

# Resumen

Una línea de desarrollo seguida en el campo de la supercomputación es el uso de procesadores de propósito específico para acelerar determinados tipos de cálculo. En esta tesis estudiamos el uso de tarjetas gráficas como aceleradores de la computación y lo aplicamos al ámbito del álgebra lineal. En particular trabajamos con la biblioteca SLEPc para resolver problemas de cálculo de autovalores en matrices de gran dimensión, y para aplicar funciones de matrices en los cálculos de aplicaciones científicas. SLEPc es una biblioteca paralela que se basa en el estándar MPI y está desarrollada con la premisa de ser escalable, esto es, de permitir resolver problemas más grandes al aumentar las unidades de procesado.

El problema lineal de autovalores,  $Ax = \lambda x$  en su forma estándar, lo abordamos con el uso de técnicas iterativas, en concreto con métodos de Krylov, con los que calculamos una pequeña porción del espectro de autovalores. Este tipo de algoritmos se basa en generar un subespacio de tamaño reducido ( $m$ ) en el que proyectar el problema de gran dimensión ( $n$ ), siendo  $m \ll n$ . Una vez se ha proyectado el problema, se resuelve este mediante métodos directos, que nos proporcionan aproximaciones a los autovalores del problema inicial que queríamos resolver. Las operaciones que se utilizan en la expansión del subespacio varían en función de si los autovalores deseados están en el exterior o en el interior del espectro. En caso de buscar autovalores en el exterior del espectro, la expansión se hace mediante multiplicaciones matriz-vector. Esta operación la realizamos en la GPU, bien mediante el uso de bibliotecas o mediante la creación de funciones que aprovechan la estructura de la matriz. En caso de autovalores en el interior del espectro, la expansión requiere resolver sistemas de ecuaciones lineales. En esta tesis implementamos varios algoritmos para la resolución de sistemas de ecuaciones lineales para el caso específico de matrices con estructura tridiagonal a bloques, que se ejecutan en GPU.

En el cálculo de las funciones de matrices hemos de diferenciar entre la aplicación directa de una función sobre una matriz,  $f(A)$ , y la aplicación de la acción de una función de matriz sobre un vector,  $f(A)b$ . El primer caso implica un cálculo denso que limita el tamaño del problema. El segundo permite trabajar con matrices dispersas grandes, y para resolverlo también hacemos uso de métodos de Krylov. La expansión del subespacio se hace mediante multiplicaciones matriz-vector, y hacemos uso de GPUs de la misma forma que al resolver autovalores. En este caso el problema proyectado comienza siendo de tamaño  $m$ , pero se incrementa en  $m$  en cada reinicio del método. La resolución del problema proyectado se hace aplicando una función

de matriz de forma directa. Nosotros hemos implementado varios algoritmos para calcular las funciones de matrices raíz cuadrada y exponencial, en las que el uso de GPUs permite acelerar el cálculo.