



ECOLE
POLYTECHNIQUE
DE BRUXELLES

PROJECT REPORT ON THE C/FORTRAN EDP SOLVER

MATH-H401

Numerical Methods : *Project*

Contents

1	Introduction	1
2	Discrétisation : conditions au bord non-homogènes	1
3	Méthode des deux grilles	2
3.1	Conditionnement	2
3.2	Correction de grille grossière	2
4	Méthode multigrilles	3
5	Exploitation du solveur	4
5.1	Critère de stabilité directe	5
5.2	Coefficient de convergence (convergence rate)	5
5.3	Relaxation	5
6	Problème aux valeurs propres avec accélération	6

Titulaires :

Prof. Yvan NOTAY
Prof. Artem NAPOV
Service METRONUM

Auteur :

Théo LISART

Rendu le 13 mai 2019

1 Introduction

Ce rapport est la seconde version du projet réalisé dans le cadre du cours de *Numerical Analysis*. La première version contenant bon nombre d'erreurs et de mauvaises pratiques de la programmation mathématique on aura une approche plus rigoureuse. On utilisera donc les outils **Valgrind** et **GDB** (GNU debugging tools) tout au long de la réécriture du logiciel.

Contrairement à la version précédente et dans un soucis de clarté, le solveur est directement implémenté dans le *main.c*. La multiplication des variables paramétrées et fonctions imbriquées rendaient de même la lecture compliquée. En particulier toute la méthode de calcul des matrices de réduction et de prolongation ont été complètement réécrites en ne parcourant que les problèmes grossiers, simplifiant énormément le code de calcul.

2 Discrétisation : conditions au bord non-homogènes

Sur base du travail de l'année passée, la première question consistait à générer un vecteur discrétisé représentant les conditions aux bords non-homogènes du nouveau problème. Après relecture du code il est assez aisé d'ajouter le vecteur indépendant et vérifier le nombre de "1" pour un problème de petite taille. On vérifie aisément en résolvant le problème obtenu par le solveur direct *UMFPACK*. On obtient :

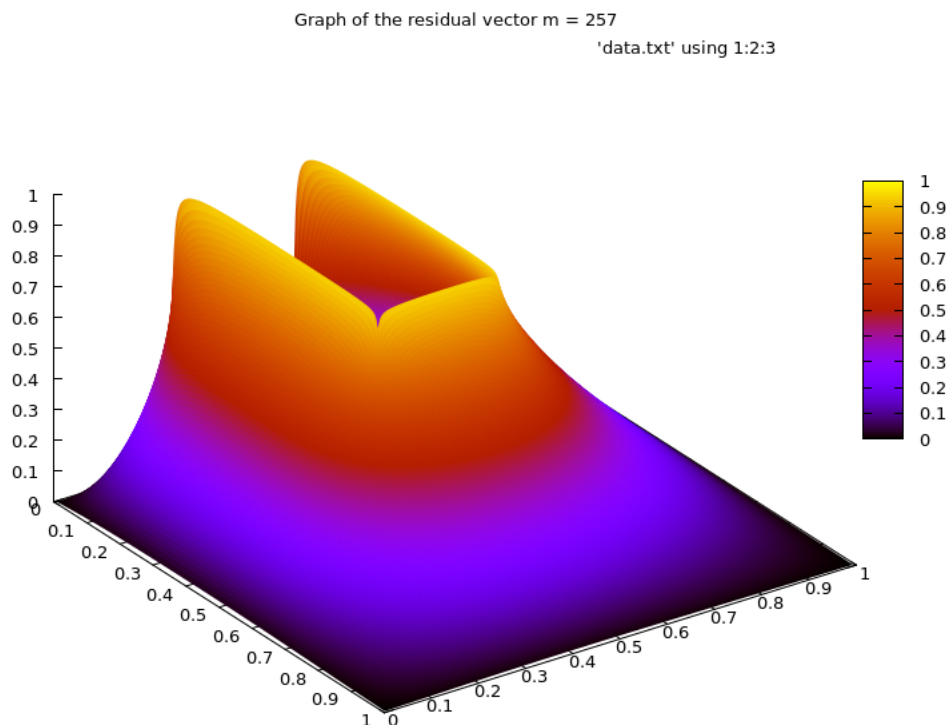


Figure 1: Représentation solution directe pour $m = 257$

Étant donné que le problème à résoudre est un problème de diffusion on choisira une vue de dessus en *heatmap* qui aura plus de sens physique que la surface.

3 Méthode des deux grilles

La conception d'un solveur deux grilles est divisée en deux grandes étapes : le préconditionnement (lissage) qui consiste en un solveur itératif stationnaire et la correction grille grossière. On implémente donc la méthode itérative en approchant la solution par résolution des systèmes triangulaires associés (Gauss-seidel) ou juste par la diagonale (Jacobi). La méthode itérative a l'avantage de supprimer les erreurs à hautes fréquences alors que les corrections seront efficaces contre les erreurs basses fréquences.

3.1 Conditionnement

Écrire un préconditionneur de sorte que la matrice \mathbf{B} n'a pas à être enregistrée n'est pas une tâche ardue. Au format CSR il suffit de parcourir la matrice du problème en ignorant les valeurs à exclure. Il reste donc à résoudre les systèmes linéaires triangulaires supérieurs et inférieur par une méthode directe. On peut vérifier visuellement en déroulant les matrices denses pour une faible discrétisation :

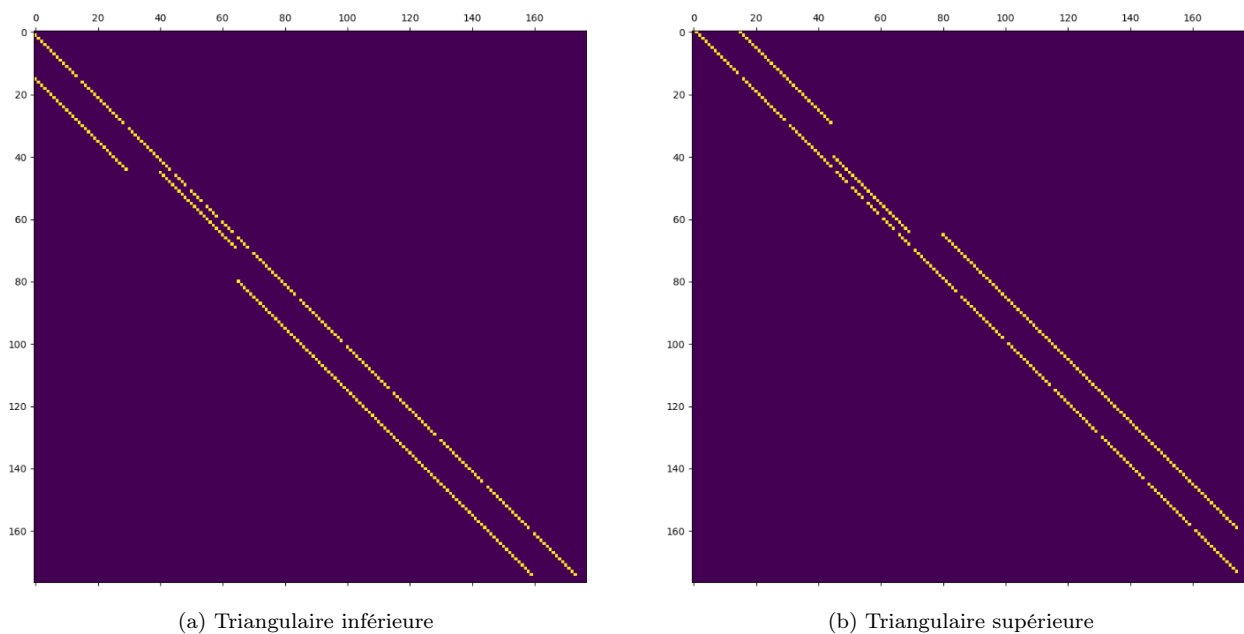


Figure 2: $m = 17$

Cette méthode seule converge déjà vers la solution mais à vitesse de convergence faible. Il reste alors à implémenter la correction de grille grossière.

3.2 Correction de grille grossière

La difficulté d'implémentation liée à cette étape est de correctement lier la géométrie de la grille grossière et de la grille fine au format CSR. Une fois cette étape faite on peut vérifier visuellement si les vecteurs réduits (points grossiers construits comme une moyenne des points fins) et prolongés (points construits comme interpolation bilinéaire de la matrice grossière à la fine) correspondent visuellement :

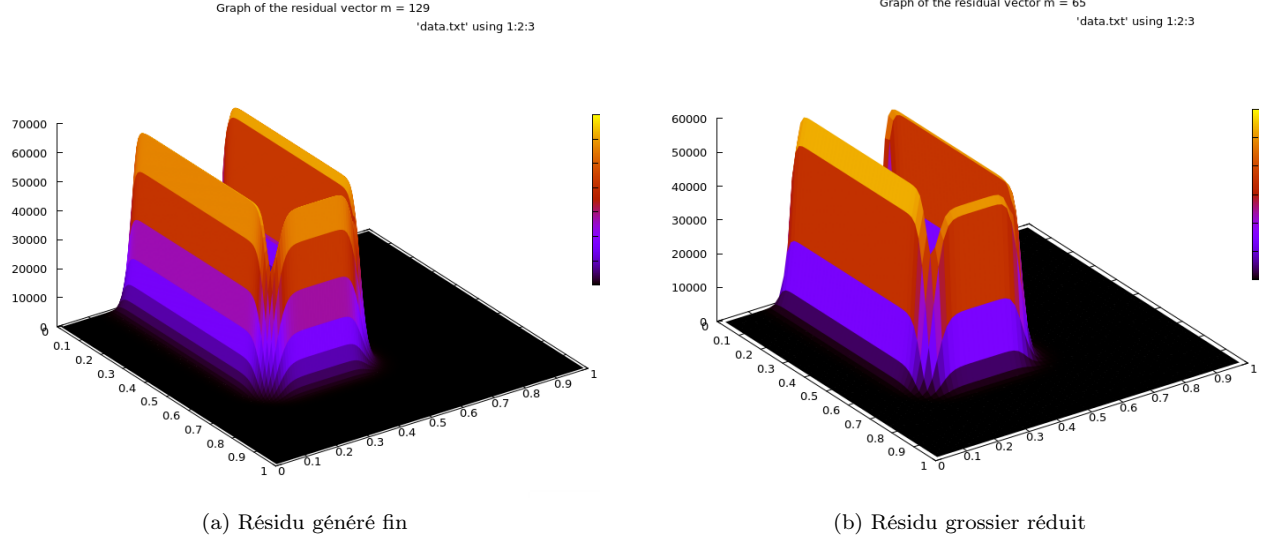


Figure 3: Réduction résidu de $m = 129$ à $m_c = 65$

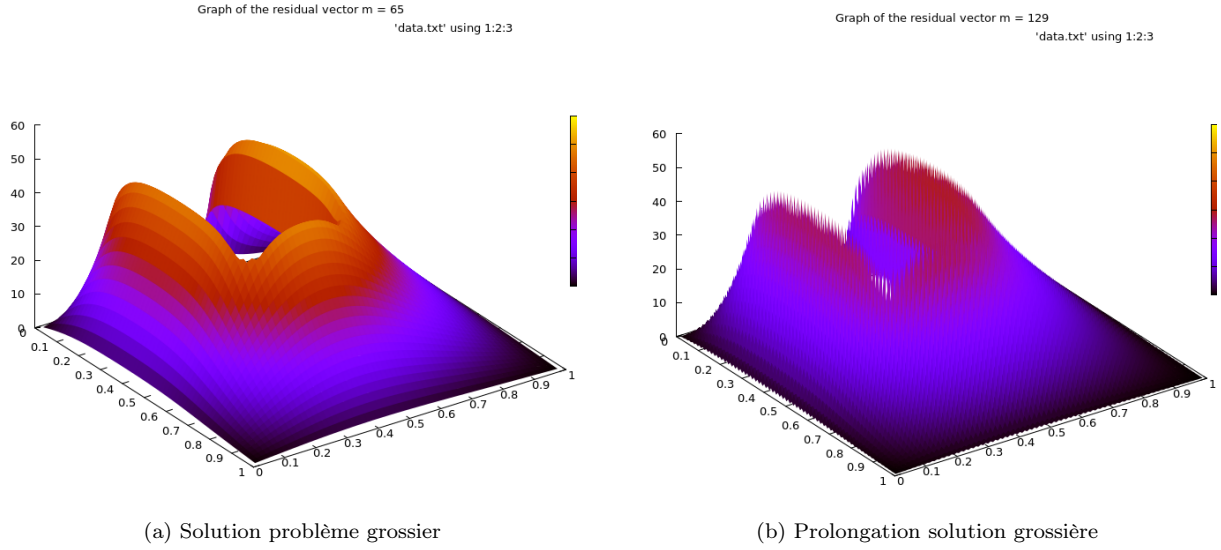


Figure 4: Prolongation de $m_c = 65$ à $m = 129$

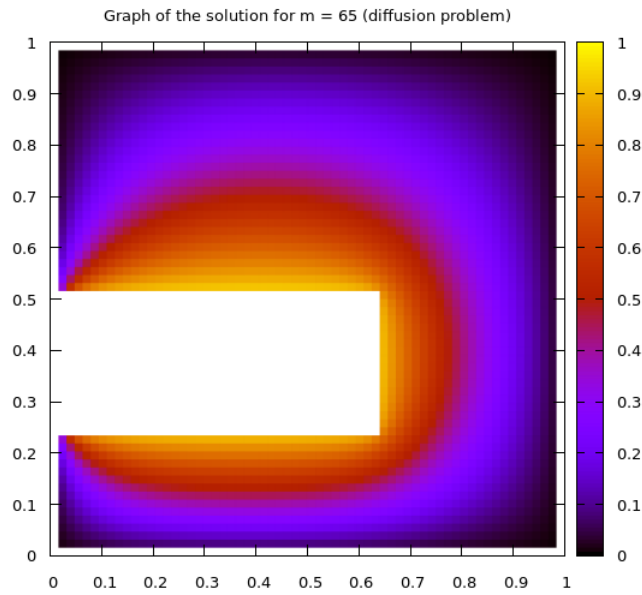
4 Méthode multigrilles

À partir de la méthode deux grilles stable et une fois la gestion de la mémoire maîtrisée il s'agit donc de mettre en place une récursion au niveau de la résolution du problème grossier. Éviter des fuites mémoire et assurer une gestion efficace des niveaux de récursion étaient les difficultés principales. Le solveur multigrilles converge bien mais malheureusement la vitesse de convergence pour le solveur n'est pas très bonne alors qu'elle est idéale sans relaxation pour le deux grilles. On observe tout de même que les itérations en multigrilles sont beaucoup plus rapides qu'en deux grilles. Une accumulation d'erreurs dans la méthode de description géométrique du problème pourrait en être la cause (un décalage d'indice entre les niveaux de récursion).

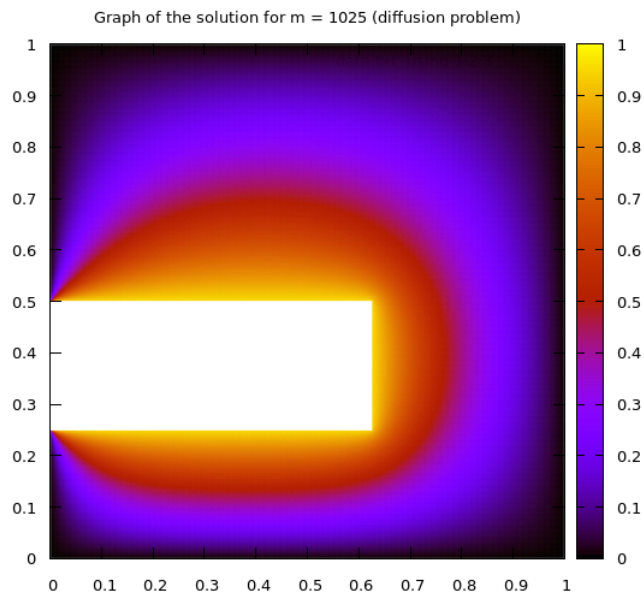
5 Exploitation du solveur

Le solveur deux grilles présentant les propriétés les plus optimales dans cette implémentation on se servira de celui-ci pour démonstration et analyse. Le solveur multigrilles converge bien vers la solution de manière stable mais la vitesse de convergence autour de 0.7 en moyenne est assez mauvaise (pour autour de 0.4 sans relaxation pour le deux grilles comme attendu pour un solveur de ce type). L'analyse reste rigoureusement la même.

Solutions diffusion :



(a) *Heatmap* solution $m = 65$



(b) *Heatmap* solution $m = 1025$

Figure 5: Solutions du problème non homogène

Le programme peut supporter jusque $m = 1537$ mais *GNUplot* n'affichera pas autant de points. On compare alors nos résultats pour $m = 65$ (3289 inconnues) et $m = 1537$ (1986625 inconnues). Tous les éléments de réponse à la question 4 sont présentés en annexe.

5.1 Critère de stabilité directe

On utilisera en tant que critère de stabilité théorique :

$$\epsilon = \frac{\|r\|}{\|b\|} < \mathcal{O}(u) \|A\|_2 \frac{\|\tilde{u}\|}{\|b\|} \quad (1)$$

Par hypothèse nous ne calculons pas directement $\|A\|_2$, la théorie nous apprend que l'on peut majorer la norme matricielle par sa valeur propre maximale. Si $\mathcal{O}(u) = 1,1 \cdot 10^{-6}$ est la constante d'erreur minimale de représentation en algèbre discret, on approche :

$$\|A\|_2 \approx \lambda_{max} \approx \frac{8D}{h^2} \quad (2)$$

On calcule le nombre de stabilité ϵ après réorganisation des facteurs et calcul de l'erreur relative $\epsilon_{rel} = \frac{\|r\|}{\|b\|}$. Qu'il s'agit de simplement vérifier automatiquement après résolution.

5.2 Coefficient de convergence (convergence rate)

D'expérience on définira la stagnation résiduelle lorsque la norme du résidu d'une itération à la suivante n'est que 10% plus petite. On suppose que l'on étudie le comportement de la norme résiduelle sans placer de tolérance minimale et sans relaxation -en supposant que le taux de convergence stagne également lorsque il n'augmente plus que de 10%- on observe une résolution stagnante autour de $\rho = 0.4$ et de même pour la convergence asymptotique. Si l'on poursuit la résolution vient un moment où l'on atteint la précision machine et la vitesse de convergence tend subitement vers 1.

5.3 Relaxation

Il est relativement facile d'ajouter une relaxation à notre résolution (correction de la solution par la solution précédente). Il reste à choisir efficacement le facteur de relaxation τ . On écrit l'approximation pour le facteur de relaxation optimal pour $\lambda_{max} = 1$ on a $\lambda_{min} = 1 - \rho$. C'est à dire :

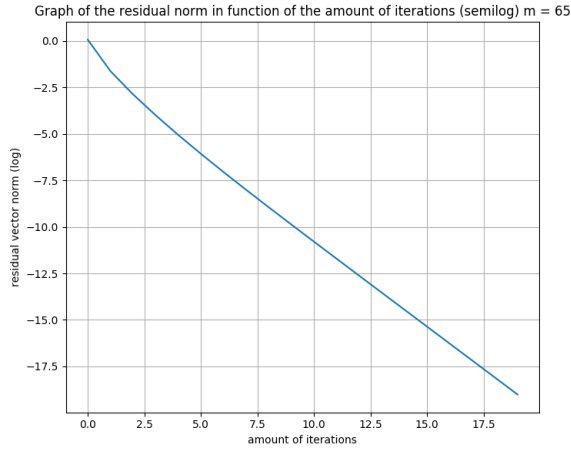
$$\tau = \frac{2}{\lambda_{max} + \lambda_{min}} \approx \frac{2}{2 - \rho} \quad (3)$$

Qui est l'approximation que l'on utilisera en pratique pour trouver une valeur efficace de τ . D'avance on pourra évaluer le nouveau coefficient de convergence théorique à partir de la forme théorique, dont on substitue l'approximation précédente:

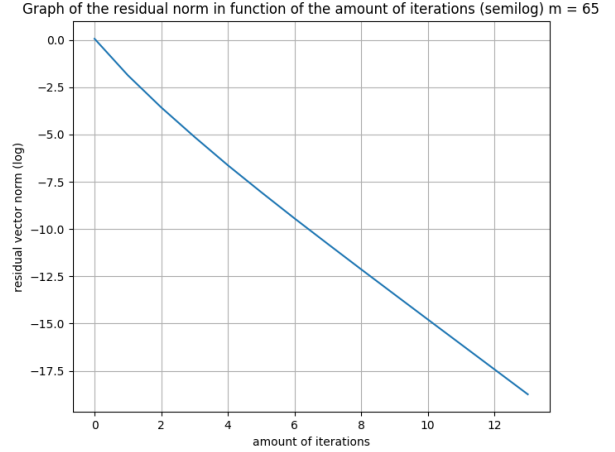
$$\rho_{th} = \frac{\lambda_{max} - \lambda_{min}}{\lambda_{max} + \lambda_{min}} \approx \frac{\rho}{2 - \rho} \quad (4)$$

Ces approximations théoriques sont assez précisément validées expérimentalement peu importe la taille du problème. Par exemple pour $m = 1537$ le calcul pour $\tau = 1.0$ donne un $\rho_a = 0.38$ et donc propose un $\tau = 1.234$ pour un $\rho_{th} = 0.234$, en exécutant le même calcul pour le τ proposé on obtient un nouveau $\rho_a = 0.230$, assez proche du ρ_{th} annoncé.

La qualité et l'accélération due à la relaxation est d'autant plus flagrante en dressant les graphes semilog de la norme du résidu en fonction du nombre d'itérations.

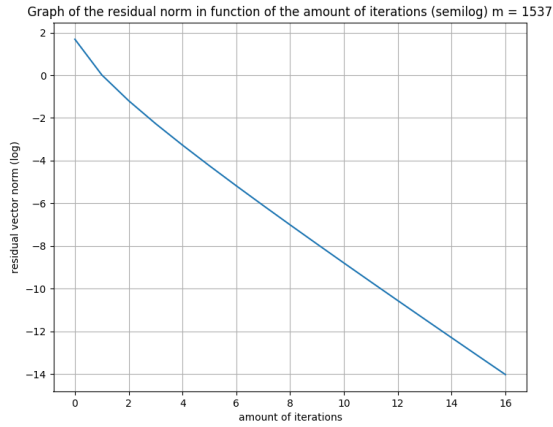


(a) Résoudre pour $\tau = 1.0$

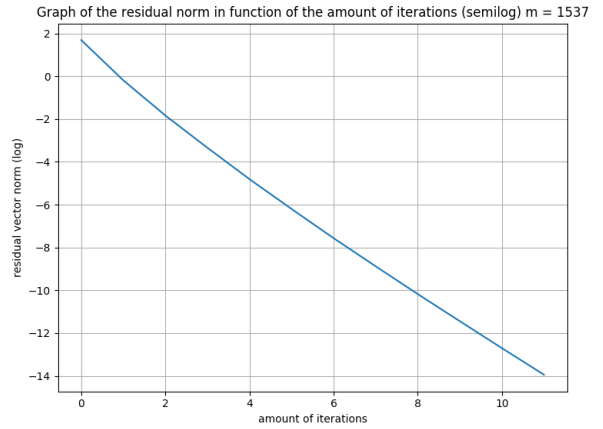


(b) Résoudre pour $\tau = 1.22$

Figure 6: Comparaison évolution normes résiduelles $m = 65$



(a) Résoudre pour $\tau = 1.0$



(b) Résoudre pour $\tau = 1.23$

Figure 7: Comparaison évolution normes résiduelles $m = 1537$

6 Problème aux valeurs propres avec accélération

Après lecture de la documentation **PRIMME** et en essayant de respecter les conventions du solveur, l'ajout d'une routine par blocks de résolution et ensuite en utilisant simplement les paramètres et ajoutant les paramètres nécessaires au solveur multigrilles.

```
1 primme.applyPreconditioner = precondition_primme;
  primme.correctionParams.precondition = 1;
```

Si l'on compare l'action du préconditionneur (multigrilles) sur la résolution de PRIMME pour $m = 257$ on obtient :

```
2 // No preconditioner
  #Converged 1 eval[ 0 ]= 4.585588e+01 norm 4.175737e-07 Mvecs 1251 Time 1.62637
```

```

4      Temps de solution (CPU) (PRIMME):    6.1 sec
6  // Two-grid preconditioner
6      #Converged 1 eval[ 0 ]= 4.585588e+01 norm 9.493136e-08 Mvecs 44 Time 2.42916
8      Temps de solution (CPU) (PRIMME):    8.6 sec
8
10 // Multi-grid preconditionner
10 #Converged 1 eval[ 0 ]= 4.585588e+01 norm 2.890194e-07 Mvecs 64 Time 1.50635
12      Temps de solution (CPU) (PRIMME):    5.7 sec
12 }

```

On voit immédiatement que le nombre d'opérations matrices/vecteurs est grandement réduite par l'utilisation du préconditionneur. Sans surprise le temps est plus long pour le deux-grilles, le multigrilles par contre est le plus efficace malgré sa vitesse de convergence désavantageuse.

Résultats pour m = 1537

```

1 // =====
3 Generating multi-grid problem : maximum coarse depth m_c = 769
fine matrix m = 1537 n = 1986625 nnz = 9925065
5 Smoothing method : Gauss-Seidel || Iteration / smoothing : 4 || Direct stability check ON || Relaxation ON - tau =
1.000000 ||
7 // =====
8 ||| Residual norm : 5.407330e+00 || Convergence rate : 0.000000 || at iteration : 1 ||
9 ||| Residual norm : 1.017028e+00 || Convergence rate : 0.188083 || at iteration : 2 ||
10 ||| Residual norm : 3.031413e-01 || Convergence rate : 0.298066 || at iteration : 3 ||
11 ||| Residual norm : 1.036629e-01 || Convergence rate : 0.341962 || at iteration : 4 ||
12 ||| Residual norm : 3.790573e-02 || Convergence rate : 0.365664 || at iteration : 5 ||
13 ||| Residual norm : 1.442185e-02 || Convergence rate : 0.380466 || at iteration : 6 ||
14 ||| Residual norm : 5.632573e-03 || Convergence rate : 0.390558 || at iteration : 7 ||
15 ||| Residual norm : 2.240953e-03 || Convergence rate : 0.397856 || at iteration : 8 ||
16 ||| Residual norm : 9.039152e-04 || Convergence rate : 0.403362 || at iteration : 9 ||
17 ||| Residual norm : 3.684827e-04 || Convergence rate : 0.407652 || at iteration : 10 ||
18 ||| Residual norm : 1.514756e-04 || Convergence rate : 0.411079 || at iteration : 11 ||
19 ||| Residual norm : 6.269183e-05 || Convergence rate : 0.413874 || at iteration : 12 ||
20 ||| Residual norm : 2.609181e-05 || Convergence rate : 0.416192 || at iteration : 13 ||
21 ||| Residual norm : 1.091004e-05 || Convergence rate : 0.418140 || at iteration : 14 ||
22 ||| Residual norm : 4.580028e-06 || Convergence rate : 0.419799 || at iteration : 15 ||
23 ||| Residual norm : 1.929227e-06 || Convergence rate : 0.421226 || at iteration : 16 ||
24 ||| Residual norm : 8.150289e-07 || Convergence rate : 0.422464 || at iteration : 17 ||
25 ||| Residual norm : 3.452033e-07 || Convergence rate : 0.423547 || at iteration : 18 ||
26 ||| Residual norm : 1.465394e-07 || Convergence rate : 0.424502 || at iteration : 19 ||
27 ||| Residual norm : 6.233021e-08 || Convergence rate : 0.425348 || at iteration : 20 ||
28 // =====
29 Minimum tol reached a it : 20
Resolution Time multi grid method (CPU): 299.9 sec
31 Final residual norm : 6.233021e-08
Final convergence rate at stop : 0.425348
33 Asymptotic rate rho = 0.380466 , optimal results for tau = 2/(lambda_max - lambda_min) ^ = (2/(2 - rho)) = 1.234923
If chosen , the new relaxation coefficient should give a theoretical rho = 0.234923
35
36 Convergence quality analysis :
37 ---> Direct stability criterion : eps = ||r||/||b|| < O(u)*||A||_2*||u||/||b|| ?
38 ---> Relative error : eps_err = 1.298828e-09 || convergence number : eps = 1.293747e-11
39 ---> eps = 1.293747e-11 < u = 1.1e-6 ?
41 ----- The stability criterion is FULFILLED -----
43 // =====

```

```

1 // =====
3 Generating multi-grid problem : maximum coarse depth m_c = 769
fine matrix m = 1537 n = 1986625 nnz = 9925065
5 Smoothing method : Gauss-Seidel || Iteration / smoothing : 4 || Direct stability check ON || Relaxation ON - tau =
1.234923 ||
7 // =====
8 ||| Residual norm : 5.407330e+00 || Convergence rate : 0.000000 || at iteration : 1 ||
9 ||| Residual norm : 8.271425e-01 || Convergence rate : 0.152967 || at iteration : 2 ||
10 ||| Residual norm : 1.596953e-01 || Convergence rate : 0.193069 || at iteration : 3 ||
11 ||| Residual norm : 3.538451e-02 || Convergence rate : 0.221575 || at iteration : 4 ||
12 ||| Residual norm : 8.166196e-03 || Convergence rate : 0.230785 || at iteration : 5 ||
13 ||| Residual norm : 2.032069e-03 || Convergence rate : 0.248839 || at iteration : 6 ||
14 ||| Residual norm : 5.188096e-04 || Convergence rate : 0.255311 || at iteration : 7 ||
15 ||| Residual norm : 1.394937e-04 || Convergence rate : 0.268873 || at iteration : 8 ||
16 ||| Residual norm : 3.811883e-05 || Convergence rate : 0.273266 || at iteration : 9 ||
17 ||| Residual norm : 1.074422e-05 || Convergence rate : 0.281861 || at iteration : 10 ||
18 ||| Residual norm : 3.054012e-06 || Convergence rate : 0.284247 || at iteration : 11 ||
19 ||| Residual norm : 8.829512e-07 || Convergence rate : 0.289112 || at iteration : 12 ||
20 ||| Residual norm : 2.563672e-07 || Convergence rate : 0.290353 || at iteration : 13 ||
21 ||| Residual norm : 7.513769e-08 || Convergence rate : 0.293086 || at iteration : 14 ||
22 // =====
23
24 Minimum tol reached a it : 14
Resolution Time multi grid method (CPU): 206.7 sec
26 Final residual norm : 7.513769e-08
Final convergence rate at stop : 0.293086
28 Asymptotic rate rho = 0.230785 , optimal results for tau = 2/(lambda_max - lambda_min) ^ = (2/(2 - rho)) = 1.130445
If chosen , the new relaxation coefficient should give a theoretical rho = 0.130445
30
31 Convergence quality analysis :
32 ---> Direct stability criterion : eps = ||r||/||b|| < O(u)*||A||_2*||u||/||b|| ?
33 ---> Relative error : eps_err = 1.565708e-09 || convergence number : eps = 1.559584e-11
34 ---> eps = 1.559584e-11 < u = 1.1e-6 ?
36 ----- The stability criterion is FULFILLED -----
37 // =====

```

Résultats pour $m = 65$

```
// =====
2  Generating multi-grid problem : maximum coarse depth m_c = 33
4  fine matrix m =      65      n =      3289  nnz =      16113

6  Smoothing method : Gauss-Seidel || Iteration / smoothing : 4 || Direct stability check ON || Relaxation ON - tau =
   1.000000 ||

8  // =====
10 ||| Residual norm : 1.066055e+00 || Convergence rate : 0.000000 || at iteration : 1 ||
11 ||| Residual norm : 1.964073e-01 || Convergence rate : 0.184238 || at iteration : 2 ||
12 ||| Residual norm : 5.632177e-02 || Convergence rate : 0.286760 || at iteration : 3 ||
13 ||| Residual norm : 1.832094e-02 || Convergence rate : 0.325291 || at iteration : 4 ||
14 ||| Residual norm : 6.360567e-03 || Convergence rate : 0.347175 || at iteration : 5 ||
15 ||| Residual norm : 2.309117e-03 || Convergence rate : 0.363036 || at iteration : 6 ||
16 ||| Residual norm : 8.666095e-04 || Convergence rate : 0.375299 || at iteration : 7 ||
17 ||| Residual norm : 3.332118e-04 || Convergence rate : 0.384501 || at iteration : 8 ||
18 ||| Residual norm : 1.302939e-04 || Convergence rate : 0.391024 || at iteration : 9 ||
19 ||| Residual norm : 5.151803e-05 || Convergence rate : 0.395399 || at iteration : 10 ||
20 ||| Residual norm : 2.051430e-05 || Convergence rate : 0.398196 || at iteration : 11 ||
21 ||| Residual norm : 8.203967e-06 || Convergence rate : 0.399915 || at iteration : 12 ||
22 ||| Residual norm : 3.289192e-06 || Convergence rate : 0.400927 || at iteration : 13 ||
23 ||| Residual norm : 1.320582e-06 || Convergence rate : 0.401491 || at iteration : 14 ||
24 ||| Residual norm : 5.305768e-07 || Convergence rate : 0.401775 || at iteration : 15 ||
25 ||| Residual norm : 2.132310e-07 || Convergence rate : 0.401885 || at iteration : 16 ||
26 ||| Residual norm : 8.569497e-08 || Convergence rate : 0.401888 || at iteration : 17 ||

28 // =====
29 Minimum tol reached a it : 17
30 Resolution Time multi grid method (CPU): 0.3 sec
31 Final residual norm : 8.569497e-08
32 Final convergence rate at stop : 0.401888
33 Asymptotic rate rho = 0.363036 , optimal results for tau = 2/(lambda_max - lambda_min) ^= (2/(2 - rho)) = 1.221774
34 If chosen , the new relaxation coefficient should give a theoritical rho = 0.221774

36 Convergence quality analysis :
37 ---> Direct stability criterion : eps = ||r||/||b|| < O(u)*||A||_2*||u||/||b|| ?
38 ---> Relative error : eps_err = 8.792118e-09 || convergence number : eps = 4.434477e-10
39 ---> eps = 4.434477e-10 < u = 1.1e-6 ?

40 ----- The stability criterion is FULFILLED -----
42 // =====
```

```
// =====
2  Generating multi-grid problem : maximum coarse depth m_c = 33
4  fine matrix m =      65      n =      3289  nnz =      16113

6  Smoothing method : Gauss-Seidel || Iteration / smoothing : 4 || Direct stability check ON || Relaxation ON - tau =
   1.221774 ||

8  // =====
10 ||| Residual norm : 1.066055e+00 || Convergence rate : 0.000000 || at iteration : 1 ||
11 ||| Residual norm : 1.542471e-01 || Convergence rate : 0.144690 || at iteration : 2 ||
12 ||| Residual norm : 2.824778e-02 || Convergence rate : 0.183133 || at iteration : 3 ||
13 ||| Residual norm : 5.924517e-03 || Convergence rate : 0.209734 || at iteration : 4 ||
14 ||| Residual norm : 1.323038e-03 || Convergence rate : 0.223316 || at iteration : 5 ||
15 ||| Residual norm : 3.191593e-04 || Convergence rate : 0.241232 || at iteration : 6 ||
16 ||| Residual norm : 7.962207e-05 || Convergence rate : 0.249474 || at iteration : 7 ||
17 ||| Residual norm : 2.057722e-05 || Convergence rate : 0.258436 || at iteration : 8 ||
18 ||| Residual norm : 5.383768e-06 || Convergence rate : 0.261637 || at iteration : 9 ||
19 ||| Residual norm : 1.427101e-06 || Convergence rate : 0.265075 || at iteration : 10 ||
20 ||| Residual norm : 3.795555e-07 || Convergence rate : 0.265963 || at iteration : 11 ||
21 ||| Residual norm : 1.013642e-07 || Convergence rate : 0.267060 || at iteration : 12 ||
22 ||| Residual norm : 2.707582e-08 || Convergence rate : 0.267114 || at iteration : 13 ||

24 // =====
25 Minimum tol reached a it : 13
26 Resolution Time multi grid method (CPU): 0.2 sec
27 Final residual norm : 2.707582e-08
28 Final convergence rate at stop : 0.267114
29 Asymptotic rate rho = 0.249474 , optimal results for tau = 2/(lambda_max - lambda_min) ^= (2/(2 - rho)) = 1.142514
30 If chosen , the new relaxation coefficient should give a theoritical rho = 0.142514

32 Convergence quality analysis :
33 ---> Direct stability criterion : eps = ||r||/||b|| < O(u)*||A||_2*||u||/||b|| ?
34 ---> Relative error : eps_err = 2.777921e-09 || convergence number : eps = 1.401099e-10
35 ---> eps = 1.401099e-10 < u = 1.1e-6 ?

36 ----- The stability criterion is FULFILLED -----
38 // =====
```