

PROPOSITION DE SUJET DE THESE

Intitulé : Neural Linear Solvers and Preconditioners for General Sparse Matrices

Référence : **SNA-DAAA-2024-32**
(à rappeler dans toute correspondance)

Début de la thèse : Octobre 2024

Date limite de candidature : 31/05/2024

Mots clés

Apprentissage automatique, algorithmique numérique, algèbre linéaire, solveurs itératifs de Krylov, calcul haute performance

Profil et compétences recherchées

Mathématiques Appliquées, Informatique

Grandes écoles d'ingénieurs et/ou Master 2 Recherche

Présentation du projet doctoral, contexte et objectif

Avec l'arrivée de la machine exascale au niveau européen en Allemagne et celle qui sera hébergée en France à l'horizon 2026, nous sommes contraints plus que jamais à préparer les outils de simulation numérique des différents domaines applicatifs pour exploiter pleinement les capacités de ce type de ressource de calcul qui sont composées, entre autres, des accélérateurs de calcul comme des GPUs.

En effet, la simulation numérique est un outil stratégique puisqu'indispensable à la recherche et à de nombreuses applications comme par exemple la modélisation d'écoulements complexes (e.g., écoulements multiphasiques, écoulements turbulents compressibles) en mécanique des fluides numérique (CFD). La performance de ces simulateurs est donc un enjeu majeur. Elle a notamment un impact direct, à la fois sur la qualité des résultats, et sur la capacité à réaliser des calculs à grande échelle. Dans un grand nombre de simulateurs numériques, la résolution de systèmes linéaires, très souvent mal conditionnés, constitue l'étape la plus consommatrice en temps de calcul. Dans ce travail, nous nous concentrons sur cette étape de calcul, et plus précisément sur le problème suivant :

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b.$$

Cette thèse étant en collaboration avec l'IFPEN, elle apportera des éclaircissements sur l'amélioration de la robustesse et de la performance des stratégies actuelles, que ce soit pour des applications de l'IFPEN telles que celles en Géoscience, Interaction Fluide-Particule et Eoliennes, ou pour des applications CFD de l'ONERA sur des systèmes résultant de discrétisations des équations de la mécanique des fluides compressibles en régime transsonique à grand nombre de Reynolds.

Nous proposons de concevoir des algorithmes pour la construction du préconditionneur « M^{-1} ». Les applications visées sont face à des problèmes de plus en plus hétérogènes en espace, et sont confrontées à des systèmes plus complexes à résoudre, dont le niveau de difficulté évolue au cours de la simulation elle-même. Les choix à réaliser pour le préconditionneur [MB], s'agissant de ces systèmes complexes, sont très difficiles à fixer a priori en fonction du problème, mais sont pourtant toujours faits de manière « globale », pour « toute la durée » de la simulation, et restent à la charge de l'utilisateur.

Le développement de préconditionneurs et plus généralement d'algorithmes itératifs de résolution de systèmes linéaires non symétriques s'appuie sur de nombreuses heuristiques. Dès lors, un grand nombre de travaux récents utilise des méthodes d'apprentissage automatique dans le but de proposer de nouvelles approches. Parmi ces travaux, ceux s'appuyant sur des GNN présentent un grand intérêt [LP, PO, YP]. L'idée générale est de considérer la matrice A comme la matrice d'adjacence d'un graphe \mathcal{G} dont les arêtes représentent les coefficients a_{ij} pour $i \neq j$, et les nœuds, les coefficients a_{ii} . Deux approches seront alors envisagées : prédire en sortie du GNN un graphe interprété comme le graphe de la matrice d'adjacence du préconditionneur M^{-1} ou prédire en sortie du GNN un graphe dont la valeur aux nœuds, x , est interprétée comme la solution du problème $Ax=b$. Dans le but d'enrichir le réseau avec des valeurs complémentaires, nous proposons d'évaluer le comportement numérique de la résolution de différentes catégories de système

en utilisant quelques itérations de Jacobi, Gauss-Seidel ou les techniques de déflation, le recyclage etc. dans un solveur type GMRES [AY, JK, PP, LM, LS].

Plus généralement, l'objectif de cette thèse sera d'étendre ces approches de résolution de systèmes linéaires basées sur des méthodes d'apprentissage aux systèmes linéaires issus de la discrétisation des modèles d'EDPs étudiés à IFPEN et à l'ONERA : équations de Poisson et d'élasticité linéaire avec coefficients spatialement variables, équations d'Euler compressibles, modèles de turbulence moyennés (RANS) compressibles.

Dans le cas du développement de préconditionneurs par apprentissage, leurs comportements seront évalués suite à leurs intégrations à des algorithmes itératifs préconditionnés tels que GMRES(m) et BiCGStab. Pour le développement de solveurs linéaires préconditionnés par apprentissage, il est possible d'évaluer leurs comportements directement dans un code de calcul en termes de précision, mais également de s'en servir comme moyen d'obtenir une solution initiale pour un algorithme itératif classique tel que GMRES(m) ou BiCGStab, auquel cas la métrique d'évaluation sera le nombre d'itérations pour atteindre la convergence.

Les travaux effectués pendant cette thèse (les modules d'inférence) seront intégrés dans la bibliothèque de résolution de systèmes linéaires préconditionnés massivement parallèle écrite en C++ (MCGSolver) de l'IFPEN, ainsi qu'au sein de la partie algèbre linéaire du solveur DG Aghora de l'ONERA en Fortran 2003 ([CPO1, CPO2]) afin que les évaluations des performances puissent être comparées avec les autres couples solveur-préconditionneur. L'illustration des apports de ces stratégies par apprentissage pourra se faire dans un premier temps à l'aide de prototypes et de jeux de données issus des codes ciblés.

Quelques références bibliographiques

[LP] Luca Gremontieri, Paolo Galeone; Towards Neural Sparse Linear Solvers, [DOI](#), 2022

[PO] Paul Häusner, Ozan Öktem, Jens Sjölund; Neural incomplete factorization: learning preconditioners for the conjugate gradient method, [DOI](#), 2023.

[YP] Yichen Li, Peter Yichen Chen, Tao Du, Wojciech Matusik; Learning Preconditioners for Conjugate Gradient PDE Solvers, Proceedings of the 40th International Conference on Machine Learning, 2023.

[CPO1] F. Renac, M. de la Llave Plata, E. Martin, J.-B. Chapelier, and V. Couaillier. Aghora: a high-order DG solver for turbulent flow simulations. In IDIHOM: Industrialization of High-Order Methods - A Top-Down Approach, pp. 315-335, Notes on Numerical Fluid Dynamics and Multidisciplinary Design 128, Springer, [DOI](#), 2015.

[CPO2] F. Renac, E. Martin. A Fast DGSEM for High Resolution Hybrid RANS-LES Turbulent Compressible Flow Simulations, in C. Hirsch, K. Hillewaert, R. Hartmann, V. Couaillier, J.-F. Bousuge, F. Chalot, S. Bosniakov, W. Haase (Eds.), TILDA: Towards Industrial LES/DNS in Aeronautics ; Paving the Way for Future Accurate CFD, Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design, 148, Springer Verlag, [DOI](#), 2021.

[AY] Andrew Chapman, Yousef Saad; Deflated and Augmented Krylov Subspace Techniques, Numerical Linear Algebra with Applications, [DOI](#), 1998.

[JK] Jocelyne Erhel, Kevin Burrage, Bert Pohl; Restarted GMRES preconditioned by deflation, Journal of Computational and Applied Mathematics, [DOI](#), 1996.

[PP] Pierre Jolivet and Pierre-Henri Tournier; Block Iterative Methods and Recycling for Improved Scalability of Linear Solvers, Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, [DOI](#), 2016.

[LM] L. M. Carvalho, S. Gratton, R. Lago, and X. Vasseur. A Flexible Generalized Conjugate Residual Method with Inner Orthogonalization and Deflated Restarting. SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 32(4) :1212-1235, [DOI](#), 2011.

[LS] L. Giraud, S. Gratton, X. Pinel, and X. Vasseur. Flexible GMRES with Deflated Restarting. SIAM Journal on Scientific Computing. 32(4) :1858-1878, [DOI](#), 2010.

[MB] M. Benzi. Preconditioning Techniques for Large Linear Systems: A Survey. Journal of Computational Physics, 182(2) :418-477. ISSN 0021-9991, [DOI](#), 2002.

[KK] Kevin Luna, Katherine Klymko, Johannes P. Blaschke. Accelerating GMRES with Deep Learning in Real-Time, [arXiv](#), 2021.

[LU] L. Saverio. Accelerating convergence of linear iterative solvers using machine learning. Rapport ONERA stage M2 (Sorbonne Université / Politecnico di Milano), 2023.

Collaborations envisagées

Cette thèse s'inscrit dans le cadre d'une collaboration entre l'IFPEN et l'ONERA pour laquelle un stage a déjà eu lieu en 2023 [KK, LU]. La personne partagera équitablement son temps de travail entre les deux organismes afin de faciliter les échanges et les travaux communs.

Laboratoire d'accueil à l'ONERA

Département : DAAA (Aérodynamique Aéroélasticité Acoustique)

Lieu (centre ONERA) : Châtillon

Contact : E. MARTIN / F. RENAC / J. NUNEZ

Tél. : 01.46.73.43.89 Email : emeric.martin@onera.fr

Tél. : 01.46.73.37.44 Email : florent.renac@onera.fr

Tél. : 01.46.73.42.84 Email : jorge.nunez@onera.fr

Directeur de thèse

Nom : F. NATAF

Laboratoire : LJLL-INRIA Alpines

Tél. : 07.60.01.07.96

Email :

frederic.nataf@sorbonne-universite.fr

Laboratoire d'accueil à l'IFPEN

Contact : T. FANEY / A. ANCIAUX-SEDRAKIAN

Email : thibault.faney@ifpen.fr

Email : ani.anciaux-sedrakian@ifpen.fr

Pour plus d'informations : <https://www.onera.fr/rejoindre-onera/la-formation-par-la-recherche>