CÁLCULO EFICIENTE DE DERIVADAS VIA COLORAÇÃO DE GRAFOS

Robert Mansel Gower
Bolsista – FAPESP/PIBIC

Profa. Dra. Margarida P. Mello
Orientadora

Departamento de Matemática Aplicada
IMECC – UNICAMP

Que cor é a sua Jacobiana?

$$J_F = \begin{array}{c} \begin{matrix} c_1 & c_2 & c_3 & c_4 & c_5 \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} j_{11} & j_{12} & 0 & 0 & j_{15} \\ 0 & 0 & j_{23} & 0 & 0 \\ 0 & j_{32} & j_{33} & j_{34} & 0 \\ j_{41} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & j_{54} & j_{55} \end{bmatrix} \end{array}$$

Estimativa numérica

$$F : R^n \to R^m$$

$$J_F \cdot e_k \approx \frac{F(x + he_k) - F(x)}{h}$$

$$\begin{pmatrix} j_{11} \\ 0 \\ 0 \\ j_{41} \\ 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{Estruturalmente ortogonais}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ j_{34} \\ 0 \\ j_{54} \end{pmatrix}$$

Diminuindo esforço computacional

$$c_1 + c_4 = \frac{F(x + h(e_1 + e_4)) - F(x)}{h}$$

Partição estruturalmente ortogonal

$$\begin{bmatrix} j_{11} & j_{12} & 0 & 0 & j_{15} \\ 0 & 0 & j_{23} & 0 & 0 \\ 0 & j_{32} & j_{33} & j_{34} & 0 \\ j_{41} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & j_{54} & j_{55} \end{bmatrix}$$

A partição representada por cores

$$\begin{bmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{15} \\ 0 & 0 & j_{23} \\ j_{34} & j_{32} & j_{33} \\ j_{41} & 0 & 0 \\ j_{54} & 0 & j_{55} \end{bmatrix}$$

Versão compacta

Modelagem por grafos

Grafo coluna interseção (GCI) = (V_c, E)

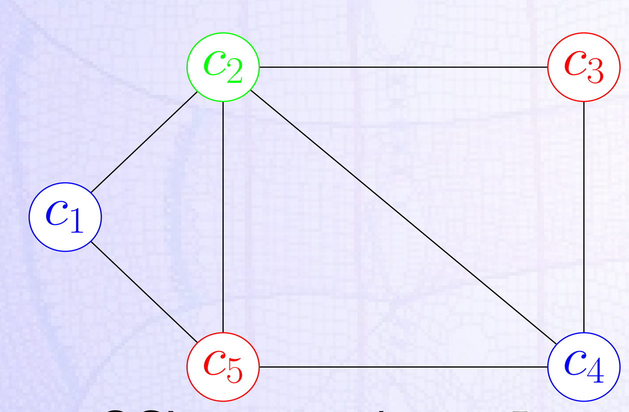
$V_c =$ colunas $= \{c_1, c_2, \ldots, c_n\}$

$(c_i, c_j) \in E \Leftrightarrow c_i$ e c_j são estruturalmente não-ortogonais.

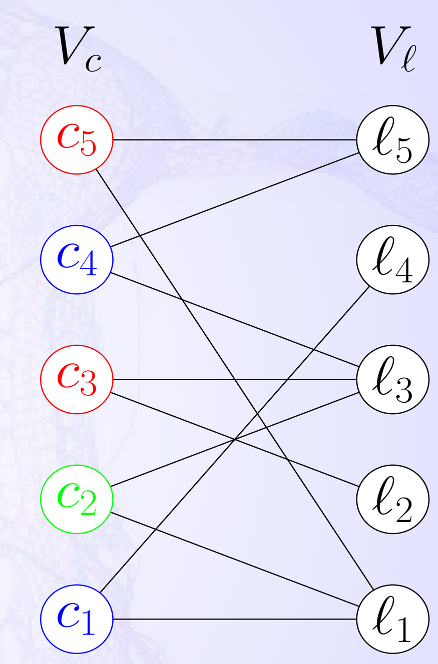
Grafo bipartido (GB) = (V_c, V_ℓ, E)

$V_\ell =$ linhas $= \{\ell_1, \ell_2, \ldots, \ell_m\}$

$(c_i, \ell_k) \in E \Leftrightarrow$ se $j_{ik} \neq 0$



GCI associado a J_F e coloração distância-1



GB associado a J_F e coloração distância-2

Coloração distância-1 do GCI: $\Phi_1 : V_c \to \{1, 2, 3, \cdots, p\}$

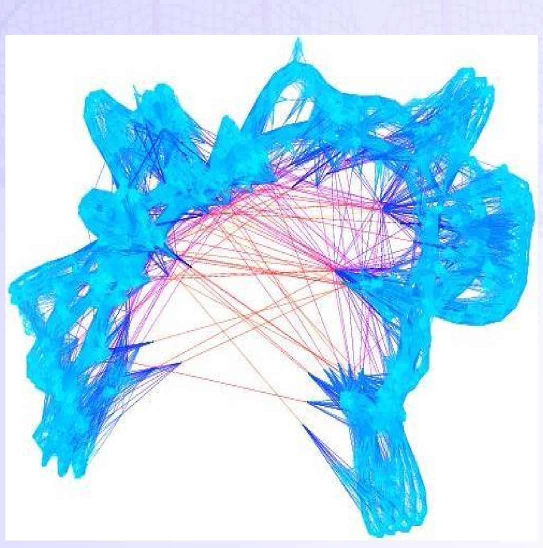
$$(c_i, c_j) \in E \Rightarrow \Phi_1(c_i) \neq \Phi_1(c_j)$$

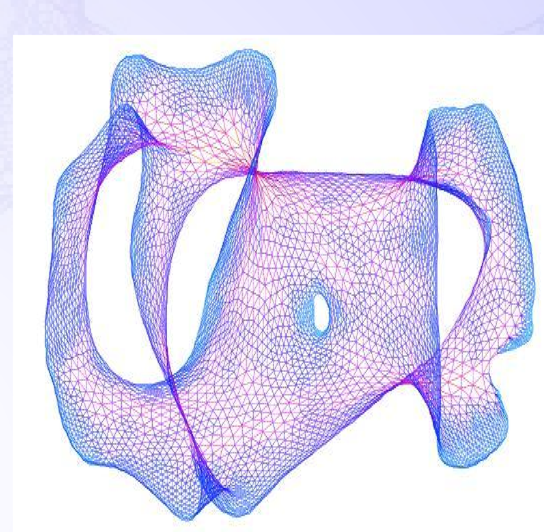
Coloração parcial distância-2 do GB: $\Phi_2 : V_c \to \{1, 2, 3, \cdots, p\}$

$$\exists \ell_k \text{ tal que } (c_i, \ell_k) \in E \text{ e } (c_j, \ell_k) \in E \Rightarrow \Phi_2(c_i) \neq \Phi_2(c_j)$$

Testes computacionais

- Banco de matrizes: *UF sparse matrix collection*, *http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/*
- Dimensões: Colunas: 7.000 a 150.000; Linhas: 25 a 130.000
- Número de não nulos: 18.000 a $2.000.000$

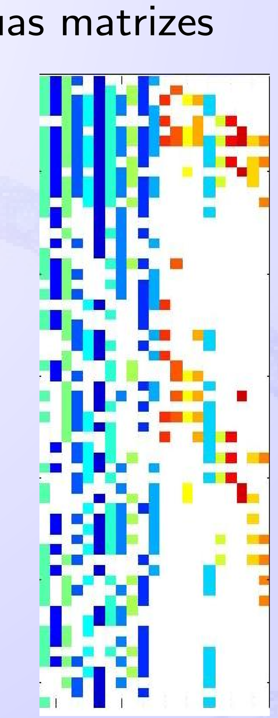




Grafos que representam a estrutura de esparsidade de duas matrizes

Matriz `bfwa62.mtx` 62×62

$\Rightarrow$



`bfwa62.mtx` compactada

A hessiana e Coloração estrela

$$\nabla^2 F e_i = \frac{\partial}{\partial x_i} \nabla F \approx \frac{\nabla F(x + he_i) - \nabla F(x)}{h}$$

Partição simetricamente ortogonal: para cada $a_{ij} \neq 0$ ou

(1) o grupo que contém c_j não contém nenhum outro não nulo na linha i ou

(2) o grupo que contém c_i não contém nenhum outro não nulo na linha j.

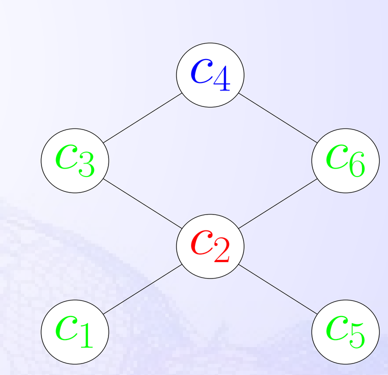
O grafo de adjacência: $G(A) = (V, E)$

$V = \{c_1, c_2, \ldots, c_n\}$ e $(c_i, c_j) \in E$ se $i \neq j$ e $a_{ij} \neq 0$

Coloração estrela: $\Phi_s : V_c \to \{1, 2, 3, \cdots, p\}$

$(c_i, c_j) \in E \Rightarrow \Phi_s(c_i) \neq \Phi_s(c_j)$ e todo caminho com quatro nós usa, pelo menos, três cores.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 & a_{25} & a_{26} \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{43} & a_{44} & 0 & a_{46} \\ 0 & a_{52} & 0 & 0 & a_{55} & 0 \\ 0 & a_{62} & 0 & a_{64} & 0 & a_{66} \end{bmatrix}$$



Grafo de adjacência associado à matriz à esquerda

Conclusões

- Superioridade da abordagem via grafos bipartidos na coloração de matrizes jacobianas
- Redução típica no número de avaliações de $F(x)$: 99%
- Eficácia da modelagem via grafo de adjacência na partição simetricamente ortogonal de matrizes simétricas.

Principal referência

A.H. Gebremedhin, F. Manne, A. Pothen, "What color is your Jacobian? Graph coloring for computing derivatives", *SIAM Review*, 47 (2005), 629–705.