

Projet ALADIN

Algorithmes adaptés au calcul numérique intensif

Rennes

THÈME 4B



*R*apport
d'Activité

2001

Table des matières

1	Composition de l'équipe	3
2	Présentation et objectifs généraux	3
3	Fondements scientifiques	4
3.1	Équations différentielles ordinaires ou algébriques	4
3.1.1	Systèmes différentiels ordinaires	5
3.1.2	Équations algébro-différentielles	6
3.1.3	Systèmes hamiltoniens	7
3.2	Problèmes linéaires et non linéaires	9
3.2.1	Méthodes directes pour les systèmes linéaires	10
3.2.2	Méthodes itératives pour les systèmes linéaires	10
3.2.3	Accélération de convergence	12
3.2.4	Problèmes non linéaires	13
3.3	Problèmes aux valeurs propres	13
3.3.1	Méthodes de Davidson	14
3.3.2	Pseudo-spectres	15
3.3.3	Matrice d'intervalles	15
4	Domaines d'applications	16
4.1	Panorama	16
4.1.1	Télécommunications	16
4.1.2	Transport	17
4.2	Environnement	17
4.2.1	Imagerie sismique sous-marine	17
4.2.2	Écoulement et transport de solutés en milieu poreux ou fracturé	17
4.2.3	Érosion côtière	17
5	Logiciels	17
5.1	Activité logicielle du projet	17
5.2	Résolution de systèmes différentiels	18
5.3	SCILIN : résolution itérative de systèmes linéaires avec SCILAB	18
5.4	PPAT : suivi de lignes de niveaux et calcul de pseudo-spectres	18
5.5	Atelier Aquarels pour la qualité numérique	19
6	Résultats nouveaux	19
6.1	Équations différentielles ordinaires ou algébriques	19
6.1.1	Méthodes générales linéaires	20
6.1.2	Méthodes pseudo-symétriques	20
6.1.3	Approximation des équations d'Hamilton-Jacobi	20
6.1.4	Méthodes post-projetées pour les équations algébro-différentielles d'indices 2 et 3	20
6.1.5	Invariants numériques d'une méthode de Runge-Kutta	21

6.2	Problèmes linéaires et non linéaires	21
6.2.1	Régularisation de systèmes mal conditionnés	21
6.2.2	Problèmes inverses en électrocardiographie	22
6.2.3	Simulation d'un écoulement et du transport de solutés en milieu poreux	23
6.3	Problèmes aux valeurs propres	24
6.3.1	Calcul des pseudo-spectres d'une matrice	24
6.3.2	Signature d'une matrice symétrique	25
6.3.3	Calcul des valeurs propres d'un opérateur de dimension infinie	25
6.4	Suivi d'interfaces fluides par la méthode des intégrales de frontières	25
6.4.1	Rebond d'une bulle de gaz sur une paroi solide	26
6.4.2	Éclatement d'une bulle de gaz à une surface libre	26
6.5	Synthèse d'ordonnancements parallèles	27
6.6	Sensibilité de modèles markoviens de réseaux de télécommunications	28
7	Actions régionales, nationales et internationales	29
7.1	Actions nationales	29
7.1.1	Défis de l'ANDRA - simulation du transfert de déchets radioactifs	29
7.1.2	Action bioinformatique - dynamique des populations	30
7.2	Actions européennes	30
7.2.1	Groupe de Travail ERCIM - Matrix Computations and Statistics	30
7.3	Actions internationales	31
7.3.1	Projet INRIA/NSF - préconditionnements robustes et parallèles	31
7.3.2	Projet CAMEREAU - hydrogéologie au Cameroun	31
7.3.3	Action intégrée avec la Tunisie - simulation d'érosion côtière	32
7.3.4	Séjours à l'étranger	32
7.3.5	Accueil de chercheurs étrangers	32
7.3.6	Relations internationales	33
8	Diffusion de résultats	33
8.1	Animation de la communauté scientifique	33
8.1.1	Organisation de conférences	33
8.1.2	Comités de rédaction	34
8.1.3	Divers	34
8.2	Enseignement universitaire	34
8.3	Participation à des colloques, séminaires, invitations, prix	35
9	Bibliographie	36

1 Composition de l'équipe

Responsable scientifique

Jocelyne Erhel [DR Inria]

Assistante de projet

Evelyne Livache [TR Inria]

Personnel Inria

Philippe Chartier [CR, avec le projet Sydoco de janvier à décembre 2001]

Erwan Faou [CR, depuis octobre 2001]

Bernard Philippe [DR]

Personnel Université de Rennes I

Frédéric Guyomarc'h [ATER, Ifsic, depuis le 1^{er} septembre 2000]

Chercheur invité

Édouard Canot [CR CNRS, LEGI, Grenoble, depuis octobre 2000]

Ingénieur associé

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

Chercheurs doctorants

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

Dany Mezher [co-tutelle avec l'université de Beyrouth, Liban, du 1^{er} octobre 1999 au 30 septembre 2001]

Claude Tadonki [co-tutelle avec l'université de Yaoundé, Cameroun, du 1^{er} octobre 1999 au 30 juin 2001, en collaboration avec le projet Cosi]

Collaborateurs extérieurs

Michel Crouzeix [professeur, université de Rennes 1]

Haïscam Abdallah [maître de conférences, université de Rennes 2, depuis janvier 2000]

2 Présentation et objectifs généraux

Mots clés : calcul scientifique, algèbre linéaire, moindres carrés, valeurs propres, équations différentielles, hamiltoniens, 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 différentiel, projection, système hamiltonien, système réversible, méthode générale linéaire, méthode symplectique, méthode 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*

$$\begin{cases} y'(x) = f(y(x)), \\ y(x_0) = y_0, \end{cases} \quad \text{ou} \quad \begin{cases} y'(x) = f(y(x), z(x)), & y(x_0) = y_0, \\ 0 = g(y(x)), & z(x_0) = z_0. \end{cases} \quad (1)$$

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 R^m , issus typiquement de la discrétisation d'une équation aux dérivées partielles. Dans une telle situation, m peut être très grand et le problème est très souvent «raide». En clair, il est fort probable que la résolution numérique se heurte à des problèmes de stabilité et qu'il soit nécessaire de recourir à une méthode implicite, donc d'un coût de calcul potentiellement prohibitif. Face à cette situation, l'usage des méthodes de différentiation rétrograde s'est généralisé, en raison de leur quasi-optimalité en terme de coût par pas. Il reste que ces méthodes souffrent d'un déficit de stabilité, auquel les codes courants tels DASSL ^[BCP89] ou Vode remédient par l'utilisation de méthodes d'ordre inférieur à 2. Les méthodes "Singly-Implicit Runge-Kutta" (SIRK) s'affranchissent partiellement de cette difficulté. Rappelons qu'une méthode de Runge-Kutta est définie par une matrice de coefficients A et un vecteur de poids b . La propriété fondamentale des méthodes SIRK ^[Bur78] est la suivante : la matrice de coefficients A possède une seule valeur propre λ de multiplicité s . Ainsi, si J est la jacobienne $m \times m$ du système différentiel, la décomposition LU (lower-upper) de la matrice

-
- [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. BRENNAN, 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.

$(I_s \otimes I_m - hA \otimes J)$, 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 :

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

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

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

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

3.1.2 Équations algébro-différentielles

Ce sont des équations du type

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

où l'on suppose que $g_y f_z$ est inversible dans un voisinage de la solution exacte $(y(x), z(x))$. Cette hypothèse assure qu'il est possible de 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 Leimkuhler ^[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]

$$\begin{cases} p'(x) &= -\frac{\partial H}{\partial q}(x), & p(x_0) = p_0, \\ q'(x) &= \frac{\partial H}{\partial p}(x), & q(x_0) = q_0, \end{cases}$$

-
- [GGL85] C. GEAR, G. GUPTA, B. LEIMKUHNER, « 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 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 celle 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. Φ est dite symplectique si et seulement si

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

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

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

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

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

Notons que pour une méthode non symplectique, on a

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

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

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 ρ 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 ρ :

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

Les méthodes dites *symétriques* satisfont une propriété similaire. La fonction flot numérique φ_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 Δ 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 $A \in R^{N \times N}$ et un vecteur $b \in R^N$; on cherche $x \in R^N$ 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 $A \in R^{N \times M}$ et un vecteur $b \in R^N$; on cherche $x \in R^M$ 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 R^N dans R^N ; on cherche à résoudre l'équation

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

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 systèmes 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 occurrence. De plus, cette opération se parallélise bien.

Dans cette famille, les méthodes de projection de Krylov sont les plus étudiées actuellement

[DER86] I. DUFF, A. ERISMAN, J. REID, *Direct Methods for Sparse Matrices*, Oxford Science Publications, 1986.

[Saa95b]. Elles sont définies par le sous-espace de Krylov

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

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

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

et la condition de Petrov-Galerkin

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

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 :

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

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.

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

3.2.3 Accélération de convergence

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

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

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

Le preconditionnement 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

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

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

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

Une autre approche est un preconditionnement par déflation, défini par

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

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 preconditionnée restreinte à $\text{vect}(U)$ est l'identité et son spectre sur $\text{vect}(U)^\perp$ est le spectre de A privé des valeurs propres associées à U , de sorte que le problème est ramené à une résolution sur $\text{vect}(U)^\perp$. 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 preconditionnement 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.

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

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

3.2.4 Problèmes non linéaires

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

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

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

Alors que la convergence locale de Newton est quadratique, donc très rapide, celles de Newton modifié et Newton inexact sont linéaires, au mieux super-linéaires donc plus lentes. En revanche, 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, pseudo-spectre, conditionnement, intervalle, arithmétique d'intervalles.

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.

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.

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.

[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.

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

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

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

$$Ax = \lambda x.$$

Le problème généralisé est défini par deux matrices

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

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.

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

3.3.1 Méthodes de Davidson

On se place dans le cas du calcul de quelques valeurs propres extrêmes d'une grande matrice symétrique A (ou hermitienne complexe). La méthode de Davidson est une méthode de sous-espace car elle génère pas-à-pas un système orthonormé de vecteurs V_m sur lequel on projette le problème initial afin d'obtenir des approximations des valeurs et vecteurs propres cherchés. Soit (λ, z) un couple d'éléments propres de la matrice $H_m = V_m^T A V_m$, 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 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 Pseudo-spectres

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 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 section 3.3.3).

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

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

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

3.3.3 Matrice d'intervalles

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

[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.

[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 and Technical, 1991.

à une très large surestimation de l'intervalle 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 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 un intervalle résultat surestimé.

- **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 avons développées les années précédentes 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.

La méthode étudiée cette année pour la signature d'une matrice est une méthode du type itératif.

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.*

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 s'est poursuivi en collaboration avec le projet Armor.

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

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 a contribué 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 (M. Brieu) [14].

4.2 Environnement

4.2.1 Imagerie sismique sous-marine

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.

4.2.2 Écoulement et transport de solutés en milieu poreux ou fracturé

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 et des Solides 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.

4.2.3 Érosion côtière

Une collaboration avec l'ENIT de Tunis et le projet IDOPT a pour objet la simulation des phénomènes d'érosion le long de la côte tunisienne.

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.

5.2 Résolution de systèmes différentiels

Participant : Philippe Chartier [correspondant].

Actuellement, deux logiciels sont déposés à l'APP et sont disponibles sur site ftp : Radau5M et PS63 (<http://www.irisa.fr/aladin/bibli/codes.html>).

Le code Radau5M est un solveur numérique dérivé du code Radau5 de l'université de Genève. La modification concerne les systèmes algébro-différentiels de Hessenberg d'indice 2 (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).

5.3 SCILIN : résolution itérative de systèmes linéaires avec SCILAB

Participants : Édouard Canot, Frédéric Guyomarc'h, Emeric Martin, Bernard Philippe [correspondant].

Résumé : *SCILIN est une boîte à outils pour la résolution de grands systèmes linéaires creux dans l'environnement SCILAB (logiciel développé par le projet Meta-lau). SCILIN intègre les méthodes itératives classiques de résolution, la construction de préconditionnements à partir des factorisations incomplètes et la génération de matrices creuses.*

Le noyau de l'environnement SCILAB permet de manipuler des matrices de type creux et de les factoriser pour permettre la résolution directe de systèmes linéaires. La boîte à outils SCILIN incorpore toutes les méthodes itératives classiques de résolution (Jacobi, SOR, CG, GMRES, BiCG, etc.) Le module correspondant a été réalisé en prenant pour base l'ensemble `templates` du site Netlib. Le code initial, écrit en MATLAB, a été adapté pour permettre l'appel avec un nombre variable de paramètres et pour permettre la définition de la multiplication matrice - vecteur ou de préconditionnements par une fonction au lieu d'une matrice.

SCILIN incorpore aussi un module de préconditionnements construits par des factorisations incomplètes. Le travail a consisté ici à définir une interface en C à la bibliothèque SPARSKIT développée en FORTRAN par Y. Saad à l'université de Minneapolis.

Enfin, un troisième module permet de disposer de matrices creuses de test. D'une part, des fonctions de lecture et d'écriture ont été définies pour interfacer la bibliothèque MatrixMarket de matrices creuses. D'autre part, des procédures de SPARSKIT ont été interfacées.

Le code a été réalisé dans le cadre de l'accueil d'Emeric Martin, en tant qu'ingénieur associé.

SCILIN est disponible à l'adresse <http://www.irisa.fr/aladin/codes/SCILIN/>.

Il doit être intégré dans une prochaine version du noyau de SCILAB.

5.4 PPAT : suivi de lignes de niveaux et calcul de pseudo-spectres

Participants : Dany Mezher, Bernard Philippe [correspondant].

Résumé : *PPAT signifie Parallel PATH following software. C'est un logiciel qui permet de suivre le contour de lignes de niveaux d'une fonction de C dans R^+ sur un réseau de stations de travail. La version actuelle est spécialisée pour la détermination de pseudospectres. Le logiciel repose sur des bibliothèques du domaine public. Il a été réalisé en commun entre l'université Saint-Joseph de Beyrouth et le projet Aladin.*

Le logiciel PPAT utilise l'algorithme de suivi de lignes de niveaux développé par le projet Aladin. Il est appliqué au calcul de la limite du pseudo-spectre d'une matrice de grande taille. Voir section 6.3.1.

L'algorithme est parfaitement fiable : il peut dépasser les singularités éventuelles de la ligne sans difficultés et il offre une garantie de terminaison même en présence d'erreurs d'arrondi. Son organisation en tâches quasiment indépendantes offre une grande granularité pour le parallélisme, permettant d'atteindre de bonnes accélérations sur des architectures parallèles. L'outil permet de tracer plusieurs lignes de niveau indépendamment et peut aussi segmenter une ligne de niveau en un ensemble de tranches calculées simultanément, ce qui augmente le degré de parallélisme. L'utilisateur utilise une interface graphique pour piloter l'application ; cette interface intègre toutes les fonctionnalités graphiques et de contrôle nécessaires au calcul et au tracé du pseudo-spectre.

L'application a été développée pour le calcul de pseudo-spectres mais elle peut servir, moyennant de faibles modifications, à tracer les lignes de niveau de toute fonction continue de C dans R^+ .

Le logiciel est disponible à l'adresse <http://www.irisa.fr/aladin/codes/PAT/>.

5.5 Atelier Aquarels pour la qualité numérique

Participants : Jocelyne Erhel [correspondant], Bernard Philippe.

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. Des exemples d'utilisation sont décrits dans [13].

6 Résultats nouveaux

6.1 Équations différentielles ordinaires ou algébriques

Résumé : *L'application des méthodes DIMSIM (voir 3.1.1) 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 l'an passé. Son extension au cas de l'indice trois pose des difficultés théoriques importantes. Le cas de la projection symétrique est désormais finalisé. Enfin, la collaboration avec l'action*

Sydoco 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. Nous avons continué notre travail sur l'application des méthodes DIMSIM aux systèmes algébro-différentiels. Il est connu depuis longtemps, et des travaux antérieurs le démontrent, que les méthodes DIMSIM sont parfaitement adaptées à ce type de système. L'objectif de notre étude est de définir et d'estimer l'erreur locale, qui est de nature différente de celle des systèmes purement différentiels, afin de rendre ces techniques applicables. 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, commencé l'an passé, est toujours en cours.

6.1.2 Méthodes pseudo-symétriques

Participants : Philippe Chartier, Michel Crouzeix.

Éric Lapôtre ayant mis un terme à sa thèse avant sa soutenance, le travail entrepris sur les méthodes pseudo-symétriques a été interrompu. L'ensemble des travaux effectués a cependant donné lieu à un rapport INRIA en cours de publication.

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 Sydoco), nous avons étudié l'application de schémas adaptés au cas où les variables d'état sont régies par des équations algébro-différentielles. Ce travail fait l'objet d'un article soumis et disponible sous forme de rapport INRIA [29].

6.1.4 Méthodes post-projetées pour les équations algébro-différentielles d'indices 2 et 3

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 [15]. 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. Ces différentes techniques sont maintenant étudiées dans le cas des équations algébro-différentielles d'indice 3.

6.1.5 Invariants numériques d'une méthode de Runge-Kutta

Participant : Philippe Chartier.

En tentant d'interpréter géométriquement le résultat de convergence, 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. La principale difficulté réside dans l'impossibilité d'obtenir un développement de l'invariant convergent. Il faut donc tronquer ce développement de manière "optimale". Ces travaux sont effectués en collaboration avec A. Murua et R. Chan.

6.2 Problèmes linéaires et non linéaires

Résumé : *Nous avons poursuivi l'étude sur la régularisation de problèmes aux moindres carrés mal conditionnés. Nous avons démarré une étude sur les problèmes inverses en électrocardiographie. Nous avons poursuivi la conception d'algorithmes fiables pour la simulation d'un écoulement en milieu poreux. Nous avons démarré la conception d'algorithmes fiables pour la simulation des phénomènes de diffusion et de dispersion en milieu poreux.*

6.2.1 Régularisation de systèmes mal conditionnés

Participants : Jocelyne Erhel, Frédéric Guyomarc'h.

En collaboration avec Y. Saad de l'université de Minneapolis, 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, 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.

Ce travail a été présenté à une conférence, il est rédigé et soumis. [30, 24].

6.2.2 Problèmes inverses en électrocardiographie

Participants : Édouard Canot, Jocelyne Erhel.

Les biosignaux recueillis à la surface du corps sont une projection de l'activité électrique du muscle cardiaque à travers les tissus de propagation (poumons, os, muscles, ..). Cette projection est atténuée ou lissée, c'est-à-dire de faible résolution par rapport aux potentiels épicaudiques. L'objectif général des problèmes inverses est d'extraire au mieux l'information obtenue à partir de capteurs de surface afin de reconstruire les événements électriques en profondeur. Nous avons démarré une étude pour résoudre ce type de problème inverse par des méthodes de régularisation.

Nous avons choisi de représenter l'activité électrique cardiaque par une modélisation du potentiel épicaudique, défini par une fonction $FC(x, t)$. Le modèle définit les lois de propagation du potentiel électrique avec des conditions aux limites sur l'épicaud et le thorax. Le problème inverse consiste à calculer le potentiel $FC(x, t)$ à partir de mesures du potentiel à la surface du thorax, modélisées par la fonction $FT(x, t)$.

Pour simplifier le démarrage de l'étude, nous avons considéré un milieu homogène et isotrope. Par ailleurs, il est licite de considérer une propagation instantanée des signaux électriques à travers les tissus, parce que le temps caractéristique de l'activité cardiaque (de l'ordre de la seconde) est très grand devant le temps caractéristique que met l'onde électromagnétique à parcourir la distance cœur-thorax. La répartition électrostatique du potentiel étant gérée par une équation de Laplace, il est naturel de s'orienter vers la méthode des intégrales de frontières, qui permet de ne mailler que le contour du domaine de calcul. Une discrétisation linéaire par morceaux (ordre 1) a été choisie.

À chaque instant t , le problème discrétisé en espace s'écrit sous la forme

$$Ax(t) = B(y(t) + e(t)),$$

où $x(t)$ est le potentiel épicaudique recherché, $y(t)$ est la mesure du potentiel thoracique, $e(t)$ est l'erreur dans la mesure, A et B sont des matrices issues de la discrétisation d'intégrales sur les frontières épicaud et thorax.

Nous avons considéré le problème simplifié $\min_{x(t)} \|Ax(t) - z(t)\|$, que nous avons résolu en chaque instant t par la méthode de régularisation TSVD (Truncated Singular Value Decomposition).

Ce travail a fait l'objet du stage de DEA de Mohamed Hayek. La régularisation en espace est efficace (pour un instant donné), mais la reconstruction temporelle en chaque point reste sujette à des oscillations.

Nous avons ensuite considéré une régularisation temporelle, proposée dans l'article [GH98]. Cette fois, la reconstruction temporelle est nettement améliorée. Ce travail a fait l'objet du stage de magistère de Erwan Deriaz.

Nous poursuivons cette étude en considérant le cas généralisé (matrice B). Ce travail se fait en collaboration avec Erricos Kontoghiorghes, de l'université de Neuchâtel, Suisse.

6.2.3 Simulation d'un écoulement et du transport de solutés en milieu poreux

Participants : Édouard Canot, Jocelyne Erhel, Hussein Hoteit, Bernard Philippe.

La modélisation numérique est un outil essentiel dans 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 et des Solides (IMFS) de l'université de Strasbourg sur ce thème. L'IMFS 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'est pas conservé, ce qui induit sous certaines hypothèses un résultat de calcul avec des pressions négatives. Cet effet est indépendant de l'intégrateur en temps choisi. Nous avons proposé différentes méthodes numériques pour remédier à cette difficulté. Ce travail a été présenté à une conférence, il est rédigé et soumis. [32, 26].

Dans un deuxième temps, nous avons comparé la qualité numérique de 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 a été présenté à une conférence, il est rédigé et soumis. [31, 25].

Nous disposons maintenant d'un logiciel fiable pour le calcul de l'écoulement. Dans la partie suivante de notre travail, nous avons étudié le problème de transport de polluants en milieux poreux. Ce problème est modélisé par une équation de convection-dispersion. Dans cette équation figure la vitesse de l'écoulement qui est calculée au préalable.

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. Nous

[GH98] F. GREENSITE, G. HUISKAMP, « An Improved Method for Estimating Epicardial Potentials from the Body Surface », *IEEE Transactions on Biomedical Engineering* 45, 1, 1998, p. 98–104.

avons choisi de discrétiser le terme convectif et le terme dispersif par les méthodes des éléments finis discontinus et mixtes (ou mixtes hybrides), respectivement.

Les éléments finis discontinus sont couplés à un schéma de limitation de pente. Nous avons conçu un algorithme efficace du calcul des limiteurs, basé sur l'algorithme général des contraintes actives (voir par exemple [Bjö96], page 198).

Nous avons appliqué notre logiciel de convection-dispersion aux simulations proposées par l'ANDRA dans le cadre des exercices Couplex (<http://www.andra.fr/fr/actu/archi-0030.htm>). Voir section 7.1.1.

6.3 Problèmes aux valeurs propres

Résumé : *Les recherches d'outils pour un calcul fiable de valeurs propres se poursuivent par la définition de nouveaux algorithmes et logiciels pour la prise en compte de données imprécises. Dans le cas où la matrice définissant 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. Une étude a été aussi menée sur le calcul des éléments propres d'un opérateur de Schrödinger en dimension infinie.*

6.3.1 Calcul des pseudo-spectres d'une matrice

Participants : Dany Mezher, Bernard Philippe.

Nous avons terminé 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 bisection appliqué en des points d'un maillage du plan complexe par des triangles équilatéraux [9, 16]. 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 [17]. Une interface graphique permet de piloter la construction de la courbe et son affichage [27].

Le logiciel PPAT implémente l'algorithme de suivi de lignes de niveaux, appliqué au calcul des pseudo-spectres d'une matrice. Il s'agit d'une version parallèle, avec une interface homme-machine. Voir section 5.4.

L'évaluation de la fonction en chaque point où elle est invoquée provoque le calcul de la plus petite valeur singulière d'une matrice. Lorsque la matrice peut être stockée comme une matrice pleine, l'algorithme est celui de la décomposition aux valeurs singulières (SVD), mais lorsque la matrice n'est connue que comme un opérateur (matrice creuse ou programme), on a recours aux méthodes itératives. Nous comparons actuellement différentes versions des méthodes de Lanczos, de Davidson et de Minimisation de la Trace. Ces méthodes permettent par exemple de calculer la plus petite valeur singulière d'une matrice complexe d'ordre 3×10^4 et de conditionnement 10^4 .

[Bjö96] A. BJÖRCK, *Numerical methods for least-squares problems*, SIAM, 1996.

6.3.2 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 prouvant 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, écrit en Matlab avec le module de la bibliothèque d'arithmétique d'intervalles développé par S. Rump à l'université de Hambourg, a été complété.

Ce travail a été réalisé en collaboration avec E. Kamgnia, de l'université de Yaoundé, Cameroun.

6.3.3 Calcul des valeurs propres d'un opérateur de dimension infinie

Participants : Philippe Chartier, Bernard Philippe.

Ce travail a été réalisé en collaboration avec George Moustakides, du projet Sigma2.

Le laboratoire SIMPA de l'université de Rennes 1, spécialisé en physique quantique, nous a proposé de déterminer les valeurs propres d'un opérateur de Schrödinger pour une situation particulière. Il s'agit d'un opérateur de dimension infinie, caractérisé par une matrice infinie tridiagonale par blocs, définie par sa k -ème ligne de blocs

$$[A \quad D + krI \quad A^T] \quad (2)$$

où $k \in \mathbb{Z}$.

Nous avons donc défini un algorithme pour calculer les valeurs propres de cet opérateur. Pour calculer l'ensemble des éléments propres, nous avons remplacé, à l'aide d'une transformation de Fourier, les récurrences sous-jacentes, par une équation différentielle sur des blocs. Nous avons ensuite choisi les intégrateurs les plus efficaces qui conservent la propriété unitaire du flot à déterminer.

Ce travail a été présenté au workshop du groupe de travail ERCIM "matrix computations and statistics" (voir section 7.2.1). Il est en cours de rédaction.

6.4 Suivi d'interfaces fluides par la méthode des intégrales de frontières

Résumé :

Pour certains cas d'écoulements fluides (peu visqueux ou impulsionsnels), on peut considérer l'écoulement comme étant irrotationnel, c'est-à-dire dérivant d'un potentiel. Par la deuxième formule de Green, on est ramené à une équation intégrale sur le contour du domaine. L'avantage est immédiat pour les problèmes impliquant un domaine s'étendant à l'infini, puisqu'on n'a besoin de mailler que la frontière du domaine de calcul.

Par ailleurs, une méthode Lagrangienne (suivi de marqueurs attaché à une interface) permet de suivre l'évolution temporelle d'une surface libre. Cette approche,

alternant méthode Eulérienne et Lagrangienne a donné lieu à de nombreuses applications. Son principal avantage est la précision de la représentation de la position de l'interface. Il reste néanmoins des problèmes liés, entre autres, à la stabilité des schémas temporels (habituellement de type Runge-Kutta).

6.4.1 Rebond d'une bulle de gaz sur une paroi solide

Participant : Édouard Canot.

Ce travail est effectué en collaboration avec M. El Hammoui (université de Fès, Maroc) et L. Davoust (LEGI, Grenoble).

Dans le domaine de la détection des petites bulles de gaz (industries chimiques, secteurs pétrolier et nucléaire,...) les mesures de leur vitesse par une sonde optique est souvent biaisée par le rebond de certaines d'entre elles sur la tête plane du capteur intrusif; ces bulles rebondissent parce que les forces de tension superficielle qui agissent à l'interface gaz/liquide leur donnent de l'élasticité. Comprendre le mécanisme de rebond de manière fine permet de fiabiliser les mesures en discriminant les bulles qui rebondissent par un traitement approprié du signal optique fourni par le capteur.

La difficulté du problème vient du drainage du film liquide qui provient de l'écrasement de la bulle contre la paroi solide. Certains codes d'éléments finis échouent, parce qu'il faut résoudre simultanément deux zones d'écoulements ayant des dimensions caractéristiques très différentes.

Notre contribution est une approche originale qui consiste à coupler un modèle de drainage (analytique, entre deux plans parallèles) avec notre calcul numérique potentiel; ce modèle intègre alors l'écoulement très visqueux dans un film d'épaisseur très mince par rapport au rayon de la bulle. Cette approche, bien qu'approximative, a permis de simuler avec succès le rebond d'une bulle sous une paroi horizontale, dans une configuration bidimensionnelle. La figure 1 ci-après montre un exemple d'évolution.

Ce travail est rédigé et soumis. Il sera nécessaire à court terme de modifier le code pour aborder les configurations 3-D axisymétriques.

6.4.2 Éclatement d'une bulle de gaz à une surface libre

Participant : Édouard Canot.

Ce travail est effectué en collaboration avec S-C. Georgescu (université de Bucarest, Roumanie) et J-L. Achard (LEGI, Grenoble).

L'éclatement, à la surface de la mer, de petites bulles de gaz remontant en surface participe au transfert de pollution mer/atmosphère. En effet, dû au brassage des vagues, les bulles d'air piégées dans la mer attirent à leur surface, par un procédé physico-chimique, tous les polluants agissant comme des tensio-actifs. Une fois remontées à la surface, ces bulles éclatent et projettent dans l'atmosphère de très petites gouttes de jet contaminées par les polluants, qui sont elles-mêmes, en partie, transportées par les courants ascendants atmosphériques.

Le phénomène d'éclatement, bref donc impulsif, est bien décrit par un modèle potentiel visqueux. Pour mener à bien la simulation numérique de ce phénomène, il a été nécessaire de

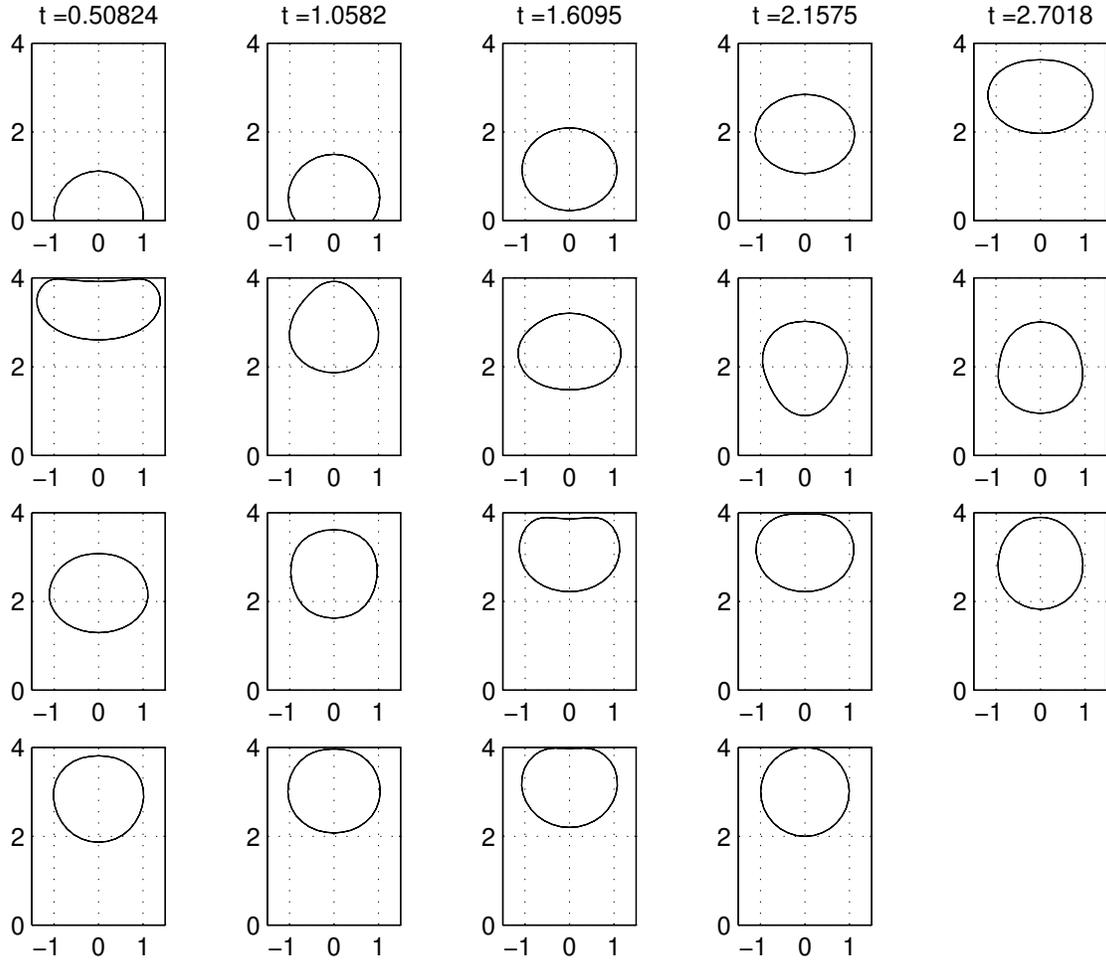


FIG. 1 – Rebond d’une bulle sur une paroi solide (position de la paroi : $z = 4$) – Rayon équivalent de la bulle : $R_0 = 1$ mm – Liquide : eau pure – [intervalle de temps quasi-constant entre chaque vue]

gérer des coupures artificielles d’interfaces afin de permettre de poursuivre le calcul au delà du pincement du jet donnant naissance à des gouttes individuelles. La figure 2 montre en particulier que les gouttes éjectées (quatre sur la présente figure) ne sont pas toutes de la même taille.

Ce travail a été présenté à une conférence [20]. Il est rédigé et soumis.

6.5 Synthèse d’ordonnements parallèles

Participant : Claude Tadonki.

Résumé :

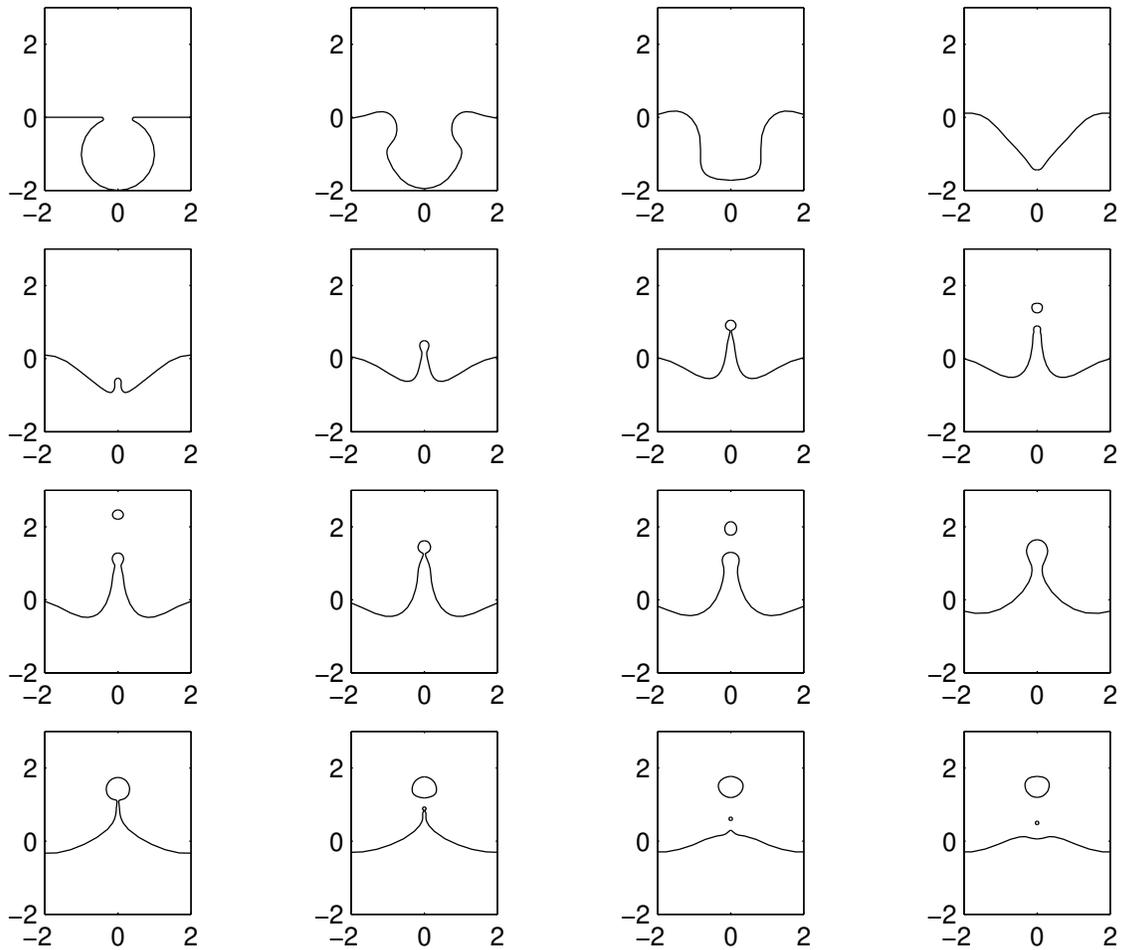


FIG. 2 – Évolution après éclatement d'une bulle : formation de gouttes de jet – Rayon initial de la bulle : $R_0 = 1$ mm – Liquide : eau pure

Après la recherche d'algorithmes parallèles pour le calcul tensoriel, le travail s'est porté sur la recherche de l'ordre d'exécution des tâches d'un algorithme donné pour une exécution parallèle.

Nous proposons une méthode qui dérive systématiquement un ordonnancement dès lors que des hypothèses sur la structure globale du graphe de dépendances sont satisfaites. Les deux principaux avantages de l'approche sont la tolérance aux pannes et le partitionnement direct. [10, 19]

6.6 Sensibilité de modèles markoviens de réseaux de télécommunications

Participant : Haïscam Abdallah.

Ce travail s'est effectué en collaboration avec Moulaye Hamza, doctorant du projet Armor. M. Hamza a soutenu une thèse de doctorat, en juillet 2001, à l'université de Rennes I.

La performance de systèmes et réseaux informatiques et la sensibilité de certaines mesures s'évaluent souvent en résolvant des systèmes différentiels markoviens sur un intervalle de temps donné $[0, t]$. En ce qui concerne la sensibilité, il s'agit de calculer la dérivée partielle des distributions instantanée et cumulative par rapport à un paramètre donné. Cette étude se heurte au problème de la complexité croissante avec l'ordre M du générateur infinitésimal et avec le temps final t .

Nous avons considéré dans un premier temps des modèles pour lesquels M est de dimension raisonnable (≤ 400). Après avoir achevé l'étude de la sensibilité du vecteur des probabilités d'état instantanées, nous avons examiné la sensibilité de l'espérance de la récompense cumulée sur $[0, t]$. [28]

Pour des tailles M très grandes, la méthodologie des réseaux d'automates stochastiques (RAS) a l'avantage d'éviter la construction du générateur infinitésimal. L'approche RAS permet aussi d'exploiter les différents algorithmes relatifs à une multiplication vecteur-matrice où la matrice est un produit tensoriel de matrices de dimensions modestes.

En vue de paralléliser la méthode itérative (stable) de l'uniformisation standard (SU) pour calculer la sensibilité de mesures instantanées et cumulatives, nous avons maintenu une somme tensorielle dans l'expression du descripteur. Ensuite, nous avons étendu un algorithme développé au sein de l'équipe au calcul d'un produit vecteur-matrice où la matrice est une somme tensorielle de matrices de petites tailles. L'implémentation de l'algorithme parallèle relatif à la méthode SU est faite sur une machine CRAY T3E de l'IDRIS. En considérant un réseau ATM avec $M = 2^{20} = 1048576$ et $t = 10^4$, l'efficacité du calcul de la sensibilité sur 128 processeurs avoisine 80%. [11]

7 Actions régionales, nationales et internationales

7.1 Actions nationales

7.1.1 Défis de l'ANDRA - simulation du transfert de déchets radioactifs

Participants : Jocelyne Erhel, Bernard Philippe, Hussein Hoteit.

Résumé : *Nous avons participé aux exercices Couplex proposés par l'ANDRA. Il s'agit de simuler numériquement le transfert de radionucléides depuis un éventuel stockage profond de déchets radioactifs. Nous avons obtenu un prix pour Couplex 1 et poursuivons l'étude sur Couplex 2.*

Voir <http://www.andra.fr/fr/actu/archi-0030.htm>

Pour mener à bien l'étude du stockage de déchets radioactifs, l'Andra mène un ensemble de modélisations et de simulations. Couplex est un ensemble de trois exercices pour simuler les transferts (déplacements) de radionucléides (éléments radioactifs) depuis un éventuel stockage en formation géologique (500 mètres de profondeur), jusqu'à la surface.

Couplex 1 est une simulation simplifiée, à deux dimensions, dans le milieu géologique. Le stockage est représenté par un rectangle homogène ; des radionucléides en sont relâchés régulièrement au cours du temps et migrent à travers le milieu géologique.

En collaboration avec l'IMFS de Strasbourg, nous avons participé à Couplex 1. Nous avons obtenu le prix attribué par le comité scientifique de Couplex aux trois meilleures contributions. Nous avons présenté nos résultats au workshop organisé par l'ANDRA, à Marseille, en juillet 2001.

Nous participons maintenant à l'exercice Couplex 2, qui se concentre sur le stockage. Il s'agit de simuler de façon plus précise le relâchement des radionucléides qui pourraient s'échapper des colis de déchets.

7.1.2 Action bioinformatique - dynamique des populations

Participants : Jocelyne Erhel, Bernard Philippe.

Résumé : *action BioInformatique - modèles et logiciel d'analyse de suivi individuel en dynamique des populations*

Coordinateur : *CEFE/CNRS UPR 9056, Montpellier*

Partenaires : *université de Montpellier 2, université de Paul Sabatier (Toulouse), université de Kent*

Durée : *de 2001 à 2002*

Les méthodes d'estimation des paramètres démographiques par capture-recapture permettent de confronter données et modèles en dynamique des populations. Cette action a pour objectif de développer une panoplie de modèles statistiques de suivi individuel et un logiciel d'ajustement de ces modèles à des données. Les problèmes numériques soulevés par l'estimation des paramètres sont complexes, par exemple des défauts d'identification et l'existence de minima locaux dans l'estimation du maximum de vraisemblance.

Le projet Aladin participe à l'étude des aspects numériques et à l'élaboration d'un logiciel fiable. En particulier, il faut développer un logiciel permettant de calculer le rang numérique d'une matrice.

7.2 Actions européennes

7.2.1 Groupe de Travail ERCIM - Matrix Computations and Statistics

Participants : Jocelyne Erhel, Bernard Philippe.

Résumé : *Groupe de travail ERCIM, accepté en 2001.*

Titre : *Matrix Computations and Statistics*

Membres : *26 chercheurs de 13 pays européens.*

Il s'agit de faire rencontrer dans ce groupe de travail des statisticiens et des spécialistes d'algèbre linéaire.

Le groupe de travail organise deux fois par an un workshop. Le premier a eu lieu à Genève en mai et le prochain aura lieu à Rennes en février 2002. La gestion du groupe de travail est assurée par B. Philippe et E. Kontoghiorghe.

<http://www.irisa.fr/aladin/wg-statlin/>

7.3 Actions internationales

7.3.1 Projet INRIA/NSF - préconditionnements robustes et parallèles

Participants : Jocelyne Erhel, Bernard Philippe.

Résumé : *Action INRIA/NSF, acceptée en 2001*

Titre : *Préconditionnements robustes et parallèles : un moyen pour combiner méthodes directes et itératives de résolution de systèmes*

Partenaires et leurs correspondants : *Y. Saad (U. Minneapolis), R. Bramley (U. Indiana), E. Ng (Lawrence Berkeley Lab.), B. Philippe (projet Aladin), F. Desprez (projet Remap), P. Amestoy (ENSEEIH, Toulouse), J. Roman (Labri, U. de Bordeaux 1)*

Le projet Aladin recherche avec Y. Saad des préconditionnements efficaces qui permettent d'accélérer les méthodes itératives de résolution. Pour les problèmes aux moindres carrés mal conditionnés, la recherche porte également sur des procédés de régularisation.

Avec les autres partenaires, le projet Aladin étudie aussi la factorisation QR des matrices creuses de grande taille. Les axes de travail concernent la détermination à la volée du rang d'une matrice et la construction éventuelle d'une base de son noyau. La parallélisation de la procédure, déjà abordée dans la thèse de D. Mezher, se poursuit ici (voir section 6.3.1).

7.3.2 Projet CAMEREAU - hydrogéologie au Cameroun

Participant : Bernard Philippe.

Résumé : *Action CAMPUS du MAE acceptée en 2000 pour une durée de 18 mois avec renouvellement.*

Titre : *Une action de recherche et de formation universitaire en hydrologie au Cameroun.*

Partenaires : *Université de Yaoundé I, Service de la Météorologie Nationale à Douala, Projet Aladin.*

Le travail est réparti en trois actions. Les deux premières concernent la simulation numérique d'un écoulement souterrain dans un quartier de Yaoundé et l'acquisition des données nécessaires à la simulation.

Le projet Aladin est engagé dans la troisième action qui est chargée de définir une procédure de lissage et d'interpolation de relevés de précipitations au Cameroun. L'approche retenue se base sur une méthode développée à l'université du Queensland à Brisbane, au centre ACMC (Advanced Computational Modelling Center, directeur K. Burrage, membre R-B. Sidje). Il s'agit d'une prolongation de la coopération avec le centre ACMC, qui est effective depuis 1994.

Ce travail a fait l'objet de la visite d'E. Kamgnia (université de Yaoundé I, Cameroun) et du stage de DEA de M. Nyamsi (université de Yaoundé I), effectué au sein du projet Aladin. Voir section 7.3.5.

7.3.3 Action intégrée avec la Tunisie - simulation d'érosion côtière

Participants : Édouard Canot, Bernard Philippe.

Résumé : *projet STIC INRIA/TUNISIE Érosion de la côte*

Partenaires : *ENIT, Tunis et projet Idopt*

Durée : *2001-2002.*

Les projets Aladin et Idopt de l'Inria sont engagés dans cette action. Il s'agit de mettre en œuvre une méthode numérique afin de simuler l'érosion de la côte tunisienne.

Nous avons effectué une étude bibliographique pour modéliser les phénomènes physiques importants. Nous avons en particulier consulté le "Coastal Engineering Manual", du Corps des Ingénieurs de l'armée américaine (<http://bigfoot.wes.army.mil/cem001.html>). Il en résulte la nécessité de tenir compte de la houle, qui peut créer deux phénomènes. D'une part, des courants induits, parallèles à la plage (longshore), transportent des sédiments d'un point de la plage à un autre ; d'autre part, une érosion offshore, due au déferlement des vagues, emporte le sable de la plage vers le large. Dans une moindre mesure, l'influence du vent pourra aussi être prise en compte.

Il est prévu d'utiliser le logiciel SMS (SurfaceWater Modeling System) qui comporte différents modules de calcul : réfraction/diffraction de la houle, transport de sédiments, ...

Ce travail a fait l'objet de la visite de N. T. Tlatli (université de Tunis), et du séjour à Tunis d'É. Canot et de B. Philippe. Voir sections 7.3.5 et 7.3.4.

7.3.4 Séjours à l'étranger

- P. Chartier a effectué une visite à l'université de Genève, Suisse, du 5 au 23 mars 2001. Il a travaillé, avec notamment E. Hairer, sur les systèmes hamiltoniens et les systèmes algébro-différentiels.

- F. Guyomarc'h a effectué un séjour à l'université d'Umea, Suède, du 15 septembre au 20 décembre 2001. Il a travaillé sur la résolution de problèmes aux valeurs propres généralisés.

- B. Philippe a effectué une visite à l'université de Purdue, Indiana, Etats-Unis, du 22 au 28 avril 2001. Il a travaillé avec A. Sameh sur la résolution de problèmes aux valeurs singulières.

- B. Philippe et É. Canot ont effectué une visite à l'université de Tunis, Tunisie, du 19 au 25 novembre 2001. Ils ont travaillé sur le projet STIC INRIA/Tunisie. Voir section 7.3.3.

7.3.5 Accueil de chercheurs étrangers

- M. El Hammoumi, de l'Université de Fès (Maroc), a effectué un séjour de trois semaines, en avril-mai 2001. Il a travaillé sur les problèmes de suivi d'interfaces. Voir section 6.4.1.

- E. Kontoghiorghes, de l'université de Neuchatel (Suisse), a effectué un séjour de 4 mois, de juin à septembre 2001. Il a créé avec le projet Aladin le groupe de travail ERCIM intitulé "Matrix Computations and Statistics", voir section 7.2.1. Il a démarré une collaboration avec le projet sur la résolution de problèmes aux moindres carrés généralisés issus de problèmes inverses en électrocardiographie, voir section 6.2.2. Il a également démarré une collaboration avec le projet sur la factorisation QR de matrices creuses. Enfin, il a poursuivi ses travaux sur des algorithmes de résolution de problèmes aux moindres carrés généralisés. En particulier, il

a étudié les modèles statistiques SUR (Seemingly Unrelated Regressions). Ce travail est rédigé dans un article accepté, quatre articles soumis et un article en préparation.

– F-Z. Nouri, de l’université d’Annaba (Algérie), a effectué un séjour d’une semaine en juillet 2001. Elle a travaillé sur des problèmes d’interpolation de fonctions.

– C. Lubich, de l’université de Tübingen (Allemagne), a effectué un séjour d’une semaine en septembre 2001. A cette occasion, il a dispensé un cours d’une durée de 15 heures sur la théorie de Kolmogorov-Arnold-Moser.

– H. Djeuda Tchpnga, de l’université de Yaoundé (Cameroun), a effectué un séjour de 1 mois, en septembre-octobre 2001. Il a coopéré avec le projet et le département de Géosciences sur des problèmes en hydrogéologie.

– E. Kamgnia, de l’université de Yaoundé (Cameroun), a effectué un séjour de 3 mois, d’octobre à décembre 2001. Il a travaillé sur le calcul de la signature d’une matrice symétrique d’intervalles (voir section 6.3.2). Il a également travaillé sur le projet CAMEREAU et encadré le stage de DEA de M. Nyamsi (voir section 7.3.2). Enfin, en tant que membre permanent du CARI, il a participé à l’organisation du colloque Cari’2002, qui aura lieu à Yaoundé, en octobre 2002.

– N. Tlatli, de l’université de Tunis (Tunisie), a effectué un séjour d’une semaine, en octobre 2001. Elle a travaillé sur le projet STIC INRIA/Tunisie. Voir section 7.3.3.

– M. Mahboub, de l’université de Tlemsen (Algérie), a effectué un séjour de 3 mois, d’octobre à décembre 2001. Il a travaillé, en collaboration avec la cellule ASCI de l’Atelier, sur la parallélisation d’un logiciel de traitement d’images.

7.3.6 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 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).

8 Diffusion de résultats

8.1 Animation de la communauté scientifique

8.1.1 Organisation de conférences

– B. Philippe a été vice-président du comité de programme du colloque 15th ACM International Conference on Supercomputing, qui a eu lieu à Sorrento, Italie, en juin 2001. Il était chargé du secteur Algorithmes et Applications.

- B. Philippe a été membre du comité de programme du colloque EURO-PAR 2001, qui a eu lieu à Manchester, Grande-Bretagne, en août 2001.
- B. Philippe a été membre du comité de programme du colloque RENPAR 2001, qui a eu lieu à Paris, en avril 2001.
- B. Philippe, en tant que secrétaire du comité permanent de CARI, participe à l'organisation du colloque Cari'2002, qui aura lieu à Yaoundé, en octobre 2002.
- Le projet organise régulièrement un séminaire thématique sur le calcul scientifique.
<http://www.irisa.fr/aladin/seminaire.html>

8.1.2 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.

8.1.3 Divers

- P. Chartier est membre élu de la Commission d'Évaluation de l'INRIA.
- J. Erhel est secrétaire du Comité de Gestion Locale de l'AGOS de l'INRIA-Rennes.
- J. Erhel est membre élu du Comité Technique Paritaire de l'INRIA.
- B. Philippe est délégué de l'Inria aux relations avec l'Afrique Sub-Saharienne et secrétaire du comité permanent Cari.
- B. Philippe est le représentant INRIA du conseil d'administration du Cimpa, depuis janvier 2000.
- B. Philippe est président de la CUMI (Commission des utilisateurs des moyens informatiques) de l'INRIA-Rennes.
- B. Philippe est membre de la commission de spécialistes de la section 27 de l'université de Rennes I.

8.2 Enseignement universitaire

- F. Bodin (projet Caps), J. Erhel et H. Leroy (cellule ASCI, Atelier) ont organisé un cours sur les Techniques pour le Calcul Hautes Performances, dans le cadre du Pôle de Calcul Intensif de l'Ouest (PCIO), à Rennes, en février 2001.
<http://www.irisa.fr/PCIR/planCI.html>
- J. Erhel a assuré le module intitulé "calcul numérique intensif".
<http://www.irisa.fr/aladin/perso/erhel/>
- J. Erhel et É. Canot ont enseigné le cours de mathématiques appliquées (MAP) du DIIC, IFSIC, Rennes (1^{re} année).
<http://www.irisa.fr/aladin/perso/erhel/>
- J. Erhel a donné un séminaire (2 heures) destiné aux étudiants de cinquième année de l'Insa-Rennes sur le thème de la qualité numérique.
<http://www.irisa.fr/aladin/perso/erhel/>

- J. Erhel a donné un séminaire (6 heures) destiné aux étudiants de licence et maîtrise de mécanique de l'université de Rennes sur le thème du calcul scientifique.

<http://www.irisa.fr/aladin/perso/erhel/>

- J. Erhel et B. Philippe ont créé le module intitulé "Applications numériques parallèles", qui est une composante du cours de DEA sur le calcul parallèle de l'université de Yaoundé I. Ce cours est accompagné d'un support sur CD-ROM et sur Internet. Il fait partie d'un DEA multisites africain, dans le cadre du projet DIA financé par l'AUF et coordonné par P. Quinton.

<http://www.irisa.fr/dia/>

- B. Philippe a participé au lancement de l'enseignement du DEA multisites africain à l'université de Yaoundé.

- 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.

8.3 Participation à des colloques, séminaires, invitations, prix

- P. Chartier - Reversible methods of Runge-Kutta type for index-2 differential-algebraic equations

conférence invitée - National Research Symposium on Geometric Integration, Melbourne, Australie - décembre 2000.

<http://www.irisa.fr/aladin/perso/chartier/>

- P. Chartier - Reversible projected methods for index 2 DAEs

conférence invitée - SciCADE01, Vancouver, Canada - juillet-août 2001

- P. Chartier - Méthodes numériques d'intégration des systèmes hamiltoniens

conférence invitée - Ecole CEA-EDF-INRIA sur les "Méthodes numériques pour la simulation atomistique : du micro au méso", Rocquencourt, France - novembre 2001.

- E. Canot - Suivi d'interfaces par une méthode d'intégrales de frontière
université de Tunis, Tunisie - novembre 2001.

- J. Erhel - Iterative solvers for large sparse linear systems

1st workshop, ERCIM WG Matrix Computations and Statistics, Genève, Suisse - mai 2001.

<http://www.irisa.fr/aladin/wg-statlin/WORKSHOPS/GENEVA01/worshop1.html>

- J. Erhel - Least-squares polynomial filters for ill-conditioned linear systems

AIP'2001, Montecatini, Italie - juin 2001.

<http://www.irisa.fr/aladin/perso/erhel/>

- J. Erhel - Iterative solvers for large sparse linear systems

3e cycle Romand de mathématiques, université de Neuchâtel - août 2001.

<http://www.irisa.fr/aladin/perso/erhel/>

- J. Erhel - précision arithmétique sur les grands systèmes

journées sur le calcul scientifique massivement parallèle, Orsay - novembre 2001.

- H. Hoteit - Numerical Reliability and Time Requirements for the Mixed Methods Applied to Flow Problems in Porous Media
Sixth SIAM Conference on mathematical and computational issues in the Geosciences, Boulder, CO, USA - juin 2001.

<http://www.irisa.fr/aladin/perso/erhel/>

- H. Hoteit - A propos de la stabilité de la méthode des Elements Finis Mixtes
Congrès National de Mathématiques Appliquées et Industrielles, Pompadour, France - mai 2001.

<http://www.irisa.fr/aladin/perso/erhel/>

- H. Hoteit - Résultats des simulations pour le problème Couplex 1
workshop ANDRA/COUPLEX, Marseille - juillet 2001.

- G. Moustakides (et B. Philippe) - Eigendecomposition of a class of infinite dimensional tridiagonal matrices

1st workshop, ERCIM WG Matrix Computations and Statistics, Genève, Suisse - mai 2001.

<http://www.irisa.fr/aladin/wg-statlin/WORKSHOPS/GENEVA01/worshop1.html>

- B. Philippe - Parallel computation of the smallest singular values of a matrix
1st workshop, ERCIM WG Matrix Computations and Statistics, Genève, Suisse - mai 2001.

<http://www.irisa.fr/aladin/wg-statlin/WORKSHOPS/GENEVA01/worshop1.html>

- B. Philippe - Calcul de la plus petite valeur singulière d'une matrice
3e cycle Romand de mathématiques, université de Neuchâtel - Août 2001.

- B. Philippe et D. Mezher - A Graphical Tool for Driving the Parallel Computation of the Pseudospectra
ICS'2001, Sorrento, Italie, juin 2001

9 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.

Thèses et habilitations à diriger des recherches

- [9] D. MEZHER, *Calcul parallèle de pseudospectres*, Thèse de doctorat, Université de Rennes 1 et Université Saint-Joseph de Beyrouth (co-tutelle), sept 2001.
- [10] C. TADONKI, *Contributions à l'algorithmique parallèle*, Thèse de doctorat, Université de Rennes 1 et Université de Yaoundé (co-tutelle), mars 2001.

Articles et chapitres de livre

- [11] H. ABDALLAH, M. HAMZA, « On the Sensitivity Analysis of the Expected Accumulated Reward », *Performance Evaluation*, à paraître.
- [12] I. ALTAS, J. ERHEL, M. GUPTA, « High Accuracy Solution of Three-Dimensional Biharmonic Equations », *Numerical Algorithms*, à paraître.
- [13] O. BEAUMONT, J. ERHEL, B. PHILIPPE, *Enabling technologies for computational science*, Kluwer Academic Publishers, Boston, 2000, ch. Aquarels : a problem-solving environment for validating scientific software.
- [14] M. BRIEU, F. DEVRIES, J. ERHEL, « Algorithme parallèle non incrémental pour la simulation de l'évolution d'endommagements en milieux hyperélastiques », *Calculateurs parallèles, réseaux et systèmes répartis 13*, 2001, p. 83–106.
- [15] R. CHAN, P. CHARTIER, A. MURUA, « Post-projected Runge-Kutta methods for index-2 differential-algebraic equations », *Applied Numerical Mathematics*, à paraître.
- [16] D. MEZHER, B. PHILIPPE, « Parallel Computation of Pseudospectra of large matrices », *Parallel Computing, Special issue on Parallel Matrix Algorithms and Applications*, à paraître.
- [17] D. MEZHER, B. PHILIPPE, « PAT - A Reliable Path Following Algorithm », *Numerical Algorithms*, à paraître.
- [18] 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.
- [19] C. TADONKI, « Méthodologie de Synthèse d'Ordonnements Parallèles par Reproduction Canonique », *Calculateurs parallèles, réseaux et systèmes répartis*, à paraître.

Communications à des congrès, colloques, etc.

- [20] E. CANOT, S.-C. GEORGESCU, J.-L. ACHARD, « Bursting air bubble at a free surface : Re-gridding influence on the interface evolution », in : *Workshop on Numerical Simulations for Fluid Mechanics and Magnetic Liquids*, I. Anton, V. Ancusa, R. Resiga (éditeurs), Timisoara, Roumanie, mai 2001.
- [21] P. CHARTIER, « Reversible methods of Runge-Kutta type for index-2 differential-algebraic equations », in : *National Research Symposium on Geometric Integration*, Melbourne, Australie, décembre 2000.
- [22] P. CHARTIER, « Méthodes numériques d'intégration des systèmes hamiltoniens », in : *Méthodes numériques pour la simulation atomistique : du micro au méso*, Rocquencourt, France, novembre 2001.
- [23] P. CHARTIER, « Reversible projected methods for index 2 DAEs », in : *SciCADE01*, Vancouver, Canada, juillet 2001.
- [24] J. ERHEL, F. GUYOMARC'H, Y. SAAD, « Least-squares polynomial filters for ill-conditioned linear systems », in : *Conference on Applied Inverse Problems*, Montecatini Terme, Italy, juin 2001.

- [25] H. HOTEIT, J. ERHEL, B. PHILIPPE, R. MOSÉ, P. ACKERER, « Numerical Reliability and Time Requirements for the Mixed Methods Applied to Flow Problems in Porous Media », *in : Sixth SIAM Conference on mathematical and computational issues in the Geosciences*, Boulder, CO, USA, juin 2001.
- [26] H. HOTEIT, R. MOSÉ, P. ACKERER, B. PHILIPPE, J. ERHEL, « A propos de la stabilité de la méthode des Elements Finis Mixtes », *in : Congrès National de Mathématiques Appliquées et Industrielles*, Pompadour, France, mai 2001.
- [27] D. MEZHER, B. PHILIPPE, « A Graphical Tool for Driving the Parallel Computation of the Pseudospectra », *in : Int. Conf. on Supercomputing*, ACM SIGARCH, ACM Press, Sorrento, Italie, 2001.

Rapports de recherche et publications internes

- [28] H. ABDALLAH, M. HAMZA, « Sensibilité de mesures transitoires des réseaux d'automates stochastiques : approche parallèle », *Rapport de recherche n°4190*, INRIA, juin 2001, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-4190.html>.
- [29] F. BONNANS, P. CHARTIER, H. ZIDANI, « Discrete approximation of the Hamilton-Jacobi equation for an optimal control problem of a differential-algebraic system », *Rapport de recherche n°4265*, INRIA, septembre 2001, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-4265.html>.
- [30] J. ERHEL, F. GUYOMARCH, Y. SAAD, « Least-squares polynomial filters for ill-conditioned linear systems », *Rapport de recherche n°4175*, INRIA, mai 2001, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-4175.html>.
- [31] H. HOTEIT, J. ERHEL, R. MOSÉ, B. PHILIPPE, P. ACKERER, « Numerical reliability and CPU time for the mixed methods applied to flow problems in porous media », *Rapport de recherche n°4228*, INRIA, juillet 2001, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-4228.html>.
- [32] H. HOTEIT, R. MOSÉ, B. PHILIPPE, P. ACKERER, J. ERHEL, « About the maximum principle violations of the mixed-hybrid finite element method applied to diffusion equations », *Rapport de recherche n°4227*, INRIA, juillet 2001, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-4227.html>.