Séminaire des doctorants de deuxième année

Solveurs performants pour les fonctionnelles énergétiques

Naoufal NIFA

Directeur de thèse : Denis AUBRY

Superviseur industriel : Mathieu CORUS

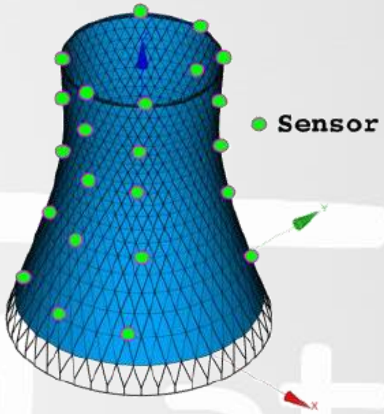
14/04/2016

Plan

1. Motivation
2. Renumérotation
3. Pivotage

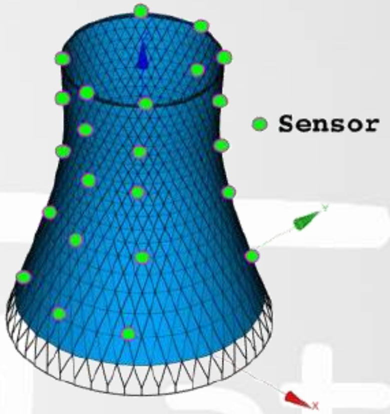
Contexte du problème

- Modèle numériques EF $\left(M(\theta), K(\theta)\right) \sim 10^6\ ddls \Rightarrow (\varphi_\theta, \omega_\theta)$
- Essais expérimentaux ~ 100 points de mesures $\Rightarrow (\varphi_t, \omega_t)$



Contexte du problème

- Modèle numériques EF $\left(M(\theta), K(\theta)\right) \sim 10^6\ ddls \quad \Rightarrow \quad (\varphi_\theta, \omega_\theta)$
- Essais expérimentaux $\sim$100 points de mesures $\quad \Rightarrow \quad (\varphi_t, \omega_t)$



Energie potentielle élastique du champ d'erreur

Distance entre les mesures et les calculs

Minimiser $E^2_\omega(\varphi, \psi, \theta) = \psi\, K(\theta)\, \psi + \frac{r}{1-r}(\Pi\varphi - \phi_t)^T K_r (\Pi\varphi - \phi_t)$

Contraintes $K(\theta)\, \psi = \left(K(\theta) - \omega_t^2 M(\theta)\right)\varphi$

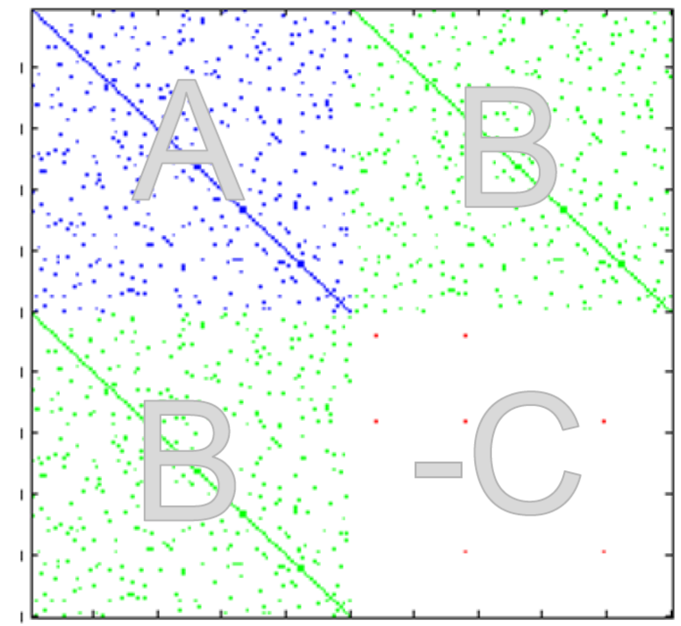
Contexte du problème

Problème à résoudre

$$\begin{bmatrix} -K(\theta) & K(\theta)-\omega_t^2 M(\theta) \\ K(\theta)-\omega_t^2 M(\theta) & \frac{r}{1-r}\Pi^T K_r \Pi \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \psi \\ \varphi \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ \frac{r}{1-r}\Pi^T K_r \phi_t \end{Bmatrix}$$

Problème de type point selle

$$\begin{bmatrix} A & B^T \\ B & -C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix}$$



Mise en œuvre d'une résolution directe: Introduction

- Problème linéaire creux de grande taille : $AX = B$
- Factorisation de la matrice A sous forme de LU , $L^T DL$ ou $L^T L$

Mise en œuvre d'une résolution directe: Introduction

- Problème linéaire creux de grande taille : $AX = B$
- Factorisation de la matrice A sous forme de LU , $L^T DL$ ou $L^T L$
- 3 phases dans la résolution directe :
  - Phase d'analyse $\sim 20\%$ du temps
    - Preprocessing de la matrice A : Mise en échelle / pivotage / renumérotation
    - Factorisation symbolique de A
  - Phase numérique
    - Le calcul effectif de L et U
  - Phase de descente-remontée
    - Résolution des systèmes triangulaires : $LY = B$ et $UX = Y$

$\sim 80\%$ du temps

Mise en œuvre d’une résolution directe: Matrices creuses et élimination de Gauss

- Factorisation de la matrice A à l’aide de l’élimination de Gauss

$\mathbf{A} = \mathbf{A}^{(1)}$, $\mathbf{b} = \mathbf{b}^{(1)}$, $\mathbf{A}^{(1)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(1)}$:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{l} 2 \leftarrow 2 - 1 \times a_{21}/a_{11} \\ 3 \leftarrow 3 - 1 \times a_{31}/a_{11} \end{array}$$

$\mathbf{A}^{(2)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(2)}$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2^{(2)} \\ b_3^{(2)} \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{l} b_2^{(2)} = b_2 - a_{21} b_1 / a_{11} \ldots \\ a_{32}^{(2)} = a_{32} - a_{31} a_{12} / a_{11} \ldots \end{array}$$

$\mathbf{A}^{(3)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(3)}$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2^{(2)} \\ b_3^{(3)} \end{pmatrix} \qquad a_{(33)}^{(3)} = a_{(33)}^{(2)} - a_{32}^{(2)} a_{23}^{(2)} / a_{22}^{(2)} \ldots$$

$$\boxed{a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)} a_{kj}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}}$$

Mise en œuvre d’une résolution directe: Matrices creuses et élimination de Gauss

- Factorisation de la matrice A à l’aide de l’élimination de Gauss

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^{(1)},\ \mathbf{b} = \mathbf{b}^{(1)},\ \mathbf{A}^{(1)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(1)}:$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{l} 2 \leftarrow 2 - 1 \times a_{21}/a_{11} \\ 3 \leftarrow 3 - 1 \times a_{31}/a_{11} \end{array}$$

$$\mathbf{A}^{(2)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(2)}$$

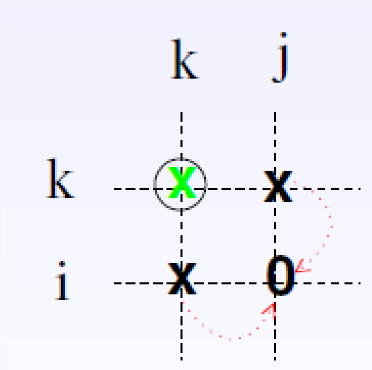
$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2^{(2)} \\ b_3^{(2)} \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{l} b_2^{(2)} = b_2 - a_{21} b_1/a_{11} \ldots \\ a_{32}^{(2)} = a_{32} - a_{31} a_{12}/a_{11} \ldots \end{array}$$

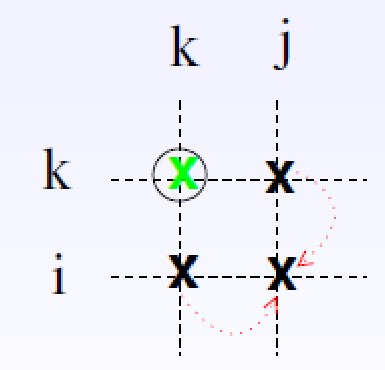
$$\mathbf{A}^{(3)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(3)}$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2^{(2)} \\ b_3^{(3)} \end{pmatrix} \qquad a_{(33)}^{(3)} = a_{(33)}^{(2)} - a_{32}^{(2)} a_{23}^{(2)}/a_{22}^{(2)} \ldots$$

$$\boxed{a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)} a_{kj}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}}$$

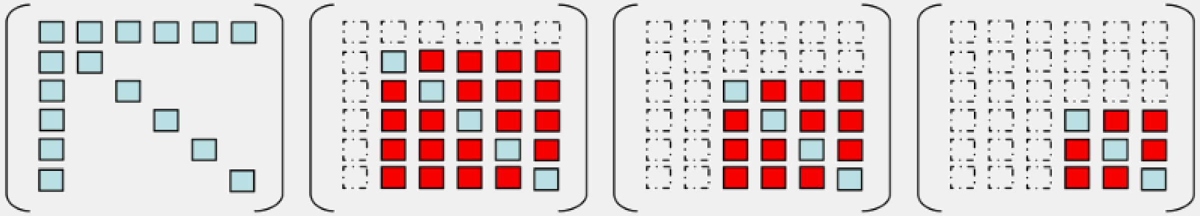
$$a'_{ij} = a_{ij} - l_{ik} \times a_{kj}$$

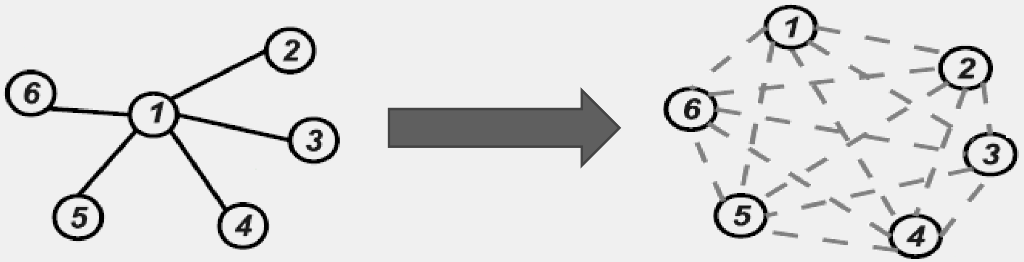




Mise en œuvre d'une résolution directe: Phénomène de remplissage (Fill-in)

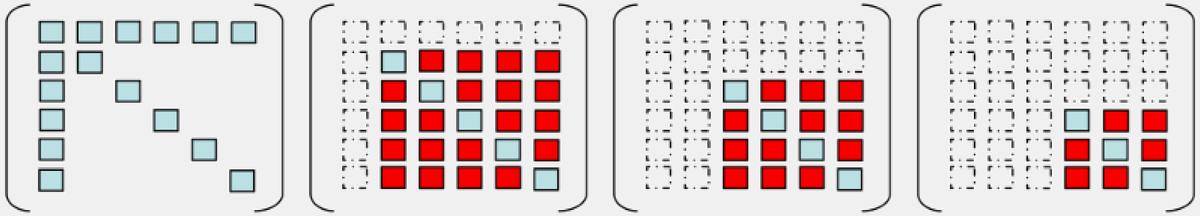
- Interprétation graphique et matricielle

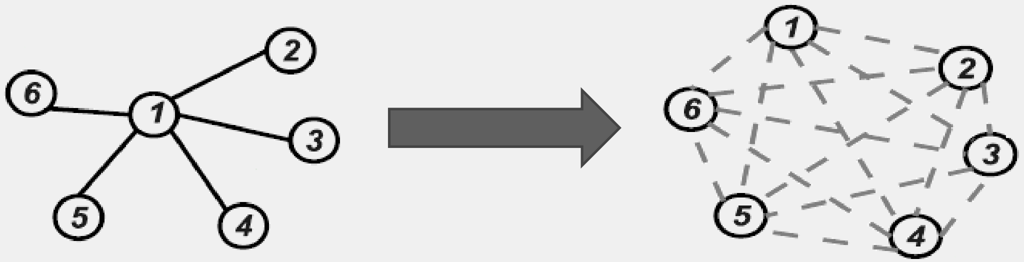


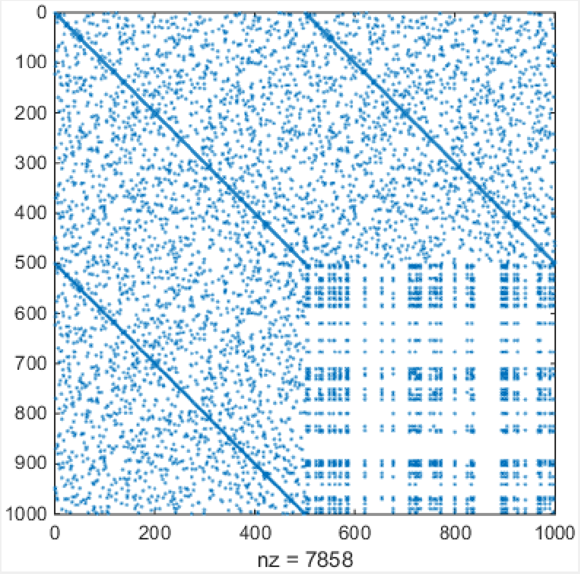


Mise en œuvre d'une résolution directe: Phénomène de remplissage (Fill-in)

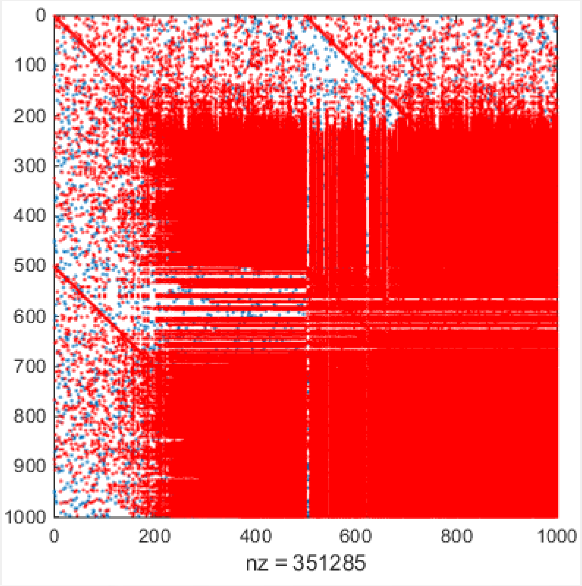
- Interprétation graphique et matricielle







Factorisation LU



- Temps de factorisation très importants
- Augmentation de la taille mémoire utilisée

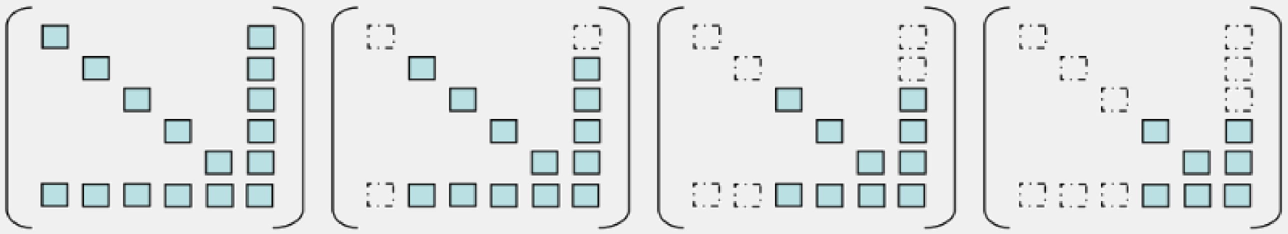
Gestion obligatoire du remplissage

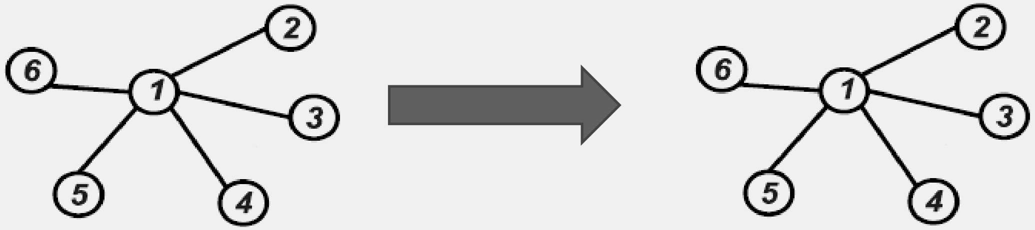
Plan

1. Motivation
2. Renumérotation
3. Pivotage

Mise en œuvre d'une résolution directe:
Preprocessing : renumérotation

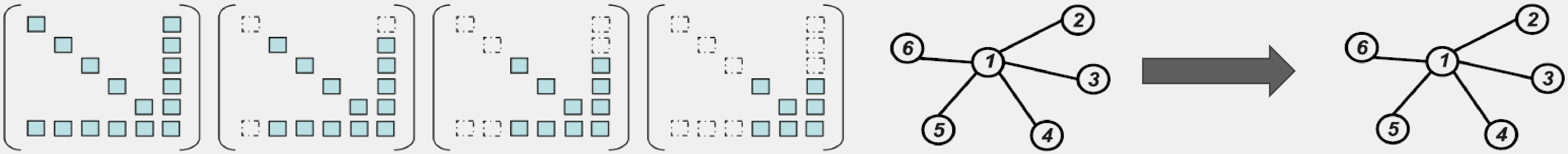
Renumérotation pour la minimisation du remplissage





Mise en œuvre d'une résolution directe: Preprocessing : renumérotation

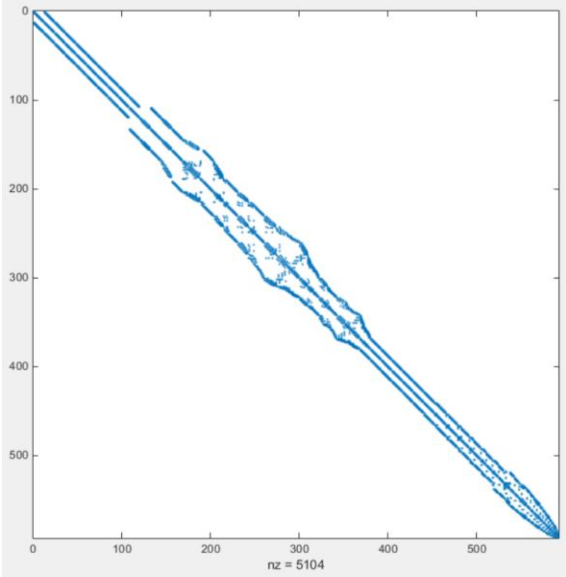
Renumérotation pour la minimisation du remplissage

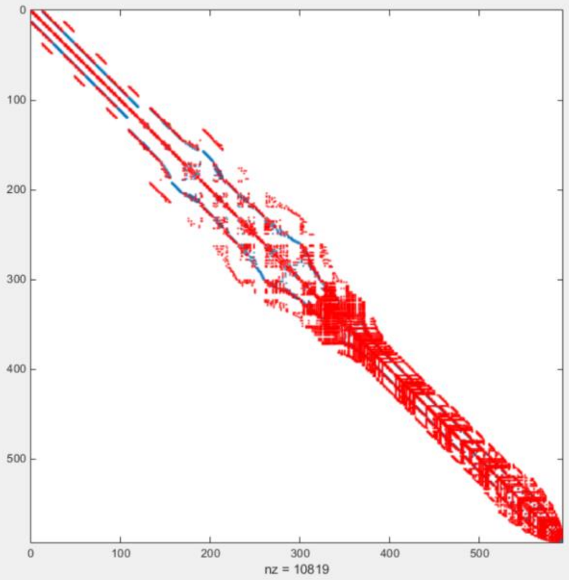


- Problème combinatoire $NP - complet$ [Yannakis '83]
- Utilisation des heuristiques :
  - Méthodes de réduction de bande : Reverse Cuthill-Mckee
  - Méthodes de degré minimum : Minimum degree (MD) et ses variantes (AMD, …)
  - Méthodes de partitionnement de graphes: Nested dissection, multilevel partitioning

Mise en œuvre d'une résolution directe: Preprocessing : renumérotation

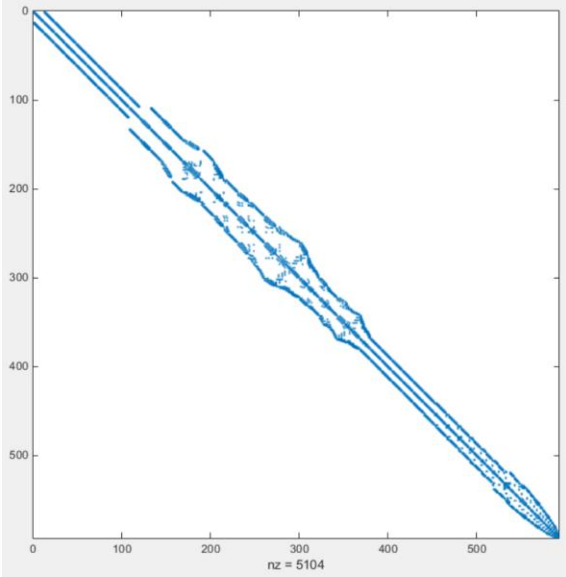
Illustrations : Méthodes de réduction de bande : Reverse Cuthill-Mckee

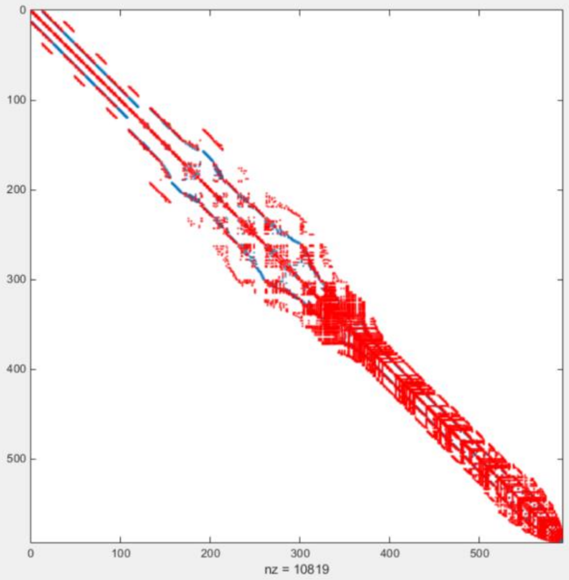


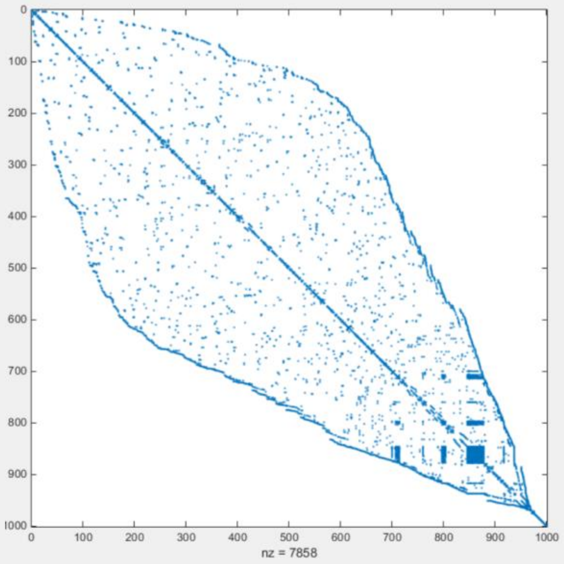


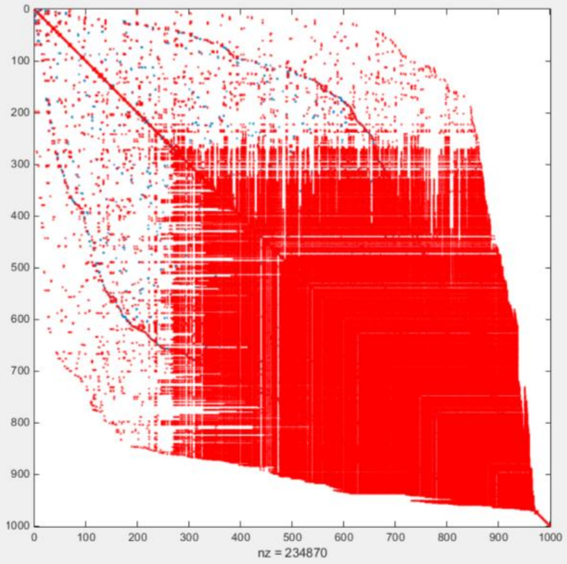
Mise en œuvre d'une résolution directe: Preprocessing : renumérotation

Illustrations : Méthodes de réduction de bande : Reverse Cuthill-Mckee



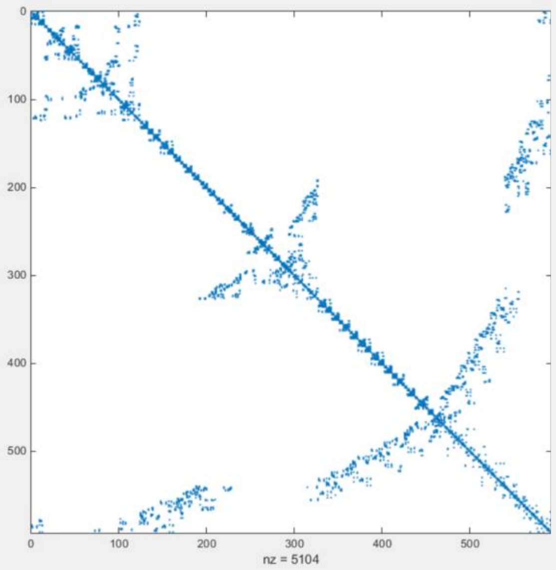


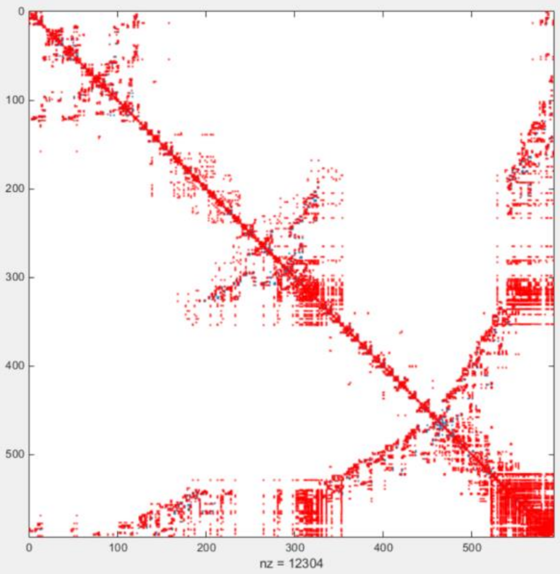




Mise en œuvre d'une résolution directe: Preprocessing : renumérotation

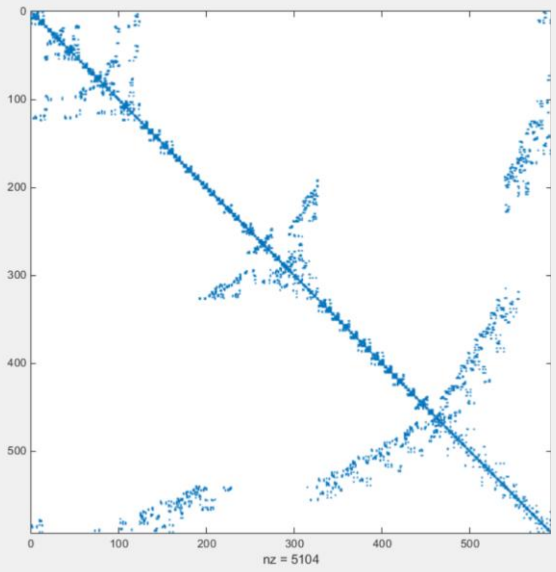
Illustrations : Méthodes de degré minimum : Minimum degree

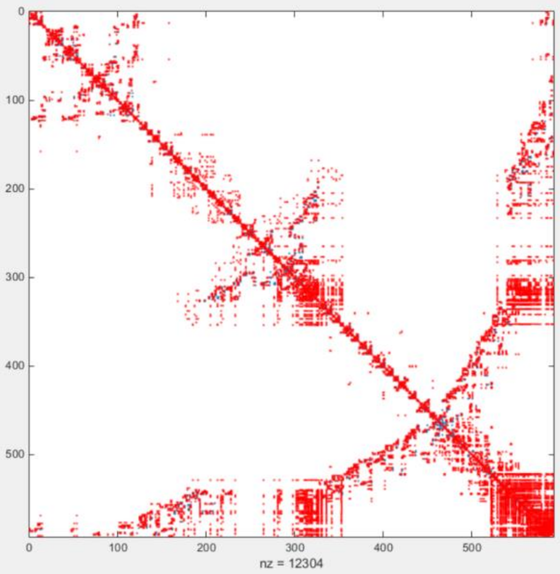


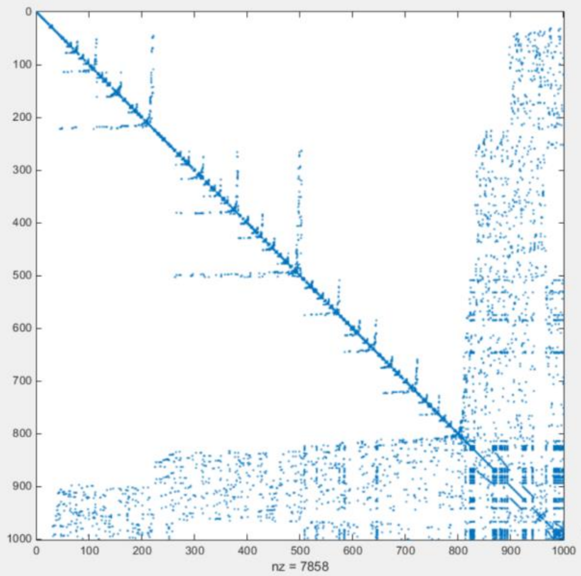


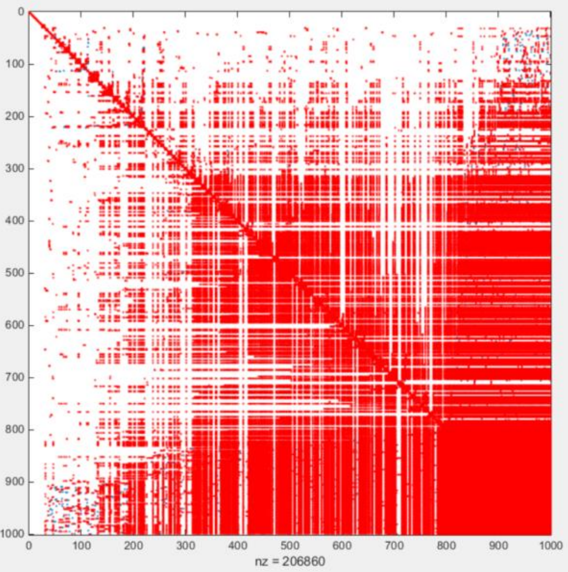
Mise en œuvre d’une résolution directe: Preprocessing : renumérotation

Illustrations : Méthodes de degré minimum : Minimum degree



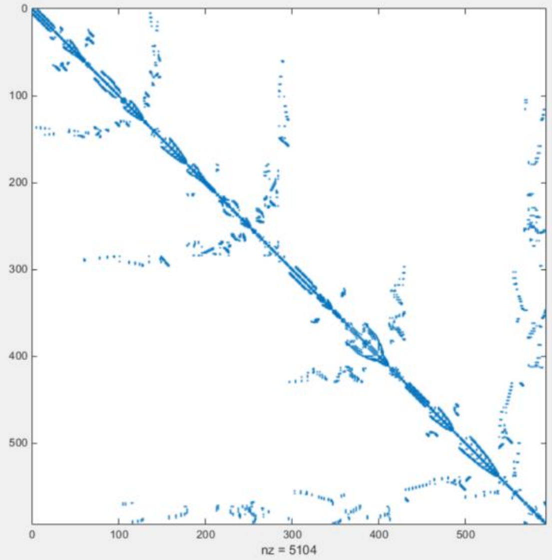


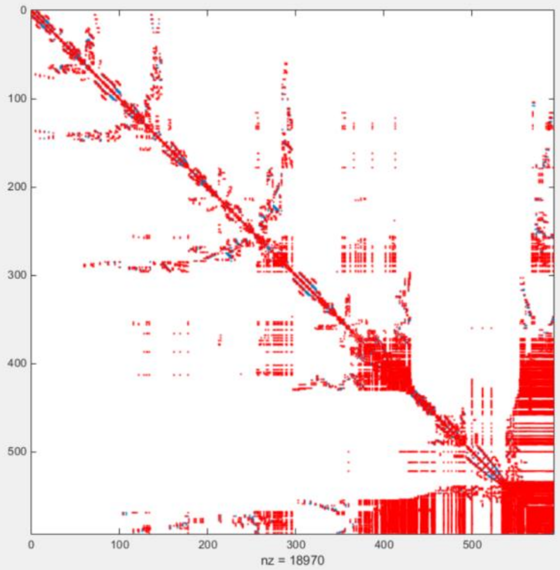




Mise en œuvre d'une résolution directe: Preprocessing : renumérotation

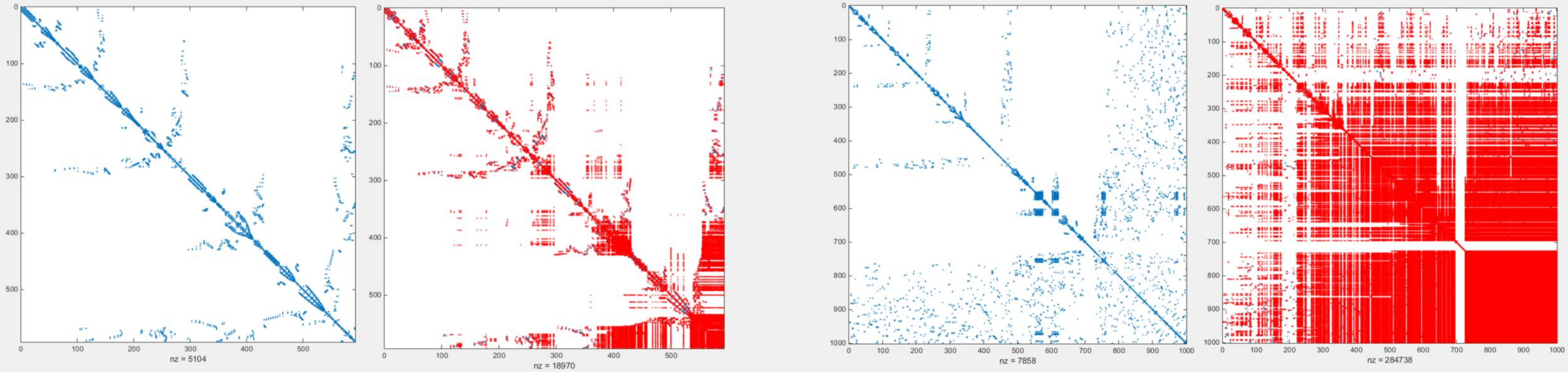
Illustrations : Méthodes de partitionnement de graphes : Nested dissection





Mise en œuvre d’une résolution directe: Preprocessing : renumérotation

Illustrations : Méthodes de partitionnement de graphes : Nested dissection



Plan

1. Motivation
2. Renumérotation
3. Pivotage

Mise en œuvre d'une résolution directe: Preprocessing : pivotage

Exemple : $\begin{pmatrix} \epsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1+\epsilon \\ 2 \end{pmatrix}$ Solution exacte $x^* = (1,1)$

$$A = \begin{pmatrix} \epsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{1}{\epsilon} & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \epsilon & 1 \\ 0 & 1-\frac{1}{\epsilon} \end{pmatrix}$$

ϵ	Erreur relative
10^{-3}	6×10^{-6}
10^{-9}	9×10^{-8}
10^{-15}	7×10^{-2}

Mise en œuvre d'une résolution directe: Preprocessing : pivotage

Exemple : $\begin{pmatrix} \epsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1+\epsilon \\ 2 \end{pmatrix}$ Solution exacte $x^* = (1,1)$

$$A = \begin{pmatrix} \epsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{1}{\epsilon} & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \epsilon & 1 \\ 0 & 1 - \frac{1}{\epsilon} \end{pmatrix}$$

ϵ	Erreur relative
10^{-3}	6×10^{-6}
10^{-9}	9×10^{-8}
10^{-15}	7×10^{-2}

- L'élimination de Gauss peut introduire des erreurs numériques à travers les petits pivots
- La renumérotation utilisée peut engendrer ce problème
- Stratégie à adopter : le pivotage
  - Permutation des lignes et /ou colonnes pour choisir un pivot plus grand

Exemple : Permutation des lignes 1 et 2 $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \epsilon & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_2 \\ x_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1+\epsilon \end{pmatrix}$ Plus d'erreur !

Mise en œuvre d’une résolution directe: Preprocessing : pivotage

- Pivotage partiel:
  - Issu du calcul matriciel dense
  - Principe : Choisir à chaque élimination le plus grand élément de la colonne / ligne

Mise en œuvre d’une résolution directe: Preprocessing : pivotage

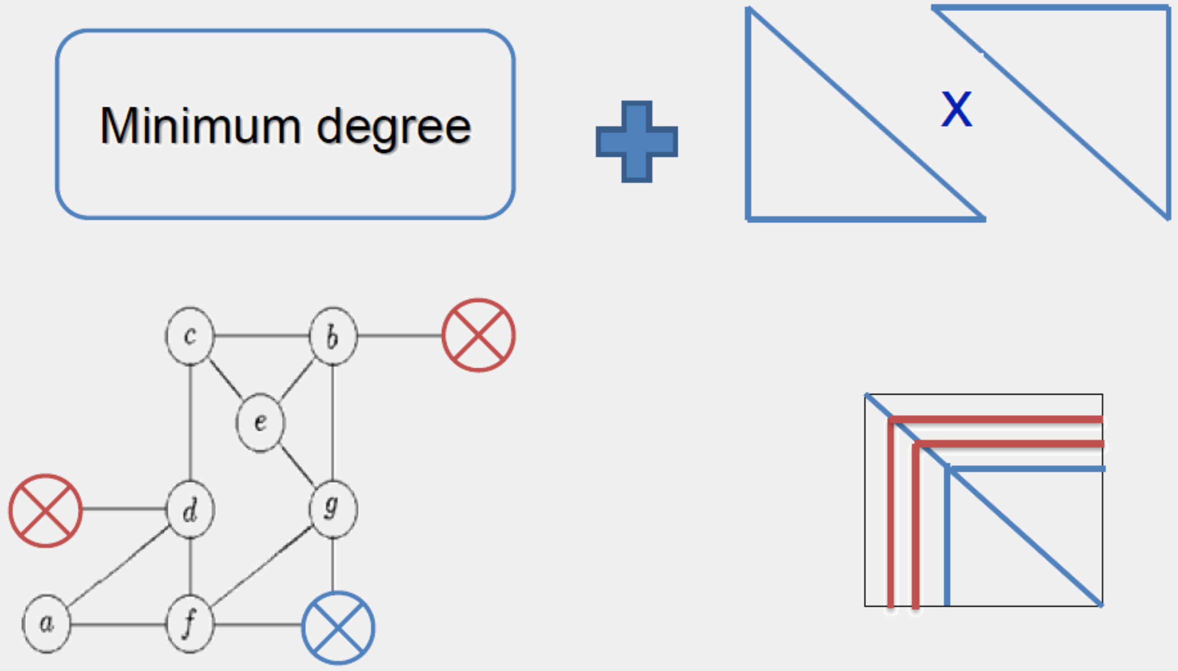
- Pivotage partiel:
  - Issu du calcul matriciel dense
  - Principe : Choisir à chaque élimination le plus grand élément de la colonne / ligne
- Pivotage partiel avec seuil :
  - Plus adapté au calcul creux
  - Flexibilité pour la préservation de l’aspect creux
  - Principe : Choisir à chaque élimination parmi les éléments de la colonne/ ligne, l’élément qui a la plus grande valeur tout en évitant le remplissage

Mise en œuvre d'une résolution directe: Preprocessing : pivotage

- Pivotage partiel:
  - Issu du calcul matriciel dense
  - Principe : Choisir à chaque élimination le plus grand élément de la colonne / ligne
- Pivotage partiel avec seuil :
  - Plus adapté au calcul creux
  - Flexibilité pour la préservation de l'aspect creux
  - Principe : Choisir à chaque élimination parmi les éléments de la colonne/ ligne, l'élément qui a la plus grande valeur tout en évitant le remplissage
- Mais :
  - Affecte le remplissage
  - Détruit la symétrie de la matrice
  - Augmente les temps d'accès aux données (nécessite des structures de données dynamiques)

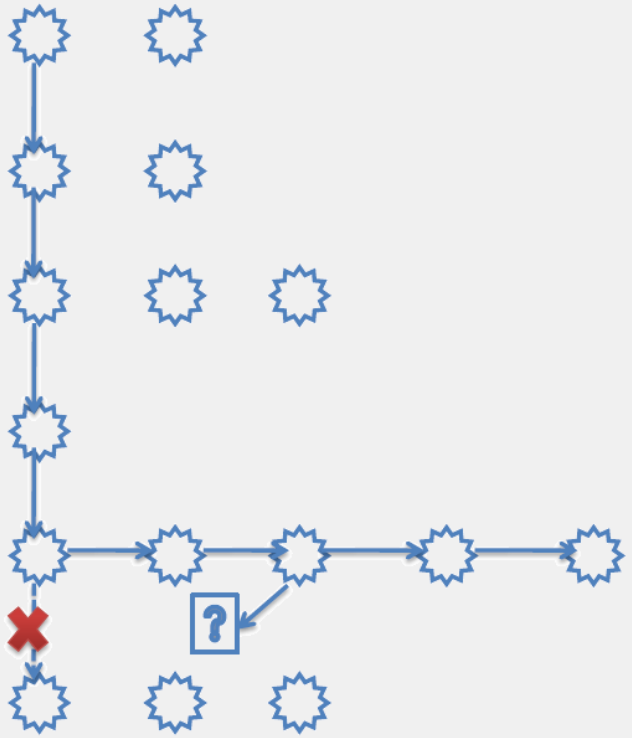
Mise en œuvre d'une résolution directe: Algorithme développé

Idée : Fusionner la renumérotation et la factorisation numérique



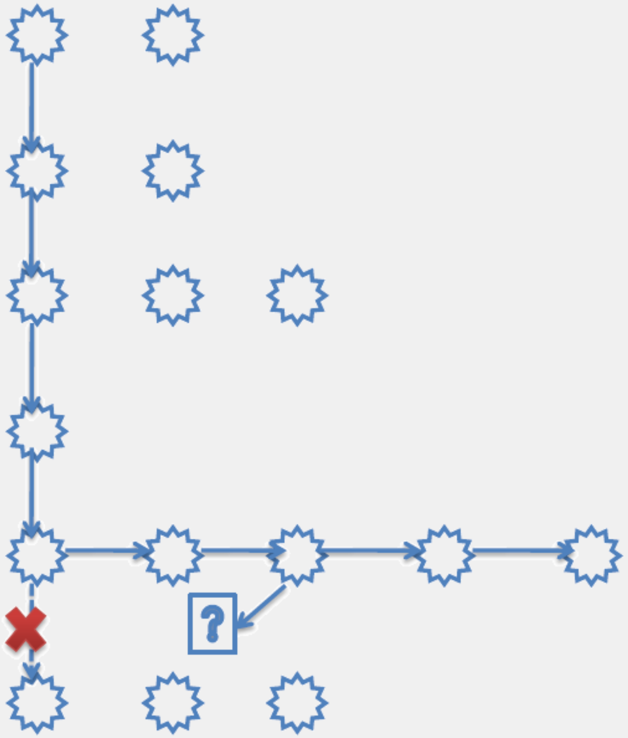
Mise en œuvre d'une résolution directe: Algorithme développé

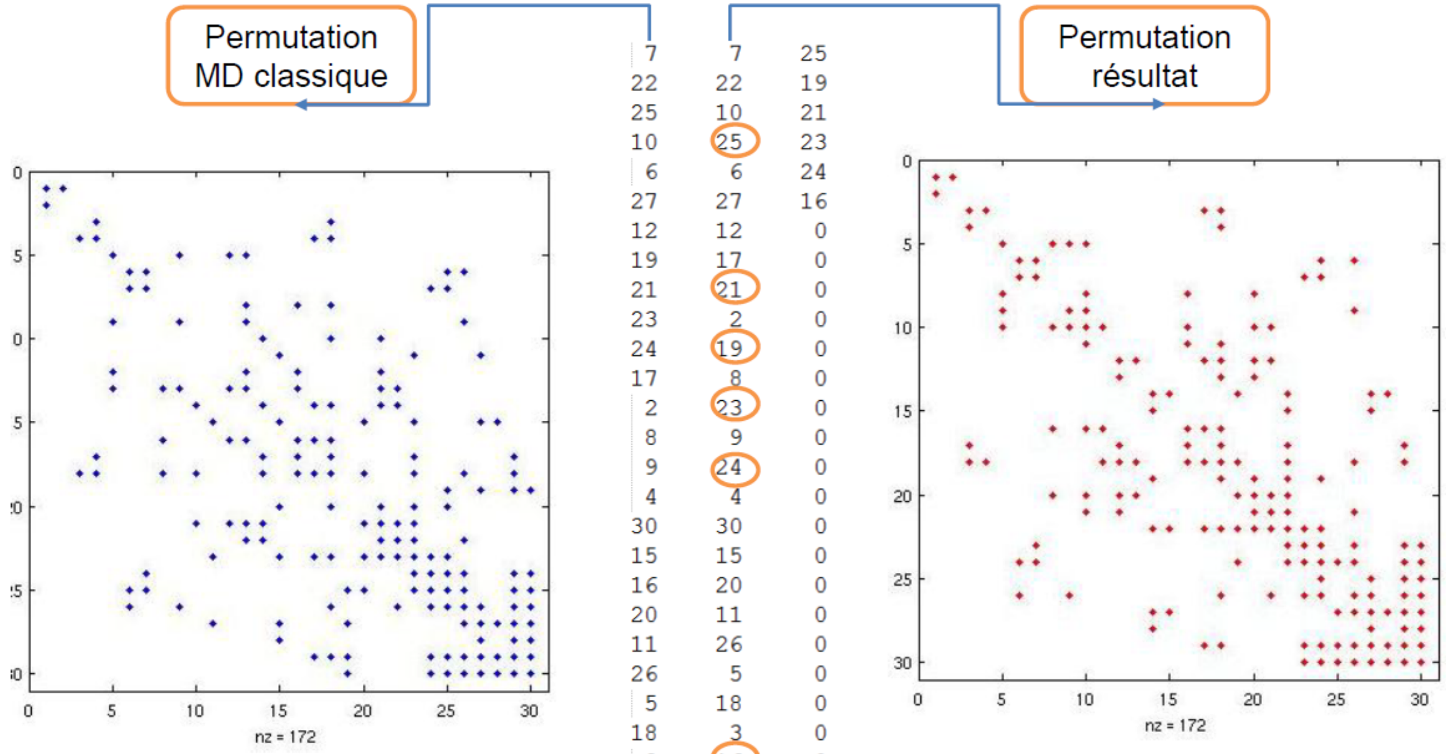
- tie breaking ?
  - Le cas de grandes structures 3D



Mise en œuvre d'une résolution directe: Algorithme développé

- tie breaking ?
    - Le cas de grandes structures 3D



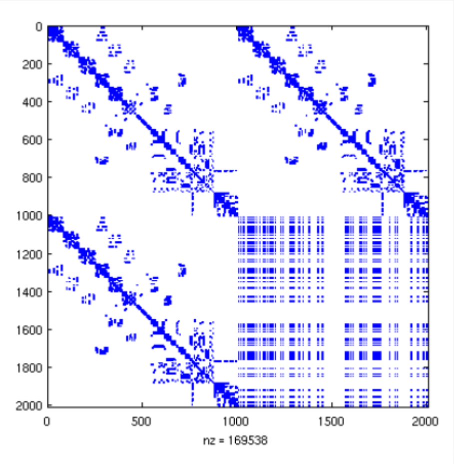


7	7	25
22	22	19
25	10	21
10	25	23
6	6	24
27	27	16
12	12	0
19	17	0
21	21	0
23	2	0
24	19	0
17	8	0
2	23	0
8	9	0
9	24	0
4	4	0
30	30	0
15	15	0
16	20	0
20	11	0
11	26	0
26	5	0
5	18	0
18	3	0
3	16	0
29	29	0
13	13	0
28	28	0
14	14	0
1	1	0

Mise en œuvre d'une résolution directe: Résultats

- Meilleure réduction de remplissage par rapport :
  - Aux algorithmes minimum degree
  - Au meilleur solveur supernodal (SuperLU)
  - Au solveur multifrontal UMFPACK
- Moins de succès par rapport au :
  - solveur multifrontal MUMPS + renumérotation

  Nested dissection (METIS/SCOTCH/PORD)



Matrice de taille 2006 × 2006
Nombre de non-zéros 169.538

Preordering algorithm	The matrix	A
	Fill-in	Ratio (%)
Algorithme 1	850,645	5.64
MUMPS		
no ordering	1,138,846	5.01
AMF	997,258	5.88
AMD	878,848	5.18
PORD	586,120	3.46
METIS	573,732	3.38
SCOTCH	663,332	3.91
SuperLU		
no ordering	2,066,378	12.18
$MMD(A^TA)$	709,877	4.18
$MMD(A^T+A)$	1,002,364	5.91
COLAMD	908,325	5.35
KLU		
no ordering	2,023,728	11.93
AMD	1,209,241	7.12
COLAMD	1,069,834	6.31
Umfpack		
CHOLAMD	914,271	5.39

Conclusions et perspectives

- Des résultats réconfortants par rapport aux solveurs directes existants
- Le remplissage reste très grand
- Factorisation symbolique élémentaire

Conclusions et perspectives

- Des résultats réconfortants par rapport aux solveurs directes existants
- Le remplissage reste très grand
- Factorisation symbolique élémentaire

- Orientation vers les méthodes itératives
- Le préconditionnement

Merci pour votre attention