# Ecole d'Automne Informatique Scientifique : Systèmes Linéaires III

ANGD *Informatique Scientifique pour le Calcul*

Pascal Hénon

Octobre 2008

# Plan

# Plan

# Introduction aux méthodes de Krylov préconditionnées

## Méthode de Krylov :

On cherche une approximation de la solution de A.x = b dans un sous-espace "de Krylov" :

$$K(m, b) = span\{b, A.b, .., A^{m-1}.b\}$$

$$x_m = \alpha_1.b + \alpha_2.A.b + .. + \alpha_{m-1}.A^{m-1}.b$$

telle que $b - A.x_m \perp (L)_m$ (condition de Petrov-Galerkin).

Ceci revient à dire que l'on cherche un polynôme $\mathcal{P}$ tel que :

$$A^{-1}.b \approx \mathcal{P}(A).b$$

# Introduction aux méthodes de Krylov préconditionnées

Il existe beaucoup de méthode itérative de Krylov. Les variations résident généralement dans :

- le choix de $\mathcal{L}_m$,
- le calcul d'une base pour $K(m, b)$,
- *restart* ...

exemple : GMRES ($\mathcal{L}_m = A.K_m$), Gradient Conjugué ($\mathcal{L}_m = K_m$), BICG ($\mathcal{L}_m = K_{A^t}(b, m)$), ...

**Référence**

*Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. Yousef Saad

# Introduction aux méthodes de Krylov préconditionnées

## Méthodes de Krylov :

*Trouver itérativement une solution approximée (ex : dans Krylov, l'espace de recherche est augmenté à chaque itération)*

La convergence dépend du nombre de conditionnement :

$$||A||_p||A^{-1}||_p$$

Méthode de préconditionnement : On transforme le système à l'aide d'un opérateur linéaire $M$ tel que le nouveau système ait un meilleur conditionnement.

Plusieurs variantes sont possibles :

- précond. à gauche : $M^{-1}.A.x = M^{-1}.b$ ;
- précond. à droite : $A.M^{-1}u = b$, $x = M^{-1}.u$ ;
- précond. découpé (cas sym.) : $M^{-1}.A.M^{-t}.u = M^{-1}.b$, $x = M^{-1}.u$ ;

# Introduction aux méthodes de Krylov préconditionnées

- En règle générale, on ne stocke pas $M^{-1}.A$ sous forme matricielle on utilise $(M^{-1}.A).x = M^{-1}.(A.x)$. Pour que ce soit rentable il faut que $M^{-1}.y$ soit peu coûteux à calculer.
- Usuellement, on cherche $M$ proche de $A$ (i.e. $M^{-1} \approx A^{-1}$).
- $M$ n'est pas nécessairement une matrice ; par exemple $M^{-1}.y$ peut être obtenu par un autre processus itératif.
- Si $M$ varie à chaque itération, on utilise alors une methode dite "flexible".
- On va s'intéresser au préconditionneur utilisant une technique de factorisation incomplète. $M^{-1} : \simeq A^{-1} \approx U^{-1}.L^{-1}$.

# Plan

- Factorisation directe : $A = L.U$
- Factorisation incomplète : $A = L.U + R$

On peut choisir d'imposer des contraintes sur R (remplissage, norme). Cadre théorique réduit : existence factorisation incomplète ? (preuve pour les M-matrices).

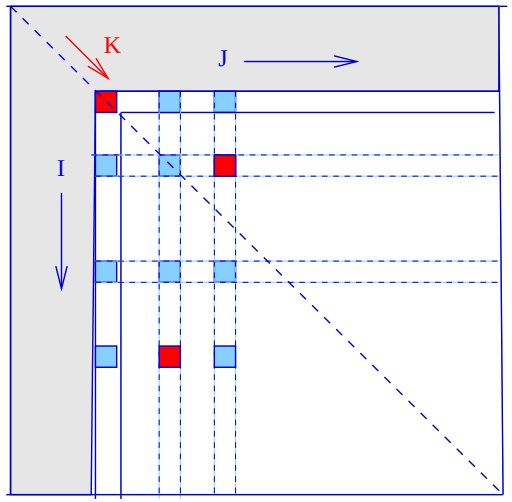
# Principe générale d'une factorisation incomplète

On distingue généralement 2 grandes familles :

- les factorisations dont le remplissage est déterminé à l'avance (de manière statique) ; ces méthodes consistent à déterminer un schéma de remplissage à partir du graphe d'adjacence $G(V, E)$ de la matrice creuse $A$.
- les factorisations dont le remplissage est déterminé au cours de la factorisation (de manière dynamique) ; ces méthodes consistent à ne garder au cours de la factorisation que les termes vérifiant un certain critère numérique (généralement une norme suffisamment élevée).

# Factorisation ILU avec remplissage prédéfini

1 **pour** $(i,j) \in \mathcal{P}$ **faire** $a_{ij} := 0$
2 **pour** $k = 1$ *à* $n-1$ **faire**
3 | **pour** $i = k+1$ *à* $n$ *tq* $(i,k) \notin \mathcal{P}$ **faire**
4 | | $a_{ik} := a_{ik}/a_{kk}$
5 | | **pour** $j = k+1$ *à* $n$ *tq* $(i,j) \notin \mathcal{P}$ **faire**
6 | | | $a_{ij} := a_{ij} - a_{ik} * a_{kj}$
7 | | **fin**
8 | **fin**
9 **fin**



# Factorisation ILU avec remplissage prédéfini

- Généralement, on construit $\mathcal{P}$ en se basant uniquement sur le graphe d'adjacence $G(V, E)$ de $A$ (valeurs numériques pas prises en compte) ;
- Exemple le plus classique : ILU(0), IC(0),
  pour $i > j$ $A_{i,j} = 0 => L_{ij} = 0$ (idem pour U).

# Caractérisation du remplissage dans les méthodes directes

**Théorème**

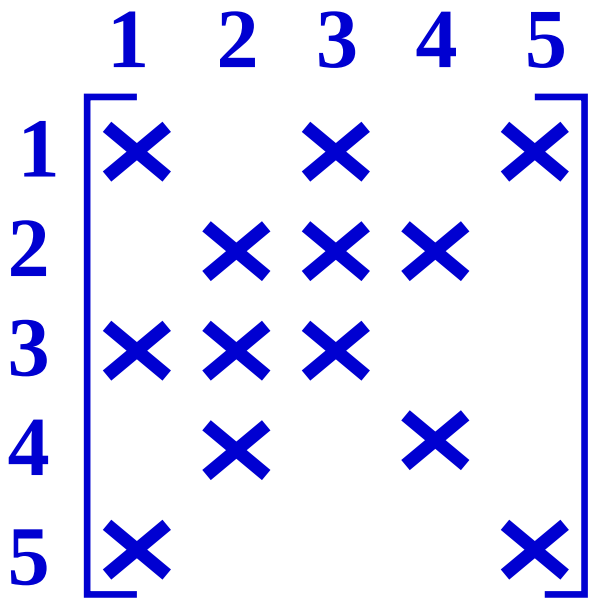
*Un terme nul $a_{ij}$ de $A$ deviendra non nul dans la factorisation $A = L.U$ ssi il existe un chemin allant du sommet $i$ au sommet $j$ en ne passant que par des sommets de plus petit numéro que $i$ et $j$ dans le graphe $G(V, E)$ d'adjacence de $A$.*

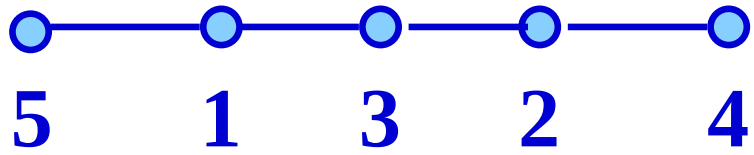
# Caractérisation du remplissage en ILU(k)

**Théorème**

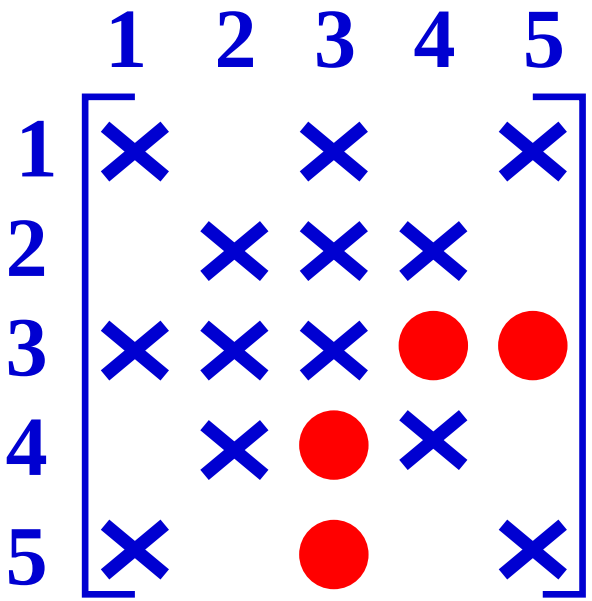
*Un terme nul $a_{ij}$ de $A$ deviendra non nul dans la factorisation ILU(k) de $A$ ssi il existe un plus court chemin de longeur $k+1$ allant du sommet $i$ au sommet $j$ en ne passant que par des sommets de plus petit numéro que $i$ et $j$ dans le graphe $G(V, E)$ d'adjacence de $A$.*

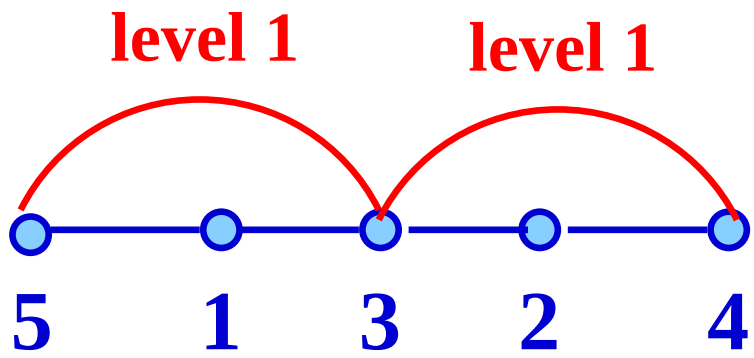
# Factorisation ILU(k)



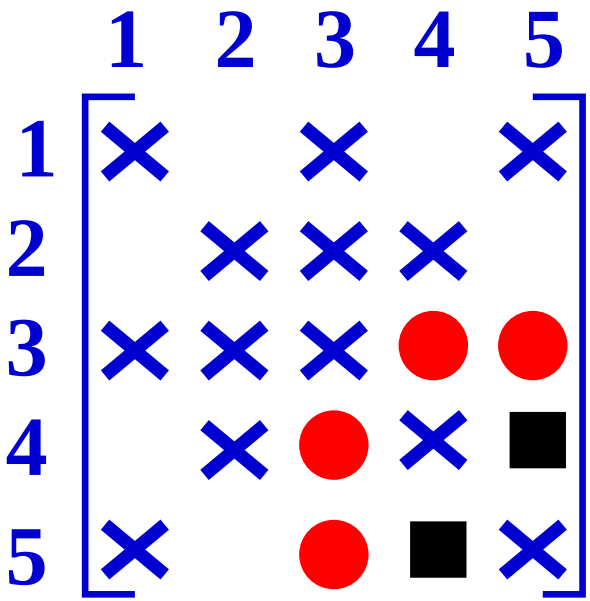



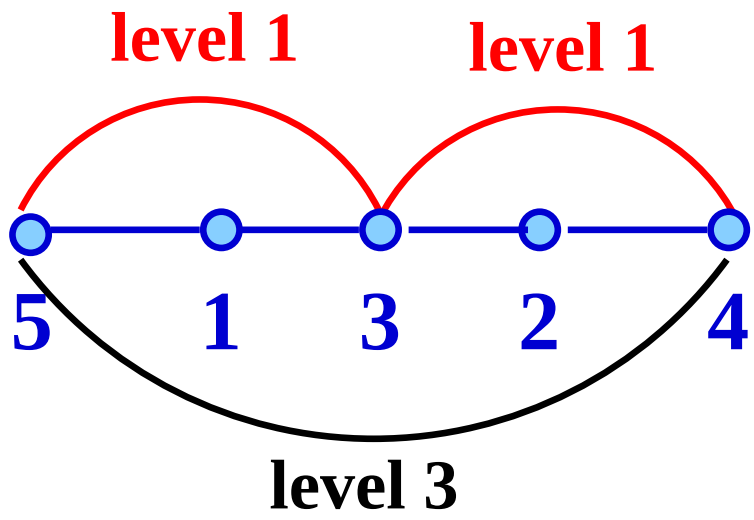
# Factorisation ILU(k)



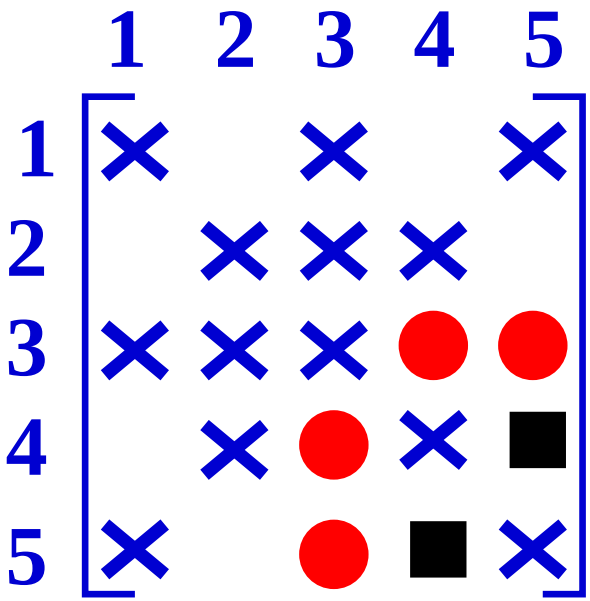
# Factorisation ILU(k)

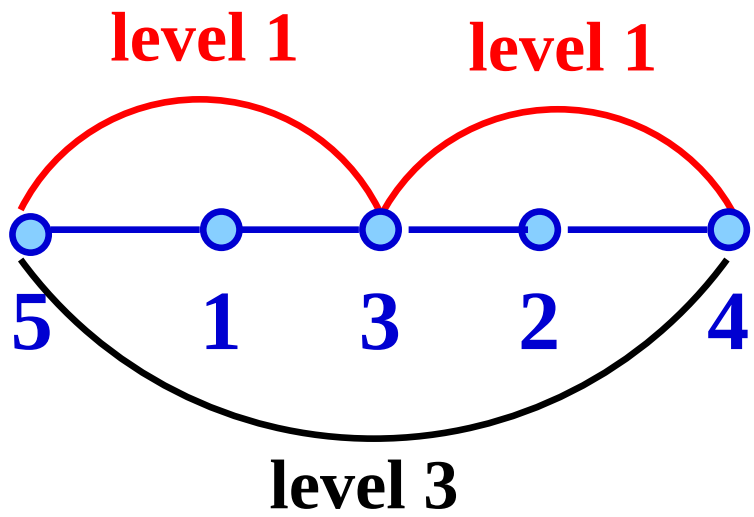


# Factorisation ILU(k)

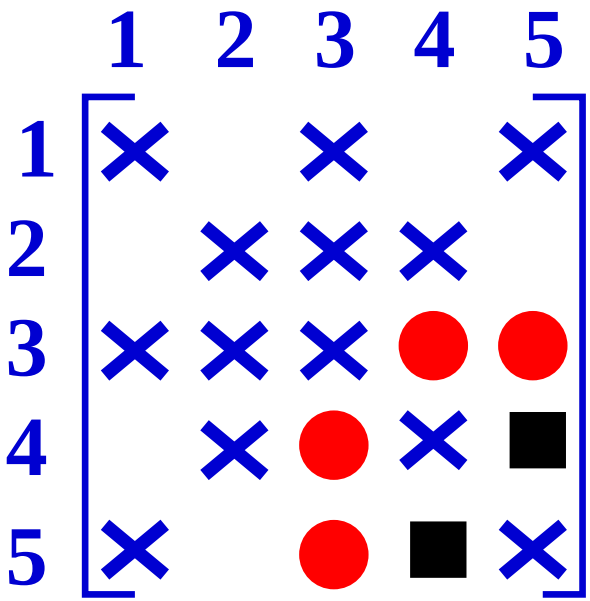
Au cours du processus d'élimination, le niveau de remplissage d'un coefficient $a_{ij}$ est défini par : Initialisalition : $\text{lev}(a_{ij}) = 0$ si $a_{ij} \neq 0$ ; sinon $\text{lev}(a_{ij}) = \text{inf}$

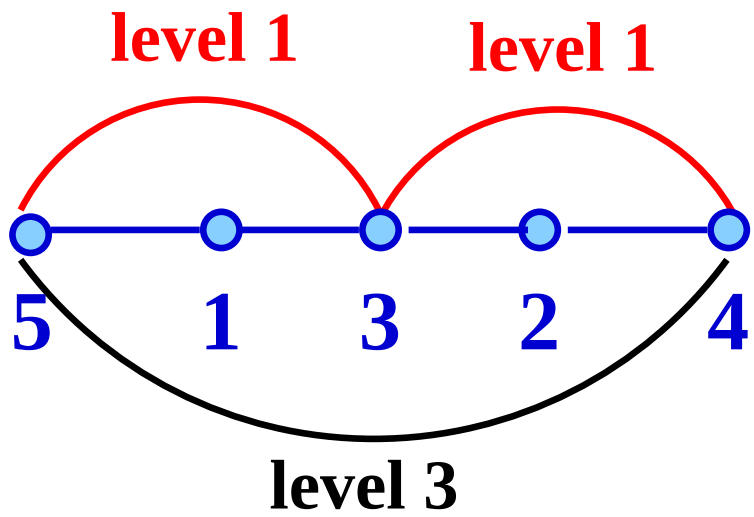


# Factorisation ILU(k)

Au cours du processus d'élimination, le niveau de remplissage d'un coefficient $a_{ij}$ est défini par : $\text{lev}(a_{ij}) = \min(\text{lev}(a_{ij}), \text{lev}(a_{ik}) + \text{lev}(a_{kj}) + 1)$ ;



# Factorisation ILU(k)

```
1  Initialisation
2  pour tous les termes de A faire
3      si a_ij ≠ 0 alors lev(a_ij) := 0
4      si a_ij = 0 alors lev(a_ij) := ∞
5  pour k = 1 à n − 1 faire
6      pour i = k + 1 à n faire
7          si lev(a_ik) ≤ p alors
8              a_ik = a_ik / a_kk
9              pour j = k + 1 à n faire
10                 lev(a_ij) = min(lev(a_ij), lev(a_ik) + lev(a_kj)+1)
11                 si lev(a_ij) ≤ p alors
12                     a_ij := a_ij − a_ik ∗ a_kj
```

# Factorisation symbolique ILU(k) (classique)

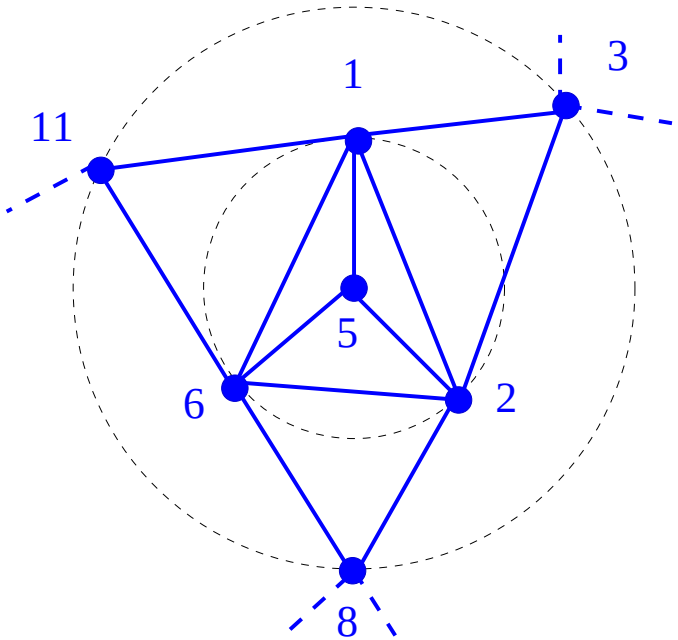
```
1  Initialisation
2  pour tous les termes de A faire
3      si a_ij ≠ 0 alors lev(a_ij) := 0
4      si a_ij = 0 alors lev(a_ij) := ∞
5  pour k = 1 à n − 1 faire
6      pour i = k + 1 à n faire
7          si lev(a_ik) ≤ p alors
8              pour j = k + 1 à n faire
9                  lev(a_ij) = min(lev(a_ij), lev(a_ik) + lev(a_kj)+1)
10                 si lev(a_ij) ≤ p alors
11                     on ajoute (i, j) dans la structure des nz de L,U
```

# Factorisation symbolique ILU(k) (D. Hysom, A. Pothen, 2002)

## Facto. symbolique à partir du graphe d'adj. de A

On peut aussi effectuer la factorisation symbolique en recherche tout les chemins d'élimination de longueurs $k+1$.

D. Hysom and A. Pothen. "A scalable parallel algorithm for incomplete factor preconditioning" SIAM SISC, 22(6) :2194–2215, 2001.

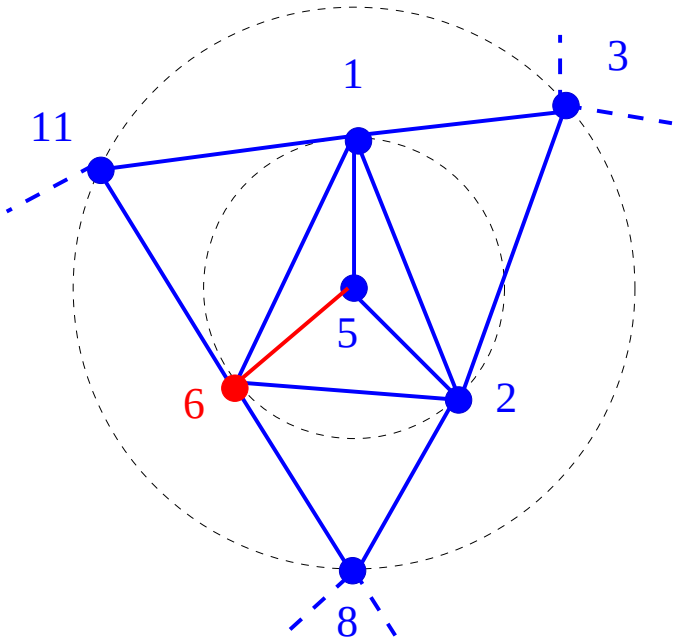


# Factorisation symbolique ILU(k) (D. Hysom, A. Pothen, 2002)

## Facto. symbolique à partir du graphe d'adj. de A

On peut aussi effectuer la factorisation symbolique en recherche tout les chemins d'élimination de longueurs $k+1$.

D. Hysom and A. Pothen. "A scalable parallel algorithm for incomplete factor preconditioning" SIAM SISC, 22(6) :2194–2215, 2001.

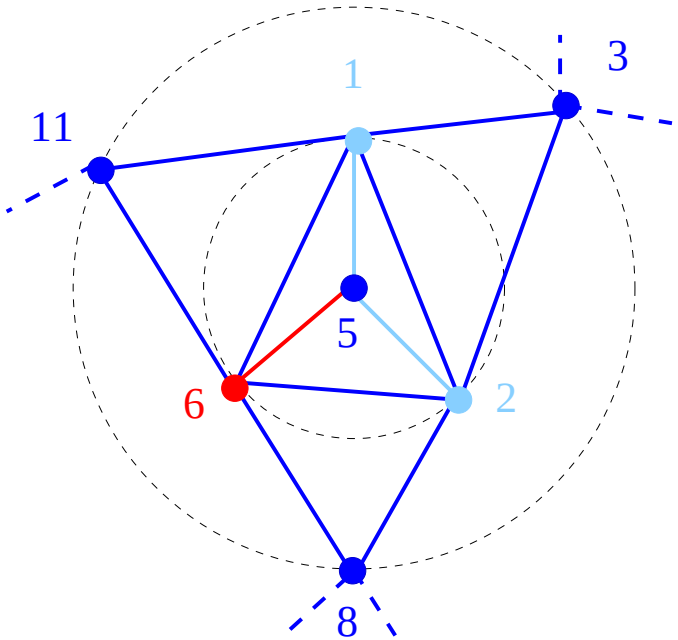


# Factorisation symbolique ILU(k) (D. Hysom, A. Pothen, 2002)

## Facto. symbolique à partir du graphe d'adj. de A

On peut aussi effectuer la factorisation symbolique en recherche tout les chemins d'élimination de longueurs $k+1$.

D. Hysom and A. Pothen. "A scalable parallel algorithm for incomplete factor preconditioning" SIAM SISC, 22(6) :2194–2215, 2001.

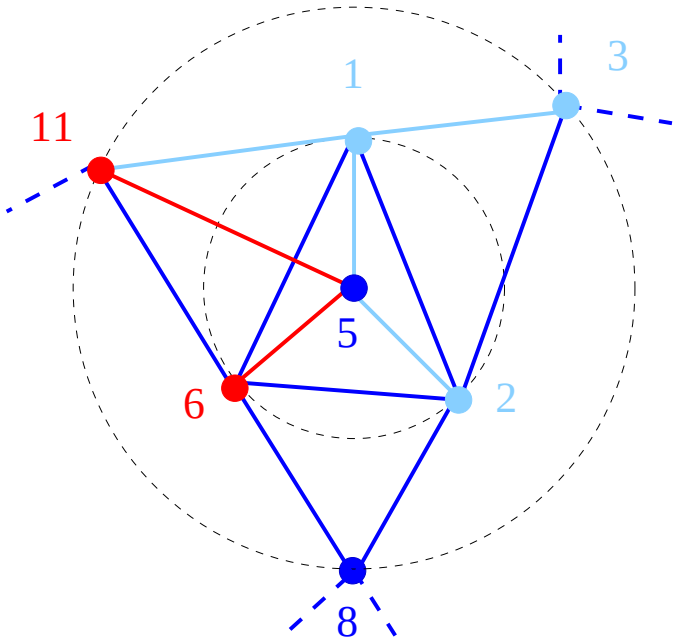


# Factorisation symbolique ILU(k) (D. Hysom, A. Pothen, 2002)

## Facto. symbolique à partir du graphe d'adj. de A

On peut aussi effectuer la factorisation symbolique en recherche tout les chemins d'élimination de longueurs $k+1$.

D. Hysom and A. Pothen. "A scalable parallel algorithm for incomplete factor preconditioning" SIAM SISC, 22(6) :2194–2215, 2001.

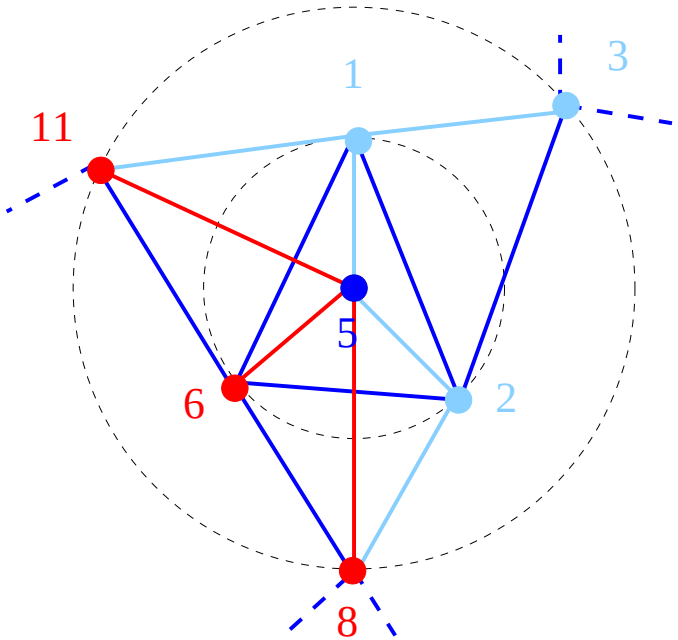


# Factorisation symbolique ILU(k) (D. Hysom, A. Pothen, 2002)

## Facto. symbolique à partir du graphe d'adj. de A

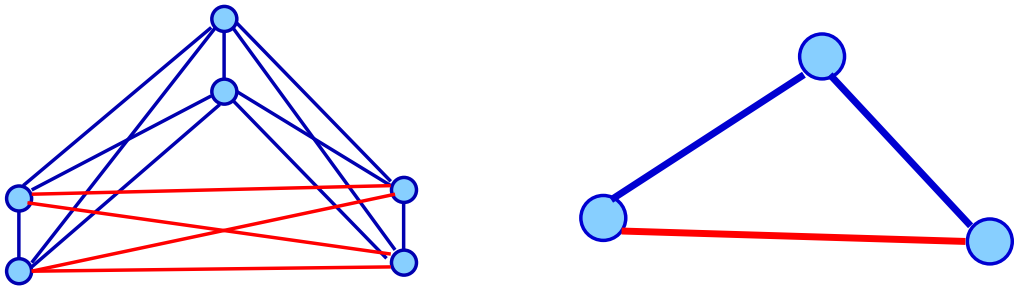
On peut aussi effectuer la factorisation symbolique en recherche tout les chemins d'élimination de longueurs $k+1$.

D. Hysom and A. Pothen. "A scalable parallel algorithm for incomplete factor preconditioning" SIAM SISC, 22(6) :2194–2215, 2001.



# Factorisation symbolique par blocs pour ILU(k)

- La factorisation symbolique par blocs pour le directe est basée sur : $Q(G,P) \longrightarrow Q(G,P)^* = Q(G^*,P)$.
- Existe-t-il une partition telle que $Q(G,P) \longrightarrow Q(G,P)^k = Q(G^k,P)$ ?
- Il en existe au moins 1 type : lorsque le graphe de $A$ peut se quotienter "naturellement".



# Factorisation symbolique par blocs pour ILU(k)

- Ex : dans une discrétisation de type éléments finis, un nœud du maillage représente plusieurs inconnues (ex : degrés de liberté) couplés entre eux ; ainsi chaque nœud du maillage représente une clique dans $G(V, E)$ le graphe d'adj. de $A$. On prend alors $P$ la partition des nœuds.
- La factorisation symbolique a, dans ce cas, une complexité fonction du nombre de nœuds du maillage et non du nombre d'inconnues (au contraire de la factorisation numérique).

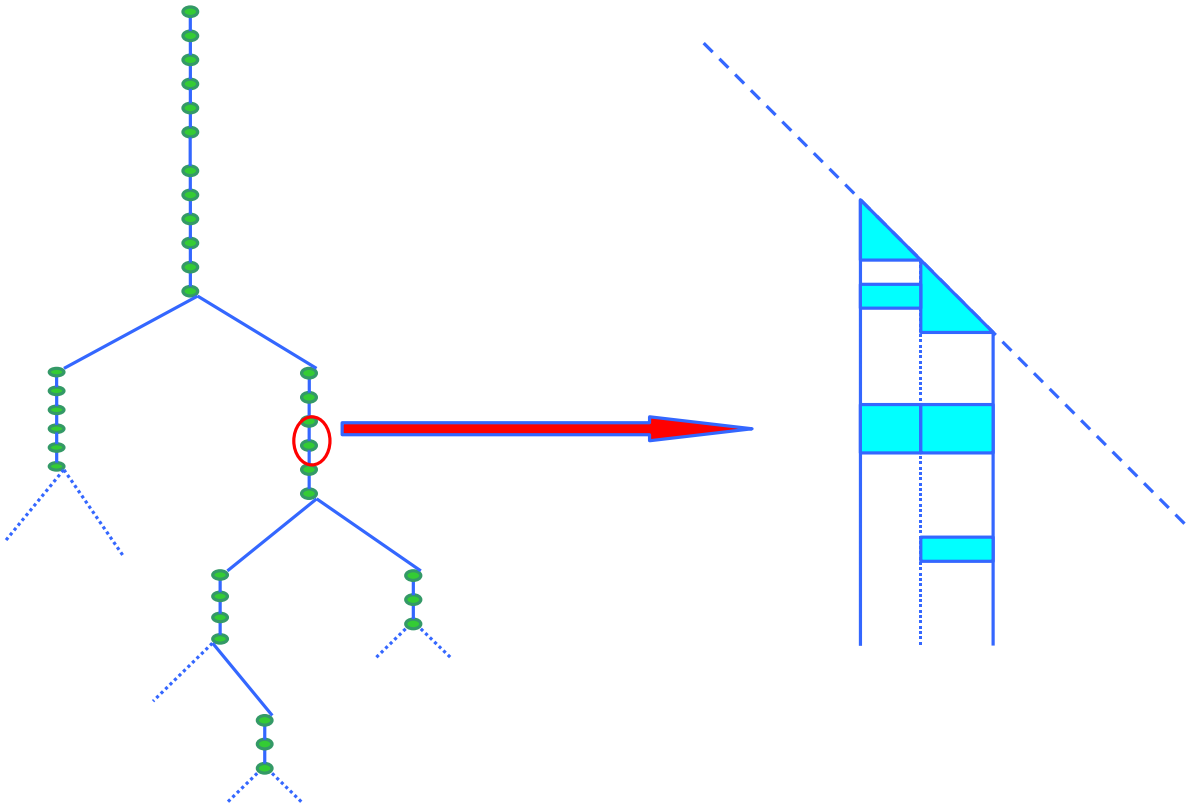
# Factorisation ILU(k) par blocs

L'utilisation d'une structure bloc-dense dans les facteurs permet l'utilisation des routines BLAS niveau 3 (factorisation) et BLAS niveau 2 (résolution).
Si la taille initiale des blocs n'est pas suffisante on peut utiliser un algorithme d'amalgamation (ILU($k$) par blocs dans PaStiX).

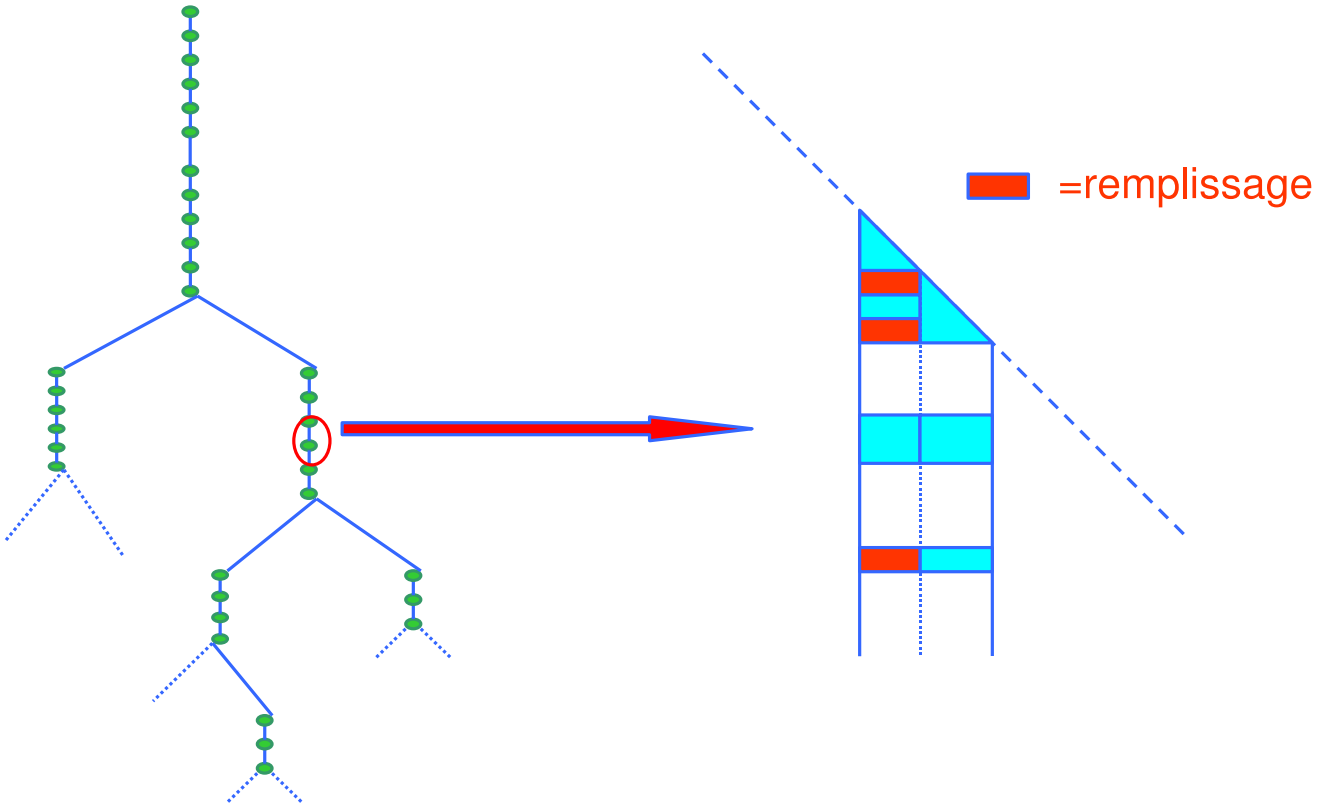
# Algorithme d'amalgamation

Le principe est d'autoriser une certaine tolérance de remplissage supplémentaire (éventuellement stocker des zéros) pour augmenter la taille des blocs denses (augmentation des performances des routines BLAS).

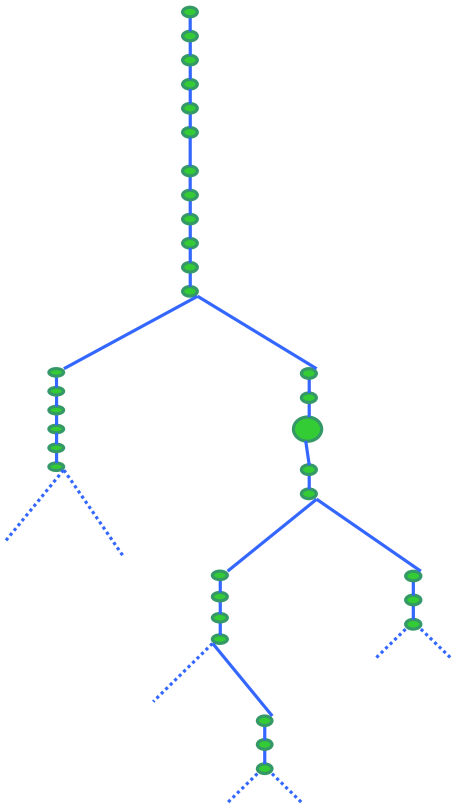
# Algorithme d'amalgamation

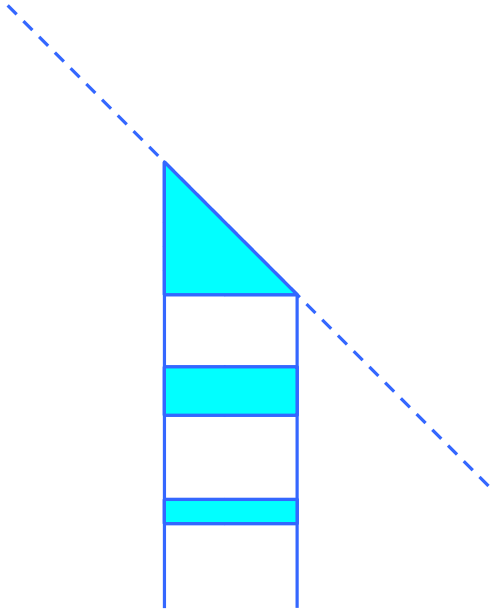


# Algorithme d'amalgamation

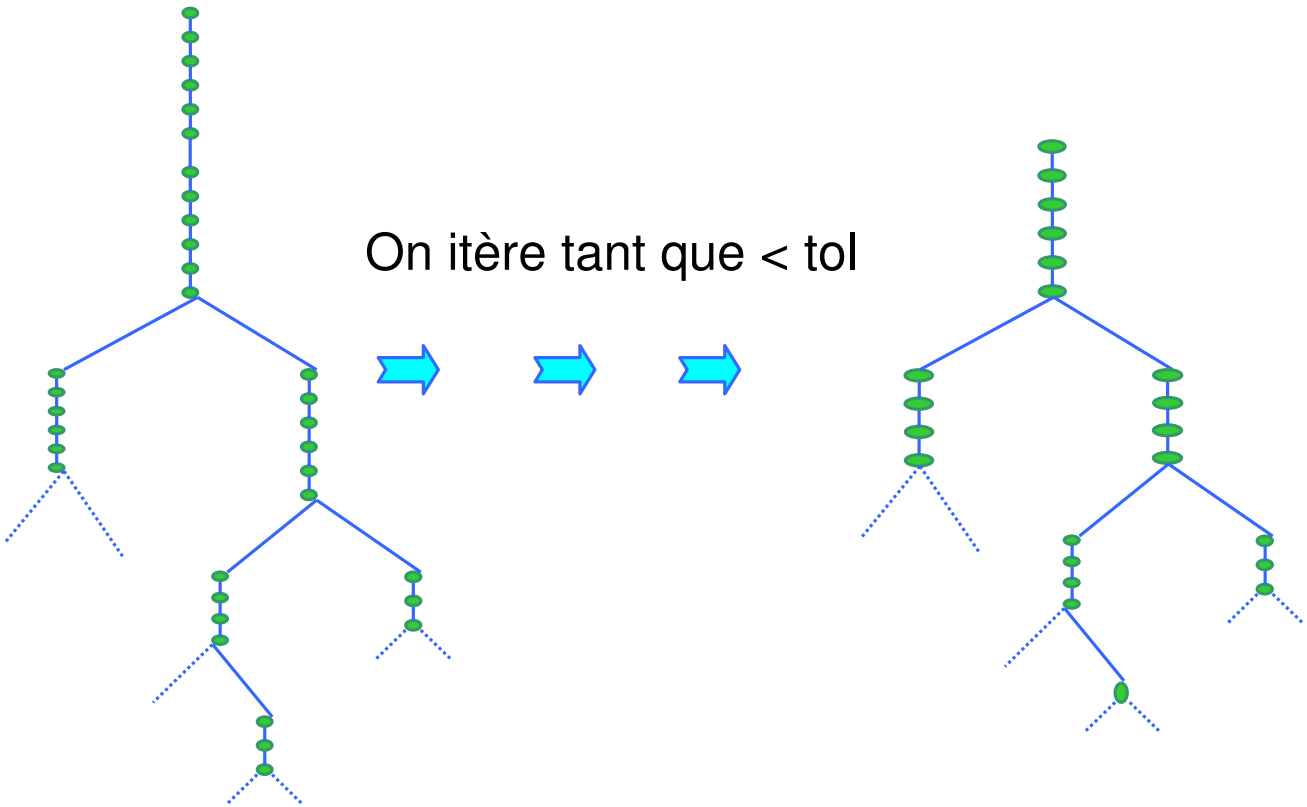


# Algorithme d'amalgamation





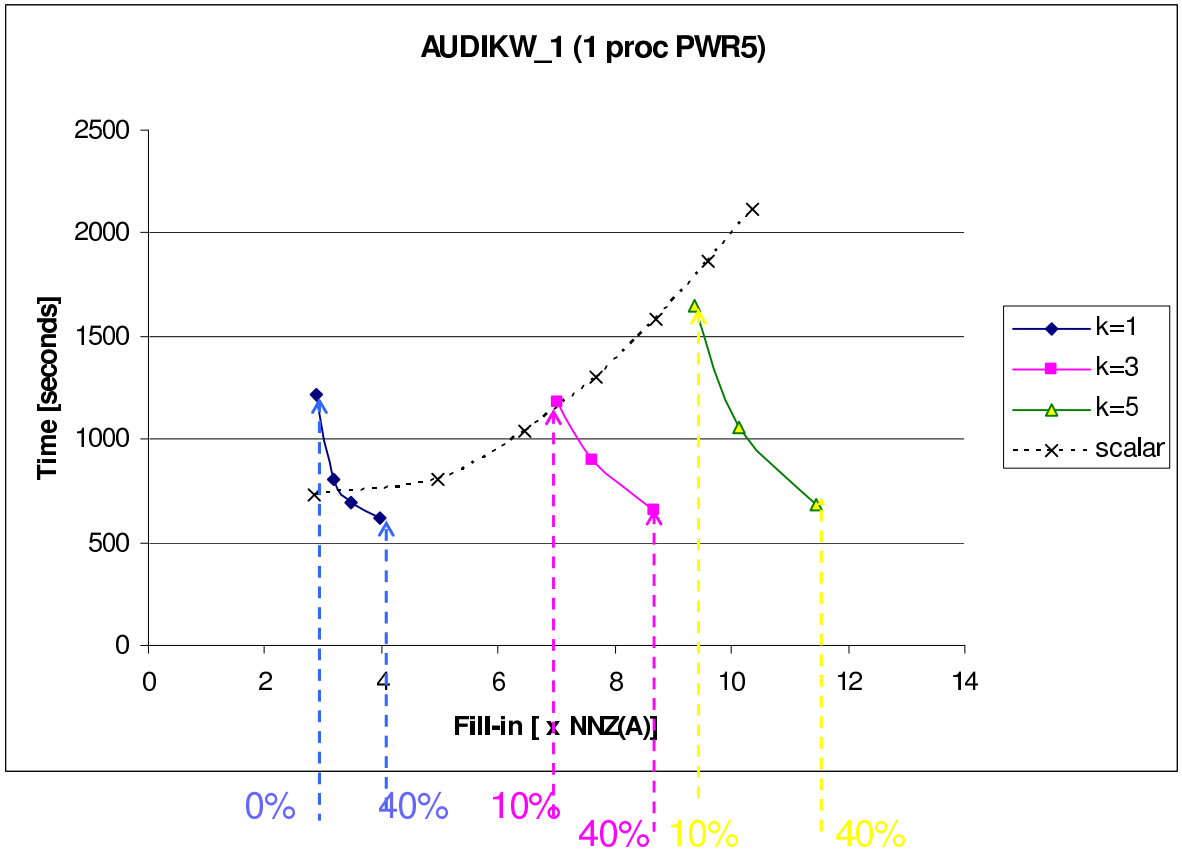
# Algorithme d'amalgamation



# Conditions d'expérience

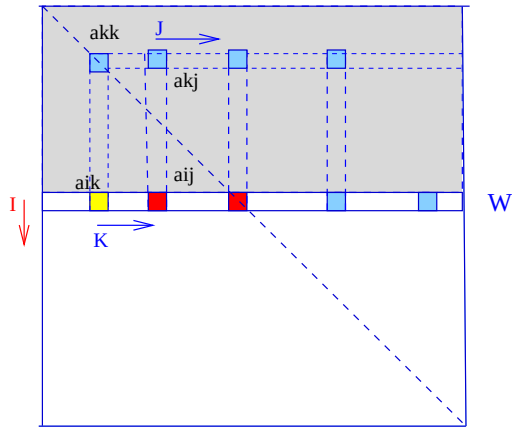
- Résultats obtenus sur IBM power5 + switch "Federation" ;
- Résultats en double précision ;
- Méthode de Krylov GMRES ;
- Précision relative $10^{-7}$
- AUDI_KW1 (collection PARASOL) : matrice symétrique
  $n = 943,695$, $nnz(A) = 39,297,771$

# AUDI_KW1 : PaStiX ILU(k)



# Factorisation ILUT($\tau$, $p$)

1 **pour** $i = 1$ *à* $n$ **faire**
2  $w := a_{i*}$
3  **pour** $k = 1$ *à* $i-1$ *et si* $w_k \neq 0$ **faire**
4  $w_k = w_k / a_{kk}$
5  Appliquer seuillage sur $w_k$ $(R_1)$
6  **si** $w_k \neq 0$ **alors**
7  $w := w - w_k * u_{k*}$
8  **fin**
9  **fin**
10  Appliquer seuillage sur $w$ $(R_2)$
11  $l_{ij} := w_j$ pour $j = 1, ..., i-1$
12  $u_{ij} := w_j$ pour $j = i, ..., n$
13 **fin**




- $R_1$ : $w_k$ est remplacé par 0 si $w_k < \tau.||a_{i*}||_2$.
- $R_2$ : on applique $R_1$ à tous les éléments de $w$. On ne garde que les $p$ plus grands.

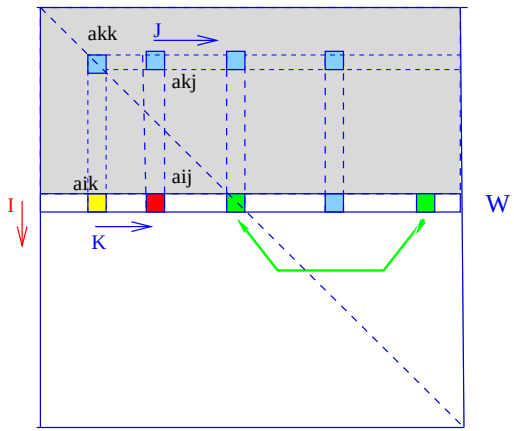
# Factorisation ILUT($\tau$, $p$)

Quelques remarques :

- structure dynamique (allocation par ligne).
- autre algo : version colonne ILUC($\tau$) (utile en symétrique).
- utiliser un *scaling* $D_r.A.D_c$ est souvent utile.
- utilisation du paramètre $p$ “dangeureuse” ;
- possibilité de pivotage à moindre coût.

# Factorisation ILUTP($\tau$, $p$)

1 **pour** $i = 1$ *à* $n$ **faire**
2  $w := a_{i*}$
3  **pour** $k = 1$ *à* $i-1$ *et si* $w_k \neq 0$ **faire**
4  $w_k = w_k / a_{kk}$
5  Appliquer seuillage sur $w_k$ $(R_1)$
6  **si** $w_k \neq 0$ **alors**
7  $w := w - w_k * u_{k*}$
8  **fin**
9  **fin**
10  Appliquer seuillage sur $w$ $(R_2)$
11  Echanger $w_i$ avec $w_{max} = max_{k>i}(w_k)$
12  $l_{ij} := w_j$ pour $j = 1, ..., i-1$
13  $u_{ij} := w_j$ pour $j = i, ..., n$
14 **fin**




- $R_1$ : $w_k$ est remplacé par 0 si $w_k < \tau.||a_{i*}||_2$.
- $R_2$ : on applique $R_1$ à tous les éléments de $w$. On ne garde

# Renumérotation des inconnues

La renumérotation des inconnues influence grandement les résultats de convergence :

- Pour ILU(0), parfois mieux de rien faire !
- Reverse Cuthill-McKee (RCM) pour remplissage "moyen" (petit $k$ dans ILU($k$) ou grand $\tau$ petit $p$ dans ILU($\tau$,$p$) )
- Dissection emboîtée ( + Minimum degré ) pour remplissage plus important (comme en direct).

voir Benzi, Szyld, Duin, "Orderings for incomplete factorization preconditioning of nonsymmetric problems", SIAM SISC, 17(1996), pp1135-1149.

# Remarques sur les factorisations ILU

- Factorisation symbolique réutilisable en ILU($k$).
- Robustesse depend du remplissage admis.
- Parallélisation "brute" difficile (sauf ILU(0)) :
  ▶ on les utilise souvent en tant que préconditionneurs locaux dans des méthodes de type DD (e.g. méthodes type Schwarz).
  ▶ on ajoute des contraintes de remplissages supplémentaires pour faciliter le parallélisme.

# Plan

# Plan

# Le complément de Schur

En distinguant les inconnues du système en deux groupes d'inconnues B et C. Le système linéaire $A.x = y$ peut s'écrire :

$$\begin{pmatrix} A_B & A_{BC} \\ A_{CB} & A_C \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} x_B \\ x_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_B \\ y_C \end{pmatrix} \quad (1)$$

$A.x = y$ ainsi décomposé peut se résoudre en 3 étapes :

$$\begin{cases} A_B.z_B = y_B \\ S.x_C = y_C - A_{CB}.z_B \\ A_B.x_B = y_B - A_{BC}.x_C \end{cases} \quad (2)$$

avec $S = A_C - A_{CB}.\mathbf{A_B^{-1}}.A_{BC} = A_C - A_{CB}.\mathbf{U_B^{-1}}.\mathbf{L_B^{-1}}.A_{BC}$

# Le complément de Schur

Remarque : La factorisation LU de $A$ peut s'écrire sous la forme :

$$A \approx \begin{pmatrix} L_B & \\ A_{CB}U_B^{-1} & L_S \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} U_B & L_B^{-1}A_{BC} \\ & U_S \end{pmatrix} \qquad (2)$$

avec $S = A_C - A_{CB}.\mathbf{A_B^{-1}}.A_{BC} = A_C - A_{CB}.\mathbf{U_B^{-1}}.\mathbf{L_B^{-1}}.A_{BC}$

# Exemple d'utilisation : ILU multi-niveaux

On peut construire récursivement une suite de système à résoudre :

$$\begin{cases} A_B^{(k)}.z_B = y_B^{(k)} \\ S^{(k)}.x_C = y_C^{(k)} - A_{CB}^{(k)}.z_B \\ A_B^{(k)}.x_B = y_B^{(k)} - A_{BC}^{(k)}.x_C \end{cases}$$

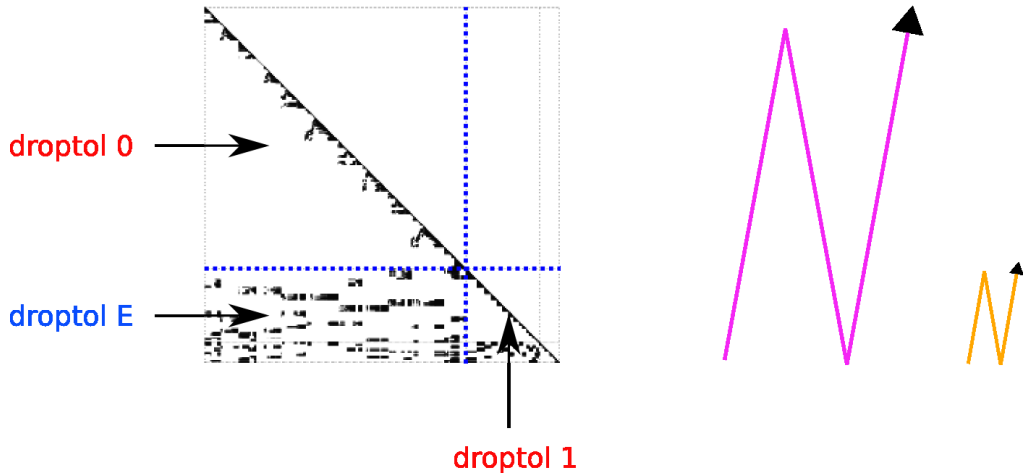
$$\begin{cases} A^{(k+1)} = S^{(k)} \\ y^{(k+1)} = y_C^{(k)} - A_{CB}^{(k)}.z_B \end{cases}$$

Les niveaux peuvent être construit avec différents critères :

- numérique (ARMS,...)
- composant du graphe (interface : HIPS).

# Exemple d'utilisation : ILU multi-niveaux

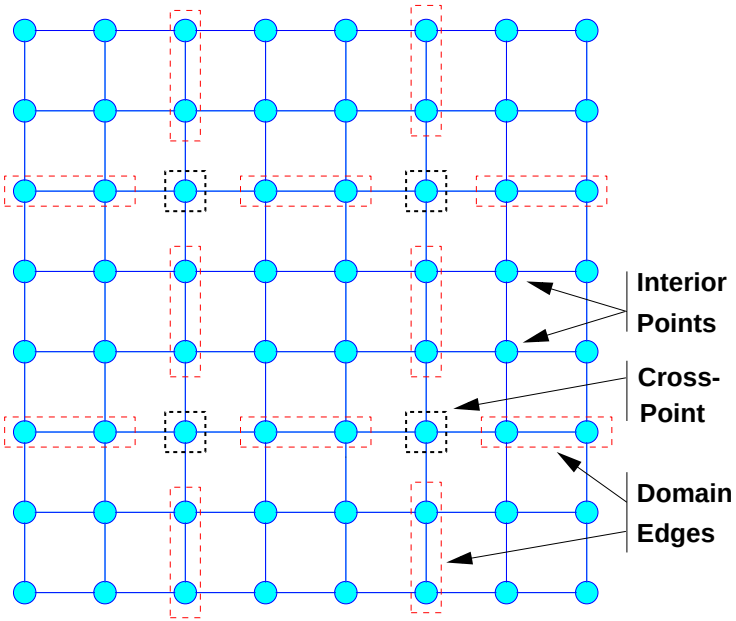
On peut construire récursivement une suite de système à résoudre :



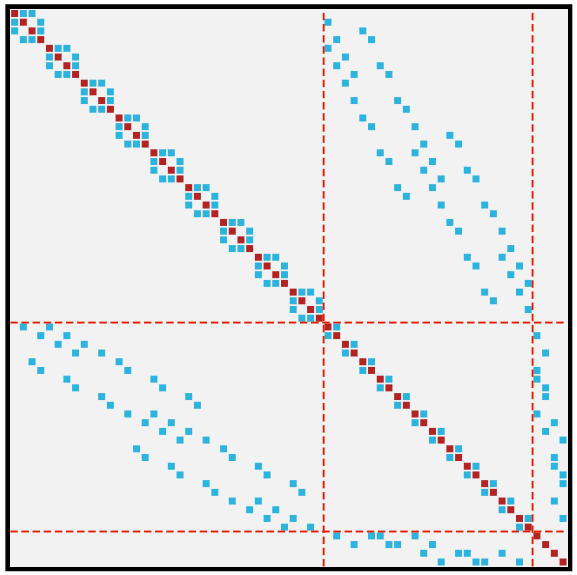

Les niveaux peuvent être construit avec différents critères :

- numérique (ARMS,...)
- composant du graphe (interface : HIPS).

# Exemple d'utilisation : ILU multi-niveaux, HIPS




*Grille 2D* $8 \times 8$.

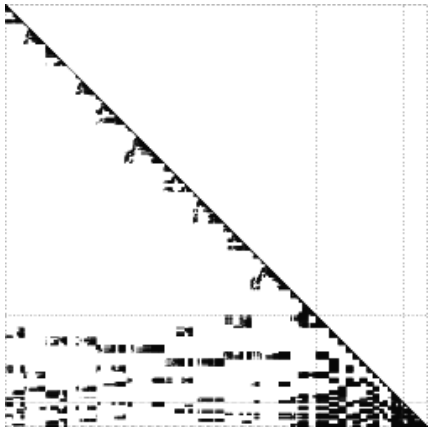


*La matrice permutée.*

# Exemple d'utilisation : méthode hybride direct/itérative

- Exemple de remplissage (bcsstk14)

$$\begin{pmatrix} L_B & \\ A_{CB} U_B^{-1} & S \end{pmatrix}$$



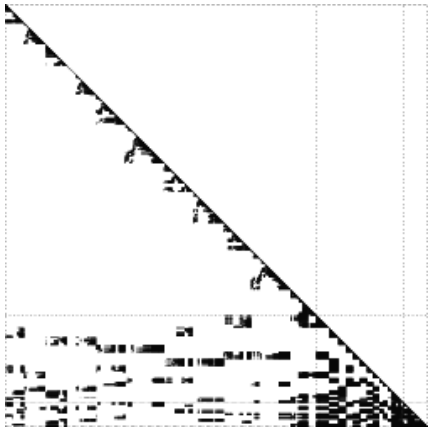
$$\begin{cases} A_B.z_B = y_B \\ S.x_C = y_C - A_{CB}.z_B \\ A_B.x_B = y_B - A_{BC}.x_C \end{cases} \quad (2)$$

avec $S = A_C - A_{CB}.\mathbf{A_B^{-1}}.A_{BC} = A_C - A_{CB}.\mathbf{U_B^{-1}}.\mathbf{L_B^{-1}}.A_{BC}$

# Exemple d'utilisation : HIPS

- Exemple de remplissage (bcsstk14)

$$\begin{pmatrix} L_B & \\ A_{CB}U_B{}^{-1} & S \end{pmatrix}$$



- Eviter de stocker $A_{CB}U_B{}^{-1}$ et $S$ en mémoire (surtout en 3D !) :
  - On n'a pas besoin de la matrice $S$, pour calculer $S.x$ on utilise : $(A_C - A_{CB}.U_B^{-1}.L_B^{-1}.A_{BC}).x$
  - ILUT : $A_{CB}U_B{}^{-1}$ (resp. $L_B{}^{-1}A_{BC}$) est "creusé" par un critère de seuillage au cours de son calcul (algorithme ILUC(t)= "regarde à gauche") : $\tilde{L_S}.\tilde{U_S} \approx \tilde{S} = (A_{CB}.\tilde{U_B^{-1}}).(\tilde{L_B^{-1}}.A_{BC}) \approx S$

# Test cases

Le remplissage et le nombre d'opérations sont donnés pour une méthode directe.

| Matrix | unknowns | non-zeros | fill-in | OPC |
|---|---|---|---|---|
| MHD1 | 485,597 | 24,233,141 | 52.4 | $9.0 \,.\, 10^{12}$ |
| AUDI | 943,695 | 39,297,771 | 41.2 | $5.4 \,.\, 10^{12}$ |
| Haltere | 1,288,825 | 10,476,775 | 38.7 | $7.5 \,.\, 10^{12}$ |
| Amande | 6,994,683 | 58,477,383 | 53.9 | $1.5 \,.\, 10^{13}$ |

# Expériences avec HIPS

## Conditions expérimentales :

10 nodes of 2.6 Ghz quadri dual-core Opteron (Myrinet)

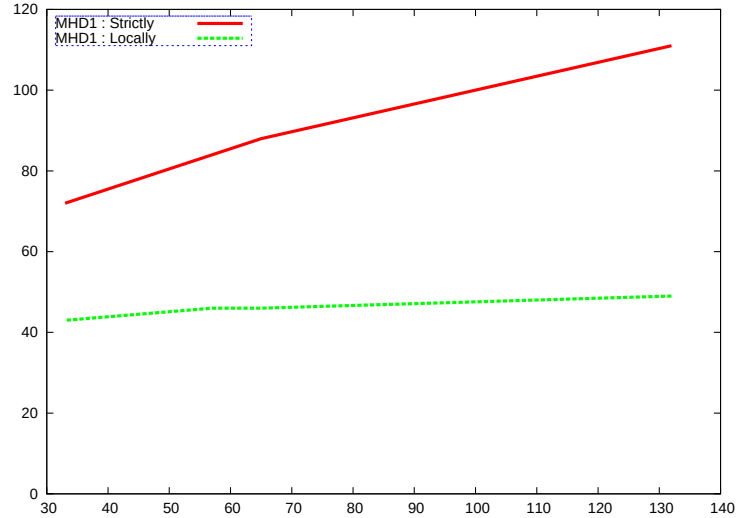
Partitionner : Scotch

$||b - A.x||/||b|| < 10^{-7}$, no restart in GMRES

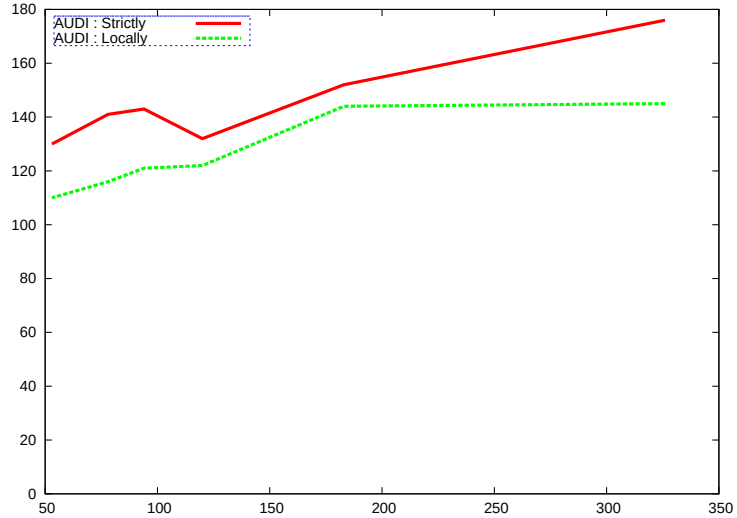
Thresholds : MHD1, Audi, Amande $= 0.001$, Haltere $= 0.01$

# HIPS : Itérations/nombre de domaines

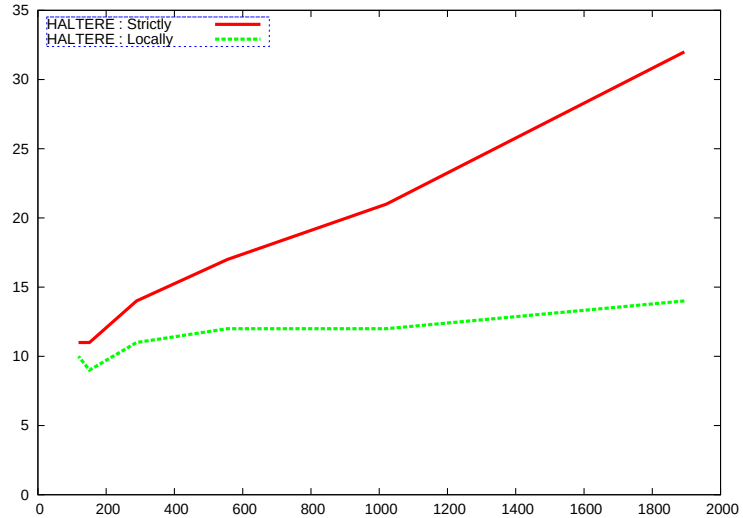
MHD1 (485, 597) : nb domains from 33 to 132



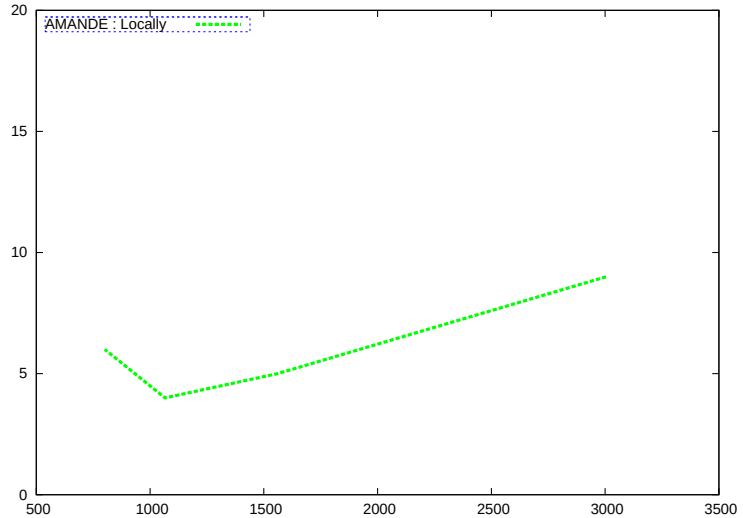

AUDI (943, 695) : nb domains from 53 to 326




HALTERE (1, 288, 825) : nb domains from 119 to 1894

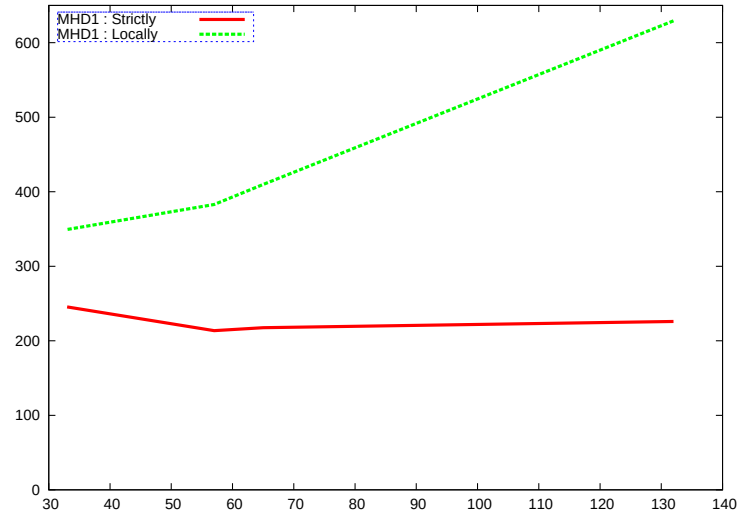



AMANDE (6, 994, 683) : nb domains from 801 to 3004

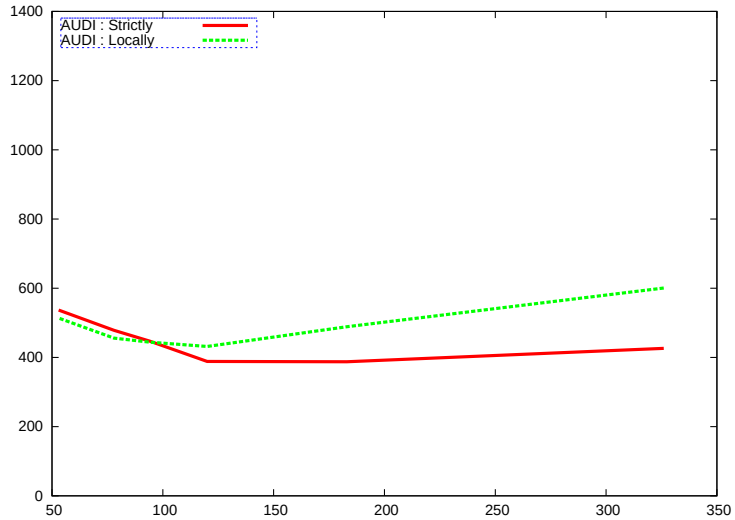


# HIPS : Temps (prec+solve seq.)/nombre de domaines

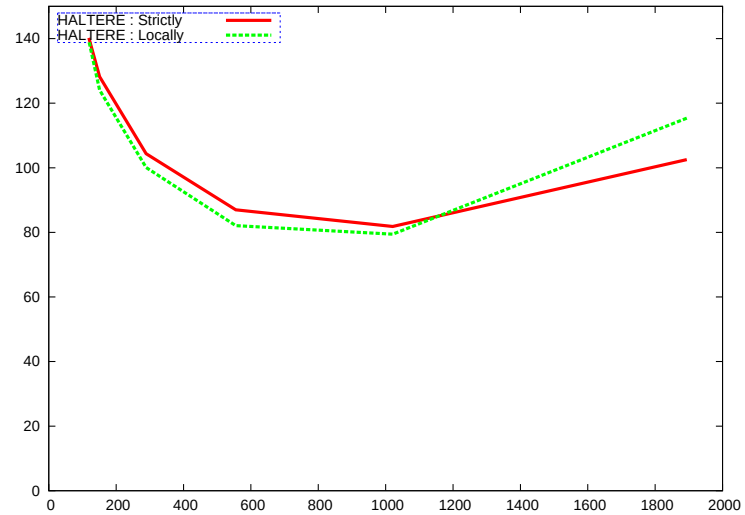
MHD1 (485, 597) : nb domains from 33 to 132



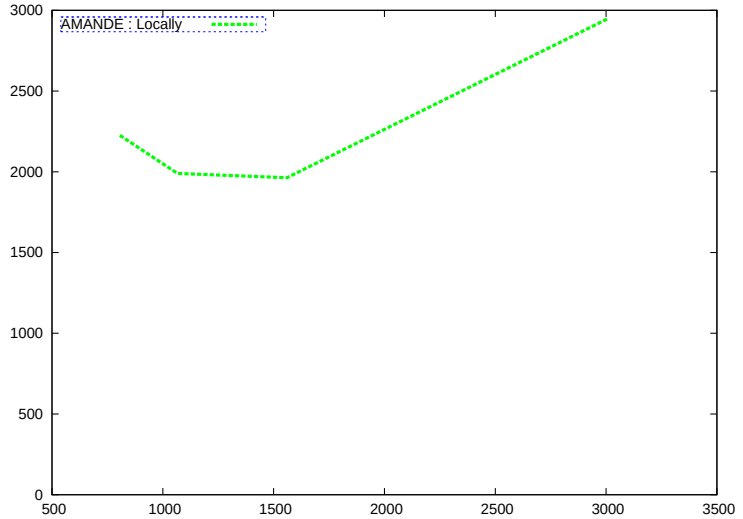

AUDI (943, 695) : nb domains from 53 to 326




HALTERE (1, 288, 825) : nb domains from 119 to 1894

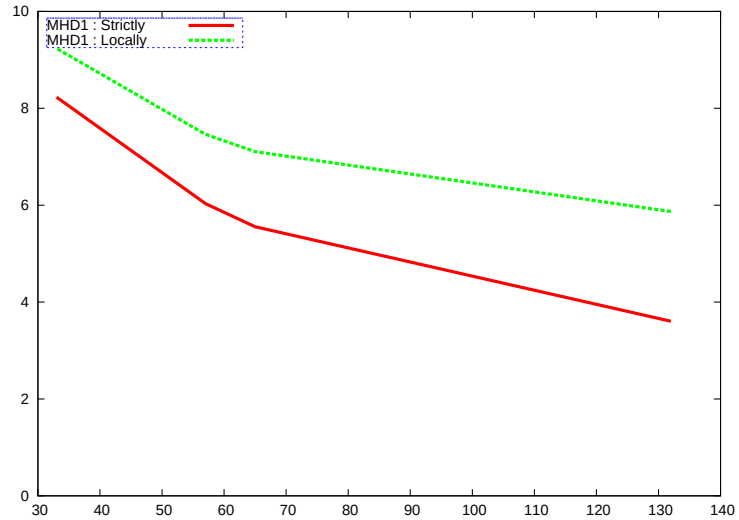



AMANDE (6, 994, 683) : nb domains from 801 to 3004

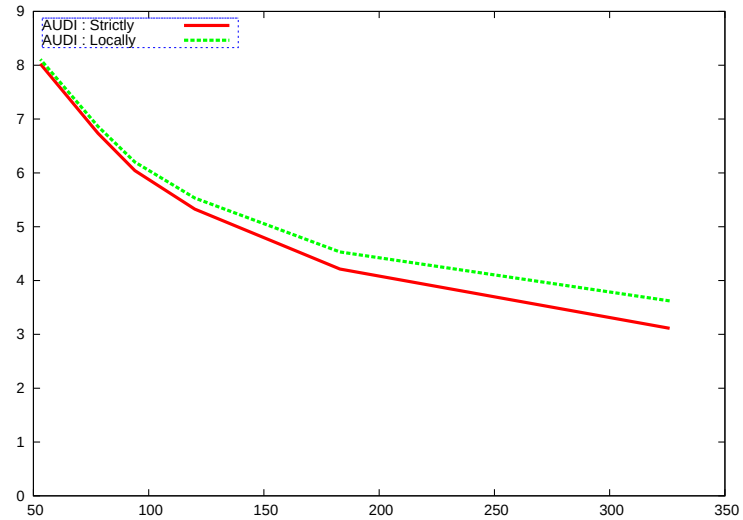


# Mémoire / nombre de domaines

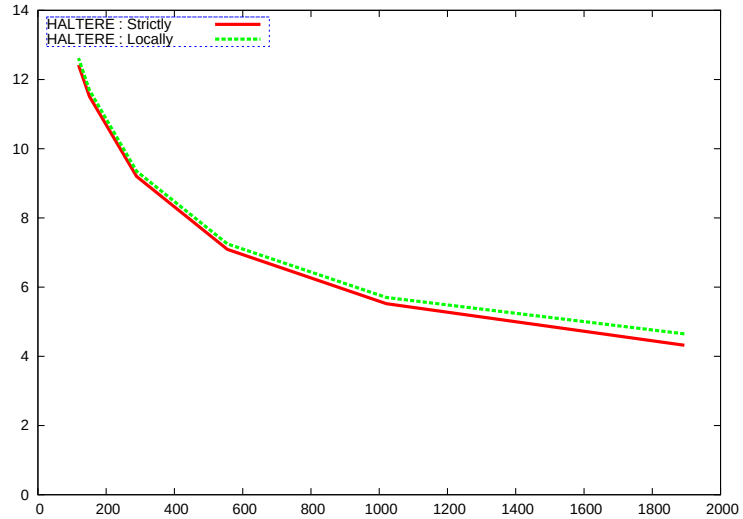
MHD1 (485, 597) : nb domains from 33 to 132



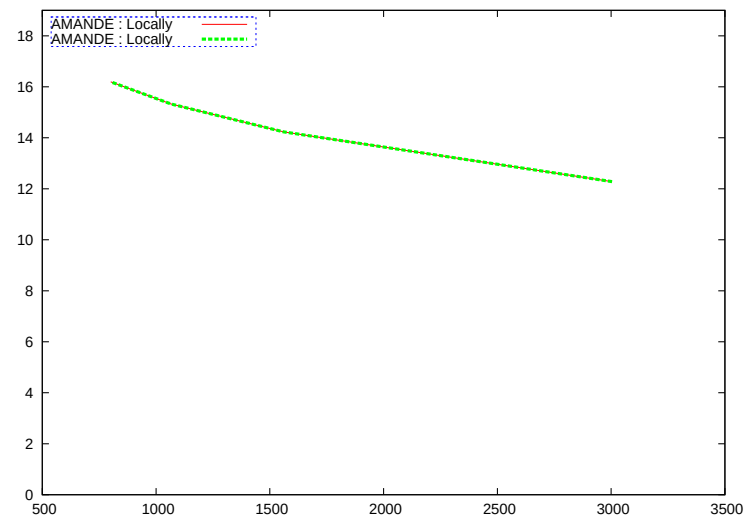

AUDI (943, 695) : nb domains from 53 to 326




HALTERE (1, 288, 825) : nb domains from 119 to 1894




AMANDE (6, 994, 683) : nb domains from 801 to 3004



# Logiciels en rapport avec le cours

- ILUPACK : ILU multi-niveaux
  `http://www.math.tu-berlin.de/ilupack/`
- HIPS : ILU multi-niveaux, hybride direct/itératif
  `http://hips.gforge.inria.fr`
- PARMS : ILU multi-niveaux
  `http://www-users.cs.umn.edu/~saad/`
- PaStiX : Direct (MPI/Thread), ILU(k) par blocs
  `http://pastix.gforge.inria.fr`
- PETSc : meta-package
  `http://www-unix.mcs.anl.gov/petsc/petsc-as/`
- Trilinos : meta-package
  `http://trilinos.sandia.gov/`