escuela de Ingeniería