



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΙΙ

ΑΝΑΛΥΣΗΣ, ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ & ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΚΑΙ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

**«ΔΙΑΧΩΡΙΣΜΟΣ ΜΕΓΑΛΟΥ ΚΑΙ ΑΡΑΙΟΥ ΓΡΑΜΜΙΚΟΥ
ΣΥΣΤΗΜΑΤΟΣ ΣΕ ΑΝΕΞΑΡΤΗΤΑ ΥΠΟΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΚΑΙ ΕΠΙΛΥΣΗ
ΤΟΥ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ SCHUR COMPLEMENT-GMRES»**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΤΟΥ

ΙΩΑΝΝΗ ΑΝΑΓΝΩΣΤΟΠΟΥΛΟΥ

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ

ΑΝΔΡΕΑΣ ΜΠΟΥΝΤΟΥΒΗΣ

ΑΘΗΝΑ, ΙΟΥΝΙΟΣ 2015

Ευχαριστίες

Ευχαριστώ θερμά τον επιβλέποντα Καθηγητή Ανδρέα Μπουντουβή για τη μοναδική ευκαιρία που μου έδωσε να γνωρίσω τον κλάδο της Υπολογιστικής Μηχανικής και την υποστήριξη που μου προσέφερε καθ' όλη τη διάρκεια της εκπόνησης της εργασίας μου.

Ταυτόχρονα, ευχαριστώ θερμά τον Δρα Αντώνη Σπυρόπουλο για τη συνεχή βοήθεια και καθοδήγηση που μου προσέφερε κατά την εκπόνηση της διπλωματικής μου εργασίας.

Περιεχόμενα

Ευχαριστίες.....	2
Περιεχόμενα.....	1
Κατάλογος διαγραμμάτων.....	4
Περίληψη.....	5
Abstract.....	6
1 Μέθοδοι διαχωρισμού χωρίων (Domain Decomposition Methods).....	7
1.1 Εισαγωγή.....	7
1.1.1 Συμβολισμός.....	8
1.1.2 Τύποι Διαχωρισμού.....	9
1.1.3 Τύποι Τεχνικών.....	9
1.2 Άμεση λύση και Schur Complement.....	11
1.2.1 Block Gaussian Απαλοιφή.....	11
1.2.2 Ιδιότητες της μεθόδου Schur Complement.....	13
1.2.3 Πρόταση.....	13
2 Η επαναληπτική μέθοδος GMRES.....	15
2.1 Εισαγωγή.....	15
2.2 Γενικές μέθοδοι προβολής.....	15
2.3 Αναπαράσταση Πίνακα.....	15
2.3.1 Πρότυπος αλγόριθμος μεθόδου προβολής.....	16
2.4 Μέθοδοι υποχώρου Krylov.....	16
2.5 Υπόχωροι Krylov.....	17
2.6 Ο βασικός αλγόριθμος Arnoldi.....	18
2.6.1 Αλγόριθμος Arnoldi.....	18
2.6.2 Πρόταση.....	19
2.6.3 Πρακτικές Εφαρμογές.....	19
2.7 Ο βασικός αλγόριθμος GMRES.....	20

2.7.1	Αλγόριθμος GMRES	21
2.8	Πρακτικά ζητήματα εφαρμογής της μεθόδου GMRES.....	21
2.9	Διακοπή (Breakdown) της επαναληπτικής μεθόδου GMRES.....	24
2.10	Παραλλαγή: Restarted GMRES ή GMRES(m)	24
2.10.1	Αλγόριθμος GMRES(m)	24
3	Προσέγγιση Schur Complement	26
3.1	Αλγόριθμος Schur Complement-GMRES.....	27
3.2	Αλγόριθμος Schur Complement-GMRES(m)	27
4	Παράλληλη επεξεργασία	28
4.1	Ορολογία πυρήνων	28
4.2	Πρότυπα παράλληλης επεξεργασίας.....	28
5	Επίλυση του προβλήματος συνοριακών τιμών.....	30
5.1	Εισαγωγή	30
5.2	Πρόβλημα	30
5.3	Πρώτο στάδιο: Επίλυση του προβλήματος συνοριακών τιμών με απαλοιφή Gauss 31	
5.4	Δεύτερο στάδιο: Αλλαγή της αρίθμησης κόμβων και της σχέσης κόμβων- συντεταγμένων.....	31
5.5	Τρίτο στάδιο: Χρήση μεθόδου Schur Complement	31
5.6	Τέταρτο στάδιο: Χρήση της επαναληπτικής μεθόδου GMRES	32
6	Μελέτη της επίλυσης του συστήματος $Ax = b$	34
6.1	Εισαγωγή	34
6.1.1	Πληροφορίες συστήματος και compiler	34
6.1.2	Μεταβλητές που χρησιμοποιήθηκαν για τη μέθοδο GMRES σε συνδυασμό με τη μέθοδο Schur Complement.....	34
6.2	Σειριακή Επίλυση	36
6.2.1	Ανάλυση για τις επαναλήψεις της μεθόδου GMRES	36
6.2.2	Ανάλυση για το συνολικό χρόνο επίλυσης	37

6.3	Παράλληλη επίλυση	38
6.3.1	Ανάλυση για το συνολικό χρόνο επίλυσης	39
6.3.2	Ανάλυση για τον αριθμό των threads	40
6.4	Σύγκριση της σειριακής και της παράλληλης επίλυσης με χρήση της μεθόδου Schur Complement	41
6.5	Ανάλυση για τη μέγιστη διάσταση υποχώρου Krylov	43
6.6	Επίλυση μεγαλύτερων συστημάτων	45
6.7	Ανάλυση των παραμέτρων της επίλυσης	46
6.7.1	Schur Complement, χρόνος επίλυσης και χρήση της μνήμης	47
6.7.2	Παράλληλη επεξεργασία και χρόνος επίλυσης	47
6.7.3	Αριθμός υποχωρίων, χρόνος επίλυσης και χρήση της μνήμης	48
6.7.4	Επίλυση ανεξάρτητων συστημάτων και χρόνος επίλυσης	48
6.7.5	Restarted GMRES, χρόνος επίλυσης και χρήση της μνήμης	49
6.7.6	Ανοχή της μεθόδου GMRES, χρόνος επίλυσης και χρήση της μνήμης	49
7	Βιβλιογραφία	50

Κατάλογος διαγραμμάτων

Διάγραμμα 6-1: Σχέση των επαναλήψεων της GMRES για την επίλυση του συστήματος $Sy = g'$ με τον αριθμό υποχωρίων, $N = 2651$	36
Διάγραμμα 6-2: Σχέση speedup επίλυσης του συστήματος $Ax = b$ με τον αριθμό υποχωρίων, $N = 2651$	38
Διάγραμμα 6-3: Σχέση speedup επίλυσης του συστήματος $Ax = b$ με τον αριθμό υποχωρίων, $N = 2651$	39
Διάγραμμα 6-4: Σχέση speedup επίλυσης του συστήματος $Ax = b$ με τον αριθμό threads, $N = 20181$	40
Διάγραμμα 6-5: Σχέση των επαναλήψεων της GMRES για την επίλυση του συστήματος $Sy = g'$ με τον αριθμό υποχωρίων, $N = 5887$	42
Διάγραμμα 6-6: Σχέση speedup επίλυσης του συστήματος $Ax = b$ με τον αριθμό υποχωρίων, $N = 5887$	42
Διάγραμμα 6-7: Σχέση των επαναλήψεων της GMRES για την επίλυση του συστήματος $Sy = g'$ με τον αριθμό υποχωρίων και τις μέγιστες διαστάσεις υποχώρου Krylov, $N = 20181$	44
Διάγραμμα 6-8: Σχέση speedup επίλυσης του συστήματος $Ax = b$ με τον αριθμό υποχωρίων και τις μέγιστες διαστάσεις υποχώρου Krylov, $N = 20181$	44
Διάγραμμα 6-9: Σχέση επαναλήψεων της GMRES για την επίλυση του συστήματος $Sy = g'$ με τον αριθμό υποχωρίων, $N = 30419$	45
Διάγραμμα 6-10: Σχέση speedup επίλυσης του συστήματος $Ax = b$ με τον αριθμό υποχωρίων, θέτοντας ως σημείο αναφοράς τον μεγαλύτερο χρόνο επίλυσης, $N = 30419$.	46

Περίληψη

Η άνοδος της παράλληλης επεξεργασίας, μέσω των πολυπύρηνων επεξεργαστών αλλά και των πυρήνων καρτών γραφικών ή συν-επεξεργαστών, ανανέωσε το ενδιαφέρον για την ανάπτυξη Μεθόδων Διαχωρισμού Χωρίου σε ανεξάρτητα υποχωρία.

Στην εργασία αυτή επιχειρήθηκε η χρήση της μεθόδου Schur Complement σε συνδυασμό με την επαναληπτική μέθοδο προβολής σε υπόχωρο Krylov, GMRES, για την επίλυση ενός δισδιάστατου προβλήματος συνοριακών τιμών, στο οποίο έγινε διακριτοποίηση μέσω της μεθόδου Πεπερασμένων Στοιχείων.

Στα πλαίσια της εργασίας αναπτύχθηκε κώδικας σε γλώσσα Fortran 95/2003, ο οποίος εκτελέσθηκε στο cluster Andromeda του Υπολογιστικού Κέντρου της Σχολής Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ (CECC). Μελετήθηκε η σύγκλιση του αλγορίθμου Schur Complement-GMRES αλλά και ο χρόνος σειριακής και παράλληλης επίλυσης του προβλήματος με την χρήση του αλγορίθμου. Ταυτόχρονα, έγινε σύγκριση του χρόνου επίλυσης του αλγορίθμου με τον αλγόριθμο που επιλύει το αρχικό μη-διαχωρισμένο χωρίο.

Διαπιστώθηκε μεγάλη επιτάχυνση της επίλυσης του προβλήματος μέσω της χρήσης της μεθόδου Schur Complement, ακόμη και στον κώδικα που εκτελέσθηκε σειριακά. Δόθηκαν οι παράμετροι που επηρεάζουν τον χρόνο επίλυσης, την χρήση της μνήμης και την ακρίβεια της λύσης και αναλύθηκαν ώστε να προκύψει ένα σύνολο κανόνων για την μέγιστη επιτάχυνση.

Abstract

With the advent of parallel computing through multicore processors, GPGPUS or coprocessors, there is a renewed interest for development of Domain Decomposition Methods, which decompose a single domain to separate subdomains.

A 2-dimensional boundary value problem was discretized by the finite element method and solved by using the Schur Complement Method in conjunction with the iterative projection to Krylov subspace method, GMRES.

For the purposes of this thesis, Fortran 95/2003 code was developed and executed on the Andromeda cluster, residing at the N.T.U.A. Chemical Engineering Computer Center (CECC). Both the convergence of the algorithm Schur Complement-GMRES and its serial and parallel solution time were studied. Concurrently, the aforementioned algorithm was compared to the solution time of the algorithm that solved the initial non-decomposed domain.

The outcome was a large speedup, when solving the problem with the Schur Complement method, even for the code that was executed in a serial manner. Parameters that have an effect on the solution time, the use of memory and the accuracy of the solution were studied, in order to achieve the maximum speedup.

1 Μέθοδοι διαχωρισμού χωρίων (Domain Decomposition Methods)

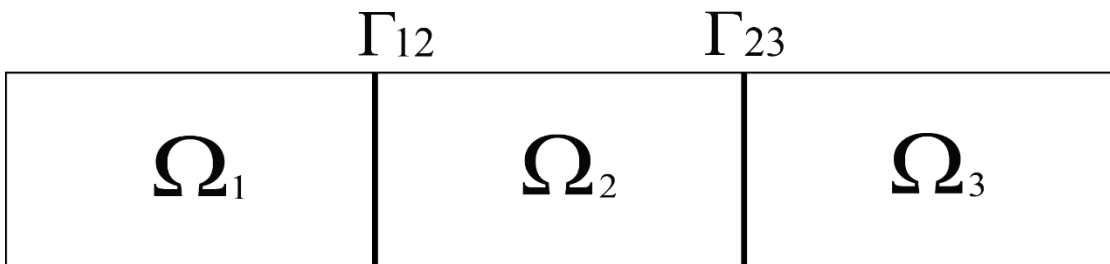
1.1 Εισαγωγή

Οι μέθοδοι διαχωρισμού χωρίων αναφέρονται σε μία συλλογή τεχνικών που στηρίζονται στην αρχή της διαίρεσης-και-κατάκτησης (divide-and-conquer). Τέτοιες μέθοδοι αναπτύχθηκαν κυρίως για την επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων σε χωρία δύο ή τριών διαστάσεων.

Έστω το πρόβλημα της επίλυσης της εξίσωσης Laplace σε ένα χωρίο Ω με σχήμα παραλληλογράμμου που διαχωρίζεται όπως φαίνεται στα παρακάτω σχήματα.



Σχήμα 1-1: Ένα χωρίο με σχήμα παραλληλογράμμου.



Σχήμα 1-2: Το χωρίο που φαίνεται στο Σχήμα 1-1 διαχωρίζεται σε τρία παραλληλόγραμμα υποχωρία.

Οι μέθοδοι διαχωρισμού χωρίων επιλύουν το πρόβλημα σε ολόκληρο το χωρίο

$$\Omega = \bigcup_{i=1}^s \Omega_i$$

χρησιμοποιώντας τις λύσεις στα υποχωρία Ω_i . Υπάρχουν διάφοροι λόγοι που εξηγούν γιατί τέτοιες τεχνικές είναι πρακτικές. Στην περίπτωση της παραπάνω εικόνας, φαίνεται ότι τα υποπροβλήματα επιλύονται ευκολότερα λόγω της παραλληλόγραμμης γεωμετρίας. Ένας δεύτερος λόγος είναι ότι το πρόβλημα μπορεί να χωριστεί σε μικρού αριθμού υποπροβλήματα όπου οι εξισώσεις μοντελοποίησης είναι διαφορετικές.

Η αρχική δομή κατανέμεται σε s τμήματα και το καθένα από αυτά είναι αρκετά μικρό ώστε να χωράει στη μνήμη του υπολογιστή. Τότε, χρησιμοποιείται μία μορφή της block-Gaussian απαλοιφής [1] για να επιλυθεί το καθολικό γραμμικό σύστημα από μία αλληλουχία λύσεων που προκύπτουν από s υποσυστήματα. Το πρόσφατο ενδιαφέρον για τις τεχνικές διαχωρισμού χωρίου οφείλεται στην παράλληλη επεξεργασία.

1.1.1 Συμβολισμός

Για να αναλυθούν τα ζητήματα και οι τεχνικές που θα χρησιμοποιηθούν παρακάτω, γίνεται αναφορά στον αντίστοιχο συμβολισμό, υποθέτοντας ότι επιλύεται το παρακάτω πρόβλημα:

$$\Delta u = f \text{ στο χωρίο } \Omega$$

$$u = u_\Gamma \text{ πάνω στο σύνορο } \Gamma = \partial\Omega.$$

Οι μέθοδοι διαχωρισμού χωρίων βασίζονται άμεσα ή έμμεσα στους διαφορετικούς τρόπους χειρισμού των αγνώστων στις διεπιφάνειες. Από την οπτική γωνία των μερικών διαφορικών εξισώσεων (PDE), εάν η τιμή της λύσης είναι γνωστή στις διεπιφάνειες μεταξύ διαφορετικών υποχωρίων, μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε συνοριακές συνθήκες τύπου Dirichlet και να προκύψουν s (αριθμός υποχωρίων) ανεξάρτητες εξισώσεις Poisson. Αυτές θα λυθούν ούτως ώστε να βρεθεί η τιμή της λύσης στα εσωτερικά σημεία. Εάν το χωρίο διακριτοποιηθεί από μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων ή πεπερασμένων διαφορών, τότε αυτό μπορεί να μεταφραστεί στο αντίστοιχο γραμμικό σύστημα.

Γίνεται η υπόθεση πως το πρόβλημα που δόθηκε παραπάνω αντιστοιχεί στο χωρίο που φαίνεται στο Σχήμα 1-2 και γίνεται διακριτοποίηση με τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων. Η αρίθμηση των κόμβων ανά υποχωρίο φαίνεται στο Σχήμα 1-3, οδηγώντας στη δομή του πίνακα που φαίνεται στο Σχήμα 1-4.

Εφόσον γίνει διαχωρισμός του χωρίου σε s υποχωρία, το γραμμικό σύστημα που αντιστοιχεί στο πρόβλημα έχει την παρακάτω δομή:

$$\begin{pmatrix} B_1 & & & E_1 \\ & B_2 & & E_2 \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & B_s & E_s \\ F_1 & F_2 & \dots & F_s & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_s \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_s \\ g \end{pmatrix} \quad (1-1)$$

όπου τα x_i είναι τα διανύσματα των αγνώστων των κόμβων που βρίσκονται στο εσωτερικό των υποχωρίων Ω_i και το y αναπαριστά το διάνυσμα όλων των αγνώστων των κόμβων που βρίσκονται στις διεπαφές. Είναι χρήσιμο να εκφραστεί το παραπάνω σύστημα στην απλούστερη μορφή,

$$A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} \text{ με } A = \begin{pmatrix} B & E \\ F & C \end{pmatrix}. \quad (1-2)$$

Επομένως, γίνεται χωρισμός του πίνακα A σε υποπίνακες (blocks). Πιο συγκεκριμένα:

- Στον υποπίνακα B , που αναπαριστά τη συνεισφορά των εσωτερικών κόμβων στις εξισώσεις των άγνωστων των εσωτερικών κόμβων.
- Στον υποπίνακα E , που αναπαριστά τη συνεισφορά των εσωτερικών κόμβων στις εξισώσεις των αγνώστων των κόμβων της διεπιφάνειας.
- Στον υποπίνακα F , που αναπαριστά της συνεισφορά των κόμβων της διεπιφάνειας στις εξισώσεις των αγνώστων των εσωτερικών κόμβων.
- Στον υποπίνακα C , που αναπαριστά τη συνεισφορά των κόμβων της διεπιφάνειας στις εξισώσεις των αγνώστων των κόμβων της διεπιφάνειας.

Αντίστοιχα και το διάνυσμα b (δεξιό μέλος) χωρίζεται σε δύο μέρη, στο block f που αναπαριστά τις συνθήκες στους εσωτερικούς κόμβους και στο block g που αναπαριστά τις συνθήκες στους κόμβους διεπαφής.

1.1.2 Τύποι Διαχωρισμού

Όταν διαχωρίζεται ένα πρόβλημα, το πιο σύνηθες είναι να χρησιμοποιούνται αναπαραστάσεις γραφημάτων. Εφόσον τα υποσυστήματα που προκύπτουν από ένα συγκεκριμένο διαχωρισμό θα αντιστοιχηθούν τελικά σε ξεχωριστούς επεξεργαστές (ή πυρήνες επεξεργαστών), υπάρχουν κάποιοι περιορισμοί σχετικά με τον τύπο διαχωρισμού που απαιτείται.

Για παράδειγμα, στις τεχνικές πεπερασμένων στοιχείων μπορεί να είναι επιθυμητό να αντιστοιχηθούν στοιχεία στους επεξεργαστές, αντί για κορυφές. Σε αυτήν την περίπτωση, ο περιορισμός υποδεικνύει πως κανένα στοιχείο δεν θα χωριστεί σε δύο υποχωρία, δηλαδή, όλες οι πληροφορίες για ένα συγκεκριμένο στοιχείο αντιστοιχούν στον ίδιο επεξεργαστή. Αυτοί οι διαχωρισμοί ονομάζονται element-based. Μία λιγότερο περιοριστική τάξη διαχωρισμών είναι οι edge-based, που δεν επιτρέπουν σε ακμές να χωριστούν μεταξύ δύο υποχωρίων. Τέλος, οι vertex-based διαχωρισμοί χωρίζουν το αρχικό σύνολο κορυφών σε υποσύνολα κορυφών και δεν παρουσιάζουν περιορισμούς στις ακμές, δηλαδή επιτρέπουν στις ακμές ή στα στοιχεία να μοιράζονται στα υποχωρία.

1.1.3 Τύποι Τεχνικών

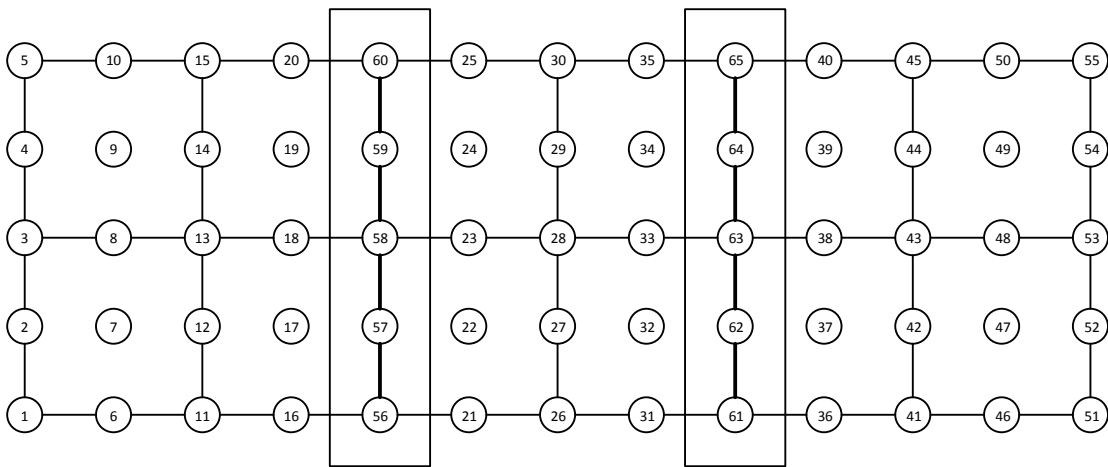
Οι τιμές στους κόμβους διεπαφής μπορούν να ληφθούν από τη χρήση μίας μορφής block-Gaussian απαλοιφής, η οποία μπορεί να είναι πολύ δαπανηρή για μεγάλα προβλήματα. Σε κάποιες περιπτώσεις, χρησιμοποιώντας γρήγορους μετασχηματισμούς Fourier (Fast Fourier Transforms), είναι δυνατόν να ληφθεί φθηνά και άμεσα η λύση του προβλήματος στις διεπιφάνειες.

Άλλες μέθοδοι εναλλάσσονται μεταξύ των υποχωρίων, λύνοντας κάθε φορά ένα νέο πρόβλημα, με τις συνοριακές συνθήκες να ενημερώνονται από τις πιο πρόσφατες λύσεις των υποσυστημάτων. Αυτές οι μέθοδοι ονομάζονται Schwarz Alternating Procedures [2].

Επιτρέπεται η επικάλυψη των υποχωρίων. Αυτό σημαίνει πως τα Ω_i είναι τέτοια ώστε

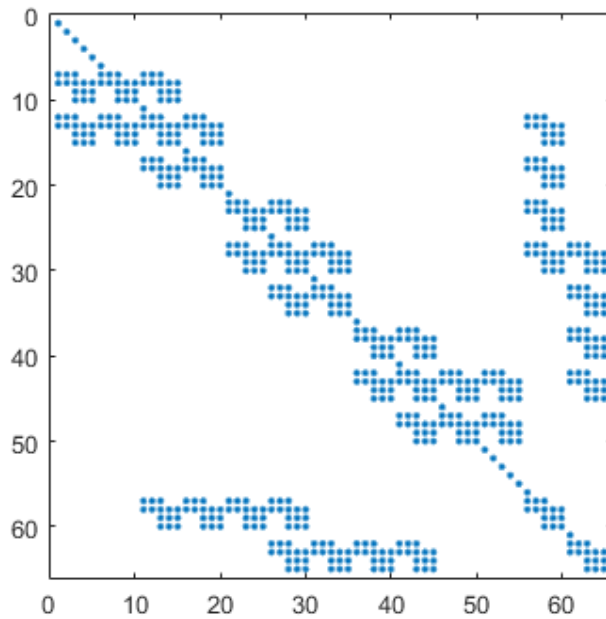
$$\Omega = \bigcup_{i=1,s} \Omega_i, \Omega_i \cap \Omega_j \neq \emptyset.$$

Για ένα διακριτοποιημένο πρόβλημα, είναι συνήθης η ποσοτικοποίηση της επικάλυψης με τον αριθμό των γραμμών πλέγματος που είναι κοινές για τα δύο υποχωρία. Στην περίπτωση που φαίνεται στο Σχήμα 1-2, η επικάλυψη είναι πρώτης τάξης, δηλαδή υπάρχει μόνο μία γραμμή πλέγματος που είναι κοινή ανά δύο υποχωρία.



Σχήμα 1-3: Διακριτοποίηση του προβλήματος που παρουσιάστηκε στο Σχήμα 1-2. Η αρίθμηση ξεκινάει από κάτω προς τα πάνω και από τα αριστερά προς τα δεξιά. Οι κόμβοι διεπαφής αριθμούνται τελευταίοι.

Παρακάτω φαίνεται και η μορφή του πίνακα που αντιστοιχεί στο πλέγμα πεπερασμένων στοιχείων (finite element mesh) του σχήματος διακριτοποίησης.



Σχήμα 1-4: Ο πίνακας που αντιστοιχεί στο πλέγμα πεπερασμένων στοιχείων, Σχήμα 1-3.

Οι διάφορες τεχνικές διαχωρισμού χωρίων διακρίνονται από τέσσερα χαρακτηριστικά:

1. *Τύπος της κατάτμησης.* Για παράδειγμα, η κατάτμηση γίνεται στις ακμές, στις κορυφές, ή στα στοιχεία; Είναι η τομή των υποχωρίων ίση με το αρχικό χωρίο ή είναι ένα υπερσύνολο αυτού (πλασματικές μέθοδοι χωρίου);
2. *Επικάλυψη.* Πρέπει τα υποχωρία να επικαλύπτονται ή όχι και αν ναι, πόσο;
3. *Επεξεργασία των κόμβων της διεπαφής.* Για παράδειγμα, χρησιμοποιείται η προσέγγιση Schur Complement; Πρέπει να υπάρχουν διαδοχικές ενημερώσεις στις τιμές διεπαφής;
4. *Επίλυση υποπροβλήματος.* Πρέπει τα υποπροβλήματα να λυθούν ακριβώς ή να βρεθεί μία προσεγγιστική λύση από μία επαναληπτική μέθοδο;

1.2 Άμεση λύση και Schur Complement

Η προσέγγιση που καλύπτεται σε αυτήν την ενότητα παρουσιάζει τη μέθοδο Schur Complement [2] [3] και εξηγεί μερικές ιδιότητές της.

1.2.1 Block Gaussian Απαλοιφή

Δίνεται το γραμμικό σύστημα της μορφής $A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}$ με $A = \begin{pmatrix} B & E \\ F & C \end{pmatrix}$, για το οποίο το block B θεωρείται ως μη-ιδιάζον (nonsingular). Από την πρώτη εξίσωση, ο άγνωστος x μπορεί να εκφραστεί ως

$$x = B^{-1}(f - Ey) \quad (1-3)$$

Με την αντικατάσταση του x στη δεύτερη εξίσωση, προκύπτει το παρακάτω σύστημα:

$$(C - FB^{-1}E)y = g - FB^{-1}f \quad (1-4)$$

Ο πίνακας

$$S = C - FB^{-1}E \quad (1-5)$$

ονομάζεται πίνακας Schur Complement και σχετίζεται με τη μεταβλητή y .

Εάν αυτός ο πίνακας μπορεί να σχηματιστεί και το γραμμικό σύστημα (1-4) μπορεί να επιλυθεί, τότε όλες οι μεταβλητές διεπαφής y γίνονται διαθέσιμες. Όταν αυτές οι μεταβλητές γίνουν γνωστές, οι υπόλοιποι άγνωστοι μπορούν να υπολογιστούν μέσω της (1-2). Λόγω της συγκεκριμένης δομής του block B , παρατηρείται πως οποιαδήποτε λύση γραμμικού συστήματος διαχωρίζεται σε s ανεξάρτητα συστήματα, όπου s ο αριθμός των υποχωρίων. Ο παραλληλισμός σε αυτήν την περίπτωση προκύπτει από αυτόν τον φυσικό διαχωρισμό.

Μία μέθοδος επίλυσης που βασίζεται σε αυτήν την προσέγγιση αποτελείται από τέσσερα βήματα:

1. Υπολογισμός του δεξιού μέρους του μειωμένου (reduced) συστήματος (1-4).
2. Σχηματισμός του πίνακα Schur Complement (1-5).
3. Επίλυση του μειωμένου συστήματος.
4. Αντικατάσταση στη σχέση (1-2) για να βρεθούν οι υπόλοιποι άγνωστοι.

Μία λύση του γραμμικού συστήματος με τον πίνακα B μπορεί να αποθηκευτεί με μετασχηματισμό του αλγόριθμου σε μία πιο κομψή μορφή. Ορίζονται

$$E' = B^{-1}E$$

και

$$f' = B^{-1}f.$$

Ο πίνακας E' και το διάνυσμα f' χρειάζονται στα βήματα (1) και (2). Το βήμα (4) παίρνει τη μορφή

$$x = B^{-1}f - B^{-1}Ey = f' - E'y.$$

και δίνει τον αλγόριθμο που ακολουθεί.

1.2.1.1 Αλγόριθμος Block-Gaussian Απαλοιφής

1. Επίλυση των συστημάτων $BE' = E$ και $Bf' = f$ ως προς E' και f' αντίστοιχα
2. Υπολογισμός του $g' = g - Ff'$
3. Υπολογισμός του $S = C - FE'$
4. Επίλυση του συστήματος $Sy = g'$ ως προς y
5. Υπολογισμός της λύσης $x = f' - E'y$

Στην πρακτική εφαρμογή, όλοι οι πίνακες B_i παράγονται και μετά επιλύονται τα συστήματα $B_i E_i' = E_i$ και $B_i f_i'$. Γενικά, πολλές στήλες στους πίνακες E_i θα είναι μηδενικές. Αυτές οι μηδενικές στήλες αντιστοιχούν στις διεπαφές που δεν είναι παρακείμενες στο υποχωρίο i . Επομένως, ένας αποδοτικός κώδικας που βασίζεται στον παραπάνω αλγόριθμο πρέπει να ξεκινάει με την αναγνώριση των μη μηδενικών στηλών.

1.2.2 Ιδιότητες της μεθόδου Schur Complement

Θα αναλυθούν τώρα οι συνδέσεις μεταξύ της μεθόδου Schur Complement και της κανονικής απαλοιφής Gauss και θα εξακριβωθούν μερικές απλές ιδιότητες. Αρχικά, γίνεται η παραγοντοποίηση block-LU του πίνακα A ,

$$\begin{pmatrix} B & E \\ F & C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ FB^{-1} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B & E \\ 0 & S \end{pmatrix} \quad (1-6)$$

όπου το μέρος $L = \begin{pmatrix} I & 0 \\ FB^{-1} & I \end{pmatrix}$ και το μέρος $U = \begin{pmatrix} B & E \\ 0 & S \end{pmatrix}$.

Επομένως, το Schur Complement μπορεί να θεωρηθεί ως το (2,2) block στο μέρος U της block-LU παραγοντοποίησης (factorization) του A . Από την παραπάνω σχέση, σημειώνεται πως αν ο πίνακας A είναι μη-ιδιάζων (nonsingular), τότε και ο πίνακας S είναι μη-ιδιάζων. Λαμβάνοντας τον αντίστροφο του πίνακα A με τη βοήθεια της παραπάνω ισότητας προκύπτει

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} B & E \\ F & C \end{pmatrix}^{-1} &= \begin{pmatrix} B^{-1} & -B^{-1}ES^{-1} \\ 0 & S^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 \\ -FB^{-1} & I \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} B^{-1} + B^{-1}ES^{-1}FB^{-1} & -B^{-1}ES^{-1} \\ -S^{-1}FB^{-1} & S^{-1} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1-7)$$

Παρατηρείται πως ο πίνακας S^{-1} είναι το block (2,2) του πίνακα A^{-1} . Πιο συγκεκριμένα, εάν ο αρχικός πίνακας A είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος (Symmetric Positive Definite ή SPD), τότε ισχύει το ίδιο και για τον αντίστροφο A^{-1} . Αυτό συνεπάγεται και πως ο πίνακας S είναι επίσης συμμετρικός και θετικά ορισμένος σε αυτήν την περίπτωση.

Οι παραπάνω ιδιότητες συνοψίζονται στην παρακάτω πρόταση.

1.2.3 Πρόταση

Έστω ένας μη-ιδιάζων πίνακας A διαχωρισμένος όπως στην (1-4) και με τέτοιο τρόπο ώστε ο υποπίνακας B να είναι μη-ιδιάζων και έστω R_y ο περιοριστικός τελεστής (restriction operator) που δρα στις μεταβλητές διεπαφής, δηλαδή, ο γραμμικός τελεστής που ορίζεται ως εξής:

$$R_y \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = y$$

Τότε οι ακόλουθες ιδιότητες είναι αληθείς.

1. Ο πίνακας της μεθόδου Schur Complement S είναι μη-ιδιάζων.
2. Εάν ο πίνακας A είναι SPD, το ίδιο ισχύει και για τον πίνακα S .
3. Για κάθε y ισχύει $S^{-1}y = R_y A^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix}$.

Σύμφωνα με την πρώτη ιδιότητα, μία μέθοδος που χρησιμοποιεί τον παραπάνω αλγόριθμο block απαλοιφής Gauss είναι δυνατός εφόσον ο πίνακας S είναι μη-ιδιάζων. Μία συνέπεια της δεύτερης ιδιότητας είναι πως όταν ο πίνακας A είναι positive definite, ένας αλγόριθμος όπως ο αλγόριθμος της επαναληπτικής μεθόδου Conjugate Gradient [2] μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την επίλυση του μειωμένου συστήματος (1-4). Τέλος, η τρίτη ιδιότητα εδραιώνει μία σχέση που επιτρέπει να οριστούν προσταθεροποιήσεις για τον πίνακα S που βασίζονται σε επαναληπτικές τεχνικές επίλυσης με τον πίνακα A .

2 Η επαναληπτική μέθοδος GMRES

2.1 Εισαγωγή

Σε αυτό το κεφάλαιο θα αναλυθεί η θεωρία της επαναληπτικής μεθόδου GMRES, τα πρακτικά ζητήματα εφαρμογής της, καθώς και η παραλλαγή της μεθόδου, GMRES(m).

2.2 Γενικές μέθοδοι προβολής

Δίνεται το σύστημα $Ax = b$. Ο πίνακας A είναι διαστάσεων $N \times N$ και τα διανύσματα x και b είναι διάστασης N . Έστω δύο υπόχωροι, διάστασης m , K και \mathcal{L} του χώρου \mathbb{R}^N . Μία τεχνική προβολής πάνω στον υπόχωρο K και ορθογώνια στον \mathcal{L} είναι μία διαδικασία εύρεσης μίας προσεγγιστικής λύσης \tilde{x} του συστήματος $Ax = b$, επιβάλλοντας τις εξής συνθήκες: το \tilde{x} να ανήκει στον K και το διάνυσμα υπολοίπου (residual vector) να είναι ορθογώνιο στον \mathcal{L} , δηλαδή

$$\text{Εύρεση } \tilde{x} \in K, \text{ τέτοιο ώστε } b - A\tilde{x} \perp \mathcal{L}.$$

Αν x_0 μία αρχική εκτίμηση της λύσης, η προσέγγιση θα ευρεθεί στο συσχετισμένο υπόχωρο $x_0 + K$ αντί στον ομογενή διανυσματικό χώρο K . Το πρόβλημα προσέγγισης σε αυτήν την περίπτωση εκφράζεται ως

$$\text{Εύρεση } \tilde{x} \in x_0 + K, \text{ τέτοιο ώστε } b - A\tilde{x} \perp \mathcal{L}.$$

Σημειώνεται πως εάν το \tilde{x} γραφεί στην μορφή $\tilde{x} = x_0 + \delta$ και το αρχικό διάνυσμα υπολοίπου r_0 οριστεί ως

$$r_0 = b - Ax_0$$

τότε η παραπάνω εξίσωση γίνεται $b - A(x_0 + \delta) \perp \mathcal{L}$ ή

$$r_0 - A\delta \perp \mathcal{L}.$$

Επομένως, η προσεγγιστική λύση μπορεί να οριστεί ως

$$\tilde{x} = x_0 + \delta, \delta \in K,$$

$$(r_0 - A\delta, w) = 0, \forall w \in \mathcal{L}.$$

Οι δύο τελευταίες σχέσεις αποτελούν το βασικό βήμα μιας μεθόδου προβολής. Οι περισσότερες κλασικές τεχνικές προβολής χρησιμοποιούν μια διαδοχική σειρά από τέτοια βήματα. Σε κάθε βήμα, χρησιμοποιείται ένα νέο ζευγάρι K και \mathcal{L} και μία αρχική εκτίμηση x_0 ίση με την πιο πρόσφατη προσέγγιση της λύσης που προέκυψαν από το προηγούμενο βήμα. [2] [4]

2.3 Αναπαράσταση Πίνακα

Έστω ένας πίνακας $V = [v_1, \dots, v_m]$, διαστάσεων $N \times m$, του οποίου οι στήλες-διανύσματα σχηματίζουν μία βάση του K και αντίστοιχα, ένας πίνακας $W = [w_1, \dots, w_m]$, διαστάσεων $N \times m$, του οποίου οι στήλες-διανύσματα σχηματίζουν μία βάση του \mathcal{L} . Εάν η προσεγγιστική λύση οριστεί ως

$$\tilde{x} = x_0 + Vy$$

τότε η συνθήκη ορθογωνιότητας (συνθήκη Petrov-Galerkin) $(r_0 - A\delta, w) = 0, \forall w \in \mathcal{L}$, οδηγεί στο ακόλουθο σύστημα εξισώσεων για το διάνυσμα y :

$$W^T AVy = W^T r_0.$$

Υποθέτοντας ότι ο πίνακας $W^T AV$ με διαστάσεις $m \times m$ είναι μη-ιδιάζων, τότε η σχέση $\tilde{x} = x_0 + Vy$ μετατρέπεται στη σχέση

$$\tilde{x} = x_0 + V(W^T AV)^{-1} W^T r_0.$$

Παρακάτω παρουσιάζεται ένας πρότυπος αλγόριθμος μεθόδου προβολής.

2.3.1 Πρότυπος αλγόριθμος μεθόδου προβολής

1. Μέχρι τη σύγκλιση, *Do*:
 - a. Επιλογή ενός ζευγαριού των υποχώρων K και \mathcal{L}
 - b. Επιλογή των βάσεων $V = [v_1, \dots, v_m]$ και $W = [w_1, \dots, w_m]$ των K και \mathcal{L} αντίστοιχα
 - c. $r := b - Ax$
 - d. $y := (W^T AV)^{-1} W^T r$
 - e. $x := x + Vy$
2. *EndDo*

Η προσεγγιστική λύση ορίζεται μόνο όταν ο πίνακας $W^T AV$ είναι μη-ιδιάζων. Αυτό όμως δεν συμβαίνει πάντα, ακόμη και αν ο πίνακας A είναι μη-ιδιάζων. [2] [4]

2.4 Μέθοδοι υποχώρου Krylov

Μία γενική μέθοδος προβολής βρίσκει μία προσεγγιστική λύση x_m από έναν συσχετισμένο υπόχωρο $x_0 + K_m$ διάστασης m με εφαρμογή της συνθήκης Petrov-Galerkin

$$b - Ax_m \perp \mathcal{L}_m$$

όπου \mathcal{L}_m είναι ένας άλλος υπόχωρος διάστασης m . Το x_0 αναπαριστά μία αυθαίρετη αρχική εκτίμηση της λύσης. Μία μέθοδος υποχώρου Krylov [2] [4] [5] είναι μία μέθοδος για την οποία ο υπόχωρος K_m είναι ο υπόχωρος Krylov

$$K_m(A, r_0) = \text{span}\{r_0, Ar_0, A^2 r_0, \dots, A^{m-1} r_0\},$$

όπου $r_0 = b - Ax_0$. Ο υπόχωρος $K_m(A, r_0)$ θα συμβολίζεται με K_m όταν δεν υπάρχει αμφισημία. Οι παραλλαγές των μεθόδων υποχώρου Krylov προκύπτουν από τις διαφορετικές επιλογές του υποχώρου \mathcal{L}_m και από τους τρόπους προσταθεροποίησης του συστήματος.

Από την οπτική γωνία της θεωρίας προσεγγίσεων, οι προσεγγίσεις που προκύπτουν από μία μέθοδο υποχώρου Krylov είναι της μορφής

$$A^{-1}b \approx x_m = x_0 + q_{m-1}(A)r_0,$$

όπου q_{m-1} είναι ένα πολυώνυμο $m - 1$ βαθμού. Στην πιο απλή περίπτωση όπου $x_0 = 0$, ισχύει

$$A^{-1}b \approx q_{m-1}(A)b$$

δηλαδή το $A^{-1}b$ προσεγγίζεται από το $q_{m-1}(A)b$.

Παρόλο που όλες οι τεχνικές προσφέρουν τον ίδιο τύπο πολυωνυμικών προσεγγίσεων, η επιλογή του υποχώρου \mathcal{L}_m , δηλαδή οι περιορισμοί που θα χρησιμοποιηθούν για να υπολογιστούν αυτές οι προσεγγίσεις, επηρεάζει σημαντικά την επαναληπτική τεχνική. Οι πιο γνωστές τεχνικές προκύπτουν από δύο γενικές επιλογές για τον υπόχωρο \mathcal{L}_m . Η πρώτη είναι η $\mathcal{L}_m = K_m$ και η παραλλαγή ελαχίστου υπολοίπου $\mathcal{L}_m = AK_m$. Η δεύτερη κατηγορία μεθόδων προκύπτει ορίζοντας τον υπόχωρο \mathcal{L}_m ως μία μέθοδο υποχώρου Krylov που σχετίζεται με τον ανάστροφο του πίνακα A , A^T , δηλαδή $\mathcal{L}_m = K_m(A^T, r_0)$. Σε αυτό το κεφάλαιο περιγράφονται μόνο οι μέθοδοι της πρώτης τάξης.

2.5 Υπόχωροι Krylov

Σε αυτήν την παράγραφο θα αναλυθούν οι μέθοδοι προβολής σε υπόχωρους Krylov, δηλαδή σε υπόχωρους της μορφής

$$K_m(A, v) \equiv \text{span}\{v, Av, A^2v, \dots, A^{m-1}v\}$$

Η διάσταση του υποχώρου των προσεγγίσεων αυξάνεται κατά ένα σε κάθε βήμα της επαναληπτικής διαδικασίας. Μία ιδιότητα του υποχώρου Krylov είναι πως ο K_m είναι ο υπόχωρος όλων των διανυσμάτων στον \mathbb{R}^n που μπορούν να γραφούν ως $x = p(A)v$, όπου p είναι το πολυώνυμο με βαθμό που δεν ξεπερνάει τον $m - 1$. Το ελάχιστο πολυώνυμο ενός διανύσματος v είναι το μικρότερου βαθμού μη μηδενικό πολυώνυμο p , τέτοιο ώστε $p(A)v = 0$. Ο βαθμός του ελάχιστου πολυωνύμου του διανύσματος v ως προς τον πίνακα A καλείται βαθμός του v ως προς τον A , ή απλά ο βαθμός του v όταν δεν υπάρχει αμφισημία και συμβολίζεται με $\text{grade}(v)$. Μία συνέπεια του θεωρήματος Cayley-Hamilton είναι ότι ο βαθμός του v δεν είναι μεγαλύτερος από το N .

Μία δεύτερη ιδιότητα των υποχώρων Krylov είναι ότι αν μ είναι ο βαθμός του v τότε ο υπόχωρος K_μ είναι αναλλοίωτος στην επίδραση του πίνακα A και $K_m = K_\mu$ για όλα τα $m \geq \mu$.

Μία τρίτη ιδιότητα των υποχώρων Krylov είναι ότι ο υπόχωρος K_m είναι διάστασης m εάν και μόνο αν ο βαθμός μ του v ως προς τον A δεν είναι μικρότερος από m , δηλαδή

$$\dim(K_m) = m \leftrightarrow \text{grade}(v) \geq m.$$

Επομένως

$$\dim(K_m) = \min\{m, \text{grade}(v)\}.$$

2.6 Ο βασικός αλγόριθμος Arnoldi

Προκειμένου να κατασκευαστεί μία ορθοκανονική βάση του υποχώρου Krylov K_m χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος Arnoldi [2] [4] [6].

Ακολουθεί ο αλγόριθμος Arnoldi.

2.6.1 Αλγόριθμος Arnoldi

1. Επιλογή ενός διανύσματος v_1 , τέτοιο ώστε η νόρμα $\|v_1\|_2 = 1$
2. *For* $j = 1, 2, \dots, m$ *Do*:
 - a. Υπολογισμός του $h_{ij} = (Av_j, v_i)$ *for* $i = 1, 2, \dots, j$
 - b. Υπολογισμός του $w_j := Av_j - \sum_{i=1}^j h_{ij}v_i$
 - c. $h_{j+1,j} = \|w_j\|_2$
 - d. *If* $h_{j+1,j} = 0$ *then Stop*
 - e. $v_{j+1} = w_j/h_{j+1,j}$

3. *EndDo*

Ο αλγόριθμος σε κάθε βήμα πολλαπλασιάζει το προηγούμενο διάνυσμα v_j με τον πίνακα A και μετά ορθοκανονικοποιεί το διάνυσμα που προκύπτει, w_j , ως προς τα προηγούμενα διανύσματα v_i με μία κλασική διαδικασία ορθοκανονικοποίησης Gram-Schmidt [7] (δηλαδή $w_j := Av_j - \sum_{i=1}^j h_{ij}v_i$) Ο αλγόριθμος σταματάει εάν εξαφανιστεί το διάνυσμα w_j που υπολογίστηκε, δηλαδή εάν ισχύει $\|w_j\|_2 = 0$.

Ορίζεται ο πίνακας V_m , διαστάσεων $N \times m$, που περιέχει τα διανύσματα στήλης v_1, \dots, v_m , ο πίνακας Hessenberg \bar{H}_m , διαστάσεων $(m+1) \times m$, του οποίου τα μη μηδενικά στοιχεία h_{ij} ορίζονται από τον αλγόριθμο 2.6.1 και ο πίνακας H_m , που προκύπτει από την αφαίρεση της τελευταίας γραμμής από τον πίνακα \bar{H}_m .

Τότε ισχύουν οι παρακάτω σχέσεις:

$$\begin{aligned} AV_m &= V_m H_m + w_m e_m^T \\ &= V_{m+1} \bar{H}_m, \\ V_m^T AV_m &= H_m. \end{aligned}$$

όπου $e_m^T = [0, 0, \dots, 1]$ ο ανάστροφος του διανύσματος βάσης διάστασης m και $w_m = h_{m+1,m}v_{m+1}$, όπως ορίζεται από τον αλγόριθμο 2.6.1.

Όπως έχει σημειωθεί προηγουμένως, ο αλγόριθμος μπορεί να σταματήσει στην περίπτωση που ισχύει $\|w_j\|_2 = 0$. Σε αυτήν την περίπτωση, το διάνυσμα v_{j+1} δεν μπορεί να υπολογιστεί και ο αλγόριθμος σταματάει.

2.6.2 Πρόταση

Υφίσταται διακοπή (breakdown) του αλγορίθμου Arnoldi στο βήμα j (δηλαδή $h_{j+1,j} = 0$), εάν και μόνο εάν το ελάχιστο πολυώνυμο του διανύσματος v_1 είναι j βαθμού. Επιπροσθέτως, σε αυτήν την περίπτωση, ο υπόχωρος K_j είναι αναλλοίωτος στην επίδραση του πίνακα A .

Μία συνέπεια της πρότασης είναι ότι μία μέθοδος προβολής στον υπόχωρο K_j θα είναι ακριβής όταν γίνεται διακοπή στο βήμα j . Για αυτόν το λόγο τέτοιες διακοπές ονομάζονται τυχερές διακοπές (lucky breakdowns).

2.6.3 Πρακτικές Εφαρμογές

Στην προηγούμενη περιγραφή της διαδικασίας Arnoldi υποτίθετο πως χρησιμοποιήθηκε ακριβής αριθμητική. Στην πράξη χρησιμοποιείται μία τροποποιημένη διαδικασία Gram-Schmidt (Modified Gram-Schmidt process) [8] ή ένας αλγόριθμος Householder [2] στη θέση της κλασσικού αλγορίθμου Gram-Schmidt.

2.6.3.1 Αλγόριθμος Arnoldi-Τροποποιημένη Gram-Schmidt

4. Επιλογή ενός διανύσματος v_1 , τέτοιο ώστε η νόρμα $\|v_1\|_2 = 1$
5. *For* $j = 1, 2, \dots, m$ *Do*:
 - a. Υπολογισμός του $w_j := Av_j$
 - b. *For* $i = 1, \dots, j$ *Do*:
 - i. $h_{ij} = (w_j, v_i)$
 - ii. $w_j := w_j - h_{ij}v_i$
 - c. *EndDo*
 - d. $h_{j+1,j} = \|w_j\|_2$
 - e. *If* $h_{j+1,j} = 0$ *then Stop*
 - f. $v_{j+1} = w_j/h_{j+1,j}$
6. *EndDo*

Για ακριβή αριθμητική, ο αλγόριθμος 2.6.1 και ο αλγόριθμος 2.6.3.1 είναι ισοδύναμοι. Όταν χρησιμοποιείται αριθμητική κινητής υποδιαστολής (floating point arithmetic), ο παραπάνω αλγόριθμος είναι πιο αξιόπιστος.

2.7 Ο βασικός αλγόριθμος GMRES

Η γενικευμένη μέθοδος ελαχίστων υπολοίπων (Generalized Minimum Residual Method ή GMRES) [2] [9] [4] [10] είναι μία μέθοδος προβολής που βασίζεται στις σχέσεις $K = K_m$ και $\mathcal{L} = AK_m$, με $v_1 = r_0/\|r_0\|_2$ (υπενθυμίζεται πως $r_0 = b - Ax_0$). Η τεχνική ελαχιστοποιεί τη νόρμα του υπολοίπου σε όλα τα διανύσματα στον υπόχωρο $x_0 + K_m$.

Προκειμένου να κατασκευαστεί η ορθοκανονική βάση του υποχώρου Krylov K_m χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος 2.6.3.1.

Λαμβάνοντας υπόψιν την ιδιότητα βέλτιστου και τη σχέση $Av_m = V_{m+1}\bar{H}_m$, οποιοδήποτε διάνυσμα x στο $x_0 + K_m$ μπορεί να γραφεί ως:

$$x = x_0 + V_m y \quad (2-1)$$

Όπου y είναι ένα διάνυσμα διάστασης m . Ορίζοντας

$$J(y) = \|b - Ax\|_2 = \|b - A(x_0 + V_m y)\|_2 \quad (2-2)$$

η σχέση $Av_m = V_{m+1}\bar{H}_m$ δίνει:

$$\begin{aligned} b - Ax &= b - A(x_0 + V_m y) \\ &= r_0 - AV_m y \\ &= \beta v_1 - V_{m+1}\bar{H}_m y \\ &= V_{m+1}(\beta e_1 - \bar{H}_m y) \end{aligned} \quad (2-3)$$

Εφόσον τα διανύσματα-στήλης του V_{m+1} είναι ορθοκανονικά, τότε

$$J(y) \equiv \|b - A(x_0 + V_m y)\|_2 = \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|_2. \quad (2-4)$$

Η προσέγγιση GMRES είναι το μοναδικό διάνυσμα του $x_0 + K_m$ το οποίο ελαχιστοποιεί τη σχέση (2-2). Από τις σχέσεις (2-1), (2-4), η προσέγγιση μπορεί να παρθεί σχετικά απλά ως $x_m = x_0 + V_m y_m$, όπου το διάνυσμα y_m ελαχιστοποιεί τη συνάρτηση $J(y) = \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|_2$, δηλαδή

$$x_m = x_0 + V_m y_m \quad (2-5)$$

$$y_m = \operatorname{argmin}_y \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|_2 \quad (2-6)$$

Ο υπολογισμός του διανύσματος y_m έχει μικρό υπολογιστικό κόστος αφού χρειάζεται την επίλυση ενός προβλήματος $(m + 1) \times m$ ελαχίστων τετραγώνων όπου το m είναι τυπικά μικρό.

Τα παραπάνω δίνουν τον εξής αλγόριθμο:

2.7.1 Αλγόριθμος GMRES

1. Υπολογισμός των $r_0 = b - Ax_0$, $\beta := \|r_0\|_2$ και $v_1 := r_0/\beta$
2. *For* $j = 1, 2, \dots, m$ *Do*:
 - a. Υπολογισμός του $w_j := Av_j$
 - b. *For* $i = 1, \dots, j$ *Do*:
 - i. $h_{ij} := (w_j, v_i)$
 - ii. $w_j := w_j - h_{ij}v_i$
 - c. *End Do*
 - d. $h_{j+1,j} = \|w_j\|_2$. *If* $h_{j+1,j} = 0$ *then* $m := j$ *και GoTo* 11
 - e. $v_{j+1} = w_j/h_{j+1,j}$
3. *End Do*
4. Ορισμός του πίνακα Hessenberg διαστάσεων $(m+1) \times m$, $\bar{H}_m = \{h_{ij}\}_{1 \leq i \leq m+1, 1 \leq j \leq m}$
5. Υπολογισμός του y_m που ελαχιστοποιεί τη νόρμα $\|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|_2$ και της νέας προσεγγιστικής λύσης $x_m = x_0 + V_m y_m$

Όπως φαίνεται και από τον αλγόριθμο, προσεγγιστικά, το κόστος σε κάθε βήμα του αλγορίθμου προσδιορίζεται ως εξής. Εάν $nz(A)$ είναι ο αριθμός των μη μηδενικών (non-zero) στοιχείων του πίνακα A , τότε για m βήματα της διαδικασίας Arnoldi απαιτούνται m γινόμενα πίνακα-με-διάνυσμα, με κόστος $2m \times nz(A)$. Κάθε βήμα της ορθοκανονικοποίησης Gram-Schmidt έχει κόστος $4 \times j \times N$ πράξεις. Επομένως, για το σύνολο των m βημάτων, το κόστος είναι περίπου $2m^2N$ και ένα βήμα της μεθόδου GMRES κοστίζει περίπου $2nz(A) + 2mN$ πράξεις.

Επιπρόσθετα, για την αποθήκευση της βάσης V_m χρειάζονται m διανύσματα διάστασης N . Χρησιμοποιούνται επιπλέον διανύσματα για να διατηρηθεί η τρέχουσα λύση και το δεξί μέρος, και ένα πρόχειρο (scratch) διάνυσμα για το γινόμενο πίνακα-με-διάνυσμα. Επίσης, αποθηκεύεται και ο πίνακας Hessenberg, H_m . Επομένως, το συνολικό κόστος αποθήκευσης είναι περίπου $(m+3)N + \frac{m^2}{2}$.

Στις περισσότερες περιπτώσεις, η διάσταση m είναι μικρή σε σχέση με τη διάσταση N και άρα το κόστος επηρεάζεται κυρίως από τον πρώτο όρο, $(m+3)N$.

2.8 Πρακτικά ζητήματα εφαρμογής της μεθόδου GMRES

Μία δυσκολία του αλγορίθμου είναι πως δεν παρέχει άμεσα την προσεγγιστική λύση x_m σε κάθε βήμα. Ως εκ τούτου, δεν είναι εύκολο να προσδιοριστεί το πότε θα σταματήσει ο αλγόριθμος. Υπάρχει μία κομψή λύση η οποία σχετίζεται με τον τρόπο με τον οποίο επιλύεται το πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων.

Μία συνήθης τεχνική για την επίλυση του προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων $\min \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|_2$, είναι ο μετασχηματισμός του πίνακα Hessenberg σε άνω τριγωνική μορφή με χρήση πινάκων περιστροφής.

Γίνεται ορισμός των πινάκων περιστροφής

$$\Omega_i = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ & & & c_i & s_i & & \\ & & & -s_i & c_i & & \\ & & & & & 1 & \\ & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} \leftarrow \text{row } i \\ \leftarrow \text{row } i + 1 \end{matrix} \quad (2-7)$$

με $c_i^2 + s_i^2 = 1$. Εάν εκτελεστούν m βήματα της επανάληψης GMRES τότε οι πίνακες αυτοί έχουν διάσταση $(m+1) \times (m+1)$.

Πολλαπλασιάζονται ο πίνακας Hessenberg \bar{H}_m και το αντίστοιχο δεξί μέλος $\bar{g}_0 \equiv \beta e_1$ με μία ακολουθία τέτοιων πινάκων από τα αριστερά. Επιλέγονται συντελεστές s_i, c_i που θα απαλείψουν $h_{i+1,i}$ στοιχεία κάθε φορά.

Επομένως εάν $m = 5$, θα είχαμε

$$\bar{H}_5 = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & h_{14} & h_{15} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & h_{24} & h_{25} \\ & h_{32} & h_{33} & h_{34} & h_{35} \\ & & h_{45} & h_{44} & h_{45} \\ & & & h_{54} & h_{55} \\ & & & & h_{65} \end{pmatrix}, \bar{g}_0 = \begin{pmatrix} \beta \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Μετά πολλαπλασιάζεται ο πίνακας \bar{H}_5 με

$$\begin{pmatrix} c_1 & s_1 & & & \\ -s_1 & c_1 & & & \\ & & 1 & & \\ & & & 1 & \\ & & & & 1 \end{pmatrix}$$

όπου

$$s_1 = \frac{h_{21}}{\sqrt{h_{11}^2 + h_{21}^2}}, c_1 = \frac{h_{11}}{\sqrt{h_{11}^2 + h_{21}^2}}$$

και προκύπτει ο πίνακας και το δεξί μέλος

$$\bar{H}_5^{(1)} = \begin{pmatrix} h_{11}^{(1)} & h_{12}^{(1)} & h_{13}^{(1)} & h_{14}^{(1)} & h_{15}^{(1)} \\ & h_{22}^{(1)} & h_{23}^{(1)} & h_{24}^{(1)} & h_{25}^{(1)} \\ & & h_{33} & h_{34} & h_{35} \\ & & & h_{45} & h_{45} \\ & & & & h_{55} \\ & & & & & h_{65} \end{pmatrix}, \bar{g}_1 = \begin{pmatrix} c_1 \beta \\ -s_1 \beta \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2-8)$$

Τώρα είναι πάλι δυνατός ο πολλαπλασιασμός του παραπάνω πίνακα και του δεξιού μέλους με έναν πίνακα περιστροφής Ω_2 για να απαλειφθεί το στοιχείο h_{32} . Αυτό επιτυγχάνεται παίρνοντας

$$s_2 = \frac{h_{32}}{\sqrt{(h_{22}^{(1)})^2 + h_{32}^2}}, c_2 = \frac{h_{22}^{(1)}}{\sqrt{(h_{22}^{(1)})^2 + h_{32}^2}}$$

Η διαδικασία απαλοιφής συνεχίζεται έως ότου εφαρμοστεί η m περιστροφή, η οποία μετασχηματίζει το πρόβλημα σε ένα που περιέχει τον πίνακα και το δεξί μέλος,

$$\bar{H}_5^{(5)} = \begin{pmatrix} h_{11}^{(5)} & h_{12}^{(5)} & h_{13}^{(5)} & h_{14}^{(5)} & h_{15}^{(5)} \\ & h_{22}^{(5)} & h_{23}^{(5)} & h_{24}^{(5)} & h_{25}^{(5)} \\ & & h_{33}^{(5)} & h_{34}^{(5)} & h_{35}^{(5)} \\ & & & h_{44}^{(5)} & h_{45}^{(5)} \\ & & & & h_{55}^{(5)} \\ & & & & & 0 \end{pmatrix}, \bar{g}_5 = \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ \gamma_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \gamma_6 \end{pmatrix}. \quad (2-9)$$

Γενικά, οι βαθμωτές μεταβλητές c_i και s_i της i περιστροφής Ω_i ορίζονται ως

$$s_i = \frac{h_{i+1,i}}{\sqrt{(h_{ii}^{(i-1)})^2 + h_{i+1,i}^2}}, c_i = \frac{h_{ii}^{(i-1)}}{\sqrt{(h_{ii}^{(i-1)})^2 + h_{i+1,i}^2}} \quad (2-10)$$

Ορίζεται το γινόμενο των Ω_i πινάκων Q_m

$$Q_m = \Omega_m \Omega_{m-1} \dots \Omega_1 \quad (2-11)$$

και

$$\bar{R}_m = \bar{H}_m^{(m)} = Q_m \bar{H}_m \quad (2-12)$$

$$\bar{g}_m = Q_m (\beta e_1) = (\gamma_1, \dots, \gamma_{m+1})^T \quad (2-13)$$

Εφόσον το γινόμενο Q_m είναι μοναδιαίο,

$$\min \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|_2 = \min \|\bar{g}_m - \bar{R}_m y\|_2.$$

Η λύση στο παραπάνω πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων λαμβάνεται επιλύοντας το τριγωνικό σύστημα που προκύπτει από τη διαγραφή της τελευταίας γραμμής του πίνακα \bar{R}_m και του δεξιού μέλους \bar{g}_m στη σχέση (2-9). Επιπρόσθετα, είναι ξεκάθαρο πως για τη λύση y_* , το «υπόλοιπο» $\|\beta e_1 - \bar{H}_m y_*\|$ δεν είναι τίποτα άλλο από το τελευταίο στοιχείο του δεξιού μέλους, δηλαδή, ο όρος γ_6 στο παραπάνω παράδειγμα.

2.9 Διακοπή (Breakdown) της επαναληπτικής μεθόδου GMRES

Εάν ο αλγόριθμος 2.7.1 εξεταστεί προσεχτικά, παρατηρείται πως οι μόνες πιθανότητες διακοπή της GMRES είναι στο βρόγχο Arnoldi, όπου $w_j = 0$, δηλαδή όταν $h_{j+1,j} = 0$ στο βήμα j . Σε αυτήν την περίπτωση, ο αλγόριθμος σταματάει επειδή το επόμενο διάνυσμα Arnoldi δεν μπορεί να παραχθεί. Ωστόσο, σε αυτήν την περίπτωση, το διάνυσμα του υπόλοιπου είναι μηδενικό, δηλαδή ο αλγόριθμος δίνει την ακριβή λύση σε αυτό το βήμα. Για την ακρίβεια, ισχύει και το αντίστροφο: Εάν ο αλγόριθμος σταματήσει σε βήμα j με $b - Ax_j = 0$, τότε $h_{j+1,j} = 0$.

2.10 Παραλλαγή: Restarted GMRES ή GMRES(m)

Ο αλγόριθμος GMRES δεν είναι πρακτικός όταν η διάσταση m είναι μεγάλη, διότι αυξάνονται η χρήση της μνήμης και οι υπολογιστικές απαιτήσεις.

Όσο η διάσταση m αυξάνεται, το υπολογιστικό κόστος αυξάνεται κατά τουλάχιστον $O(m^2N)$ πράξεις λόγω της ορθοκανονικοποίησης Gram-Schmidt. Το κόστος χρήσης της μνήμης αυξάνεται κατά $O(mN)$. Το κόστος αυτό περιορίζει τη μέγιστη τιμή της διάστασης m για μεγάλες διαστάσεις N διανυσμάτων τύπου m .

Ένας τρόπος να αποφευχθεί το φαινόμενο αυτό είναι η επανεκκίνηση με τη μέθοδο GMRES(m) [2] [4] [11].

2.10.1 Αλγόριθμος GMRES(m)

1. Υπολογισμός των $r_0 = b - Ax_0$, $\beta := \|r_0\|_2$ και $v_1 := r_0/\beta$
2. Παραγωγή της βάσης Arnoldi και του πίνακα \bar{H}_m με χρήση του αλγορίθμου 2.6.3.1, ξεκινώντας με το v_1
3. Υπολογισμός του y_m που ελαχιστοποιεί τη νόρμα $\|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|_2$ και της νέας προσεγγιστικής λύσης $x_m = x_0 + V_m y_m$
4. *If* $\|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|_2 < tol$ *then* διακοπή, *else* $x_0 := x_m$ και *GoTo* 1

όπου tol είναι η ανοχή που έχει επιλεχθεί.

Σημειώνεται πως οι ιδιότητες της εφαρμογής που σχολιάστηκαν στην προηγούμενη ενότητα μπορούν να χρησιμοποιηθούν, δίνοντας τη νόρμα του υπολοίπου σε κάθε υποβήμα j χωρίς να υπολογίζεται η προσέγγιση x_j . Αυτό επιτρέπει στη ρουτίνα να τερματίσει μόλις η νόρμα είναι αρκετά μικρή.

Μια γνωστή δυσκολία του αλγορίθμου GMRES(m) είναι ότι μπορεί η τιμή της νόρμας $\|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|_2$ να μην μειώνεται περαιτέρω όταν ο πίνακας δεν είναι θετικά ορισμένος. Ο συνολικός αλγόριθμος της μεθόδου GMRES εγγυάται πως θα συγκλίνει το μέγιστο στα n βήματα, το οποίο δεν θα ήταν πρακτικό εάν ήταν πολλά τα βήματα που θα χρειαζόνταν για σύγκλιση. Ένας τρόπος αποφυγής του φαινομένου είναι η χρήση τεχνικών

προσταθεροποίησης, που ο σκοπός τους είναι να μειωθεί ο αριθμός επαναλήψεων που χρειάζονται για σύγκλιση.

3 Προσέγγιση Schur Complement

Οι μέθοδοι Schur Complement βασίζονται στην επίλυση του συστήματος $(C - FB^{-1}E)y = g - FB^{-1}f$ από κάποια προσταθεροποιημένη μέθοδο υποχώρου Krylov. Οι διαδικασίες αυτού του τύπου γίνονται σε τρία βήματα.

1. Υπολογισμός του δεξιού μέρους $g' = g - FB^{-1}f$
2. Επίλυση του συστήματος $Sy = g'$ μέσω μίας επαναληπτικής μεθόδου
3. Υπολογισμός του x μέσω της σχέσης $x = B^{-1}(f - Ey)$

Οι διαφορετικές μέθοδοι σχετίζονται με τον τρόπο που θα εκτελεστεί το δεύτερο βήμα. Πρώτα παρατηρείται ότι δεν χρειάζεται να σχηματιστεί άμεσα ο πίνακας S , ούτως ώστε να επιλυθεί το σύστημα $(C - FB^{-1}E)y = g - FB^{-1}f = g'$. Για παράδειγμα, εάν χρησιμοποιηθεί μία μέθοδος υποχώρου Krylov, τότε οι μόνες απαιτούμενες πράξεις στον πίνακα S είναι πίνακα-με-διάνυσμα, δηλαδή $w = Sv$. Τέτοιες πράξεις μπορούν να πραγματοποιηθούν όπως φαίνεται παρακάτω.

1. Υπολογισμός του $v' = Ev$
2. Επίλυση του συστήματος $Bz = v'$ ως προς z
3. Υπολογισμός του $w = Cv - Fz$

Η παραπάνω διαδικασία αποτελείται μόνο από πολλαπλασιασμούς πίνακα-με-διάνυσμα και μία λύση γραμμικού συστήματος. Υπενθυμίζεται ότι το γραμμικό σύστημα που αφορά στο block B αντιστοιχεί σε s ανεξάρτητα γραμμικά συστήματα. Επίσης, σημειώνεται πως τα γραμμικά συστήματα που αφορούν στο block B πρέπει να επιλυθούν ακριβώς, είτε με μία άμεση μέθοδο επίλυσης είτε με μία επαναληπτική μέθοδο μεγάλης ακρίβειας.

Ενώ οι πολλαπλασιασμοί πίνακα-με-διάνυσμα παρουσιάζουν μικρή δυσκολία, είναι πολύ δυσκολότερο να προσταθεροποιηθεί ο πίνακας S , αφού ο ολόκληρος πίνακας δεν είναι άμεσα διαθέσιμος.

Βάσει των παραπάνω πράξεων προκύπτει ο τροποποιημένος αλγόριθμος της μεθόδου Schur Complement-GMRES.

3.1 Αλγόριθμος Schur Complement-GMRES

1. Υπολογισμός των $r_0 = g'$, $\beta := \|r_0\|_2$ και $v_1 := r_0/\beta$
2. *For* $j = 1, 2, \dots, m$ *Do*:
 - a. Υπολογισμός του $v' = Ev_j$
 - b. Επίλυση του συστήματος $Bz = v'$ ως προς z
 - c. Υπολογισμός του $w_j := Cv - Fz$
 - d. *For* $i = 1, \dots, j$ *Do*:
 - i. $h_{ij} := (w_j, v_i)$
 - ii. $w_j := w_j - h_{ij}v_i$
 - e. *End Do*
 - f. $h_{j+1,j} = \|w_j\|_2$. *If* $h_{j+1,j} = 0$ *then* $m := j$ *και GoTo* 11
 - g. $v_{j+1} = w_j/h_{j+1,j}$

3. *End Do*

4. Ορισμός του πίνακα Hessenberg διαστάσεων $(m+1) \times m$, $\bar{H}_m = \{h_{ij}\}_{1 \leq i \leq m+1, 1 \leq j \leq m}$

5. Υπολογισμός του y_m που ελαχιστοποιεί τη νόρμα $\|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|_2$ και της νέας προσεγγιστικής λύσης $x_m = x_0 + V_m y_m$

Όπως φαίνεται από τον αλγόριθμο, ουσιαστικά αλλάζει ο τρόπος με τον οποίο υπολογίζεται το w_j και το διάνυσμα r_0 που είναι ίσο με $r_0 = g'$.

Παρακάτω φαίνεται και ο αντίστοιχος αλγόριθμος της GMRES(m):

3.2 Αλγόριθμος Schur Complement-GMRES(m)

1. Τίθεται $r_0 = g'$
2. Υπολογισμός των $\beta := \|r_0\|_2$ και $v_1 := r_0/\beta$
3. Παραγωγή της βάσης Arnoldi και του πίνακα \bar{H}_m με χρήση του αλγορίθμου 2.6.3.1, ξεκινώντας με το v_1
4. Υπολογισμός του y_m που ελαχιστοποιεί τη νόρμα $\|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|_2$ και της νέας προσεγγιστικής λύσης $x_m = x_0 + V_m y_m$
5. *If* $\|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|_2 < tol$ *then* διακοπή, *else*
 - a. $x_0 := x_m$
 - b. Επίλυση του συστήματος $e' = B^{-1}Ex_0$ ως προς e'
 - c. Υπολογισμός του $r_0 := g' - Cx_0 - Fe'$
 - d. *GoTo* 2

Ότι ισχύει για τον αλγόριθμο 3.1 ισχύει και για τον αλγόριθμο 3.2. Επίσης, για τον αλγόριθμο Schur Complement-GMRES(m) ο εκ νέου υπολογισμός του διανύσματος r_0 γίνεται μέσω της σχέσης $r_0 := g' - Cx_0 - Fe'$.

4 Παράλληλη επεξεργασία

Στο κεφάλαιο αυτό γίνεται αναφορά στον τρόπο με τον οποίο έγινε η παράλληλη επεξεργασία, αλλά και τα προβλήματα αυτής.

4.1 Ορολογία πυρήνων

Αρχικά δίνονται οι ορισμοί των πυρήνων των επεξεργαστών :

- Οι φυσικοί πυρήνες του επεξεργαστή (Physical CPU cores) είναι ο αριθμός των φυσικών πυρήνων του επεξεργαστή, ή αλλιώς ο αριθμός των πραγματικών πυρήνων.
- Οι λογικοί πυρήνες του επεξεργαστή (Logical CPU cores) είναι ο αριθμός των φυσικών πυρήνων επί ένα συντελεστή multi-threading, ο οποίος είναι συνήθως 2. Επομένως, ένας τετραπύρηνος επεξεργαστής έχει στη διάθεσή του 8 λογικούς πυρήνες (8 threads).

4.2 Πρότυπα παράλληλης επεξεργασίας

Τα κυρίαρχα πρότυπα για την παράλληλη επεξεργασία σε επεξεργαστές αλλά και σε επιταχυντές (accelerators):

- Το πρότυπο (standard) OpenMP [12], το οποίο έχουν υιοθετήσει διάφοροι compilers, όπως ο GCC και οι compilers της Intel για τις γλώσσες C, C++ και Fortran [13]. παρέχει ένα σύνολο οδηγιών (directives) παράλληλης επεξεργασίας, ρουτίνες βιβλιοθήκης και μεταβλητές περιβάλλοντος που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να προσδοθεί παραλληλία υψηλού επιπέδου (high-level parallelism) σε προγράμματα που έχουν προγραμματιστεί στις γλώσσες που υποστηρίζονται.
- Το πρότυπο OpenACC [14] είναι ένα νέο σύνολο directives παράλληλης επεξεργασίας, ρουτινών βιβλιοθήκης και μεταβλητές περιβάλλοντος που επιτρέπουν την παράλληλη επεξεργασία σε GPU (Graphics Processing Unit) ή coprocessors (π.χ. Intel Xeon Phi) πάλι χωρίς αλλαγή στον κώδικα ο οποίος θεωρείται παραλληλοποίησης.

Οι οδηγίες τοποθετούνται σε μέρη του κώδικα τα οποία θεωρούνται από τον προγραμματιστή παραλληλοποιήσιμα. Το πλεονέκτημα των οδηγιών είναι ότι ο κώδικας δεν χρειάζεται να τροποποιηθεί.

Στην περίπτωση του προτύπου OpenMP μπορεί να παρουσιαστούν επιβραδύνσεις κατά την παράλληλη εκτέλεση του κώδικα (bottlenecks) π.χ. ένα thread περιμένει να τελειώσει το προηγούμενο ενώ θα ήταν δυνατή η παράλληλη εκτέλεση των threads.

Για αυτόν τον λόγο είναι σημαντικό και το scheduling της παράλληλης επεξεργασίας, δηλαδή το πώς θα κατανέμονται τα threads στους πυρήνες των επεξεργαστών ή γενικά στους

επεξεργαστές. Το πλεονέκτημα της παραλληλοποίησης εμφανίζεται κυρίως όταν ο αριθμός των φυσικών πυρήνων του επεξεργαστή συνάδει με τον αριθμό των στοιχείων που επεξεργάζονται.

Ταυτόχρονα, είναι χρήσιμο ο κώδικας που θα χαρακτηριστεί ως παραλληλοποίησης να περιέχει ανεξάρτητα τμήματα, ούτως ώστε να μην περιμένει ένα thread τα αποτελέσματα από το προηγούμενο.

Οι οδηγίες OpenMP ευνοούν την εκτέλεση σε ισχυρότερα υπολογιστικά συστήματα όπως τα workstations, αυξάνοντας την ταχύτητα επεξεργασίας όσο αυξάνονται οι επεξεργαστές ή οι πυρήνες αυτών (scalability), σε εφαρμογές που χρησιμοποιούν παράλληλη επεξεργασία σε κοινή μνήμη (shared-memory parallel programming). Αυτό βέβαια είναι ιδιότητα της εφαρμογής και των αλγορίθμων που χρησιμοποιούνται. Η παράλληλη προγραμματιστική γλώσσα μπορεί να υποστηρίξει την ιδιότητα αυτή μόνο μέσω δομών που απλοποιούν τις προδιαγραφές της παραλληλίας και που μπορούν να εφαρμοστούν με χαμηλό επεξεργαστικό κόστος από τις διανομές μεταφραστών. [15]

Οι οδηγίες OpenACC δεν αντιμετωπίζουν το πρόβλημα αναμονής ενός thread για τα αποτελέσματα από το προηγούμενο, καθώς η επεξεργασία δεν επιτρέπει την αναμονή, αλλά μόνο την ταυτόχρονη εκτέλεση των threads.

5 Επίλυση του προβλήματος συνοριακών τιμών

5.1 Εισαγωγή

Στο κεφάλαιο αυτό, γίνεται ανάλυση του προβλήματος που επιλύθηκε, καθώς και της διαδικασίας επίλυσής του.

5.2 Πρόβλημα

Το σύστημα το οποίο επιλύθηκε είναι το δισδιάστατο πρόβλημα συνοριακών τιμών:

$$\begin{aligned}\nabla^2 u &= f(x, y), 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b \\ u(0, y) &= 0, u(x, 0) = 0 \\ u(a, y) &= g(y), \frac{\partial u}{\partial y}(x, b) = h(x)\end{aligned}$$

Επιλέχθηκε $0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1$.

Έγινε διακριτοποίηση του προβλήματος μέσω της μεθόδου των Πεπερασμένων Στοιχείων και πιο συγκεκριμένα με χρήση των σταθμισμένων υπολοίπων Galerkin (Galerkin Weighted Residuals) [16]. Επιλέχθηκαν διωνυμικές συναρτήσεις ως παράγοντες στάθμισης.

Το σύστημα που προκύπτει είναι το $Ax = b$ όπου A είναι ο πίνακας $N \times N$ των συντελεστών a_{ij} , $A \equiv [a_{ij}]$ και b το διάνυσμα N στοιχείων $b \equiv (b_1, b_2, \dots, b_n)$, x το διάνυσμα των αγνώστων, $x \equiv (x_1, x_2, \dots, x_n)$ και N είναι ο αριθμός των κόμβων.

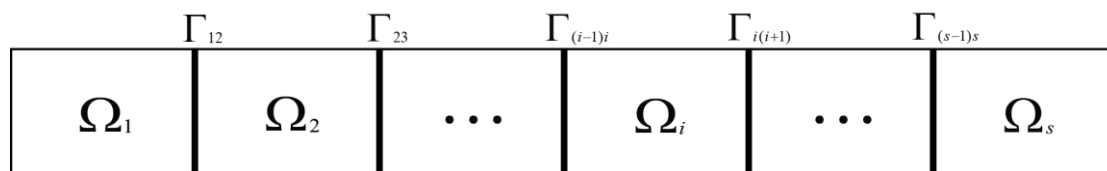
Η αρίθμηση των κόμβων έγινε από τα αριστερά προς τα δεξιά και από κάτω προς τα πάνω. Η αρίθμηση των κόμβων της διεπαφής έγινε στο τέλος, δηλαδή μετά από την αρίθμηση των κόμβων που βρίσκονται στο σύνορο του χωρίου στη συντεταγμένη $x = 1$.

Το χωρίο του προβλήματος έχει την παρακάτω μορφή:



Σχήμα 5-1: Το χωρίο του προβλήματος.

Όταν γίνεται χρήση της μεθόδου Schur Complement, το ίδιο χωρίο χωρίζεται σε s υποχωρία κατά τον τρόπο που φαίνεται στο παρακάτω σχήμα:



Σχήμα 5-2: Το χωρίο που φαίνεται στο Σχήμα 1-1 χωρίζεται σε s υποχωρία.

Εδώ, με τον όρο υποχωρία, δεν εννοούνται τα στοιχεία. Κάθε υποχωρίο περιέχει παραπάνω από ένα στοιχεία.

Από τον διαχωρισμό προκύπτουν s ανεξάρτητα συστήματα. Οι γραμμές συμβολίζουν τους κόμβους διεπαφής των υποχωρίων και ο αριθμός των γραμμών είναι $s - 1$.

Ακολουθούν τα στάδια επίλυσης του συστήματος $Ax = b$.

5.3 Πρώτο στάδιο: Επίλυση του προβλήματος συνοριακών τιμών με απαλοιφή Gauss

Κατασκευάστηκε το δισδιάστατο πρόβλημα συνοριακών τιμών χρησιμοποιώντας τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων, με διωνυμικές συναρτήσεις βάσης.

Η λύση του συστήματος $Ax = b$, όπου A ο πίνακας των εξισώσεων διακριτοποίησης, x η λύση και b το διάνυσμα δεξιού μέλους λύθηκε μέσω απαλοιφής Gauss.

5.4 Δεύτερο στάδιο: Αλλαγή της αρίθμησης κόμβων και της σχέσης κόμβων-συντεταγμένων

Έγινε αλλαγή της αρίθμησης κόμβων, όπως και της συσχέτισης των συντεταγμένων x και y με τους κόμβους, ούτως ώστε να εκφράζουν υποχωρία και όχι ένα μόνο χωρίο.

Στην περίπτωση ενός υποχωρίου, το σύστημα που προκύπτει ταυτίζεται με το αρχικό σύστημα, δηλαδή με αυτό που προέκυψε με το διαχωρισμό του χωρίου σε στοιχεία. Η διαφορά μεταξύ των δύο μεθόδων έγκειται στο γεγονός ότι ο διαχωρισμός σε υποχωρία επιτρέπει την παράλληλη επεξεργασία.

Το σύστημα λύθηκε με απαλοιφή Gauss.

5.5 Τρίτο στάδιο: Χρήση μεθόδου Schur Complement

Γίνεται χωρισμός του πίνακα A σε υποπίνακες, όπως φαίνεται στις σχέσεις (1-1), (1-2)

Το block x μπορεί να εκφραστεί ως $x = B^{-1}(f - Ey)$.

Το block y βρίσκεται από το σύστημα $Sy = g'$ όπου S ο πίνακας Schur Complement, δηλαδή $S = C - FB^{-1}E$ και το διάνυσμα $g' = g - FB^{-1}E$.

Επομένως στο στάδιο αυτό, η διαδικασία έχει ως εξής:

1. Χωρισμός του πίνακα A στα blocks B , E , F και C .
2. Σχηματισμός του πίνακα Schur Complement.
3. Χωρισμός του διανύσματος b σε blocks f και g .
4. Υπολογισμός του δεξιού μέρους g' .
5. Επίλυση του συστήματος $Sy = g'$ ως προς το διάνυσμα αγνώστων διεπαφής y .
6. Αντικατάσταση του διανύσματος y στην εξίσωση $x = B^{-1}(f - Ey)$.

Ο υπολογισμός των διανυσμάτων $f' = B^{-1}f$ και $e' = B^{-1}Ey$ έγινε με απαλοιφή Gauss.

Υπήρχαν όμως πράξεις πίνακα-με-πίνακα για τον υπολογισμό του πίνακα S και του δεξιού μέρους g' . Πιο συγκεκριμένα:

- Επίλυση του συστήματος $BE' = E$ με απαλοιφή Gauss-Jordan.
- Πολλαπλασιασμός του πίνακα F με τη λύση του παραπάνω συστήματος E' .

5.6 Τέταρτο στάδιο: Χρήση της επαναληπτικής μεθόδου GMRES

Για να αποφευχθεί ο σχηματισμός του πίνακα S του συστήματος $Sy = g'$ αλλά και ο πολλαπλασιασμός των πινάκων, χρησιμοποιείται μία επαναληπτική μέθοδος υποχώρου Krylov. Στη προκειμένη περίπτωση χρησιμοποιείται η GMRES.

Εδώ χρησιμοποιείται ο όρος υπόχωρος που αναφέρεται σε διανυσματικό υπόχωρο και όχι ο όρος υποχωρίο που αναφέρεται στον χωρισμό του αρχικού χωρίου.

Πρώτα δοκιμάστηκε η μέθοδος GMRES για τη λύση του συνολικού συστήματος χωρίς της μέθοδο Schur Complement.

Το διάνυσμα λύσης x του συνολικού συστήματος $Ax = b$ προκύπτει από την εφαρμογή της μεθόδου Schur Complement.

Η διαδικασία είχε ως εξής:

1. Υπολογισμός του δεξιού μέρους $g' = g - FB^{-1}f$.
2. Επίλυση του συστήματος $Sy = g'$ μέσω της επαναληπτικής μεθόδου GMRES και άρα υπολογίζεται το διάνυσμα y που είναι το διάνυσμα – λύση για τους κόμβους διεπαφής των υποχωρίων.
3. Αντικατάσταση του y στο σύστημα $x = B^{-1}(f - Ey)$.

Με τη χρήση των πολλαπλασιασμών πίνακα-με-διάνυσμα, όπως παρουσιάζονται παρακάτω, ο πίνακας Schur Complement S δεν χρειαζόταν να σχηματιστεί.

Το δεξί μέρος, το οποίο είναι διάνυσμα, οι πίνακες E , F , C και ο αρχικός πίνακας A είναι μεταβλητές εισόδου της μεθόδου GMRES.

Οι πολλαπλασιασμοί πίνακα – με – διάνυσμα εκτελέστηκαν ως εξής:

1. Υπολογισμός $v' = Ev$.
2. Εύρεση του διανύσματος z μέσω της επίλυσης του συστήματος $Bz = v'$.
3. Υπολογισμός $w = Cv - Fz$.

Το γραμμικό σύστημα $Bz = v'$ αντιστοιχεί σε s ανεξάρτητα γραμμικά συστήματα, όπου s ο αριθμός των υποχωρίων. Επομένως, γίνεται χωρισμός του B σε s υποπίνακες B_i και του διανύσματος v' σε s υποδιανύσματα v'_i και απαιτείται κάθε φορά η λύση ενός συστήματος της μορφής $B_i z_i = v'_i$.

Καθένα από αυτά λύνεται με απαλοιφή Gauss ή με τη μέθοδο GMRES. Το ίδιο συμβαίνει και με τις λύσεις των γραμμικών συστημάτων που είναι εκτός της GMRES, δηλαδή των συστημάτων $f' = B^{-1}f$ και $e' = B^{-1}Ey$.

Σε κάθε επανάληψη της μεθόδου GMRES δημιουργείται ένας νέος υπόχωρος Krylov.

Χρησιμοποιήθηκαν και επανεκκινήσεις, δηλαδή η μέθοδος Restarted GMRES ή GMRES(m), ώστε η διάσταση m του υποχώρου Krylov που σχηματίζεται με τη μέθοδο Arnoldi να μην αυξηθεί πολύ.

6 Μελέτη της επίλυσης του συστήματος $Ax = b$

6.1 Εισαγωγή

Στο κεφάλαιο αυτό μελετώνται τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την επίλυση του συστήματος $Ax = b$ ως προς πολλές παραμέτρους που θα αναλυθούν στις επόμενες παραγράφους.

Πρώτα δίνονται κάποιες πληροφορίες για το σύστημα και τον compiler που χρησιμοποιήθηκε, καθώς και οι μεταβλητές που χρησιμοποιήθηκαν στα αποτελέσματα.

6.1.1 Πληροφορίες συστήματος και compiler

Το λειτουργικό και υπολογιστικό μέσο που χρησιμοποιήθηκε για τη μελέτη ήταν το cluster Andromeda (Rocks 5.4) της Σχολής Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ.

Κάθε κόμβος (HP ProLiant SL390s G7) του cluster Andromeda αποτελείται από δύο επεξεργαστές Xeon X5660, με συνολικά 12 φυσικούς πυρήνες (24 threads) και 16 GB RAM.

Ο compiler ήταν ο Intel® Fortran Compiler ή ifort 12.0.4, μέρος του Intel® Parallel Studio XE 2012.

Οι σημαντικές παράμετροι για τη μελέτη κατά το compiling ήταν οι εξής:

“-O3 –heap-arrays” για τους σειριακούς υπολογισμούς

“-O3 –openmp –heap-arrays” για τους υπολογισμούς που έγιναν παράλληλα

Η παράμετρος «O3» ενεργοποιεί πολλές βελτιστοποιήσεις (optimizations) του compiler, δηλαδή ο κώδικας μετασχηματίζεται σε μία πιο αποδοτική μορφή και η παράμετρος «heap-arrays» είναι χρήσιμη στην επίλυση μεγάλων συστημάτων.

6.1.2 Μεταβλητές που χρησιμοποιήθηκαν για τη μέθοδο GMRES σε συνδυασμό με τη μέθοδο Schur Complement

- Υποχωρία (subdomains): Ο αριθμός των υποχωρίων, ο οποίος συμβολίζεται με s .
- x στοιχεία (elements) ανά υποχωρίο: Ο αριθμός των στοιχείων στον άξονα x ανά υποχωρίο, ο οποίος συμβολίζεται με $snex$.
- y στοιχεία ανά υποχωρίο: Ο αριθμός των στοιχείων στον άξονα y ανά υποχωρίο, ο οποίος συμβολίζεται με $sney$.
- Εξωτερικές (outer) επαναλήψεις (iterations) της GMRES: Ο αριθμός των εξωτερικών επαναλήψεων της GMRES και συμβολίζεται με i . Αυτές παρουσιάζονται μόνο κατά τη χρήση της μεθόδου GMRES(m).
- Μέγιστη διάσταση (dimension) Krylov: Η μέγιστη διάσταση υποχώρου Krylov, η οποία χρησιμοποιείται για Restarted GMRES ή GMRES(m) και συμβολίζεται με m .

- Εσωτερικές (inner) επαναλήψεις (iterations) της GMRES: Το βήμα μεθόδου Arnoldi ή η τρέχουσα διάσταση υποχώρου Krylov και το οποίο συμβολίζεται με j . Είναι οι εσωτερικές επαναλήψεις της μεθόδου GMRES.
- Επαναλήψεις (iterations) της GMRES: Ο αριθμός επαναλήψεων (εσωτερικών και εξωτερικών) της πορείας σύγκλισης της GMRES ή GMRES(m) ο οποίος υπολογίζεται από τον τύπο $(i-1) \times m + j$.
- Κόμβοι (nodes) στον άξονα x : Ο αριθμός των συνολικών κόμβων στον άξονα x που υπολογίζεται από τον τύπο $nnx = 2 \times s \times snex + 1$.
- Κόμβοι στον άξονα y : Ο αριθμός των συνολικών κόμβων στον άξονα y που υπολογίζεται από τον τύπο $nnx = 2 \times sney + 1$, δηλαδή σε κάθε υποχωρίο ο αριθμός κόμβων στον άξονα y είναι ίδιος, λόγω του τρόπου διαμερισμού.
- Συνολικοί κόμβοι (total nodes): Ο αριθμός των συνολικών κόμβων που υπολογίζεται από τον τύπο $nnx \times nnx$.
- Συνολικός χρόνος (total time): Ο χρόνος επίλυσης του συστήματος $Ax = b$.
- Ανοχή (tolerance): Η ανοχή που επιλέχθηκε για τη σύγκλιση της GMRES αλλά και για την επαλήθευση της λύσης ήταν $1E-07$.
- Ανοχή της GMRES για την επίλυση υποσυστημάτων(partitions): Η ανοχή που επιλέχθηκε για τη σύγκλιση της GMRES της επίλυσης των ανεξάρτητων συστημάτων (επίλυση των $B_i z_i = v'_i$ ως προς z_i) που είναι ίση με $1E-09$. Η ανοχή εδώ είναι μικρότερη καθώς το σφάλμα (error) κάθε λύσης που προκύπτει στα υποσυστήματα, οδηγεί στη λύση διαφορετικού συστήματος από το αρχικό και επομένως η επαλήθευση της τελικής λύσης αποτυγχάνει. Όταν χρησιμοποιείται απαλοιφή Gauss στα υποσυστήματα, δηλαδή χρησιμοποιείται άμεση μέθοδος επίλυσης (Direct Solver), οι λύσεις είναι ακριβείς και άρα δεν παρουσιάζεται αντίστοιχο πρόβλημα.

6.2 Σειριακή Επίλυση

Αρχικά, όλοι οι υπολογισμοί έγιναν σειριακά, με απενεργοποίηση των OpenMP directives κατά το compiling.

Για τα ανεξάρτητα συστήματα που προέκυψαν από ένα αρχικό σύστημα $N = 2651$ κόμβων, η επίλυση έγινε και με απαλοιφή Gauss και GMRES, ούτως ώστε να γίνει αξιολόγηση και για τις δύο μεθόδους ως προς τον χρόνο επίλυσης.

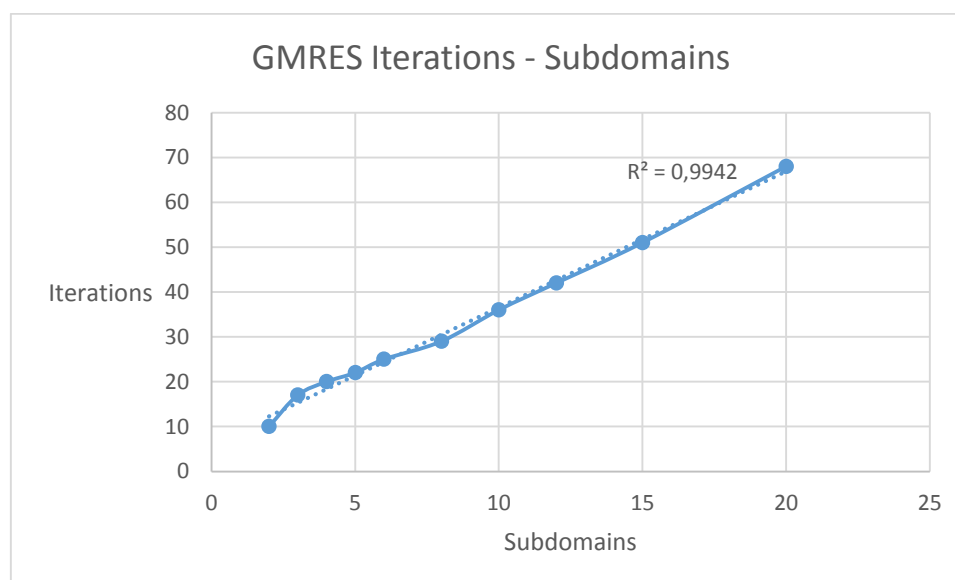
Η επίλυση έγινε χωρίς επανεκκινήσεις και με μέγιστη διάσταση υποχώρου Krylov $m = 70$, όταν έγινε χρήση της μεθόδου Schur Complement και $m = 1000$, όταν επιλύθηκε το σύστημα ενός χωρίου.

6.2.1 Ανάλυση για τις επαναλήψεις της μεθόδου GMRES

Η χρήση απαλοιφής Gauss ή GMRES για την επίλυση των υποσυστημάτων δεν διαφοροποιεί τη σύγκλιση της μεθόδου GMRES.

Επισημαίνεται πως οι επαναλήψεις της GMRES με συνδυασμό της μεθόδου Schur Complement είναι λιγότερες σε σχέση με την αρχική επίλυση ενός χωρίου εφόσον το σύστημα που λύνεται είναι διαφορετικό. Συγκριμένα, με χρήση της μεθόδου Schur Complement, το σύστημα που επιλύεται από τη GMRES είναι το $Sy = g'$, όπως αυτό προκύπτει από του κόμβους διεπαφής των υποχωρίων και όχι το αρχικό σύστημα $Ax = b$. Το διάνυσμα της λύσης που δίνεται από τη GMRES σε αυτή την περίπτωση δεν είναι το x αλλά το διάνυσμα y , το οποίο τελικά χρησιμοποιείται για να βρεθεί το διάνυσμα x .

Παρακάτω φαίνονται τα αντίστοιχα αποτελέσματα για το σύστημα $N = 2651$ κόμβων:



Διάγραμμα 6-1: Σχέση των επαναλήψεων της GMRES για την επίλυση του συστήματος $Sy = g'$ με τον αριθμό υποχωρίων, $N = 2651$

Όσο αυξάνεται το πλήθος των υποχωρίων, τόσο αυξάνονται οι κόμβοι διεπαφής οι οποίοι παρουσιάζονται μεταξύ των υποχωρίων και άρα αυξάνεται ο αριθμός των επαναλήψεων της

GMRES, αφού λύνεται μεγαλύτερων διαστάσεων σύστημα $Sy = g'$. Επιπρόσθετα, η αύξηση των επαναλήψεων είναι γραμμική ($R^2 = 0,9942$), όπως προέκυψε από γραμμική παλινδρόμηση, αφού δεν υπάρχουν επανεκκινήσεις. Το πώς επηρεάζεται η σύγκλιση της GMRES όταν γίνεται χρήση της μεθόδου Schur Complement θα σχολιαστεί στην παράγραφο 6.5.

Δεν περιλαμβάνεται στο διάγραμμα η επίλυση χωρίς τη χρήση της μεθόδου Schur Complement, αφού δεν επιλύεται το ίδιο σύστημα από την επαναληπτική μέθοδο GMRES.

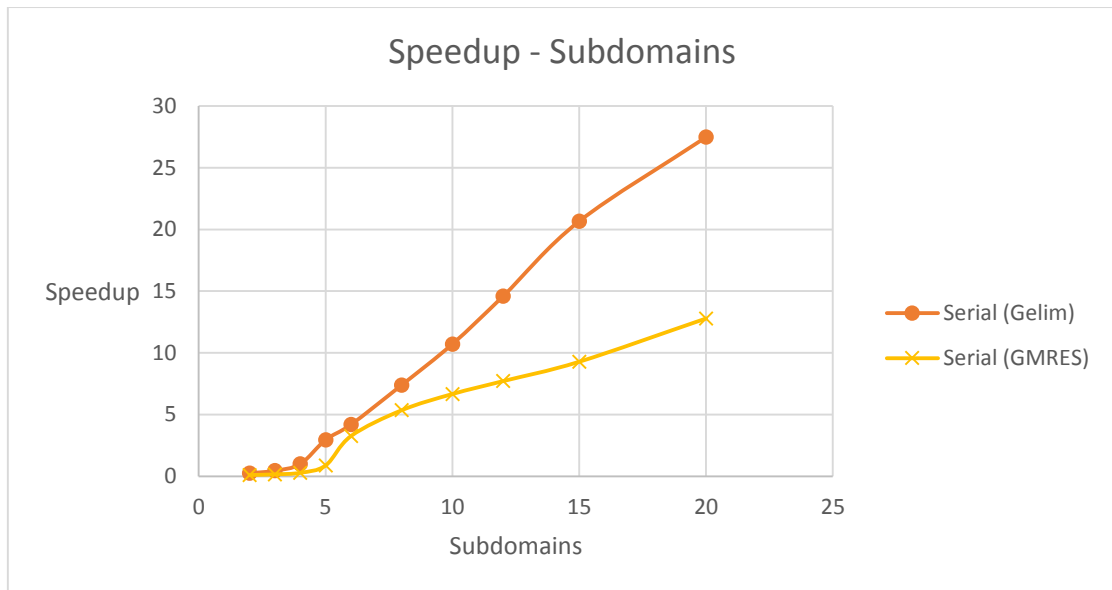
6.2.2 Ανάλυση για το συνολικό χρόνο επίλυσης

Ο συνολικός χρόνος επηρεάζεται από τον χρόνο επίλυσης των συστημάτων που αντιστοιχούν στα υποχωρία. Αυτά λύνονται με απαλοιφή Gauss ή GMRES. Εν γένει, όσο πιο μικρά είναι τα συστήματα αυτά, δηλαδή όσο περισσότερα είναι τα υποχωρία, τόσο πιο γρήγορη είναι και η επίλυση του συστήματος $Ax = b$. Το φαινόμενο αυτό παρατηρείται μέχρι ένα συγκεκριμένο αριθμό υποχωρίων, καθώς τα συστήματα καταλήγουν να είναι τόσο μικρά που δεν παρατηρείται ουσιαστική διαφορά στον χρόνο επίλυσης με απαλοιφή Gauss αλλά οι επαναλήψεις της GMRES συνεχίζουν να αυξάνονται. Εφόσον ο αριθμός των υποχωρίων υπερβεί το όριο, ο χρόνος επίλυσης δεν μειώνεται περαιτέρω, αλλά αυξάνεται.

Επίσης, το όριο είναι ανάλογο με το μέγεθος του συστήματος $Ax = b$ και για μεγαλύτερα αρχικά συστήματα από αυτά που χρησιμοποιήθηκαν για τα αποτελέσματα, χρειάζονται περισσότερα υποχωρία για να παρατηρηθεί σημαντική διαφορά στον χρόνο επίλυσης των ανεξάρτητων συστημάτων με απαλοιφή Gauss.

Μετρήθηκε το speedup ως προς τη λύση ενός χωρίου με GMRES, δηλαδή υπολογίζεται ο λόγος $\frac{\text{Total Time} \rightarrow \text{Domain}}{\text{Total Time} \rightarrow s \text{ Subdomains}}$, όπου $s \geq 2$ ο αριθμός υποχωρίων που επιλέχθηκε για κάθε επίλυση.

Παρακάτω φαίνονται τα αντίστοιχα αποτελέσματα για το σύστημα $N = 2651$ κόμβων, για επίλυση με GMRES και απαλοιφή Gauss:



Διάγραμμα 6-2: Σχέση speedup επίλυσης του συστήματος $Ax = b$ με τον αριθμό υποχωρίων, $N = 2651$

Όπως παρατηρείται από τα αποτελέσματα, για μικρό αριθμό υποχωρίων, ο χρόνος επίλυσης με τη μέθοδο Schur Complement είναι πιο μεγάλος από τον χρόνο επίλυσης ενός χωρίου με GMRES. Η αύξηση των υποχωρίων οδηγεί σε σημαντική διαφορά μεταξύ των δύο επιλύσεων.

Πιο συγκεκριμένα, οι δύο χρόνοι επίλυσης για 20 υποχωρία είναι 2,342 s και 64,349 s αντίστοιχα. Άρα, η χρήση της μεθόδου Schur Complement με 20 υποχωρία προσδίδει 27,476 x speedup στην επίλυση.

Το γεγονός αυτό οφείλεται στον χρόνο επίλυσης των ανεξάρτητων συστημάτων που αντιστοιχούν στα υποχωρία. Λιγότερα υποχωρία αντιστοιχούν σε μεγαλύτερα ανεξάρτητα συστήματα και αντιστρόφως. Ο χρόνος επίλυσης των ανεξάρτητων συστημάτων με απαλοιφή Gauss είναι μικρότερος για μικρά συστήματα, καθώς η υπολογιστική της πολυπλοκότητα (Computational complexity) είναι $O(N^3)$.

Αναφορά σχετικά με τη διαφορά στα speedup μεταξύ GMRES και απαλοιφή Gauss για την επίλυση των υποσυστημάτων αλλά και για το όριο στο οποίο δεν παρουσιάζεται speedup με αύξηση των υποχωρίων, θα γίνει έπειτα, στην παράγραφο 6.7.

6.3 Παράλληλη επίλυση

Στη συνέχεια, τα ανεξάρτητα συστήματα λύθηκαν παράλληλα, με ενεργοποίηση των οδηγιών OpenMP.

Οι επαναλήψεις της GMRES δεν επηρεάζονται, είτε η επίλυση γίνει σειριακά, είτε η επίλυση γίνει παράλληλα και άρα δεν εξετάζονται.

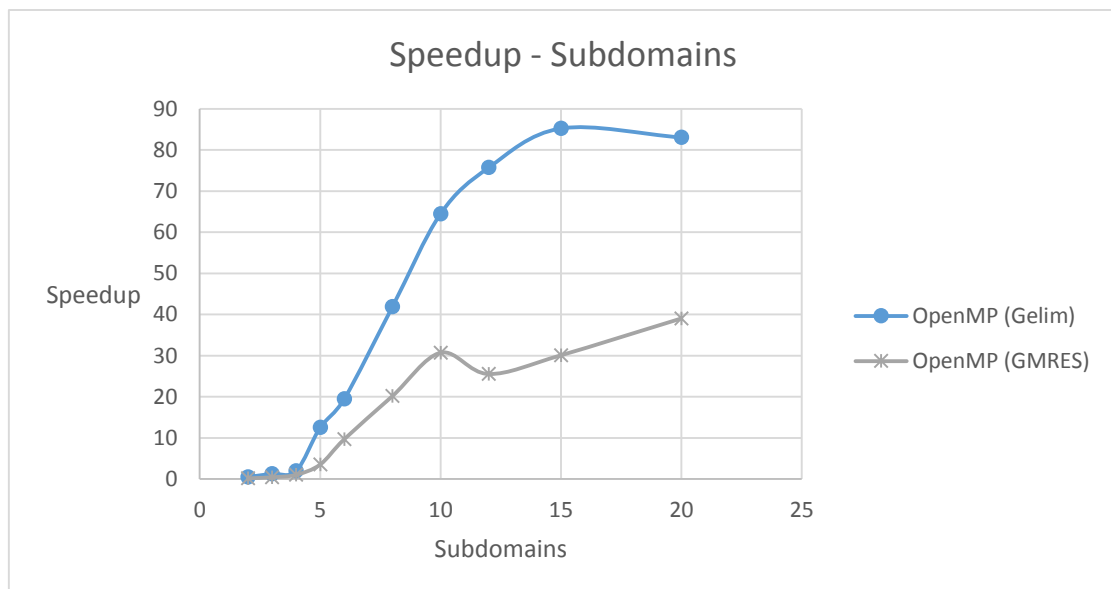
Για τα ανεξάρτητα συστήματα που προέκυψαν από αρχικό σύστημα $N = 2651$ κόμβων, η επίλυση έγινε και με απαλοιφή Gauss και GMRES, ούτως ώστε να γίνει αξιολόγηση και για τις δύο μεθόδους ως προς τον χρόνο επίλυσης.

6.3.1 Ανάλυση για το συνολικό χρόνο επίλυσης

Ο συνολικός χρόνος επίλυσης του συστήματος μειώνεται, καθώς τα ανεξάρτητα συστήματα που προκύπτουν λόγω της χρήσης της μεθόδου Schur Complement μπορούν να επιλυθούν παράλληλα.

Μετρήθηκε το speedup ως προς τη λύση ενός χωρίου με GMRES, όπως έγινε και στη σειριακή επίλυση, δηλαδή υπολογίζεται ο λόγος $\frac{\text{Total Time} \rightarrow \text{Domain}}{\text{Total Time} \rightarrow s \text{ Subdomains}}$, όπου $s \geq 2$ ο αριθμός υποχωρίων που επιλέχθηκε για κάθε επίλυση.

Παρακάτω φαίνονται τα αντίστοιχα αποτελέσματα για το σύστημα $N = 2651$ κόμβων.



Διάγραμμα 6-3: Σχέση speedup επίλυσης του συστήματος $Ax = b$ με τον αριθμό υποχωρίων, $N = 2651$

Εμφανίζεται η μείωση του speedup και άρα μείωσης της κλίσης της καμπύλης, που εξηγείται από τη δραστική μείωση του μεγέθους των ανεξάρτητων συστημάτων.

6.3.2 Ανάλυση για τον αριθμό των threads

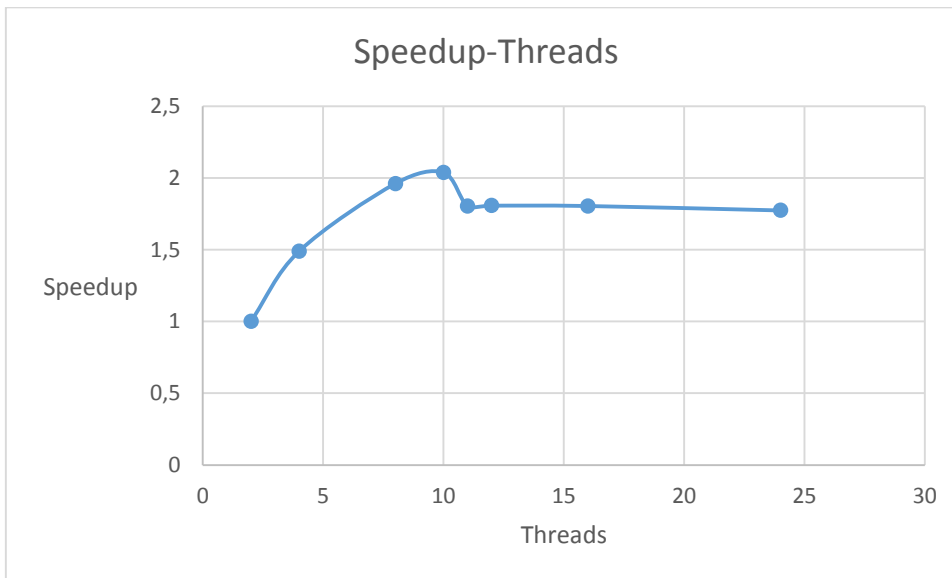
Η χρήση των λογικών πυρήνων του επεξεργαστή και του hyper-threading δεν μειώνει πάντα τον χρόνο επεξεργασίας αλλά αντιθέτως μπορεί να τον αυξήσει, σε σχέση με την χρήση ενός thread.

Χωρίς hyper-threading, ο μέγιστος αριθμός των threads είναι 12, ενώ με hyper-threading, ο μέγιστος αριθμός των threads είναι 24.

Προκειμένου να βρεθεί ο βέλτιστος αριθμός των threads κατά την παράλληλη επίλυση των ανεξάρτητων συστημάτων, έγινε επίλυση συστήματος $N = 20181$ κόμβων, με διαχωρισμό του αρχικού χωρίου σε 48 υποχωρία. Η μέγιστη διάσταση m του υποχώρου Krylov επιλέχθηκε ίση με 200 ούτως ώστε να μην υπάρχουν επανεκκινήσεις κατά την επίλυση του συστήματος $Sy = g'$ με τη μέθοδο GMRES. Η επίλυση των ανεξάρτητων συστημάτων έγινε με απαλοιφή Gauss.

Το speedup μετρήθηκε ως προς τη βραδύτερη λύση, δηλαδή υπολογίζεται ο λόγος $\frac{\text{Longest Total Time} \rightarrow 2 \text{ threads}}{\text{Total Time} \rightarrow k \text{ threads}}$, όπου $k \geq 2$ ο αριθμός των threads που επιλέχθηκε για κάθε επίλυση.

Παρακάτω φαίνονται τα αποτελέσματα για το σύστημα $N = 20181$ κόμβων για τον χρόνο επίλυσης ως προς τον αριθμό των threads.



Διάγραμμα 6-4: Σχέση speedup επίλυσης του συστήματος $Ax = b$ με τον αριθμό threads, $N = 20181$

Όπως φαίνεται από το παραπάνω διάγραμμα, το μέγιστο speedup παρουσιάζεται κατά την χρήση των 10 threads. Μετά από τα 10 threads, το speedup παραμένει σχεδόν σταθερό. Επιβεβαιώνεται λοιπόν πως το hyper-threading, για αριθμό threads $k > 12$, δεν μειώνει τον χρόνο επίλυσης του συστήματος $Ax = b$, αλλά αντιθέτως τον αυξάνει.

Η μείωση του speedup εμφανίζεται στα 11 threads και όχι στα 13, καθώς γίνεται μεγαλύτερη χρήση των δύο πρώτων πυρήνων από το λογικισμό συστήματος (Operating System) σε σχέση με τους υπόλοιπους. Ταυτόχρονα, λόγω της χρήσης των υπολογιστικών κόμβων του cluster και από άλλους χρήστες, το speedup μπορεί να παρουσιάσει μικρές αυξομειώσεις σε σχέση με τις προηγούμενες εκτελέσεις του προγράμματος.

6.4 Σύγκριση της σειριακής και της παράλληλης επίλυσης με χρήση της μεθόδου Schur Complement

Στις προηγούμενες παραγράφους 6.2 και 6.3 έγινε η σύγκριση μεταξύ της σειριακής επίλυσης συστήματος ενός χωρίου και της σειριακής επίλυσης με την χρήση της μεθόδου Schur Complement, καθώς και η σύγκριση μεταξύ της σειριακής επίλυσης συστήματος ενός χωρίου και της παράλληλης επίλυσης με την χρήση της μεθόδου Schur Complement. Μέσω της επίλυσης του συστήματος $N = 2651$ κόμβων, έγινε εμφανές πως για μικρό αριθμό υποχωρίων, η επίλυση με τη μέθοδο Schur Complement είναι πιο αργή από ότι η επίλυση του συστήματος για ένα χωρίο.

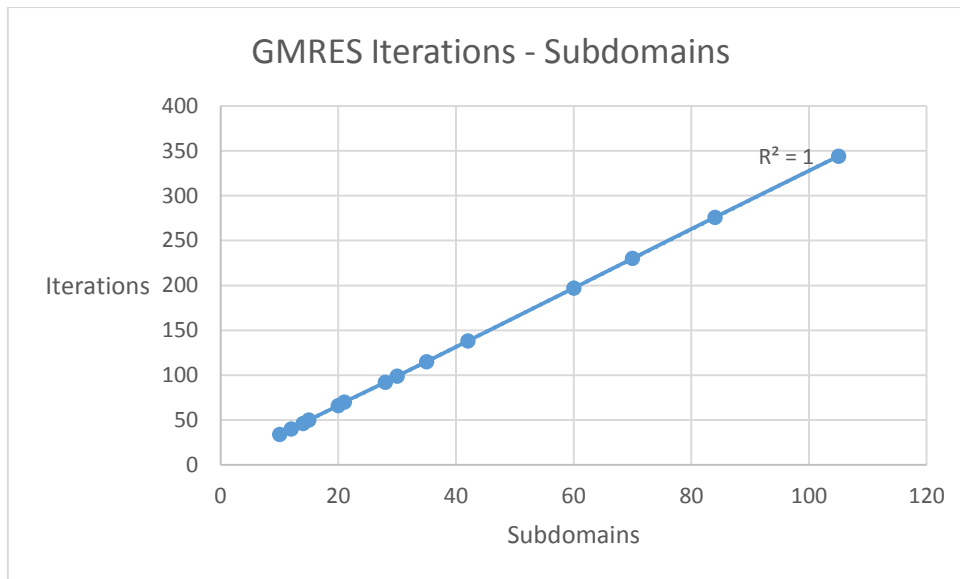
Σε αυτήν την παράγραφο περιγράφεται η σύγκριση της σειριακής και της παράλληλης επίλυσης με χρήση της μεθόδου Schur Complement, σε σχέση με την επίλυση του συστήματος για ένα χωρίο.

Έγινε επίλυση συστήματος $N = 5887$ κόμβων με χρήση της μεθόδου Schur Complement και επομένως έγινε διαχωρισμός του αρχικού χωρίου σε υποχωρία, με μέγιστη διάσταση υποχώρου Krylov $m = 400$ ώστε να μην υπάρχουν επανεκκινήσεις. Επίσης, έγινε και επίλυση του ίδιου συστήματος χωρίς διαχωρισμό του χωρίου, με μέγιστη διάσταση $m = 3000$ ώστε να μην υπάρχουν επανεκκινήσεις.

Για τα ανεξάρτητα συστήματα που προέκυψαν όταν έγινε χρήση της μεθόδου Schur Complement, η επίλυση έγινε και με απαλοιφή Gauss και GMRES, ούτως ώστε να γίνει αξιολόγηση και για τις δύο μεθόδους ως προς τον χρόνο επίλυσης.

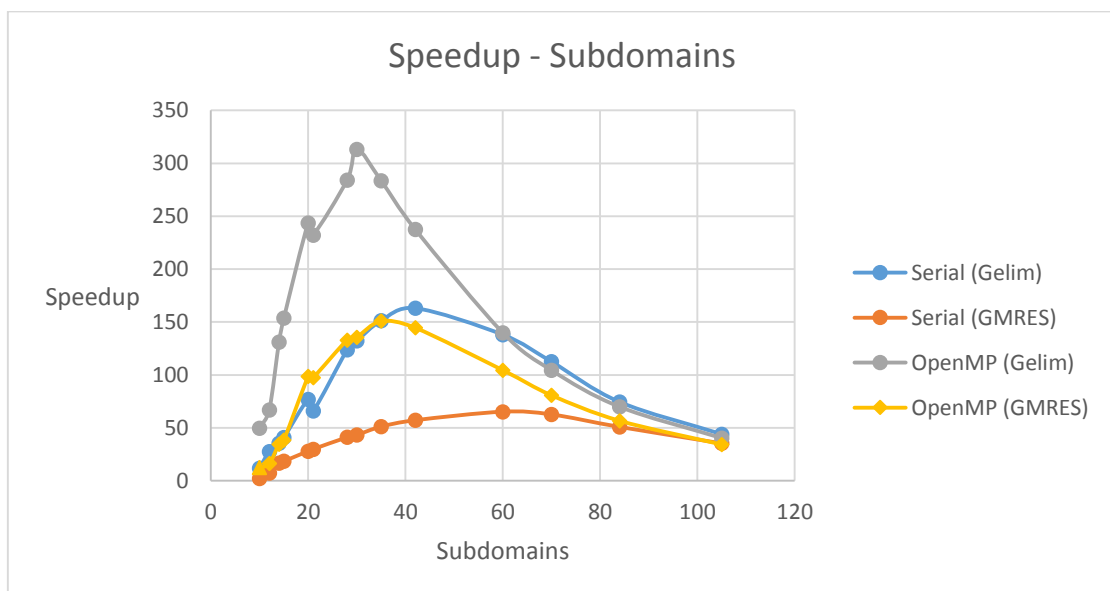
Μετρήθηκε το speedup ως προς τη λύση ενός χωρίου με GMRES, όπως έγινε και προηγουμένως, δηλαδή υπολογίζεται ο λόγος $\frac{Total\ Time \rightarrow Domain}{Total\ Time \rightarrow s\ Subdomains}$, όπου $s \geq 10$ ο αριθμός υποχωρίων που επιλέχθηκε για κάθε επίλυση.

Παρακάτω φαίνονται τα συγκεντρωτικά αποτελέσματα για το σύστημα $N = 5887$ κόμβων για τη σύγκλιση της GMRES και τον χρόνο επίλυσης.



Διάγραμμα 6-5: Σχέση των επαναλήψεων της GMRES για την επίλυση του συστήματος $Sy = g'$ με τον αριθμό υποχωρίων, $N = 5887$

Όσο αυξάνονται τα υποχωρία, τόσο αυξάνονται οι κόμβοι διεπαφής (interface nodes) οι οποίοι παρουσιάζονται μεταξύ των υποχωρίων και άρα αυξάνεται ο αριθμός επαναλήψεων, αφού λύνεται μεγαλύτερο σύστημα $Sy = g'$. Επιπρόσθετα, η αύξηση των επαναλήψεων είναι γραμμική ($R^2 = 1$), όπως προέκυψε από γραμμική παλινδρόμηση, αφού δεν υπάρχουν επανεκκινήσεις. Παρουσιάζεται μόνο μία καμπύλη, καθώς η πορεία σύγκλισης είναι ίδια για όλες τις περιπτώσεις.



Διάγραμμα 6-6: Σχέση speedup επίλυσης του συστήματος $Ax = b$ με τον αριθμό υποχωρίων, $N = 5887$

Από το διάγραμμα φαίνεται πως οι παράλληλες επιλύσεις είναι ταχύτερες. Επίσης, η επίλυση των υποσυστημάτων με απαλοιφή Gauss σε σύγκριση με τη GMRES είναι ταχύτερη.

Η απαλοιφή Gauss κατά την επίλυση των υποσυστημάτων είναι προτιμότερη και στην σειριακή και στην παράλληλη επίλυση διότι τα συστήματα είναι μικρά και η GMRES είναι

αρκετά δαπανηρή, καθώς απαιτείται μικρότερη ανοχή. Ο λόγος που χρειάζεται μικρότερη ανοχή έχει αναφερθεί στην παράγραφο 6.1.2.

Όπως φαίνεται, όλες οι επιλύσεις παρουσιάζουν ένα όριο ως προς την αύξηση του speedup και έπειτα αύξηση του χρόνου επίλυσης.

Ο λόγος για τον οποίο παρατηρείται το όριο είναι ότι με την περαιτέρω αύξηση των υποχωρίων, το υπολογιστικό κόστος της απαλοιφής Gauss δεν επηρεάζεται σημαντικά, ενώ οι επαναλήψεις της GMRES κατά την επίλυση του συστήματος $Sy = g'$ αυξάνονται και άρα επηρεάζεται το υπολογιστικό κόστος της GMRES.

Εφόσον αυξάνονται οι κόμβοι διεπαφής (interface nodes) οι οποίοι παρουσιάζονται μεταξύ των υποχωρίων, αυξάνεται και το μέγεθος του συστήματος $Sy = g'$ και άρα γίνονται περισσότερες πράξεις, οδηγώντας σε αύξηση του χρόνου επίλυσης. Επίσης, για μεγάλο αριθμό υποχωρίων (105), οι επιλύσεις έχουν παρόμοιο χρόνο επίλυσης.

Επιβεβαιώνεται λοιπόν, πως το υπολογιστικό κόστος δεν παρουσιάζει ουσιαστική διαφορά για πολύ μικρά ανεξάρτητα συστήματα, ενώ το πλήθος των επαναλήψεων, το οποίο είναι ίδιο και για τις τέσσερις επιλύσεις, αυξάνεται με την αύξηση των υποχωρίων.

6.5 Ανάλυση για τη μέγιστη διάσταση υποχώρου Krylov

Ο χρόνο επίλυσης του συστήματος $Sy = g'$ με GMRES επηρεάζεται σημαντικά από τη μέγιστη διάσταση που μπορεί να λάβει ο υποχώρος Krylov. Γενικά, για τα συστήματα που δοκιμάστηκαν, όσο μεγαλύτερη ήταν η διάσταση και άρα όσο λιγότερες ήταν οι επανεκκινήσεις, τόσο πιο μικρός ήταν ο χρόνος επίλυσης. Το γεγονός οφείλεται στο ότι με κάθε επανεκκίνηση μηδενίζονται οι βασικές μεταβλητές της GMRES που προκύπτουν από τη μέθοδο Arnoldi, η οποία ξεκινά για διάσταση υποχώρου Krylov ίση με 1.

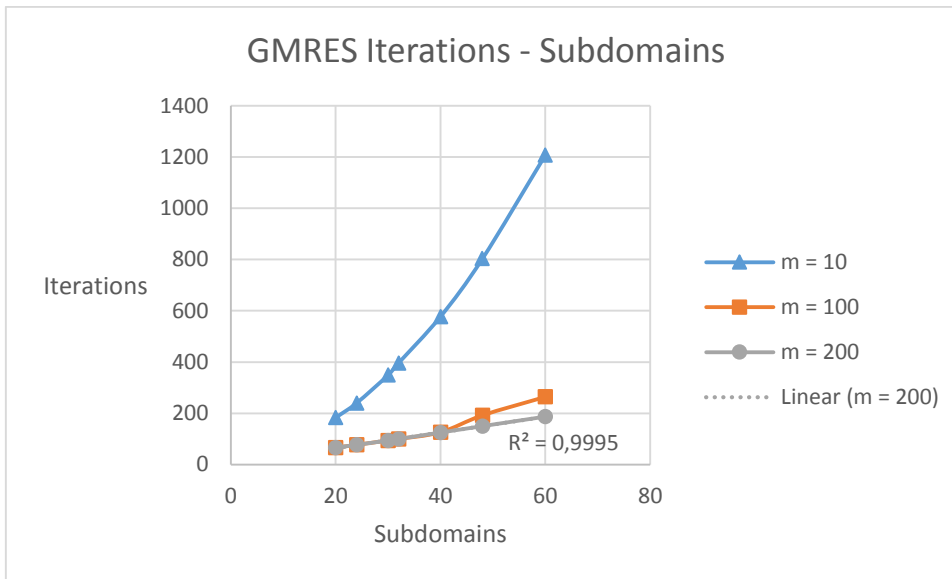
Συνοπτικά, ο χρόνος επίλυσης σχετίζεται άμεσα με τις επαναλήψεις της GMRES. Όσο περισσότερες είναι οι επαναλήψεις, τόσο πιο αργή είναι και η επίλυση του συστήματος.

Προηγουμένως χρησιμοποιήθηκε διάσταση τέτοια ώστε η GMRES να μην παρουσιάζει επανεκκινήσεις, καθώς τα συστήματα δεν ήταν μεγάλα.

Εξετάστηκε η χρήση των επανεκκινήσεων με σύστημα $N = 20181$ κόμβων και μέγιστες διαστάσεις $m = 10$, $m = 100$ και $m = 200$. Τα υποσυστήματα επιλύθηκαν παράλληλα με απαλοιφή Gauss.

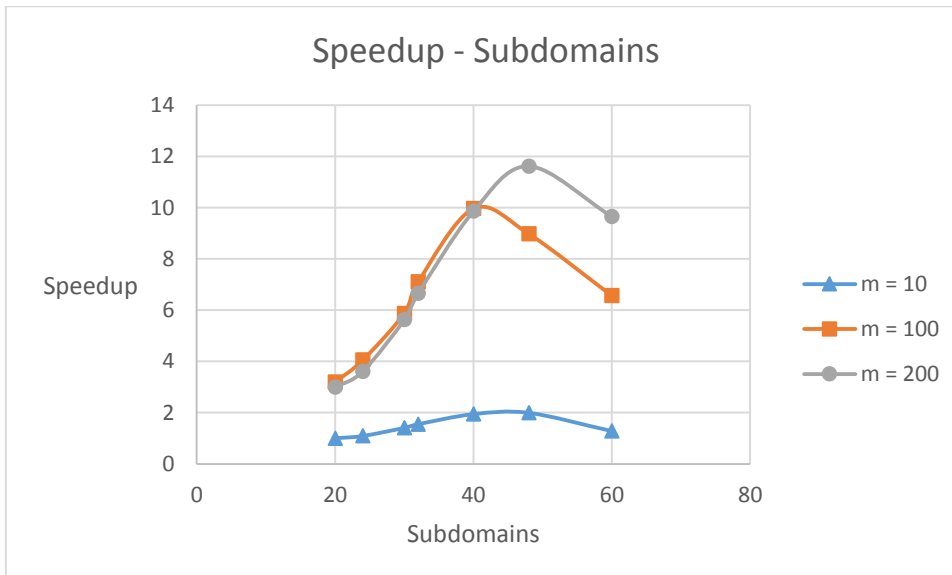
Το speedup υπολογίστηκε για το αρχικό σύστημα $Ax = b$, καθώς οι διαφορές χρόνου που παρουσιάζονται είναι λόγω της διαφοράς του χρόνου επίλυσης του συστήματος $Sy = g'$. Μετρήθηκε ως προς τη βραδύτερη λύση, δηλαδή υπολογίζεται ο λόγος $\frac{\text{Longest Total Time} \rightarrow 20 \text{ Subdomains και } m=10}{\text{Total Time} \rightarrow s \text{ Subdomains}}$, όπου $s \geq 20$ ο αριθμός υποχωρίων και m η μέγιστη διάσταση υποχώρου Krylov που επιλέχθηκαν για κάθε επίλυση.

Παρακάτω φαίνονται και τα αντίστοιχα διαγράμματα σύγκλισης και speedup.



Διάγραμμα 6-7: Σχέση των επαναλήψεων της GMRES για την επίλυση του συστήματος $Sy = g'$ με τον αριθμό υποχωρίων και τη μέγιστη διαστάση υποχώρου Krylov, $N = 20181$

Το Διάγραμμα 6-7 επαληθεύει πως όσο μειώνεται η μέγιστη διάσταση υποχώρου Krylov, τόσο αυξάνονται οι επαναλήψεις της GMRES. Επίσης, παρατηρείται πως για τη διάσταση $m = 200$, η καμπύλη της σχέσης επαναλήψεων και υποχωρίων είναι γραμμική, ενώ όσο μειώνεται η διάσταση, τόσο μεγαλύτερη είναι η κλίση της καμπύλης.



Διάγραμμα 6-8: Σχέση speedup επίλυσης του συστήματος $Ax = b$ με τον αριθμό υποχωρίων και τις μέγιστες διαστάσεις υποχώρου Krylov, $N = 20181$

Το Διάγραμμα 6-8 επαληθεύει πως όσο μειώνεται η μέγιστη διάσταση υποχώρου Krylov, τόσο αυξάνεται και ο χρόνος επίλυσης του συστήματος $Sy = g'$, λόγω της αύξησης των επαναλήψεων. Για τις διαστάσεις $m = 100$ και $m = 200$, παρουσιάζονται αντίστοιχα

αποτελέσματα μέχρι και τα 40 υποχωρία, καθώς μέχρι τον αριθμό αυτό, οι επαναλήψεις είναι σχεδόν οι ίδιες. Για τη διάσταση $m = 200$ δεν γίνονται επανεκκινήσεις.

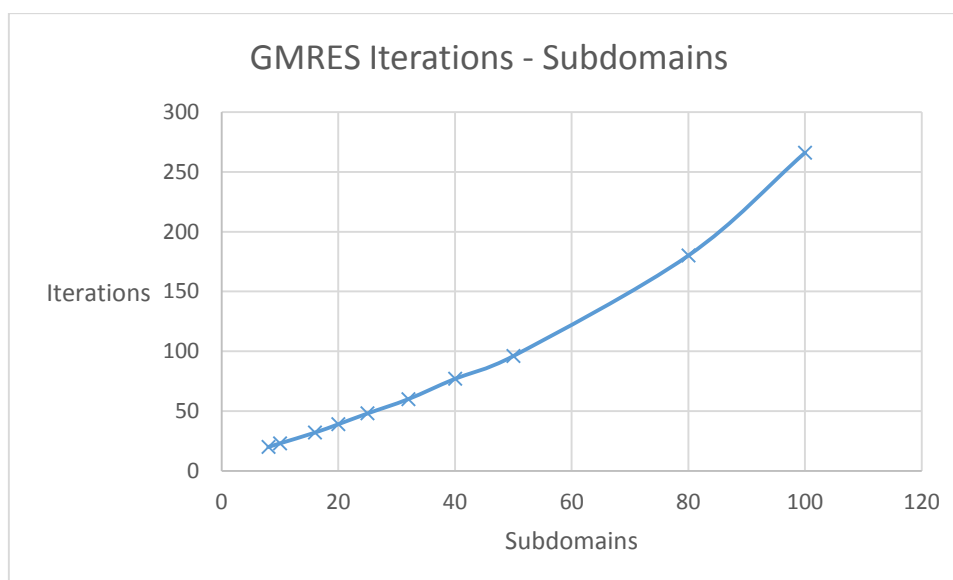
6.6 Επίλυση μεγαλύτερων συστημάτων

Η λύση μικρών συστημάτων ενδέχεται να μην εμφανίζει συμπεριφορές που θα παρουσιάζονταν σε μεγαλύτερα συστήματα, λόγω υπολογιστικής πολυπλοκότητας.

Εξετάστηκε σύστημα $N = 30419$ κόμβων. Τα υποσυστήματα επιλύθηκαν παράλληλα με απαλοιφή Gauss. Η μέγιστη διάσταση υποχώρου Krylov ήταν ίση με $m = 70$.

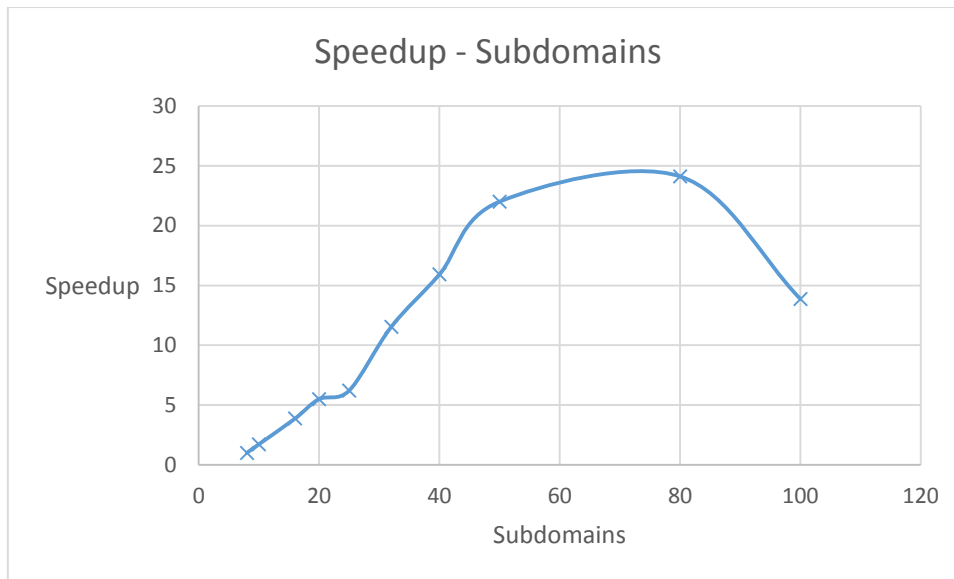
Το speedup μετρήθηκε ως προς τη λύση με τον μεγαλύτερο χρόνο επίλυσης, δηλαδή υπολογίζεται ο λόγος $\frac{\text{Longest Total Time} \rightarrow 8 \text{ Subdomains}}{\text{Total Time} \rightarrow s \text{ Subdomains}}$, όπου $s \geq 8$ ο αριθμός υποχωρίων που επιλέχθηκε για κάθε επίλυση.

Παρακάτω φαίνονται και τα αντίστοιχα διαγράμματα σύγκλισης και speedup.



Διάγραμμα 6-9: Σχέση επαναλήψεων της GMRES για την επίλυση του συστήματος $Sy = g'$ με τον αριθμό υποχωρίων, $N = 30419$

Το Διάγραμμα 6-9 επαληθεύει πως η αύξηση των υποχωρίων οδηγεί σε μη γραμμική και έντονη αύξηση των επαναλήψεων της μεθόδου GMRES. Εδώ γίνονται επανεκκινήσεις, επομένως η καμπύλη δεν είναι γραμμική.



Διάγραμμα 6-10: Σχέση speedup επίλυσης του συστήματος $Ax = b$ με τον αριθμό υποχωριών, θέτοντας ως σημείο αναφοράς τον μεγαλύτερο χρόνο επίλυσης, $N = 30419$

Στο Διάγραμμα 6-10 φαίνεται ότι με την αύξηση των υποχωριών υπάρχει ένα όριο στο οποίο το speedup όχι μόνο σταματάει να αυξάνεται, αλλά μειώνεται δραστικά.

Αυτό συμβαίνει λόγω της αύξησης των επαναλήψεων της GMRES. Εξαιτίας των επαναλήψεων, το φαινόμενο γίνεται πιο έντονο, καθώς η σχέση επαναλήψεων και υποχωριών δεν είναι γραμμική.

6.7 Ανάλυση των παραμέτρων της επίλυσης

Όπως φάνηκε στις προηγούμενες παραγράφους, ο χρόνος επίλυσης του συστήματος $Ax = b$ επηρεάζεται από διάφορες παραμέτρους.

Στην παράγραφο 6.2 περιεγράφηκε η διαφορά στον χρόνο σειριακής επίλυσης μεταξύ του συστήματος ενός χωρίου και του συστήματος που διαχωρίζεται σε υποχωρία.

Στην παράγραφο 6.3 περιεγράφηκε η διαφορά στον χρόνο παράλληλης επίλυσης μεταξύ του συστήματος ενός χωρίου και του συστήματος που διαχωρίζεται σε υποχωρία. Ταυτόχρονα έγινε ανάλυση ως προς τον αριθμό των threads που χρησιμοποιήθηκαν.

Στην παράγραφο 6.4 έγινε σύγκριση της σειριακής και της παράλληλης επίλυσης του συστήματος που διαχωρίζεται σε υποχωρία.

Στην παράγραφο 6.5 αναλύθηκε το πώς επηρεάζει η μέγιστη διάσταση υποχώρου Krylov m τον χρόνο επίλυσης.

Στην παράγραφο 6.6 αναλύθηκε η επίλυση μεγάλων συστημάτων.

Μέσω των αναλύσεων αυτών, προκύπτει ένα σύνολο παραμέτρων:

1. Θα χρησιμοποιηθεί η μέθοδος Schur Complement, δηλαδή θα γίνει διαχωρισμός του χωρίου;
2. Θα γίνει σειριακή ή παράλληλη επίλυση των ανεξάρτητων συστημάτων που προκύπτουν από το διαχωρισμό σε υποχωρία; Αν γίνει παράλληλη, πόσα threads θα χρησιμοποιηθούν;
3. Πόσα υποχωρία θα επιλεγούν ώστε να επιτευχθεί το μέγιστο speedup;
4. Θα γίνει επίλυση των ανεξάρτητων συστημάτων με μία άμεση μέθοδο επίλυσης (π.χ. απαλοιφή Gauss) ή μία επαναληπτική (π.χ. GMRES ή Conjugate Gradient);
5. Θα χρησιμοποιηθεί η Restarted GMRES για την επίλυση του συστήματος $Sy = g'$ και αν ναι, ποια θα είναι η μέγιστη διάσταση υποχώρου Krylov;
6. Ποια ανοχή θα χρησιμοποιηθεί για την επίλυση του συστήματος $Sy = g'$ με τη μέθοδο GMRES;

Κάθε μία από τις παραμέτρους επηρεάζει τουλάχιστον μία από τις παρακάτω ιδιότητες:

- a. Τον χρόνο επίλυσης (παράμετροι 1, 2, 3, 4, 5, 6)
- b. Την χρήση της μνήμης (παράμετροι 1, 3, 5, 6)
- c. Την ακρίβεια της λύσης (παράμετρος 6)

Παρακάτω αναλύονται οι συνδυασμοί παραμέτρων και ιδιοτήτων.

6.7.1 Schur Complement, χρόνος επίλυσης και χρήση της μνήμης

Η χρήση της μεθόδου Schur Complement μπορεί να επιταχύνει την επίλυση του αρχικού συστήματος, καθώς επιτρέπει τη δημιουργία μικρών ανεξάρτητων συστημάτων, που παρουσιάζουν μικρότερη υπολογιστική πολυπλοκότητα. Το αν θα εμφανιστεί επιτάχυνση ή όχι και πόση θα είναι αυτή εξαρτάται από τον αριθμό των υποχωρίων.

Ως προς την χρήση της μνήμης, επειδή επιλύεται το σύστημα $Sy = g'$ και όχι το $Ax = b$, όλοι οι πίνακες και τα διανύσματα της GMRES είναι μικρότερης διάστασης, άρα χρησιμοποιείται λιγότερη μνήμη. Οι υποπίνακες B , E , F , C δεν καταναλώνουν παραπάνω μνήμη καθώς εκφράζονται ως δείκτες (pointers) προς τον A .

6.7.2 Παράλληλη επεξεργασία και χρόνος επίλυσης

Η παράλληλη επίλυση των ανεξάρτητων συστημάτων που προκύπτουν από το διαχωρισμό σε υποχωρία, επιταχύνει την επίλυση σε σχέση με τη σειριακή, καθώς επιλύονται ταυτόχρονα τα συστήματα. Ο αριθμός των συστημάτων που επιλύονται ταυτόχρονα καθορίζεται από τις δυνατότητες του μέσου επεξεργασίας (πυρήνες CPU, πυρήνες GPU, coprocessors) και από τον αριθμό των υποχωρίων.

Επίσης, ο αριθμός των threads που θα επιλεγεί, είναι ανάλογος με τον αριθμό φυσικών πυρήνων που διαθέτει το μέσο επεξεργασίας.

6.7.3 Αριθμός υποχωρίων, χρόνος επίλυσης και χρήση της μνήμης

Ο αριθμός υποχωρίων επηρεάζει τρεις μεταβλητές:

- Τον αριθμό των ανεξάρτητων συστημάτων, που ταυτίζεται με τον αριθμό των υποχωρίων
- Το μέγεθος των συστημάτων
- Τον αριθμό των κόμβων διεπαφής

Ο αριθμός των ανεξάρτητων συστημάτων επηρεάζει το μέγεθος των συστημάτων. Όσο μεγαλύτερος είναι ο αριθμός, τόσο μικρότερο είναι το μέγεθος των συστημάτων. Το μικρό μέγεθος μειώνει το υπολογιστικό κόστος για την επίλυση των συστημάτων.

Ωστόσο, η όλο και μεγαλύτερη μείωση του μεγέθους δεν παρουσιάζει υποχρεωτικά μείωση του χρόνου επίλυσης.

Ταυτόχρονα, ο αριθμός των υποχωρίων επηρεάζει τον αριθμό των κόμβων διεπαφής. Όσο μεγαλύτερος είναι ο αριθμός των υποχωρίων, τόσο μεγαλύτερος είναι ο αριθμός των κόμβων διεπαφής. Αυτό σημαίνει πως το σύστημα $Sy = g'$ μεγαλώνει όσο αυξάνεται ο αριθμός των υποχωρίων και άρα αυξάνονται οι επαναλήψεις, δηλαδή αυξάνονται οι διαστάσεις των πινάκων της GMRES. Επομένως, αυξάνεται η χρήση της μνήμης και αυξάνεται ο χρόνος επίλυσης, χωρίς να υπάρχει υποχρεωτικά αντίστοιχη μείωση του χρόνου επίλυσης των ανεξάρτητων συστημάτων. Η αύξηση της χρήσης της μνήμης μπορεί να αντιμετωπιστεί με την κατάλληλη μέγιστη διάσταση υποχώρου Krylov και τη μέθοδο GMRES(m).

Το μέγιστο speedup παρουσιάζεται στη χρυσή τομή αριθμού και μεγέθους ανεξάρτητων συστημάτων αλλά και αριθμού κόμβων διεπαφής, συναρτήσει της ικανότητας παραλληλισμού του υπολογιστή ή του cluster που χρησιμοποιείται. Για παράδειγμα, ένας υπολογιστής με 16 πυρήνες παρουσιάζει μεγαλύτερη μέγιστη επιτάχυνση σε μεγαλύτερο αριθμό υποχωρίων από ότι ένας υπολογιστής με 8 πυρήνες.

Πρέπει άρα κάθε φορά να γίνει μελέτη για την επιλογή του αριθμού των υποχωρίων ώστε να παρατηρηθεί ουσιαστική διαφορά στον χρόνο επίλυσης, σε σχέση με το πρόβλημα που επιλύεται αλλά και το hardware.

6.7.4 Επίλυση ανεξάρτητων συστημάτων και χρόνος επίλυσης

Από τα αποτελέσματα φαίνεται πως η απαλοιφή Gauss είναι ταχύτερη για την επίλυση των ανεξάρτητων συστημάτων από τη GMRES. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι είναι μία άμεση μέθοδος και για μικρά συστήματα δίνει γρήγορα την ακριβή λύση.

Αντιθέτως, η GMRES δίνει μία προσεγγιστική λύση και χρειάζεται μικρότερη ανοχή για την επίλυση των ανεξάρτητων συστημάτων. Επομένως, αυξάνονται ο χρόνος επίλυσης και οι επαναλήψεις, καθώς το σφάλμα κάθε λύσης που προκύπτει από τα συστήματα, οδηγεί στη λύση διαφορετικού συστήματος από το αρχικό και άρα η επαλήθευση της τελικής λύσης αποτυγχάνει.

6.7.5 Restarted GMRES, χρόνος επίλυσης και χρήση της μνήμης

Στην περίπτωση πολύ μεγάλων συστημάτων, γίνεται χρήση της GMRES(m), για να μειωθούν οι πράξεις, αφού μειώνονται οι διαστάσεις των πινάκων και διανυσμάτων της μεθόδου, όσο αυξάνεται η διάσταση του υποχώρου Krylov. Το γεγονός αυτό θεωρητικά οδηγεί στη μείωση της χρήσης της μνήμης αλλά και σε ταχύτερη επίλυση, γιατί μειώνεται το υπολογιστικό κόστος.

Παρόλα αυτά, σε κάθε εξωτερική επανάληψη (restart), πρέπει να υπολογιστούν από την αρχή όλες οι μεταβλητές της GMRES, εκτός από την προσεγγιστική λύση. Υπενθυμίζεται πως όταν χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος Schur Complement-GMRES(m), πρέπει να υπολογιστεί και το νέο διάνυσμα υπολοίπου r_0 μέσω της σχέσης $g' - Cx_0 - Fe'$ και επομένως στο τέλος κάθε εξωτερικής επανάληψης υπάρχουν επιπρόσθετες πράξεις σε σχέση με την απλή GMRES.

Επομένως, υπάρχει μία χρυσή τομή μεταξύ του μεγέθους του συστήματος και της μέγιστης διάστασης του υποχώρου Krylov, βάσει πάντα της υπολογιστικής πολυπλοκότητας της GMRES. Το μέγεθος του συστήματος για την περίπτωση της χρήσης της μεθόδου Schur Complement επηρεάζεται από τον αριθμό των υποχωρίων.

6.7.6 Ανοχή της μεθόδου GMRES, χρόνος επίλυσης και χρήση της μνήμης

Η μείωση της ανοχής οδηγεί σε περισσότερες επαναλήψεις για να βρεθεί η λύση του συστήματος $Sy = g'$ και άρα ο χρόνος επίλυσης αυξάνεται, καθώς οι πράξεις και η χρήση της μνήμης αυξάνονται με τη διάσταση του υποχώρου Krylov. Η αύξηση της χρήσης της μνήμης μπορεί να αντιμετωπιστεί με την κατάλληλη μέγιστη διάσταση υποχώρου Krylov και τη μέθοδο GMRES(m).

7 Βιβλιογραφία

- [1] G. H. Golub και C. F. Van Loan, «Matrix Computations,» σε *Matrix Computations*, Johns Hopkins University Press, 1996, pp. 101,102.
- [2] Y. Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, SIAM, 2007, pp. 171-180.
- [3] F. Zhang, *The Schur Complement and Its Applications*, Springer, 2005.
- [4] Α. Γ. Μπουντουβής and Α. Ν. Σπυρόπουλος, *Επαναληπτικές μέθοδοι προβολής σε υπόχωρους Krylov*, Αθήνα: Εκδόσεις ΕΜΠ, 2012.
- [5] C. D. M. Ilse C.F. Ipsen, «The Idea Behind Krylov Methods,» *American Mathematical Monthly*, τόμ. 105, pp. 889-899, 1997.
- [6] W. E. Arnoldi, "The principle of minimized iterations in solution of the matrix eigenvalue," *Quarterly of Applied Mathematics*, vol. 9, p. 17, 1951.
- [7] W. Gander, "Algorithms for the QR-Decomposition," *Seminar for Applied Mathematics*, Zurich, 1980.
- [8] M. R. Z. S. Christopher C. Paige, "Modified Gram-Schmidt (MGS), Least Squares, and Backward Stability of MGS-GMRES," *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, vol. 28, no. 1, pp. 264-284, 2006.
- [9] Y. Saad and M. H. Schultz, "GMRES: a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems," *Society for Industrial and Applied Mathematics*, vol. 7, no. 3, p. 856, 1986.
- [10] R. Barrett, M. Berry, T. F. Chan, J. Demmel, J. M. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine και H. Van der Vorst, *Templates for the Solution of Linear Systems*, Society for Industrial and Applied, 1994.
- [11] M. A. Gomes-Ruggiero, V. L. R. Lopes and J. V. Toledo-Benavides, "A safeguard approach to detect stagnation of GMRES (m) with applications in Newton-Krylov methods," *American Mathematical Society*, vol. 27, 2008.
- [12] OpenMP ARB, «FAQ OPENMP,» [Ηλεκτρονικό]. Available: <http://openmp.org/openmp-faq.html#Content.OMPAPI.General>.
- [13] OpenMP ARB, "FAQ OPENMP #WhichCompilers," [Online]. Available: <http://openmp.org/openmp-faq.html#WhichCompilers>.

- [14] OpenACC.org, "About OpenACC," [Online]. Available: http://www.openacc.org/About_OpenACC.
- [15] OpenMP ARB, "FAQ OPENMP #Scalability," [Online]. Available: (<http://openmp.org/openmp-faq.html#Scalability>).
- [16] Α. Γ. Μπουντουβής, Υπολογιστική Ανάλυση με την Μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων, Αθήνα: Εκδόσεις ΕΜΠ, 1992.