



HAL
open science

Extraction et exploitation de modèles réduits dans les solveurs de Krylov

Pierre Gosselet, Christian Rey, Julien Pebrel

► **To cite this version:**

Pierre Gosselet, Christian Rey, Julien Pebrel. Extraction et exploitation de modèles réduits dans les solveurs de Krylov. Neuvième colloque national en calcul des structures, May 2009, Giens (Var), France. pp.111-116. hal-00437248

HAL Id: hal-00437248

<https://hal.science/hal-00437248>

Submitted on 30 Nov 2009

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Extraction et exploitation de modèles réduits dans les solveurs de Krylov

Pierre Gosselet, Christian Rey, Julien Pebrel

LMT-Cachan (ENS-Cachan/CNRS/UPMC/Pres Universud)
61, av. du président Wilson, 94230 CACHAN, France
{gosselet,rey,pebrel}@lmt.ens-cachan.fr

Résumé — Nous nous intéressons à la résolution d'une succession de problèmes linéaires définis positifs symétriques (à matrices non constantes) par un gradient conjugué. Nous montrons comment il est possible de déduire à faible coût puis d'automatiquement enrichir à l'issue de chaque résolution un modèle réduit dont l'utilisation permet de diminuer fortement le nombre d'itérations à venir.

Mots clés — solveur itératif de Krylov, multirésolution, réduction de modèle

1 Introduction

La résolution d'un unique système linéaire est rarement suffisante pour répondre à un problème mécanique. En général, une suite de systèmes linéaires doit être résolue, soit parce que la technique de résolution s'appuie sur la décomposition du problème originel en plusieurs systèmes linéaires (ce qui est par exemple le cas de la majorité des méthodes traitant la non-linéarité ou la dépendance en temps), soit parce que la question posée implique en soi de résoudre plusieurs systèmes (comme dans le cas de l'exploration d'un plan d'expérience).

Il semble donc du plus grand intérêt de conserver à la fin d'une résolution une information numérique permettant d'accélérer les résolutions suivantes. Dans cette optique les solveurs directs montrent rapidement leurs limites puisqu'ils ne sont adaptés qu'au cas où la matrice est constante (en conservant la matrice sous forme factorisée) ou de rang très faiblement variant (en utilisant la formule de Sherman-Morrisson). Les solveurs itératifs de Krylov [12], qui reposent sur une recherche de la solution en projection sur un sous-espace de dimension croissante, permettent eux aussi (à condition de stocker une base des sous-espaces introduits) de traiter le cas d'une succession de seconds membres variables (algorithmes pour *multiple right-hand sides* [11, 4]). Ils permettent également d'apporter des réponses intéressantes au cas des matrices variables [7, 15].

En effet les solveurs de Krylov s'appuient sur la vérification de conditions de Petrov-Galerkin et entrent naturellement dans l'esprit des techniques de réduction de modèle. A la fin de chaque système on obtient une base de l'espace de recherche et une expression d'une « inverse réduite » sur cette base. Ces informations peuvent être réutilisées sur les systèmes suivants par des techniques de préconditionnement, de correction de préconditionneur [8, 10] ou d'augmentation [9]. Dans les cas où le sous-espace stocké est de dimension importante, les calculs associés à cette réutilisation peuvent devenir coûteux. Il est alors nécessaire de définir des critères, relativement objectifs, permettant de condenser l'information. Dans [5], une première étude avait été conduite sur le sujet, une procédure de sélection de l'information basée sur une analyse spectrale de Ritz [3] était proposée, l'algorithme résultant est nommé SRKS pour Selective Reuse of Krylov Subspaces

par opposition à l'approche sans sélection nommée TRKS pour Total Reuse of Krylov Subspaces. Nous prolongeons ici ces travaux en améliorant les critères de choix de la base réduite.

La suite du papier est organisée de la façon suivante : dans la section 2, l'algorithme de base est rappelé ainsi que les propriétés fondamentales qui seront utilisées par la suite, la technique d'analyse spectrale fait l'objet de la section 3 alors que la section 4 présente quelques résultats.

2 Gradient conjugué préconditionné augmenté

On cherche à résoudre le système $Ax = b$, avec A un opérateur symétrique défini positif. On note x_i la i^{eme} approximation (donc x_0 l'initialisation), et $r_i = b - Ax_i = A(x - x_i)$ le résidu associé. L'algorithme du gradient conjugué est extrêmement classique ([1, 12] pour des détails théoriques et pratiques), il consiste à rechercher x_i sous la forme :

$$\begin{cases} x_i \in x_0 + \mathcal{K}_i(A, r_0) \\ r_i \perp \mathcal{K}_i(A, r_0) \end{cases} \quad \text{avec} \quad \mathcal{K}_i(A, r_0) = \text{Vect}(r_0, Ar_0, \dots, A^{i-1}r_0) \quad (1)$$

Cet algorithme est extrêmement sensible au spectre de l'opérateur, caractérisé en première approximation par le conditionnement. Le préconditionnement par un opérateur symétrique défini positif M permet d'améliorer les propriétés spectrales en essayant de « tasser » le spectre. L'augmentation (ou de manière équivalente la déflation [6, 14]) permet de capter dès l'initialisation une partie de la solution appartenant à un sous-espace $\text{Im}(C)$, et de trouver itérativement le reste de la solution dans un sous-espace supplémentaire. En particulier l'augmentation par des sous-espaces stables permet d'éliminer des bandes spectrales. L'élimination de parties extrêmes du spectre permettant schématiquement de redéfinir un conditionnement plus faible. L'algorithme 1 présente un gradient conjugué préconditionné augmenté dont l'augmentation est assurée par une projection.

Algorithm 1: APCG(A, M, C, b)

Calculer AC , factoriser $(C^T AC)^{-1}$; poser $P = Id - C(C^T AC)^{-1}C^T A$

$x_0 = C(C^T AC)^{-1}C^T b$

$r_0 = b - Ax_0 = P^T b$

$z_0 = PM^{-1}r_0, w_0 = z_0$

for $j = 1, \dots, i$ **do**

$x_j = x_{j-1} + \alpha_{j-1}w_{j-1}$

$r_j = r_{j-1} - \alpha_{j-1}Aw_{j-1}$; $\alpha_{j-1} = (r_{j-1}, z_{j-1}) / (Aw_{j-1}, w_{j-1})$

$z_j = PM^{-1}r_{j+1}$

$w_j = z_j - \beta_j w_{j-1}$; $\beta_j = (Aw_{j-1}, z_j) / (w_{j-1}, Aw_{j-1})$

end

On note en majuscules les matrices formées par des collections de vecteurs, par exemple $R_i = (r_0, \dots, r_{i-1})$. L'algorithme du gradient conjugué repose sur la construction d'un certain nombre de bases de l'espace de Krylov, notamment la base M -orthogonale des résidus préconditionnés Z_i et la base A -orthogonale des directions de descente W_i . Les conditions de Petrov-Galerkin se traduisent par la formule suivante :

$$x_i = x_0 + W_i (W_i^T A W_i)^{-1} W_i^T r_0 \quad (2)$$

où l'on voit que $W_i (W_i^T A W_i)^{-1} W_i$ constitue une « inverse en projection » sur $\mathcal{K}_i(A, b)$ de A , et donc que le couple $(W_i, W_i^T A W_i)$ permet de déduire un modèle réduit du système (en particulier ici, ce modèle est diagonal).

Le principe de la multirésolution par augmentation consiste après une première résolution à réutiliser une base de $\mathcal{K}_i(\mathbf{A}, b)$ comme matrice d'augmentation \mathbf{C} du nouveau système. Dans le cas particulier où l'opérateur est invariant, le choix de W_i permet de grandement simplifier les calculs, on se retrouve à résoudre le nouveau système exactement comme si les i premières itérations avaient permis de construire la base W_i . En particulier si le second membre appartient toujours à $\mathcal{K}_i(\mathbf{A}, b)$ alors l'initialisation permet de converger immédiatement.

Dans le cas où l'opérateur change (on note le nouveau système avec des tildes : $\tilde{\mathbf{A}}\tilde{x} = \tilde{b}$), il est toujours possible de se resserrer d'une base de $\mathcal{K}_i(\mathbf{A}, b)$ comme matrice de contrainte $\tilde{\mathbf{C}}$. On peut alors espérer une convergence rapide si « l'essentiel » de la solution \tilde{x} appartient à $\mathcal{K}_i(\mathbf{A}, b)$. Néanmoins les bonnes propriétés de conjugaison entre W_i et $\tilde{\mathbf{A}}$ étant perdues, la mise en place du modèle réduit ($W_i^T \tilde{\mathbf{A}} W_i$) nécessite le calcul puis la factorisation d'une matrice dense, opérations qui peuvent s'avérer coûteuses. L'objectif de nos travaux est donc de déduire un meilleur modèle réduit que celui construit automatiquement à partir de la base de Krylov.

3 Construction du modèle réduit

On suppose que le premier système $\mathbf{A}x = b$ a convergé au bout de i itérations. L'utilisation d'un préconditionneur symétrique défini positif, donc factorisable sous la forme $\mathbf{M} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$, permet de raisonner sur le système symétrique $\mathbf{L}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{L}^{-T}$ équivalent au système préconditionné à gauche.

3.1 Sous-espace pertinent – analyse spectrale de Ritz

L'extraction d'un sous-espace de $\mathcal{K}_i(\mathbf{A}, b)$ est guidé par l'analyse suivante. Soit V_i une base orthonormale de \mathcal{K}_i , on appelle matrice de Rayleigh la matrice $(V_i^T \mathbf{A} V_i)$ dont on note $(\theta_j^i)_j$ et $(t_j^i)_j$ les valeurs propres et vecteurs propres orthonormés. Les θ_j^i sont appelées les valeurs de Ritz et les vecteurs $V_i t_j^i$ sont les vecteurs de Ritz. Les éléments de Ritz convergent vers les éléments propres de la matrice \mathbf{A} et la convergence du gradient conjugué est liée à celle des valeurs de Ritz, par la relation suivante [3] :

$$x - x_i = \pi_i(\mathbf{A})(x - x_0) \quad \text{avec} \quad \pi_i(\xi) = \prod_{j=1}^i \frac{\theta_j^i - \xi}{\theta_j^i} \quad (3)$$

En particulier la convergence du gradient conjugué est obtenue quand un certain nombre de valeurs de Ritz approchent suffisamment bien des valeurs propres critiques [3] (en particulier les valeurs extrémales du spectre). En conséquence, une base réduite particulièrement pertinente peut être obtenue en ne conservant que des vecteurs de Ritz associés à des valeurs convergées. Si les vecteurs propres du nouvel opérateur sont suffisamment proches de ceux de l'ancien, on a alors un certain nombre de valeurs de Ritz du nouveau système qui sont immédiatement convergées.

3.2 Sélection

La convergence des valeurs de Ritz est évaluée par un critère en stagnation : après convergence à l'itération i , on calcule les valeurs de Ritz pour les itérations i et $i-1$, on compare ces valeurs dont on sait qu'une partie converge vers le haut et l'autre vers le bas. Si les valeurs sont suffisamment proches, on suppose qu'il y a convergence. En résumé :

$$\left\{ \begin{array}{ll} j = 1 \dots i-1 & \text{si } \delta_i^h = \frac{\theta_j^i - \theta_j^{i-1}}{\theta_j^i} \leq \varepsilon, \text{ ou} \\ j = 2 \dots i & \text{si } \delta_i^b = \frac{\theta_j^i - \theta_{j-1}^{i-1}}{\theta_j^i} \leq \varepsilon \end{array} \right. \quad \text{alors on conserve } V_i t_j^i \quad (4)$$

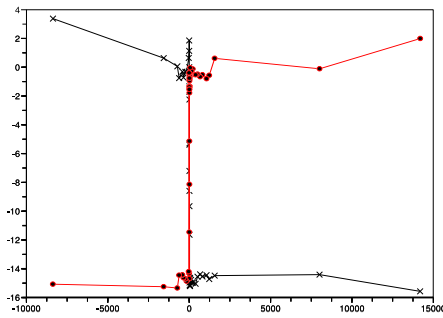


Figure 1 – Critères de convergence

Le critère de sélection ε doit faire l'objet d'une étude préalable. Cependant il est important de noter qu'en général pour un système préconditionné, les valeurs de Ritz ont une convergence franche et que la distinction entre une valeur en cours de convergence et une valeur convergée est relativement objective. On pourra se référer à la figure 1 où on représente les deux critères pour le spectre d'un opérateur issu d'un problème de mécanique classique (complément de Schur primal d'un comportement tangent hyperléastique).

3.3 Calcul pratique

Il est à noter qu'il est possible de connecter la méthode du gradient conjugué à une procédure d'Arnoldi sur le système symétrique équivalent en posant :

$$v_j = (-1)^j \frac{z_j}{\sqrt{r_j^T z_j}} \text{ et } H_i = \text{tridiag}\left(\frac{\sqrt{\beta_{j-1}}}{\alpha_{j-1}}, \frac{1}{\alpha_j} + \frac{\beta_{j-1}}{\alpha_{j-1}}, \frac{\sqrt{\beta_j}}{\alpha_j}\right) \quad (5)$$

La matrice d'Hessemberg H_i est la matrice de Rayleigh associée à la base V_i , elle est tridiagonale symétrique et son analyse spectrale peut être efficacement conduite via des routines Lapack.

3.4 Enchaînement de résolutions

Ainsi le second système est augmenté par les vecteurs de Ritz réputés convergés du premier. En fonction de la stabilité des sous-espaces de Krylov [2] l'accélération résultante peut être très significative ; il est à noter que dans tous les cas l'augmentation ne peut pas dégrader les performances du solveur. Après la convergence du second système, l'espace de Krylov $\tilde{\mathcal{K}}$ est, par construction, \tilde{M} -orthogonal à C . On peut alors envisager au choix de faire une analyse de Ritz sur le sous-espace $C \oplus \tilde{\mathcal{K}}$ [13] pour obtenir une base optimisée de vecteurs de Ritz, ou bien de simplement calculer les meilleurs vecteurs de Ritz sur $\tilde{\mathcal{K}}$ et les concaténer aux contraintes précédentes. Si on suppose que l'évolution de l'opérateur est peu prévisible, il n'y a pas de raisons de préférer un opérateur à un autre, aussi nous retenons le second choix qui peut cependant conduire à un accroissement trop rapide du nombre des contraintes, on propose alors d'y adjoindre un second critère basé sur l'activité des vecteurs de Ritz : si le second membre est pratiquement orthogonal à un vecteur de Ritz, celui-ci est n'est pas utilisé pour l'augmentation.

4 Validation

On propose de valider la stratégie introduite en s'intéressant à la résolution d'un ensemble de problèmes d'élasticité linéaire. On considère un carré encastré sur son coté gauche et soumis à un effort ponctuel au coin haut droit et on fait varier le coefficient de poisson du matériau entre 0.15 et 0.44 par pas de 0.01. Les performances de la stratégie en terme de gain en itérations (instantané et moyenné sur le nombre de systèmes) sont résumés sur la figure 2 ainsi que la comparaison en terme de gain moyen avec l'approche sans sélection. Afin de valider la pertinence du processus de sélection de l'information, on s'intéresse à la taille de l'espace d'augmentation représenté sur la

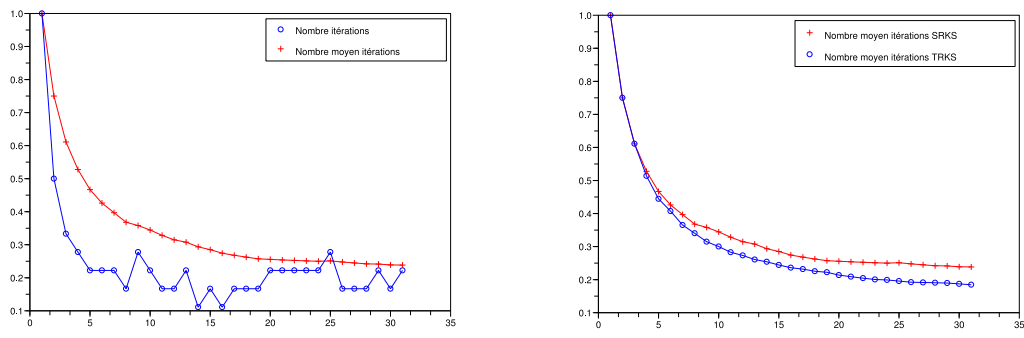


Figure 2 – Nombre d’itérations
 (a) Performances de SRKS – (b) Comparaison avec TRKS

figure 3. On constate que le choix d’une information pertinente permet de conserver un gain très important en nombre d’itérations et ce pour un espace d’augmentation de taille assez limitée.

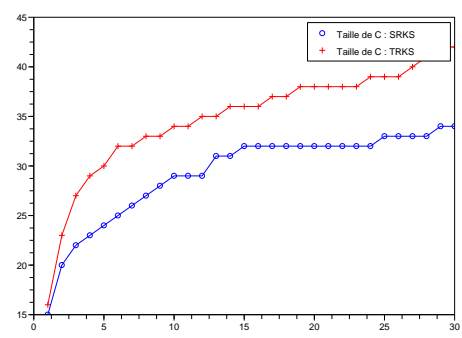


Figure 3 – Taille de l’espace d’augmentation – comparaison avec TRKS

L’analyse de convergence du gradient conjugué à l’aide du conditionnement est basée sur une hypothèse de répartition uniforme des valeurs propres dans le spectre qui n’est pas respectée dans la pratique et en particulier pour les systèmes préconditionnés. Une étude plus évoluée des mécanismes de convergence est possible et mène à une prise en compte du rôle des extrémités du spectre qui permet de définir des critères de choix de l’information plus pertinents que ceux présentés ici. Ces extensions sont en développement actuellement.

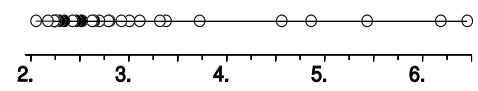


Figure 4 – Spectre des opérateurs

5 Conclusion

Dans ce papier, nous avons présenté une technique de réutilisation des sous-espaces de Krylov pour accélérer la résolution d’une séquence de systèmes linéaires. Elle est basée sur une technique d’augmentation par un sous-espace pertinent au sens de l’analyse de convergence de Ritz.

Les résultats pratiques sont tout à fait satisfaisants mais dépendent fortement de la variation des sous-espaces stables des opérateurs considérés. Les travaux à venir concerneront l'appréciation de l'évolution de ces propriétés spectrales, avec des techniques de sélection *a priori* des bases de contrainte pertinentes, et la ré-optimisation des sous-espaces au cours des résolutions.

Références

- [1] R. Barrett, M. Berry, T.F. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, and H. Van der Vorst. *Templates for the Solution of Linear Systems : Building Blocks for Iterative Methods*. SIAM, 1994.
- [2] J.F. Carpraux, Godunov S., and S. Kuznetsov. Stability of the krylov bases and subspaces. Technical Report 2296, INRIA, 1994.
- [3] A. Van der Sluis and H. Van der Vorst. The rate of convergence of conjugate gradients. *Numer. Math.*, 48 :543–560, 1986.
- [4] J. Erhel and F. Guyomarc'h. An augmented conjugate gradient method for solving consecutive symmetric positive definite linear systems. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 21(4) :1279–1299, 2000.
- [5] P. Gosselet and C. Rey. On a selective reuse of krylov subspaces in newton-krylov approaches for nonlinear elasticity. In *Proceedings of the 14th conference on domain decomposition methods*, pages 419–426, 2002.
- [6] R. Nabben and C. Vuik. A comparison of deflation and the balancing preconditioner. *SIAM J. Sci. Comput.*, 2006 :27–1742, 2006.
- [7] M. Parks, E. De Sturler, G. Mackey, D. Johnson, and S. Maiti. Recycling krylov subspaces for sequences of linear systems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 28(5) :1651–1674, 2006.
- [8] C. Rey. Une technique d'accélération de la résolution de problèmes d'élasticité non linéaire par décomposition de domaines. *C.R. Acad. Sci. Paris*, 322 Série IIb :601–606, 1996.
- [9] C. Rey and F. Risler. A Rayleigh-Ritz preconditioner for the iterative solution to large scale nonlinear problems. *Numerical Algorithms*, 17 :279–311, 1998.
- [10] F. Risler and C. Rey. Iterative accelerating algorithms with Krylov subspaces for the solution to large-scale nonlinear problems. *Numerical Algorithms*, 23 :1–30, 2000.
- [11] Y. Saad. On the Lanczos method for solving symmetric linear systems with several right hand sides. *Math. Comp.*, 48 :651–662, 1987.
- [12] Y. Saad. *Iterative methods for sparse linear systems*. PWS Publishing Company, 3rd edition, 2000.
- [13] Y. Saad, M. Yeung, J. Erhel, and F. Guyomarc'h. A deflated version of the conjugate gradient algorithm. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21(5) :1909–1926, 2000.
- [14] J.M. Tang, R. Nabben, C. Vuik, and Y.A. Erlangga. Theoretical and numerical comparison of various projection methods derived from deflation, domain decomposition and multigrid methods. Reports of the Department of Applied Mathematical Analysis 07-04, Delft university of technology, 2007.
- [15] S. Wang, E. De Sturler, and G. Paulino. Large-scale topology optimization using preconditioner krylov subspace methods with recycling. *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 69(12) :2441–2468, 2007.