LNCC - Programa de Verão 2008

Minicurso M16
Estrutura de Dados e Solvers

Lucia Catabriga
www.inf.ufes.br/~luciac

LCAD - Laboratório de Computação de Alto Desempenho
Departamento de Informática - CT/UFES

Ementa do Curso

- Introdução
- Estudo de Armazenamento de Matrizes Esparsas:
  - armazenamentos globais e armazenamentos locais aplicados ao método das diferenças finitas e ao método dos elementos finitos;
- Métodos de solução de sistemas lineares: Diretos, iterativos;
- Métodos Iterativos: Estacionários, Não-estacionários;
- Métodos Não-estacionários:
  - Método dos Gradientes Conjugados;
  - Método do Resíduo Mínimo Generalizado (GMRES);
  - Métodos das direções conjugadas à esquerda (LCD);
- Estudo de Precondicionadores:
  - Fatorações tipo Gauss-Seidel e fatorações tipo ILU.
- Solução de sistemas não-lineares:
  - Método de Newton inexato;
  - Critérios de parada.

Referências

www.inf.ufes.br/~luciac

- **Barret, R, et al., ``Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods'', SIAM, 1994.**
- **Shewchuk, J. R., ``An Introduction to the Conjugate Gradient Method Withuot the Agonizing Pain'', 1994.**
- Dongarra, J.J., Duff, I.S., Sorasen, D.C., Van der Vorst, H.A., Numerical LInear Algebra for High-Performance Computers, SIAM, 1998.
- Golub, G. and Van Loan, C., "Matrix Computations", The John Hopkins University Press,1993.
- Kelley C.T., "Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations", SIAM, 1995.
- **Saad, Y., "Iterative Methods for Sparse Linear Systems", PWS Publishing Company, 1996.**
- **White, R.E., "Computational Modeling with Methods and Analysis", 2003.**

3 – Solução de Sistemas Lineares Métodos Diretos

- Introdução
- Solução de sistemas triangulares
- Eliminação de Gauss
- Decomposição LU
- Métodos diretos x Matrizes Esparsas

Introdução

- Característica:
  - encontra a solução exata a menos de erros de arredontamento
- Objetivo:
  - transformar o sistema em um sistema trivial (sistema triangular)
- Complexidade:
  - em torno de n^3 (número de operações de ponto flutuante)

Sistemas triangulares

Sistema Triangular Inferior Lx = c

$$\begin{bmatrix} l_{11} & & & & \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \Rightarrow x_i = \frac{c_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} x_j}{l_{ii}}, \; i = 1, 2, \cdots, n$$

Substituição (Complexidade: ≈n^2)

Sistema Triangular Superior Ux = d

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1,n-1} & u_{1n} \\ & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2,n-1} & u_{2,n} \\ & & u_{33} & \cdots & u_{3,n-1} & u_{3,n} \\ & & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & & u_{n-1,n-1} & u_{n-1,n} \\ & & & & & u_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{bmatrix} \Rightarrow x_i = \frac{d_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_j}{u_{ii}}, \; i = 1, 2, \cdots, n$$

Retrosubstituição
(Complexidade: ≈n^2)

Reduação a Sistemas triangulares

Eliminação de Gauss

$$Ax = b \underbrace{\Longrightarrow}_{\substack{\textit{Operações Elementares} \\ L_i \leftarrow L_i - m_{ij} L_j \\ L_i \leftarrow \lambda L_j \\ L_i \leftrightarrow L_j}} Ux = d$$

Complexidade ≈ n^3

Decomposição LU

$$Ax = b \underbrace{\Longrightarrow}_{A=LU} L\underbrace{Ux}_{d} = b \Longrightarrow \begin{matrix} Ld = b \\ Ux = d \end{matrix}$$

Redução a Sistemas triangulares

Processo de Eliminação de Gauss

$$A|b = \left[\begin{array}{cccccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1,n-1} & a_{1n} & b_1 \\ \boxed{\begin{array}{c} a_{21} \\ a_{31} \\ \vdots \\ a_{n-1,1} \\ a_{n1} \end{array}} & \begin{array}{c} a_{22} \\ a_{32} \\ \vdots \\ a_{n-1,2} \\ a_{n2} \end{array} & \begin{array}{c} a_{23} \\ a_{33} \\ \vdots \\ a_{n-1,3} \\ a_{n3} \end{array} & \begin{array}{c} \cdots \\ \cdots \\ \ddots \\ \cdots \\ \cdots \end{array} & \begin{array}{c} a_{2,n-1} \\ a_{3,n-1} \\ \vdots \\ a_{n-1,n-1} \\ a_{n,n-1} \end{array} & \begin{array}{c} a_{2,n} \\ a_{3,n} \\ \vdots \\ a_{n-1,n} \\ a_{nn} \end{array} & \begin{array}{c} b_2 \\ b_3 \\ \\ b_{n-1} \\ b_n \end{array} \end{array}\right] \quad \begin{array}{c} m_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{a_{11}} \\ L_i \leftarrow L_i - m_{i1}L_1 \\ a_{ij} \leftarrow a_{ij} - m_{i1}a_{1j} \\ b_i \leftarrow b_i - m_{i1}b_1 \\ ij = 2,\cdots,n \end{array} \rightarrow \left[\begin{array}{c|c} \begin{array}{c} a_{11} \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{array} & \begin{array}{c} \begin{array}{ccccc|c} a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1,n-1} & a_{1n} & b_1 \end{array} \\ \boxed{\begin{array}{ccccc|c} a^1_{22} & a^1_{23} & \cdots & a^1_{2,n-1} & a^1_{2,n} & b^1_2 \\ a^1_{32} & a^1_{33} & \cdots & a^1_{3,n-1} & a^1_{3,n} & b^1_3 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \\ a^1_{n-1,2} & a^1_{n-1,3} & \cdots & a^1_{n-1,n-1} & a^1_{n-1,n} & b^1_{n-1} \\ a^1_{n2} & a^1_{n3} & \cdots & a^1_{n,n-1} & a^1_{nn} & b^1_n \end{array}} \end{array} \end{array}\right]$$

$$A^{k-1}|b^{k-1} = \left[\begin{array}{cccccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ & a^1_{22} & \cdots & a^1_{2k} & \cdots & a^1_{2,n} & b^1_2 \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & a^{k-1}_{kk} & \cdots & a^{k-1}_{kn} & b^{k-1}_k \\ & & & \boxed{\begin{array}{c} \vdots \\ a^{k-1}_{nk} \end{array}} & \begin{array}{c} \ddots \\ \cdots \end{array} & \begin{array}{c} \vdots \\ a^{k-1}_{nn} \end{array} & \begin{array}{c} \vdots \\ b^{k-1}_n \end{array} \end{array}\right] \quad \begin{array}{c} m_{ik} = \dfrac{a_{ik}}{a_{kk}} \\ L_i \leftarrow L_i - m_{ik}L_k \\ a_{ij} \leftarrow a_{ij} - m_{ik}a_{kj} \\ b_i \leftarrow b_i - m_{ik}b_k \\ ij = k+1,\cdots,n \end{array} \rightarrow \left[\begin{array}{cccccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ & a^1_{22} & \cdots & a^1_{2k} & \cdots & a^1_{2,n} & b^1_2 \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & a^{k-1}_{kk} & \cdots & a^{k-1}_{kn} & b^{k-1}_k \\ & & & & \boxed{\begin{array}{ccc} \ddots & \vdots & \vdots \\ \cdots & a^k_{nn} & b^k_n \end{array}} & & \end{array}\right]$$

n-1 etapas totalizando complexidade em torno de n^3

Redução a Sistemas triangulares

Processo de Decomposição LU

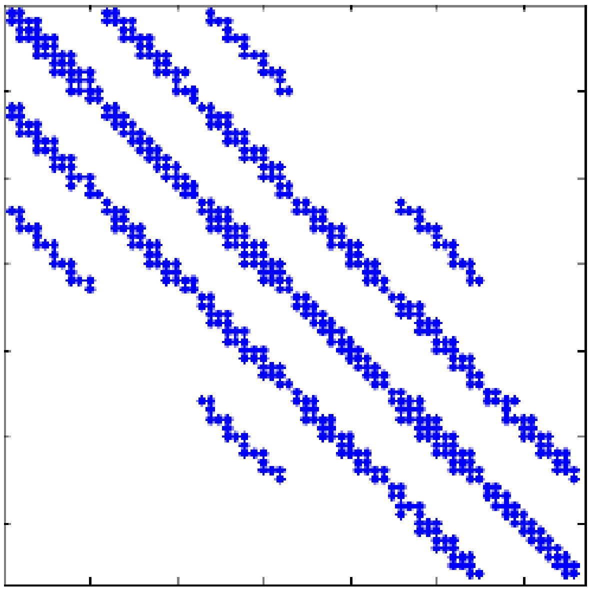
$$\overbrace{L=\begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ m_{21} & 1 & & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\ m_{n-1,1} & m_{n-1,2} & m_{n-1,3} & \cdots & 1 & \\ m_{n1} & m_{n2} & m_{n3} & \cdots & m_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} \quad U=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{22}^{1} & \cdots & a_{2k}^{1} & \cdots & a_{2,n}^{1} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{kk}^{k-1} & \cdots & a_{kn}^{k-1} \\ & & & & \ddots & \vdots \\ & & & & & a_{nn}^{k} \end{bmatrix}}^{A=LU}$$

$$Ax=b \underbrace{\Rightarrow}_{A=LU} L\underbrace{Ux}_{d}=b \Rightarrow \begin{matrix} Ld=b \\ Ux=d \end{matrix}$$

n-1 etapas totalizando complexidade em torno de n^3

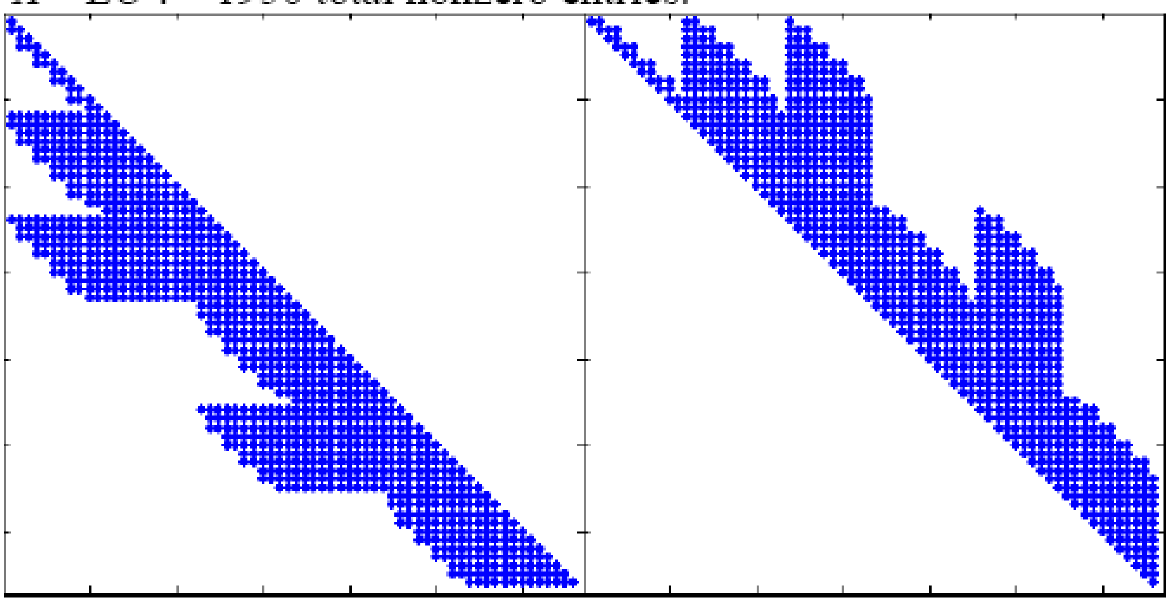
Métodos Diretos x Matrizes Esparsas

Matrix A :   582 nonzero entries.



- O processo de decomposição preenche com coeficientes não-nulos posições orginalmente nulas!
- Armazenamento SKL ou banda completa.

$A = LU$:   1950 total nonzero entries.



4 – Solução de Sistemas Lineares Métodos Iterativos Estacionários

- Introdução
- Critérios de convergência e Parada
- Jacobi
- Seidel
- SOR
- Métodos iterativos x Matrizes Esparsas

Introdução

- Características:
  - encontra a solução aproximada com precisão pré-fixada,
  - depende de critérios de convergência relacionados a matriz dos coeficientes A.
- Objetivo:
  - transformar o sistema em uma expressão recurssiva tal que $x^{(k+1)} = F(x^{(k)}, A, b)$ para uma condição inicial $x^{(0)}$ conhecida.
- Complexidade:
  - em torno de n^2 por iteração.

Introdução

$$Ax = b \Rightarrow x = Cx + g \underbrace{\Rightarrow}_{Definição} x^{(k+1)} = Cx^{(k)} + g$$

- **Resultado necessário e suficiente**: O método iterativo $x^{(k+1)} = Cx^{(k)}+g$ converge com qualquer valor inicial $x^{(0)}$ se, e somente se, $\rho(C) < 1$.

  $\rho(C)$ é o raio espectral de C (maior autovalor em módulo)

- **Resultado suficiente**: O método iterativo $x^{(k+1)} = Cx^{(k)}+g$ converge com qualquer valor inicial $x^{(0)}$ se $||C|| < 1$.

- **Critérios de Parada**: $x^{(k+1)}$ é solução aproximada com tolerância ε se:

$$\frac{\left\| x^{(k)} - x^{(k-1)} \right\|}{\left\| x^{(k)} \right\|} < \varepsilon \quad ou \quad \|r\| = \|b - Ax\| < \varepsilon$$

Métodos Jacobi, Seidel e SOR

$$\begin{matrix} Ax = b \\ (L+D+U)x = b \end{matrix} \Rightarrow \begin{matrix} Dx = -(L+U)x + b \\ (L+D)x = -Ux + b \end{matrix} \Rightarrow \begin{matrix} x_J^{(k+1)} = -D^{-1}(L+U)x_J^{(k)} + D^{-1}b \\ x_S^{(k+1)} = -D^{-1}Lx_S^{(k+1)} - D^{-1}Ux_S^{(k)} + D^{-1}b \end{matrix}$$

$$\left(x_i^{(k+1)}\right)_J = \frac{b_i - \sum\limits_{j=1 \ \ j\neq i}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}}{a_{ii}}$$

$$\left(x_i^{(k+1)}\right)_S = \frac{b_i - \sum\limits_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum\limits_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}}{a_{ii}}$$

$$\left(x_i^{(k+1)}\right)_{SOR} = w\left(x_i^{(k+1)}\right)_S + (1-w)\left(x_i^{(k)}\right)_{SOR}$$

- O método SOR converge para $0<w<2$
- Os coeficientes de A e b não são alterados durante o processo iterativo

Métodos Iterativos Estacionários x Matrizes Esparsas

- Somente os coeficientes não nulos necessitam ser armazenados
- A linha genérica i do sistema resultante da discretização por diferenças finitas para um problema bidimensional é:

$$a_{i,i-n}x_{i-n} + a_{i,i-1}x_{i-1} + a_{ii}x_i + a_{i,i+1}x_i + a_{i,i+n}x_{i+n} = b_i$$

$$\left(x_i^{(k+1)}\right)_J = \frac{b_i - a_{i,i-n}x_{i-n}^{(k)} - a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k)} - a_{i,i+1}x_i^{(k)} - a_{i,i+n}x_{i+n}^{(k)}}{a_{ii}}$$

$$\left(x_i^{(k+1)}\right)_S = \frac{b_i - a_{i,i-n}x_{i-n}^{(k+1)} - a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k+1)} - a_{i,i+1}x_i^{(k)} - a_{i,i+n}x_{i+n}^{(k)}}{a_{ii}}$$

$$\left(x_i^{(k+1)}\right)_{SOR} = w\left(\frac{b_i - a_{i,i-n}x_{i-n}^{(k+1)} - a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k+1)} - a_{i,i+1}x_i^{(k)} - a_{i,i+n}x_{i+n}^{(k)}}{a_{ii}}\right) + (1-w)x_i^k$$