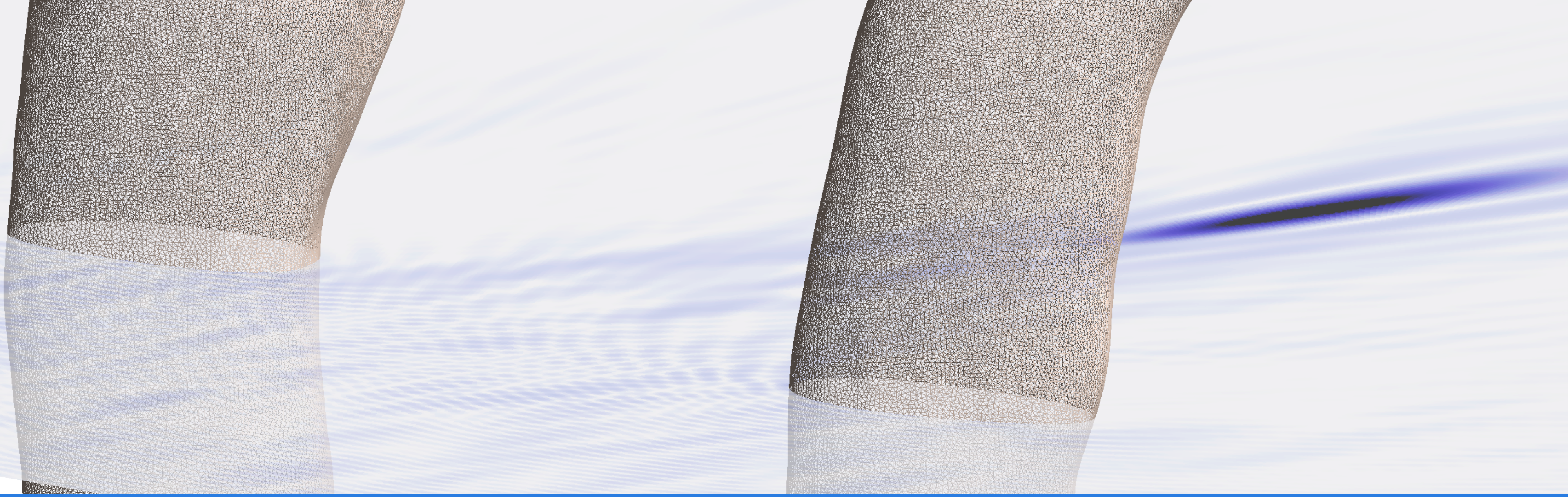


IMT2112 - Algoritmos Paralelos en Computación Científica

Métodos numéricos

Elwin van 't Wout

3 de octubre de 2019

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE

Facultad de Matemáticas • Escuela de Ingeniería

Clase previa

- La programación de comunicación en MPI

Agenda

- ¿Cuál es el impacto de aritmética de precisión finita en álgebra lineal?

- ¿Como aproximar la solución de un problema de condición de frontera?

Aritmética de precisión finita

Secciones 3.1-3.3 del libro de Eijkhout

Aritmética de precisión finita

- Los computadores usan bits para guardar información
  - hay un número máximo para representar

- Un número entero como objeto en C++
  - **int**: 32 bits con rango de $[-2^{31}, 2^{31}-1]$ = [-2.147.483.648, 2.147.483.647]
  - **unsigned int**: 32 bits con rango de $[0, 2^{32}-1]$ = [0, 4.294.967.295]
  - **long**: 64 bits con rango de $[-2^{63}, 2^{63}-1]$

- El *overflow* y *underflow*
  - int a = 2.147.483.647
  - a+1 = -2.147.483.648

Aritmética de precisión finita

- Un número real se guarda con un punto flotante
  - número real = signo X mantisa X base^exponente

- Un número real como objeto en C++
  - float: 32 bits (signo 1, mantisa 23, exponente 8)
  - double: 64 bits (signo 1, mantisa 52, exponente 11)

- El rango positivo de números reales
  - float: $[2^{-126}, 2^{+127}] = [1.2 \times 10^{-38}, 1.7 \times 10^{+38}]$
  - double: $[2^{-1022}, 2^{+1023}] = [2.2 \times 10^{-308}, 9.0 \times 10^{+307}]$

- La precisión de máquina para puntos flotantes
  - float: $2^{-24} = 6.0 \times 10^{-8}$
  - double: $2^{-53} = 1.1 \times 10^{-16}$

Aritmética de precisión finita

- Operadores como la suma y multiplicación no son asociativos en aritmética de precisión finita
  - $x+(y+z)$ no es siempre igual a $(x+y)+z$

- Operadores de reducción en paralelo pueden cambiar el orden de ejecución y, por lo tanto, el error de redondeo en la operación

Álgebra lineal en aritmética del computador

Secciones 5.1-5.3 del libro de Eijkhout

Descomposición LU

- La solución del sistema

$$\begin{bmatrix} \epsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1+\epsilon \\ 2 \end{bmatrix}$$

es $x_1=1$ y $x_2=1$

- La descomposición LU es

$$\begin{bmatrix} \epsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \epsilon & 0 \\ 1 & 1-\frac{1}{\epsilon} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{\epsilon} \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Descomposición LU

- En aritmética de precisión finita y con

$$\epsilon < \epsilon_{\text{machine}}$$

más pequeña que la precisión de máquina, tenemos

$$1 + \epsilon = 1,$$

$$1 + \frac{1}{\epsilon} = \frac{1}{\epsilon}$$

Descomposición LU

- Resolver el sistema

$$\begin{bmatrix} \epsilon & 0 \\ 1 & 1-\frac{1}{\epsilon} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{\epsilon} \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1+\epsilon \\ 2 \end{bmatrix}$$

en aritmética de precisión finita resulta en

$$\begin{bmatrix} \epsilon & 0 \\ 1 & \frac{1}{\epsilon} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{\epsilon} \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

y con sustitución tenemos x_1=0 y x_2=1, ¡lo cual es incorrecto!

Descomposición LU

- Resolver el sistema equivalente

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \epsilon & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1+\epsilon \end{bmatrix}$$

  con LU en aritmética de precisión finita resulta en x_1=1 y x_2=1, ¡lo cual es correcto!

- Cambiar las filas se llama 'pivoteo parcial'
  - evitar valores pequeños en el diagonal
  - 'pivoteo completo' is cambiar el orden de ambas filas y columnas

El método de diferencias finitas

Sección 4.2 del libro de Eijkhout

Métodos numéricos

- Problemas de condición de frontera
  - ecuación parcial en espacio
  - condiciones en la frontera del dominio

- Muchos problemas físicos se puede modelar con problemas de condición de frontera

- In general, no tiene solución en forma cerrada
  - no solución en términos de funciones elementales

- Se tiene que aproximar la solución
  - métodos numéricos

Métodos numéricos

- El método de diferencias finitas
  - crear una malla rectangular en el dominio
  - aproximar derivadas con diferencias finitas entre vecinos
  - resolver un sistema lineal

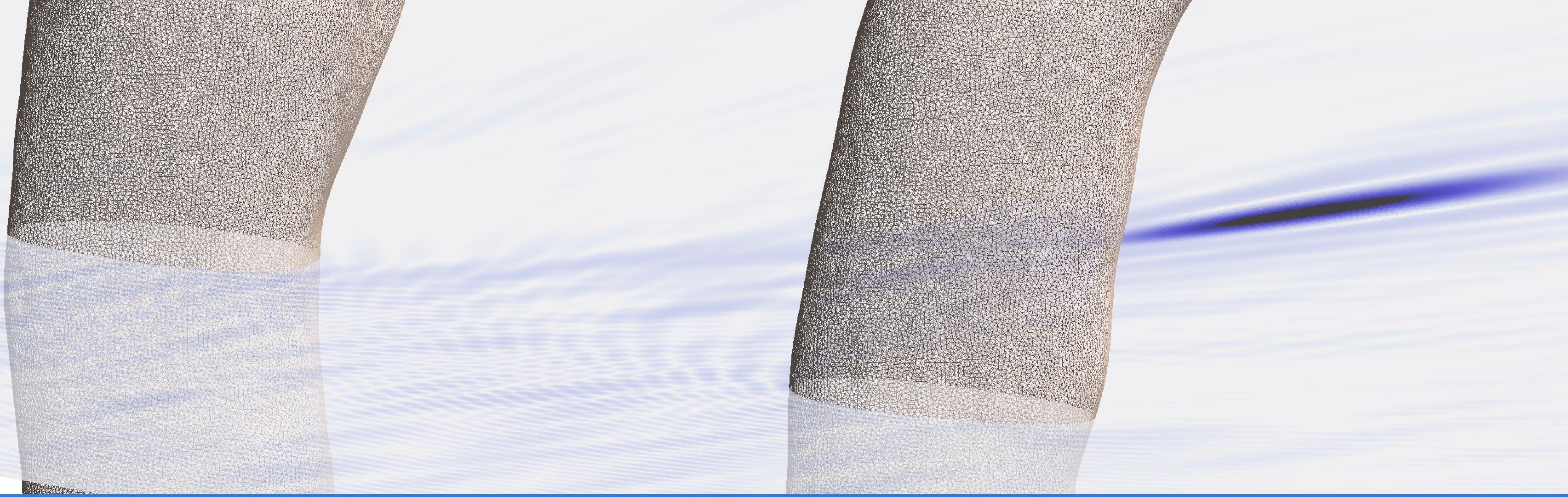
- El sistema lineal resultante es *sparse*
  - para una matriz de n x n solo $O(n)$ elementos son distintos a cero
  - en el caso de mallas estructurados, la matriz tiene solo un número fijo de diagonales con valores distinto a cero

Resumen

- Aritmética de precisión finita
- Álgebra lineal con error de redondeo
- El método de diferencias finitas

Clase siguiente

- Álgebra lineal con matrizes *sparse* en paralelo



IMT2112 - Algoritmos Paralelos en Computación Científica

Métodos numéricos

Elwin van 't Wout

3 de octubre de 2019

PONTIFICIA
UNIVERSIDAD
CATÓLICA
DE CHILE

Facultad de Matemáticas • Escuela de Ingeniería

imc.uc.cl