INSTITUT NATIONAL DE RECHERCHE EN INFORMATIQUE ET EN AUTOMATIQUE

# *Projet* ALADIN

*Algorithmes adaptés au calcul numérique intensif*

*Rennes*

THÈME 4B

Rapport d'Activité

2000

# 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, à mi-temps avec l'action Mocoa du 1er décembre 1999 au 30 avril 2000]

Bernard Philippe [DR]

### Université de Rennes I

Claude Simon [maître de conférences, IUT Lannion, jusqu'au 31 décembre 2000]

### Chercheur invité

Yann-Hervé De Roeck [ingénieur, Ifremer, Brest, mis à disposition du 1er avril 1999 au 30 juin 2000]

Edouard Canot [CR CNRS, LEGI, Grenoble, mission longue durée depuis le 1er octobre 2000]

### Ingénieur expert

Olivier Bertrand [du 1er novembre 1999 au 31 janvier 2000]

### Ingénieur associé

Emeric Martin [du 1er septembre 2000 au 31 août 2001]

### Chercheurs doctorants

Frédéric Guyomarc'h [moniteur normalien, jusqu'au 31 août 2000, puis ATER Ifsic depuis le 1er septembre 2000]

Hussein Hoteit [bourse Egide, co-encadrement avec l'IMF, depuis le 1er octobre 1999]

Eric Lapôtre [bourse MENESR, du 1er octobre 1998 au 30 septembre 2000]

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, jusqu'au 15 octobre 2000]

### Collaborateurs extérieurs

Michel Crouzeix [professeur, université de Rennes 1]

Haiscam Abdallah [maître de conférences, université de Rennes 2, depuis le 1er janvier 2000]

## 2 Présentation et objectifs généraux

**Mots clés** : calcul scientifique, algèbre linéaire, équations différentielles, parallélisme, précision, environnement, santé.

Le thème unificateur du projet est la conception, l'étude et la mise en œuvre d'algorithmes pour le calcul scientifique, dans les différents contextes d'un traitement numérique : la simulation proprement dite à partir des équations de la physique, le traitement d'images, la réalité virtuelle.

Il résulte de ces thèmes transversaux que les domaines d'application sont potentiellement très nombreux. Le projet a choisi de s'investir plus particulièrement dans les domaines de l'environnement (hydro-géologie, prospection sous-marine) et de la santé (chimie, dynamique moléculaire).

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 recherche en équations différentielles porte sur des schémas numériques permettant de résoudre efficacement et avec une bonne précision des équations différentielles algébriques. Un sujet d'étude concerne la résolution numérique des systèmes hamiltoniens qui modélisent des problèmes issus par exemple de la dynamique moléculaire.

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, voire de ne pas stocker de matrice, en utilisant seulement l'application de l'opérateur linéaire à des vecteurs.

Pour les problèmes aux valeurs propres, issus par exemple de l'équation de Schrödinger, les espaces de Krylov sont aussi 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.

Les algorithmes développés pour les trois axes décrits ci-dessus sont validés sur des architectures parallèles et utilisés dans des applications en sismique sous-marine, hydro-géologie, mécanique des matériaux composites, électromagnétisme, etc.

Les relations internationales universitaires du projet sont nombreuses et variées. Citons les universités de Genève, d'Auckland, du Queensland, de Minneapolis, de Patras, de Yaoundé.

Le projet collabore avec l'Institut de Mécanique des Fluides de Strasbourg, l'action MOCOA de l'Inria Rocquencourt.

Le projet collabore étroitement avec l'Ifremer de Brest.

# 3 Fondements scientifiques

## 3.1 Équations différentielles ordinaires ou algébriques

**Mots clés** : système différentiel, système algébro-différentiel, indice, projection, système hamiltonien, système réversible, méthode générale linéaire, méthode symplectique, symétrique.

**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*

$$\left\{\begin{array}{rcl} y'(x) & = & f(y(x)), \\ y(x_0) & = & y_0, \end{array}\right. \quad ou \quad \left\{\begin{array}{rcll} y'(x) & = & f(y(x),z(x)), & y(x_0)=y_0, \\ 0 & = & g(y(x)), & z(x_0)=z_0. \end{array}\right. \tag{1}$$

*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 différentielles algébriques posent quant à elles des problèmes spécifiques : en particulier, l'ordre de convergence habituel se trouve notablement diminué du fait de la présence des contraintes. Pour certaines méthodes, la solution numérique fournie satisfait les contraintes. Pour d'autres au contraire, elle s'en écarte progressivement : sous certaines hypothèses, on peut néanmoins prouver l'existence d'un invariant numérique, "proche" de la variété des contraintes. Ce résultat permet en outre d'analyser les techniques de post-projection et de projection symétrique (voir Section 6.1.4). Enfin, nous nous intéressons aux systèmes hamiltoniens avec ou sans contraintes et aux systèmes réversibles en temps. Ces systèmes se présentent soit sous la forme d'équations différentielles ordinaires, soit sous la forme d'équations algébro-différentielles, mais méritent souvent un traitement spécifique, 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 $\mathbf{R}^m$, 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 :

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

[HW96] E. Hairer, G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations, Stiff Problems and Differential Algebraic Problems*, édition Second Edition, 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.

la matrice de coefficients $A$ possède une seule valeur propre $\lambda$ 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 concevant 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 :

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

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

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

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

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

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

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. En outre, une technique introduite par Gear, Gupta et Leimkulher [GGL85] permet d'écrire les systèmes d'indice 3 comme des systèmes d'indice 2 -résultat qu'on obtient également par simple différentiation- en incluant la contrainte d'indice 3 dans le nouveau système au moyen d'un multiplicateur de Lagrange "artificiel". La contrainte d'origine peut ainsi être prise en compte lors de la résolution numérique du système. 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.

Une manière de remédier à la réduction d'ordre consiste à projeter la solution numérique sur la variété des contraintes. Introduite par Ascher et Petzold [AP91], cette technique d'un coût modique, restaure l'ordre de convergence *habituel* de la méthode considérée. Si $(y_n, z_n)$ désigne la solution numérique au pas $n$, la solution "projetée" s'obtient en résolvant le système non-linéaire :

$$\begin{aligned} y_n^* &= y_n + f_z(y_n, z_n)\lambda_n, \\ 0 &= g(y_n^*). \end{aligned}$$

La résolution numérique se poursuit alors à partir de $y_n^*$.

### 3.1.3 Systèmes hamiltoniens

Ce sont des systèmes de la forme[SSC94]

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

[GGL85] C. Gear, G. Gupta, B. Leimkuhler, « Automatic integration of Euler-Lagrange equations with constraints », *Journal of Computing and Applied Mathematics 12, 13*, 1985, p. 77–90.

[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 Edition, Springer-Verlag, 1996, Volume 2.

[AP91] U. Ascher, L. Petzold, « Projected implicit Runge-Kutta methods for differential-algebraic equations », *SIAM Journal of Numerical Analysis 4*, 1991, p. 1097–1120.

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

où $H(p,q)$ est une fonction scalaire dite hamiltonienne et $p$, $q$ sont des vecteurs de $\mathbf{R}^n$. 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* $\Phi_x(p,q)$ qui à un point $(p_0,q_0)$ associe le point $(p(x_0+x), q(x_0+x))$ solution du système hamiltonien décrit ci-dessus. $\Phi$ 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 $\omega^2$. Si $\varphi_h$ désigne la fonction flot numérique associée à une méthode symplectique et $h$ le pas d'intégration, alors, quelle que soit la valeur de $h$, $\varphi$ 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 $\Delta$ entre la solution approchée et la solution exacte d'un problème hamiltonien, par exemple périodique pour simplifier, varie linéairement par rapport à $X$ :

$$\Delta \approx Ch^pX.$$

Notons que pour une méthode non symplectique, on a

$$\Delta \approx Ch^pX^2.$$

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

Lorsque la fonction hamiltonienne est telle que $H(-p,q) = H(p,q)$, alors le système est en outre réversible. Plus généralement, un système de la forme (1) est dit *réversible* s'il existe un isomorphisme involutif $\rho$ tel que

$$\forall\, y,\ f(\rho(y)) = -\rho(f(y)).$$

La fonction $\Phi_x(y_0)$, qui au point $y_0$ associe la solution $y(x)$ de (1) au point $x_0+x$, est alors *invariante* par $\rho$ :

$$\forall\, x, \forall\, y,\ \Phi_{-x}(\rho(y)) = \rho(\Phi_x(y)).$$

Les méthodes dites *symétriques* satisfont une propriété similaire. La fonction flot numérique $\varphi_h$ associée à une méthode symétrique vérifie elle aussi

$$\forall\, h, \forall\, y,, \varphi_h(\rho(y)) = \rho(\varphi(y)).$$

L'intérêt fondamental des méthodes symétriques réside dans le fait que pour les systèmes réversibles, l'erreur $\Delta$ est là aussi de la forme

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

pour une méthode d'ordre $p$.

### 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 régulières, on dit que la matrice est creuse et structurée. Sinon elle est creuse et générale.

**Espace de Krylov :** L'espace engendré par $\{v, Av, \dots, A^{m-1}v\}$ 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'opérateur 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 $A \in \mathbf{R}^{N\times N}$ et un vecteur $b \in \mathbf{R}^N$ ; on cherche $x \in \mathbf{R}^N$ tel que $Ax = b$. L'entier $N$ est l'ordre ou la taille de la matrice. Un problème aux moindres carrés est défini par une matrice $A \in \mathbf{R}^{N\times M}$ et un vecteur $b \in \mathbf{R}^N$ ; on cherche $x \in \mathbf{R}^M$ qui minimise $\|Ax - b\|_2$.*

*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 $\mathbf{R}^N$ dans $\mathbf{R}^N$ ; on cherche à résoudre l'équation*

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

*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 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 $A$ dans les méthodes "matrix-free", où le produit matrice-vecteur est recalculé ou approché à chaque occurence. De plus, cette opération se parallélise 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

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

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

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

et la condition de Petrov-Galerkin

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

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 $A^T Ax = A^T b$ 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 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

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

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

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

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

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

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 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

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

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, par exemple avec une technique de "backtracking" ou de continuation.

### 3.3 Problèmes aux valeurs propres

**Mots clés** : valeur propre, valeur singulière, Lanczos, Arnoldi, 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.

**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 $A \in \mathbf{R}^{N\times N}$ donnée, à trouver tous les couples*

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

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

$$Ax = \lambda x.$$

[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.

*Le problème généralisé est défini par deux matrices*

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

*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 $(\lambda, z)$ un couple d'éléments propres de la matrice $H_m = {V_m}^T A V_m$, 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

[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.

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 $H_m = {V_m}^T A V_m$ 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 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

[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.

par Godunov [GKK91] et Trefethen [Tre91]. Pour une matrice $A$ et un paramètre de précision $\epsilon$ 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 $\epsilon$. La construction de ces objets se fait habituellement par le calcul de $\sigma_{\min}(A - \lambda I)$ pour $\lambda$ 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.

### 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*

[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.

*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 $\mathbf{R}^N$ 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.

Nous avons développé nos méthodes d'encadrement pour la résolution de systèmes linéaires et pour la résolution de problèmes aux valeurs propres. Voir [45, 48, 46, 47].

# 4 Domaines d'applications

## 4.1 Panorama

**Mots clés** : calcul scientifique, simulation, environnement, pollution, télécommunications, transport.

**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, que nous développons ci-dessous. Dans ce bref panorama, nous citons les domaines des télécommunications et du transport où le projet a également obtenu des résultats ces dernières années.*

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

### 4.1.1 Télécommunications

Les réseaux d'automates stochastiques (RAS) constituent un outil performant pour modéliser des réseaux à haut débit comme par exemple les réseaux ATM. En modélisant le comportement de chaque automate par un processus markovien, le générateur global s'exprime à l'aide d'une algèbre tensorielle. Nous développons des algorithmes parallèles performants pour les opérations en jeu. Ce travail a démarré dans le cadre d'un accord NSF et se poursuit en collaboration avec le projet Armor.

Pour optimiser la configuration d'un système d'antennes, il faut simuler leur comportement électromagnétique. Afin d'effectuer des expériences de taille réaliste, nous développons des versions parallèles des logiciels de simulation. Nous collaborons avec le laboratoire «Structures rayonnantes» du département de Physique de l'université de Rennes 1 et avec la société Ipsis.

### 4.1.2 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. Nous collaborons avec l'université de Lille sur ce sujet (F. Devries et M. Brieu).

## 4.2 Environnement

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 performant. Nous étudions la méthode de migration en profondeur avant sommation pour localiser la profondeur des échos.

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 correspondant pour ces logiciels est Philippe Chartier. 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 (voir section 3.1.2). 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 (voir section 3.1.3).

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. 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. Des exemples sont décrits dans [15].

## 6 Résultats nouveaux

### 6.1 Equations différentielles ordinaires ou algébriques

**Résumé :** *L'application des méthodes* DIMSIM *aux systèmes algébro-différentiels est en cours d'analyse. Par ailleurs, une nouvelle technique de projection, dite de “post-projection” a été introduite et analysée. Le cas de la projection symétrique est lui en cours d'étude. Enfin, la collaboration avec l'action Mocoa sur la résolution numériques des équations d'Hamilton-Jacobi s'est poursuivie.*

#### 6.1.1 Méthodes générales linéaires

**Participant** : Philippe Chartier.

La collaboration avec J.C. Butcher de l'université d'Auckland a été poursuivie. L'effort s'est porté cette année sur les méthodes dites de types 2 et 4, c'est-à-dire destinées aux systèmes différentiels ordinaires raides et aux équations algébro-différentielles. En particulier, il s'est agi d'analyser l'erreur locale (i.e. l'erreur commise à chaque pas d'intégration) correspondant à de tels systèmes et de construire des estimateurs appropriés. Ce travail est en cours de rédaction.

### 6.1.2 Méthodes pseudo-symétriques

**Participants** : 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 ont donné lieu à une collaboration avec Jim Verner, de l'université d'Ontario. Une méthode d'ordre 4 et d'ordre de pseudo-symétrie 6 a été construite et devrait donner lieu à publication. Cependant, la résolution des conditions est d'une telle complexité, que la poursuite de ce travail semble compromise.

### 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'état 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.

### 6.1.4 Méthodes post-projetées pour les équations algébro-différentielles d'indice 2

**Participant** : Philippe Chartier.

Si l'étape de projection, supposée être appliquée à chaque pas, est repoussée à la fin de l'intervalle d'intégration, ou n'est effectuée que lorsque qu'une approximation est exigée, on parle alors de méthode "post-projetée". En collaboration avec R.P.K. Chan de l'université d'Auckland et A. Murua de l'université du Pays Basque, nous avons pu montrer que l'ordre de convergence de ces méthodes est en général identique à celui observé pour les méthodes projetées correspondantes. Ce résultat, a priori surprenant, n'est pas d'un intérêt uniquement théorique. Lorsque que le système est en outre réversible, il est naturel de recourir à une méthode symétrique, afin de préserver les invariants géométriques du problème. Cette exigence est incompatible avec la technique de projection classique, qui détruit la symétrie ou la symplecticité de la méthode sous-jacente. Il n'en est pas de même pour la post-projection. Une technique alternative, dite de "projection symétrique", définie par E. Hairer dans le cas des équations différentielles avec invariants, a été également étudiée [30, 29].

### 6.1.5 Invariants numériques d'une méthode de Runge-Kutta

**Participant** : Philippe Chartier.

En tentant d'interpréter géométriquement le résultat précédent, nous avons obtenu l'existence d'un "invariant" numérique proche de la variété des contraintes. De même que la solution exacte vit sur la variété exacte des contraintes, l'approximation fournie par une méthode de Runge-Kutta vit sur une variété différentielle dont on peut démontrer l'existence et l'unicité pour les méthodes strictement stables et dont on doit se contenter de donner un développement formel dans le cas des méthodes symétriques. Lorsque le système est réversible en temps, on peut alors effectuer une analyse rétrograde et valider les observations concernant le comportement linéaire de l'erreur globale pour les systèmes réversibles. Ces travaux, effectués en collaboration avec A. Murua et R. Chan, sont l'objet de plusieurs articles en cours de rédaction.

## 6.2 Problèmes linéaires et non linéaires

**Résumé :** *Nous avons poursuivi le travail sur la résolution du problème biharmonique, ainsi que l'étude sur la régularisation de problèmes aux moindres carrés mal conditionnés. Nous avons appliqué nos méthodes à l'imagerie sismique, afin d'explorer les couches sédimentaires des fonds sous-marins. Nous avons comparé diverses modélisations et discrétisations d'un écoulement en milieu poreux, afin de simuler numériquement les phénomènes de diffusion et de dispersion dans des nappes phréatiques.*

### 6.2.1 Equations biharmoniques en 3D

**Participant** : Jocelyne Erhel.

De nombreuses applications, telles que la restauration d'images ou le problème d'écoulement dans une cavité, conduisent à des équations différentielles biharmoniques tridimensionnelles. A l'aide d'un programme de calcul formel, nous avons développé des schémas de différences finies d'ordre élevé qui évitent les points fictifs aux frontières. Nous avons résolu le système linéaire par une méthode multigrille et par une méthode de Krylov préconditionnée. La méthode multigrille est ici plus efficace parce que la convergence est indépendante de la taille de la grille. Nous avons résolu des problèmes biharmoniques avec des grilles de taille $64^3$ en 4000 secondes sur une station de travail.

Ce travail, effectué en collaboration avec I. Altas (Australie) et M. Gupta (Etats-Unis), est rédigé et soumis.

Il faut maintenant définir un critère d'arrêt avec une estimation d'erreur, développer une version parallèle et appliquer la méthode à l'amélioration d'images satellites.

### 6.2.2 Régularisation de systèmes mal conditionnés

**Participants** : Jocelyne Erhel, Frédéric Guyomarc'h.

Nous avons poursuivi l'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, dans la fouille de données, etc. Les méthodes usuelles de décomposition tronquée en valeurs singulières (TSVD) et de régularisation de Tychonov

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

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. Cette méthode est basée sur la définition d'un produit scalaire et la construction d'une base orthonormée de polynômes. Nous avons obtenu des résultats satisfaisants sur des problèmes de restauration d'images [13]. Ce travail se poursuit en collaboration avec Y. Saad de l'université de Minneapolis.

### 6.2.3 Méthodes d'algèbre linéaire creuse pour la géophysique

**Participant** : Yann-Hervé De Roeck.

Il s'agit d'étudier l'algorithme particulier de la migration en profondeur avant sommation. Dans la séquence de traitements des données de sismique réflexion utilisées pour imager les couches sédimentaires, cet algorithme intervient pour localiser les échos à leur bonne profondeur. Il est appliqué dans le cas étudié à des données de sismique marine à très haute résolution qui possèdent la particularité d'être affectées par un fort niveau de bruit [31, 34, 35].

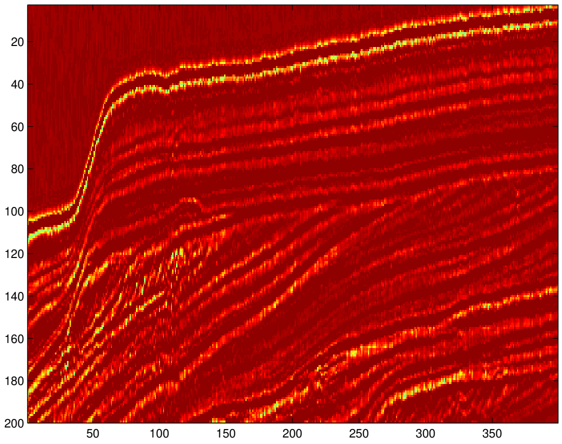
Avec le formalisme de l'inversion par formes d'ondes, sur la base d'un modèle de propagation linéarisé (approximation de Born et lancer de rayons), le problème se pose sous la forme de moindres carrés linéaires. Les méthodes de résolution proposées par la littérature, qu'elles soient directes ou itératives, ont été passées en revue et testées sur un jeu de données synthétiques bruitées. La taille du système obtenu, 10 000 $\times$ 100 000, reste certes modeste au regard des applications sur profils sismiques réels, mais s'avère déjà conséquente vis-à-vis des algorithmes proposés de façon standard pour résoudre un problème de moindres carrés.

Il ressort de cette étude qu'il est impératif de disposer de méthodes autorisant un format de stockage creux des matrices, voire aux calculs "*matrix-free*" : l'effet de remplissage dû à l'opérateur de convolution avec l'ondelette émettrice renforce ce besoin (cependant, on peut formuler le problème en le mettant en facteur de la simulation). Par ailleurs, le mauvais conditionnement du problème implique que sur des données bruitées, il s'avère nécessaire de mettre en oeuvre une stratégie de régularisation.

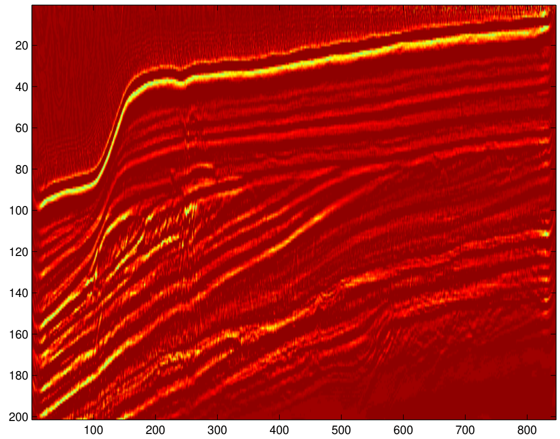
Parmi les méthodes directes, TPQR-QGS (Truncated Pivoted QR factorization, Quasi Gram-Schmidt version, proposé par Stewart) a été retenue : la régularisation est obtenue par troncature de la factorisation QR, c'est-à-dire en stoppant assez tôt par un critère heuristique sur la taille relative des pivots. L'adéquation de cet algorithme à notre problème provient de la possibilité de ne pas stocker la matrice orthogonale $Q$, en étant ramené à un problème Q-less par la formulation implicite des équations semi-normales :

$$A = QR \quad \Rightarrow \quad A^{\dagger} = R^{-1} R^{-T} A^{T}$$

Parmi les méthodes itératives, CGLS (Conjugate Gradient Least Squares) offre les meilleurs résultats de convergence. En ce cas, la régularisation est opérée par l'arrêt prématuré des itérations : en effet, le résidu peut poursuivre sa décroissance alors que l'erreur sur la solution recherchée se remet à croître. Avec des données synthétiques, ce phénomène est facilement observable, et la difficulté consiste à trouver un critère d'estimation de l'erreur à partir de récurrences sur le résidu. Hanke fournit une heuristique, que nous avons légèrement modifiée pour l'adapter à notre cas [53, 40, 39].




Raw data profile (one receiver gather)




Pre–stack depth migration, solution by an iterative solver of a large sparse linear least squares problem

### 6.2.4 Modélisation d'un écoulement en milieu poreux

**Participants** : Edouard Canot, 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 poursuivi notre collaboration avec l'Institut de Mécanique des Fluides (IMF) 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.

La simulation de l'écoulement est fondée sur une discrétisation de l'espace par une méthode d'éléments finis mixtes, qui garantit un calcul précis du champ de vitesse. Dans un premier temps, nous avons montré que le principe du maximum n'étant pas conservé, il était possible de calculer sous certaines hypothèses des pressions négatives, et cela quel que soit l'intégrateur en temps choisi. Ce travail est rédigé et soumis.

L'étude porte maintenant sur la comparaison de la qualité numérique entre deux versions mathématiquement équivalentes de la méthode des éléments finis mixtes : la version classique et la version hybride. Nous avons montré que, dans le cas d'une triangulation irrégulière du domaine, la méthode hybride peut inclure des calculs très mal conditionnés alors que la méthode classique ne souffre pas de cet inconvénient. Nous avons aussi montré que le conditionnement des deux méthodes dépend linéairement du rapport entre les valeurs extrémales de la perméabilité du milieu. Nous visons maintenant, pour un terrain donné, à déterminer un maillage et une approximation qui tiennent compte des hétérogénéités du milieu. Ce travail est en cours de rédaction.

Nous avons également modifié notre code de façon à utiliser un logiciel d'intégration numérique (DASSL) pour les équations différentielles algébriques d'indice 1. Ce travail a fait l'objet du stage de I. Moukouop Nguena.

Dans la partie suivante de notre travail, nous allons étudier le problème de transport de polluants en milieux poreux. Ce problème est modélisé par une équation de convection-dispersion. Quand le terme convectif est prédominant, les méthodes classiques introduisent des oscillations ou de la diffusion numérique. Une des approches utilisées pour la résolution de ce problème est de décomposer les opérateurs différentiels et d'utiliser des discrétisations distinctes. Ici le terme convectif et le terme dispersif sont discrétisés par les méthodes des éléments finis discontinus et mixtes hybrides, respectivement.

## 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.*

### 6.3.1 Calcul de valeurs propres internes

**Participants :** Bernard Philippe, Ahmed Zaoui.

La recherche doctorale d'A. Zaoui [14], menée dans le cadre de la collaboration Inria/Cerfacs, a consistér 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.

### 6.3.2 Calcul des pseudo-spectres d'une matrice

**Participants :** Dany Mezher, Bernard Philippe.

Nous avons poursuivi le travail pour déterminer une ligne de niveau de la norme de la résolvante d'une matrice. Nous avons conçu un algorithme fiable qui suit les lignes de niveaux malgré la rencontre éventuelle de points anguleux. L'algorithme est fondé sur un procédé de bissection appliqué en des points d'un maillage du plan complexe par des triangles équilatéraux [51, 37]. Etant donné le coût élevé des calculs nécessaires à la construction d'une ligne de niveau, la parallélisation a été menée. L'architecture ciblée est un ensemble de PCs connectés par un réseau classique. Les performances obtenues sont excellentes grâce à un recouvrement efficace des communications par les calculs [36].

### 6.3.3 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 (itération de Krawczyk). Le programme a été écrit en Matlab avec le module de la bibliothèque d'arithmétique d'intervalles développé par S. Rump à l'université de Hambourg.

Ce travail a été réalisé en collaboration avec E. Kamgnia de l'université de Yaoundé [32, 33].

## 6.4 Analyse de modèles de télécommunications

**Résumé :** *Nous avons comparé trois approches pour calculer la sensibilité aux paramètres d'un modèle markovien. Nous avons développé une méthodologie pour concevoir des algorithmes parallèles appliqués à l'algèbre tensorielle issue des modèles de réseaux d'automates stochastiques. Nous avons développé un logiciel parallèle qui modélise une antenne de structure périodique.*

### 6.4.1 Sensibilité des modèles markoviens

**Participant** : Haiscam Abdallah.

Ce travail s'effectue en collaboration avec Moulaye Hamza, doctorant du projet Armor.

Les modèles markoviens permettent d'évaluer quantitativement les mesures de performance de nombreux phénomènes réels tels que les systèmes et réseaux informatiques.

La résolution de ces modèles en régime transitoire fournit les mesures instantanées et cumulatives. L'objectif de nos travaux est le calcul de la sensibilité de mesures transitoires par rapport à des paramètres importants des modèles. La complexité du modèle dépend du nombre des états et de l'intervalle d'intégration des systèmes différentiels. L'idée de base consiste à trouver, dans un premier temps, des méthodes robustes permettant de calculer la sensibilité de mesures pour les modèles raides à espace d'état raisonnable ($\leq 400$). En vue de calculer la sensibilité de l'espérance de la récompense cumulée sur un intervalle, nous avons étudié la méthode itérative de l'uniformisation standard pour laquelle nous avons établi un nouveau majorant de l'erreur. Ensuite, nous avons adapté la méthode IRK3 au calcul de cette sensibilité. Finalement, nous avons réussi à étendre la technique des puissances uniformisées au calcul de cette même sensibilité. Les trois méthodes ont été testées et comparées. Nous avons conclu que l'uniformisation standard est efficace pour les modèles non raides alors que IRK3 et la technique des puissances uniformisées affrontent bien la raideur. [44, 27, 28]

#### 6.4.2 Réseaux d'automates stochastiques

**Participants** : Haiscam Abdallah, Bernard Philippe, Claude Tadonki.

Les réseaux d'automates stochastiques (RAS) constituent un outil performant pour modéliser les systèmes parallèles et en particulier les réseaux ATM. En modélisant le comportement de chaque automate par un processus markovien à espace d'état raisonnable, le générateur global associé à la chaîne de Markov multidimensionnelle s'exprime comme une somme de produits tensoriels de matrices comprenant les sous-générateurs.

Nous avons terminé le travail commencé l'année précédente sur la définition d'une procédure parallèle de multiplication d'un vecteur par un produit tensoriel de matrices [41, 24].

Nous avons modifié la méthode de l'uniformisation standard et utilisé l'algorithme précédent afin d'examiner l'apport du parallélisme dans l'affrontement de la raideur avec un grand espace d'état. Le vecteur des probabilités d'état d'un réseau ATM avec $2^{20} = 1048576$ états a été calculé pour différentes valeurs de $t$ avec 128 processeurs et les résultats sont intéressants. Ainsi par exemple, pour $t = 10^4$ heures, le temps CPU est estimé à 2 heures.

La méthodologie (équations récurrentes) qui a été utilisée pour l'algèbre tensorielle a aussi été appliquée à d'autres cas comme la factorisation de Cholesky [43]. Nous avons mis au point une méthodologie générale d'ordonnancement [42, 38, 26, 54, 52].

#### 6.4.3 Comportement électromagnétique d'antennes

**Participants** : Emeric Martin, Bernard Philippe.

Nous poursuivons la collaboration avec le laboratoire «Structures rayonnantes» du département de physique de l'université de Rennes 1. Nous avons démarré la parallélisation du code PMLcant qui permet la modélisation d'une antenne de structure périodique. Le code parallèle est fondé sur la bibliothèque de communications MPI. Les architectures visées sont le T3E ou les réseaux de stations de travail.

# 7 Contrats industriels (nationaux, européens et internationaux)

## 7.1 Contrats industriels

#### 7.1.1 Problème inverse en bathycélérimétrie

**Participants** : Bernard Philippe, Yann-Hervé De Roeck.

**Résumé :** *convention Ifremer, No. 1 99 C 1783 00 31319 06 1*
*partenaires : Irisa, Ifremer*
*durée : du 15 décembre 1999 au 14 décembre 2000*

Il s'agit de retrouver la structure de la célérité des ondes acoustiques dans la tranche d'eau (cette célérité varie en fonction des variations de température et de salinité des masses d'eau de mer traversées).

Avec des balayages d'ondes acoustiques dans l'axe du bateau (sonar multi-faisceau axial), la redondance des informations de type tomographie réflexion permet d'envisager la résolution du problème inverse en propagation : retrouver la valeur de la célérité des ondes.

Les travaux réalisés sur ce sujet ont porté sur les points suivants :

- calculer la sensibilité du calcul de la bathymétrie (profondeur d'eau) en fonction des incidences angulaires (techniques d'état adjoint) ;
- montrer que le problème d'identification du champ de célérité est mal posé avec les seuls renseignements d'origine tomographique ;
- montrer que l'ajustement réalisé sur les vitesses permet d'obtenir un modèle de vitesses comprenant des erreurs qui se compensent mais qui permettent cependant d'interpréter correctement les images et les mesures bathymétriques.

Ce travail a fait l'objet du stage de Mathieu Lefèbvre.

# 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 198C57200313 19061*
*durée : du 8 janvier 1999 au 15 mars 2000*

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.

La parallélisation de deux parties de la résolution était à considérer. Celle de la résolution d'un grand système linéaire complexe à matrice pleine a été efficacement obtenue par le recours à la bibliothèque SCALAPACK. La parallélisation de l'assemblage de la matrice devait permettre de générer la matrice du système et de la répartir de manière à pouvoir directement enchaîner avec la résolution. Des difficultés pratiques n'ont pas permis d'aboutir à l'objectif dans le temps imparti à cause de structures de données adaptées à des interfaces mais incompatibles avec les procédures MPI. Cette expérience nous a montré l'écart entre la parallélisation d'un programme universitaire et celle d'un code industriel.

## 8.2 Actions nationales

### 8.2.1 Action Génie 2

**Participant** : Jocelyne Erhel.

**Résumé :** *action de développement Inria Génie 2*
*coordinateur : projet Metalau*
*partenaire d'Aladin : Dassault Aviations*
*de janvier 1999 à février 2000.*

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.

Dassault Aviations nous a fourni un exemple représentatif de procédure extraite du logiciel de calcul de trajectoire. Il ressort de notre étude que les trois tests contenus dans cette procédure sont critiques. Ces tests évaluent la position d'un point par rapport à une courbe. Nous avons proposé une nouvelle formulation de ces tests qui prend en compte les erreurs d'arrondis possibles, en introduisant la notion de point proche de la courbe [50]. Cette nouvelle notion devrait permette de définir également une nouvelle axiomatique.

## 8.3 Actions européennes

### 8.3.1 Action intégrée avec la Norvège

**Participant** : Bernard Philippe.

**Résumé :** *projet* PAI *Aurora No 99043*
*partenaire : université de Bergen*
*durée : de janvier 1999 au 15 mai 2000.*

L'action a permis de définir une future collaboration dans le cadre des activités d'hydrogéologie du projet. L'équipe Norvégienne a un savoir-faire sur la résolution du problème inverse qui permet de déterminer la perméabilité inconnue du sous-sol.

## 8.4 Actions internationales

### 8.4.1 Accueil de chercheurs étrangers

– A. Murua, de l'université du Pays Basque (Espagne), a effectué deux séjours de 3 semaines chacun, en décembre 1999 et octobre 2000. Il a contribué aux travaux sur les équations différentielles algébriques.

— E. Kamgnia, de l'université de Yaoundé I (Cameroun), est venu pendant un mois, en janvier 2000. Il a poursuivi son travail sur la signature de matrices symétriques.

– A. Malyshev, de l'université de Bergen (Norvège), est venu pendant une semaine, en janvier 2000. Il a participé aux travaux du projet dans le cadre du programme PAI Aurora.

— E. Kontoghiorghes, de l'université de Neuchatel (Suisse), a effectué un séjour de 3 semaines en février 2000, et d'une semaine en décembre 2000. Il a participé aux travaux sur la régularisation de problèmes aux moindres carrés.

- J. Verner, de l'université d'Ontario (Canada), a effectué un séjour de 1 mois, en mars 2000. Il a contribué aux travaux sur les méthodes pseudo-symétriques.

- I. Damakoa, de l'université de Ngaoundéré (Cameroun), a effectué un séjour de 3 mois, d'avril à juin 2000. Il a travaillé sur la simulation des phénomènes de diffusion.

- N. Tlatli, de l'université de Tunis (Tunisie), a effectué un séjour d'une semaine, en mai 2000. Elle a contribué au support des cours de DEA donnés à Tunis en collaboration avec l'INRIA.

- J. Belward, de l'université du Queensland (Australie), a effectué un séjour de 2,5 mois, de juin à août 2000. Il a travaillé sur des problèmes d'algèbre linéaire issus de la bioinformatique.

– J.C. Butcher, de l'université d'Auckland (Nouvelle-Zélande), a effectué un séjour d'une semaine, en août 2000. Il a travaillé sur les méthodes DIMSIM.

– Y. Saad, de l'université de Minneapolis (Etats-Unis), a effectué un séjour de 3 mois, d'octobre à décembre 2000. Il a contribué aux recherches sur les problèmes linéaires et les problèmes aux valeurs propres.

– R.B. Sidje, de l'université du Queensland (Australie), a effectué un séjour d'un mois, en novembre 2000. Il a travaillé sur les méthodes pour le filtrage et l'interpolation de données pluviométriques.

### 8.4.2 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), de l'université du Pays Basque, Espagne (A. Murua).

Dans les domaines des systèmes d'équations et des problèmes aux valeurs propres, le projet coopère principalement avec l'université du Queensland, Australie (J. Belward, K. Burrage, R.B. Sidje), avec l'université du Minnesota, Etats-Unis (Y. Saad), avec l'université de Patras, Grèce (E. Gallopoulos), avec l'université d'Utrecht, Pays-Bas (H. van der Vorst), avec l'université de Neuchatel, Suisse (E. Kontoghiorghes), et les universités de Douala et Yaoundé, Cameroun (E. Kamgnia et M. Tchuente).

# 9 Diffusion de résultats

## 9.1 Animation de la communauté scientifique

### 9.1.1 Organisation de conférences

- J. Erhel a organisé, avec H. Leroy, une journée du Pôle de Calcul Intensif de l'université de Rennes 1 (PCIR), le 28 septembre 2000. Le thème était la simulation de grands systèmes moléculaires complexes. Voir `http://www.irisa.fr/PCIR`

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

- J. Erhel et B. Philippe ont organisé, dans le cadre du PCIR, une série de séminaires sur le calcul intensif pendant la semaine du 6 au 10 novembre 2000. Voir `http://www.irisa.fr/PCIR`

- Le projet organise régulièrement un séminaire thématique sur le calcul scientifique. Voir `http://www.irisa.fr/aladin/seminaire.html`

#### 9.1.2 Comités de rédaction

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

- B. Philippe est membre du comité éditorial de la revue Calculateurs parallèles.

#### 9.1.3 Divers

- B. Philippe a été le représentant de l'Inria au bureau Orap, d'octobre 1997 à mai 2000.

- B. Philippe a été membre du jury de l'agrégation de mathématiques de l'année 2000.

- 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 d'administration du Cimpa, depuis janvier 2000.

### 9.2 Enseignement universitaire

- Y-H. De Roeck a enseigné un cours de mathématiques appliquées à l'ENSIETA, à Brest ($1^{re}$ année).

- J. Erhel et Y-H. De Roeck ont enseigné le cours de mathématiques appliquées du DIIC, IFSIC, Rennes ($1^{re}$ année).

- J. Erhel a donné un séminaire destiné aux étudiants de cinquième 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 K. Bouatouch du projet Siames, l'option Systèmes linéaires et radiosité (SYRA) 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 a assuré l'enseignement d'un module du DEA de mathématiques appliquées de l'université de Tunis.

### 9.3 Participation à des colloques, séminaires, invitations, prix

- P. Chartier - Post-projected Runge-Kutta methods for index-2 differential-algebraic equations - conférence plénière invitée - NUMDIFF-9, Halle, Allemagne - Septembre 2000.

- Y-H. De Roeck - Geophysical migration and sparse linear algebra - séminaire NERSC, Berkeley, USA, février 2000.

- J. Erhel - Méthodes itératives pour la résolution de systèmes linéaires et accélération de la convergence - séminaire PALM, université de Paris 6 - Janvier 2000.

- J. Erhel - Algorithmes pour le calcul scientifique intensif - séminaire Irisa-Ifremer, Brest - Mars 2000.

- C. Tadonki - Méthologie de Conception d'Algorithmes Parallèles - séminaire de l'ICPS de Strasbourg - Juillet 2000.

- C. Tadonki - Canonic Schedule and Parallel Cholesky Factorization - séminaire de l'université de Genève (CUI) - Août 2000.

- C. Tadonki - Quelques Résultats en Algorithmique Parallèle et Complexité - séminaire de l'université de Genève (LOGILAB) - Octobre 2000.

- C. Tadonki - Forum ORAP, CERN, Genève - octobre 2000.

# 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*, *24*, 4, Numerical Algorithms, 2000.

[10] B. Philippe, M. Tchuente (éditeurs), *CARI'98*, *19*, 7, Technique et Science Informatiques, HERMES, 2000.

[11] B. Philippe (éditeur), *Les applications du calcul parallèle*, *11*, 3, Calculateurs parallèles, réseaux et systèmes répartis (Hermès), 1999.

## Thèses et habilitations à diriger des recherches

[12] P. Chartier, *Méthodes numériques pour les équations différentielles ordinaires et algébriques avec application aux systèmes hamiltoniens*, Habilitation à diriger des recherches, Université de Rennes 1, janvier 2000.

[13] F. Guyomarc'h, *Méthodes de Krylov : régularisation de la solution et accélération de la convergence*, Thèse de doctorat, Université de Rennes 1, novembre 2000.

[14] A. Zaoui, *Deux contributions au calcul numérique : sur la convergence de la méthode des itérations simultanées couplée à l'algorithme d'Arnoldi itératif et autour du calcul hypercomplexe*, Thèse de doctorat, université de Toulouse, décembre 2000.

## 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, « Micro-mechanical approach and algorithm for the study of damage's appearance in elastomer composite », *Composites Structures 46*, 4, 1999, p. 309–319.

[17] J. Butcher, P. Chartier, Z. Jackiewicz, « Experiments with a variable-order type 1 DIMSIM code », *Numerical algorithms 22*, 3,4, 1999, p. 237–261.

[18] J. Butcher, P. Chartier, « The effective order of singly-implicit Runge-Kutta methods », *Numerical algorithms 20*, 4, 1999, p. 269–284.

[19] R. Chan, P. Chartier, « Classification of High-Order Implicit Runge-Kutta Methods by Characterization of their Properties », *New-Zealand journal of mathematics 29*, 2000.

[20] J. Erhel, F. Guyomarc'h, « An Augmented Conjugate Gradient Method for solving consecutive symmetric positive definite systems », *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications 21*, 4, 2000, p. 1279–1299.

[21] J. Erhel, S. Rault, « Algorithme parallèle pour le calcul d'orbites : Parallélisation à travers le temps », *Technique et science informatiques 19*, 5, 2000.

[22] 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 10*, 2, 1999, p. 209–234.

[23] Y. Saad, M. Yeung, J. Erhel, F. Guyomarc'h, « A deflated version of the Conjugate Gradient Algorithm », *SIAM Journal on Scientific Computing 21*, 5, 2000, p. 1909–1926.

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

[25] C. Tadonki, B. Philippe, « Parallel Multiplication of a Vector by a Kronecker Tensor Product of matrices », *Parallel and Distributed Computing Practices 4*, 2, 2000, p. 53–67.

[26] C. Tadonki, « Méthodologie de Synthèse d'Ordonnancements Parallèles par Reproduction Canonique », *Calculateurs parallèles, réseaux et systèmes répartis*, à paraître.

### Communications à des congrès, colloques, etc.

[27] H. Abdallah, M. Hamza, « Sensitivity analysis of the Expected Accumulated Reward using Uniformization and IRK3 methods », *in: second conference on Numerical Analysis and Applications*, Rousse, Bulgarie, juin 2000.

[28] H. Abdallah, M. Hamza, «Sensitivity computation of the expected accumulated reward of stiff Markov models», *in: International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications*, Las Vegas, USA, juin 2000.

[29] R. Chan, P. Chartier, A. Murua, « Reversible methods of Runge-Kutta type for index-2 Differential-Algebraic Equations », *in: National Research Symposium on Geometric Integration*, Melbourne, décembre 2000.

[30] P. Chartier, « Post-projected Runge-Kutta methods for index-2 Differential-Algebraic Equations », *in: NUMDIFF-9*, Halle, septembre 2000.

[31] J.-M. Cognet, Y.-H. D. Roeck, G. Chavent, « The seismic inverse problem with a source identification », *in: WAVES 2000*, Santiago de Compostella, juillet 2000.

[32] E. Kamgnia, B. Philippe, « Factorisation $LDL^t$ d'une matrice symétrique d'intervalles », *in: Colloque Africain de Recherche en Informatique*, Antananrivo, Madagascar, octobre 2000.

[33] E. Kamgnia, B. Philippe, « Inertia of a Symmetric Matrix of Intervals », *in: SCAN 2000 / INTERVAL 2000*, Karlsruhe, septembre 2000.

[34] C. Leleu, Y.-H. D. Roeck, G. Chavent, « Validity range of a 3D Born+ray model for the estimation of sea bottom and acquisition parameters in marine seismics », *in: WAVES 2000*, Santiago de Compostella, juillet 2000.

[35] C. Leleu, Y.-H. D. Roeck, F. Clément, G. Chavent, « A 3-D Born+ray prestack depth migration for the estimation of acquisition parameters », *in: SEG*, Calgary, août 2000.

[36] D. Mezher, B. Philippe, « Parallel Pseudospectrum Calculations for Large Matrices », *in: Matrix Analysis and Applications*, Neuchatel, Suisse, août 2000.

[37] D. Mezher, B. Philippe, « Robust and parallel programs for eigenvalues localization », *in: Matrix Iterative Analysis and Biorthogonality*, Luminy, France, octobre 2000.

[38] P. Quinton, C. Tadonki, M. Tchuente, « Un échéancier systolique et son utilisation dans l'ATM », *in: CARI*, Tananarive, Madagascar, octobre 2000.

[39] Y.-H. D. Roeck, « Migration sismique et algèbre linéaire creuse », *in: Matlab User's meeting*, Reims, mai 2000.

[40] Y.-H. D. Roeck, «Pre-stack depth migration and sparse linear algebra», *in: EAGE*, Glasgow, juin 2000.

[41] C. Tadonki, B. Philippe, « Méthodologie de Conception d'Algorithmes Efficaces pour le Produit Tensoriel », *in: CARI*, Tananarive, Madagascar, octobre 2000.

[42] C. Tadonki, « Ordonnancements canoniques », *in: RENPAR*, Besançon, France, juin 2000.

[43] C. Tadonki, « Parallel Cholesky Factorization », *in: Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications*, Neuchatel, Suisse, août 2000.

## Rapports de recherche et publications internes

[44] H. Abdallah, M. Hamza, « Sensibilité de l'espérance de la récompense cumulée des modèles markoviens raides », *Rapport de recherche n° 3904*, INRIA, 2000, `http://www.inria.fr/rrrt/rr-3904.html`.

[45] O. Beaumont, A. Munch, « A new algorithm for evaluating the in-circle lll predicate », *Publication interne n° 1312*, IRISA, 2000.

[46] O. Beaumont, « An Algorithm for Symmetric Interval Eigenvalue Problem », *Publication interne n° 1314*, IRISA, 2000.

[47] O. Beaumont, « Solving interval linear systems with oblique boxes », *Publication interne n° 1315*, IRISA, 2000.

[48] O. Beaumont, « Solving Linear Interval Tolerance problem with Oblique Boxes », *Publication interne n° 1313*, IRISA, 2000.

[49] D. Cachera, S. Rajopadhye, T. Risset, C. Tadonki, « Parallelization of the Algebraic Path Problem on Linear Arrays », *Publication interne n° 1346*, IRISA, 2000.

[50] J. Erhel, « Etude de la prise en compte des erreurs d'arrondi dans la preuve d'un algorithme de calcul de trajectoire », *Rapport de fin de contrat, GENIE2, thème 1.4*, INRIA, 2000.

[51] D. Mezher, B. Philippe, « PAT - a reliable Path Following algorithm », *Rapport de recherche n° 3991*, INRIA, 2000, `http://www.inria.fr/rrrt/rr-3991.html`.

[52] P. Quinton, C. Tadonki, M. Tchuente, « Un échéancier systolique et son utilisation dans l'ATM », *Publication interne n° 1348*, IRISA, 2000.

[53] Y.-H. D. Roeck, « Sparse linear algebra and geophysical migration », *Rapport de recherche n° 3876*, INRIA, 2000, `http://www.inria.fr/rrrt/rr-3876.html`.

[54] C. Tadonki, « Synthèse d'ordonnancements parallèles par reproduction canonique », *Rapport de recherche n° 3996*, INRIA, 2000, `http://www.inria.fr/rrrt/rr-3996.html`.