

Décomposition de domaine avec multipréconditionnement adaptatif pour les calculs de structure

P. GOSSELET^a, C. BOVET^b, A. PARRET-FRÉAUD^c, N. SPILLANE^d

a.LMT (ENS Paris-Saclay/CNRS/U. Paris-Saclay), gosselet@lmt.ens-paris-saclay.fr

b. ONERA, christophe.bovet@onera.fr

c. SAFRAN TECH, augustin.parret-freaud@safrangroup.com

d. CMAP (X/CNRS), nicole.spillane@polytechnique.edu

Résumé :

Nous présentons rapidement les performances de la méthode FETI avec multipréconditionnement adaptatif. Cet algorithme vise à conserver la robustesse de la méthode FETI multipréconditionnée (introduire sous le nom de FETI-simultané) tout en limitant les coûts numériques associés. Une présentation détaillée est disponible dans [18].

Abstract :

We briefly present some assessments of the adaptive multipreconditioned FETI solvers (AMPFETI) on realistic industrial problems and hardware. This algorithm (known as the adaptive multipreconditioned conjugate gradient algorithm) aims at preserving the robustness of multipreconditioned FETI algorithm (first introduced as Simultaneous FETI) while limiting as much as possible the computational burden of the method. A detailed presentation is available in [18].

Mots clés : Décomposition de domaine ; multipréconditionnement adaptatif ; calcul parallèle ; solveur de Krylov

1 Introduction

Les méthodes de décomposition de domaine offrent un cadre favorable à la résolution en parallèle des systèmes linéaires issus de la discrétisation d'équations aux dérivées partielles. En effet, les algorithmes qui découlent, et en particulier les méthodes associées au complément de Schur, Balancing Domain Decomposition (BDD) [1], Finite Element Tearing and Interconnecting (FETI) [2], et leurs variantes contraintes [3, 4], impliquent des échanges entre voisins et quelques communications tous-vers-tous. De plus la structure creuse du problème grossier introduit pour assurer l'extensibilité des méthodes permet des mises en œuvre multiniveaux à grande échelle [5, 6].

Ces méthodes souffrent d'une perte de performance dans certains cas (interfaces irrégulières, mauvais aspect des sous-domaines, fortes hétérogénéités mal placées vis-à-vis de l'interface) qui les rendent inefficaces pour résoudre de nombreux systèmes générés par des simulations de mécanique des structures.

Suite à des avancées théoriques [7, 8], il a été compris que les pertes de performances étaient liées à l'incapacité du préconditionneur (une somme pondérée des inverses des matrices des sous-domaines) à prendre en compte certains phénomènes globaux. Des corrections ont été alors proposées sur la base d'une analyse préalable de problèmes aux valeurs propres généralisés localisés [9, 10, 11] et de l'élimination des modes problématiques ou de l'optimisation du *scaling* [12].

Dans l'algorithme FETI-simultané [13], il a été proposé d'éliminer à la volée les contributions locales néfastes. Cet algorithme est en fait un cas particulier de solveur de Krylov MultiPréconditionné [14, 15, 16], d'où la dénomination par la suite de MPFETI. Dans MPFETI l'additivité du préconditionneur est exploitée de manière à générer autant de directions de recherche que de sous-domaines : l'information locale est préservée et une combinaison optimale est calculée à chaque itération. L'inconvénient de cette méthode est la grande quantité d'information générée à chaque itération qui doit être stockée à cause de la perte de la récurrence courte. De façon à limiter cette information, un critère de sélection a été proposé dans [17] où les vecteurs dont les contributions n'ont pas besoin d'être individualisées sont sommés (comme dans un FETI classique). On parle alors de FETI MultiPréconditionné Adaptatif (AMPFETI).

Cet acte présente un extrait des résultats de l'article [18] consacré à l'étude des performances d'une mise en œuvre des algorithmes AMPFETI sur des cas tests académiques et industriels.

2 L'algorithme AMPCG

Afin d'éviter de compliquer les notations, on présente l'algorithme dans un cadre le plus simple possible de problèmes à structure additive. Il sera appliqué à la méthode FETI dans la section suivante.

On considère le système $\left(\sum_{s=1}^N \mathbf{A}^s\right) \mathbf{x} = \mathbf{b}$ où (\mathbf{A}^s) est une famille de matrices symétriques positives telles que $\mathbf{A} = \left(\sum_{s=1}^N \mathbf{A}^s\right)$ soit définie. On suppose qu'un préconditionneur efficace peut prendre la forme $\mathbf{M} = \left(\sum_{s=1}^N \mathbf{M}^s\right)$ avec (\mathbf{M}^s) est une famille de matrices symétriques positives telles que \mathbf{M} soit définie. On suppose de plus que ce préconditionneur est tel que le spectre de l'opérateur préconditionné, qui correspond aux valeurs propres généralisées des matrices (\mathbf{A}, \mathbf{M}) , est borné inférieurement par 1.

L'algorithme 1 donne diverses variantes du gradient conjugué multipréconditionné avec adaptation, avec les notations suivantes : $\mathbf{1} = (1 \dots 1)^T$, \mathbf{r} est le résidu, \mathbf{Z} est le (multi)vecteur des résidus préconditionnés, \mathbf{W} est le (multi)vecteur des directions de recherche.

L'idée du multipréconditionnement est d'optimiser la contribution de chaque sous-domaine au résidu préconditionné à chaque itération de manière à diminuer l'erreur autant que possible. Dans le cas d'un préconditionnement classique, on ne manipule que des vecteurs et des scalaires. Dans le cas multipréconditionné, on manipule des multivecteurs à N colonnes $(\mathbf{Z}, \mathbf{W}, \mathbf{Q})$, des vecteurs de dimension N (γ, α) et des matrices $N \times N$ (Δ, Φ) . L'algorithme est présenté avec réorthogonalisation totale, ce qui est facultatif sur le gradient conjugué classique, mais obligatoire dans le cas multipréconditionné. Le coût associé au stockage et à la réutilisation de toutes les directions de recherche est d'ailleurs le problème majeur des algorithmes multipréconditionnés.

Le τ -test *global* permet d'alterner entre des itérations où le préconditionneur classique est suffisant pour assurer une décroissance de l'erreur satisfaisante, et des itérations multipréconditionnées. Le τ -test *local* permet de sélectionner les directions de recherche qui ont une contribution notable à la décroissance de l'erreur, et de manipuler des multivecteurs à nombre de colonnes variable entre 1 et N .

Algorithm 1: Gradient conjugué multipréconditionné adaptatif. Les données sont l'initialisation \mathbf{x}_0 , la tolérance $\epsilon > 0$ and le seuil $\tau > 0$ pour les tests.

```

1  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$ 
2 switch do
3   case Préconditionnement classique do
4      $\mathbf{Z}_0 = (\sum_s \mathbf{M}^s)\mathbf{r}_0$  (vecteur)
5   case Multipréconditionnement do
6      $\mathbf{Z}_0 = (\mathbf{M}^1\mathbf{r}_0 | \dots | \mathbf{M}^N\mathbf{r}_0)$  (N-multivecteur)
7  $\mathbf{W}_0 = \mathbf{Z}_0$ 
8  $i = 0$ 
9 while  $\sqrt{\mathbf{r}_i^\top \mathbf{Z}_i \mathbf{1}} > \epsilon$  do
10   $\mathbf{Q}_i = \mathbf{A}\mathbf{W}_i$ 
11   $\Delta_i = \mathbf{Q}_i^\top \mathbf{W}_i$ 
12   $\gamma_i = \mathbf{Z}_i^\top \mathbf{r}_i$ 
13   $\alpha_i = \Delta_i^+ \gamma_i$ 
14   $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \mathbf{W}_i \alpha_i$ 
15   $\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i - \mathbf{Q}_i \alpha_i$ 
16  switch do
17    case Préconditionnement classique do
18       $\mathbf{Z}_{i+1} = (\sum_s \mathbf{M}^s)\mathbf{r}_{i+1}$  (vecteur)
19    case Multipréconditionnement do
20       $\mathbf{Z}_{i+1} = (\mathbf{M}^1\mathbf{r}_{i+1} | \dots | \mathbf{M}^N\mathbf{r}_{i+1})$  (N-multivecteur)
21    case  $\tau$ -test global do
22       $\mathbf{Z}_{i+1} = \begin{cases} (\mathbf{M}^1\mathbf{r}_{i+1} | \dots | \mathbf{M}^N\mathbf{r}_{i+1}) & \text{if } t_i := \frac{\gamma_i^\top \alpha_i}{\mathbf{r}_{i+1}^\top \mathbf{Z}_{i+1}} < \tau, \\ (\sum_s \mathbf{M}^s)\mathbf{r}_{i+1} & \text{otherwise.} \end{cases}$ 
23    case  $\tau$ -test local do
24       $t_i^s = \frac{(\mathbf{W}_i \alpha_i)^\top \mathbf{A}^s (\mathbf{W}_i \alpha_i)}{\mathbf{r}_{i+1}^\top \mathbf{M}^s \mathbf{r}_{i+1}}$ 
25       $\mathbf{Z}_{i+1} = \text{concatenate} \left( \{ \mathbf{M}^s \mathbf{r}_{i+1} ; t_i^s < \tau \}, \sum_{t_i^s > \tau} \mathbf{M}^s \mathbf{r}_{i+1} \right)$ 
26   $\mathbf{W}_{i+1} = \mathbf{Z}_{i+1}$ 
27  for  $0 \leq j \leq i$  do  $\left\{ \begin{array}{l} \Phi_{i,j} = \mathbf{Q}_j^\top \mathbf{W}_{i+1} \\ \mathbf{W}_{i+1} \leftarrow \mathbf{W}_{i+1} - \mathbf{W}_j \Delta_j^+ \Phi_{i,j} \end{array} \right.$ 
28   $i \leftarrow i + 1$ 
29 Return  $\mathbf{x}_i$ 

```

$N = 175$	Counters		Timers (s)			
	# iter.	# search dir.	Total	Precond.	Operator	Orthog.
FETI	371	371	1553.00	52.91%	29.77%	2.59%
AMPFETIL	103	1627	876.30	49.93%	15.97%	2.63%
AMPFETIG	120	1686	726.60	40.69%	24.49%	2.85%
$N = 250$	# iter.	# search dir.	Total	Precond.	Operator	Orthog.
FETI	405	405	1109.00	50.97%	28.71%	3.52%
AMPFETIL	103	2026	635.10	51.74%	14.52%	3.49%
AMPFETIG	121	2113	499.10	40.88%	23.87%	3.83%
$N = 500$	# iter.	# search dir.	Total	Precond.	Operator	Orthog.
FETI	544	544	721.60	49.40%	26.70%	7.75%
AMPFETIL	104	3907	408.20	43.73%	11.60%	12.25%
AMPFETIG	122	4613	319.52	30.75%	22.25%	12.64%

TABLE 1 – Woven composite REV : summary of results

3 Performances appliquées à FETI

Cette étude est empruntée à [18]. On utilise la méthode de décomposition de domaine duale FETI avec préconditionneur et projecteur de Dirichlet et avec *scaling* basé sur la rigidité [19]. Le cas test choisi est un volume élémentaire représentatif de composite tissé issu de Safran Tech basé sur [21, 20], figure 1a. La matrice est élastique linéaire isotrope, les brins sont linéaires élastiques orthotropes, l'hétérogénéité maximale est de l'ordre de 7.10^3 .

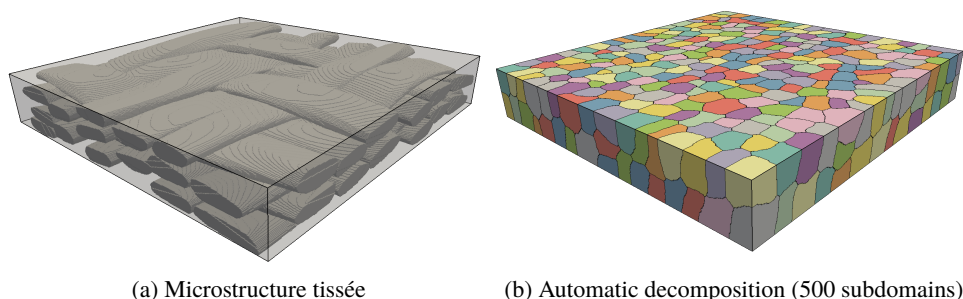


FIGURE 1 – Representative elementary volume of woven composite

Le problème discrétisé contient environ 10^8 inconnues, il est décomposé en 175, 200 et 500 sous-domaines. Dans ces cas précis la méthode FETI classique converge alors que la méthode FETI multipréconditionnée de base génère trop de directions de recherche pour la mémoire disponible ; les variantes adaptatives permettent d'utiliser le multipréconditionnement. Les résultats sont résumés dans le tableau 1, ils ont été obtenus sur le calculateur Cobalt de Safran Tech en utilisant les valeurs $\epsilon = 10^{-6}$ et $\tau = 10^{-2}$.

Contrairement à FETI, les variantes AMPFETI convergent en un nombre d'itérations pratiquement indépendant de la décomposition : les méthodes sont fortement extensibles en terme d'itérations ; l'extensibilité n'est pas aussi parfaite en terme de temps de calcul, néanmoins on arrive à des performances tout à fait satisfaisantes (5 minutes pour AMPFETI avec test global dans le cas de 500 sous-domaines). Malgré le gain en terme de taille d'espace de directions de recherche, la méthode avec test local se révèle moins performante en temps de calcul que le test local à cause des coûts associés à la construction du

test.

4 Conclusion

On a présenté brièvement diverses adaptations de l'algorithme du gradient conjugué multipréconditionné, elles permettent de limiter le nombre de directions de recherche générées à chaque itération tout en garantissant un certain taux de convergence [17]. Ces méthodes s'appliquent très naturellement aux méthodes de décomposition de domaine [13], et permettent d'obtenir des performances satisfaisantes sur des problèmes complexes, voir [18] pour une étude plus complète, pour des nombres de sous-domaines pour l'instant limités à 1000. Les travaux actuels visent à dépasser cette limitation par une mise en œuvre plus fine et d'autres types d'adaptation. Par ailleurs, notons que les algorithmes multipréconditionnés s'adaptent aux problèmes non symétriques-positifs [22], ce qui n'est pas (encore) le cas des autres méthodes pour rendre robustes les solveurs par décomposition de domaine.

Références

- [1] J. Mandel, Balancing domain decomposition, *Communications in Numerical Methods in Engineering* 9 (3) (1993) 233. doi :10.1002/cnm.1640090307.
- [2] C. Farhat, F. X. Roux, Implicit parallel processing in structural mechanics, *Computational Mechanics Advances* 2 (1) (1994) 1–124, north-Holland. doi :10.1002/nme.1620371111.
- [3] C. Farhat, M. Lesoinne, P. LeTallec, K. Pierson, D. Rixen, FETI-DP : a Dual-Primal Unified FETI Method - Part I : a Faster Alternative to the Two-Level FETI Method, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 50 (7) (2001) 1523–1544. doi :10.1002/nme.76.
- [4] C. R. Dohrmann, A preconditioner for substructuring based on constrained energy minimization, *SIAM Journal for Scientific Computing* 25 (2003) 246. doi :10.1137/s1064827502412887.
- [5] A. Klawonn, M. Lanser, O. Rheinbach, Toward Extremely Scalable Nonlinear Domain Decomposition Methods for Elliptic Partial Differential Equations, *SIAM Journal on Scientific Computing* 37 (6) (2015) C667–C696. doi :10.1137/140997907.
- [6] S. Badia, A. F. Martín, J. Principe, Multilevel Balancing Domain Decomposition at Extreme Scales, *SIAM Journal on Scientific Computing* 38 (1) (2016) C22–C52. doi :10.1137/15m1013511.
- [7] C. Pechstein, R. Scheichl, Analysis of FETI methods for multiscale PDEs. Part II : interface variation, *Numer. Math.* 118 (3) (2011) 485–529. doi :10.1007/s00211-011-0359-2.
- [8] J. Mandel, B. Sousedík, Adaptive selection of face coarse degrees of freedom in the BDDC and the FETI-DP iterative substructuring methods, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 196 (8) (2007) 1389–1399. doi :10.1016/j.cma.2006.03.010.
- [9] N. Spillane, D. J. Rixen, Automatic spectral coarse spaces for robust FETI and BDD algorithms, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 95 (11) (2013) 953–990. doi :10.1002/nme.4534.
- [10] N. Spillane, V. Dolean, P. Hauret, F. Nataf, C. Pechstein, R. Scheichl, Abstract robust coarse spaces for systems of PDEs via generalized eigenproblems in the overlaps, *Numer. Math.* 126 (4) (2014) 741–770. doi :10.1007/s00211-013-0576-y.

- [11] A. Klawonn, M. Kühn, O. Rheinbach, Adaptive coarse spaces for FETI-DP in three dimensions, *SIAM J. Sci. Comput.* 38 (5) (2016) A2880–A2911. doi :10.1137/15M1049610.
- [12] J. G. Calvi, O. B. Widlund, An adaptive choice of primal constraints for BDDC domain decomposition algorithms, Tech. Rep. TR2015-979, Courant Institute, New York University (2015). doi :10.1007/3-540-26662-3_5.
- [13] P. Gosselet, D. Rixen, F.-X. Roux, N. Spillane, Simultaneous FETI and block FETI : Robust domain decomposition with multiple search directions, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 104 (10) (2015) 905–927, nme.4946. doi :10.1002/nme.4946.
- [14] R. Bridson, C. Greif, A multipreconditioned conjugate gradient algorithm, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 27 (4) (2006) 1056–1068 (electronic). doi :10.1137/040620047.
- [15] C. Greif, T. Rees, D. B. Szyld, MPGMRES : a generalized minimum residual method with multiple preconditioners, Tech. Rep. 11-12-23, Department of Mathematics, Temple University, revised September 2012 and January 2014. Also available as Technical Report TR-2011-12, Department of Computer Science, University of British Columbia (2011). doi :10.1007/s40324-016-0088-7.
- [16] C. Greif, T. Rees, D. B. Szyld, Additive Schwarz with Variable Weights, Tech. Rep. 12-11-30, Department of Mathematics, Temple University (Nov. 2012). doi :10.1007/978-3-319-05789-7_75.
- [17] N. Spillane, An Adaptive Multipreconditioned Conjugate Gradient Algorithm, *SIAM J. Sci. Comput.* 38 (3) (2016) A1896–A1918. doi :10.1137/15M1028534.
- [18] C. Bovet, A. Parret-Fréaud, N. Spillane, P. Gosselet Adaptive multipreconditioned FETI : scalability results and robustness assessment. Soumis, preprint : hal-01458725v1, 2017.
- [19] D. J. Rixen, C. Farhat, A simple and efficient extension of a class of substructure based preconditioners to heterogeneous structural mechanics problems, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 44 (4) (1999) 489–516. doi :10.1002/(SICI)1097-0207(19990210)44 :4<489 : :AID-NME514>3.0.CO ;2-Z.
- [20] Y. Wielhorski, D. Durville, Finite element simulation of a 3d woven fabric : determination of the initial configuration and characterization of the mechanical behavior, in : 13th International conference on textile composites (TexComp-12), Rayleigh, USA, 2015.
- [21] G. Hello, J. Schneider, Z. Aboura, Generation of Voxel-FE Models for Complex 3D Composite Architectures, in : 8th European Solid Mechanics Conference (ESMC-2012), Graz, Austria, 2012.
- [22] C. Bovet, P. Gosselet, and N. Spillane. Multipreconditioning for nonsymmetric problems : the case of orthomin and biCG. *accepté dans Comptes rendus de l'académie des sciences (mathématiques)*, 2017, hal-01348633.