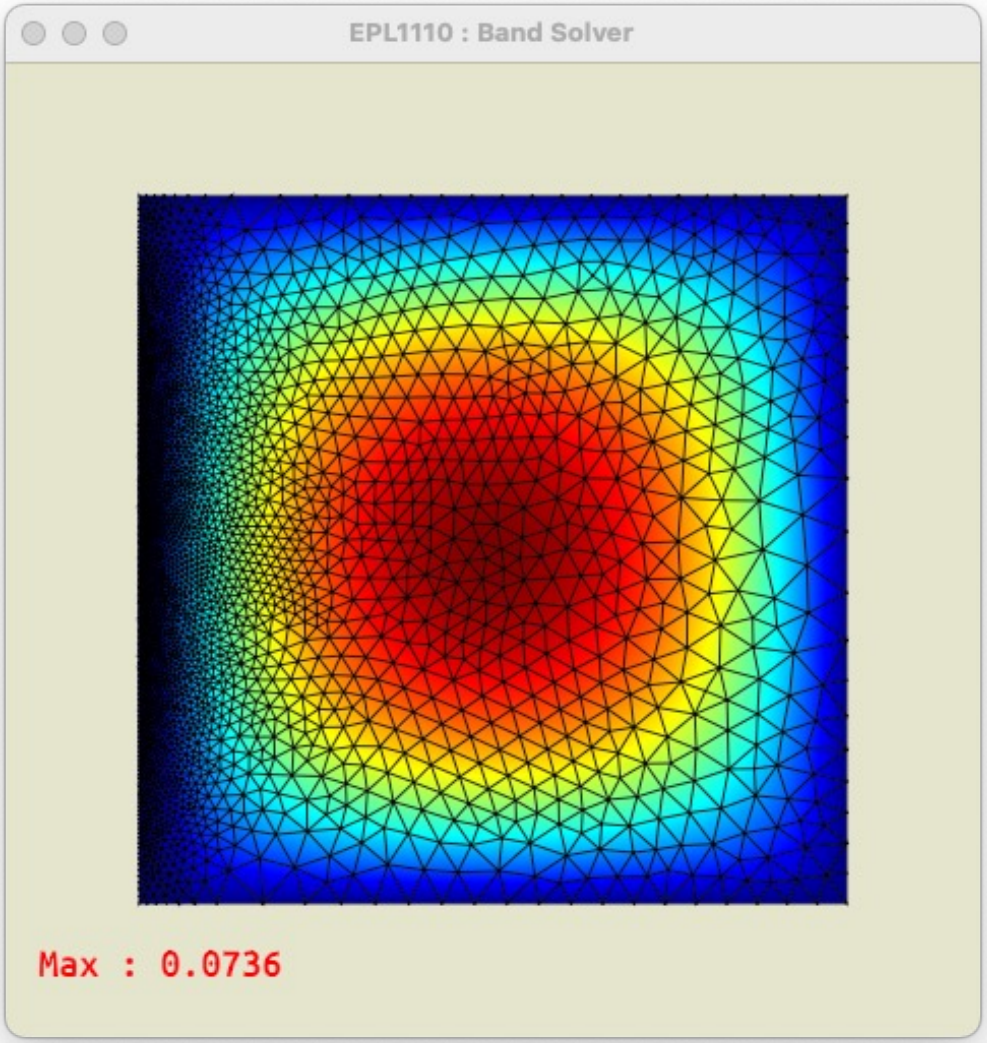


Un petit mot sur la résolution de grands systèmes linéaires

Résoudre un système triangulaire est facile…

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ & & \dots & \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{bmatrix}$$

Triangulation

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ & & & \dots \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{bmatrix}$$

$$x_j = (b_j - \sum_{k=j+1}^{n} a_{jk} x_k) / a_{jj}$$

Backward substitution

Triangularisation
par élimination de Gauss

$$\begin{matrix} L1 \\ L2 \end{matrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 5 & 6 & 7 \\ 8 & 9 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$L2 \leftarrow L2 - 5L1$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 5-5 & 6-10 & 7-20 \end{bmatrix}$$

$= 0$

Karl Friedrich Gauss (1777-1855)

Triangularisation par élimination de Gauss

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(k)} & a_{12}^{(k)} & \dots & a_{1k}^{(k)} & \dots & a_{1n}^{(k)} \\ & a_{22}^{(k)} & \dots & a_{2k}^{(k)} & \dots & a_{2k}^{(k)} \\ & & & \dots & & \\ & & & a_{kk}^{(k)} & \dots & a_{kn}^{(k)} \\ & & & & \dots & \\ & & & a_{nk}^{(k)} & \dots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix}$$

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} a_{kj}^{(k)} \qquad i = k+1, \dots, n,\ j = k, \dots, n$$

$$b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} b_k^{(k)} \qquad i = k+1, \dots, n,$$

Karl Friedrich Gauss (1777-1855)

$$\underbrace{\begin{bmatrix} a_{11}^{(n)} & a_{12}^{(n)} & \dots & a_{1n}^{(n)} \\ & a_{22}^{(n)} & \dots & a_{2n}^{(n)} \\ & & \dots & \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}^{(n)}\mathbf{x}} = \underbrace{\begin{bmatrix} b_1^{(n)} \\ b_2^{(n)} \\ \dots \\ b_n^{(n)} \end{bmatrix}}_{\mathbf{b}^{(n)}}$$

Le problème discret

Trouver $U_j \in \mathbb{R}^n$ tels que

$$\sum_{j=1}^{n} A_{ij} U_j = F_i, \qquad i = 1, n.$$

Problème continu elliptique et linéaire
Méthode des éléments finis
Formulation de Galerkin

Matrice définie positive

Trouver $U_j \in \mathbb{R}^n$ tels que

$$J(U_j) = \min_{V_j \in \mathbb{R}^n} \underbrace{\left(\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \tfrac{1}{2} V_i A_{ij} V_j - \sum_{i=1}^{n} V_i F_i \right)}_{J(V_j)},$$

Aller simple vers le monde de l'algèbre linéaire…

Trouver $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ tel que

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

Trouver $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ tel que

$$J(\mathbf{x}) = \min_{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n} \underbrace{\left(\tfrac{1}{2}\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}\mathbf{v} - \mathbf{b} \cdot \mathbf{v}\right)}_{J(\mathbf{v})}$$

Utilisation des notations habituelles de l'algèbre linéaire

Deux grandes classes de méthodes de résolution

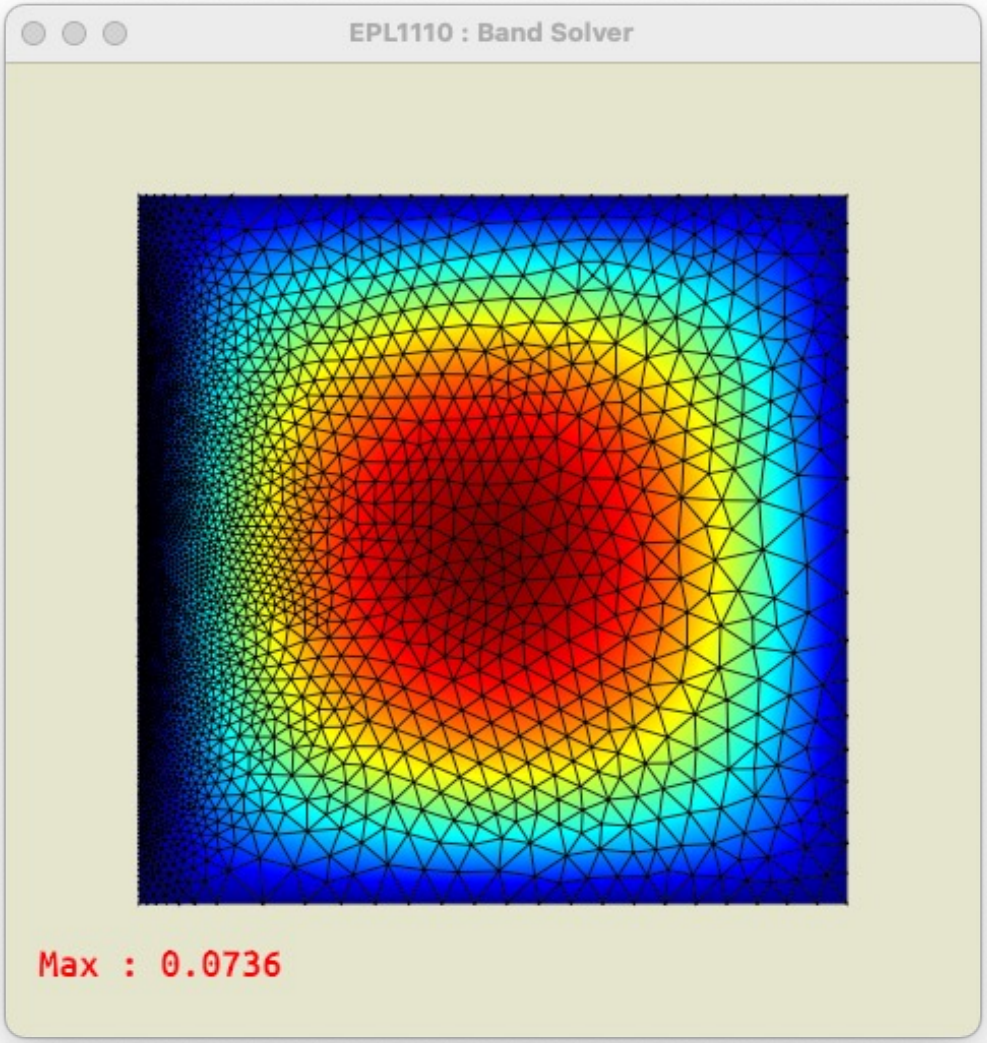
Solveurs directs (Elimination gaussienne)

Solveur de Gauss
Solveur de Gauss bande
Solveur de Gauss « skyline »
Solveur de Gauss frontal
Solveur de Gauss « Nested dissection »

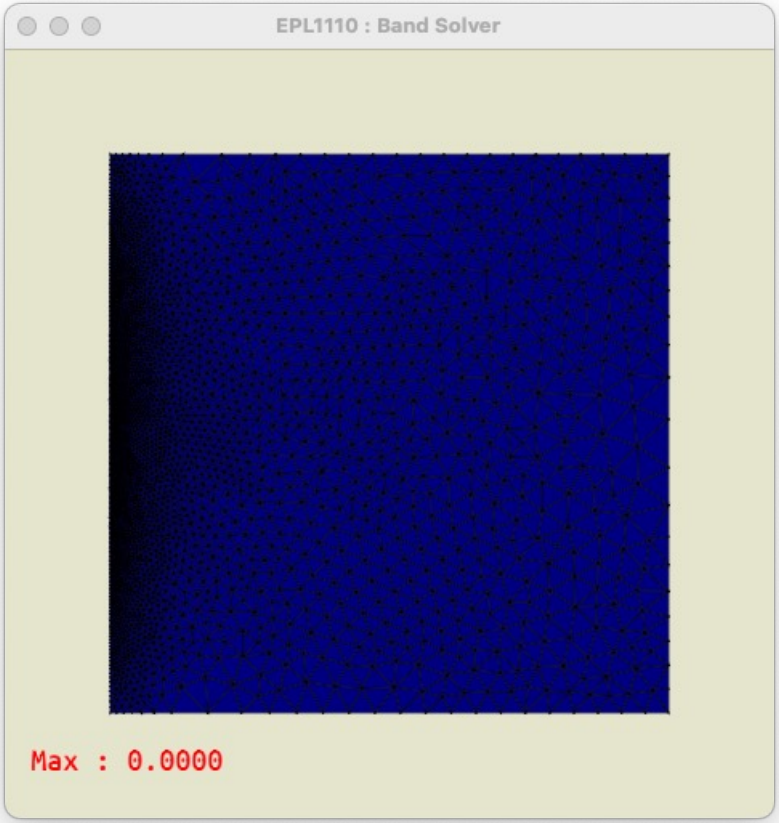
Les méthodes de la plus grande pente et des gradients conjugés ne sont utilisables que pour une matrice définie positive →

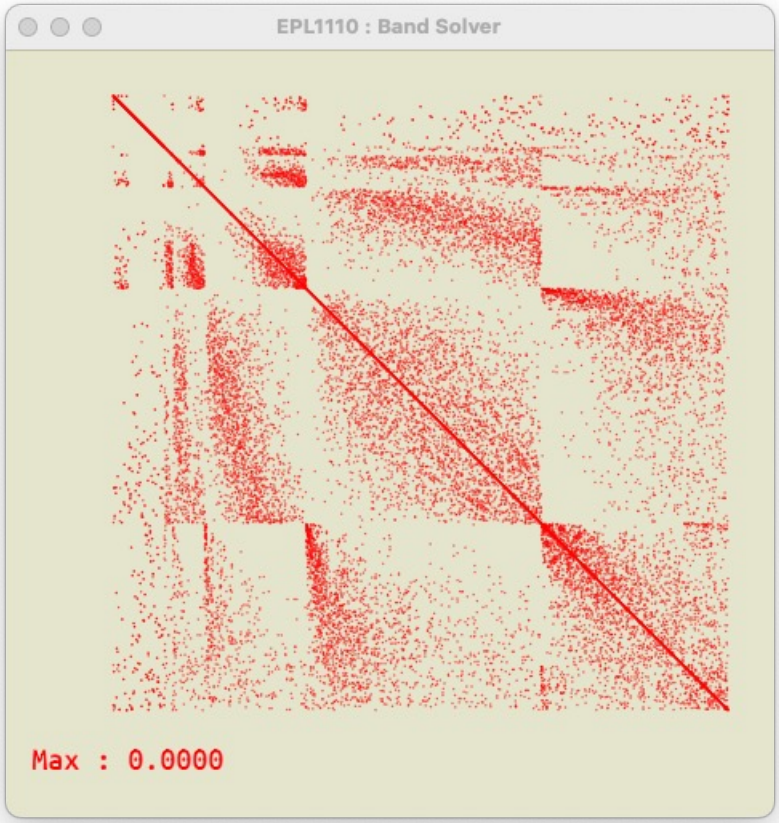
Solveurs itératifs

Méthode de la plus grande pente
Méthode des gradients conjugés
Méthode de GMRES

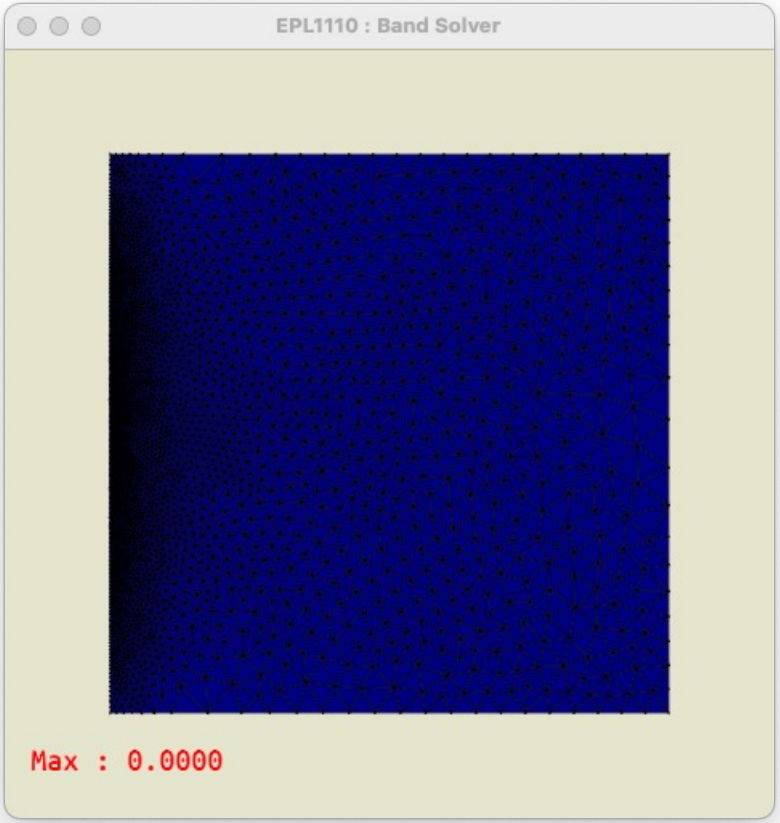


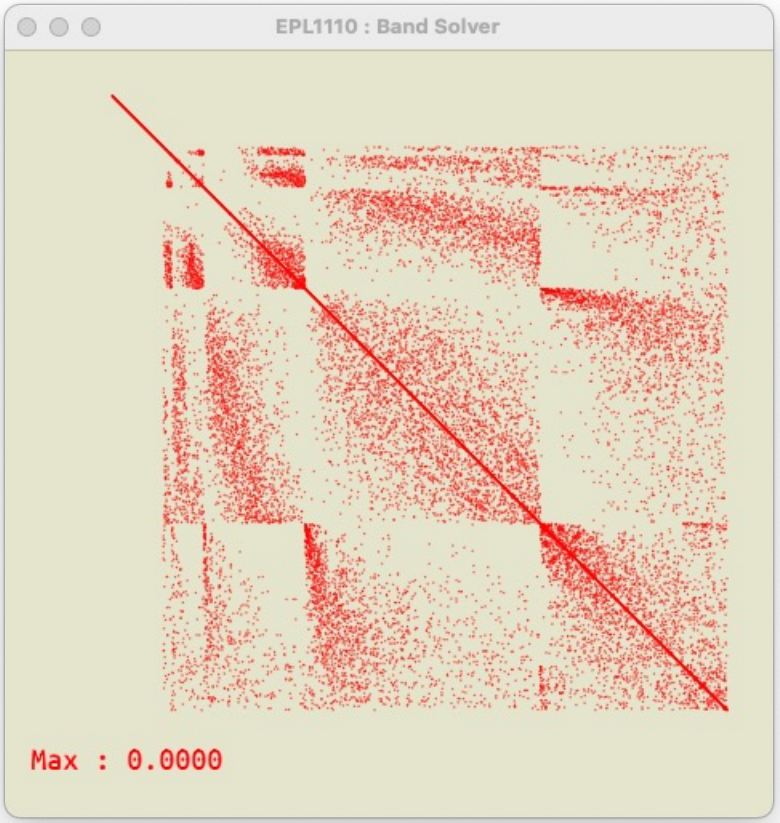
Revenons
à notre
problème:-)



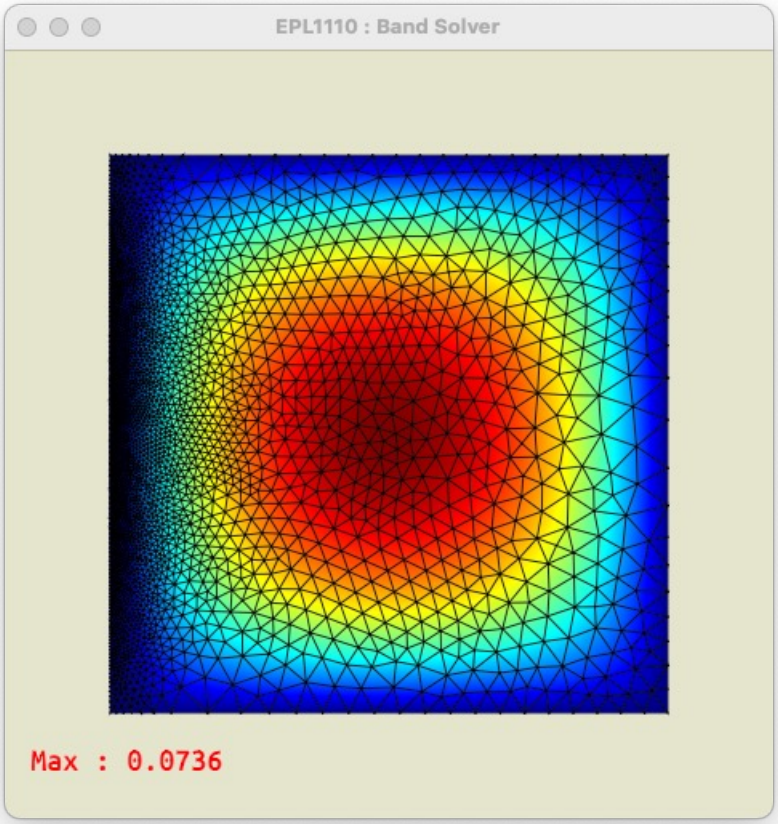


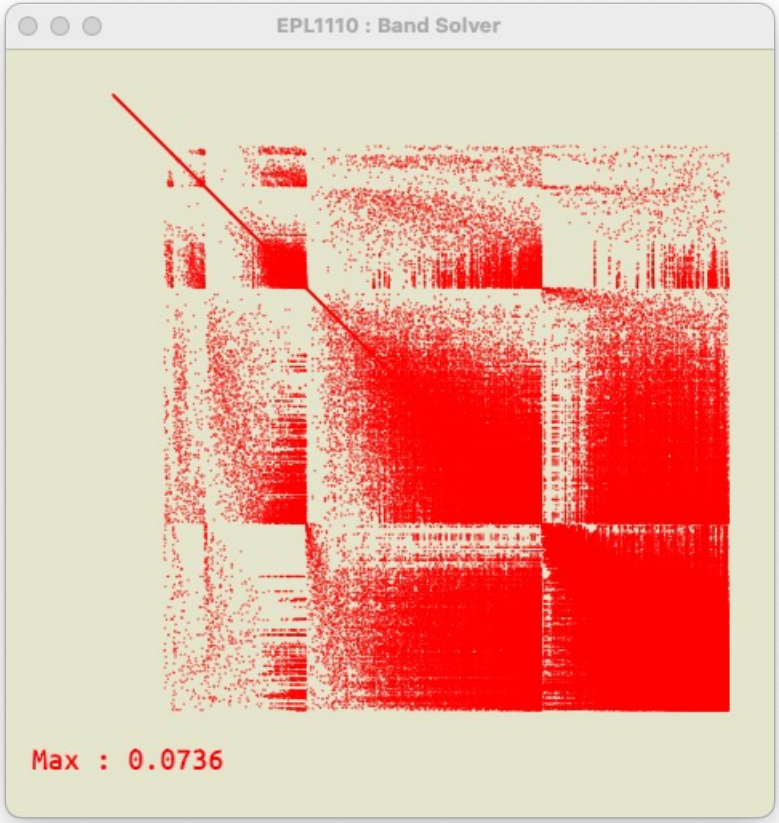
Après l'assemblage :-)





Après les conditions frontières :-)





Après résolution :-)

C'est facile à implémenter…

Elimination effectuée « en place »
Ok, si tous les pivots sont non-nuls pendant les processus

```
double  *matrixSolve(double **A, double *B, int size)

{    int i,j,k;


     /* Gauss elimination */
      for (k=0; k < size; k++) {
          if ( A[k][k] == 0 ) Error("zero pivot");
             for (i = k+1 ; i <  size; i++) {
                 factor = A[i][k] / A[k][k];
                 for (j = k+1 ; j < size; j++)
                      A[i][j] = A[i][j] - A[k][j] * factor;
                 B[i] = B[i] - B[k] * factor; }}

     /* Back-substitution */
     for (i = (size)-1; i >= 0 ; i--) {
           factor = 0;
           for (j = i+1 ; j < size; j++)
                 factor += A[i][j] * B[j];
            B[i] = ( B[i] - factor)/A[i][i]; }
     return(B);
}
```

Oui, si la matrice est définie positive

Coût calcul : $O(n^3)$

Résolution par factorisation LU

Factorisation de A en LU *(effectuée par élimination gaussienne)*
Résolution de Lz = b par substitution directe
Résolution de Ux = z par substitution arrière

$$l_{ik} = -\frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \qquad i = k+1, \ldots, n,\ k = 1, \ldots, n$$

$$l_{ii} = 1 \qquad i = 1, \ldots, n$$

Même coût qu'une élimination gaussienne,
Il suffit juste de conserver L
Très utile, si on souhaite traiter plusieurs cas de charges !
Mais plus gourmand en mémoire : facteur critique..

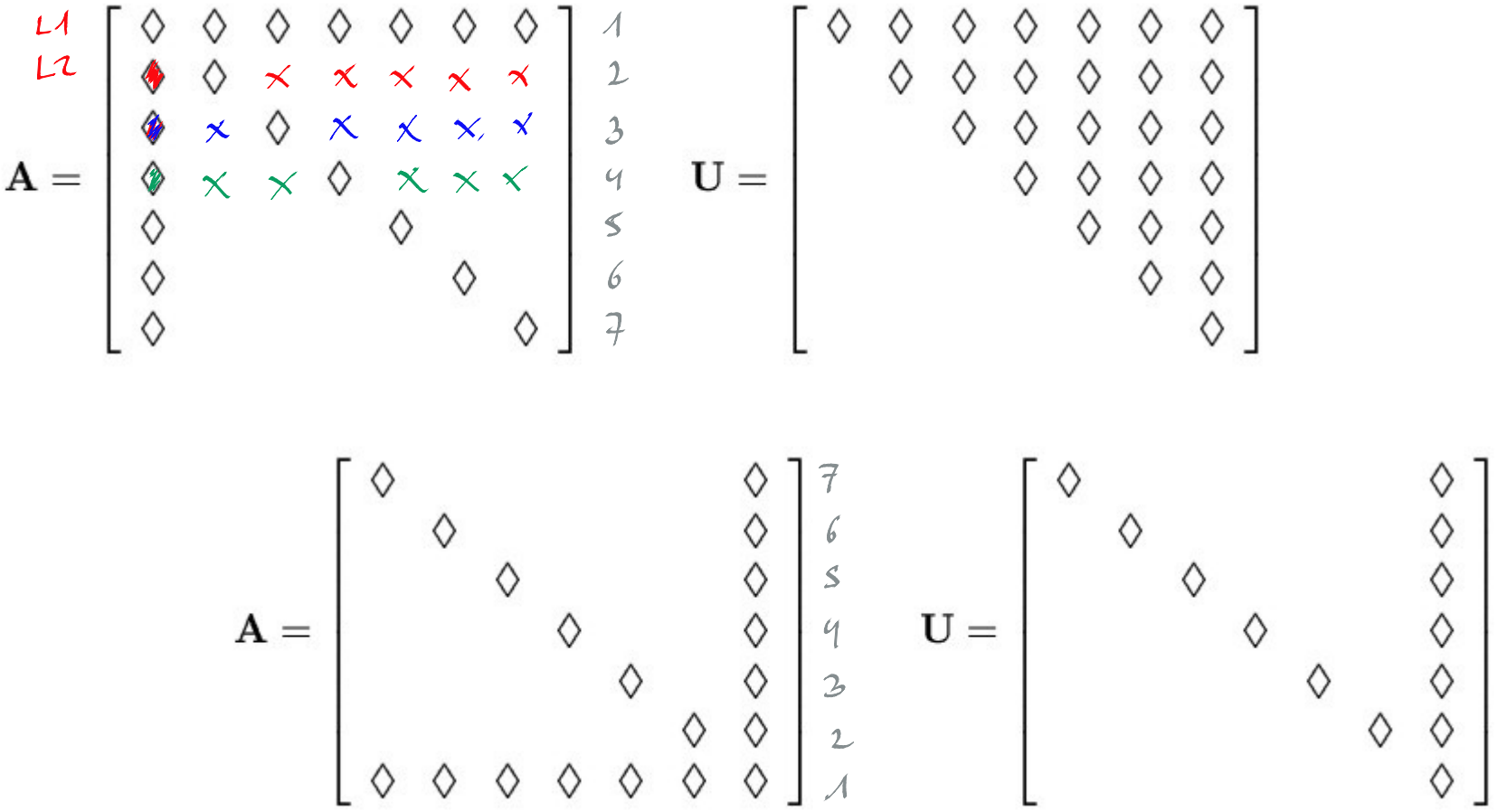
Matrice symétrique définie-positive : Méthode de Cholesky

$$
\begin{aligned}
b_{11} &= \sqrt{a_{11}} \\
b_{i1} &= \frac{a_{i1}}{b_{11}} && i = 2, \ldots, n \\
b_{jj} &= \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} b_{jk}^2} && j = 2, \ldots, n \\
b_{ij} &= \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} b_{ik} b_{jk}}{b_{jj}} && j = 2, \ldots, n,\ i = j+1, \ldots, n
\end{aligned}
$$

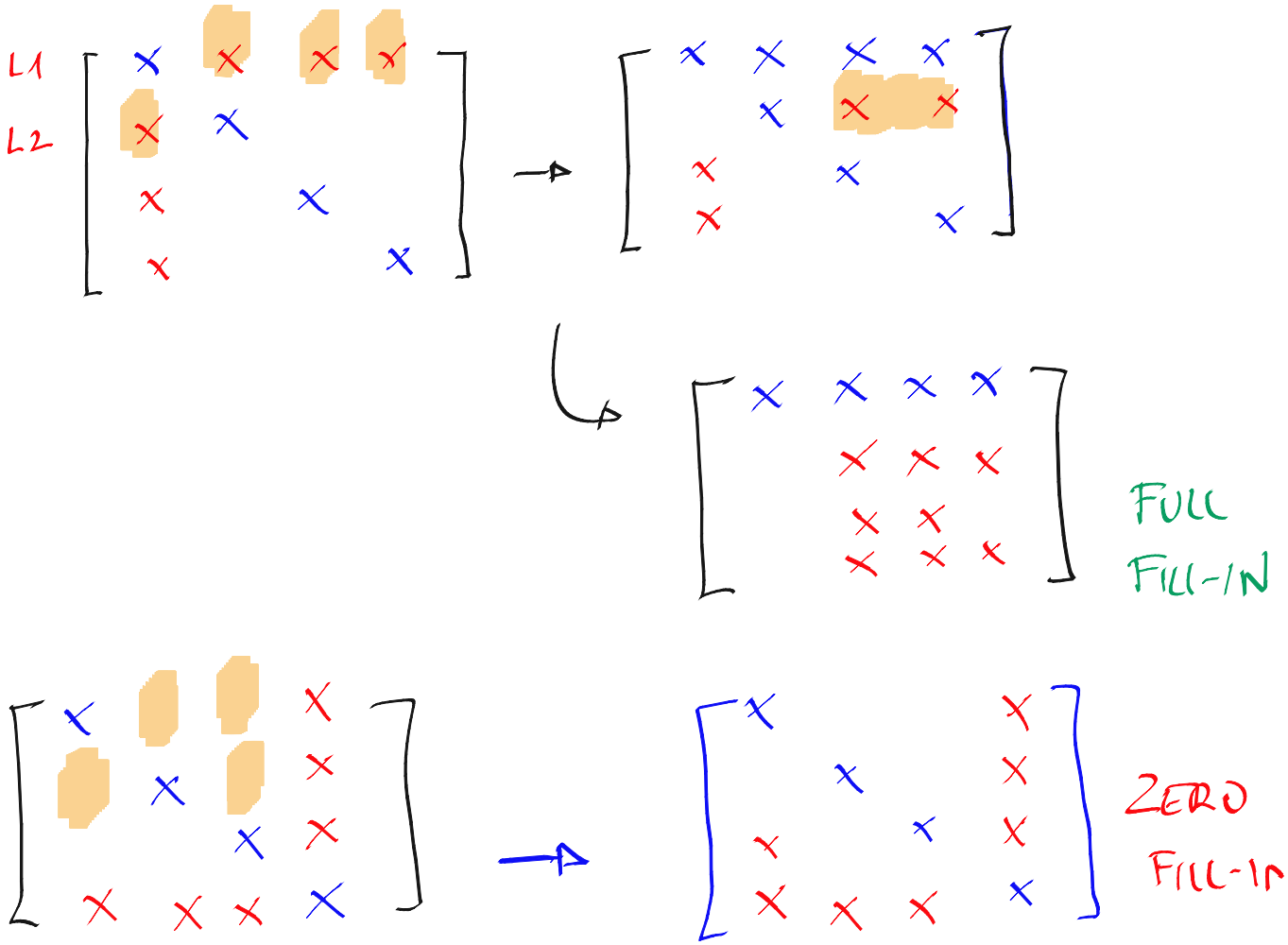
$$\mathbf{A = BB^T}$$

Plus intéressante que l'élimination gaussienne en termes d'opération,
Mais valable que pour des matrices symétriques définies positives

Factorisation de matrices creuses : Problème du *fill-in*

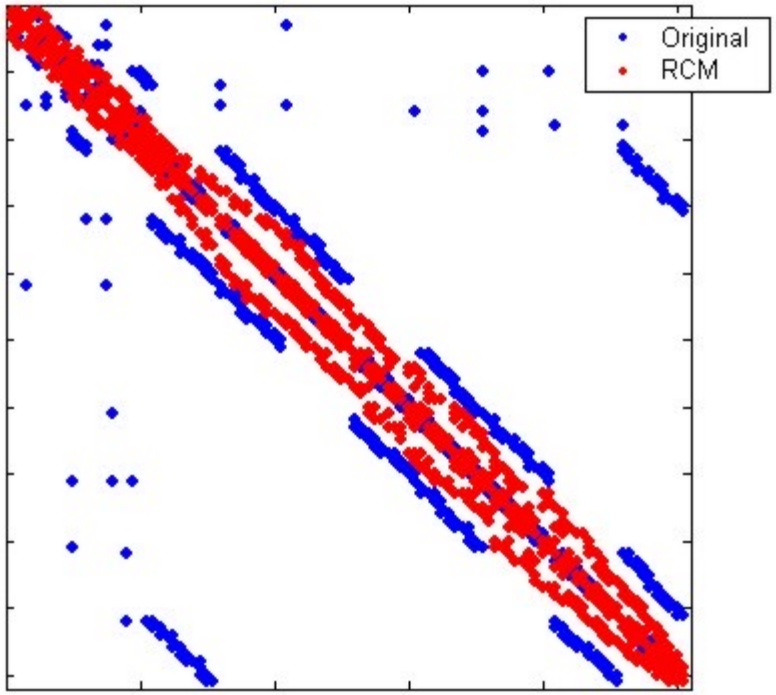


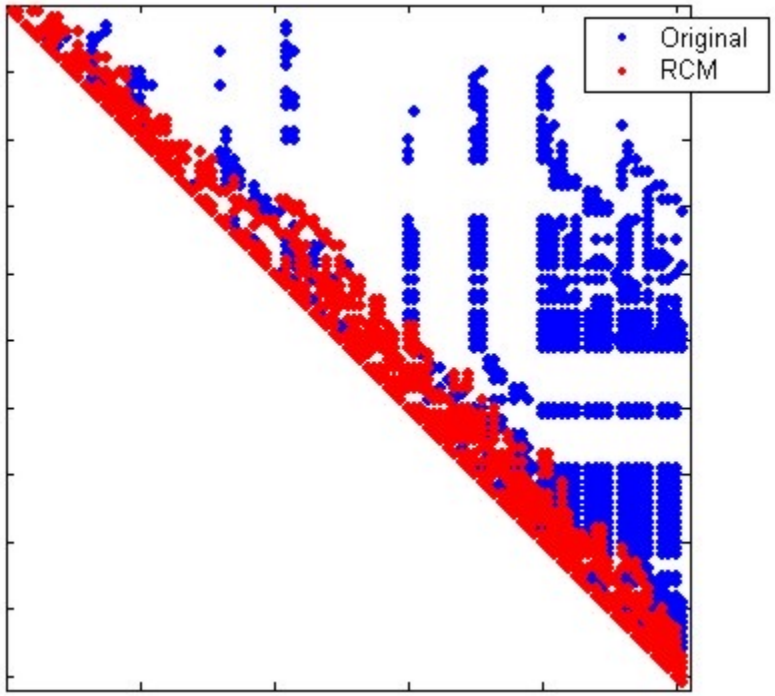
Fill-in



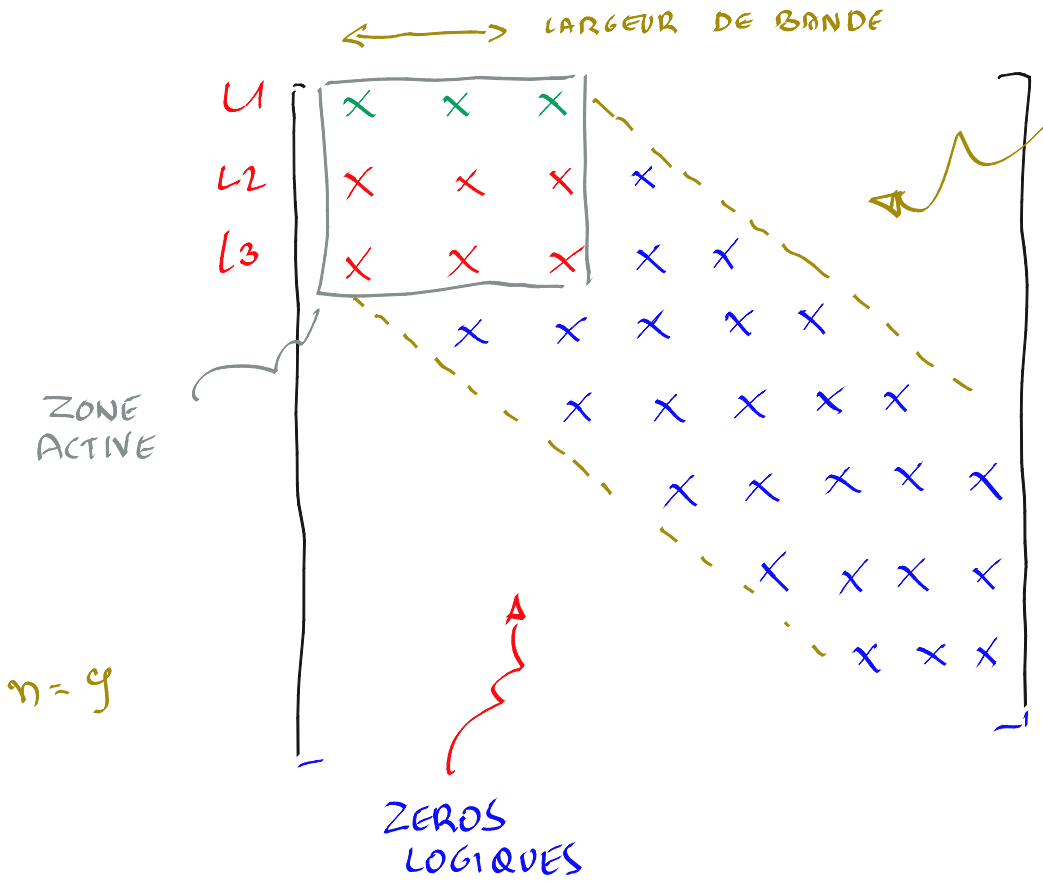
Seule, la numérotation des noeuds est cruciale !

Fill-in et renumérotation des variables !



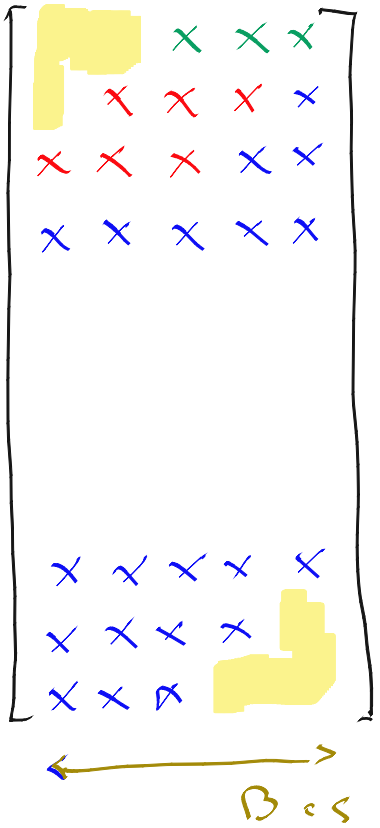


Yannakakis, Computing the minimum fill-in is NP-complete, SIAM J. Algebraic and Discrete Methods, Vol. 2, 1981, 77-79.



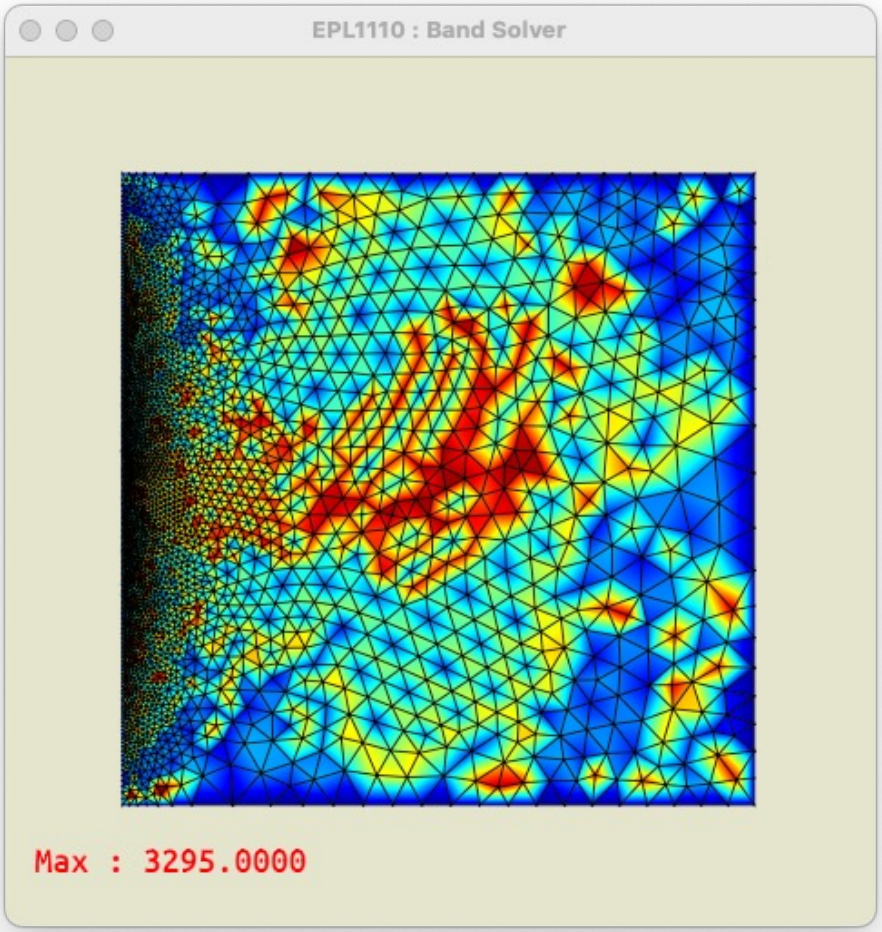
STOCKAGE $\mathcal{O}(nb)$

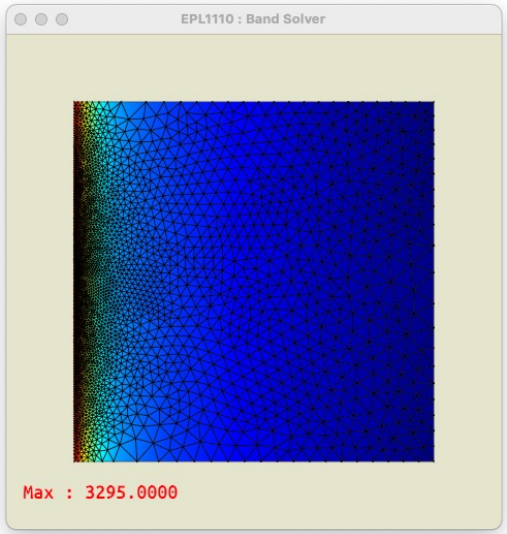
COUT $\mathcal{O}(nb^2)$



Stockage de la matrice bande

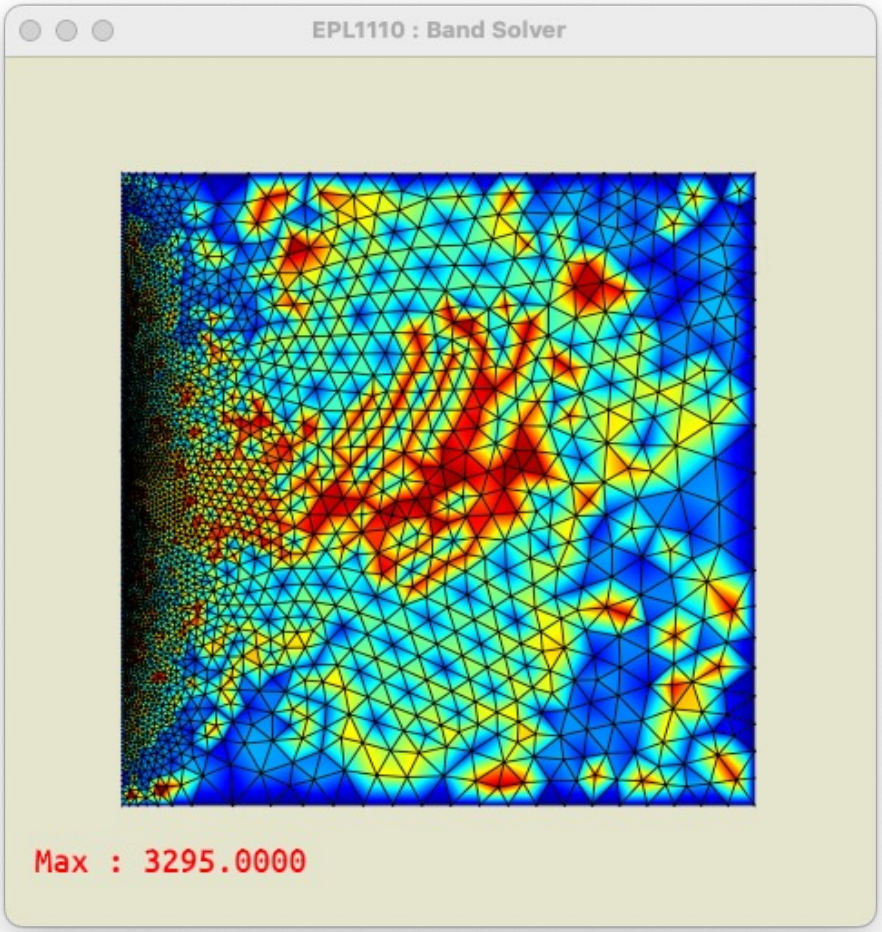
En modifiant la numérotation des noeuds…

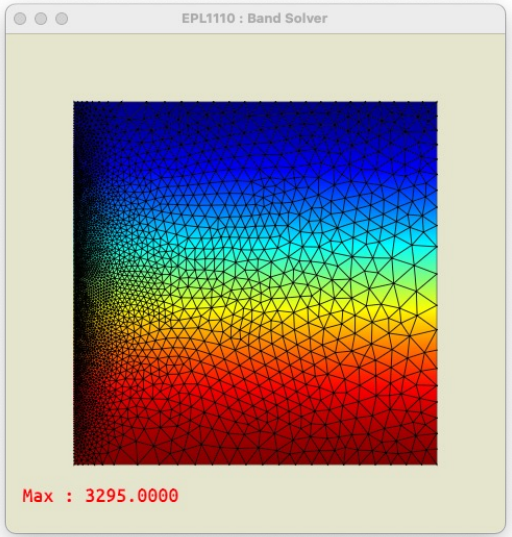




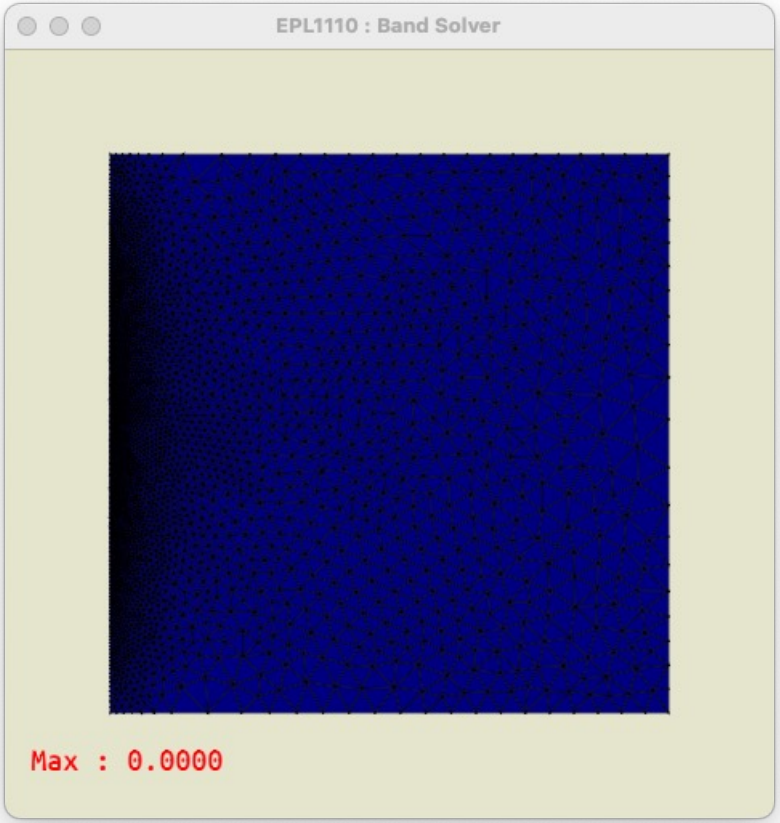

```
    BandSize Gaussian
    Matrix size       :      3296
    Matrix band       :       610
    Bytes required    : 16110848


    Full Gaussian elimination
    Matrix size       :      3296
    Bytes required    : 86935296
```

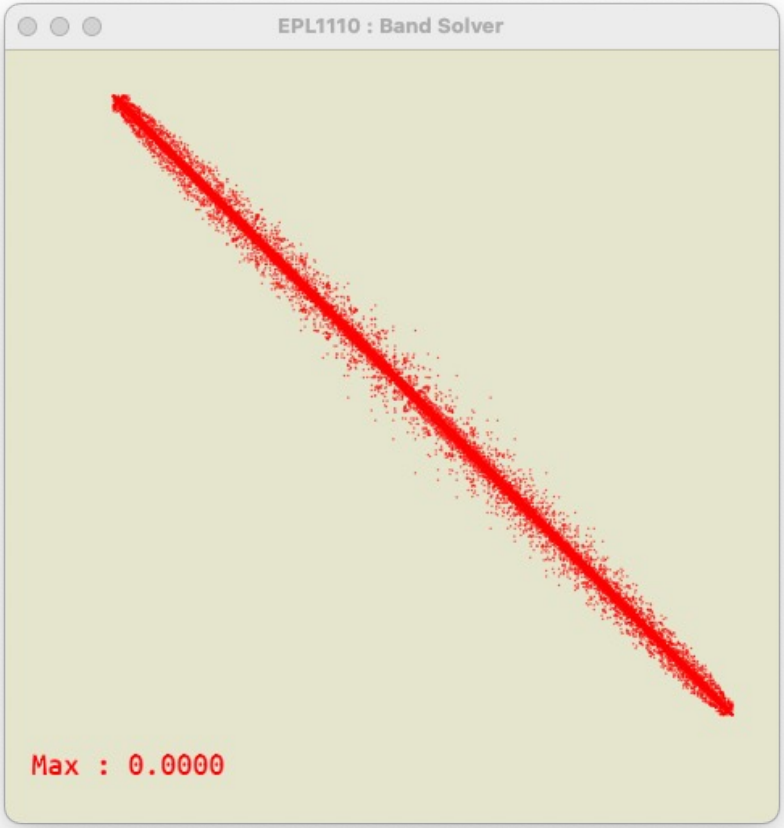
En modifiant la numérotation des noeuds…



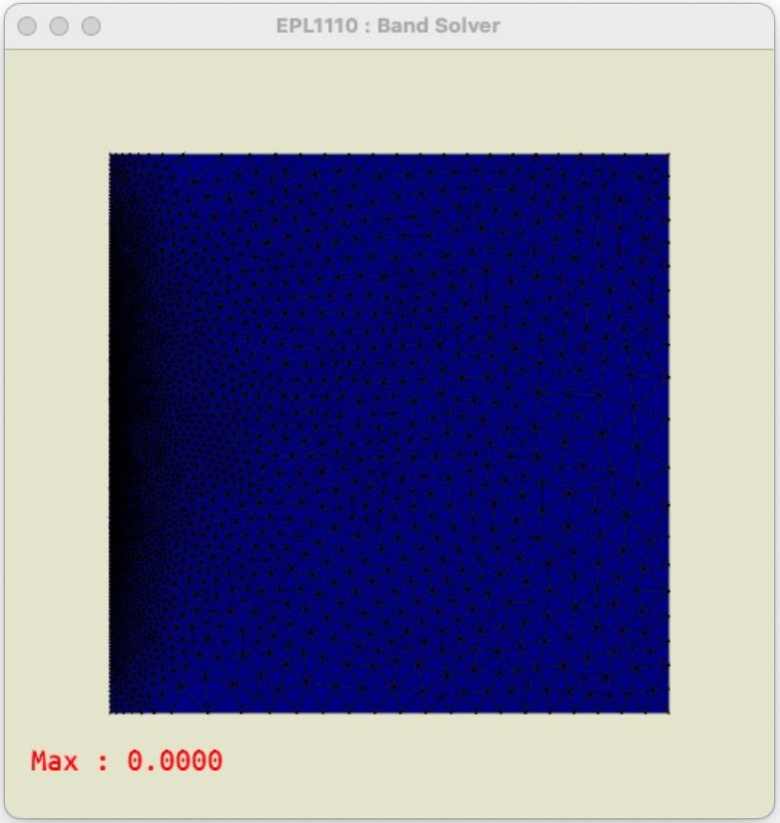


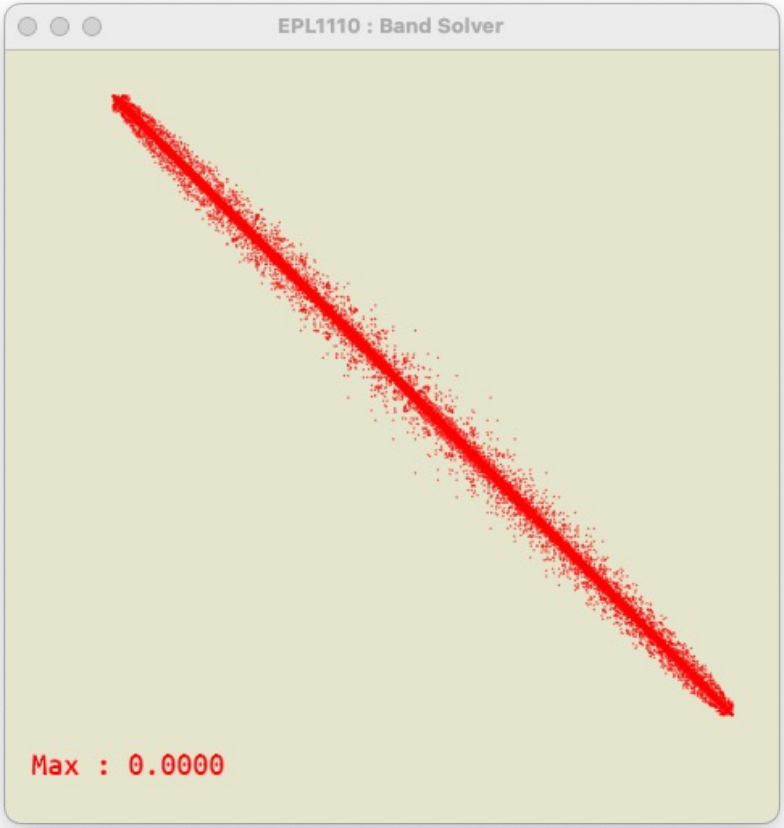

```
BandSize Gaussian
Matrix size       :      3296
Matrix band       :       402
Bytes required    : 10626304



Full Gaussian elimination
Matrix size       :      3296
Bytes required    : 86935296
```



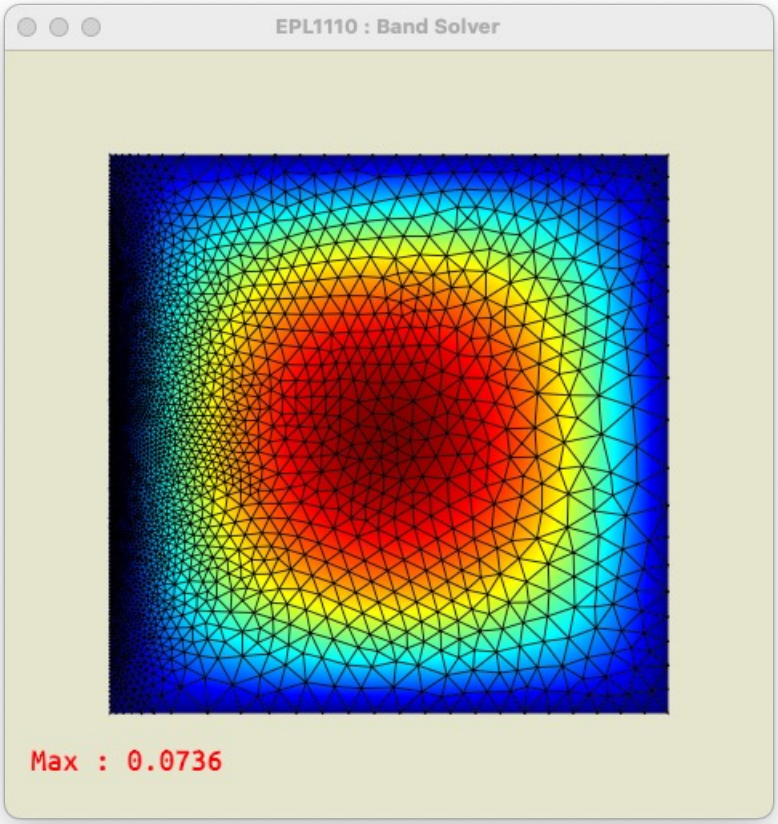


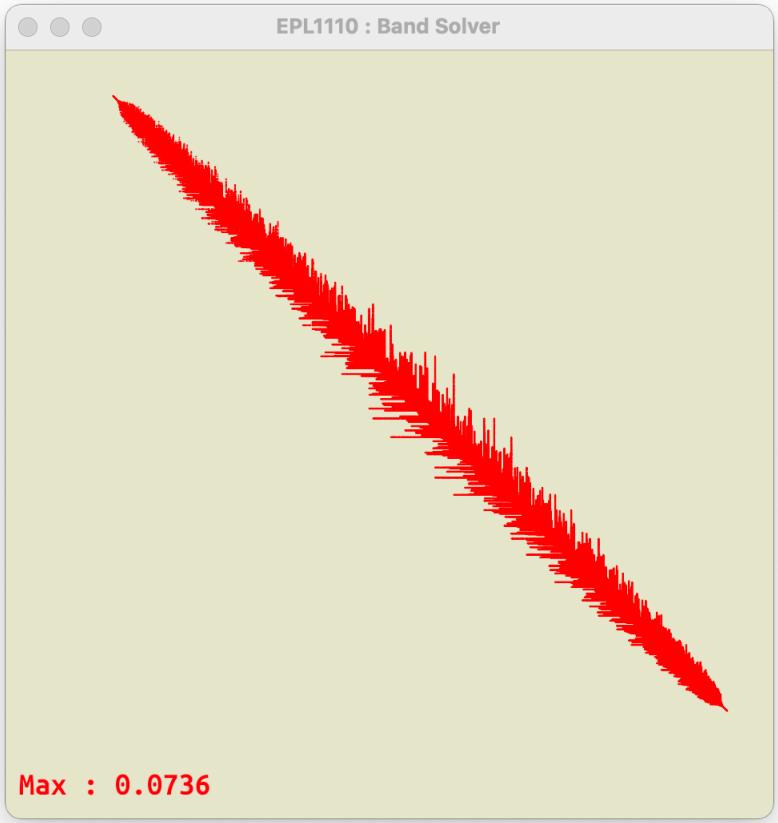
Après l’assemblage :-)





Après les conditions frontières :-)

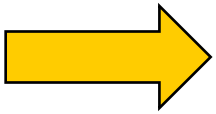




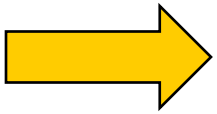
Après résolution :-)

Quel est le vrai facteur critique pour des simulations de grande taille ?

Précision du résultat
Faut-il pivoter ?
Comment minimiser la propagation des erreurs d'arrondis ?
Simple ou double précision ?
Matrices sym. déf. pos. : il n'est pas requis de pivoter !

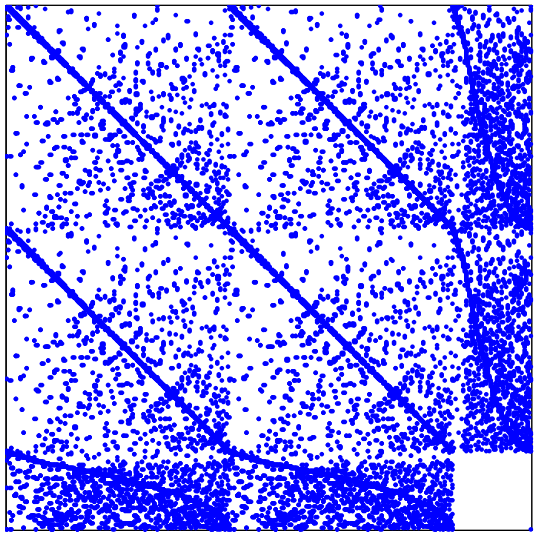
Aujourd'hui 

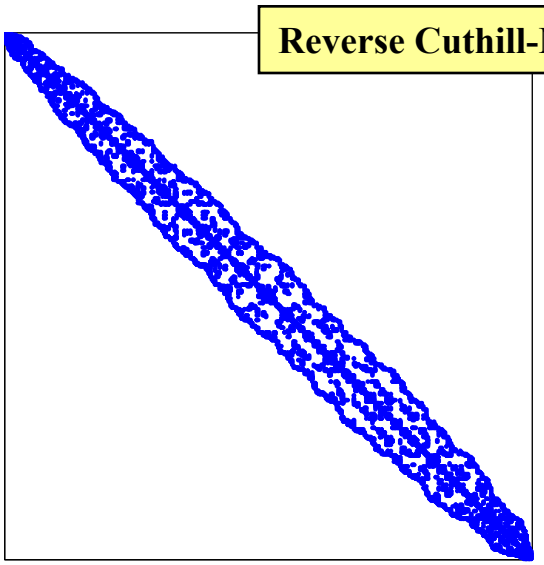
Espace mémoire requis
Stockage de U ou LU
Calcul en simple ou en double précision ?
Stockage en simple ou en double précision ?

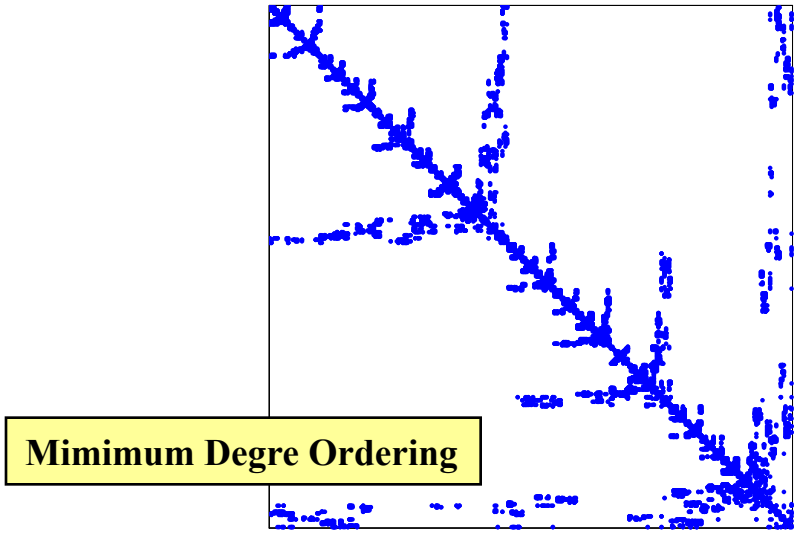
Hier 

Temps de calcul « cpu »
Heuristiques de rénumérotation
Utilisation des outils BLAS et LAPACK

Heuristiques de renumérotation





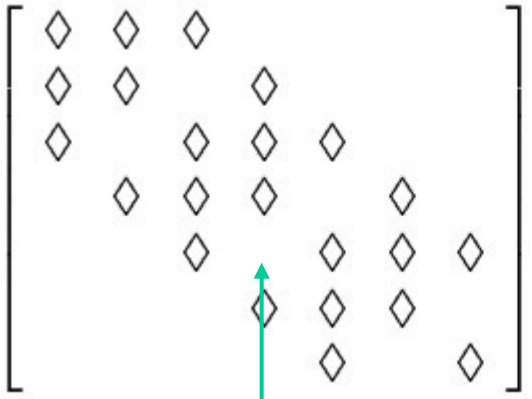


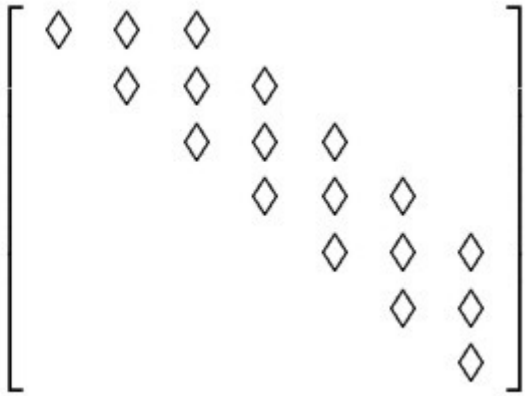
Solveur de Gauss pour matrices bandes

Coût calcul : $O(n\beta^2)$

$$\beta(A_{ij}) - 1 = max_{ij}\left\{|i-j|, \quad \forall (i,j) \text{ tels que } A_{ij} \neq 0\right\}.$$

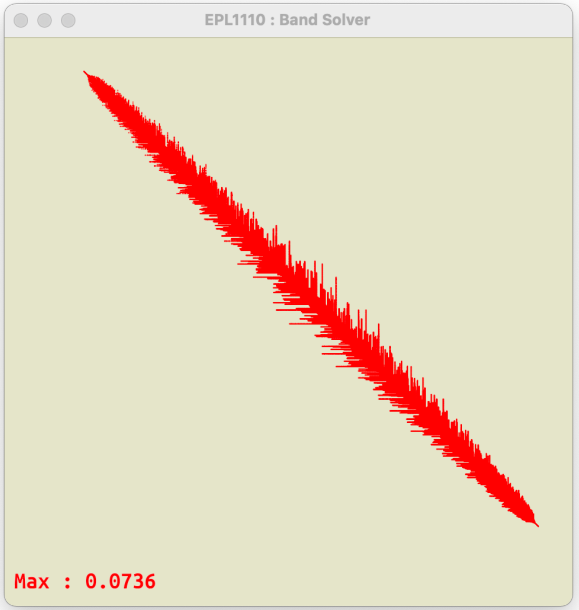
Concept de largeur de bande

$\mathbf{A} =$ 

$\mathbf{U} =$ 

La numérotation des inconnues est cruciale

Zéro logique traité comme un zéro numérique

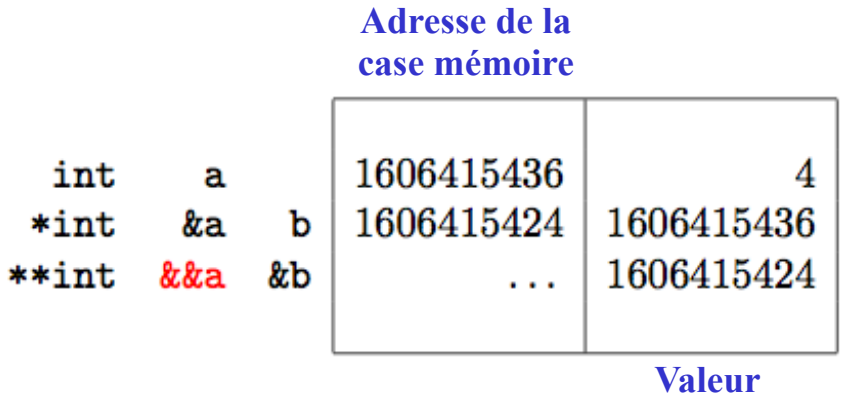



```
femBandSystem *femBandSystemCreate(int size,int band);
void femBandSystemInit(Band *myBand);
void femBandSystemPrint(Band *myBand);
void femBandSystemPrintInfos(Band *myBand);
void femBandSystemConstrain(Band *myBand,int myNode,double myValue);
void femBandSystemdEliminate(Band *myBand);
void femBandSystemAssemble(Band *myBand,double *A,double *B,int *row,int *col,int n);
```

Homework 4 :
un solveur creux bande !

Le C est un langage de bas niveau : les pointeurs ;-(

```
int main(void)
{
   int a = 4;
   printf(" ====   a === %d \n",a);
   printf(" ====  &a === %d \n",&a);
   int *b = &a;  // &&a do not exist : why ?
   printf(" ==== &&a === %d \n",&b);
   exit(0);
}
```

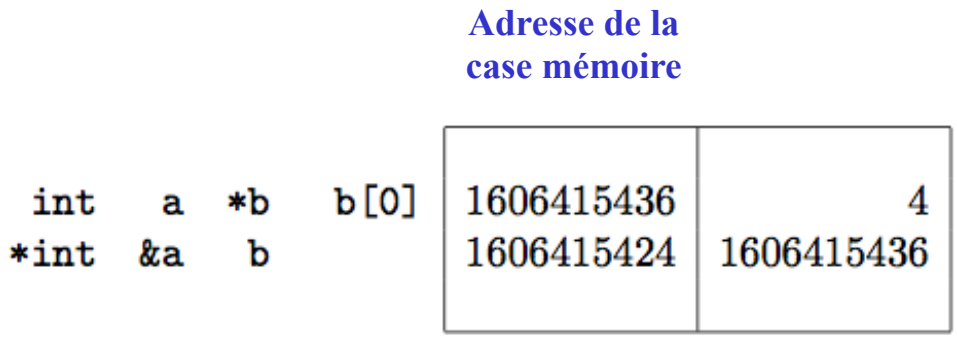


L'utilisation des pointeurs permet d'écrire des codes très efficaces et rapides…
Par contre, programmer est une tâche plus délicate et fastidieuse.
Mais, la rapidité d'un code est critique pour la simulation numérique (et le jeux !) :

Le langage C (ou C++) est bon choix ici !

Le C est un langage de bas niveau les pointeurs ;-(

```
int a = 0;
int *b = &a;
b[0] = 4;
printf(" ====  *b  === %d \n",*b);
printf(" ==== b[0] === %d \n",b[0]);
printf(" ====   a  === %d \n",a);
printf(" ====   b  === %d \n",b);
```



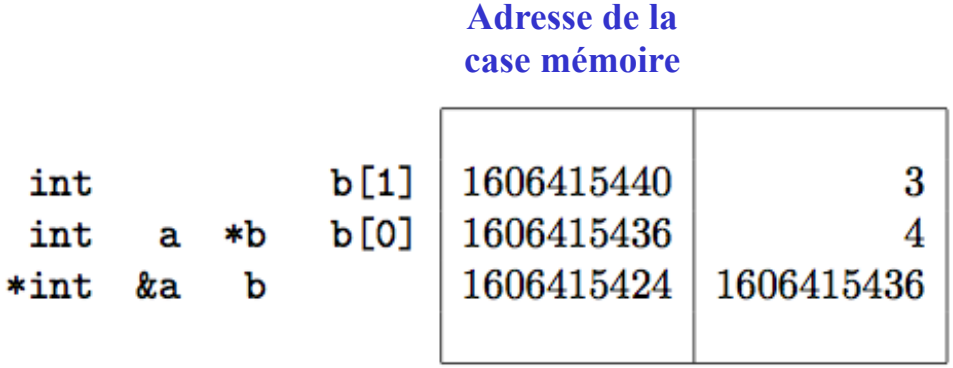
L'utilisation des pointeurs permet d'écrire des codes très efficaces et rapides…
Par contre, programmer est une tâche plus délicate et fastidieuse.
Mais, la rapidité d'un code est critique pour la simulation numérique (et le jeux !) :

Le langage C (ou C++) est bon choix ici !

On peut écrire n'importe où dans la mémoire de l'ordinateur ! Ouuuuuups : c'est pas joli

```
int a = 0;
int *b = &a;
b[0] = 4;
b[1] = 3;
printf(" ====  *b  === %d \n",*b);
printf(" ==== b[0] === %d \n",b[0]);
printf(" ==== b[1] === %d \n",b[1]);
printf(" ====   a  === %d \n",a);
printf(" ====   b  === %d \n",b);
printf(" ==== &b[0] == %d \n",&b[0]);
printf(" ==== &b[1] == %d \n",&b[1]);
```

Et le pire, c'est que cela marche parfois…
Parfois pas : `Segmentation fault`



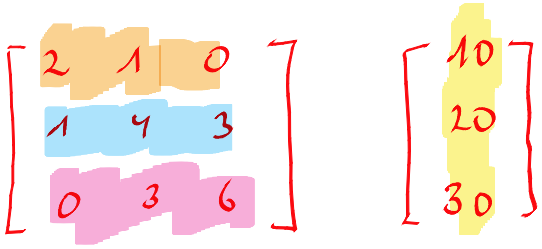
Et pour une matrice...

```
typedef struct {
    double *B;
    double **A;
    int size;
} femFullSystem;
```

```
femFullSystem *femFullSystemCreate(int size)
{
    femFullSystem *theSystem = malloc(sizeof(femFullSystem));
    femFullSystemAlloc(theSystem, size);
    femFullSystemInit(theSystem);

    return theSystem;
}
```

```
void femFullSystemAlloc(femFullSystem *mySystem, int size)
{
    int i;
    double *elem = malloc(sizeof(double) * size * (size+1));
    mySystem->A = malloc(sizeof(double*) * size);
    mySystem->B = elem;
    mySystem->A[0] = elem + size;
    mySystem->size = size;
    for (i=1 ; i < size ; i++)
        mySystem->A[i] = mySystem->A[i-1] + size;
}
```

Et zou...



double	B[0]		elem[0]	1606415390	10.0
double	B[1]		elem[1]	1606415394	20.0
double	B[2]		elem[2]	1606415398	30.0
double	A[0][0]		elem[3]	1606415402	2.0
double	A[0][1]		elem[4]	1606415406	1.0
double	A[0][2]		elem[5]	1606415410	0.0
double	A[1][0]		elem[6]	1606415414	1.0
double	A[1][1]		elem[7]	1606415418	4.0
double	A[1][2]		elem[8]	1606415422	3.0
double	A[2][0]		elem[9]	1606415426	0.0
double	A[2][1]		elem[10]	1606415430	3.0
double	A[2][2]		elem[11]	1606415434	6.0
*double	B	elem		1606415438	1606415390
*double	A[0]	elem+3	&elem[3]	1606415442	1606415402
*double	A[1]	elem+6	&elem[6]	1606415446	1606415414
*double	A[2]	elem+9	&elem[9]	1606415450	1606415426
**double	A			1606415454	1606415442

```
int i;
double *elem = malloc(sizeof(double) * size * (size+1));
mySystem->A = malloc(sizeof(double*) * size);
mySystem->B = elem;
mySystem->A[0] = elem + size;
mySystem->size = size;
for (i=1 ; i < size ; i++)
    mySystem->A[i] = mySystem->A[i-1] + size;
```

Elimination gaussienne

```
double* femFullSystemEliminate(femFullSystem *mySystem)
{
    double  **A, *B, factor;
    int     i, j, k, size;
    A    = mySystem->A;
    B    = mySystem->B;
    size = mySystem->size;

    for (k=0; k < size; k++) {
         for (i = k+1 ; i <  size; i++) {
            factor = A[i][k] / A[k][k];
            for (j = k+1 ; j < size; j++)
                A[i][j] = A[i][j] - A[k][j] * factor;
            B[i] = B[i] - B[k] * factor; }}

    for (i = size-1; i >= 0 ; i--) {
        factor = 0;
        for (j = i+1 ; j < size; j++)
            factor += A[i][j] * B[j];
        B[i] = ( B[i] - factor)/A[i][i]; }

    return(mySystem->B);
}
```

Imposition d'une condition essentielle

```
void  femFullSystemConstrain(femFullSystem *mySystem,
                             int myNode, double myValue)
{
    double  **A, *B;
    int     i, size;

    A    = mySystem->A;
    B    = mySystem->B;
    size = mySystem->size;

    for (i=0; i < size; i++) {
        B[i] -= myValue * A[i][myNode];
        A[i][myNode] = 0; }

    for (i=0; i < size; i++)
        A[myNode][i] = 0;

    A[myNode][myNode] = 1;
    B[myNode] = myValue;
}
```

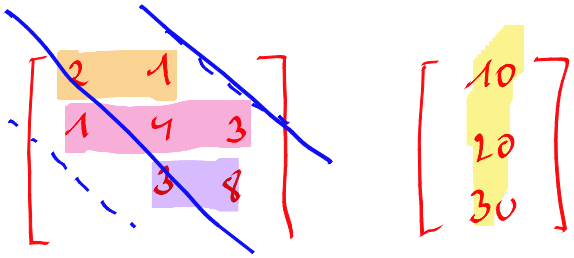
Et pour une matrice bande...

```
typedef struct {
    double *B;
    double **A;
    int size;
    int band;
} femBandSystem;
```

```
femFullSystem *femFullSystemCreate(int size)
{
    femFullSystem *theSystem = malloc(sizeof(femFullSystem));
    theSystem->A = malloc(sizeof(double*) * size);
    theSystem->B = malloc(sizeof(double) * size * (size+1));
    theSystem->A[0] = theSystem->B + size;
    theSystem->size = size;
    int i;
    for (i=1 ; i < size ; i++)
        theSystem->A[i] = theSystem->A[i-1] + size;
    femFullSystemInit(theSystem);

    return theSystem;
}
```

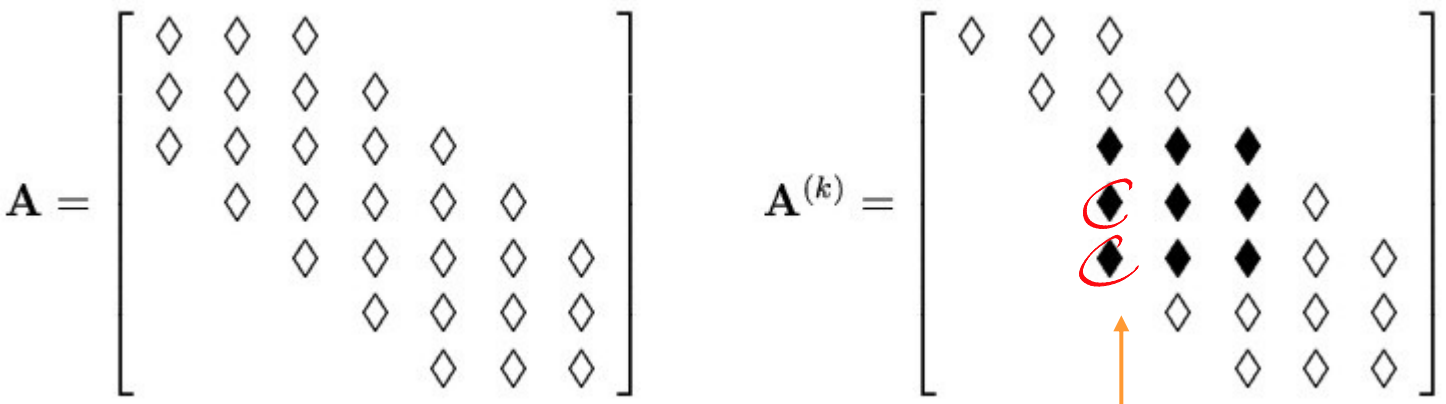
Et zou..

double	B[0]		elem[0]	1606415390	10.0
double	B[1]		elem[1]	1606415394	20.0
double	B[2]		elem[2]	1606415398	30.0
double	A[0][0]		elem[3]	1606415402	2.0
double	A[1][0]=A[0][1]		elem[4]	1606415406	1.0
double	A[2][0]=A[1][1]		elem[5]	1606415410	4.0
double	A[2][1]=A[1][2]		elem[6]	1606415414	3.0
double	A[2][2]		elem[7]	1606415418	6.0
*double	B	elem		1606415438	1606415390
*double	A[0]	elem+3	&elem[3]	1606415442	1606415402
*double	A[1]	elem+4	&elem[4]	1606415446	1606415406
*double	A[2]	elem+5	&elem[5]	1606415450	1606415410
**double	A			1606415454	1606415442




```
myBandSystem->B = malloc(sizeof(double)*size*(band+1));
myBandSystem->A = malloc(sizeof(double*)*size);
myBandSystem->size = size;
myBandSystem->band = band;
myBandSystem->A[0] = myBandSystem->B + size;
for (int i=1 ; i < size ; i++)
    myBandSystem->A[i] = myBandSystem->A[i-1] + band - 1;
```

Solveur de Gauss frontal



Coût calcul : $O(n\beta^2)$

Matrice active stockée sur la mémoire à accès rapide

Le reste est stocké sur la mémoire secondaire

La méthode frontale est cependant plus générale et peut s'appliquer à une matrice non-bande !
On effectue l'élimination et l'assemblage de manière simultanée :

ce sera la numérotation des éléments qui sera critique

Solveur de Gauss frontal

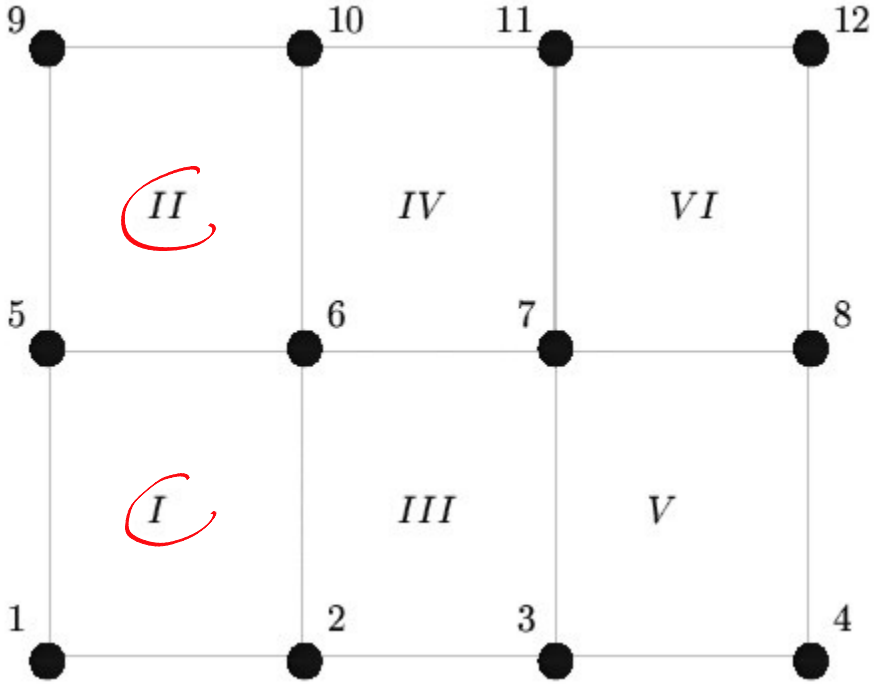
$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \lozenge & \lozenge & \lozenge & & & & \\ \lozenge & \lozenge & \lozenge & \lozenge & & & \\ \lozenge & \lozenge & \lozenge & \lozenge & \lozenge & & \\ & \lozenge & \lozenge & \lozenge & \lozenge & \lozenge & \\ & & \lozenge & \lozenge & \lozenge & \lozenge & \lozenge \\ & & & \lozenge & \lozenge & \lozenge & \lozenge \\ & & & & \lozenge & \lozenge & \lozenge \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}^{(k)} = \begin{bmatrix} \lozenge & \lozenge & \lozenge & & & & \\ & \lozenge & \lozenge & \lozenge & & & \\ & & \blacklozenge & \blacklozenge & \blacklozenge & & \\ & & \blacklozenge & \blacklozenge & \blacklozenge & \lozenge & \\ & & \blacklozenge & \blacklozenge & \blacklozenge & \lozenge & \lozenge \\ & & & \lozenge & \lozenge & \lozenge & \lozenge \\ & & & & \lozenge & \lozenge & \lozenge \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}^{(k)} = \begin{bmatrix} \lozenge & \lozenge & \lozenge & & & & \\ & \lozenge & \lozenge & \lozenge & & & \\ & & \blacklozenge & \blacklozenge & \blacklozenge & & \\ & & \blacklozenge & \blacklozenge & \blacklozenge & \lozenge & \\ & & \blacklozenge & \blacklozenge & \blacklozenge & \lozenge & \lozenge \\ & & & \lozenge & \lozenge & \lozenge & \lozenge \\ & & & & \lozenge & \lozenge & \lozenge \end{bmatrix}$$

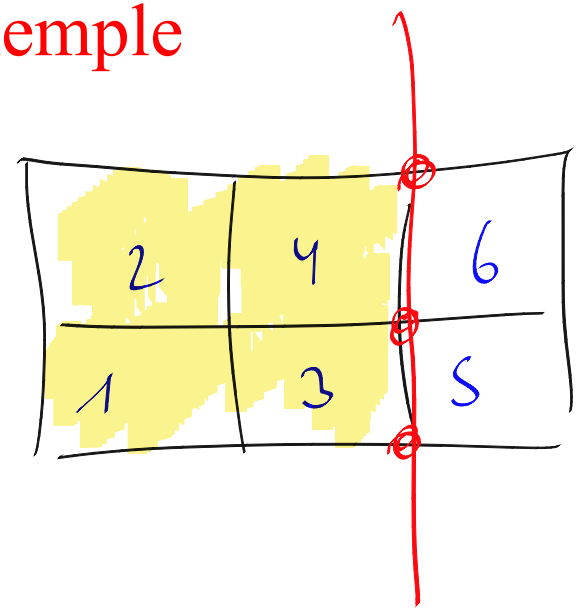
Exemple

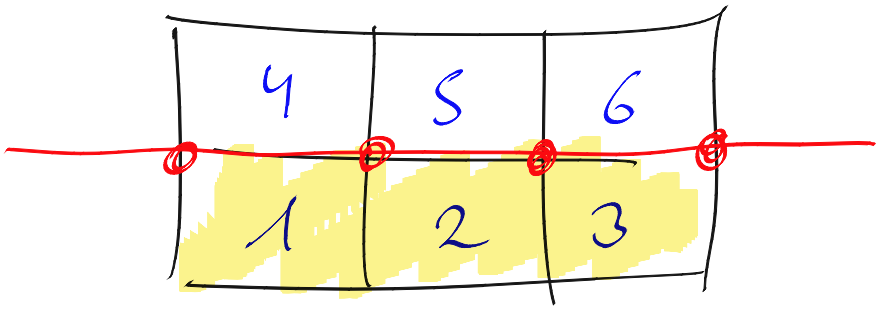
Seule, la numérotation des éléments est cruciale !



Elément	Sommets			
1	1	2	6	5
2	5	6	10	9
3	2	3	7	6
4	11	10	6	7
5	3	4	8	7
6	7	8	12	11

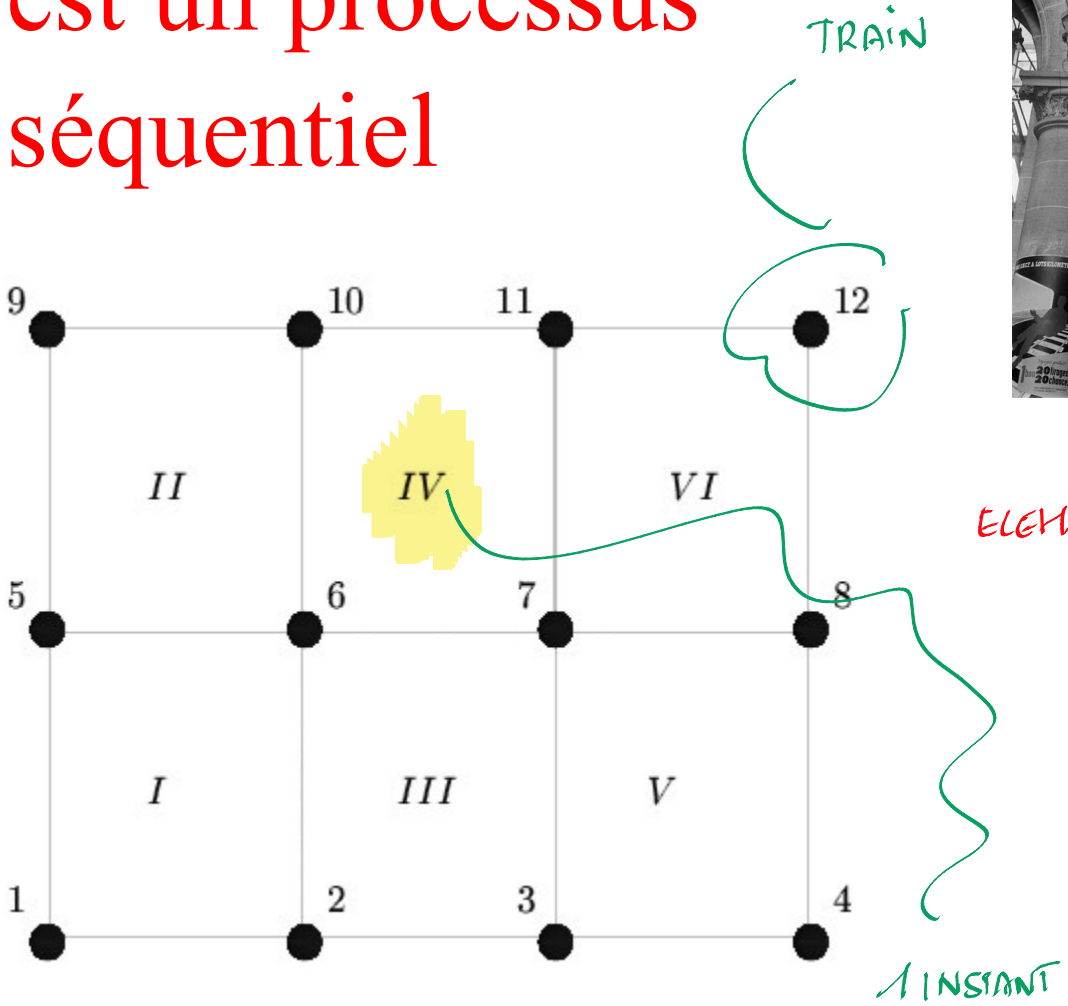
Exemple





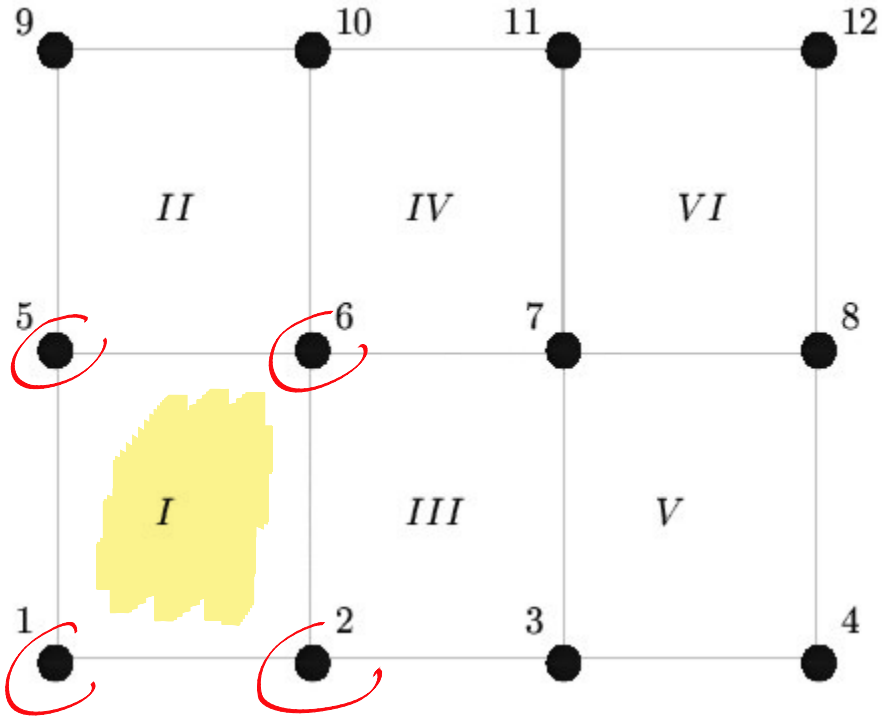
Seule, la numérotation des éléments est cruciale !

L'assemblage est un processus séquentiel

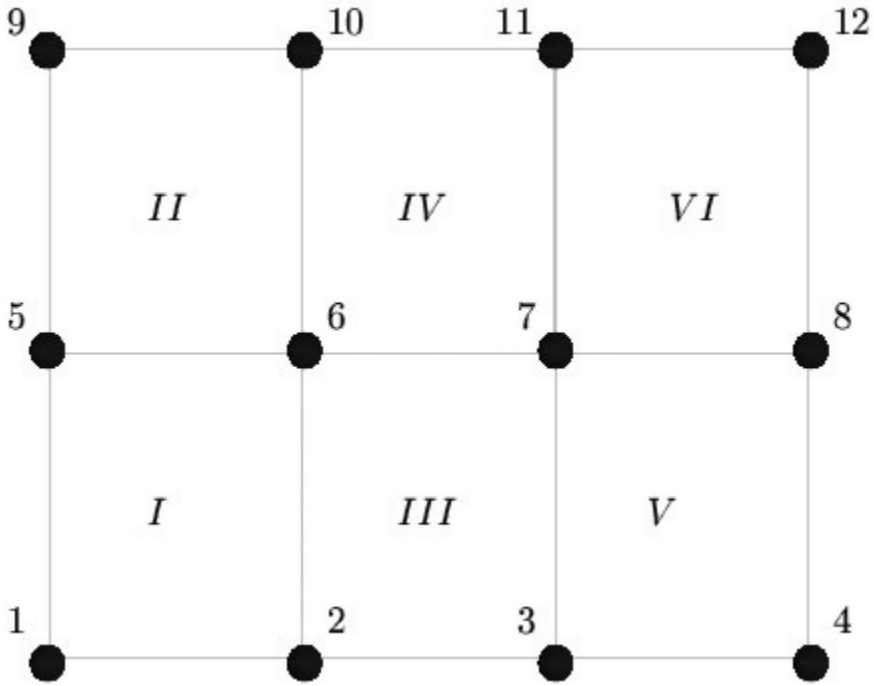


ELEMENT	1	12h	JOUR 1
	2	13h	JOUR 2
	3	14h	JOUR 3
	4	15h	JOUR 4
	5	16h	JOUR 5
	6	17h	JOUR 6

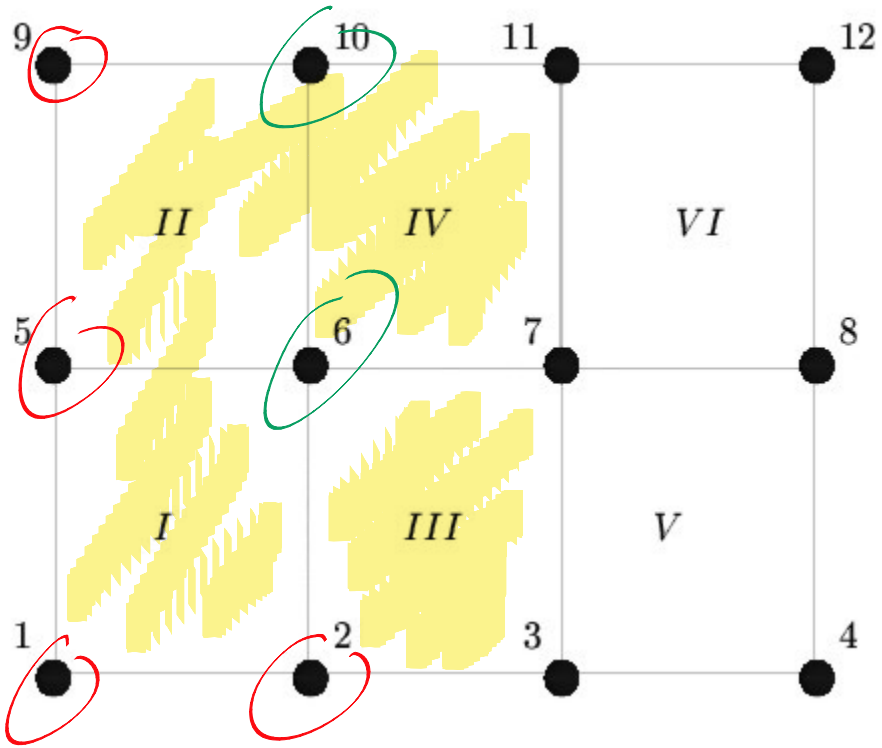
Chaque élément est une heure !

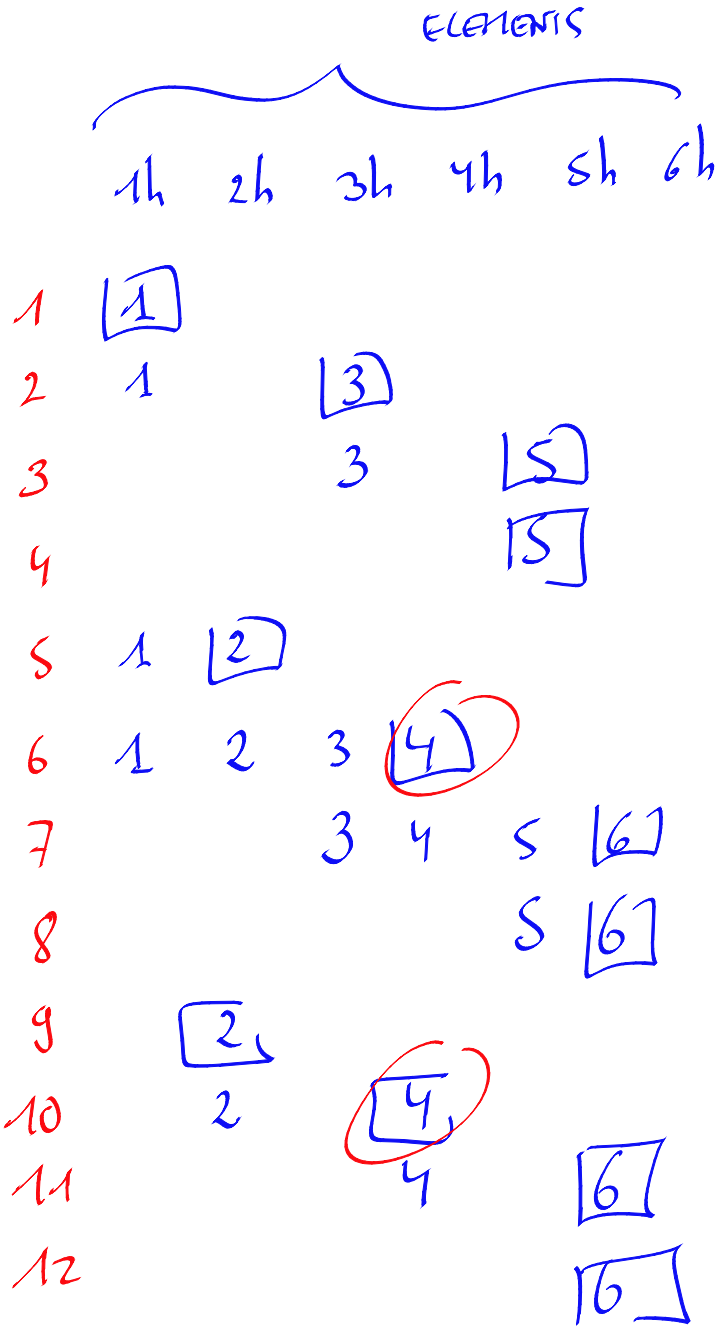


Chaque nœud est un train !



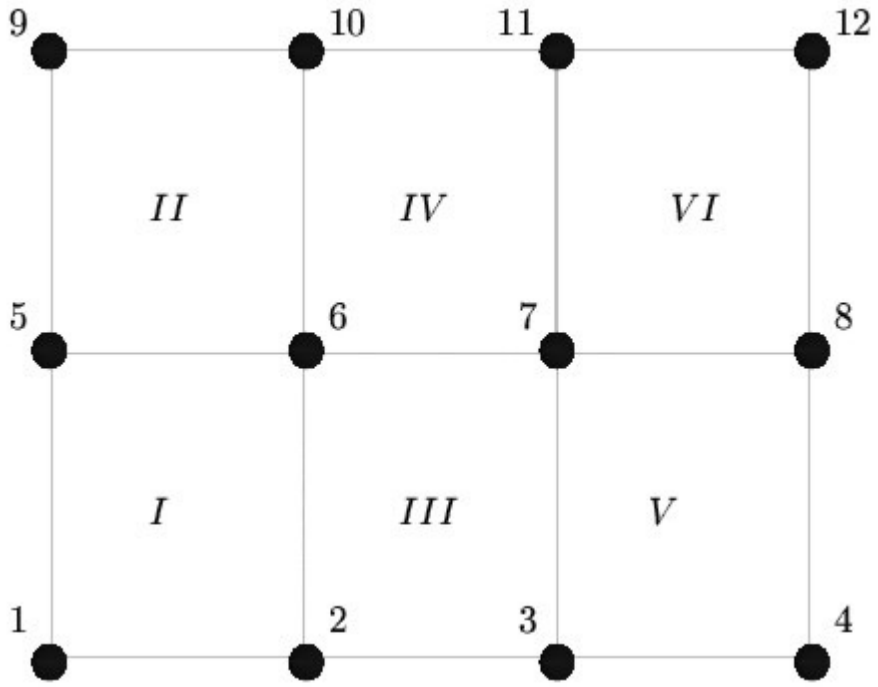
Le train est passé !



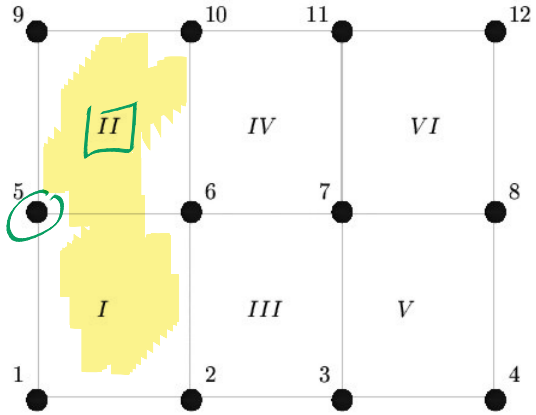


Heure ou élément où le train est passé !

Elément	Sommets			
1	1	2	6	5
2	5	6	10	9
3	2	3	7	6
4	11	10	6	7
5	3	4	8	7
6	7	8	12	11



Calcul de l'élément de disparition



Sommet	Elément de disparition
1	[1]
2	1 [3]
3	3 [5]
4	[5]
5	1 [2]
6	1 2 3 [4]
7	3 4 5 [6]
8	5 [6]
9	[2]
10	2 [4]
11	4 [6]
12	[6]

Attribuer une voie libre à un train !

Elément	Sommets			
1	1	2	6	5
2	5	6	10	9
3	2	3	7	6
4	11	10	6	7
5	3	4	8	7
6	7	8	12	11

HEURES	1	2	3	4	5	6
1	1	10	10	10	8	8
2	2	2	2	11	11	11
3	6	6	6	6	4	12
4	5	5	3	3	3	
5		9	7	7	7	7

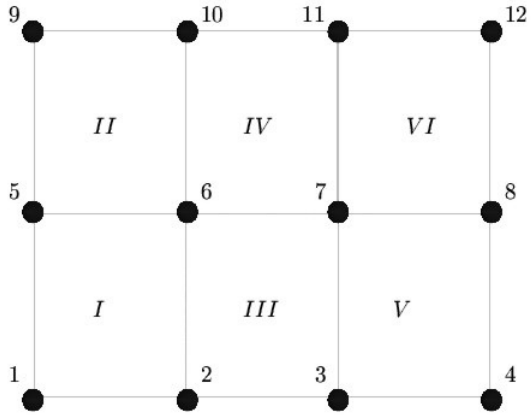
Sommet	Elément de disparition					
1	1					
2	1		3			
3			3		5	
4					5	
5	1	2				
6	1	2	3	4		
7			3	4	5	6
8					5	6
9		2				
10		2		4		
11				4		6
12						6

Attribuer une voie libre à un train !

	Occupation de la matrice active lors de l'assemblage des éléments					
Elément	1	2	3	4	5	6
Destination						
1	**1**	10	10	**10**	**4**	**12**
2	2	2	**2**	11	11	**11**
3	6	6	6	**6**	8	**8**
4	5	**5**	3	3	**3**	
5		**9**	7	7	7	**7**
6						

→ **Calcul de la taille requise pour la matrice active**
Comment dimensionner la jonction Nord-Midi ?

Factorisation symbolique



	Occupation de la matrice active lors de l'assemblage des éléments					
Elément	1	2	3	4	5	6
Destination						
1	**1**	10	10	**10**	**4**	**12**
2	2	2	**2**	11	11	**11**
3	6	6	6	**6**	8	**8**
4	5	**5**	3	3	**3**	
5		**9**	7	7	7	**7**
6						

→ **Calcul de la taille requise pour la matrice active**

Méthodes itératives

Matrice définie positive

Trouver $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ tel que

$$J(\mathbf{x}) = \min_{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n} \underbrace{\left(\frac{1}{2}\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}\mathbf{v} - \mathbf{b} \cdot \mathbf{v}\right)}_{J(\mathbf{v})}$$

Soit $\mathbf{x}^0$ une approximation initiale de la solution exacte $\mathbf{x}$ de (7.4),

il s'agit alors construire une série d'approximations $\mathbf{x}^i \to \mathbf{x}$
de la manière suivante

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}^k$$