

## Propositions de MFE en Analyse Numérique

SUJETS (accessibles à tous les étudiants)

English version pages 5–7

### 1 Partitionnement pour méthode multi-grilles algébrique en mode multithread.

[Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be), Artem Napov (anapov@ulb.ac.be)]

### 2 Solveur de grille grossière pour méthodes multi-grilles parallèles: grands agrégats vs décomposition de domaine.

[Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be), Artem Napov (anapov@ulb.ac.be)]

### 3 Calcul des valeurs propres les plus à droite dans le cadre de l'analyse de stabilité dans les réseaux électriques.

[Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be)]

### 4 GMRES et déflation optimale.

[Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be)]

### 5 Méthode multi-grilles parallèle pour les problèmes curl-curl.

[Artem Napov (anapov@ulb.ac.be), Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be)]

### 6 Méthode multi-grilles algébrique pour le calcul des plasmas.

[Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be), Artem Napov (anapov@ulb.ac.be)]

## CONTEXTE

Certains des sujets proposés sont liés aux **méthodes multi-grilles**. Ces méthodes sont utilisées pour la résolution de très grands systèmes linéaires, avec, typiquement, plusieurs millions voire milliards d'inconnues. Le Service de Métrologie Nucléaire dispose d'une expertise mondialement reconnue dans le domaine des méthodes multi-grilles. En particulier, il développe le logiciel AGMG, qui a plusieurs centaines d'utilisateurs de part le monde.

Les méthodes multi-grilles ont pour principe de base d'effectuer la résolution d'un système linéaire donné en utilisant une hiérarchie de systèmes de plus en plus petits. Les sujets proposés dans ce cadre portent en général sur des méthodes *basées sur l'agrégation*, qui construisent progressivement une hiérarchie de systèmes de plus en plus petits en groupant les inconnues en agrégats; il s'agit de variantes multi-grilles à la fois simples et particulièrement efficaces. Comme les agrégats sont formés automatiquement sur base de la matrice du système linéaire, elles sont par ailleurs beaucoup plus flexibles que les méthodes multi-grilles basées sur une hiérarchie de grilles prédéfinie.

Tous les sujets proposés sont directement liés aux activités de recherche qui ont lieu dans le Service de Métrologie Nucléaire.

BRÈVE PRÉSENTATION : pages 2–4

# 1 Partitionnement pour méthode multi-grilles algébrique en mode multithread

Le logiciel AGMG existe en différentes versions : purement séquentielle, en version parallèle pour mémoire partagée, et en version parallèle pour mémoire distribuée. La version pour architectures à mémoire partagée est basée sur le «multithreading», et a l'avantage d'avoir la même séquence d'appel que la version séquentielle; *i.e.* elle permet de bénéficier de l'accélération parallèle offerte par les processeurs modernes sans modification du programme appelant. Elle s'avère cependant quelque peu moins robuste que la version séquentielle parce que, concrètement, le logiciel répartit la matrice du système à résoudre sur les différents «threads», et que cela induit des changements algorithmiques qui peuvent affecter les performances si cette répartition n'est pas appropriée.

Le but du travail est de développer une version qui effectue un partitionnement de la matrice adapté en fonction du problème. On développera une approche originale qui utilise une version séquentielle simplifiée d'AGMG pour guider le partitionnement. Les résultats seront comparés à ceux obtenus en utilisant un logiciel de partitionnement standard comme METIS. Il s'agit d'un travail à portée essentiellement pratique.

[Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be), Artem Napov (anapov@ulb.ac.be)]

## 2 Solveur de grille grossière pour méthodes multi-grilles parallèles: grands agrégats vs décomposition de domaine

Dans sa version massivement parallèle, AGMG résout le système sur la grille la plus grossière avec une méthode itérative à deux niveaux basée sur des très grands agrégats (une grille super grossière est formée en agrégeant ensemble toutes les inconnues sur un même processeur). Cette méthode est en fait assez proche d'une méthode de décomposition de domaine. Le travail proposé consiste à explorer cette analogie, et en particulier à analyser comment la convergence est affectée lorsqu'on utilise des agrégats qui se chevauchent (une approche standard pour les méthodes de décomposition de domaine).

Le travail comporte donc deux aspects : un aspect numérique, qui consiste à développer des programmes (Matlab/Octave/Python) permettant l'évaluation pratique des différentes stratégies ; et un aspect théorique, qui nécessite de bien assimiler les différentes théories de convergence afin de pouvoir les comparer entre elles et avec les résultats pratiques.

[Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be), Artem Napov (anapov@ulb.ac.be)]

### 3 Calcul des valeurs propres les plus à droite dans le cadre de l'analyse de stabilité dans les réseaux électriques

L'analyse de stabilité des réseaux électriques demande le calcul des valeurs propres les plus à droite associées à la modélisation du réseau, ce qui devient problématique à partir du moment où les réseaux sont intégrés à l'échelle d'un continent. Le travail consiste à analyser les méthodes numériques actuellement utilisées par Tractebel Engineering dans le cadre de leur logiciel d'analyse de réseau. On cherchera aussi à proposer et tester des pistes d'amélioration. *Ce travail peut être couplé à un stage chez Tractebel Engineering.*

[Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be), en collaboration avec Tractebel]

### 4 GMRES et déflation optimale

La déflation est une procédure algébrique qui accélère les méthodes de résolution de systèmes linéaires basées sur les sous-espaces de Krylov comme GMRES. Elle revient à ajouter au sous-espace de Krylov des vecteurs connus comme étant des «bonnes» direction de recherche. Algébriquement, le processus est assez proche d'une correction de grille grossière, à ceci près que les matrices de restriction et de prolongation ne contiennent qu'un petit nombre de lignes et colonnes, respectivement.

En général, sont considérées comme «bonnes» directions de recherche les approximations des vecteurs propres associées aux valeurs propres les plus basses. Cependant, des résultats récents montrent que, dans le cadre des méthodes multi-grilles, ce type de choix est loin d'être optimal lorsque les matrices ne sont pas symétriques.

Le but du travail est d'étendre ces résultats à la déflation, et, d'une manière plus générale, de déterminer quels sont les vecteurs qui maximisent l'efficacité de ce processus.

[Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be)]

## 5 Méthode multi-grilles parallèle pour les problèmes curl-curl

Les problèmes aux limites de type curl-curl résultent de l'approximation des régimes quasi stationnaires des équations de Maxwell. Ils sont typiquement utilisés pour modéliser des machines électriques (moteurs, transformateurs, etc.). Une nouvelle méthode multi-grilles basée sur l'agrégation a récemment été proposée pour la résolution numérique des problèmes discrets correspondants.

Le but de ce travail est d'explorer la parallélisation de la nouvelle méthode, c'est-à-dire d'explorer la possibilité de réduire le temps d'exécution en effectuant des tâches différentes sur des processeurs différents. La difficulté principale attendue est liée à l'usage du cycle K, dont la parallélisation sur des machines à grand nombre de processeurs n'est pas triviale. Néanmoins, une méthode basée sur le cycle K pour le problème de Poisson a déjà été parallélisée avec succès, et nous allons utiliser la démarche correspondante comme point de départ. Dans un premier temps, le travail sera restreint au cas d'un algorithme modèle appliqué à un problème modèle. Notons qu'une mise en oeuvre parallèle de la méthode n'est pas obligatoire mais, si elle est faite, le code résultant pourra être testé sur des machines massivement parallèles.

[Artem Napov (anapov@ulb.ac.be), Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be)]

## 6 Méthode multi-grilles algébrique pour le calcul des plasmas

Le code de calcul TOKAM3X simule la physique des tokamaks, et est utilisée dans le développement du futur réacteur de fusion ITER. Environ 50% du temps de calcul est passé à résoudre des systèmes linéaires. Dans le cadre du centre d'excellence européen EoCoE («Energy oriented center of excellence»), le logiciel AGMG a été intégré à ce code afin d'accélérer cette partie des calculs. Cela conduit à une amélioration notable, mais on observe qu'AGMG reste sous performant à cause de la structure particulière des systèmes linéaires. Cette dernière provient des équations physiques du modèle, caractérisées par une forte anisotropie non alignée avec la grille de discrétisation.

Le but du travail est d'explorer différentes idées pour améliorer AGMG dans ce contexte particulier, notamment en exploitant la connaissance de la direction de couplage dominant.

[Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be), Artem Napov (anapov@ulb.ac.be)]

## Master theses in Numerical Analysis (English version)

### SUBJECTS

**1 Partitioning for an algebraic multigrid method in a multi-thread mode.**

[Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be), Artem Napov (anapov@ulb.ac.be)]

**2 Coarse grid solver for parallel multigrid methods: large aggregates vs. domain decomposition.**

[Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be), Artem Napov (anapov@ulb.ac.be)]

**3 Computation of the rightmost eigenvalues within the framework of the stability analysis of electrical networks.**

[Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be), Artem Napov (anapov@ulb.ac.be)]

**4 GMRES and optimal deflation.**

[Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be)]

**5 Parallel aggregation-based multigrid for curl-curl problem.**

[Artem Napov (anapov@ulb.ac.be)]

**6 Algebraic multi-grid method for plasmas computation.**

[Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be), Artem Napov (anapov@ulb.ac.be)]

### CONTEXT

Some of the master thesis subjects listed above are related to **multigrid methods**. These methods are used for the solution of large linear systems of equations, with typically several millions to several billions of unknowns. The *Service de Métrologie Nucléaire* team has an internationally recognized expertise in the field of multigrid methods. In particular, the team develops the AGMG code, which has hundreds of users around the world.

The basic principle behind multigrid methods is to solve a given linear system using a hierarchy of decreasing in size linear systems. The above subjects within this framework are in general related to *aggregation-based* multigrid methods, which construct a hierarchy of decreasing in size linear systems by grouping unknowns into aggregates; this yields simple yet efficient multigrid variants. Because the aggregates are automatically formed on the basis of the linear system matrix, these methods are on the other hand much more flexible than the multigrid methods based on a predefined hierarchy of grids.

All master thesis subjects are directly connected to the research activities of the team.

SHORT DESCRIPTION : page 6–7

# **1 Partitioning for an algebraic multigrid method in a multithread mode**

The AGMG software exists in different versions : purely sequential, parallel for shared memory, parallel for distributed memory. The version for shared memory architectures is based on multithreading, and it has the advantage of having the same calling sequence as the sequential version ; i.e., it allows one to benefit from the parallel acceleration offered by modern processors without modification of the calling program. This version is, however, somehow less robust than the sequential version because, concretely, the software distributes the system matrix on the different threads, and this induces some algorithmic changes that may affect performance if this distribution is not appropriate.

The aim of the proposed thesis is to develop a version that makes a partitioning of the matrix adapted to the problem at hand. One will develop an original approach that uses a simplified sequential version of AGMG to guide the partitioning. The results will be compared with those obtained using standard partitioning software like METIS. This work is mainly practical.

[Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be), Artem Napov (anapov@ulb.ac.be)]

# **2 Coarse grid solver for parallel multigrid methods: large aggregates vs. domain decomposition**

In its massively parallel version, AGMG solves the system on the coarsest grid using a two-level iterative method based on very large aggregates (a super coarse grid is formed by aggregating together all unknowns on a same processor). This method is in fact somewhat similar to a domain decomposition method. The work consists in exploring this analogy, in particular in analyzing how the convergence is affected when one uses overlapping aggregates (a standard approach for domain decomposition methods).

The work has two components : a numerical component, which requires to develop programs (Matlab/Octave/Python) for the practical assessment of the considered strategies ; and a theoretical component, which requires a proper study of the different convergence theories, in order to compare these theories between them and with practical observations.

[Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be), Artem Napov (anapov@ulb.ac.be)]

# **3 Computation of the rightmost eigenvalues within the framework of the stability analysis of electrical networks**

The stability analysis of electrical networks requires the computation of the rightmost eigenvalues associated with the modeling of the network, which becomes difficult when networks are integrated at the continental level. The work consists in analyzing the numerical methods used by Tractebel Engineering within the framework of their network analysis software. One will also seek for improvements, and test them.

[Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be), in collaboration with Tractebel]

## 4 GMRES and optimal deflation

Deflation is an algebraic procedure that accelerates Krylov subspace methods for solving linear systems, such as GMRES. It amounts to adding to the Krylov subspace vectors known as “good” search direction. Algebraically, the process is quite close to a coarse grid correction, except that the restriction and the prolongation matrices contain only a small number of rows and columns, respectively.

In general, “good” search directions are approximations of the eigenvectors associated with the lowest eigenvalues. However, recent results show that, in the context of multigrid methods, this type of choice is far from optimal when the matrices are nonsymmetric.

The aim of the work is to extend these results to deflation, and, more generally, to determine which vectors maximize the efficiency of this process.

[Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be)]

## 5 Parallel aggregation-based multigrid for curl-curl problem

The curl-curl boundary value problems arise when eddy current approximation is applied to Maxwell equations. They are typically used when modelling electrical machines (engines, transformers, etc.). A new aggregation-based multigrid method has been recently proposed for the numerical solution of the corresponding discrete problems.

The aim of the work is to explore the parallelization of the new method, i.e., to explore the possibility to reduce the execution time by running tasks on different processors. The main difficulty is related to the use of the K-cycle on machines with a large number of processors. However, methods based on the K-cycle have already been successfully parallelized for the Poisson problem, and we shall use the corresponding approach as a starting point. At first, we shall restrict ourselves to the model algorithm for a model problem. Note that the actual parallel implementation of the method is not mandatory, but if it is realised, the resulting code could be tested on massively parallel machines.

[Artem Napov (anapov@ulb.ac.be), Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be)]

## 6 Algebraic multi-grid method for plasmas computation

The TOKAM3X code simulates the physics of the tokamaks, and is used in the development of the future ITER fusion reactor. About 50% of the computing time is spent in solving linear systems. Within the framework of the European Center of Excellence EoCoE (“Energy oriented center of excellence”), the AGMG software has been integrated into this code in order to speed up this part of the computation. This leads to a significant improvement, but it is observed that AGMG remains underperforming because of the particular structure of the linear systems. The latter comes from the physical equations of the model, characterized by a strong anisotropy not aligned with the discretization grid.

The aim of the work is to explore different ideas for improving AGMG in this particular context, notably by exploiting the knowledge of the dominant coupling direction.

[Yvan Notay (ynotay@ulb.ac.be), Artem Napov (anapov@ulb.ac.be)]