

# Résolution de grands système linéaires

Pham Quang Cuong

12 juin 2003

La nécessité de résoudre des systèmes linéaires surgit dans de nombreux domaines de l'activité humaine : dans les domaines scientifiques : physique, chimie, biologie, ... mais aussi dans l'ingénierie, la construction, et même l'économie. Très souvent, les matrices associées à ces systèmes sont de très grande dimension (par exemple  $10000 \times 10000$ ) et possèdent très peu de coefficients non nuls (moins de 5%), il est donc particulièrement important de mettre en œuvre des techniques particulières pour résoudre ces systèmes en un temps minimal, tout en utilisant un minimum de place mémoire.

## 1 Position du problème

### 1.1 Présentation matricielle

Dans cet exposé, on s'intéressera à la résolution de l'équation matricielle  $AX = B$  où  $A$  est une matrice carrée symétrique définie positive. Dans le cas général, la méthode du pivot de Gauss permet de factoriser  $A$  (quitte à multiplier  $A$  par une matrice de permutation) en un produit  $A = LU$  où  $L$  est une matrice triangulaire inférieure à diagonale unité et  $U$  une matrice triangulaire supérieure [cf. A1]. Ensuite, il ne reste plus qu'à résoudre les deux systèmes triangulaires  $LY = B$  puis  $UX = Y$ . Dans le cas où  $A$  est symétrique définie positive,  $A$  se factorise en un produit  $A = LD^tL$  où  $L$  est une matrice triangulaire inférieure à diagonale unité et  $D$  une matrice diagonale [cf. A2]. Il reste ensuite à résoudre les deux systèmes triangulaires  $LY = B$  puis  ${}^tLX = D^{-1}Y$ . Le calcul des coefficients de  $L$  et de  $D$  en fonction des coefficients de  $A$  se fait en  $O(n^3)$ , la résolution des systèmes triangulaires en  $O(n^2)$ . C'est donc l'étape de factorisation qui est la plus importante, et qu'il s'agira ici d'optimiser.

### 1.2 Rangement compact et phénomène de remplissage

Étant donnée la taille des matrices que l'on trouve dans la pratique, ainsi que le nombre de coefficients nuls qu'elles contiennent, il est hors de question de les stocker intégralement. La première idée est de stocker seulement les

coefficients non nuls. Examinons cependant l'exemple suivant :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 4 \end{pmatrix} \rightarrow L = \begin{pmatrix} 1 & -1/4 & -1/4 & -1/4 \\ -1/4 & 1 & -1/3 & -1/3 \\ -1/4 & -1/3 & 1 & -1/2 \\ -1/4 & -1/3 & -1/2 & 1 \end{pmatrix}$$

Il apparaît clairement que  $L$  possède plus de coefficients non nuls que  $A$ . Dans la pratique, ce phénomène peut être catastrophique pour la gestion des calculs et des données : en effet, on ne contrôle *a priori* ni le nombre, ni l'emplacement des nouveaux coefficients.

## 2 Optimisation du rangement

### 2.1 Rangement profil et conservation du profil

Une méthode intermédiaire et relativement efficace est le rangement profil. Le profil d'une matrice  $A$  est  $\{(i, j), 1 \leq i \leq N, j_i \leq j \leq i\}$  où  $j_i$  est l'indice de la colonne du premier élément non nul de la ligne  $i$ . On ne stockera que les éléments nuls ou non situés à l'intérieur du profil de  $A$ .

L'intérêt de ce rangement réside dans le fait que le profil de  $L$  est inclus dans celui de  $A$  [cf. A3]. Ainsi, si l'on réserve une quantité de place mémoire suffisante pour stocker le profil de  $A$ , on pourra ranger au fur et à mesure les coefficients de la matrice  $L$  dans cette place. Les éléments diagonaux de  $L$  valant 1 n'ayant pas besoin d'être stockés, les éléments de  $D$  seront rangés à la place des coefficients diagonaux de  $A$ . On constate alors le double avantage de ce rangement : d'une part on fait une grande économie de place mémoire (à condition que le profil de  $A$  soit assez petit), d'autre part la gestion des données reste assez simple : il suffit de stocker le profil de  $A$  sous forme d'un tableau, la taille et la forme de ce tableau n'évoluant pas au cours de la factorisation.

Voyons maintenant comment diminuer la dimension du profil de  $A$ . (N.B. : Les matrices considérées étant symétriques, on ne représentera que leur moitié située en-dessous la diagonale).

### 2.2 Algorithme de Cuthill-Mc Kee

À la matrice  $A$  associons un graphe  $G = g(A)$  défini par

- Les sommets de  $G$  sont numérotés de 1 à  $N$  où  $N$  est la dimension de  $A$ .
- Les sommets  $i$  et  $j$  de  $G$  sont reliés si et seulement si  $A_{ij}$  est non nul.

Inversement, nous pouvons associer à tout graphe  $G$  une matrice  $A$  telle que  $G = g(A)$ . (Voir Fig. 1)

Le graphe  $g(A)$  traduit en fait les relations entre les inconnues du système : les inconnues  $x_i$  et  $x_j$  sont en effet reliés si  $A_{ij} \neq 0$ , c'est-à-dire si les sommets  $i$  et  $j$  sont reliés. Si nous renumérotions les sommets sans changer

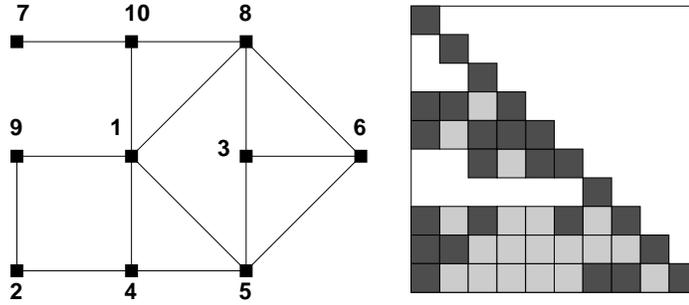


FIG. 1 – Représentation d’un système linéaire par un graphe (19 zéros dans le profil)

la structure du graphe, nous ne changeons pas le système, mais seulement l’ordre dans lequel apparaissent les inconnues. Il faut donc trouver une numérotation optimale du graphe, c’est-à-dire une numérotation dont la matrice associée a un profil de dimension minimale.

L’algorithme suivant est dû à Cuthill et Mc Kee, il permet de trouver de manière heuristique une bonne numérotation du graphe [cf. A4].

**Algorithme 1 (Cuthill-Mc Kee direct)** 1. On choisit un premier sommet.

2. On numérote ses voisins.

3. On numérote les voisins non encore numérotés du numéro 2, puis du numéro 3,...

À chaque étape, lorsqu’il y a plusieurs sommets à numérotter, on numérote en premier les sommets qui ont le moins de voisins non encore numérotés.

Cet algorithme consiste en fait un en parcours en largeur du graphe. Chaque sommet du graphe est visité une et une seule fois. (Voir Fig. 2)

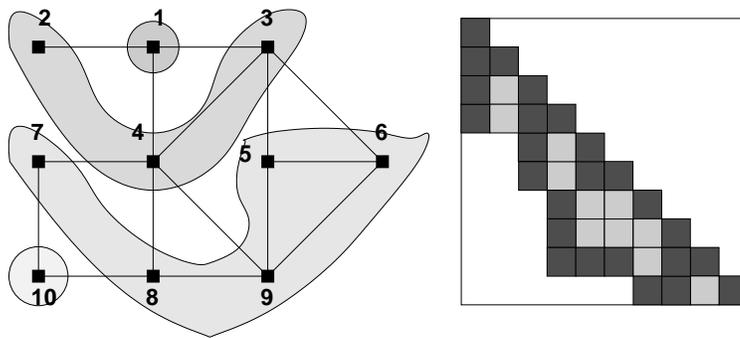


FIG. 2 – Application de Cuthill-Mc Kee direct (11 zéros dans le profil)

Il est remarquable que si l’on reverse l’ordre des sommets obtenu par l’algorithme de Cuthill-Mc Kee, on obtienne un meilleur profil [cf. A5]. (Voir

Fig. 3)

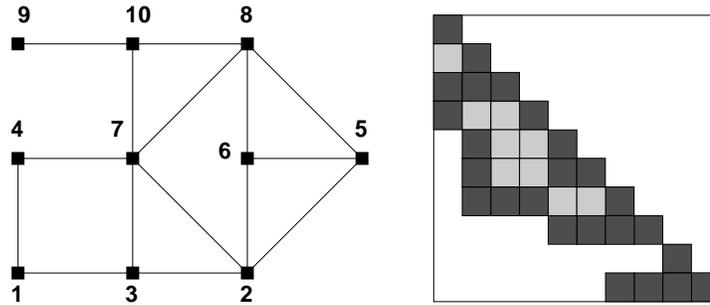


FIG. 3 – Application de Cuthill-Mc Kee inverse (9 zéros dans le profil)

Le choix du premier sommet conditionne de manière substantielle la qualité du profil obtenu grâce à l’algorithme de Cuthill-Mc Kee. Soit en effet  $d(i, j)$  la distance du nœud  $i$  au nœud  $j$ , on définit l’excentricité d’un nœud  $i$  du graphe  $G$  par  $exc(i) = \max_{j \in G} d(i, j)$ . Alors un sommet ayant une grande excentricité permet d’obtenir un bon profil [cf. A6].

Dans l’exemple ci-dessus, il apparaît que le sommet situé en haut à gauche soit un bon sommet, l’algorithme de Cuthill-Mc Kee appliqué à ce sommet donne le résultat suivant (Voir Fig. 4).

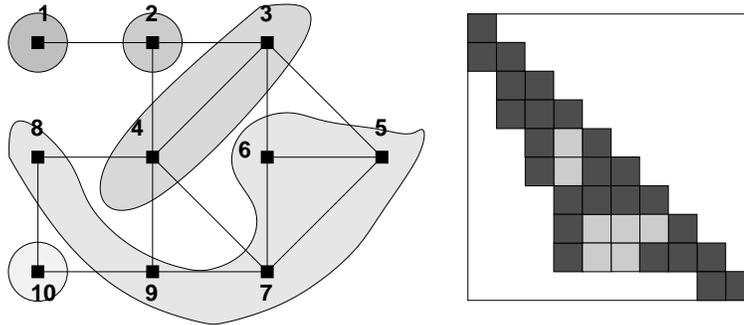


FIG. 4 – Un choix judicieux du premier sommet (7 zéros dans le profil)

Son alter ego Cuthill-Mc Kee renversé conduit à : (Voir Fig. 5).

Il faut alors chercher dans le graphe  $g(A)$  un sommet ayant la plus grande excentricité possible :

- Algorithme 2 (Recherche du premier sommet)**
1. On choisit un sommet  $r$  quelconque comme racine.
  2. On construit la structure en niveau à partir de  $r$ . Soit  $D(r)$  le dernier niveau de construit à partir de  $r$ .
  3. On choisit un sommet  $i \in D(r)$  non encore choisi
    - Si  $exc(i) > exc(r)$ , remplacer  $r$  par  $i$  et retourner en 2.

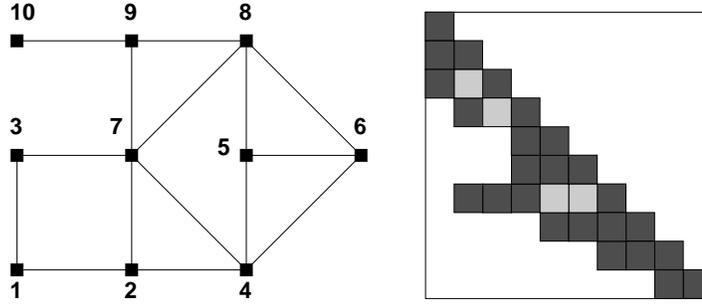


FIG. 5 – Cuthill-McKee inverse avec un premier sommet judicieux (4 zéros dans le profil)

- Sinon retourner en 3 pour essayer un autre sommet de  $D(r)$ , si on a épuisé  $D(r)$  alors STOP et prendre  $r$  comme premier sommet.

Dans le cas général, la recherche d'un sommet de plus grande excentricité est quadratique (il faut en effet examiner les chemins entre tout couple de sommets). La méthode précédente ne garantit pas l'obtention d'un sommet de plus grande excentricité, mais donne de bons résultats pour un coût relativement faible.

### 3 Application à un problème de physique

#### 3.1 Un problème de conducteurs

Étant donnée une distribution de conducteurs dont le potentiel électrique est imposé, il est parfois utile de connaître la valeur du potentiel  $V$  en tout point de l'espace. Ce potentiel doit vérifier l'équation de Laplace  $\Delta V = 0$  à l'extérieur des conducteurs, et doit être continu à la surface des conducteurs.

Dans un problème à deux dimensions, on doit avoir :  $\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} = 0$ , or pour  $h$  et assez petit on a :

$$V(x+h, y) \simeq V(x, y) + h \frac{\partial V}{\partial x}(x, y) + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial x^2}(x, y)$$

$$V(x-h, y) \simeq V(x, y) - h \frac{\partial V}{\partial x}(x, y) + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial x^2}(x, y)$$

$$V(x, y+h) \simeq V(x, y) + h \frac{\partial V}{\partial y}(x, y) + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial y^2}(x, y)$$

$$V(x, y-h) \simeq V(x, y) - h \frac{\partial V}{\partial y}(x, y) + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial y^2}(x, y)$$

En additionnant membre à membre, on obtient :

$$V(x+h, y) + V(x-h, y) + V(x, y+h) + V(x, y-h)$$

$$\simeq 4V(x, y) + h^2 \left( \frac{\partial^2 V}{\partial x^2}(x, y) + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2}(x, y) \right)$$

Soit :  $V(x, y) \simeq \frac{1}{4}(V(x+h, y)+V(x-h, y)+V(x, y+h)+V(x, y-h))$  (\*)  
 puisque  $\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} = 0$ .

Divisons un domaine de l'espace en réseau carré de paramètre  $h$  et affectons une variable  $V_i$  à chaque point du réseau situé en dehors des conducteurs. Alors l'équation (\*) ainsi que les conditions aux limites conduisent naturellement à un système affine d'inconnues  $(V_i)_i$ .

La mise en pratique du procédé ci-dessus nécessite quelques détours. Prenons l'exemple d'une plaque carrée dont l'un des côtés est un conducteur soumis au potentiel 0, les trois autres au potentiel 1, l'intérieur étant vide. Discrétisons cette plaque en un réseau de  $40 \times 40$  nœuds. La première étape consiste à construire une matrice de  $1600 \times 1600$  traduisant les relations entre les potentiels aux nœuds (typiquement, il s'agit d'une matrice carrée symétrique avec des 1 sur la diagonale et avec quelques  $-1/4$  ailleurs). On transforme ensuite cette matrice en graphe, puis on applique l'algorithme de Cuthill-Mc Kee à ce graphe. Une fois la renumérotation calculée, on reconstruit la matrice, on la factorise et on résout le système selon le procédé décrit au 1.1.

### 3.2 Résultats et comparaison avec d'autres méthodes

Pour des raisons de commodité, l'étape de la renumérotation a été programmée à l'aide des structures évoluées de CAML, ce qui en ralentit considérablement l'exécution. Cependant, dans la pratique, il est tout à fait possible de la programmer avec des structures élémentaires.

Voici les temps d'exécution des différents algorithmes sur une machine Pentium III 800 Mhz, 512 Mo de RAM, avec l'interpréteur CAML :

...

## A Démonstrations mathématiques

### A.1 Factorisation LU

Additionner à la ligne  $i$   $\alpha$  fois la ligne  $j$  revient à multiplier A à gauche par la matrice  $E_{ij}$  où  $(\alpha$  étant situé à la  $i^e$  ligne et à la  $j^e$  colonne)



les idées, prenons l'exemple suivant : supposons que deux sommets adjacents ont des numéros très éloignés, disons respectivement 1 et 10000, le coefficient  $A_{10000,1}$  est alors non nul et le profil devra contenir tous les coefficients de  $A_{10000,1}$  à  $A_{10000,10000}$  !!!

### A.5 Cuthill-Mc Kee inverse

En gros, quand on renumérote dans l'ordre inverse, on effectue une symétrie par rapport à l'autre diagonale. Il est facile de voir qu'aucun zéro ne peut être créé (car le profil de Cuthill-Mc Kee est monotone). En revanche, les tranchées verticales rentrantes de zéros deviennent horizontales, et les zéros de ces tranchées disparaissent du profil.

### A.6 Premier sommet

Là, il faut remarquer que plus le premier sommet est excentrique, plus le nombre de couches successives obtenues par Cuthill-Mc Kee est grand, et donc plus la largeur moyenne des couches est petite. Mais la largeur moyenne de couche est reliée à la largeur moyenne des lignes dans le profil de la matrice. Or comme le nombre de coefficients non nuls reste inchangés, la diminution de la largeur des lignes de la matrice signifie la diminution du nombre de zéros.

## B Programmes CAML

*Cf.* les documents textes (ASCII) attachés.

## Références

- [1] P. Lascaux, R. Théodor : *Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingénieur*, chap. IV, V. Masson 1985.
- [2] A. Le Pourhiet : *Résolution numérique des équations aux dérivées partielles : une première approche*, chap. V. Cepadues 1988.
- [3] J.P. Pelletier : *Techniques numériques appliqués au calcul scientifique*, chap. XII. Masson 1982.
- [4] T. Davis : <http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices>. Dernière visite : 10 mai 2003.