

Proposta de Estágio

Título:

Parallelização do método da iteração inversa associada ao BlockCG para resolução de sistemas de equações lineares com múltiplos termos independentes.

Resumo:

Este estágio consiste na paralelização de uma técnica de factorização espectral parcial de matrizes esparsas e de grande dimensão, usando apenas ferramentas iterativas.

O estágio situa-se no domínio da computação científica numérica e tem como principal domínio de aplicação a mecânica dos fluidos. O trabalho a efectuar consistirá em implementar algoritmos de resolução e em analisar os resultados de forma a validar e/ou melhorar os métodos.

Este estágio pode vir a constituir parte do trabalho prático do Mestrado em Informática e Comunicações e poderá ser seguido de uma tese de doutoramento. Este estágio será acompanhado por Ronan Guivarch da ENSEEIHT (Toulouse-França) e por Carlos Balsa (ESTiG), estando previstas deslocações regulares a Toulouse.

Perfil do candidato:

Este estágio dirige-se a alunos do 3º ano do curso de informática que tenha seguido com interesse as disciplinas de Álgebra Linear, Métodos Numéricos e Computação Paralela. É necessário também um bom nível de programação.

Contribuição deste estágio:

No fim do estágio, o aluno terá completado e alargado os seus conhecimentos em Álgebra Linear Numérica (précondicionamento, métodos iterativos, métodos do subspaço de Krylov,...). Terá também manipulado bibliotecas MPI (standard de rotinas paralelas), SCALAPACK (biblioteca de rotinas de Álgebra Linear). Terá igualmente implementado estas aplicações em diferentes plataformas de processamento paralelo (clusters de PCs, supercomputadores,...).

Colaboradores:

Este estágio será acompanhado na ESTiG por Carlos Balsa, com deslocações regulares a Toulouse - França, sob a coordenação de Ronan Guivarc'h da l'ENSEEIH.HT.

Palavras Chave:

Métodos Iterativos, Métodos de Krylov, Précondicionamento, Cálculo Paralelo, MPI, SCALAPACK, Matlab Paralelo.

Contactos:

Carlos Balsa
Tel: +351 273 30 30 93
Email : balsa@ipb.pt
Gab. 75 – ESTiG

Ronan Guivarc'h
Tel : +33 (0)5 61 58 84 08
Email: Ronan.Guivarch@enseeiht.fr

Descrição do estágio

Principio da factorização espectral:

Este trabalho de investigação enquadra-se numa sequência de trabalhos cujo objectivo é o de desenvolver uma ferramenta iterativa pura, destinada a extrair a informação espectral relativa aos valores próprios mais pequenos de uma dada matriz A . O conhecimento desta informação permite acelerar de forma drástica a resolução de todos os sistemas lineares associados a esta matriz com diferentes termos independentes. Este tipo de abordagem enquadra-se particularmente na simulação directa de problemas evolutivos por Equações às Derivadas Parciais (EDPs) em que o operador não muda ao longo dos vários passos de tempo, mudando apenas o segundo membro em função das soluções anteriores e do termo fonte.

De maneira mais precisa, o método previsto para realizar este objectivo consiste numa combinação do método da iteração inversa com um algoritmo do tipo do gradiente conjugado por blocos précondicionado (BlockCG) para resolver aproximadamente os sistemas lineares necessários em cada iteração inversa. O interesse deste tipo de abordagem reside no facto dela apenas requerer um procedimento que efectua o produto matriz-vector, não sendo necessário conhecer explicitamente a matriz A sobre a qual operamos.

Uma aplicação directa consistiria, por exemplo, na implementação de uma técnica de decomposição do domínio, na qual não se conhece explicitamente o complemento de Schur (o custo da sua construção é considerável), e de acelerar através de factorização espectral parcial a resolução dos sistemas lineares associados a este complemento de Schur sem ter que o construir.

Trabalho a efectuar:

Um protótipo sequencial do método foi desenvolvido por Carlos Balsa em Matlab ao longo da sua tese de doutoramento. O trabalho consistirá em paralelizar este método utilizando as possibilidades paralelas do Matlab ou bibliotecas paralelas de Álgebra Linear como SCALAPACK para poder tratar situações mais interessantes.