

Rapport INRIA 1994 — Programme 6

Algorithmes adaptés au calcul numérique intensif

Projet ALADIN

3 mai 1995

Projet ALADIN

Algorithmes adaptés au calcul numérique intensif

Localisation : *Rennes*

Mots-clés :

Aladin est un projet commun Inria/CNRS (URA 227).

1 Composition de l'équipe

Responsable scientifique

Bernard Philippe, DR Inria

Secrétaire

Marie-Noëlle Georgeault, Inria

Personnel Inria

Philippe Chartier, CR

Jocelyne Erhel, CR

Miloud Sadkane, CR

Personnel Ura 227

Claude Simon, maître de conférences, IUT de Lannion

Personnel Simulog

Jean-Christophe Paoletti, ingénieur

Collaborateurs extérieurs

Michel Crouzeix, professeur, université de Rennes 1
Georges Le Vey, maître assistant, école des Mines de Nantes
Nicolas Mallejac, doctorant CEA

Chercheur post-doctorant

Fabio Guerinoni, bourse HCM, depuis le 1er septembre

Chercheurs doctorants

Jean-François Carpraux, bourse Dret, jusqu'au 1er octobre
Stéphane Chauveau, bourse MESR, en collaboration avec le
projet CAPS, à partir du 1er octobre

Rémi Choquet, bourse Dret

Mounir Hahad, bourse du gouvernement algérien, en collabo-
ration avec le projet CAPS

Philippe Féat, bourse MESR du département de mathéma-
tiques, en collaboration avec l'Irmar

Vincent Heuveline, bourse Inria

Pierre-François Lavallée, bourse MESR, à partir du 1er octobre

Inessa Matveeva, bourse Miceco, co-tutelle avec Novosibirsk

Pierre Rabain, bourse de l'école des Mines de Nantes, en
collaboration avec le projet Caps

Roger-Blaise Sidje, bourse Inria-CIES, jusqu'au 1er octobre

Chercheurs invités

Genadii Demidenko, bourse Dret-Cies, 3 mois, Novosibirsk

Sergei Godunov, bourse Dret-Cies, 2 mois, Novosibirsk

Alexandre Malyshev, bourse Dret-Cies, 3 mois, Novosibirsk

Juergen Wolff von Gudenberg, bourse Inria, 2 mois, Wuerz-
burg

2 Présentation générale et objectifs

On peut décomposer la simulation numérique d'un phénomène physique en différentes étapes :

- mise en équation,
- étude mathématique des équations (problème bien posé, régularité de la solution),
- étude du schéma numérique de résolution (discrétisation, convergence, stabilité),

- détermination de l'algorithme global et mise en œuvre.

La dernière étape se décompose aussi en une suite de problèmes répertoriés que l'on résout en utilisant des programmes de calcul disponibles dans des bibliothèques. Le projet se consacre à la conception d'algorithmes pour ces modules.

Comme ces procédures concentrent la plus grande partie des calculs réalisés sur l'ordinateur pendant la résolution, leur construction doit assurer les meilleures efficacité et fiabilité possibles. Le projet étudie la réalisation de tels modules dans le domaine de l'algèbre linéaire et de la résolution des équations différentielles (ordinaires ou algébriques). Le cas des grands problèmes définis par des matrices creuses constitue un axe important des préoccupations du projet.

3 Actions de recherche

L'activité du projet s'est ouverte cette année à de nouveaux thèmes de recherche grâce aux collaborations démarrées par des contacts extérieurs. La rencontre de chercheurs de Brisbane, de Novosibirsk et d'Auckland a stimulé la recherche d'algorithmes sur les thèmes respectifs de la résolution des systèmes linéaires, du calcul de valeurs propres et de la résolution des équations différentielles.

3.1 Algorithmes itératifs sur les sous-espaces de Krylov

Les sous-espaces de Krylov sont l'un des outils privilégiés pour résoudre des problèmes d'algèbre linéaire sur grandes matrices creuses. En effet, ils permettent d'une part d'itérer sur des approximations polynômiales et d'autre part ils évitent des transformations sur la matrice que l'on ne pourrait matériellement réaliser. Le projet s'intéresse principalement aux méthodes fondées sur le procédé d'Arnoldi qui construit une base orthonormée de l'espace considéré, à l'école de Y. Saad, l'un des correspondants réguliers de l'équipe.

Evolution des espaces de Krylov

Participants : Jean-François Carpraux, Jocelyne Erhel, Sergei Godunov, Bernard Philippe, Miloud Sadkane

Pour mesurer la stabilité des espaces de Krylov, nous avons défini un algorithme pour en calculer la sensibilité aux perturbations. Le travail est parti d'une idée de S.V. Kuznetsov de Novosibirsk. Par une approximation du premier ordre, le problème se ramène à l'inversion d'une matrice triangulaire calculée à partir de la matrice de départ. Il reste maintenant à caractériser les cas instables puis à en déduire l'effet sur la convergence des méthodes itératives telles que GMRES ou Arnoldi. [10]

Une étude a permis de déterminer les formules donnant l'évolution des angles entre deux sous-espaces consécutifs et de mettre en évidence des signaux pour la convergence des valeurs propres [13].

Techniques de déflation

Participants : Jocelyne Erhel, Philippe Féat

Pendant son séjour à Brisbane, J. Erhel a conçu avec K. Burrage et B. Pohl une technique pour accélérer la convergence de résolutions itératives de systèmes linéaires ou non linéaires. L'idée est de construire une approximation P de l'espace invariant correspondant aux valeurs propres qui freinent la convergence et de résoudre de manière exacte dans ce sous-espace. L'espace P est construit incrémentalement grâce aux nouvelles approximations des vecteurs invariants fournies par la méthode itérative elle-même.

Cette approche a été utilisée dans le cas linéaire pour accélérer la convergence des méthodes stationnaires (Jacobi, relaxation, etc). Elle a été également adaptée pour définir un préconditionnement de GMRES. Les résultats actuels sont encourageants. De plus, les opérations induites sont aisément parallélisables. [17, 23, 18].

Méthode de Newton-GMRES

Participants : Rémi Choquet, Jocelyne Erhel, Claude Simon

La méthode de Newton-GMRES permet de résoudre un problème non linéaire, dans lequel chaque système linéaire avec Jacobien J est résolu approximativement par GMRES, en utilisant une différentiation

numérique du produit Jv . Il est indispensable de préconditionner le Jacobien J pour converger assez vite, avec la contrainte supplémentaire de ne pas construire le Jacobien ni stocker de matrice. Plusieurs pistes ont été explorées dans le cadre des équations de Navier-Stokes compressibles mais elles peuvent aussi être appliquées à d'autres problèmes. Leur principe est d'exploiter la résolution des itérations précédentes de Newton [21].

La même méthode est aussi utilisée pour la résolution du système d'équations non linéaires rencontrées dans la modélisation des phénomènes de transport électrique dans les semiconducteurs [15]

Calcul de valeurs propres

Participants: Jocelyne Erhel, Vincent Heuveline, Bernard Philippe, Miloud Sadkane

Les petites valeurs singulières d'une grande matrice A sont les plus délicates à calculer. A partir d'une adaptation de la méthode de Davidson réalisée l'année précédente, nous avons défini des préconditionnements du problème à partir de factorisations incomplètes (QR incomplet sur A ou Choleski incomplet sur $A^T A$). Ce procédé a permis de résoudre un certain nombre d'exemples réputés difficiles sur lesquels l'approche classique de l'algorithme de Lanczos échoue. Il reste malgré tout encore des cas de non convergence.

Pour calculer les valeurs propres situées à la périphérie du spectre, il est nécessaire de transformer la méthode d'Arnoldi qui calcule naturellement les valeurs périphériques. Afin d'éviter la transformation spectrale classique qui nécessite des résolutions de systèmes linéaires, on recherche des transformations polynômiales ou même exponentielles.

3.2 Dichotomie spectrale

Participants: Genadii Demidenko, Sergei Godunov, Alexandre Malyshev, Miloud Sadkane

La coopération du projet avec le département de mathématiques de Novosibirsk a initié les membres du projet aux nouvelles techniques de partitionnement du spectre avec calcul simultané d'un indicateur de confiance à apporter à la réponse. Le problème provient couramment

d'études de stabilité de systèmes. A partir d'algorithmes précédemment développés à Novosibirsk (dichotomie par l'axe des imaginaires ou par le cercle unité) de nouvelles méthodes ont été obtenues pour le cas de l'ellipse et de la parabole [24, 26, 27]. L'appartenance de valeurs propres à des lignes polygonales a aussi été traitée [22].

3.3 Résolutions d'équations différentielles algébriques

Participants : Philippe Chartier, Georges Le Vey

Le séjour de P. Chartier à Auckland dans l'équipe de J. Butcher lui a permis d'explorer en profondeur les méthodes numériques dites Diagonally Implicit Multi Stage Integration Methods et plus particulièrement, parmi elles, des méthodes dites de type 4 qui se caractérisent par leur aptitude à être aisément parallélisées. L'application de ces schémas au cas des systèmes différentiels raides et algébro-différentiels a permis de caractériser un certain nombre de propriétés dont la satisfaction semble souhaitable voire indispensable. Cette étude a permis la construction de méthodes L-stables stiffly accurate d'ordre élevé dont l'efficacité a été démontrée sur des tests préliminaires [19].

Par ailleurs, de nouveaux schémas de type Runge-Kutta (dits symétriseurs) ont été construits. Associés à des méthodes symétriques classiques (par exemple Gauss), ces schémas permettent de réduire considérablement l'ampleur du phénomène de réduction d'ordre observé dans le cas des systèmes algébro-différentiels d'indice 2 [20].

Enfin, nous nous intéressons aux problèmes liés à l'indice des systèmes dits différentiels algébriques. L'indice est une propriété de nature algébrique pour l'étude de laquelle il est naturel de se placer dans le cadre de la théorie des jets. Par ailleurs, la théorie formelle des équations aux dérivées partielles est un outil puissant qui nous a permis de donner une définition très générale de l'indice des systèmes implicites, qui peuvent en outre être surdéterminés, ce que ne permet pas la définition usuelle [28].

3.4 Parallélisation d'algorithmes

Participants : Jocelyne Erhel, Mounir Hahad, Roger-Blaise Sidje

Nous nous sommes intéressés à la parallélisation du procédé de construction des espaces de Krylov sur la machine Paragon de l'Irisa. D'abord de manière classique, puis en changeant d'algorithme.

Les primitives de base dans GMRES sont le produit de la matrice creuse par un vecteur, le procédé d'Arnoldi pour construire une base orthonormée de l'espace de Krylov et le préconditionnement. Une parallélisation naturelle repose sur une partition par lignes de la matrice. Sur machine à mémoire distribuée, une structure de données complexe permet de déterminer exactement les communications entre processus. Les premiers essais sur Paragon, à partir d'un code développé par Y.Saad, donnent des résultats prometteurs sur des matrices à structure régulière. Dans le cas général, il faudra utiliser une renumérotation de la matrice basée sur un partitionnement de graphe afin de minimiser les communications.

Une deuxième approche a aussi été poursuivie pour la parallélisation de la construction d'une base de Krylov. Plutôt que de générer successivement les vecteurs en les orthogonalisant à chaque fois, on a cherché à directement construire une base que l'on orthogonalise ensuite. La mise en œuvre de cette idée se heurte à des difficultés numériques que l'on a pu surmonter. La procédure obtenue est très efficace sur la machine Paragon [14].

Ces codes et beaucoup d'autres du calcul scientifique ont recours à des indirections dans les tableaux. Il est donc intéressant de développer un outil logiciel pour paralléliser facilement ce cas de figure. L'étude porte ici sur une machine parallèle à mémoire virtuelle partagée. La solution proposée repose sur un test de propriété en écriture introduit avant chaque indirection. Une technique d'apprentissage améliore les performances dans le cas itératif.

3.5 Le projet Aquarels

Participants : Jocelyne Erhel, Jean-Christophe Paoletti, Bernard Philippe, Juergen Wolff von Gudenberg

La réalisation d'un prototype de l'atelier logiciel Aquarels est en voie d'achèvement. Il s'agit par cet atelier de définir une structure cohé-

rente et conviviale pour accueillir un ensemble de logiciels permettant un meilleur contrôle de la précision des calculs. La société Simulog le développe grâce à un financement du CEA, du Cnes et de la Dret tandis que l'Irisa joue dans l'opération le rôle de conseiller scientifique. Une première utilisation de l'atelier a eu lieu sur une application du CEA dans laquelle on a testé un ensemble de routines par perturbations. L'arithmétique d'intervalle a d'autre-part été utilisée dans un calcul d'encadrement de la plus petite valeur singulière d'une matrice.

L'invité allemand du projet a déterminé un nouvel algorithme de calcul du produit scalaire précis (arrondi uniquement en fin de calcul) plus efficace que le précédent [29].

4 Actions industrielles

Le projet est engagé avec le projet Calpar dans une convention Dret (193C2710000MPR011). La part du projet Aladin porte sur des solveurs adaptés aux matrices creuses : comportement de primitives de base sur la machine KSR et état de l'art dans les méthodes itératives pour résoudre les systèmes linéaires.

Une autre coopération lie le projet Aladin au projet Calpar. Il s'agit d'un partenariat avec la société Stern Computing Systems pour des études accompagnant l'achat d'un ordinateur hautes performances SSP/Enterprise par l'Irisa. Le projet est chargé de l'évaluation du comportement des compilateurs sur des procédures de bibliothèque et de la conception de nouveaux modules.

Le contrat DAM/CEL-V N°W003725/454(93) passé avec le CEA a démarré cette année sur une première utilisation de l'atelier Aquarels appliquée à des programmes fournis par le CEA.

Le projet émerge avec les projets Pampa et Solidor au contrat ERDP d'Intel (référence Inria : 193C21431318012). Sa part consiste à porter différents algorithmes parallèles d'algèbre linéaire sur la machine Paragon en utilisant ou non la mémoire virtuelle globale Koan.

5 Actions nationales et internationales

5.1 Action nationale

B. Philippe est avec H. Leroy et B. Plateau coordinateur du réseau Rapid (Réseau de ressources des applications parallèles pour l'industrie et le développement scientifique) qui rassemble les machines d'une grande partie des centres publics français possédant des calculateurs parallèles. Les partenaires mettent ainsi leurs ressources et leur expérience à la disposition d'industriels désirant avoir un premier contact avec le calcul parallèle. Les membres fondateurs du réseau outre l'Inria sont le CEA, le Cerfacs, le CNRS, la DGA et le MESR.

5.2 Actions internationales

Nous avons déjà cité les collaborations avec le département de mathématiques de l'Académie des Sciences de Russie à Novosibirsk (séjours de chercheurs Russes financés par des contrats Dret-Cies), avec le département de mathématiques de l'université d'Auckland (bourse post-doctorale de P. Chartier) et avec le département de mathématiques de l'université de Brisbane (séjour de J. Erhel).

Le projet est membre avec le Cerfacs d'un réseau européen HCM (Résolution parallèle de codes de mécanique des fluides). Ce contrat permet de financer le séjour post-doctoral de Fabio Guerinoni (dix mois).

Le projet collabore avec des chercheurs des universités des états de Caroline du Nord, de l'Illinois et du Minnesota dans le cadre d'un accord Nsf/Inria (Calcul du régime transitoire d'une chaîne de Markov sur calculateur parallèle).

Un contrat Copernicus liant les projets Api et Aladin à des centres de recherche de Bratislava, Novosibirsk et Sofia est en voie de finalisation. Il permettra de définir des procédures parallèles pour la construction des portraits spectraux de matrices.

Bernard Philippe est le représentant de l'Inria au Comité Africain de Recherche en Informatique pour promouvoir une coopération entre chercheurs africains sur des thèmes spécifiques. A ce titre, il a activement participé à la préparation du colloque Cari'94 de Ouagadougou. C'est dans ce cadre que démarre le projet de recherche entre le projet et l'équipe de M. Tchunte à l'université de Yaoundé.

Bernard Philippe est le représentant Inria au Steering Committee du ppn group (Parallel Processing and Networking), activité du consortium Ercim.

6 Diffusion des résultats

Le projet a organisé un cours sur l'algèbre linéaire creuse à l'EDF-DER en mai ; une deuxième session traitera de la recherche de valeurs propres.

Le projet a organisé une journée nationale sur la résolution numérique des équations différentielles à laquelle participaient quelques spécialistes renommés.

J. Erhel, M. Sadkane et R. Choquet assurent à l'Ifsic les options calcul scientifique de maîtrise et de DIIC2. J. Erhel intervient dans l'option calcul parallèle du DEA commune à l'Ifsic et à l'Irmar. Avec Miloud Sadkane elle assure aussi un cours sur le parallélisme en algèbre linéaire dans le DEA de mathématiques de l'Irmar.

7 Bibliographie du projet

Thèses

- [1] J.-F. CARPRAUX, *Quelques outils d'aide au contrôle de précision en calcul*, thèse de doctorat, université de Rennes 1, septembre 1994.
- [2] R.-B. SIDJE, *Algorithmes parallèles pour le calcul d'exponentielles de matrices de grandes tailles*, thèse de doctorat, université de Rennes 1, juillet 1994.

Articles et chapitres de livre

- [3] M. ARIOLI, I. DUFF, D. RUIZ, M. SADKANE, «Block Lanczos Techniques for accelerating the block Cimmino method», *SIAM J. Sci. Comput*, 1995 (à paraître).
- [4] M. BRISTEAU, P. FÉAT, J. ERHEL, R. GLOWINSKI, J. PÉRIAUX, «Solving the Helmholtz equation at high wave numbers on a parallel computer with a shared virtual memory», *The International Journal of Supercomputer Applications and High Performance Computing*, 1995 (à paraître).
- [5] J.-F. CARPRAUX, J. ERHEL, M. SADKANE, «Spectral portrait for non hermitian large sparse matrices», *Computing*, 52, 1994.

- [6] J.-F. CARPRAUX, J. ERHEL, «A Knowledge-Based System for some Eigenvalue Problems», *Mathematics and Computers in Simulation*, 1994, p. 315–325.
- [7] P. CHARTIER, B. PHILIPPE, «A Parallel Shooting Technique for Solving Dissipative ODE's , Part 1 : Theoretical Analysis ; Part 2 : Numerical Implementation», *Computing 51 (3-4)*, 1994.
- [8] P. CHARTIER, «L-Stable Parallel One-Block Methods for Ordinary Differential Equations», *SIAM J. Numer. Analysis 31 (2)*, 1994, p. 552–571.

Communications à des congrès, colloques, etc.

- [9] J.-C. BUTCHER, P. CHARTIER, «Parallel general linear methods for stiff ODEs and DAEs», *in: IMACS International Conference*, USA, 1994.
- [10] J.-F. CARPRAUX, S.-K. GODUNOV, S.-V. KUZNETSOV, «Stability of the Krylov Bases and Subspaces», *in: Third International Conference on Numerical Methods and Applications*, Bulgarie, août 1994.
- [11] M. HAHAD, J. ERHEL, T. PRIOL, «A new approach to parallel sparse Cholesky on DMPCs», *in: International Conference on Parallel Processing*, USA, août 1994.
- [12] M. AUBOURG, P.-H. GIESBERS, B. PHILIPPE, M. SADKANE, «Calcul des structures de propagation microondes heterogenes et anisotropes», *in: 26ème Congrès National d'Analyse Numerique*, Les Karelis, 29 mai-3 juin 1994.
- [13] B. PHILIPPE, M. SADKANE, «Arnoldi's procedure and angles between Krylov subspaces», *in: Proceedings of 3rd International Conference on Numerical Methods and Applications NM&A - $O(h^3)$* , Sophia, Bulgarie, 1994.
- [14] B. PHILIPPE, R.-B. SIDJE, «Parallel Krylov Subspace Basis Computation», *in: 2ème Colloque Africain sur la recherche en Informatique*, Ouagadougou, 1994.
- [15] J. PLEUMEKEERS, C. SIMON, S. MOTTET, «An explicit method for solving the semiconductor equations», *in: Conference Nasecode X*, J. Miller (éd.), Boole Press, Dublin, 21-24 juin 1994.
- [16] M. SADKANE, B. PHILIPPE, «Improving the Reliability of a Deflated non Hermitian Generalized Eigenvalue Problem», *in: Fifth SIAM conference on Applied Linear Algebra*, Snowbird, Utah, 15-18 juin 1994.

Rapports de recherche et publications internes

- [17] K. BURRAGE, J. ERHEL, B. POHL, «A deflation technique for linear systems of equations», *rapport de recherche n°94-02*, ETH-Zürich, juin 1994.
- [18] K. BURRAGE, A. WILLIAMS, J. ERHEL, B. POHL, «The implementation of a Generalized Cross Validation algorithm using deflation techniques for linear systems», *rapport de recherche n°94-05*, ETH-Zürich, juillet 1994.
- [19] J. BUTCHER, P. CHARTIER, «The construction of DIMSIMs for stiff ODEs and DAEs», *rapport de recherche*, university of Auckland, à paraître.
- [20] R. CHAN, P. CHARTIER, «Gaussian symmetrizers applied to index 2 DAEs», *rapport de recherche*, university of Auckland, 1994 (à paraître).
- [21] R. CHOQUET, «Accélération de l'algorithme de Newton-GMRES pour les équations de Navier-Stokes», *publication interne n°831*, Irisa, juin 1994.
- [22] G. DEMIDENKO, I. MATVEEVA, «On Properties of a class of spectral characteristics of matrices and applications to ordinary differential equations», *publication interne n°820*, IRISA, mai 1994.
- [23] J. ERHEL, K. BURRAGE, B. POHL, «Restarted GMRES preconditioned by deflation», *rapport de recherche n°94-04*, ETH-Zürich, juillet 1994.
- [24] S. K. GODUNOV, M. SADKANE, «Elliptic Dichotomy of a Matrix Spectrum», *publication interne n°836*, Irisa, juin 1994.
- [25] A. N. MALYSHEV, M. SADKANE, «Lyapunov's stability of large matrices», *publication interne n°845*, Irisa, juillet 1994.
- [26] A. N. MALYSHEV, M. SADKANE, «Parabolic and Elliptic Dichotomy», *publication interne n°844*, Irisa, juillet 1994.
- [27] A. N. MALYSHEV, «New estimates of the spectral dichotomy», *publication interne n°846*, Irisa, Juillet 1994.
- [28] G. L. VEY, «Differential algebraic equations: a new look at the index», *publication interne n°808*, Irisa, 1994.
- [29] J. W. VON GUDENBERG, «Comparison of accurate dot product algorithms», *publication interne*, Irisa, octobre 1994.

8 Abstract

The project Advanced Algorithms for Scientific Computing is devoted to the search for algorithms for numerical libraries. The goal of the work is to obtain parallel algorithms that are also numerically reliable.

In linear algebra, the methods studied will cater to sparse matrices. Of special concern are the projection methods which approximate the solution in subspaces of reduced dimension and the direct methods which are used for preconditioning. New parallel schemes are designed for integrating ordinary differential equations. Their study includes a full characterization of their stability as well as their behaviour on algebraic differential equations. The obtained procedures are tested within large numerical simulations as for example Computational Fluid Dynamics or Electronic Device Simulation. The project is also concerned with programming environments for scientific computing. In this direction, new tools are being designed which should help the user assess the numerical reliability of his code (eg. Aquarels toolbox).

Scientific Context

- Solution of linear and nonlinear systems of equations
- Computation of eigenvalues and eigenvectors ; spectral dichotomy
- Solution of ordinary or algebraic differential equations
- Parallel computing
- Reliability and accuracy of scientific computing

Developments:

- Procedures for numerical libraries
- Aquarels: toolbox under development at Simulog

Table des matières

1	Composition de l'équipe	1
2	Présentation générale et objectifs	2
3	Actions de recherche	3
3.1	Algorithmes itératifs sur les sous-espaces de Krylov	3
3.2	Dichotomie spectrale	5
3.3	Résolutions d'équations différentielles algébriques	6
3.4	Parallélisation d'algorithmes	7
3.5	Le projet Aquarels	7
4	Actions industrielles	8
5	Actions nationales et internationales	9
5.1	Action nationale	9
5.2	Actions internationales	9
6	Diffusion des résultats	10
7	Bibliographie du projet	10
8	Abstract	12