

Méthodes itératives de Krylov III

Gérard MEURANT

Novembre 2014

- 1 Introduction
- 2 Cholesky incomplet
- 3 Inverses approchés
- 4 Exemples

Préconditionnement

Au lieu de

$$Ax = b$$

on résout

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b \quad \text{ou} \quad AM^{-1}(Mx) = b$$

ou

$$M^{-\frac{1}{2}}AM^{-\frac{1}{2}}y = M^{-\frac{1}{2}}b$$

dans le cas symétrique

“ M^{-1} ” A doit avoir de meilleures propriétés que A pour la convergence

Propriétés souhaitées

Supposons A SPD grande et creuse

- M SPD
- M creuse
- M facile et peu coûteuse à construire
- $Mz = r$ facile à résoudre
- “bonne” distribution des valeurs propres de $M^{-1}A$

Dans le cas non symétrique on n'a pas besoin de 1)

Idée la plus simple : Jacobi

$$M = D = \text{diag}(A)$$

Autre idée simple : SSOR (Axelsson)

$$A = D + L + L^T$$

$$M = \frac{1}{\omega(2-\omega)}(D + \omega L)D^{-1}(D + \omega L^T)$$

$0 < \omega < 2$, D diagonale, L triangulaire inférieure (stricte)

Pb : choix de ω ?

Décomposition de Cholesky incomplète

(..., Meijerink & Van der Vorst (1977),...)

A SPD

Cette méthode est basée sur la décomposition (complète) de
Cholesky

A chaque étape de la factorisation on néglige des éléments (selon leurs positions)



André-Louis Cholesky
1875-1918

Soit $G = \{(i,j), i > j\}$ un ensemble d'indices donné

$$A = L\Sigma L^T - R$$

L triangulaire inférieure avec $\ell_{i,i} = 1$ et Σ diagonale, R est le reste (que l'on ne calcule pas)

On construit L t.q. $\ell_{i,j} = 0$ si $(i,j) \notin G$

Première étape :

$$A = A_1 = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_1^T \\ a_1 & B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{1,1} & b_1^T \\ b_1 & B_1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & r_1^T \\ r_1 & 0 \end{pmatrix} = M_1 - R_1$$

$$a_1 = b_1 - r_1$$

$$(b_1)_i = 0, \text{ if } (i, 1) \notin G \Rightarrow (r_1)_i = -(a_1)_i$$

$$(b_1)_i = (a_1)_i, \text{ if } (i, 1) \in G \Rightarrow (r_1)_i = 0$$

On factorise M_1 :

$$M_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \ell_1 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1,1} & 0 \\ 0 & A_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \ell_1^T \\ 0 & I \end{pmatrix} = L_1 \Sigma_1 L_1^T$$

$$\ell_1 = \frac{b_1}{a_{1,1}}$$

$$A_2 = B_2 - \frac{1}{a_{1,1}} b_1 b_1^T$$

On utilise le même procédé sur A_2 :

$$A_2 = \begin{pmatrix} a_{2,2}^{(2)} & a_2^T \\ a_2 & B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{2,2}^{(2)} & b_2^T \\ b_2 & B_2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & r_2^T \\ r_2 & 0 \end{pmatrix} = M_2 - R_2$$

où b_2 est obtenu depuis a_2 en annulant les éléments $(i, 2)$ dont les indices n'appartiennent pas à G

$$L_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \ell_2 & I \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

Après deux étapes :

$$A = L_1 L_2 \Sigma_2 L_2^T L_1^T - L_1 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & R_2 \end{pmatrix} L_1^T - R_1$$

$$L_1 L_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \ell_1 & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \ell_2 & I \end{pmatrix} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad L_1 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & R_2 \end{pmatrix} L_1^T = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & R_2 \end{pmatrix}$$

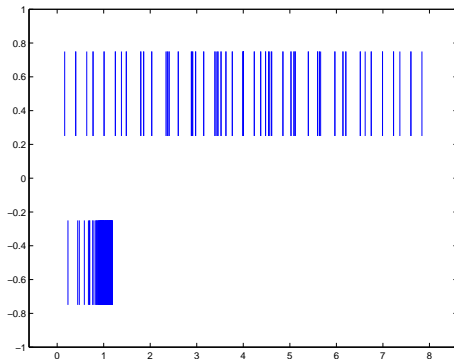
et on continue...

Cet algorithme a construit une décomposition complète de

$$M = A + R$$

- ▶ Il faut que les pivots (divisions) soient non nuls
- ▶ C'est vrai pour certaines classes de matrices
- ▶ M-matrices et H-matrices
- ▶ Ce n'est pas le cas pour toutes les matrices SPD
- ▶ On peut donc trouver des cas où ça ne marche pas...

On ne garde que 3 diagonales dans L



Poisson, $m = 10$, $n = 100$, valeurs propres, A et $IC(1,1)(A)$

- ▶ L'intérêt est que la structure de L est connue a priori
- ▶ Mais il existe de nombreuses variantes de Cholesky incomplet
- ▶ - On peut garder ou négliger les éléments suivants leur valeur absolue
- ▶ - Et ne conserver qu'un nombre fixé d'éléments sur chaque ligne
- ▶ - On peut aussi changer la numérotation des inconnues
- ▶ Pb : IC n'est pas très parallèle
- ▶ Pour les matrices non symétriques : ILU
- ▶ - Pb : pivotage et stabilité

Inverses approchés

- ▶ Huckle et Grote (1994)
- ▶ Gould et Scott (1995)
- ▶ Chow et Saad (1994–1995)
- ▶ Benzi (1995–1996)

On calcule directement M^{-1} et on veut $M^{-1}A$ “qui ressemble” à I

On calcule $C = M^{-1}$ qui minimise

$$\|AC - I\| \text{ ou } \|CA - I\|$$

En général on choisit la norme de Frobenius :

$$\|AC - I\|_F^2 = \sum_{k=1}^n \|(AC - I)e_k\|^2$$

e_k k-ième colonne de I

AINV (Benzi)

A SPD

Si $Z = [z_1, z_2, \dots, z_n]$ est un ensemble de directions conjuguées pour A

$$Z^T A Z = D$$

D diagonale et $A^{-1} = Z D^{-1} Z^T$

Les directions sont calculées par Gram-Schmidt appliqué à

v_1, v_2, \dots, v_n

Si $V = [v_1, v_2, \dots, v_n] = I$, Z est triangulaire supérieure

- Pour préserver la structure creuse, on annule les remplissages selon leur position ou leur valeur
- Il existe une version “robuste” **SAINV** (Benzi, Cullum et Tuma)
- La méthode se généralise aux matrices non symétriques en considérant $Z = [z_1, \dots, z_n]$ et $W = [w_1, \dots, w_n]$ tels que

$$W^T A Z = D$$

Exemples de systèmes symétriques

Poisson 2D, $m=50$, $n=2500$, $\text{epss}=10^{-6}$, r_k résidu, ε_k erreur

méthode	nb it	$\ r_k\ $	$\ \varepsilon_k\ $
CG, M=I	127	$2.6037 \cdot 10^{-5}$	$8.4147 \cdot 10^{-5}$
CG, M=diag	127	$2.6037 \cdot 10^{-5}$	$8.4147 \cdot 10^{-5}$
CG, M=IC(0)	39	$1.2263 \cdot 10^{-5}$	$5.2022 \cdot 10^{-4}$
CG, M=SSOR $\omega = 1$	46	$2.2925 \cdot 10^{-5}$	$1.4882 \cdot 10^{-4}$
CG, M=AINV $\tau = 0.05$	30	$1.0079 \cdot 10^{-5}$	$4.0654 \cdot 10^{-4}$
CG, M=ml 'gs,b,st,st' $\tau = 0.05$	4	$6.0406 \cdot 10^{-6}$	$3.2352 \cdot 10^{-5}$
CG, M=ml 'ic,b,st,st' $\tau = 0.05$	4	$2.3068 \cdot 10^{-7}$	$1.5569 \cdot 10^{-6}$

Pb 2

- ▶ Problème 2D avec coefficients discontinus
- ▶ Les coefficients de diffusion en x et y sont 1 excepté dans $[1/4, 3/4]^2$ où la valeur est 1000
- ▶ Pour $m = 50, n = 2500, \lambda_{min} = 8.83 \cdot 10^{-3}, \lambda_{max} = 7.97 \cdot 10^3, \kappa = 9.03 \cdot 10^5$

Pb 2 $m=50$, $n=2500$, $\text{epss}=10^{-6}$

méthode	nb it	$\ r_k\ $	$\ \varepsilon_k\ $
CG, M=I	1551	$2.6211 \cdot 10^{-5}$	$2.7909 \cdot 10^{-5}$
CG, M=diag	166	$2.4297 \cdot 10^{-5}$	$2.3925 \cdot 10^{-5}$
CG, M=IC(0)	53	$1.0033 \cdot 10^{-5}$	$1.4868 \cdot 10^{-4}$
CG, M=SSOR $\omega = 1$	65	$2.0698 \cdot 10^{-5}$	$3.0055 \cdot 10^{-5}$
CG, M=AINV $\tau = 0.05$	37	$7.6959 \cdot 10^{-6}$	$1.4915 \cdot 10^{-4}$
CG, M=SAINV $\tau = 0.05$	34	$7.7236 \cdot 10^{-6}$	$8.6639 \cdot 10^{-5}$
CG, M=ml 'gs,b,st,st' $\tau = 0.05$	8	$3.1880 \cdot 10^{-7}$	$3.3869 \cdot 10^{-6}$
CG, M=ml 'ic,b,st,st' $\tau = 0.05$	6	$7.5153 \cdot 10^{-6}$	$3.8023 \cdot 10^{-5}$

Pb 3

- Problème 2D
- Les coefficients de diffusion en x and y sont égaux à

$$\frac{1}{(2 + p \sin \frac{x}{\eta})(2 + p \sin \frac{y}{\eta})}$$

avec $p = 1.99$ et $\eta = 0.01$

- Pour $m = 50$, $n = 2500$, $\lambda_{min} = 1.81 \cdot 10^{-2}$, $\lambda_{max} = 8.86 \cdot 10^3$,
 $\kappa = 4.89 \cdot 10^5$

Pb 3 $m=50$, $n=2500$, $\text{epss}=10^{-6}$

méthode	nb it	$\ r_k\ $	$\ \varepsilon_k\ $
CG, M=I	2013	$2.3420 \cdot 10^{-5}$	$4.1623 \cdot 10^{-5}$
CG, M=diag	436	$2.5696 \cdot 10^{-5}$	$3.1074 \cdot 10^{-5}$
CG, M=IC(0)	83	$2.0339 \cdot 10^{-5}$	0.0013
CG, M=SSOR $\omega = 1$	214	$2.8148 \cdot 10^{-5}$	$5.3301 \cdot 10^{-5}$
CG, M=AINV $\tau = 0.05$	47	$1.6103 \cdot 10^{-5}$	$7.8652 \cdot 10^{-4}$
CG, M=SAINV $\tau = 0.05$	40	$1.4228 \cdot 10^{-5}$	$5.8608 \cdot 10^{-4}$
CG, M=ml 'gs,b,st,st' $\tau = 0.05$	23	$1.3891 \cdot 10^{-5}$	0.0010
CG, M=ml 'ic,b,st,st' $\tau = 0.05$	13	$0.609 \cdot 10^{-5}$	$6.3135 \cdot 10^{-4}$

Bcsstk01 (Matrix Market), $n=48$, $\text{nnz}=400$, $\kappa(A) = 8.82 \cdot 10^5$,
 $\text{epss}=10^{-6}$

méthode	nb it	$\ r_k\ $	$\ \varepsilon_k\ $
CG, M=I	139	$3.8910 \cdot 10^{-6}$	$7.4606 \cdot 10^{-13}$
CG, M=diag	48	$1.9818 \cdot 10^{-6}$	$5.3852 \cdot 10^{-15}$
CG, M=IC(0)	16	$9.3495 \cdot 10^{-7}$	$6.2030 \cdot 10^{-14}$
CG, M=SSOR $\omega = 1$	25	$2.2969 \cdot 10^{-7}$	$9.7950 \cdot 10^{-16}$
CG, M=AINV $\tau = 0.05$	13	$1.3292 \cdot 10^{-9}$	$8.7294 \cdot 10^{-9}$
CG, M=SAINV $\tau = 0.1$	13	$2.4287 \cdot 10^{-9}$	$1.0611 \cdot 10^{-8}$
CG, M=ml 'gs,b,st,st' $\tau = 0.05$	10	$1.0272 \cdot 10^{-9}$	$1.0107 \cdot 10^{-8}$
CG, M=ml 'ic,b,st,st' $\tau = 0.05$	9	$1.9440 \cdot 10^{-9}$	$5.6457 \cdot 10^{-9}$

Nos1 (Matrix Market), $n=237$, $nnz=1017$, $\kappa(A) = 1.99 \cdot 10^7$,
 $epss=10^{-6}$

méthode	nb it	$\ r_k\ $	$\ \varepsilon_k\ $
CG, M=I	3188	$1.7741 \cdot 10^{-6}$	$9.5519 \cdot 10^{-12}$
CG, M=diag	491	$8.1794 \cdot 10^{-6}$	$4.1244 \cdot 10^{-11}$
CG, M=IC(0) *	3077	$1.2460 \cdot 10^{-8}$	$1.1284 \cdot 10^{-5}$
CG, M=SSOR $\omega = 1$	242	$6.7752 \cdot 10^{-6}$	$6.3632 \cdot 10^{-11}$
CG, M=AINV $\tau = 0.05$	68	$6.4919 \cdot 10^{-9}$	$3.9781 \cdot 10^{-8}$
CG, M=SAINV $\tau = 0.05$	59	$1.1979 \cdot 10^{-8}$	$9.3062 \cdot 10^{-8}$
CG, M=ml 'gs,b,st,st' $\tau = 0.05$	5	$4.3710 \cdot 10^{-9}$	$6.5420 \cdot 10^{-7}$
CG, M=ml 'ic,b,st,st' $\tau = 0.05$ *	282	$8.2578 \cdot 10^{-9}$	$3.5641 \cdot 10^{-8}$

* Pb avec la décomposition incomplète

Comme on l'a vu on peut aussi utiliser comme préconditionnement la méthode **multigrille**