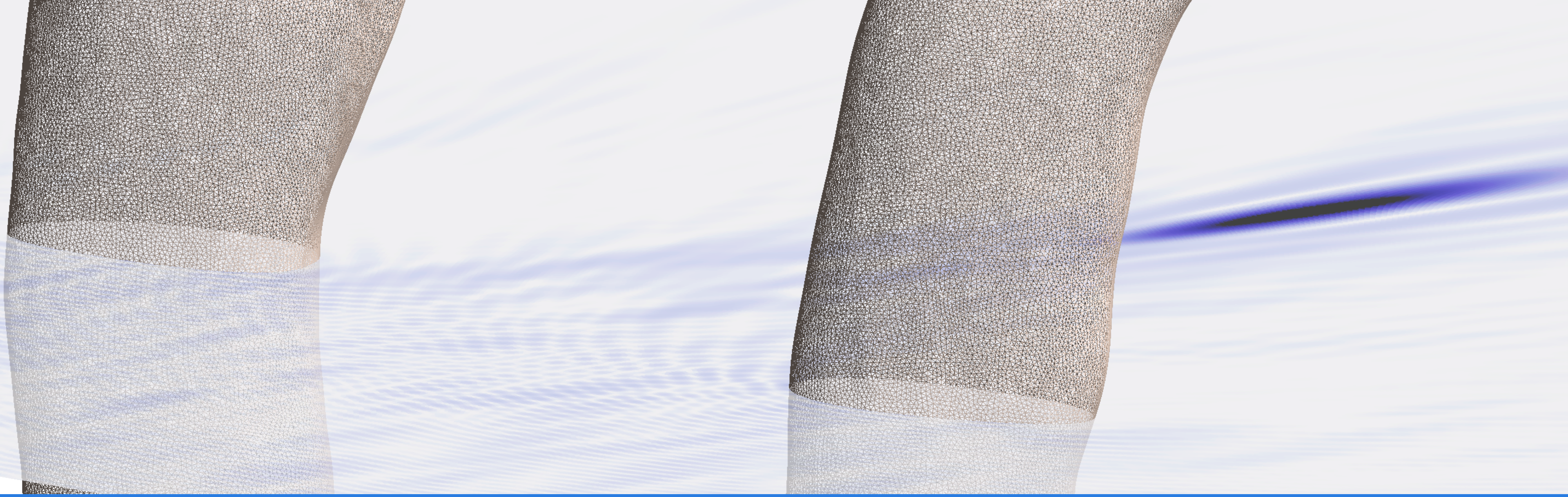


IMT2112 - Algoritmos Paralelos en Computación Científica

Métodos iterativos para resolver sistemas lineales

Elwin van ‘t Wout

10 de octubre de 2019

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE

Facultad de Matemáticas • Escuela de Ingeniería

imc.uc.cl

Clase previa

- La multiplicación matriz por vector *sparse* en paralelo

Agenda

- ¿Como resolver un sistema lineal *sparse* en paralelo?

Métodos iterativos para resolver sistemas lineales

Sección 5.5 del libro de Eijkhout

Solvers lineales

- Una pregunta importante es: cómo resolver $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ para una matriz A
  - las dimensiones de la matriz pueden ser enormes
  - tan eficiente como sea posible (precisión y velocidad)
  - este es a menudo el algoritmo que consume más tiempo dentro de muchos métodos numéricos (por ejemplo, FEM)

Solvers lineales

- Métodos directos
  - ejemplo: factorización LU
  - Un algoritmo para calcular la solución exactamente
    - exacto = precisión de la máquina
  - preciso pero lento

- Métodos iterativos
  - ejemplos: gradientes conjugados (CG - *Conjugate Gradients*) y residual mínima generalizada (GMRes - *Generalised Minimum Residual*)
  - actualizar iterativamente la estimación de la solución
    - terminar cuando se haya alcanzado una precisión especificada
  - rápido pero inexacto

Solvers lineales *sparse*

- Métodos directos
  - el relleno (*fill-in*) aumenta considerablemente la memoria
  - métodos avanzados pueden reducir el ancho de banda

- Métodos iterativos
  - el producto matriz-vector es la subrutina que consume más tiempo
    - relativamente rápido para matrices ralas
  - el número de iteraciones requeridas a menudo aumenta con la complejidad del problema

Solvers lineales *sparse*

- Elija un método directo para
  - matrices densas
  - matrices pequeñas
  - alta precisión

- Elija un método iterativo para
  - matrices ralas
  - matrices grandes
  - flexibilidad en precisión

- La elección real depende mucho del problema

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”
  - residual ortogonal al subespacio de Krylov (CG)
  - minimización de residuos en el subespacio de Krylov (GMRes)

Métodos del subespacio de Krylov

- Gradientes Conjugados (*CG*)
  - limitado a matrices simétricas positivas definidas (*spd*)
  - algoritmo de recurrencia corta
- Residual mínimo generalizado (*GMRes*)
  - matrices generales
  - algoritmo de recurrencia larga
    - todos los residuos anteriores son necesarios
    - se puede reiniciar GMRes

El teorema de Gershgorin

- CG es limitado a matrices s.p.d.

- El teorema de Gershgorin puede demostrar que una matriz es positiva definita
  - 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 Gersgorin 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

Álgebra lineal numérica

Para mas información:
IMT2111 Álgebra Lineal Numérica (primer semestre)

Métodos iterativos en paralelo

Sección 6.6 del libro de Eijkhout

Métodos iterativos para resolver sistemas lineales

- La resolución del sistema lineal a partir de métodos numéricos generalmente se realiza con *solvers* lineales iterativos

- Métodos del subespacio de Krylov
  - Gradientes Conjugados (CG)
  - Residual mínimo generalizado (GMRes)

- Variables básicas en *solvers* lineales iterativos:
  - 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

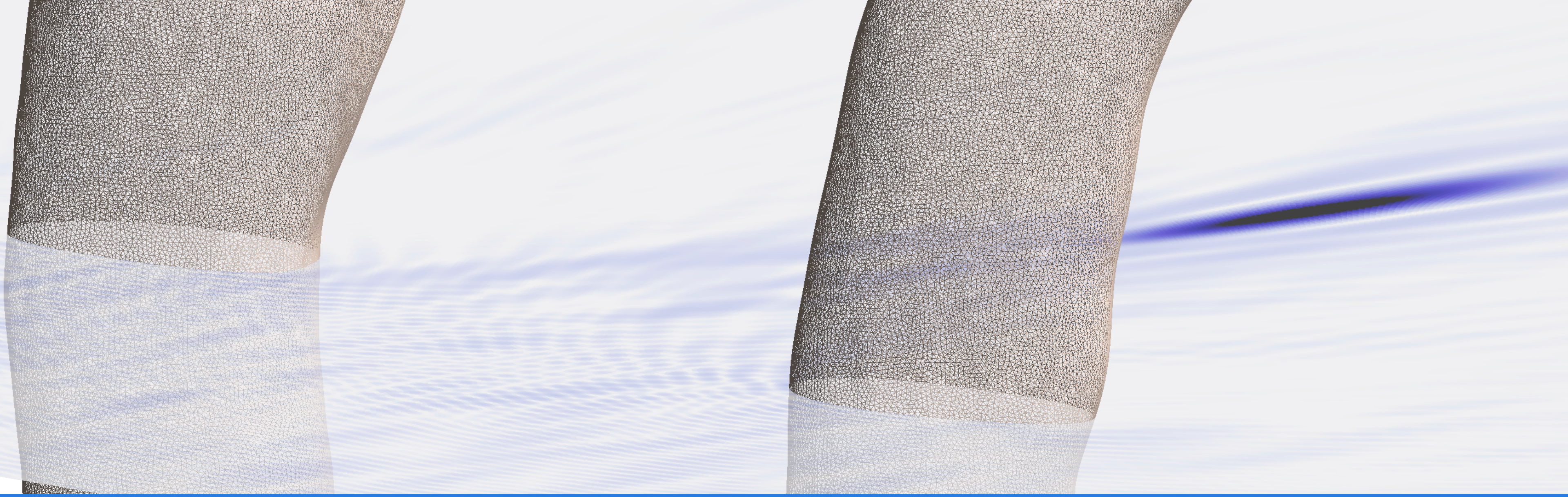
- Estrategia de paralelización: paralelizar las operaciones de álgebra lineal en cada iteración

Resumen

- Resolver sistemas lineales con métodos iterativos
- El método de gradientes conjugados en paralelo

Clase siguiente

- Usar preacondicionamiento para mejorar el desempeño de métodos iterativos



IMT2112 - Algoritmos Paralelos en Computación Científica

Métodos iterativos para resolver sistemas lineales

Elwin van ‘t Wout
10 de octubre de 2019

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE

Facultad de Matemáticas • Escuela de Ingeniería

imc.uc.cl