INSTITUT NATIONAL DE RECHERCHE EN INFORMATIQUE ET EN AUTOMATIQUE

Projet ALADIN

Algorithmes adaptés au calcul numérique intensif

Rennes

THÈME 4B

Rapport d'Activité

1999

Table des matières

1 Composition de l'équipe

Responsable scientifique

Jocelyne Erhel [DR Inria]

Assistante de projet

Evelyne Livache [SAR Inria]

Personnel Inria

Philippe Chartier [CR]

Bernard Philippe [DR]

Université de Rennes I

Anne Aubry [Ater Irmar, jusqu'au 31 août 1999]

Olivier Beaumont [Ater Ifsic, jusqu'au 31 août 1999]

Claude Simon [maître de conférences, IUT Lannion]

Chercheurs invités

Yann-Hervé De Roeck [ingénieur, Ifremer, Brest, mis à disposition depuis le 1er avril 1999]

Abdou Njifenjou [enseignant-chercheur, Ecole Nationale Polytechnique, Yaoundé, Cameroun, de novembre 1998 à mars 1999]

Chercheurs doctorants

Olivier Bertrand [bourse MENESR]

Mathias Brieu [Moniteur normalien, en collaboration avec le LM2S, université de Paris 6, jusqu'au 31 août 1999]

Frédéric Guyomarc'h [moniteur normalien]

Hussein Hoteit [co-tutelle avec l'université de Beyrouth, Liban, depuis le 1er octobre 1999]

Eric Lapôtre [bourse MENESR]

Dany Mezher [co-tutelle avec l'université de Beyrouth, Liban, depuis le 1er octobre 1999]

Claude Tadonki [co-tutelle avec l'université de Yaoundé, Cameroun, depuis le 1er octobre 1999, en collaboration avec le projet Cosi]

Ahmed Zaoui [bourse Cerfacs, co-encadrement avec le Cerfacs]

Collaborateurs extérieurs

Michel Crouzeix [professeur, université de Rennes 1]

Robert Erra [professeur à l'ESIEA, Paris]

2 Présentation et objectifs généraux

Mots clés : calcul scientifique, algèbre linéaire, équation différentielle, parallélisme, précision.

Le thème unificateur du projet est la conception, l'étude et la mise en œuvre d'algorithmes destinés aux bibliothèques numériques. Ces algorithmes peuvent être utilisés dans des contextes très variés. Citons par exemple le calcul scientifique, la simulation à l'aide de chaînes de Markov, le traitement d'images.

Il résulte de ces thèmes transversaux que les domaines d'application sont potentiellement très nombreux. Pour n'en citer que quelques-uns, les problèmes d'environnement, de transport, d'astrophysique, de chimie, nécessitent *in fine* des algorithmes numériques étudiés dans le projet.

Le projet Aladin a choisi de se consacrer à trois axes de recherche :

– équations différentielles,
– systèmes d'équations linéaires et non linéaires,
– problèmes aux valeurs propres.

En effet, ces trois types de problème sont au cœur de la plupart des logiciels faisant du calcul numérique.

Les principaux critères de qualité d'un algorithme sont sa fiabilité et sa vitesse d'exécution. C'est pourquoi le projet Aladin développe deux axes de recherche orthogonaux aux précédents :

– parallélisme,
– qualité numérique.

La vitesse d'exécution d'un algorithme numérique se caractérise principalement par sa complexité mesurée en nombre d'opérations flottantes, sa vitesse de convergence s'il est itératif, son taux de parallélisme. Le calcul parallèle apporte au projet une motivation pour la recherche de nouveaux algorithmes. La mise en œuvre effective sur des architectures parallèles permet de valider les algorithmes que nous développons.

La fiabilité d'un algorithme numérique se traduit par la précision de l'approximation (discrétisation par exemple), mesurée souvent par l'ordre de la méthode, la stabilité du schéma de résolution, la sensibilité par rapport aux erreurs d'arrondi. Enfin la qualité numérique d'un résultat dépend intrinsèquement du conditionnement du problème à résoudre. La recherche d'algorithmes robustes et fiables est une motivation complémentaire et non exclusive de la recherche d'algorithmes performants et parallèles.

La dynamique d'un système est en général modélisée par des équations différentielles, éventuellement couplées avec des équations algébriques. Le projet s'attache à définir de nouveaux schémas d'intégration qui combinent au mieux de bonnes propriétés d'ordre, de stabilité et de parallélisme. La recherche porte aussi sur des schémas numériques permettant de résoudre efficacement et avec une bonne précision des équations différentielles algébriques. Enfin un troisième sujet d'étude concerne la résolution numérique des systèmes hamiltoniens qui modélisent par exemple des problèmes issus de la mécanique céleste ou de la dynamique moléculaire.

La résolution numérique d'équations différentielles implique à chaque pas de temps la résolution d'un système d'équations linéaires ou non linéaires. Ces systèmes d'équations se retrouvent également dans la résolution numérique d'équations aux dérivées partielles, dans le traitement d'images, etc. La résolution de problèmes non linéaires s'effectue par résolution successive de systèmes linéaires. Pour les systèmes linéaires, la recherche du projet porte sur la conception d'algorithmes itératifs adaptés aux systèmes de très grande taille définis par des matrices creuses. Les espaces de Krylov sont l'un des outils privilégiés pour concevoir ces algorithmes itératifs. Un avantage est de n'exiger aucune transformation de la matrice du système.

De même, la résolution de problèmes aux valeurs propres peut être issue, par exemple, d'une discrétisation d'équations aux dérivées partielles. Là encore, les espaces de Krylov sont un outil de choix pour la conception des algorithmes. Un autre sujet de recherche important a trait à la stabilité des systèmes dynamiques. Dans ce cas, il faut localiser de manière sûre les valeurs propres de la matrice associée. Le projet définit des procédures permettant de contrôler cette localisation dans une région donnée du plan complexe.

Les algorithmes développés pour les trois axes décrits ci-dessus sont pour la plupart parallèles. Le projet les valide sur des architectures parallèles et les utilise dans diverses applications pour démontrer leur efficacité. Le projet vérifie également la robustesse des algorithmes et les limites de résistance aux accidents numériques.

Enfin le projet développe une nouvelle et fructueuse approche pour fournir un encadrement garanti des résultats. Les travaux portent pour l'instant sur la résolution de systèmes linéaires et de problèmes aux valeurs propres.

3 Fondements scientifiques

3.1 Équations différentielles ordinaires ou algébriques

Mots clés : système différentiel, système algébro-différentiel, indice, système hamiltonien, méthode générale linéaire, méthode symplectique.

Résumé : *On cherche à résoudre numériquement des problèmes de valeur initiale pour des systèmes d'équations différentielles ordinaires ou avec contraintes, c'est-à-dire de la forme*

$$\left\{\begin{array}{rcl} y'(x) & = & f(y(x)), \\ y(x_0) & = & y_0, \end{array}\right. \quad ou \quad \left\{\begin{array}{rcll} y'(x) & = & f(y(x),z(x)), & y(x_0) = y_0, \\ 0 & = & g(y(x)), & z(x_0) = z_0. \end{array}\right.$$

Dans le cas des équations différentielles ordinaires se pose un problème de coût de calcul pour les systèmes de grande taille. Le recours au parallélisme semble alors incontournable, mais il se heurte au caractère intrinsèquement séquentiel des méthodes numériques usuelles. Nos travaux se sont orientés dans des directions orthogonales, suivant que l'on cherche à paralléliser «à travers l'intervalle d'intégration» ou «à travers la méthode». Les équations algébro-différentielles posent quant à elles des problèmes spécifiques : en particulier, l'ordre de convergence habituel se trouve notablement diminué du fait de la présence de contraintes algébriques. Nous nous attachons donc à adapter les méthodes existentes ou à en construire de nouvelles permettant de palier cet inconvénient. Enfin nous nous intéressons aux systèmes hamiltoniens, qui se présentent sous forme d'équations différentielles ordinaires mais

méritent souvent un traitement spécifique. Celui-ci est destiné à préserver certains invariants géométriques qui leur sont attachés.

3.1.1 Systèmes différentiels ordinaires

Ce sont des systèmes qui se posent sous la forme [HNW93,HW96]

$$\begin{cases} y'(x) &= f(y(x)), \\ y(x_0) &= y_0. \end{cases}$$

Les vecteurs y et f sont ici dans $\mathbb{R}^m$, issus typiquement de la discrétisation d'une équation aux dérivées partielles. Dans une telle situation, m peut être très grand et le problème est très souvent «raide». En clair, il est fort probable que la résolution numérique se heurte à des problèmes de stabilité et qu'il soit nécessaire de recourir à une méthode implicite, donc d'un coût de calcul potentiellement prohibitif. Face à cette situation, l'usage des méthodes de différentiation rétrograde s'est généralisé, en raison de leur quasi-optimalité en terme de coût par pas. Il reste que ces méthodes souffrent d'un déficit de stabilité, auquel les codes courants tels DASSL [BCP89] ou Vode remédient par l'utilisation de méthodes d'ordre inférieur à 2. Les méthodes "Singly-Implicit Runge-Kutta" (SIRK) s'affranchissent partiellement de cette difficulté. Rappelons qu'une méthode de Runge-Kutta est définie par une matrice de coefficients A et un vecteur de poids b. La propriété fondamentale des méthodes SIRK[Bur78] est la suivante : la matrice de coefficients A possède une seule valeur propre λ de multiplicité s. Ainsi, si J est la jacobienne $m \times m$ du système différentiel, la décomposition LU (lower-upper) de la matrice $(I_s \otimes I_m - hA \otimes J)$, dont le coût est prédominant dans les formules de passage d'un pas au suivant, peut être évitée et remplacée par la décomposition LU de la matrice $I_m - h\lambda J$. Modulo quelques transformations linéaires, le coût de ces méthodes est alors ramené à un niveau comparable à celui des méthodes multipas et elles sont parfaitement stables.

Il est également possible de contourner cette difficulté en ayant recours au parallélisme : une première technique consiste à reformuler le système sous une forme itérative. Considérons pour simplifier la forme de Picard

$$\begin{cases} y^{(k+1)'}(x) &= f(y^{(k)}(x)), \\ y^{(k+1)}(x_0) &= y_0. \end{cases}$$

Sous cette forme, l'intégration se résume à un problème de quadrature et ne présente plus aucune difficulté. Il est même possible de découpler le système par blocs de composantes et d'affecter chaque bloc à un processeur. On voit aisément que le succès de cette approche est

[HNW93] E. Hairer, S. Nørsett, G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations, Nonstiff Problems*, édition Second, Springer-Verlag, 1993, Volume 1.

[HW96] E. Hairer, G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations, Stiff Problems and Differential Algebraic Problems*, édition Second, Springer-Verlag, 1996, Volume 2.

[BCP89] K. Brenan, S. Campbell, L. Petzold, *Numerical solution of initial value problems in differential-algebraic equations*, North Holland, 1989, New-York.

[Bur78] K. Burrage, « A special family of Runge-Kutta methods for solving stiff differential equations », *BIT 18*, 1978, p. 22–41.

conditionné par la vitesse de convergence du processus, ce qui exclut en général la forme de Picard. Cependant des variantes existent, du type Jacobi, donc implicites, mais néanmoins susceptibles d'être parallélisées. Nous nous sommes quant à nous intéressés à une idée similaire, issue des travaux de A. Bellen et M. Zennaro [BZ89], et à son application aux problèmes dissipatifs [2]. Nous avons appliqué ces méthodes au calcul de trajectoires de satellite et aux problèmes d'endommagement dans des structures composites (voir section 6.5.3).

Une seconde technique consiste à concevoir des méthodes intrinsèquement parallèles possédant des domaines de stabilité plus larges. C'est le cas des méthodes DIMSIM[But93] implicites, dont le format est le suivant :

$$\begin{aligned} Y_i &= h\sum_{j=1}^{s} a_{i,j} f(Y_i) + \sum_{j=1}^{r} u_{i,j} y_j^{[n]}, i = 1,\dots,s \\ y_i^{[n+1]} &= h\sum_{j=1}^{s} b_{i,j} f(Y_i) + \sum_{j=1}^{r} v_{i,j} y_j^{[n]}, i = 1,\dots,r. \end{aligned}$$

Les vecteurs $y_i^{[n]}$ et Y_i désignent des approximations de la solution exacte ou de quantités relatives à la solution exacte dont la définition précise importe peu. Toute méthode numérique «classique» peut s'écrire sous ce format et son coût par pas est essentiellement déterminé par la forme de la matrice A. La première des deux équations ci-dessus constitue en effet un système implicite non-linéaire dont la résolution nécessite là encore la décomposition LU de la matrice

$$(I_s \otimes I_m - hA \otimes J).$$

Dans le cas d'une méthode de Runge-Kutta classique (c'est-à-dire non SIRK) à s étapes internes, A est une matrice pleine et le système de dimension $s \times m$. Cette dimension n'est que de m pour les méthodes de différentiation rétrograde. Les méthodes DIMSIM que nous avons considérées possèdent une matrice A diagonale. Le système est alors découplable en s sous-systèmes indépendants de dimension m. Le grand avantage de ces méthodes est qu'il est possible de construire des méthodes d'ordre élevé et parfaitement stables [3].

3.1.2 Équations algébro-différentielles

Ce sont des équations du type

$$\begin{cases} y'(x) = f(y(x),z(x)), & y(x_0) = y_0, \\ 0 = g(y(x)), & z(x_0) = z_0, \end{cases}$$

où l'on suppose que $g_y f_z$ est inversible dans un voisinage de la solution exacte $(y(x),z(x))$. Cette hypothèse assure qu'il est possible de retransformer le système algébro-différentiel en un

[BZ89] A. Bellen, M. Zennaro, « Parallel Algorithms for Initial Value Problems », *Journal of Computational and Applied Mathematics 25*, 1989, p. 341–350.

[But93] J. Butcher, « Diagonally-Implicit Multi-Stage Integration Methods », *Applied Numerical Mathematics 11*, 380, 1993, p. 347–363, North-Holland.

système différentiel pur, et ce en dérivant la contrainte $0 = g(y(x))$. En omettant la dépendance en x, il vient en effet successivement

$$\begin{aligned} 0 &= g_y(y)y' = g_y(y)f(y,z), \\ 0 &= g_{yy}(y)(f(y,z),f(y,z)) + g_y(y)f_y(y)f(y,z) + g_y(y)f_z(y,z)z', \end{aligned}$$

d'où il est possible de tirer d'après l'hypothèse faite sur $g_y f_z$ une expression de z'. On voit au passage que deux différentiations ont été nécessaires, ce qui caractérise les systèmes de Hessenberg d'indice 2. Les problèmes d'indice inférieur à 2 ne posent pas de difficultés particulières, alors que le traitement direct des systèmes d'indice supérieur à 3 est considéré comme périlleux. Ceci confère aux systèmes d'indice 2 une importance particulière, reflétée par l'abondance de la littérature portant sur ce cas[HLR89,HW96].

Comme indiqué précédemment, une méthode de Runge-Kutta appliquée à un système d'indice 2, subit une réduction de son ordre de convergence. Si la méthode possède s étapes internes, l'ordre des méthodes de Runge-Kutta de type Radau IIA, qui sont les mieux adaptées à la situation décrite, est de $2s-1$ pour une équation ordinaire. Il n'est plus que de s pour la composante algébrique (z) d'un système d'indice 2. C'est ce qu'on observe couramment lorsqu'on utilise le code Radau5 fondé sur ces méthodes. La réduction d'ordre est plus drastique encore pour les systèmes d'indice 3, mais il apparaît de plus en plus nécessaire d'étudier ces systèmes en tant que tels, en raison de la place qu'ils occupent tant en mécanique qu'en contrôle optimal.

3.1.3 Systèmes hamiltoniens

Ce sont des systèmes de la forme[SSC94]

$$\left\{ \begin{array}{lcll} p'(x) &=& -\frac{\partial H}{\partial q}(x), & p(x_0) = p_0, \\ q'(x) &=& \frac{\partial H}{\partial p}(x), & q(x_0) = q_0, \end{array} \right.$$

où $H(p,q)$ est une fonction scalaire dite hamiltonienne et p, q sont des vecteurs de $\mathbb{R}^n$. De tels systèmes possèdent un certain nombre de propriétés remarquables, au rang desquelles la conservation de H et de la différentielle 2-forme

$$\omega^2 = \sum_{i=1}^{n} dp_i \wedge dq_i$$

le long des solutions, exprimant en dimension 2 la conservation des surfaces et en dimension supérieure d'une quantité similaire quoique plus abstraite. On peut également caractériser ces systèmes en exprimant la symplecticité de la fonction *flot* $\Phi_{x_0,x_1}(p,q)$ qui à un point (p_0,q_0)

[HLR89] E. Hairer, C. Lubich, M. Roche, *The Numerical Solution of Differential Algebraic Systems by Runge-Kutta Methods*, Springer-Verlag, 1989, Lecture Notes in Mathematics 1409.

[HW96] E. Hairer, G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations, Stiff Problems and Differential Algebraic Problems*, édition Second, Springer-Verlag, 1996, Volume 2.

[SSC94] J. Sanz-Serna, M. Calvo, *Numerical Hamiltonian Problems*, *Applied Mathematics and Mathematical Computation*, 7, Chapman and Hall, 1994.

associe le point $(p(x_1),q(x_1))$ solution du système hamiltonien décrit ci-dessus. Φ est dite symplectique si et seulement si

$$\Phi'^T \begin{bmatrix} 0 & I_n \\ -I_n & 0 \end{bmatrix} \Phi' = \begin{bmatrix} 0 & I_n \\ -I_n & 0 \end{bmatrix}.$$

Les méthodes dites *symplectiques* ont été conçues pour conserver certaines quantités de nature géométrique, telle ω^2. Si φ_{x_0,x_0+h} désigne la fonction flot numérique associée à une méthode symplectique et h le pas d'intégration, alors, quelle que soit la valeur de h, φ vérifie elle-aussi

$$\varphi'^T \begin{bmatrix} 0 & I_n \\ -I_n & 0 \end{bmatrix} \varphi' = \begin{bmatrix} 0 & I_n \\ -I_n & 0 \end{bmatrix}.$$

Les méthodes de Runge-Kutta symplectiques ont certaines propriétés très séduisantes. Ainsi, si X désigne la longueur de l'intervalle d'intégration et p l'ordre de la méthode considérée, l'erreur Δ entre la solution approchée et la solution exacte d'un problème hamiltonien, par exemple périodique pour simplifier, varie linéairement par rapport à X :

$$\Delta \approx Ch^p X.$$

Notons que pour une méthode non symplectique, on a

$$\Delta \approx Ch^p X^2.$$

Pour des intervalles d'intégration «astronomiques», cela représente un avantage considérable.

3.2 Problèmes linéaires et non linéaires

Mots clés : matrice symétrique, matrice creuse, espace de Krylov, linéarisation, itératif, préconditionnement, déflation.

Glossaire :

Matrice symétrique : Les matrices symétriques vérifient $A = A^t$; elles sont très fréquentes dans les applications. Grâce à leurs propriétés, notamment spectrales, la résolution de systèmes symétriques est simplifiée.

Matrice creuse : Une matrice creuse est une matrice de très grande taille avec un petit pourcentage de coefficients non nuls. Lorsque les coefficients non nuls sont à des positions précises, on dit que la matrice est creuse et structurée. Sinon elle est creuse et générale.

Espace de Krylov : L'espace engendré par $\{v,Av,\ldots,A^{m-1}v\}$ est un espace de Krylov. Projeter le problème linéaire sur ce sous-espace permet de se ramener à un problème de petite taille qui approche le problème initial.

Linéarisation : En remplaçant localement la fonction F par l'espace tangent, et en résolvant un problème linéaire associé, on trouve une approximation de la solution au problème $F(u) = 0$.

Résumé :

Un problème linéaire est défini par une matrice $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ et un vecteur $b \in \mathbb{R}^N$; on cherche $x \in \mathbb{R}^N$ tel que $Ax = b$. L'entier N est l'ordre ou la taille de la matrice.

Ce problème est au cœur de nombreuses applications scientifiques : discrétisation d'équations aux dérivées partielles, linéarisation de problèmes non linéaires, traitement d'images, etc.

Un problème non linéaire est défini par une fonction F d'un domaine D de $\mathbb{R}^N$ dans $\mathbb{R}^N$; on cherche à résoudre l'équation

$$u \in \mathbb{R}^N,\ F(u) = 0.$$

Ce problème, très général, se pose après discrétisation d'équations différentielles par des schémas implicites (voir module 3.1), après discrétisation d'équations aux dérivées partielles non linéaires, etc.

Le projet étudie principalement les méthodes itératives dites de Krylov pour résoudre les systèmes linéaires. La recherche porte sur des méthodes permettant d'accélérer la convergence. Dans le cas non linéaire, le projet étudie les méthodes itératives de linéarisation et leur couplage avec la résolution des problèmes linéaires induits.

3.2.1 Méthodes directes pour les sytèmes linéaires

Si N est assez petit ($N \leq 5000$ environ), le système $Ax = b$ se résout par une méthode directe basée sur la factorisation de Gauss avec pivot $PA = LU$, où P est une matrice de permutation liée à la stratégie de pivot qui assure la stabilité numérique, L est triangulaire inférieure et U est triangulaire supérieure. Cette méthode est précise et stable numériquement mais sa complexité, mesurée par $O(N^3)$ opérations flottantes et $O(N^2)$ variables flottantes en mémoire, est un frein à son utilisation pour N grand.

Pour réduire le coût mémoire, il faut alors exploiter la structure creuse de la matrice en ne stockant que peu, voire pas, de coefficients nuls [DER86]. Il existe de nombreux types de stockage creux : bande, profil, compressé par lignes, par colonnes, par diagonales, etc. Mais la factorisation de Gauss induit du remplissage dans les facteurs L et U. Des techniques de renumérotation ont pour objectif de limiter ce remplissage : minimisation de la largeur de bande ou du profil, degré minimum, etc. Dans le cas symétrique où $A = LL^t$, la complexité devient alors $O(N \times d^2)$ opérations flottantes et $O(NZ(L))$ variables flottantes, où $NZ(L)$ est le nombre de coefficients non nuls dans le facteur L et $d = NZ(L)/N$ est le nombre moyen par ligne. Typiquement, $NZ(L) = O(N^{3/2})$ pour une discrétisation de problèmes 2D et $NZ(L) = O(N^{5/3})$ pour des problèmes 3D. Une autre difficulté est de concevoir une version parallèle. Les méthodes multifrontales sont souvent efficaces. Il est aussi possible d'exploiter la structure creuse pour dégager un parallélisme intrinsèque à gros grain [6].

3.2.2 Méthodes itératives pour les systèmes linéaires

Pour N très grand ($N \geq 10000$ environ), le volume mémoire des méthodes directes est souvent prohibitif. De plus en plus, elles sont remplacées par des méthodes itératives. Les méthodes stationnaires de type relaxation ont l'inconvénient de converger lentement et seulement

[DER86] I. Duff, A. Erisman, J. Reid, *Direct Methods for Sparse Matrices*, Oxford Science Publications, 1986.

pour certaines classes de matrices. Les méthodes de projection sont plus générales et plus robustes.

De plus, les méthodes de projection sont intéressantes parce que la matrice A n'est utilisée qu'à travers l'opérateur produit matrice-vecteur $w = Av$. Il est donc possible d'utiliser un stockage compressé, voire de ne pas stocker A. Un autre avantage est l'utilisation de méthodes "matrix-free", où le produit matrice-vecteur est recalculé ou approché à chaque occurence. De plus, cette opération se parallélise assez bien.

Dans cette famille, les méthodes de projection de Krylov sont les plus étudiées actuellement [Saa95b]. Elles sont définies par le sous-espace de Krylov

$$\mathcal{K}_m(A,r_0) = vect\{r_0,Ar_0,\ldots,A^{m-1}r_0\},$$

construit itérativement, par une matrice B souvent symétrique définie positive et par deux conditions : la condition d'espace

$$x_{m+1} - x_m \in \mathcal{K}_m$$

et la condition de Petrov-Galerkin

$$(B(x - x_m),v) = 0, \ \ \forall v \in \mathcal{K}_m.$$

Ces méthodes de Krylov sont polynomiales, en effet

$$x - x_m = R_m(A)(x - x_0)$$

où R_m est un polynôme de degré m. On en déduit qu'elles convergent en au plus N itérations mais l'objectif est d'obtenir une bonne approximation en beaucoup moins d'itérations. Si A est diagonalisable sous la forme $A = XDX^{-1}$ avec D diagonale contenant les valeurs propres de A, alors $R_m(A) = XR_m(D)X^{-1}$ et il suffit d'étudier $R_m(D)$. Cette propriété permet de relier les méthodes de Krylov aux outils mathématiques manipulant les polynômes.

Il faut distinguer, comme pour le cas des méthodes directes, les systèmes symétriques et non symétriques.

Les systèmes symétriques sont les plus faciles à résoudre. Les méthodes de Krylov peuvent dans ce cas construire $\mathcal{K}_m$ et calculer x_{m+1} à l'aide de récurrences courtes, d'où une faible complexité. Si de plus A est définie positive, la méthode du gradient conjugué permet d'allier récurrences courtes et minimisation :

$$\|x - x_m\|_A \leq \|x - x_0 + v\|_A, \forall v \in \mathcal{K}_m.$$

Les systèmes non symétriques sont plus difficiles à résoudre. Une approche possible est de se ramener au cas symétrique défini positif en résolvant l'équation normale $A^tAx = A^tb$ ou l'équation $AA^t(A^{-t}x) = b$. Cette solution est robuste mais coûteuse puisque chaque itération requiert à la fois le produit par A et par A^t. Hormis cette méthode, il existe deux grandes classes de méthodes, soit avec récurrences courtes, soit avec minimisation, les deux propriétés

[Saa95b] Y. Saad, *Iterative methods for sparse linear systems*, PWS publishing, 1995.

étant incompatibles ici. La méthode GMRES (Generalized Minimum Residual), qui est très utilisée pour sa robustesse et son efficacité, impose une propriété de minimisation

$$\|r_m\|_2 = \min_{v \in \mathcal{K}_m} \|r_0 - Av\|_2$$

mais la construction de $\mathcal{K}_m$ a une complexité en $O(mNZ(A) + m^2N)$ opérations flottantes et $O(NZ(A) + mN)$ variables flottantes. Un moyen de limiter ce coût est de redémarrer l'algorithme toutes les m itérations, toutefois la convergence n'est plus garantie. Le choix du paramètre m s'avère très délicat.

3.2.3 Accélération de convergence

Pour le gradient conjugué comme pour GMRES, la vitesse de convergence dépend des valeurs propres de la matrice (le spectre). Préconditionner la matrice, c'est-à-dire résoudre

$$M_1 A M_2 (M_2^{-1} x) = M_1 b,$$

avec M_1 et M_2 inversibles, permet d'accélérer la convergence grâce à un spectre de $M_1 A M_2$ plus favorable [Bru95]. Chaque itération est alors plus coûteuse puisqu'elle implique, outre le produit Av, les produits $M_1 v$ et $M_2 v$ (il est bien sûr hors de question de stocker la matrice pleine $M_1 A M_2$).

Le préconditionnement diagonal $M_1 = D, M_2 = I$ a un coût faible en $O(N)$ opérations flottantes et variables flottantes. La parallélisation en est aisée mais l'efficacité est parfois réduite.

La factorisation incomplète est définie par

$$M_2 = I,\ M_1 = (L_1 U_1)^{-1} \quad \text{avec} \quad A = L_1 U_1 + R$$

et R choisi implicitement par le taux de remplissage dans L_1 et U_1. Ce préconditionnement est en général efficace mais est en contrepartie coûteux et peu parallèle (on retombe sur les inconvénients des méthodes directes).

Les préconditionnements polynomiaux sont également assez coûteux, bien qu'ils soient parallèles puisque seul le produit $w = Av$ intervient.

Une autre approche est un préconditionnement par déflation, défini par

$$M_2 = I \quad et \quad M_1 = I - UU^t + U(U^t A U)^{-1} U^t$$

où U est une base orthonormée d'un sous-espace invariant (en pratique une approximation). Des variantes peuvent être construites autour de la même idée. Si U est exactement invariant, la matrice préconditionnée restreinte à $vect(U)$ est l'identité et son spectre sur $vect(U)^\perp$ est le spectre de A privé des valeurs propres associées à U de sorte que le problème est ramené à une résolution sur $vect(U)^\perp$. Il faut donc choisir U associé aux petites valeurs propres qui freinent la convergence. L'approximation de U se fait grâce à des relations avec les méthodes

[Bru95] A. Bruaset, *A survey of preconditioned iterative methods*, *Pitman Research Notes in Mathematics Series*, Longman Scientific and Technical, 1995.

de Lanczos et d'Arnoldi (voir module 3.3). Le produit $w = M_1 v$ est basé sur des opérations de type matrice-vecteur qui se parallélisent bien.

Augmenter l'espace des solutions, avec un sous-espace de Krylov calculé précédemment ou une approximation d'un sous-espace invariant, est une autre accélération possible, assez similaire à la précédente. La comparaison entre le préconditionnement et l'approche de type sous-espace augmenté est faite dans [Saa95a] et dans [5].

Enfin les méthodes par blocs ont un effet semblable au précédent et ont l'intérêt de recourir à des opérateurs de type matrice-vecteur ou matrice-matrice.

3.2.4 Problèmes non linéaires

La méthode de Newton est souvent utilisée pour résoudre le problème $F(u) = 0$. C'est une méthode de linéarisation qui s'écrit

$$u_{k+1} = u_k - J(u_k)^{-1} F(u_k)$$

où $J(u_k)$ est le Jacobien de F en u_k. Les méthodes de type Newton modifié utilisent un Jacobien approché et les méthodes de type Newton-inexact résolvent de façon approchée le système linéaire $J(u_k)x_k = -F(u_k)$ [OR70],[DS83].

Alors que la convergence locale de Newton est quadratique, donc très rapide, celles de Newton modifié et Newton inexact sont linéaires, au mieux super-linéaires donc plus lentes. Par contre, la complexité par itération est en général moindre, ce qui peut compenser le plus grand nombre d'itérations.

Les méthodes de Newton-Krylov, de type inexact, résolvent le système linéaire à l'aide d'une méthode de projection sur un espace de Krylov (voir section 3.2.2). La difficulté réside dans un bon choix des critères de convergence et dans un préconditionnement efficace (voir section 3.2.3). D'autre part, pour garantir la convergence globale, il faut combiner la méthode de Newton avec une technique de "backtracking" ou de continuation par exemple.

3.3 Problèmes aux valeurs propres

Mots clés : valeur propre, Davidson, Chebychev, Faber, pseudo-spectre, dichotomie spectrale, intervalle.

Glossaire :

Davidson : Méthode de calcul de valeurs propres adaptée aux grandes matrices creuses symétriques qui peut être vue comme une méthode de Lanczos accélérée à chaque étape par un pas d'une méthode de Newton inexacte pour corriger l'estimation courante du vecteur propre. Elle nécessite une matrice de préconditionnement. La méthode peut se décliner en méthode de Davidson ou de Jacobi-Davidson.

[Saa95a] Y. SAAD, « Analysis of Augmented Krylov subspace methods », *rapport de recherche n° 176*, University of Minnesota, 1995.

[OR70] J. ORTEGA, W. RHEINBOLDT, *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*, *Computer science and applied mathematics*, Academic Press, 1970.

[DS83] J. E. DENNIS, R. B. SCHNABEL, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*, Prentice-Hall series in Computational Mathematics, 1983.

Chebychev, Faber : Deux types de polynômes définis sur un domaine D convexe du plan complexe (respectivement ellipse et polygone) bornés par l'unité sur D et qui croissent très rapidement dès que l'on s'éloigne du contour vers l'extérieur de D.

Pseudo-spectre : Ensemble des valeurs propres de toutes les matrices voisines d'une matrice donnée où le voisinage est défini avec la norme euclidienne. Permet de connaître la sensibilité aux perturbations des valeurs propres d'une matrice.

Dichotomie spectrale : Procédé de partitionnement de l'ensemble des valeurs propres d'une matrice qui contient aussi l'évaluation d'un critère de fiabilité sur le résultat du partitionnement. Contient généralement aussi le calcul de projecteurs spectraux (projecteurs définis par la diagonalisation de la matrice).

Résumé : *Le problème standard de valeur propre consiste pour une matrice $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ donnée à trouver tous les couples*

$$(\lambda,x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^N$$

(ou seulement une partie d'entre-eux) qui vérifient :

$$Ax = \lambda x.$$

Le problème généralisé est défini par deux matrices

$$A,\, B \in \mathbb{R}^{N\times N}$$

et les couples doivent alors vérifier :

$$Ax = \lambda Bx.$$

L'amélioration des méthodes de calcul de valeurs propres porte essentiellement sur la recherche d'accélérateurs de la convergence à appliquer dans les méthodes itératives adaptées aux grandes matrices creuses. Le projet travaille depuis plusieurs années sur la méthode de Davidson pour le cas des matrices symétriques, méthode qu'il adapte maintenant au calcul des plus petites valeurs singulières de matrices. Dans le cas des matrices non symétriques (ou non hermitiennes), les travaux ont porté sur la recherche d'accélérateurs polynomiaux (polynômes de Chebychev et de Faber).

La mesure de la sensibilité des valeurs propres d'une matrice aux perturbations est un problème à résoudre lorsque l'on doit localiser les valeurs propres d'une matrice imprécisément connue. On peut définir l'ensemble des perturbations possibles par la norme euclidienne des matrices ou par des matrices d'intervalles.

3.3.1 Méthodes de Davidson

On se place dans le cas du calcul de quelques valeurs propres extrêmes d'une grande matrice symétrique A (ou hermitienne complexe). La méthode de Davidson est une méthode de sous-espace car elle génère pas-à-pas un système orthonormé de vecteurs V_m sur lequel on projette le problème initial afin d'obtenir des approximations des valeurs et vecteurs propres cherchés. Soit (λ,z) un couple d'éléments propres de la matrice $H_m = V_m{}^t AV_m$, alors $(\lambda,x = V_m z)$ est une approximation d'un couple d'éléments propres de A. Contrairement à la méthode de référence Lanczos, les sous-espaces engendrés ne sont pas des sous-espaces de Krylov (voir la définition dans 3.2), car on incorpore à chaque pas une correction du vecteur x par un procédé de Newton : on recherche y petit tel que $y \perp x$ et $x+y$ soit un vecteur propre de A. En négligeant les termes du deuxième ordre par rapport à $\|y\|$, on est ramené à résoudre

$$\begin{aligned} r &= (\lambda I - A)y \\ \text{où } r &= Ax - \lambda x \text{ et } y \perp x \end{aligned}$$

Les méthodes de Davidson consistent à résoudre approximativement la première équation, soit en remplaçant A par une matrice M plus facile à manipuler, soit en effectuant quelques pas d'une méthode de type gradient conjugué. Lorsque l'on résout directement dans l'orthogonal de x, on obtient une méthode de type Jacobi-Davidson. Le comportement de la méthode de Davidson a été étudié dans [4] tandis que la méthode de Jacobi-Davidson est décrite dans [SVdV96]. Ces méthodes sont de nettes améliorations de la méthode de Lanczos dans le cas du calcul de valeurs propres de petites valeurs absolues. C'est pourquoi le projet les a considérées pour calculer les plus petites valeurs singulières d'une grande matrice en les appliquant à la matrice $A^t A$ [7].

3.3.2 Accélération de la méthode d'Arnoldi

Nous étudions le cas d'une matrice A de grande taille réelle non symétrique ou complexe non hermitienne, dont les valeurs propres peuvent par conséquent être complexes. La méthode d'Arnoldi [Cha88,Saa92] construit pas à pas une base orthonormée V_m de l'espace de Krylov $\mathcal{K}_m(A,v)$ et approche les couples propres cherchés par ceux de la matrice $H_m = V_m{}^t AV_m$ qui est une matrice de Hessenberg de petite taille. Appliquée à une matrice symétrique, cette méthode serait la méthode de Lanczos. Comme la dimension m de la base est limitée par les capacités de stockage des données, il est nécessaire de redémarrer périodiquement le procédé avec la meilleure approximation courante du vecteur propre cherché et c'est à cet endroit que s'insèrent les techniques d'accélération. Afin d'accoître les composantes du nouveau vecteur initial v dans les directions des vecteurs propres que l'on recherche, on calcule $p(A)v$ où p est un polynôme dont le module discrimine les valeurs propres cherchées des autres. Il s'agit donc de définir une courbe convexe qui entoure les valeurs propres à rejeter et seulement elles. Pour cela on choisit généralement une ellipse et le polynôme de Chebychev qu'elle définit. Si la matrice est réelle, l'ellipse est choisie symétrique par rapport à l'axe des réels. Dans le cas complexe, le placement de l'ellipse est plus délicat. Il est souvent préférable de construire un polygone et de calculer le polynôme de Faber associé, polynôme obtenu à partir de la transformation de

[SVdV96] G. L. G. Sleijpen, H. A. Van der Vorst, « A Jacobi-Davidson iteration method for linear eigenvalue problems », *SIAM J. Matrix Anal. Appl. 17*, 1996.

[Cha88] F. Chatelin, *Valeurs propres de matrices*, Masson, 1988.

[Saa92] Y. Saad, *Numerical methods for large eigenvalue problems*, *Algorithms and Architectures for Advanced Scientific Computing*, Manchester University Press, Manchester, UK, 1992.

Schwarz-Christopher qui fait correspondre l'extérieur du polygone avec l'extérieur du disque unité. Le projet a travaillé ces trois approches et les a appliquées à la méthode d'Arnoldi par blocs. Nous avons systématiquement choisi dans ce domaine d'exprimer les algorithmes par des versions par blocs car elles permettent de meilleures efficacités informatique et numérique.

3.3.3 Pseudo-spectres et dichotomie spectrale

Dans de nombreuses applications, les valeurs propres d'une matrice sont calculées afin de décider si tout le spectre est ou non inclus dans une partie donnée du plan complexe (demi-plan des complexes à partie réelle négative, disque unité, etc.) Malheureusement, la matrice n'est définie qu'à une précision donnée (au maximum la précision de l'arithmétique flottante) et le conditionnement (voir la définition en 3.4) de certaines valeurs propres peut être assez élevé pour que le résultat ne soit pas sûr. On ne désire donc pas calculer les valeurs propres d'une unique matrice mais plutôt en déterminer les zones de variation lorsque la matrice varie dans un voisinage donné de la matrice initiale. On considère ici le cas où le voisinage est défini avec la norme euclidienne mais il peut aussi être défini par une matrice d'intervalles (voir 3.4).

La notion de pseudo-spectre a été introduite simultanément mais de manière indépendante par Godunov [GKK91] et Trefethen [Tre91]. Pour une matrice A et un paramètre de précision ϵ donnés, le pseudo-spectre $\Lambda_\epsilon(A)$ est l'ensemble des valeurs propres de toutes les matrices $A+\Delta$ où $\|\Delta\| \leq \epsilon\|A\|$. Sa caractérisation repose sur l'équivalence :

$$\lambda \in \Lambda_\epsilon(A) \Leftrightarrow \sigma_{\min}(A - \lambda I) \leq \epsilon\|A\|$$

où $\sigma_{\min}$ représente la plus petite des valeurs singulières. Les pseudo-spectres sont représentés dans le portrait spectral de la matrice par des lignes de niveaux correspondant à différentes valeurs de ϵ. La construction de ces objets se fait habituellement par le calcul de $\sigma_{\min}(A - \lambda I)$ pour λ parcourant une grille définie dans le plan complexe. Comme cette approche est coûteuse en volume de calcul et non totalement fiable, on recherche actuellement des méthodes de continuation qui permettent de suivre directement les lignes de niveaux. Dans tous les cas, ces méthodes reposent sur une utilisation massive du calcul de la plus petite valeur singulière d'une matrice complexe, calcul pour lequel le projet a développé des algorithmes parallèles.

La dichotomie spectrale peut se réaliser grâce à la détermination d'un pseudo-spectre mais il existe aussi une direction de recherche qui consiste à définir des projecteurs spectraux correspondant à des sous-espaces invariants bien séparés, un indicateur évaluant la qualité de la séparation. Le cas de la dichotomie par un cercle ou un axe a été traité par Malyshev [Mal93]. Les cas de dichotomie par une ellipse ou un polygone s'y ramènent. Les procédures obtenues sont très fiables mais si coûteuses qu'elles ne peuvent pour le moment être envisagées que pour des matrices de très petite taille.

[GKK91] S. K. Godunov, O. P. Kiriljuk, V. I. Kostin, « Spectral portrait of matrices and criteria of spectrum dichotomy », *in : Computer arithmetic and enclosure methods*, J. Herzberger, L. Athanassova (éditeurs), 1991.

[Tre91] L. N. Trefethen, « Pseudospectra of matrices », *in : Numerical Analysis*, D. F. Griffiths, G. A. Watson (éditeurs), Longman Scientific abnd Technical, 1991.

[Mal93] A. N. Malyshev, « Parallel algorithm for solving some spectral problems of linear algebra », *Lin. Alg. Applic. 188-189*, 1993, p. 489–520.

3.4 Encadrement garanti de résultats

Mots clés : conditionnement, arithmétique d'intervalles, algèbre linéaire.

Glossaire :

Conditionnement : quantité qui mesure le taux de variation d'un résultat en fonction de l'amplitude des perturbations des données. Cette quantité dépend généralement des normes choisies. Lorsque la résolution du problème correspond au calcul d'une fonction différentiable, le conditionnement est égal à la norme de la matrice jacobienne.

Arithmétique d'intervalles : l'arithmétique d'intervalles est une extension de l'arithmétique classique qui garantit l'encadrement du résultat exact. En dimension n, un intervalle est un parallélépipède rectangle de côtés parallèles aux axes.

Résumé : *Il existe des situations où l'on recherche un encadrement sûr du résultat d'un calcul pour garantir qu'on ne se trouvera pas dans une situation d'échec, malgré l'imprécision des calculs effectués sur ordinateur et l'imprécision des données. C'est le cas par exemple en géométrie algorithmique où des arbres de décision reposent sur des tests arithmétiques. Le projet recherche des procédures d'encadrement pour les problèmes classiques de l'algèbre linéaire.*

Lorsque les données d'un problème sont imprécises, elles sont définies par des intervalles. La première solution qui consiste en une application directe de l'arithmétique d'intervalles conduit à une très large surestimation du résultat, due à la décorrélation des calculs et à l'effet enveloppant d'un ensemble par un intervalle. Pour traiter ces problèmes, deux grandes classes de méthodes ont donc été développées [Her94]:

– **les méthodes itératives :** elles consistent à se ramener à des problèmes de type point fixe : si une fonction continue f vérifie $f(I) \subset I$ où I est un compact convexe de $\mathbb{R}^N$ alors l'équation $f(x) = x$ a au moins une solution dans I. Ces méthodes nécessitent habituellement un préconditionnement du système, ce qui produit souvent une large surestimation du résultat.

– **les méthodes directes :** elles utilisent la structure particulière d'un problème pour obtenir une résolution exacte. Elles nécessitent souvent des conditions d'application très strictes, telles que des conditions de signe sur les vecteurs manipulés.

Les méthodes que nous développons se situent dans une catégorie intermédiaire. Elles consistent à obtenir une description de l'ensemble résultat sous la forme d'une condition nécessaire et suffisante qui ne fasse pas intervenir d'intervalles ; par contre la condition fait intervenir des valeurs absolues et des non linéarités dont on se débarrasse en l'affaiblissant. Nous obtenons alors une approximation du résultat (un sur-ensemble ou un sous-ensemble, selon les cas) sous la forme d'un polyèdre convexe. Finalement, l'analyse des perturbations au premier ordre nous permet d'obtenir de bons points de départ pour les algorithmes classiques de programmation linéaire. Un traitement numérique des résultats est encore nécessaire, pour obtenir des encadrements sûrs malgré l'utilisation de l'arithmétique flottante.

[Her94] *in : Topics in Validated Computations*, J. Herzberger (éditeur), *Studies in Computational Mathematics*, North-Holland, 1994.

Nous avons développé nos méthodes d'encadrement pour la résolution de systèmes linéaires et pour la résolution de problèmes aux valeurs propres.

4 Domaines d'applications

4.1 Panorama

Mots clés : calcul scientifique, transport, environnement, pollution.

Résumé : *Les thèmes de recherche du projet Aladin s'inscrivent en aval de nombreux champs d'étude. Les domaines d'application sont donc très variés et très nombreux. Nous avons choisi récemment de nous investir plus particulièrement dans le domaine de l'environnement. Nous développons ce thème ci-dessous. Dans ce bref panorama, nous citons les autres domaines où le projet a obtenu des résultats ces dernières années.*

- aéronautique : le projet a contribué à améliorer et à paralléliser la résolution des équations de Navier-Stokes qui gouvernent l'écoulement de l'air autour d'un avion ou d'une navette spatiale.
- transport : les matériaux composites, de type élastomères renforcés, sont de plus en plus utilisés dans les industries automobile, spatiale, aéronautique, ferroviaire, etc. Il apparaît nécessaire de caractériser le comportement mécanique de ces matériaux. Le projet contribue à la simulation numérique de ces problèmes mécaniques à l'aide de méthodes d'homogénéisation.
- orbitographie : afin de contrôler et de corriger au besoin la position d'un satellite, il faut pouvoir simuler rapidement sa trajectoire à partir d'une observation donnée. Le projet a développé une méthode parallèle pour calculer cette trajectoire.
- électromagnétisme : pour simuler le fonctionnement de dispositifs de transmission de micro-ondes, il est nécessaire de résoudre un problème généralisé de valeurs propres défini par des matrices complexes non hermitiennes de grande taille. Le projet a développé un logiciel programmant une méthode d'Arnoldi avec déflation pour résoudre ce problème.

4.2 Environnement

En collaboration avec d'autres équipes de recherche, le projet participe à plusieurs études liées à l'environnement.

La gestion de ressources naturelles repose sur une cartographie de celles-ci à l'aide de relevés météorologiques ou d'images satellitaires. Cette cartographie requiert la résolution d'une succession de problèmes linéaires. Le projet a contribué à développer un algorithme performant de résolution, dans le cadre d'une coopération avec l'université du Queensland en Australie. Il s'agit de visualiser la pluviométrie et la couverture végétale dans le but de gérer au mieux l'exploitation agricole des ressources naturelles.

L'imagerie sismique permet de réaliser une analyse des fonds sous-marins. Elle doit s'effectuer à très haute résolution pour atteindre des objectifs géotechniques tels que la détection de déchets polluants. Dans le cadre d'une coopération avec Ifremer, le projet participe au développement d'un logiciel de résolution performant.

Dans le cadre du projet Esimeau (projet européen du programme Inco-DC) et de l'action de dissémination CRUCID, nous avons collaboré à une modélisation des phénomènes d'eutrophisation et de crues dans les bassins et rivières. Les exemples d'application viennent des pays méditerranéens.

L'étude des phénomènes de diffusion et de dispersion dans les nappes phréatiques est fondamentale pour la gestion des ressources en eau, pour l'exploitation de la géothermie, pour l'analyse de la contamination par des polluants, etc. Le projet coopère avec le département de Géosciences de l'université de Rennes 1 et avec l'Institut de Mécanique des Fluides de l'université de Strasbourg. Les travaux portent sur la modélisation et la simulation des phénomènes de diffusion et de dispersion dans un réseau souterrain de failles ou dans un milieu poreux.

5 Logiciels

5.1 Activité logicielle du projet

La plupart des algorithmes numériques conçus par le projet font l'objet d'un développement logiciel. Les algorithmes parallèles sont programmés sur des calculateurs multiprocesseurs, à mémoire partagée ou distribuée. En général, seule une version prototype est réalisée. Ces prototypes, écrits en utilisant le système de calcul numérique Matlab ou en langage de programmation Fortran, servent à illustrer expérimentalement les performances des algorithmes : temps de calcul, place mémoire, précision du résultat, etc. Les tests portent sur des problèmes académiques, ou des problèmes applicatifs issus de collaborations, ou des problèmes fournis dans le cadre d'études contractuelles.

Actuellement, deux logiciels sont déposés à l'APP et sont disponibles sur site ftp : Radau5M et PS63 (http://www.irisa.fr/aladin/bibli/codes.html). Le code RADAU5M est un solveur numérique dérivé du code Radau5 de l'université de Genève. La modification concerne les systèmes algébro-différentiels de Hessenberg d'indice 2. Le code PS63 est une méthode de Runge-Kutta explicite d'ordre 3 et d'ordre pseudo-symplectique 6. Cette méthode est destinée à la résolution de systèmes hamiltoniens.

En ce qui concerne la qualité numérique, le projet a fortement contribué au développement de l'atelier logiciel Aquarels décrit ci-dessous. Cet atelier a pour but de contrôler la précision du résultat d'un calcul numérique.

5.2 Atelier Aquarels

Participants : Jocelyne Erhel [correspondant], Bernard Philippe.

Résumé : *L'atelier Aquarels permet de contrôler la qualité numérique dans les programmes scientifiques. Il rassemble sous une unique structure d'accueil une palette d'outils pour valider un programme ou traquer les causes d'échec.*

Aquarels signifie "atelier de qualité numérique pour la réalisation de logiciels scientifiques". Ce logiciel englobe dans une même structure d'accueil de type atelier divers outils pour contrôler la précision de logiciels scientifiques. L'atelier, qui a été conçu principalement par le projet Aladin, a été développé par la société Simulog, avec un financement du CNES, du CEA et de la DGA. L'atelier est diffusé par Simulog, qui assure également la documentation et la maintenance du logiciel. Le projet poursuit des expérimentations avec Aquarels.

L'application testée avec l'atelier peut s'exécuter sur une plate-forme distante tandis que l'interface s'exécute classiquement sur une station de travail. À l'aide de l'atelier Aquarels, il est possible de :

- contrôler l'arithmétique flottante du calculateur hôte. Cet outil présente trois fonctionnalités : déterminer les paramètres de l'arithmétique flottante, comparer à la norme IEEE754, vérifier la précision des fonctions mathématiques usuelles.
- Effectuer des calculs en précision arbitraire, choisie par l'usager.
- Effectuer des calculs avec une arithmétique d'intervalles. Les bornes des intervalles peuvent être de précision arbitraire.
- Perturber aléatoirement les opérations et analyser l'échantillon stochastique des résultats.
- Perturber aléatoirement des variables (données du problème) et analyser statistiquement d'autres variables (résultats du problème).
- Faire appel aux bibliothèques numériques Lapack et NAG.
- Utiliser le système de calcul formel MAPLE.

Les arithmétiques de précision arbitraire et d'intervalles, de même que les méthodes de perturbation, sont facilement utilisables grâce à des extensions du langage Fortran 77. Le langage Fortran-Aquarels inclut les nouveaux types Multiprecision, Interval et des directives de perturbations. La structure d'accueil permet de modifier ou d'intégrer de nouveaux outils.

Au fur et à mesure des expériences avec l'atelier Aquarels, le projet acquiert un savoir-faire qui lui permet de mettre au point une véritable méthodologie [15]. Deux types d'utilisation se dégagent : analyser comme une "boîte noire" le comportement d'un programme déjà existant ou analyser les causes d'un échec (souvent une division par zéro) pendant l'exécution d'un programme. Dans les deux cas, il s'agit de repérer les composantes du logiciel sensibles à des variations sur les données. L'atelier Aquarels permet d'analyser finement les procédures incriminées pour cerner les contours de leur domaine de validité et éventuellement proposer des solutions alternatives plus robustes.

6 Résultats nouveaux

6.1 Equations différentielles ordinaires ou algébriques

Résumé : *L'étude des méthodes* DIMSIM *s'est poursuivie. Par ailleurs, le concept de pseudo-symétrie, similaire à celui de pseudo-symplecticité mais adapté au cas des équations différentielles ordinaires réversibles en temps, a été étudié. Enfin, une collaboration avec l'action Mocoa a débuté sur la résolution numérique des équations d'Hamilton-Jacobi.*

6.1.1 Méthodes générales linéaires

Participant : Philippe Chartier.

La collaboration avec J.C Butcher de l'université d'Auckland et Z. Jackiewicz de l'université d'Arizona a été poursuivie. L'effort s'est porté cette année sur les méthodes dites de type 1, c'est-à-dire destinées aux systèmes différentiels non raides. Ces méthodes, explicites et séquentielles, ont été étudiées dans le cadre défini en 98 ; en particulier, elles ont été testées numériquement et implantées en Matlab. Elles font l'objet d'un article actuellement soumis.

6.1.2 Méthodes pseudo-symétriques

Participants : Anne Aubry, Philippe Chartier, Eric Lapôtre, Michel Crouzeix.

De même que le concept de pseudo-symplecticité autorise la construction de méthodes de Runge-Kutta explicites conservant certaines propriétés fondamentales des méthodes symplectiques, on peut définir pour les systèmes réversibles en temps celui de pseudo-symétrie. La définition de la pseudo-symétrie et l'étude des propriétés des méthodes pseudo-symétriques a fait l'objet d'un rapport de recherche et d'une présentation à une conférence, dans le cadre de la thèse d'Eric Lapôtre [36, 28]. Ce travail se poursuit actuellement avec la recherche de méthodes satisfaisant les critères définis dans [36]. La construction de méthodes pseudo-symétriques d'ordre élevé reste toujours un problème délicat.

6.1.3 Approximation des équations d'Hamilton-Jacobi

Participant : Philippe Chartier.

Les équations d'Hamilton-Jacobi pour un problème de contrôle optimal où les variables d'états sont régies par une équation différentielle ordinaire ont été étudiées depuis de nombreuses années. En collaboration avec Frédéric Bonnans et Housnaa Zidani (action Mocoa), nous avons étudié l'application de schémas adaptés au cas où les variables d'état sont régies par des équations algébro-différentielles. Ce travail est en cours de rédaction.

6.2 Problèmes linéaires et non linéaires

Résumé : *Nous avons poursuivi l'étude de méthodes itératives préconditionnées. Nous avons défini des méthodes hybrides, basées sur une méthode de relaxation ou une méthode multigrille et sur une méthode de gradient conjugué. Par ailleurs, nous avons démarré une étude sur la régularisation de problèmes aux moindres carrés mal conditionnés. Nous avons comparé des méthodes directes et itératives, dans le but de traiter des matrices creuses de grande taille. Nos méthodes sont appliquées à de l'imagerie sismique ou satellitaire.*

6.2.1 Accélération de résolution dans une simulation d'eutrophisation

Participants : Dany Mezher, Bernard Philippe.

Ce travail a trouvé son sujet dans l'activité du contrat européen Esimeau (INCO-DEV). Ce contrat a pour but de modéliser et simuler numériquement l'eutrophisation de bassins. Après discrétisation (éléments finis sur une formulation $\psi - \omega$ de l'équation de Navier-Stokes), on aboutit à un système linéaire formé de quatre blocs carrés, dans lesquels les blocs diagonaux sont définis, positif pour l'un et négatif pour l'autre. Nous avons développé, étudié et comparé différentes méthodes pour résoudre le système. Nous avons retenu celle qui est la plus performante en nombre d'opérations et fiabilité : une résolution Gauss-Seidel par blocs et inversion des blocs par une méthode du gradient conjugué préconditionné [37].

6.2.2 Equations biharmoniques en 3D

Participant : Jocelyne Erhel.

De nombreuses applications, telles que la restauration d'images, le problème d'écoulement dans une cavité, conduisent à des équations différentielles biharmoniques tridimensionnelles. Avec un schéma numérique classique de différences finies d'ordre 1, il apparaît des points fictifs extérieurs au domaine, ce qui nuit à la qualité globale de la solution. Pour remédier à cette difficulté, nous avons mis au point des schémas de différences finies d'ordre 2, 3 et 4 qui utilisent seulement le cube unité comme élément de référence. Grâce à ces schémas, il n'y a plus de points fictifs. Nous avons développé un programme de calcul symbolique pour générer ces formules.

Le système linéaire issu de la discrétisation précédente est mal conditionné et de très grande taille. Les méthodes de résolution de type Gauss-Seidel ou SOR convergent très lentement. Pour accélérer la convergence, nous avons développé une méthode multigrille, dont la vitesse de convergence est indépendante de la taille du maillage.

Nous comparons maintenant cette méthode multigrille à des méthodes de type gradient biconjugué préconditionné.

Nous appliquerons notre méthode à l'amélioration d'images satellites telles que la taille du système linéaire à résoudre peut aller jusqu'à environ 16 millions.

Ce travail est le fruit de la coopération avec I. Altas lors de son séjour dans le projet Aladin (voir 8.4.2). Il est en cours de rédaction.

6.2.3 Régularisation de systèmes mal conditionnés

Participants : Jocelyne Erhel, Frédéric Guyomarc'h.

Nous avons poursuivi le travail sur des méthodes d'accélération de convergence du gradient conjugué [19, 22, 20].

Nous avons poursuivi notre coopération avec le projet Vista, sur les problèmes de restauration d'images. Ce travail a fait l'objet du stage d'Olivier Dournon en fin d'études de Sup'Elec. Nous avons comparé divers algorithmes pour résoudre les systèmes linéaires issus d'un problème d'estimation robuste. Les résultats ont montré que la méthode du gradient conjugué préconditionné par une factorisation incomplète est nettement plus efficace qu'une méthode de relaxation de type SOR.

Nous avons démarré une étude sur la résolution de problèmes aux moindres carrés mal conditionnés

$$\min_x \|Ax - b\|$$

qui se rencontrent dans les problèmes d'analyse de séquences d'images, dans les problèmes inverses, etc. La méthode de décomposition tronquée en valeurs singulières (TSVD) est utilisée pour des systèmes pleins de petite taille. Pour les systèmes de grande taille, une méthode usuelle est la régularisation de Tychonov

$$\min_x \|Ax - b\| + \beta\|Dx\|.$$

Cette méthode et la TSVD se traduisent par une fonction filtre appliquée aux valeurs singulières de A. Nous avons défini une nouvelle fonction filtre et une nouvelle méthode de résolution polynomiale associée à ce filtre.

Ce travail est en cours de rédaction.

6.2.4 Migration en sismique réflection

Participant : Yann-Hervé De Roeck.

Sur des données de sismique réflexion, l'opérateur de migration en profondeur avant sommation consiste à retrouver la position des réflecteurs acoustiques, pour un champ de vitesse de propagation donné [29].

Suivant la modélisation et le type de discrétisation retenus, ce problème peut se poser sous la forme d'une minimisation aux moindres carrés linéaires. Dans ce cadre, notre étude tend à affiner la précision du résultat et à diminuer le coût de calcul, en tenant compte des progrès réalisés sur les solveurs creux. En effet, la matrice du système, de très grande taille, possède une densité de non-zéros très faible.

L'étude est menée à la fois sur les méthodes directes et sur les méthodes itératives. Les premières permettent une étude détaillée du conditionnement de ce problème, et l'avènement de factorisations QR creuses très efficaces (parallélisées) permet d'envisager l'emploi de telles méthodes, à condition de ne pas omettre les opérations de pivotage, afin de régulariser le problème par troncature. Les secondes obtiennent de façon naturelle des résultats assez régularisés, mais le mauvais conditionnement du problème, en particulier l'existence d'un noyau numérique, implique le choix de méthodes très robustes, améliorées par un préconditionnement déduit de la géométrie.

Ce travail est en cours de rédaction.

6.3 Problèmes aux valeurs propres

Résumé : *Les recherches d'outils pour un calcul fiable de valeurs propres se poursuivent dans deux directions : celle de l'amélioration des procédures de calcul du spectre et celle de la définition de nouveaux outils pour la prise en compte de données imprécises. Dans le cas où la matrice définissant le système linéaire ou le problème aux valeurs propres est une matrice d'intervalles, il est nécessaire de*

définir des méthodes qui construisent un encadrement de tous les résultats possibles [12].

6.3.1 Calcul de valeurs propres internes

Participants : Bernard Philippe, Ahmed Zaoui.

La recherche doctorale d'A. Zaoui, menée dans le cadre de la collaboration Inria/Cerfacs, consiste à définir un enchaînement de deux méthodes qui permette de calculer avec une grande fiabilité les valeurs propres les plus voisines d'une valeur de référence donnée pour un problème généralisé complexe non hermitien.

Dans la première étape, la méthode d'Arnoldi calcule un jeu de valeurs propres et de vecteurs propres associés, puis dans la deuxième étape, une méthode d'itérations simultanées avec déflation corrige le sous-espace invariant trouvé en contrôlant si les valeurs propres sont bien les plus proches de la valeur de référence. Une transformation spectrale classique transforme le problème généralisé en une forme standard. La transformation entraîne un recours répété à la résolution de systèmes linéaires avec des matrices creuses ; on a choisi les méthodes directes de la bibliothèque HSL pour le faire. Le travail se concentre maintenant sur l'interface graphique qui permettra à l'utilisateur de piloter dynamiquement les calculs.

6.3.2 Dénombrement de valeurs propres

Participants : Olivier Bertrand, Bernard Philippe.

La recherche de stabilité de procédés (chimiques, physiques...) se traduit souvent par la localisation de valeurs propres d'une matrice dans le plan complexe : les valeurs propres sont-elles à parties réelles négatives ou de module inférieur à l'unité ? La méthode habituelle consiste à calculer les valeurs propres pour pouvoir répondre. Malheureusement deux écueils portent atteinte à la démarche. D'une part pour les très grandes matrices, il est nécessaire de recourir à des méthodes (Arnoldi, Davidson...) utilisant une transformation spectrale afin de calculer toutes les valeurs propres d'une zone donnée du plan complexe ; il est alors toujours à craindre d'avoir «oublié» une valeur propre importante. D'autre part, les coefficients de la matrice sont en général connus avec une incertitude et il est alors nécessaire de déterminer la zone de variation des valeurs propres.

Nous avons défini une famille de méthodes calculant le nombre de valeurs propres encerclées par un chemin fermé. La courbe peut être donnée *a priori* ou découverte pas à pas comme ligne de niveau de la résolvante. Le dernier cas permet alors d'isoler une composante du pseudo-spectre correspondant à la précision de la matrice. Les méthodes consistent à intégrer numériquement l'intégrale de Cauchy qui s'appuie sur le polynôme caractéristique de la matrice. Certaines sont fondées sur des procédures habituelles d'intégration (méthodes des Trapèzes ou d'Adams) et une autre sur le développement en série du logarithme. Les algorithmes sont parallélisés. La dimension maximale atteinte a été de 16000 pour une matrice issue de l'étude de la stabilité d'un état stationnaire d'un écoulement turbulent. L'ensemble de ces travaux est décrit dans [13, 34, 24, 30].

6.3.3 Calcul des pseudo-spectres d'une matrice

Participants : Dany Mezher, Bernard Philippe.

A la suite des travaux du projet européen STABLE (terminé le 31/12/98) et de ceux d'O. Bertrand (voir paragraphe 6.3.2), nous avons démarré la construction d'une procédure qui dans un même temps détermine une ligne de niveau de la résolvante d'une matrice et le nombre de valeurs propres qu'elle encercle. On détermine ainsi les valeurs propres avec leur zone de variation pour un niveau donné des perturbations de la matrice.

6.3.4 Signature d'une matrice symétrique

Participant : Bernard Philippe.

Pour déterminer la signature d'une matrice d'intervalles, une approche de factorisation LDL^t fondée sur l'algorithme de Bunch et Kaufmann, a été adaptée aux intervalles. L'itération qui permet d'obtenir l'inclusion qui prouve l'encadrement de la diagonale (celle qui donne la signature de la matrice) est fondée sur une méthode de Newton. Une première version a été définie l'année dernière mais il restait à réduire l'explosion des largeurs d'intervalles dans le cas de grandes matrices. Le travail porte maintenant sur la résolution la plus efficace (en termes de largeur d'intervalles) pour résoudre le système linéaire du pas de Newton. Les nouvelles versions du programme sont écrites en MATLAB avec le module de la bibliothèque d'arithmétique d'intervalles développé par S. Rump à l'université de Hambourg.

Cette étude correspond au travail réalisé avec E. Kamgnia pendant son séjour dans le projet Aladin (voir section 8.4.2).

6.4 Stratégies de parallélisation

Résumé : *Le travail se poursuit dans deux directions : la conception d'algorithmes parallèles pour des opérations utilisées de manière intensive et le développement d'un logiciel parallèle à partir d'une version séquentielle.*

6.4.1 Calcul tensoriel parallèle

Participants : Claude Tadonki, Bernard Philippe.

Ce travail s'inscrit dans le cadre du projet NSF décrit au paragraphe 8.4.1. L'un des enjeux de l'étude est de définir des procédures parallélisables dans cette algèbre matricielle basée sur des produits et additions tensorielles. Après une étude théorique démarrée l'année précédente, une procédure générale de multiplication est maintenant définie. La dernière partie a porté sur l'adaptation de l'algorithme à des nombres de processeurs moins particuliers : pour calculer la multiplication $u\left(\otimes_{i=1}^{n} A^{(i)}\right)$ où les matrices $A^{(i)}$ sont de dimension $n_i \times n_i$, $i = 1, \ldots, n$, on peut considérer sans perte d'efficacité tout nombre de processeurs qui soit un diviseur de $N = \prod_{i=1}^{n} n_i$ [33, 23, 32].

6.4.2 Comportement électromagnétique d'antennes

Participants : Hussein Hoteit, Bernard Philippe.

Dans une collaboration avec le laboratoire «Structures rayonnantes» du département de Physique de l'université de Rennes I, nous avons développé une version parallèle du code FDTD qui calcule le comportement électromagnétique d'une antenne grâce à une discrétisation par différences finies. Ce code a permis aux physiciens d'accroître notablement la dimension des expériences de simulation [21].

6.5 Simulation numérique en hydro-géologie et en mécanique

Résumé : *Nous avons poursuivi l'étude du transport et de la dispersion dans un réseau de fractures. Nous avons démarré une étude similaire pour un milieu poreux. Enfin nous avons poursuivi l'étude de l'endommagement de matériaux composites.*

6.5.1 Modélisation de l'écoulement et du transport dans des milieux fracturés

Participants : Jocelyne Erhel, Abdou Njifenjou.

Nous avons poursuivi notre coopération avec le département de Géosciences de l'université de Rennes 1. Une préoccupation essentielle dans le domaine de l'environnement est l'étude des phénomènes de transport et de dispersion dans les nappes phréatiques. La modélisation de telles nappes en milieu fracturé à l'aide d'un réseau de failles doit permettre de simuler numériquement et mieux analyser ces phénomènes.

Nous utilisons une discrétisation en espace par volumes finis. Nous avons étudié la convergence et obtenu une estimation d'erreur pour cette méthode. Ce travail a été réalisé par A. Njifenjou lors de son séjour dans le projet Aladin [38] (voir 8.4.2).

La première étape est le calcul du flux, en régime permanent ou transitoire. En régime permanent, le code développé l'an dernier a permis d'évaluer l'influence de la structure géométrique du réseau de failles sur la perméabilité. Des études statistiques sur des réseaux 2D ont permis de dégager des modèles selon la distribution de longueur et d'ouverture des failles.

Le régime transitoire est modélisé par une équation différentielle ordinaire et linéaire. Nous avons comparé deux méthodes : une discrétisation en espace suivie d'un schéma implicite multipas, disponible dans la bibliothèque numérique LSODE ; un schéma de Laplace, qui ne requiert pas de discrétisation en espace. La précision des deux schémas est du même ordre, le schéma multipas est par contre plus rapide. Ce travail est en cours de rédaction.

La deuxième étape est la simulation de la dispersion. Pour l'instant, notre modèle de dispersion est linéaire. Nous avons comparé une discrétisation par volumes finis à une discrétisation par des marcheurs aléatoires. Ce travail est en cours de rédaction.

Ces résultats sont décrits dans la thèse de Jean-Raynald De Dreuzy, de l'université de Rennes, soutenue le 3 décembre 1999, intitulée "Analyse des propriétés hydrauliques des réseaux de fractures".

6.5.2 Modélisation d'un écoulement en milieu poreux

Participants : Jocelyne Erhel, Hussein Hoteit, Bernard Philippe.

La modélisation numérique est un outil essentiel pour la gestion des eaux souterraines, la prévision de la propagation des polluants, etc. Nous avons démarré une collaboration avec l'Institut de Mécanique des Fluides de l'université de Strasbourg sur ce thème. L'IMF a mis au point un logiciel simulant l'écoulement et la dispersion en milieu poreux. Notre objectif est d'améliorer à la fois la précision et la rapidité de ce logiciel afin d'aborder des simulations complexes et tridimensionnelles. Nous avons obtenu pour l'instant deux résultats importants.

Pour l'écoulement, l'IMF a choisi une discrétisation de l'espace par une méthode d'éléments finis mixtes hybrides, qui garantit un calcul précis du champ de vitesse. Nous avons reformulé la méthode de façon à obtenir une équation différentielle algébrique d'indice 1 (EDA).

Pour calculer une matrice de cette équation, il faut inverser une matrice d'ordre 3 en chaque maille. L'IMF a généré les formules de l'inverse à l'aide d'un système de calcul formel. Avec l'atelier Aquarels [15], nous avons observé une perte de précision conséquente pour certaines mailles. Aussi nous avons choisi un autre algorithme de calcul d'inverse, qui est numériquement stable, sans perte de précision.

Nous avons comparé divers schémas en temps pour résoudre l'EDA. Les schémas explicites sont instables donc nécessitent des pas de temps très petits. Il faut choisir un schéma implicite qui autorise un pas de temps plus grand. Un schéma d'ordre supérieur, 2 ou 3 par exemple, permet d'accroître nettement la précision, avec des performances similaires, par rapport au schéma d'ordre un. Par contre, il requiert un peu plus de stockage mémoire.

Ce travail est en cours de rédaction.

6.5.3 Homogénéisation de matériaux composites hyper-élastiques

Participants : Mathias Brieu, Jocelyne Erhel.

Un des soucis principaux des industriels, lors de la conception puis de l'utilisation de plus en plus fréquente de matériaux composites, est la détermination de leur comportement à moindre coût numérique, et la modélisation de phénomènes d'endommagement. Il s'agit de résoudre une équation différentielle algébrique d'indice 1. Nous avons mis en œuvre une méthode d'homogénéisation qui, dans le cas de matériaux composites hyper-élastiques, induit des problèmes fortement non linéaires [14, 16, 17, 18, 25, 27, 35].

Nous avons comparé des schémas numériques classiques de type Runge-Kutta ou multipas à une méthode itérative de Picard, décrite au paragraphe 3.1.1, de surcroît linéarisée [26]. Dans certains cas de pseudo-potentiels de dissipation, la méthode de Picard converge rapidement et est compétitive. Un autre avantage est le parallélisme potentiel.

Ce travail s'effectue en collaboration avec F. Devries de l'université de Paris VI.

7 Contrats industriels (nationaux, européens et internationaux)

7.1 Simulation et modélisation de lignes supraconductrices

Participants : Bernard Philippe, Ahmed Zaoui.

Résumé : *convention Dret/Ircom, No. 96.34.102.00.470.75.65*
partenaires : Irisa, ENSEEIHT*, Thomson* LCR*, Armines*
durée : trois ans à partir de décembre 1996.

Il s'agit de déterminer la répartition des courants dans les conducteurs de lignes supraconductrices. Le projet Aladin est chargé de fournir des solveurs pour les problèmes aux valeurs propres qui sont obtenus dans les modélisations. Le problème est généralisé, complexe, non hermitien, et les valeurs propres cherchées sont internes au spectre. Toutes ces conditions rendent le problème difficile à résoudre.

Nous avons défini une méthode hybride pour calculer ces valeurs propres, qui consiste à enchaîner les deux méthodes d'Arnoldi et d'itérations simultanées (voir 6.3.1).

8 Actions régionales, nationales et internationales

8.1 Actions régionales

8.1.1 Programme ITR/Société Ipsis

Participants : Olivier Bertrand, Bernard Philippe.

Résumé : *contrat avec le conseil régional de Bretagne (programme* ITR*)*
réf. Inria 198C5720031319061
du 8 janvier 1999 au 31 décembre 1999

La société Ipsis commercialise un programme qui calcule les caractéristiques électriques d'une antenne électromagnétique. Elle s'est associée à l'Irisa pour paralléliser l'application avec le soutien financier de la Région Bretagne. L'algorithme repose sur la résolution de systèmes linéaires dont les matrices sont de grandes dimensions et pleines. Le programme parallèle s'exécutera sur un réseau de postes de travail (de deux à quatre postes) et il sera portable sur des architectures parallèles à grand nombre de processeurs. La parallélisation doit non seulement permettre d'accélérer les calculs mais surtout d'envisager des dimensions de problème plus importantes qu'actuellement. Le travail de l'Irisa fait intervenir deux équipes. L'Atelier (avec Hugues Leroy) est chargé de définir l'environnement logiciel (bibliothèques MPI et ScaLapack) nécessaire à l'exécution du code transformé chez la société Ipsis. Le projet Aladin est chargé de développer une version parallèle du code.

8.2 Actions nationales

8.2.1 Action Fiable

Participants : Olivier Beaumont, Jocelyne Erhel, Bernard Philippe.

Résumé : *action de recherche coopérative Inria Fiable*
coordinateur : projet Aladin
partenaires : projets Arénaire, Polka, Prisme et Safir ; équipe CHPV *(université Pierre et Marie Curie)*
de juin 97 à juin 99.

L'objectif de cette action est de déterminer des méthodes sûres de calcul numérique sur des polynômes et des déterminants de matrices. Des calculs de géométrie issus de synthèses d'images ou de robotique servent de cas d'application. L'interaction calcul formel / calcul numérique est particulièrement étudiée dans les procédures de localisation des racines de polynômes.

Nous avons poursuivi cette année, la détermination numérique de solutions d'équations polynomiales. Il existe des méthodes de calcul formel pour les localiser mais elles ne résistent pas à l'arithmétique flottante. Nous avons défini une procédure qui calcule le PGCD d'un couple de polynômes voisins de deux polynômes donnés *a priori*. La méthode est composée d'un calcul direct suivi d'itérations de correction par une méthode de Newton. Un argument d'erreur inverse valide le résultat final. Il reste maintenant à généraliser le calcul dans d'autres bases polynomiales que la base canonique afin de mieux s'adapter à des zones de racines éloignées de l'origine.

8.2.2 Action Génie 2

Participants : Olivier Beaumont, Jocelyne Erhel.

Résumé : *action de développement Inria Génie 2*
coordinateur : projet Meta2
partenaire d'Aladin : Dassault Aviations
depuis janvier 1999.

Dassault Aviations utilise un logiciel de calcul de trajectoire. Dans la phase 1 de Génie, le logiciel Coq a permis de prouver formellement certaines propriétés de la trajectoire calculée, en supposant que les calculs sont effectués en précision infinie. Il s'agit ici de déterminer l'impact des erreurs d'arrondi dues à l'arithmétique flottante. En particulier, il faut déterminer comment modifier cette preuve pour tenir compte des erreurs d'arrondi.

Dassault Aviations nous a fourni un exemple représentatif de procédure extraite du logiciel de calcul de trajectoire. Notre étude porte sur cette procédure, qui comporte trois tests. Il ressort de notre analyse que des erreurs d'arrondi dans les calculs antérieurs aux tests peuvent induire des tests faux. Nous travaillons actuellement à une nouvelle formulation des tests.

8.3 Actions européennes

8.3.1 Projet Crucid

Participants : Jocelyne Erhel, Bernard Philippe.

Résumé : *Action de dissémination Crucid*
action complémentaire du projet européen Esimeau
projet INCO-DC *1997 No. 973070*
coordinateur : projet M3N

Le projet Aladin est chargé d'assurer des formations en algorithmique numérique auprès des équipes engagées dans le projet Esimeau. Nous avons participé à deux séminaires de formation, l'un à Beyrouth (Liban) et l'autre à Rabat (Maroc). Voir 9.3.

8.3.2 Action intégrée avec la Norvège

Participant : Bernard Philippe.

Résumé : *projet* PAI *Aurora No 99043*
partenaire : université de Bergen

L'objectif est de choisir les modèles mathématiques qui permettent de simuler l'écoulement souterrain d'eau en milieu fracturé. L'équipe Norvégienne qui a une expérience importante en calculs dédiés à la recherche pétrolière devrait nous permettre d'acquérir l'expertise nécessaire.

8.4 Actions internationales

8.4.1 Accord NSF/Inria

Participants : Claude Tadonki, Bernard Philippe.

Résumé : *Accord* NSF*/Inria : An investigation in the numerical solution of high-speed network models*
coordinateur français : projet Apache
partenaires américains : départements d'informatique des universités de Minneapolis (Y. Saad et A. Sameh) et de Raleigh (W. Stewart).

Le thème de la recherche consiste à appliquer à la simulation des réseaux à hauts débits les techniques développées dans une précédente collaboration, techniques qui permettent de calculer l'état stationnaire d'une chaîne de Markov à grand nombre d'états. Pour exprimer la chaîne de Markov, on a recours à une modélisation par réseaux d'automates stochastiques. L'un des enjeux de l'étude est de définir des procédures parallélisables dans cette algèbre matricielle basée sur des produits et additions tensorielles.

Nous avons développé un code parallèle qui réalise la multiplication d'un vecteur par un produit tensoriel de matrices. Voir section 6.4.1.

8.4.2 Accueil de chercheurs étrangers

– A. Njifenjou de l'Ecole Nationale Polytechnique de Yaoundé (Cameroun), a effectué un séjour de 5 mois, de novembre 1998 à fin mars 1999, dans le cadre du projet UNICAM 2000. Il a travaillé sur les méthodes de volumes finis et leur application à des problèmes d'hydrogéologie. Voir 6.5.1.

– I. Altas de l'université Charles Sturt (NSW, Australie), a effectué un séjour de deux mois, de juillet à août 1999. Il a travaillé sur les méthodes multigrilles et leur application à l'analyse d'images. Voir 6.2.2.

– E. Kamgnia de l'université de Yaoundé I (Cameroun), est venu pendant un mois, en octobre-novembre 1999. Il a poursuivi son travail sur la signature de matrices symétriques. Voir 6.3.4.

– R.P.K. Chan de l'université d'Auckland (Nouvelle-Zélande), a été accueilli pendant un mois, en octobre-novembre 1999.

8.4.3 Relations internationales

Le projet coopère régulièrement avec diverses universités dans le monde.

Dans le domaine des équations différentielles, il s'agit principalement de l'université d'Auckland, Nouvelle-Zélande (J. Butcher, R.P.K. Chan), de l'université de Genève, Suisse (E. Hairer), de l'université d'Arizona, Etats-Unis (Z. Jackiewicz).

Dans les domaines des systèmes non linéaires et des problèmes aux valeurs propres, le projet coopère principalement avec l'université du Queensland, Australie (K. Burrage, R.B. Sidje), avec l'université du Minnesota, Etats-Unis (Y. Saad), avec l'université de Raleigh, Etats-Unis (W. J. Stewart) et l'université de Yaoundé, Cameroun (E. Kamgnia et M. Tchuente).

9 Diffusion de résultats

9.1 Animation de la communauté scientifique

9.1.1 Organisation de conférences

- P. Chartier et B. Philippe ont organisé le "troisième séminaire sur l'algorithmique numérique appliquée aux problèmes industriels - Matrices creuses et équations différentielles", noté "creuses'99", qui a eu lieu à Rennes les 11-12 mars 1999 et qui a réuni 70 participants.

- J. Erhel a organisé un symposium de la conférence internationale SCICADE'99 qui a eu lieu à Fraser Island, Australie, du 9 au 13 août 1999.

- B. Philippe a organisé le workshop final de l'action coopérative Fiable, intitulé "Outils pour un calcul numérique fiable", qui a eu lieu à Paris, du 22 au 24 septembre 1999.

- B. Philippe a co-organisé un symposium de la conférence internationale Europar'99, qui a eu lieu à Toulouse, du 31 août au 3 septembre 1999.

- B. Philippe est vice-président du comité de programme du colloque Cari'2000, qui aura lieu à Madagascar, du 16 au 19 octobre 2000.

9.1.2 Editions et comités de rédaction

- B. Philippe et M. Tchuente sont rédacteurs du numéro spécial de TSI consacré à Cari'98 [11].

- P. Chartier et B. Philippe sont rédacteurs du numéro spécial de Numerical Algorithms consacré aux journées "creuses'99" [9].

- B. Philippe est rédacteur principal du numéro spécial de Calculateurs Parallèles, réseaux et systèmes répartis, consacré aux journées Orap sur le calcul parallèle dans l'industrie [10].

- B. Philippe est membre du comité éditorial de la revue International Journal on High Speed Computing.

9.1.3 Divers

- B. Philippe est le représentant de l'Inria au bureau Orap, depuis octobre 1997.

- B. Philippe est le délégué de l'Inria auprès de l'Idris, depuis septembre 1999.

- B. Philippe a été membre du jury de l'agrégation de mathématiques de 1999.

- B. Philippe est délégué de l'Inria aux relations avec l'Afrique Sub-Saharienne et secrétaire du comité permanent Cari.

- B. Philippe est membre du conseil scientifique du Cimpa, à partir de novembre 1999.

9.2 Enseignement universitaire

- Y-H. De Roeck a enseigné le cours d'Algèbre Linéaire de l'ENSIETA, à Brest (1^{re} année).

- J. Erhel a donné un séminaire destiné aux étudiants de première année de l'ENS-Cachan sur le thème du calcul scientifique.

- J. Erhel a donné un séminaire destiné aux étudiants de dernière année de l'Insa-Rennes sur le thème de la qualité numérique.

- J. Erhel et B. Philippe sont responsables de la création d'un module pour le support de cours d'un DEA multisites africain (projet DIA financé par l'AUF et coordonné par P. Quinton).

- B. Philippe a enseigné, avec F. Bodin du projet Caps, l'option Calcul Parallèle (Capa) du DEA d'informatique à l'Ifsic.

- B. Philippe a assuré l'enseignement d'un module (Résolution des grands systèmes) du DEA de mathématiques appliquées de Beyrouth, co-organisé par les universités Libanaises, l'EPFL, l'Irisa et l'université de Reims.

- B. Philippe assure l'enseignement d'un module du DEA de mathématiques appliquées de l'université de Tunis, qui démarre cette année.

9.3 Participation à des colloques, séminaires, invitations, prix

- A. Aubry, O. Bertrand et F. Guyomarc'h ont présenté leurs travaux aux journées "creuses'99" (voir 9.1.1).

- O. Beaumont, J. Erhel et B. Philippe ont présenté leurs travaux au workshop de l'action coopérative Fiable (voir 8.2.1 et 9.1.1).

- O. Beaumont a été invité au GdR "Automatique" pour présenter ses travaux sur l'arithmétique d'intervalles, à Paris, en mars 1999.

- J. Erhel a participé en tant que conférencier au workshop du projet européen Crucid, à Rabat (Maroc), en juillet 1999.

- B. Philippe a participé en tant que conférencier au workshop du projet européen Crucid, à Beyrouth (Liban), en décembre 1998.

- B. Philippe a été invité à faire une présentation à l'université d'Utrecht (Pays-Bas), en février 1999.

- Le prix IEEE de la meilleure communication a été décerné à Claude Tadonki pour son exposé aux "Rencontres francophones du Parallélisme, des Architectures et des Systèmes (RenPar'11)".

10 Bibliographie

Ouvrages et articles de référence de l'équipe

[1] R. Chan, P. Chartier, « A Composition Law for Runge-Kutta Methods Applied to Index-2 Differential-Algebraic Equations », *BIT 36*, 2, 1996, p. 229–246.

[2] P. Chartier, B. Philippe, « A Parallel Shooting Technique for Solving Dissipative ODE's », *Computing 51*, 3-4, 1993, p. 209–236.

[3] P. Chartier, « L-stable parallel one-block methods for ordinary differential equations », *SIAM Journal of Numerical Analysis 31*, 2, avril 1994.

[4] M. Crouzeix, B. Philippe, M. Sadkane, « The Davidson Method », *SIAM, Journal on Scientific and Statistical Computing 15:1*, 1994, p. 62–76.

[5] J. Erhel, K. Burrage, B. Pohl, « Restarted GMRES preconditioned by deflation », *Journal of Computational and Applied Mathematics 69*, 1996, p. 303–318.

[6] M. Hahad, J. Erhel, T. Priol., « A new approach to parallel sparse Cholesky on DMPCs. », *in: International Conference on Parallel Processing, USA,*, août 1994.

[7] B. Philippe, M. Sadkane, « Computation of the fundamental singular subspace of a large matrix », *Linear Algebra and Applications 257*, 1997.

[8] M. Sadkane, « Block-Arnoldi and Davidson methods for unsymmetric large eigenvalue problems », *Numer. Math. 64*, 1993, p. 195–211.

Livres et monographies

[9] P. Chartier, B. Philippe (éditeurs), *Sparse matrices and differential equations in industry*, Numerical Algorithms, à paraître.

[10] B. Philippe *et al.* (éditeurs), *Calcul parallèle dans l'industrie : pratiques et outils*, Calculateurs parallèles, réseaux et systèmes répartis (Hermès), à paraître.

[11] B. Philippe, M. Tchuente (éditeurs), *CARI'98*, Technique et Science Informatiques, HERMES, à paraître.

Thèses et habilitations à diriger des recherches

[12] O. Beaumont, *Algorithmique pour les intervalles : Comment obtenir un résultat sûr quand les données sont incertaines*, thèse de doctorat, université de Rennes 1, janvier 1999.

[13] O. Bertrand, *Procédures de dénombrement de valeurs propres*, thèse de doctorat, université de Rennes 1, décembre 1999.

[14] M. Brieu, *Homogénéisation et endommagement de composites élastomères*, thèse de doctorat, ENS-Cachan, janvier 1999.

Articles et chapitres de livre

[15] O. Beaumont, J. Erhel, B. Philippe, *Problem-solving environments for computational science*, IEEE Press, à paraître, ch. Aquarels : a problem-solving environment for validating scientific software.

[16] M. Brieu, F. Devries, « Approche micro/macro de l'endommagement de milieux élastomères », *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences Série II*, 326, 1998.

[17] M. Brieu, F. Devries, « Micro-mechanical approach and algorithm for the study of damage's appearance in elastomer composite », *Composites Structures*, à paraître.

[18] M. Brieu, F. Devries, « Modelling damage in nonlinear elastic materials : debonding in multilayered composites », *International Journal of Engineering Science*, à paraître.

[19] M.-O. Bristeau, J. Erhel, « Augmented Conjugate Gradient. Application in an iterative process for the solution of scattering problems », *Numerical Algorithms*, 18, 1998, p. 71–90.

[20] J. Erhel, F. Guyomarc'h, « An Augmented Conjugate Gradient Method for solving consecutive symmetric positive definite systems », *SIAM Journal on Matrix Analysis*, à paraître.

[21] H. Hoteit, R. Sauleau, B. Philippe, P. Coquet, J. Daniel, « Vector and parallel implementations for the FDTD analysis of millimeter wave planar antennas », *International Journal of High Speed Computing*, à paraître.

[22] Y. Saad, M. Yeung, J. Erhel, F. Guyomarc'h, « A deflated version of the Conjugate Gradient Algorithm », *SIAM Journal on Scientific Computing*, à paraître.

[23] C. Tadonki, B. Philippe, « Parallel Multiplication of a Vector by a Kronecker Tensor Product of matrices », *Parallel and Distributed Computing Practices*, à paraître.

Communications à des congrès, colloques, etc.

[24] O. Bertrand, « Counting the eigenvalues which lie in a region of the complex plane », *in : ICIAM'99*, Edinbourg, Ecosse, juillet 1999.

[25] M. Brieu, F. Devries, *in :* 11$^{\text{èmes}}$ *journées Nationales sur les Composites*, p. 1263–1272, 1999.

[26] M. Brieu, J. Erhel, « Simulation of damage evolution in nonlinear elastic materials », *in : SCICADE*, Fraser Island, Australie, août 1999.

[27] M. Brieu, « Endommagement de milieux élastomères par techniques de calcul parallèle. », *in :* 32$^{\text{ème}}$ *Congrés National d'Analyse Numérique*, 1999.

[28] P. Chartier, E. Lapôtre, « Explicit pseudo-symmetric and conjugate pseudo-symmetric RK methods », *in : SCICADE*, Fraser Island, Australie, août 1999.

[29] G. C. H. N. J-M. Cognet, Y-H. De Roeck, « Model based depth imaging by Migration Based Travel Time », *in : Society of Exploration Geophysicists*, Houston, USA, novembre 1999.

[30] B. Philippe, « Computing the number of eigenvalues in a domain », Novosibirsk, Russie, août 1999.

[31] S. Rajopadhye, C. Tadonki, T. Risset, « The algebraic path problem revisited », *in : EUROPAR'99*, *Lecture notes in computer sciences*, 1685, Springer-Verlag, p. 698–707, août 1999.

[32] C. Tadonki, « Equations récurrentes et algorithmes parallèles pour la multiplication d'un vecteur par un produit tensoriel de matrices », *in : Rencontres francophones du Parallélisme, des Architectures et des Systèmes (RENPAR'11)*, p. 199–204, Rennes, juin 1999.

[33] C. Tadonki, « Fast parallel multiplication of vector by a Kronecker product of matrices », *in : PARDI'99*, p. 47–59, Oujda, Maroc, octobre 1999.

Rapports de recherche et publications internes

[34] O. Bertrand, B. Philippe, « Counting the Eigenvalues surrounded by a closed curve », *Publication interne no 1272*, IRISA, octobre 1999.

[35] M. Brieu, J. Erhel, « Une méthode non incrémentale d'homogénéisation de structures élastomères. Démonstration de la convergence. », *rapport de recherche no 3599*, INRIA, janvier 1999.

[36] P. Chartier, E. Lapôtre, « Reversible B-series », *Publication interne no 1221*, IRISA, décembre 1998.

[37] D. Mezher, B. Philippe, « Résolution de systèmes linéaires issus de la discrétisation d'une équation de Navier-Stokes », *rapport de recherche no 3777*, INRIA, octobre 1999.

[38] A. Njifenjou, « Une présentation des volumes finis pour les EDP elliptiques linéaires du second ordre. Convergence et estimation d'erreur. », *rapport de fin de stage*, IRISA, avril 1999.