

*Projet ALADIN**Algorithmes adaptés au calcul numérique
intensif**Rennes*

THÈME 4B

*R* *apport
d'Activité*

2002

Table des matières

1. Composition de l'équipe	1
2. Présentation et objectifs généraux	1
3. Fondements scientifiques	2
3.1. Équations différentielles ordinaires ou algébriques	2
3.1.1. Systèmes différentiels ordinaires	2
3.1.2. Équations algébro-différentielles	3
3.1.3. Systèmes hamiltoniens	4
3.2. Problèmes linéaires et non linéaires	5
3.2.1. Méthodes directes pour les systèmes linéaires	6
3.2.2. Méthodes itératives pour les systèmes linéaires	6
3.2.3. Accélération de convergence	8
3.2.4. Problèmes non linéaires	8
3.3. Problèmes aux valeurs propres	9
3.3.1. Méthodes de Davidson	10
3.3.2. Pseudo-spectres	10
4. Domaines d'application	10
4.1. Panorama	10
4.1.1. Télécommunications	11
4.1.2. Transport	11
4.2. Environnement	11
4.2.1. Écoulement et transport de solutés en milieu poreux ou fracturé	11
4.2.2. Érosion côtière	11
5. Logiciels	11
5.1. Activité logicielle du projet	11
5.2. Résolution de systèmes différentiels	12
5.3. SCILIN : résolution itérative de systèmes linéaires avec SCILAB	12
5.4. PPAT : suivi de lignes de niveaux et calcul de pseudo-spectres	12
5.5. Atelier Aquarels pour la qualité numérique	13
6. Résultats nouveaux	13
6.1. Équations différentielles ordinaires ou algébriques	13
6.1.1. Discrétisation en espace d'une équation différentielle ordinaire	13
6.1.2. Modèle de laser à effet Raman dans une fibre	13
6.1.3. Techniques de reparamétrisation des équations hamiltoniennes	14
6.1.4. Méthodes numériques pour la dynamique moléculaire	14
6.2. Systèmes linéaires et problèmes aux moindres carrés	14
6.2.1. Échantillonnage d'images digitales	14
6.2.2. Cartographie de données pluviométriques	14
6.2.3. Problèmes inverses en électrocardiographie	15
6.3. Modélisation du transport de solutés en milieu poreux ou fracturé	15
6.3.1. Résolution des systèmes linéaires pour la simulation d'écoulement en milieu poreux	15
6.3.2. Modélisation hydraulique de milieux poreux fortement hétérogènes	15
6.3.3. Modélisation hydraulique de milieux fracturés 3D	16
6.3.4. Transport de solutés par convection-diffusion	16
6.3.5. Transport de contaminants faiblement solubles	16
6.4. Problèmes aux valeurs propres	16
6.4.1. Plus petite valeur singulière d'une matrice	16
6.4.2. Structure canonique partielle d'un faisceau de matrices	17

6.5.	Suivi d'interfaces fluides par la méthode des intégrales de frontières	17
6.6.	Sensibilité de modèles markoviens de réseaux de télécommunications	18
7.	Contrats industriels	18
7.1.	Contrats nationaux	18
7.1.1.	ALCATEL CIT - Modélisation de laser à effet Raman	18
8.	Actions régionales, nationales et internationales	18
8.1.	Actions nationales	18
8.1.1.	GdR MOMAS - Modélisation pour la gestion de déchets nucléaires	18
8.1.2.	HydroGrid - Couplage en hydrogéologie	19
8.1.3.	Défis de l'ANDRA - simulation du transfert de déchets radioactifs	19
8.1.4.	Action bioinformatique - dynamique des populations	19
8.2.	Actions européennes	20
8.2.1.	Groupe de Travail ERCIM - Matrix Computations and Statistics	20
8.3.	Actions internationales	20
8.3.1.	Projet INRIA/NSF - préconditionnements robustes et parallèles	20
8.3.2.	Projet CAMEREAU - hydrogéologie au Cameroun	20
8.3.3.	Action intégrée avec la Tunisie - simulation d'érosion côtière	21
8.3.4.	SARIMA - Soutien à la recherche en Afrique	21
8.3.5.	Séjours à l'étranger	22
8.3.6.	Accueil de chercheurs étrangers	22
8.3.7.	Relations internationales	22
9.	Diffusion des résultats	23
9.1.	Animation de la communauté scientifique	23
9.1.1.	Organisation de conférences	23
9.1.2.	Comités de rédaction	23
9.1.3.	Divers	23
9.2.	Enseignement universitaire	23
9.3.	Participation à des colloques, séminaires, invitations, prix	24
10.	Bibliographie	24

1. Composition de l'équipe

Responsable scientifique

Jocelyne Erhel [DR Inria]

Assistante de projet

Evelyne Livache [TR Inria, jusqu'en novembre 2002]

Fabienne Cuyollaa [TR Inria, depuis novembre 2002]

Personnel Inria

Philippe Chartier [DR]

Erwan Faou [CR]

Bernard Philippe [DR]

Personnel Université de Rennes I

Frédéric Guyomarc'h [ATER (jusqu'au 31 août 2002) puis MdC (depuis le 1^{er} septembre 2002), Ifsic]

Personnel CNRS

Édouard Canot [CR]

Chercheurs doctorants

Hussein Hoteit [bourse Egide, co-encadrement avec l'IMFS, du 1^{er} octobre 1999 au 30 septembre 2002]

Hussein Mustapha [bourse fléchée ACI-GRID, co-encadrement avec le CAREN, depuis le 1^{er} octobre 2002]

Chercheur post-doctorant

Marios Fyrillas [bourse ERCIM, du 1^{er} avril 2002 au 31 décembre 2002]

Collaborateurs extérieurs

Michel Crouzeix [professeur, université de Rennes 1]

Haïscam Abdallah [maître de conférences, université de Rennes 2]

2. Présentation et objectifs généraux

Mots clés : *calcul scientifique, algèbre linéaire, moindres carrés, valeurs propres, équations différentielles, hamiltoniens, parallélisme, précision, environnement, chimie moléculaire.*

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) et de la 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 de calcul scientifique.

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, dynamique moléculaire, 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'IRMAR, le CAREN, le CERMICS, l'IMFS, l'IFREMER.

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.*

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. 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 [49][50]

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

Les vecteurs y et f sont ici dans \mathbb{R}^m , issus typiquement de la discrétisation d'une équation aux dérivées partielles. Dans une telle situation, m peut être très grand et le problème est très souvent « raide ». En clair, il est fort probable que la résolution numérique se heurte à des problèmes de stabilité et qu'il soit nécessaire de recourir à une méthode implicite, donc d'un coût de calcul potentiellement prohibitif. Face à cette situation, l'usage des méthodes de différentiation rétrograde s'est généralisé, en raison de leur quasi-optimalité en terme de coût par pas. Il reste que ces méthodes souffrent d'un déficit de stabilité, auquel les codes courants tels DASSL [40] 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 [42] est la suivante : la matrice de coefficients A possède une seule valeur propre λ de multiplicité s . Ainsi, si J est la jacobienne $m \times m$ du système différentiel, la décomposition LU (lower-upper) de la matrice $(I_s \otimes I_m - hA \otimes J)$, dont le coût est prédominant dans les formules de passage d'un pas au suivant, peut être évitée et remplacée par la décomposition LU de la matrice $I_m - h\lambda J$. Modulo quelques transformations linéaires, le coût de ces méthodes est alors ramené à un niveau comparable à celui des méthodes multipas et elles sont parfaitement stables.

Il est également possible de contourner cette difficulté en concevant des méthodes intrinsèquement parallèles possédant des domaines de stabilité plus larges. C'est le cas des méthodes DIMSIM [43] 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 [2].

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

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

d'où il est possible de tirer d'après l'hypothèse faite sur $g_y f_z$ une expression de z' . On voit au passage que deux différentiations ont été nécessaires, ce qui caractérise les systèmes de Hessenberg d'indice 2. Les problèmes d'indice inférieur à 2 ne posent pas de difficultés particulières, alors que le traitement direct des systèmes d'indice supérieur à 3 est considéré comme périlleux. En outre, une technique introduite par Gear, Gupta et Leimkulher [46] 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 [48][50].

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 [39], 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 [55]

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

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

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

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 *flow* $\Phi_x(p, q)$ 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 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

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

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 $F(u) = 0$.

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

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

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 [45]. 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 [54]. 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.

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 [41]. 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 [53] et dans [5].

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

3.2.4. Problèmes non linéaires

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

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

où $J(u_k)$ est le Jacobien de F en u_k . Les méthodes de type Newton modifié utilisent un Jacobien approché et les méthodes de type Newton-inexact résolvent de façon approchée le système linéaire $J(u_k) x_k = -F(u_k)$ [52],[44].

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. 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.

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

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

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

$$Ax = \lambda x.$$

Le problème généralisé est défini par deux matrices

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

et les couples doivent alors vérifier :

$$Ax = \lambda Bx.$$

L'amélioration des méthodes de calcul de valeurs propres porte essentiellement sur la recherche d'accélérateurs de la convergence à appliquer dans les méthodes itératives adaptées aux grandes matrices creuses. Le projet travaille depuis plusieurs années sur la méthode de Davidson pour le cas des matrices symétriques, méthode qu'il adapte maintenant au calcul des plus petites valeurs singulières de matrices.

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 [56]. 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.) Mais 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.

La notion de pseudo-spectre a été introduite simultanément mais de manière indépendante par Godunov [47] et Trefethen [57]. 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 :

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

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.

4. Domaines d'application

4.1. Panorama

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

Les thèmes de recherche du projet Aladin s'inscrivent en amont 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.

Nous étudions une modélisation de laser avec effet Raman, en collaboration avec Alcatel-CIT. Voir sections 6.1.2 et 7.1.1.

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 [15]).

4.2. Environnement

4.2.1. 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, la gestion de déchets nucléaires, etc.

Le projet coopère avec le CAREN (Centre Armoricaïn de Recherche en Environnement), l'IMFS (Institut de Mécanique des Fluides et des Solides, université de Strasbourg) et le projet ESTIME de l'INRIA Rocquencourt. 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 souterrain.

Un des objectifs est de développer des logiciels fiables et performants, pour réaliser des simulations à grande échelle sur une grille de calcul.

4.2.2. Érosion côtière

Une collaboration avec l'ENIT de Tunis et le projet IDOPT de l'INRIA Rhône-Alpes 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 un système de calcul numérique (Matlab ou Scilab), ou en langage de programmation (Fortran, C ou C++), 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 [correspondant], Frédéric Guyomarc'h, Bernard Philippe.

SCILIN est une boîte à outils pour la résolution de grands systèmes linéaires creux dans l'environnement SCILAB (logiciel développé par le projet Metalau). 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 : Edouard Canot [correspondant], Bernard Philippe.

PPAT signifie Parallel PATH following software. C'est un logiciel qui permet de suivre le contour de lignes de niveaux d'une fonction de \mathbb{C} dans \mathbb{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.

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 \mathbb{C} dans \mathbb{R}^+ .

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

Il est également distribué sur le CD-ROM des logiciels libres de l'INRIA, voir <http://www.inria.fr/valorisation/logiciels/cederom.fr.h>

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.

6. Résultats nouveaux

6.1. Équations différentielles ordinaires ou algébriques

Quatre nouvelles études ont été initiées :

- Une technique de résolution numérique des systèmes différentiels avec invariant a été introduite. Elle permet en particulier de traiter le cas d'un champ de vecteurs qui n'est connu qu'en un ensemble discret de points.
- Dans le cadre d'un contrat avec Alcatel, un modèle d'ondes lasers évoluant dans une fibre avec effet Raman a été étudié.
- Un critère d'optimalité des reparamétrisations d'équations hamiltoniennes a été déterminé. Il corrobore et justifie les choix usuels.
- Enfin, une collaboration sur la résolution numérique des systèmes issus de la dynamique moléculaire a été initiée avec le CERMICS, laboratoire de l'École Nationale des Ponts et Chaussées.

6.1.1. Discrétisation en espace d'une équation différentielle ordinaire

Participants : Philippe Chartier, Erwan Faou.

Nous avons abordé la résolution numérique des équations différentielles ordinaires sous l'angle nouveau de la discrétisation en espace. L'idée consiste à approcher le champ de vecteurs sur un ensemble de points dont on s'assure qu'il respecte certaines des symétries du problème. On montre alors qu'il est possible de construire une approximation de la solution qui soit réversible en temps et respecte donc, au sens approché habituel, la valeur de l'hamiltonien. Les propriétés de ce nouvel algorithme ne sont pas encore clairement comprises et c'est l'objet de cette étude. Un article sur cette méthode est en cours de rédaction.

Ce travail a fait l'objet du stage de DEA de Maha Farah, de l'université de Beyrouth.

6.1.2. Modèle de laser à effet Raman dans une fibre

Participants : Philippe Chartier, Erwan Faou.

Dans le cadre d'un contrat Alcatel (voir section 7.1.1), nous avons été amenés à étudier un modèle de laser Raman. Il s'agit d'un problème aux deux bouts pour un système d'équations différentielles ordinaires. Outre la simulation numérique de ce système en Matlab, nous avons étudié certains aspects mathématiques du problème, qui, bien que connu et documenté dans des articles de physique récents, n'a pas encore été abordé sous cet angle. En particulier, nous avons exhibé un certain nombre d'invariants liés à la structure (de Poisson) des équations. Plus récemment, nous avons démontré l'existence d'une solution, l'unicité restant une question ouverte à ce jour.

6.1.3. Techniques de reparamétrisation des équations hamiltoniennes

Participant : Philippe Chartier.

En collaboration avec Ander Murua de l'université de San Sebastian, nous nous sommes intéressés au problème de la détermination d'une reparamétrisation optimale d'un système hamiltonien. Le contexte est celui de la résolution numérique des systèmes hamiltoniens par une méthode symplectique, dont on sait qu'elle n'est possible qu'à pas constant. L'idée de la reparamétrisation est donc de changer d'échelle de temps pour permettre l'utilisation d'un pas adapté. Cette idée est naturelle dans le cas exemplaire d'une trajectoire elliptique très excentrique, pour laquelle un pas constant est totalement inadapté. Jusqu'alors, les reparamétrisations connues n'avaient pu être justifiées. Notre apport a été de déterminer un critère d'optimalité dont le principal mérite est d'améliorer la compréhension de cette technique.

6.1.4. Méthodes numériques pour la dynamique moléculaire

Participants : Philippe Chartier, Erwan Faou.

L'étude vise à mieux comprendre le comportement qualitatif des méthodes numériques symplectiques pour la dynamique moléculaire. Elle est menée en collaboration avec F. Castella de l'IRMAR, université de Rennes I, et E. Cancès, C. Lebris, F. Legoll et G. Turinici, du projet MICMAC (projet commun de l'INRIA-Rocquencourt et de l'ENPC, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées). Un premier résultat concerne la vitesse de convergence de quantités moyennées le long d'une trajectoire vers la moyenne de cette même quantité calculée cette fois sur une surface d'énergie constante. Une technique d'accélération de la convergence a en outre été proposée. Ces résultats préliminaires n'ont pas encore fait l'objet de publication.

6.2. Systèmes linéaires et problèmes aux moindres carrés

Trois études ont été poursuivies :

- échantillonnage d'images digitales.
- cartographie de données pluviométriques.
- problèmes inverses en électrocardiographie.

Ces problèmes conduisent à la résolution de systèmes linéaires ou de problèmes aux moindres carrés, qu'il faut régulariser lorsqu'ils sont mal posés.

6.2.1. Échantillonnage d'images digitales

Participant : Bernard Philippe.

Ce travail a été effectué en collaboration avec Mourad Mahboub, de l'université de Tlemcen, Algérie.

En traitement d'images, il est souvent nécessaire de faire des transformations géométriques qui obligent à définir des pixels intermédiaires. A partir d'une interpolation par des fonctions B-splines, on aboutit à des systèmes linéaires de formes particulières. Dans le cas traité, les matrices sont tridiagonales circulantes. Une méthode adaptée de factorisation de Cholesky a permis de maintenir la complexité des calculs en $O(n^2)$, où n est l'ordre de la matrice. Ce travail a été présenté à CARI'02 [33].

6.2.2. Cartographie de données pluviométriques

Participant : Bernard Philippe.

Ce travail est mené en collaboration avec Emmanuel Kamgnia et a fait l'objet du stage de DEA de Madeleine Nyamsi, dans le cadre du projet CAMEREAU, voir 8.3.2.

L'objectif est de définir une procédure pour représenter de manière uniforme des données pluviométriques. Il s'agit de déterminer les valeurs à affecter aux nœuds d'une grille définie *a priori* sur le pays. A cette fin, nous avons utilisé un ajustement par une spline définissant une plaque mince de rigidité fixée, ce qui définit un problème aux moindres carrés régularisé par les paramètres d'ajustement. Pour calculer ces paramètres, une approche heuristique a été définie et utilement comparée à la validation croisée généralisée (GCV). Ce travail a été présenté à CARI'02 [34].

6.2.3. Problèmes inverses en électrocardiographie

Participants : Édouard Canot, Jocelyne Erhel.

L'objectif général des problèmes inverses en électrocardiographie est de reconstituer l'activité électrique cardiaque à partir des mesures du potentiel à la surface du corps. Nous avons choisi de modéliser l'activité électrique cardiaque par une distribution du potentiel épicaudique.

À chaque instant t , le problème discrétisé en espace s'écrit sous la forme $Ax = B(y + e)$, avec $x = (x_1, x_2)^T$, où x_1 est le potentiel épicaudique recherché, et x_2 est soit le potentiel dans le volume conducteur (méthodes d'éléments finis par exemple), soit le gradient du potentiel épicaudique (méthodes d'intégrales de frontière). Le vecteur y est la mesure du potentiel thoracique, e est l'erreur dans la mesure, A et B sont des matrices issues de la discrétisation en espace.

L'approche classique consiste à éliminer x_2 , en construisant la matrice de transfert T telle que $Tx_1 = y + e$, où e est un bruit blanc, puis à régulariser ce problème linéaire standard, par décomposition en valeurs singulières tronquée (TSVD) ou par Tikhonov. Nous avons considéré une approche globale avec le modèle linéaire général $Ax = By + Be$, où e est un bruit blanc, que nous avons régularisé de deux façons : décomposition en valeurs singulières généralisées tronquée (TGSVD) ou généralisation de Tikhonov [51]. Nous avons aussi utilisé un modèle linéaire standard $Ax = By + u$, où u est un bruit blanc, qui introduit un biais dans le modèle, que nous avons régularisé par TSVD ou par Tikhonov.

Nos premiers essais portent sur un modèle simplifié homogène et isotrope en 2D, discrétisé par une méthode d'intégrales de frontière (BEM). Il apparaît que la méthode avec la matrice de transfert est moins précise que les deux autres, qui donnent des résultats similaires. Il semble que le biais introduit par le modèle standard soit compensé par celui de la régularisation. De plus, l'approche globale est moins coûteuse car elle évite le calcul de T .

Ce travail a fait l'objet du stage de DEA de Grace Hechme, de l'université de Beyrouth. Il a été présenté au deuxième workshop du groupe de travail ERCIM « matrix computations and statistics » (voir section 8.2.1) et est en cours de rédaction.

6.3. Modélisation du transport de solutés en milieu poreux ou fracturé

La modélisation numérique est un outil essentiel dans la gestion des eaux souterraines, la prévision de la propagation des polluants, etc. Nous avons poursuivi le développement d'un logiciel pour la simulation d'un écoulement en milieu poreux et la conception d'algorithmes pour la simulation des phénomènes de diffusion et de dispersion en milieu poreux.

6.3.1. Résolution des systèmes linéaires pour la simulation d'écoulement en milieu poreux

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

Nous avons poursuivi notre collaboration sur ce thème avec l'Institut de Mécanique des Fluides et des Solides (IMFS), université de Strasbourg. Nous disposons maintenant d'un logiciel fiable et performant pour le calcul de l'écoulement, basé sur une méthode d'éléments finis mixtes et un schéma implicite en temps [21][20][10].

Chaque pas de temps nécessite la résolution d'un système linéaire creux de grande taille. Nous avons comparé différents logiciels de résolution. Nous avons programmé une méthode de gradient conjugué préconditionné et utilisé les logiciels UMFPACK et MUMPS, du domaine public, pour tester les méthodes directes de Gauss et Cholesky. Ce travail a fait l'objet du stage d'ingénieur de P. Medi, université de Yaoundé. Il est en cours de rédaction.

6.3.2. Modélisation hydraulique de milieux poreux fortement hétérogènes

Participants : Jocelyne Erhel, Hussein Hoteit.

Ce travail est réalisé en collaboration avec J-R. de Dreuzy, du département Géosciences de l'université de Rennes 1.

Nous avons démarré une étude sur la modélisation d'un écoulement en milieu poreux fortement hétérogène. La perméabilité du milieu est définie selon une loi fractale. Nous utilisons une méthode d'éléments finis mixtes

pour effectuer les simulations, à l'aide du logiciel développé précédemment (section 6.3.1). L'objectif est de déterminer un modèle avec un petit nombre de paramètres pertinents pour caractériser le milieu étudié.

6.3.3. Modélisation hydraulique de milieux fracturés 3D

Participants : Jocelyne Erhel, Hussein Mustapha.

Ce travail est réalisé en collaboration avec J-R. de Dreuzy, du département Géosciences de l'université de Rennes 1, qui co-encadre la thèse de Hussein Mustapha, démarrée en octobre 2002, dans le cadre de l'ACI Hydrogrid (section 8.1.2).

Nous avons dans un premier temps modélisé et simulé un écoulement dans un réseau de fractures 2D [17]. L'objectif de la thèse de Hussein Mustapha est de modéliser des réseaux de fractures 3D. Nous avons commencé par définir une géométrie 3D de réseau de fractures. Celles-ci sont des ellipses de taille, d'excentricité et d'orientation variables. Le réseau est en partie caractérisé par les intersections de fractures.

6.3.4. Transport de solutés par convection-diffusion

Participants : Jocelyne Erhel, Hussein Hoteit, Bernard Philippe.

En collaboration avec l'IMFS, nous avons étudié la modélisation du transport de solutés en milieu poreux, par une équation de type convection-dispersion. Nous avons choisi d'utiliser une décomposition d'opérateurs séparant les termes convectifs et diffusifs, avec une discrétisation par éléments finis discontinus et mixtes, respectivement. Les éléments finis discontinus sont couplés à un schéma de limitation de pente. Nous avons introduit un nouveau type de limiteur de pente, qui génère moins d'oscillations que les limiteurs utilisés auparavant, qui est peu diffusif et qui est simple à calculer [36][10].

Nous avons appliqué notre logiciel de convection-dispersion aux simulations proposées par l'ANDRA dans le cadre des exercices Couplex [31][37][38][10]. Voir section 8.1.3.

6.3.5. Transport de contaminants faiblement solubles

Participants : Marios Fyrillas, Bernard Philippe.

Lorsqu'un contaminant est faiblement soluble, il est dispersé dans un milieu poreux séparément de l'eau ; il s'agit d'un liquide en phase non aqueuse (nonaqueous-phase liquid NAPL). Nous avons étudié un modèle stationnaire de convection-dispersion d'une source de contaminant à la surface d'un milieu poreux tridimensionnel. Nous avons utilisé une discrétisation par la méthode des intégrales de frontière, afin de calculer le gradient de concentration à la surface. La valeur du gradient permet de calculer le coefficient de transfert moyen de masse et le nombre de Sherwood. Nos résultats numériques sont légèrement plus grands que les résultats expérimentaux obtenus dans une cuve. Il est possible que cet écart soit dû à l'hypothèse d'un milieu infini alors que la cuve est bien sûr finie.

Ce travail a été présenté au troisième workshop du groupe de travail ERCIM « matrix computations and statistics » (voir section 8.2.1). Il est en cours de rédaction.

6.4. Problèmes aux valeurs propres

Dans le cadre des calculs de portraits spectraux, un effort particulier est porté sur les méthodes de calcul de la plus petite valeur singulière d'une matrice. Une autre étude concerne le calcul précis de valeurs propres multiples.

6.4.1. Plus petite valeur singulière d'une matrice

Participant : Bernard Philippe.

La plus petite valeur singulière d'un opérateur détermine la distance de cet opérateur à la singularité.

Le logiciel PPAT (section 5.4), qui calcule les pseudo-spectres d'une matrice A , repose le calcul de la plus petite valeur singulière de la matrice $A - zI$ pour un grand nombre de valeurs du paramètre complexe z .

Nous menons actuellement une étude pour déterminer les méthodes les mieux appropriées pour le cas des grandes matrices creuses. Le parallélisme et la précision des méthodes sont les principales qualités

recherchées. Ce travail intègre des études précédentes du projet sur la méthode de Davidson et sur les résultats des projets européens PORTRAIT et STABLE.

Il est mené en collaboration avec Ahmed Sameh (Purdue University) et Dany Mezher (Université Saint-Joseph à Beyrouth).

6.4.2. Structure canonique partielle d'un faisceau de matrices

Participant : Frédéric Guyomarc'h.

Ce travail a été réalisé en collaboration avec Bo Kågström, de l'université d'Umeå (Suède), dans le cadre d'un projet appelé *Matrix Pencil Computations in Computer-Aided Control System Design : Theory, Algorithms and Software Tools*. Il est en cours de rédaction.

Quand A et E sont grands, il peut être prohibitif de calculer la décomposition de Schur du faisceau $A - \lambda E$, en utilisant les algorithmes usuels de l'algèbre linéaire dense. D'autre part, les techniques pour les matrices creuses ne traitent pas toujours de façon satisfaisante le cas des valeurs multiples.

B. Kågström et P. Wiberg ont mis au point une méthode pour calculer une décomposition de Weierstrass partielle associée à la valeur propre dominante. Celle-ci s'appuie sur l'algorithme de D. Sorensen, IRAM (*Implicitly Restarted Arnoldi Method*). Malheureusement, cet algorithme ne gère pas intrinsèquement les valeurs multiples. Il faut donc calculer très précisément les informations pour la première multiplicité de la valeur propre, puis grâce à une technique de déflation explicite (*lock and purge*), recommencer les calculs pour avoir les informations de l'instance suivante.

Notre travail est d'adapter cette méthode pour gérer les cas des valeurs multiples (indispensable pour des calculs de structures canoniques), grâce à des stratégies de blocs, et aussi d'étudier un nouvel algorithme basé non plus sur une décomposition d'Arnoldi mais plus généralement sur une décomposition dite de Krylov-Schur qui ne souffre pas de la nécessité de préserver la forme de Hessenberg du quotient de Rayleigh.

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

Une méthode lagrangienne (suivi de marqueurs attachés à une interface) permet de suivre l'évolution temporelle d'une surface libre. Cette approche, alternant méthode eulérienne et lagrangienne permet de traiter de nombreuses applications. Son principal avantage est la précision de la représentation de la position de l'interface.

Participant : Édouard Canot.

L'éclatement, à la surface de la mer, de petites bulles de gaz remontant en surface participe au transfert de pollution mer/atmosphère. 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 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 [19].

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

Dans le domaine de la détection des petites bulles de gaz (industries chimiques, secteurs pétrolier et nucléaire,...) la mesure 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. La difficulté du problème vient du drainage du film liquide qui provient de l'écrasement de la bulle contre la paroi solide. Notre contribution est une approche originale qui consiste à coupler un modèle de drainage (analytique, entre deux plans parallèles) avec un calcul numérique potentiel.

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

Nous avons démarré une collaboration avec Arthur Soucemarianadin (équipe PIM commune au LEGI, Grenoble et au LETI, CEA-Grenoble), pour étudier l'impact d'une microgoutte d'encre sur un support papier. Nous allons utiliser le modèle de drainage décrit ci-dessus.

6.6. Sensibilité de modèles markoviens de réseaux de télécommunications

Participant : Haïscam Abdallah.

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 .

L'étude des espaces ayant moins de 400 états a été achevée avec l'examen de la sensibilité de l'espérance de la récompense cumulée sur $[0, t]$ [12].

Pour des tailles M très grandes, le choix de la méthodologie des réseaux d'automates stochastiques (RAS), avec adaptation des algorithmes de résolution à l'architecture parallèle, se confirme.

L'adaptation de la méthode stable de l'uniformisation standard (SU) et la parallélisation des algorithmes relatifs au calcul des mesures transitoires et de la sensibilité de certaines d'entre elles a été achevée. Les principaux résultats portant sur les mesures transitoires sont publiés [25], [11]. Certains résultats concernant la sensibilité sont en cours de rédaction.

Nous nous intéressons à la décomposition du générateur infinitésimal en vue d'effectuer une construction tensorielle de ce générateur et d'utiliser dans un premier temps les algorithmes développés précédemment. Une étude intéressante pourrait concerner la définition des critères permettant la prise en compte des états atteints uniquement. Cela pourrait réduire la complexité du calcul des mesures transitoires et de la sensibilité.

7. Contrats industriels

7.1. Contrats nationaux

7.1.1. ALCATEL CIT - Modélisation de laser à effet Raman

Participants : Philippe Chartier, Erwan Faou.

convention Alcatel, No. 102C40200331319012

partenaires : Irisa, Alcatel CIT

durée : du 1 juin 2002 au 31 mai 2003

Voir section 6.1.2. Les lasers à effet Raman sont utilisés dans le cadre de la transmission de données dans des fibres optiques sur de longues distances. L'objectif est de simuler le comportement de ces lasers.

8. Actions régionales, nationales et internationales

8.1. Actions nationales

8.1.1. GdR MOMAS - Modélisation pour la gestion de déchets nucléaires

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

Modélisation Mathématique et Simulations numériques liées aux aux problèmes de gestion des déchets nucléaires. Thématique « couplage multiphénomènes ». Projet « Développement de méthodes numériques pour le transport réactif ».

Voir <https://mcs.univ-lyon1.fr/MOMAS/>

Les modèles d'écoulement en milieux poreux avec transport de solutés sont décrits par des EDP de type diffusion-convection-réaction. De plus, ces modèles doivent être couplés avec les équations décrivant l'évolution chimique ou radioactive des espèces et phases, les déformations poroélastoplastiques, l'évolution morphologique et chimique du milieu poreux. Ces modèles posent de nombreux problèmes mathématiques, numériques et informatiques, notamment à cause des forts contrastes de propriétés, des géométries 3D non structurées, des données connues avec incertitude, des échelles de temps variables suivant le phénomène.

Nous participons au groupe thématique du GdR MOMAS relatif aux couplages multiphénomènes, dont l'objectif est de concevoir des méthodes numériques et des composants logiciels réalisant ces couplages.

D'autre part, nous participons au projet intitulé « Développement de méthodes numériques pour le transport réactif », financé par le GdR MOMAS pour une durée de 2 ans.

La problématique du transport réactif dans la description de l'évolution d'un site de stockage de déchets nucléaires est extrêmement importante. En effet le phénomène de dégradation des colis de déchets, le relâchement de radio-éléments et leur migration à travers les barrières sont essentiellement décrits par des phénomènes chimiques, ou géochimiques, et des mécanismes de transport. Ces deux phénomènes sont intimement couplés, les aspects chimiques intervenant comme des contraintes sur les quantités transportées. Le but de notre projet est donc de contribuer à l'amélioration des méthodes numériques dans ce contexte et plus particulièrement des méthodes de couplages.

8.1.2. HydroGrid - Couplage en hydrogéologie

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

HydroGrid : Couplage de codes pour le transfert de fluides et de solutés dans les milieux géologiques : une approche par composants logiciels. HydroGrid est un projet pluridisciplinaire de l'Action Concertée Incitative (ACI) Globalisation des ressources informatiques et des données (GRID) du ministère de la recherche.

Voir <http://www-rocq.inria.fr/~kern/HydroGrid/HydroGrid.html>

Les transferts de fluides et de solutés dans les milieux souterrains sont au centre de nombreuses problématiques énergétiques et environnementales. Des problèmes apparus récemment concernent la contamination des aquifères par des polluants, l'intrusion d'eau salée dans les aquifères et le stockage profond des déchets nucléaires. Ils ont fait apparaître l'importance de phénomènes physico-chimiques complexes.

Le projet HydroGrid a pour but de modéliser et simuler des transferts de fluides et de transport de solutés dans des milieux géologiques souterrains. Les logiciels ont des besoins en capacité de stockage et de calcul qui croissent très vite avec le nombre de mailles utilisées pour discrétiser les modèles. Le recours au parallélisme permet d'accélérer les calculs. Après les machines parallèles et les grappes de PC, le développement des réseaux longues distances a fait apparaître la grille, ensemble de machines parallèles et/ou de grappes de PC. Il est ainsi possible d'agréger d'énormes puissances de calcul, notamment pour coupler des modèles physiques. Nous choisissons une approche de couplage de codes par composants logiciels.

8.1.3. Défis de l'ANDRA - simulation du transfert de déchets radioactifs

Participant : Hussein Hoteit.

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.

Voir <http://www.andra.fr/fra/actu/couplex.htm>

Pour mener à bien l'étude du stockage de déchets radioactifs, l'Andra mène des modélisations et des 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 un modèle simplifié, à deux dimensions, dans le milieu géologique. Dans Couplex 2, il s'agit de modéliser et simuler de façon plus précise le relâchement des radionucléides qui pourraient s'échapper des colis de déchets. L'exercice Couplex 3 est un modèle tridimensionnel du milieu géologique, qui intègre les résultats de Couplex 2 pour le champ proche. L'IMFS (H. Hoteit, P. Ackerer, R. Mosé) a obtenu le premier prix à ce défi.

8.1.4. Action bioinformatique - dynamique des populations

Participants : Jocelyne Erhel, Bernard Philippe.

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

Coordinateur : CEFÉ/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.

8.2. Actions européennes

8.2.1. Groupe de Travail ERCIM - Matrix Computations and Statistics

Participants : Jocelyne Erhel, Bernard Philippe.

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 deuxième workshop a eu lieu à Rennes en février 2002 et le troisième workshop a eu lieu à Neuchâtel, Suisse, en novembre 2002.

La coordination du groupe de travail est assurée par B. Philippe et E. Kontoghiorghes.

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

8.3. Actions internationales

8.3.1. Projet INRIA/NSF - préconditionnements robustes et parallèles

Participants : Jocelyne Erhel, Bernard Philippe.

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 (Laurence Berkeley Lab.), B. Philippe (projet Aladin), F. Desprez (projet Remap), P. Amestoy (ENSEEIH, Toulouse), J. Roman (Labri, U. de Bordeaux 1)

Un des axes de recherche est l'étude de préconditionnements efficaces qui permettent d'accélérer les méthodes itératives de résolution. Pour les problèmes aux moindres carrés mal posés, la recherche porte également sur des procédés de régularisation.

Un autre axe est la conception d'algorithmes et de logiciels pour effectuer la factorisation QR de matrices creuses de grande taille. Un des enjeux est la détermination du rang d'une matrice et la construction éventuelle d'une base de son noyau. Un des objectifs est le développement d'un logiciel fiable et performant. En particulier, nous étudions des algorithmes et logiciels parallèles.

8.3.2. Projet CAMEREAU - hydrogéologie au Cameroun

Participant : Bernard Philippe.

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 été présenté à CARI'2002.

8.3.3. Action intégrée avec la Tunisie - simulation d'érosion côtière

Participants : Édouard Canot, Bernard Philippe.

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.

Le modèle doit tenir compte de la houle, qui peut créer deux phénomènes physiques importants. 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. Cette étude a été continuée au sein de l'ENI-Tunis. Des données concernant la baie de Hammamet ont été recueillies (bathymétrie, direction préférentielle de la houle, ...) et ont été traitées par le logiciel SMS (SurfaceWater Modeling System), qui permet de coupler les phénomènes de réfraction/diffraction de la houle avec le transport de sédiments (sable essentiellement).

8.3.4. SARIMA - Soutien à la recherche en Afrique

Participant : Bernard Philippe.

projet SARIMA Inria/Ministère des affaires étrangères

Soutien aux Activités de Recherche Informatique et Mathématique en Afrique

Partenaire : CIMPA

Durée : 2003-2006.

Le projet Aladin est très impliqué dans le projet SARIMA du ministère des Affaires Etrangères qui se propose de renforcer la recherche en informatique et en mathématiques appliquées en Afrique. La stratégie adoptée consiste à créer ou à renforcer des pôles d'excellence coopérant dans une structure de réseau. Sept équipes de la Zone de Solidarité Prioritaire (ZSP) sont retenues au départ du projet comme nœuds du réseau (cinq équipes sub-sahariennes francophones, une équipe tunisienne et une équipe libanaise). Les opérateurs financiers du projet sont le Centre International des Mathématiques Pures et Appliquées (CIMPA) et l'INRIA. B. Philippe est le correspondant de SARIMA pour l'INRIA.

L'activité de SARIMA suit deux axes :

- l'aide particulière à chaque équipe : il s'agit d'aboutir en quatre ans à la constitution d'une masse critique de chercheurs dans les thèmes de recherche affichés par le projet scientifique de l'équipe. Les aides directes portent sur le financement de stages dans des équipes expertes, du Nord ou du Sud, en faveur d'étudiants de troisième cycle, de doctorants ou de jeunes docteurs.
- les actions structurant les équipes et leur coopération : à partir du projet scientifique des équipes du projet, les institutions du Nord proposent des coopérations avec leurs laboratoires. Elles sont l'occasion de recherches communes et d'installation ou de renforcement de cursus de troisièmes cycles. Le projet anime un réseau d'équipes qui coopèrent pour une organisation continentale de la communauté scientifique africaine en informatique (ce qui existe déjà avec l'expérience du CARI) et en mathématiques appliquées (ce qui reste à créer). Ces réseaux spécialisés proposent des rencontres régionales (écoles ou ateliers thématiques) et favorisent les liens avec la communauté scientifique internationale.

8.3.5. Séjours à l'étranger

- Édouard Canot a effectué une visite d'une semaine au Maroc, Faculté des Sciences et Technique de Fès (FST), en février 2002. Il a participé au jury de thèse de Mohammed El Hammoumi et enseigné un module sur l'arithmétique flottante.

- P. Chartier a effectué un séjour d'une semaine à l'université de San Sebastian, Espagne, en juillet 2002. Il a travaillé avec A. Murua sur les méthodes symplectiques. Voir section 6.1.3.

- P. Chartier a effectué un séjour d'une semaine à Beyrouth, Liban, où il a enseigné un module de DEA.

- F. Guyomarc'h a effectué deux séjours à l'université d'Umeå, Suède, du 19 septembre au 1 novembre 2002 et du 25 novembre au 20 décembre 2002. Il a travaillé sur la résolution de problèmes aux valeurs propres généralisés. Voir section 6.4.2.

- B. Philippe a effectué une visite d'une semaine, à l'université de Yaoundé, Cameroun, en janvier 2002. Il a participé à l'organisation de la conférence CARI'2002.

- B. Philippe a effectué une visite d'une semaine, à l'université du Minnesota à Minneapolis, Etats-Unis, en mars 2002. Il a travaillé avec Y. Saad sur la factorisation QR de grandes matrices, dans le cadre de l'accord NSF-INRIA. Voir section 8.3.1.

- B. Philippe a effectué une visite d'une semaine à l'université de Tunis, Tunisie, en décembre 2002. Il a travaillé sur le projet STIC INRIA/Tunisie, voir section 8.3.3. Il y a donné un cours de DEA et présenté un exposé.

8.3.6. Accueil de chercheurs étrangers

- J. Belward, université du Queensland (Australie), une semaine, juin 2002. Il a présenté ses travaux sur un problème de convection-diffusion discrétisé par une méthode d'intégrales de frontière et a travaillé avec le projet Aladin sur ce thème.

- E. Kontoghiorghes, université de Neuchatel (Suisse), un mois, mai 2002. Il a poursuivi la collaboration avec le projet Aladin sur des algorithmes de résolution de problèmes aux moindres carrés généralisés et sur la factorisation QR.

- Y. Saad, université du Minnesota (USA), une semaine, juin 2002. Il a poursuivi la collaboration sur la factorisation QR et sur les préconditionnements de méthodes itératives.

- A. Sameh, université de Purdue (USA), une semaine, novembre 2002. Il a travaillé sur le calcul des plus petites valeurs singulières de grandes matrices.

- L. Grigori, post-doc INRIA à l'université de Berkeley (USA), trois semaines, novembre-décembre 2002. Elle a travaillé sur la factorisation QR de grandes matrices et sur le calcul parallèle.

- Adel Benselama (doctorant de l'équipe PIM du LETI, CEA-Grenoble) a effectué un séjour d'un mois (20 nov. - 20 déc. 2002) pour collaborer avec Édouard Canot sur l'utilisation de la Méthode des Intégrales de Frontière pour une application en microbiologie.

8.3.7. 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 l'université de Yaoundé, Cameroun (E. Kamgnia, A. Njifenjou).

9. Diffusion des résultats

9.1. Animation de la communauté scientifique

9.1.1. Organisation de conférences

- B. Philippe a été membre du comité de programme du colloque RENPAR 2002, Tunis, avril 2002.
- B. Philippe a été membre du comité de programme du « 2nd International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications (PMAA'02) », Neuchatel, novembre 2002.
- B. Philippe et J. Erhel ont été membres du comité de programme du « Third workshop of the ERCIM Working Group on Matrix Computations and Statistics », Neuchatel, novembre 2002.
- B. Philippe, en tant que secrétaire du comité permanent de CARI, a participé à l'organisation du colloque Cari'2002, qui a eu lieu à Yaoundé, en octobre 2002.
- Le projet organise régulièrement un séminaire thématique sur le calcul scientifique.
<http://www.irisa.fr/aladin/seminaire.html>
- Le projet participe régulièrement au séminaire d'analyse numérique de l'IRMAR, université de Rennes 1.

9.1.2. Comités de rédaction

- B. Philippe est l'un des trois rédacteurs de la revue électronique ARIMA qui est lancée au dernier trimestre de l'année 2002.
- B. Philippe est membre du comité éditorial de la revue IMHOTEP (Yaoundé).
- B. Philippe est membre du comité éditorial de la revue International Journal on High Speed Computing.
- B. Philippe est membre du comité éditorial de la revue Calculateurs parallèles.

9.1.3. Divers

- P. Chartier a été membre élu de la Commission d'Évaluation de l'INRIA, jusqu'en juin 2002.
- J. Erhel est membre élu et 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.
- J. Erhel est membre élu de la Commission d'Évaluation de l'INRIA, depuis juillet 2002.
- J. Erhel est membre de la commission de spécialistes de la section 27 de l'université de Rennes I, depuis décembre 2001.
- B. Philippe est délégué de l'Inria aux relations avec l'Afrique Sub-Saharienne et secrétaire du comité Cari.
- B. Philippe est le représentant INRIA du conseil d'administration du Cimpa, depuis janvier 2000.
- B. Philippe a été président de la CUMI (Commission des utilisateurs des moyens informatiques) de l'INRIA-Rennes, jusqu'en novembre 2002.

9.2. Enseignement universitaire

- É. Canot et J. Erhel ont enseigné le cours de mathématiques appliquées (MAP) du DIIC, IFSIC, Rennes 1 (1^{re} année).
<http://www.irisa.fr/aladin/perso/erhel/>
- P. Chartier et J. Erhel ont enseigné le cours et les TD de Modélisation (MODL) en maîtrise de mathématiques et de mécanique, UFR Mathématiques, Rennes 1.
- P. Chartier a assuré l'enseignement d'un module (Modélisation mathématique de phénomènes issus de la physique - 1ere partie) du DEA de mathématiques appliquées de Beyrouth, co-organisé par les universités Libanaises, l'EPFL, l'Irisa et l'université de Reims.
- F. Guyomarc'h a enseigné le cours et les travaux pratiques de C/C++ (PRC) du DIIC, IFSIC, Rennes (1^{re} année).
- F. Guyomarc'h a enseigné le cours et les travaux pratiques d'algorithmique (ALG2) du DESS CCI, IFSIC, Rennes.
- F. Guyomarc'h a effectué un service d'ATER plein à l'université de Rennes 1, ce qui représente 192 d'heures (eq.TD) de CM, TD et TP dans les diverses filière de l'université (Deug MIAS, IFSIC et Deug SV).

- B. Philippe a enseigné, avec K. Bouatouch du projet Siames, l'option Systèmes linéaires et radiosit  (SYRA) du DEA d'informatique   l'Ifsic.
- B. Philippe a assur  l'enseignement d'un module (R solution des grands syst mes) du DEA de math matiques appliqu es de Beyrouth, co-organis  par les universit s Libanaises, l'EPFL, l'Irisa et l'universit  de Reims.
- B. Philippe a assur  l'enseignement d'un module du MAST RE de math matiques appliqu es de l'universit  de Tunis (calcul de valeurs propres).

9.3. Participation   des colloques, s minaires, invitations, prix

-  . Canot - s minaire (12 h de cours + TP) sur le contr le des erreurs de calcul en arithm tique flottante, f vrier 2002, F s, Maroc.
- J. Erhel a particip  aux journ es scientifiques du GdR MOMAS, Lyon, janvier 2002. Voir section 8.1.1.
- E. Faou a particip    la « Conference on scientific computation », organis e pour le 60  anniversaire de Gerhard Wanner, Gen ve, Suisse, juin 2002.
<http://www.unige.ch/math/folks/haerer/conference/>
- F. Guyomarc'h - Implicitly restarted methods, s minaire HPC2N, universit  d'Ume , Su de - octobre 2002.
- F. Guyomarc'h a assist    la conf rence organis e pour le 60  anniversaire d'A. Ruhe, KTH, Stockholm, Su de - octobre 2002).
<http://www.nada.kth.se/ruheconference/>
- B. Philippe - Parallel eigenvalue solvers, tutorial, 3 me Cycle Romand d'Informatique Parallel Numerical Linear Algebra and Scientific Computing, Neuchatel, Suisse - novembre 2002.
- B. Philippe - Calcul parall le de pseudo-spectres, s minaire du laboratoire LAMSIN, universit  de Tunis, Tunisie - d cembre 2002.

10. Bibliographie

Bibliographie de r f rence

- [1] R. CHAN, P. CHARTIER. *A Composition Law for Runge-Kutta Methods Applied to Index-2 Differential-Algebraic Equations*. in « BIT », num ro 2, volume 36, 1996, pages 229-246.
- [2] P. CHARTIER. *L-stable parallel one-block methods for ordinary differential equations*. in « SIAM Journal of Numerical Analysis », num ro 2, volume 31, avril, 1994.
- [3] P. CHARTIER, B. PHILIPPE. *A Parallel Shooting Technique for Solving Dissipative ODE's*. in « Computing », num ro 3-4, volume 51, 1993, pages 209-236.
- [4] M. CROUZEIX, B. PHILIPPE, M. SADKANE. *The Davidson Method*. in « SIAM, Journal on Scientific and Statistical Computing », volume 15 :1, 1994, pages 62-76.
- [5] J. ERHEL, K. BURRAGE, B. POHL. *Restarted GMRES preconditioned by deflation*. in « Journal of Computational and Applied Mathematics », volume 69, 1996, pages 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, », ao t, 1994.

- [7] B. PHILIPPE, M. SADKANE. *Computation of the fundamental singular subspace of a large matrix*. in « Linear Algebra and Applications », volume 257, 1997.
- [8] M. SADKANE. *Block-Arnoldi and Davidson methods for unsymmetric large eigenvalue problems*. in « Numer. Math. », volume 64, 1993, pages 195-211.

Thèses et habilitations à diriger des recherche

- [9] H. ABDALLAH. *Evaluation numérique des performances des systèmes markoviens*. Habilitation à Diriger des Recherches, Université de Rennes 2, nov, 2002.
- [10] H. HOTEIT. *Simulation d'écoulements et de transports de polluants en milieux poreux : application à la modélisation de la rétention des dépôts de déchets radioactifs*. Thèse de doctorat, Université de Rennes 1, sept, 2002.

Articles et chapitres de livre

- [11] H. ABDALLAH. *Parallel Implementation of Uniformization to Compute the Transient Solution of Stochastic Automata Networks*. in « Parallel and Distributed Computing Practices (PDCP) », à paraître.
- [12] H. ABDALLAH, M. HAMZA. *On the Sensitivity Analysis of the Expected Accumulated Reward*. in « Performance Evaluation », numéro 2-3, volume 47, 2002, pages 163-179.
- [13] I. ALTAS, J. ERHEL, M. GUPTA. *High Accuracy Solution of Three-Dimensional Biharmonic Equations*. in « Numerical Algorithms », numéro 1, volume 29, 2002, pages 1-19.
- [14] J. BONNANS, P. CHARTIER, H. ZIDANI. *Discrete approximation of the Hamilton-Jacobi equation for an optimal control problem of a differential-algebraic system*. in « Control and Cybernetics », à paraître.
- [15] M. BRIEU, J. ERHEL. *On the convergence of a non-incremental homogenization method for non-linear elastic composite materials*. in « Numerical Algorithms », à paraître.
- [16] R. CHAN, P. CHARTIER, A. MURUA. *Post-projected Runge-Kutta methods for index-2 differential-algebraic equations*. in « Applied Numerical Mathematics », numéro 1-3, volume 42, 2002, pages 77-94.
- [17] J.-R. DE DREUZY, J. ERHEL. *Efficient algorithms for the determination of the connected fracture network and the solution to the steady-state flow equation in fracture networks*. in « Computers and Geosciences », à paraître.
- [18] E. FAOU. *Elasticity on a thin shell : Formal series solution*. in « Asymptotic Analysis », volume 31, 2002, pages 317-361.
- [19] S.-C. GEORGESCU, J.-L. ACHARD, E. CANOT. *Jet drops ejection in bursting gas bubble processes*. in « Eur. J. Mech., B/Fluids », volume 21, 2002, pages 265-280.
- [20] H. HOTEIT, J. ERHEL, R. MOSÉ, B. PHILIPPE, P. ACKERER. *Numerical Reliability for Mixed Methods Applied to Flow Problems in Porous Media*. in « Computational Geosciences », volume 6, 2002, pages 161-

194, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-4228.html>.

- [21] H. HOTEIT, R. MOSÉ, B. PHILIPPE, P. ACKERER, J. ERHEL. *The maximum principle violations of the mixed-hybrid finite-element method applied to diffusion equations*. in « International Journal for Numerical Methods in Engineering », volume 55, 2002.
- [22] D. MEZHER, B. PHILIPPE. *Parallel computation of pseudospectra of large sparse matrices*. in « Parallel Computing », numéro 2, volume 28, 2002, pages 199-221.
- [23] D. MEZHER, B. PHILIPPE. *PAT - A Reliable Path Following Algorithm*. in « Numerical Algorithms », numéro 1, volume 29, 2002, pages 131-152.
- [24] C. TADONKI, B. PHILIPPE. *Parallel numerical linear algebra*. J. Dongarra and E. Kontoghiorghes editors, Nova science, 2002, chapitre Parallel multiplication of a vector by a Kronecker product of matrices, pages 71-89.

Communications à des congrès, colloques, etc.

- [25] H. ABDALLAH, M. HAMZA. *Approche parallèle pour l'évaluation de performance des réseaux d'automates stochastiques*. in « Renpar' 14 », Hammamet, Tunisie, 10-13 avril, 2002.
- [26] E. CANOT, J. ERHEL. *Some inverse problems in electrocardiography*. in « 2nd workshop, ERCIM Working Group on Matrix Computations and Statistics », Rennes, France, fev, 2002, <http://www.irisa.fr/aladin/wg-statlin/>.
- [27] J. ERHEL, P. ACKERER, J.-R. DE DREUZY, M. KERN, H. LEROY, C. PEREZ. *Couplage par composants logiciels de codes d'hydrogéologie*. in « École thématique Grid 2002 », Aussois, France, dec, 2002, <http://grid2002.loria.fr/francais/>.
- [28] J. ERHEL, H. HOTEIT, P. ACKERER, R. MOSÉ, B. PHILIPPE. *méthodes d'éléments finis mixtes en hydrogéologie des milieux poreux*. in « Journées du PNRH », Rocquencourt, France, nov, 2002.
- [29] J. ERHEL, H. HOTEIT, P. ACKERER, R. MOSÉ, B. PHILIPPE. *Simulation du transport de solutés en milieu poreux par séparation des opérateurs de convection et diffusion*. in « Journées du GdR MOMAS », Rocquencourt, France, dec, 2002.
- [30] M. FYRILLAS, B. PHILIPPE. *Mass transfer from elliptical pools in uniform flow*. in « 3rd workshop, ERCIM Working Group on Matrix Computations and Statistics », Neuchatel, Suisse, nov, 2002, <http://www.irisa.fr/aladin/wg-statlin/>.
- [31] H. HOTEIT, P. ACKERER, R. MOSÉ. *A new iterative technique for solving nonlinear coupled equations arising from nuclear waste transport process*. in « SMAI-CANUM », Anglet, France, mai, 2002, <http://www.irisa.fr/aladin/perso/hoteit/>.
- [32] H. HOTEIT, B. PHILIPPE, J. ERHEL, P. ACKERER, R. MOSÉ. *Linear systems and mixed finite elements in hydrogeology*. in « Sparse days at Cerfacs », Toulouse, France, juin, 2002, <http://aton.cerfacs.fr/algor/sparseDay2002.html>.

- [33] E. KAMGNIA, M. NYAMSI, B. PHILIPPE. *Ajustement des données météorologiques : application à la pluviométrie du Cameroun*. in « Actes du 6ème Colloque Africain sur la Recherche en Informatique », INRIA, Université de Yaoundé I, pages 411-418, 2002.
- [34] M. MAHBOUB, B. PHILIPPE. *Ré-échantillonnage d'images numériques par la B-spline cubique uniforme*. in « Actes du 6ème Colloque Africain sur la Recherche en Informatique », INRIA, Université de Yaoundé I, pages 301-308, 2002.
- [35] B. PHILIPPE. *Parallel eigenvalue solvers*. in « International Workshop on Parallel Numerics (PARNUM) », Bled, Slovénie, octobre, 2002.

Rapports de recherche et publications internes

- [36] H. HOTEIT, P. ACKERER, R. MOSÉ, J. ERHEL, B. PHILIPPE. *New two-dimensional slope limiters for discontinuous Galerkin methods on arbitrary meshes*. Rapport de recherche, numéro 4491, INRIA, juillet, 2002, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-4491.html>.
- [37] H. HOTEIT, P. ACKERER, R. MOSÉ. *Modélisation du cas test : COUPLEX 2*. rapport technique, IMFS, jan, 2002.
- [38] H. HOTEIT, P. ACKERER, R. MOSÉ. *Modélisation du cas test : COUPLEX 3*. rapport technique, IMFS, jan, 2002.

Bibliographie générale

- [39] U. ASCHER, L. PETZOLD. *Projected implicit Runge-Kutta methods for differential-algebraic equations*. in « SIAM Journal of Numerical Analysis », volume 4, 1991, pages 1097-1120.
- [40] K. BRENAN, S. CAMPBELL, L. PETZOLD. *Numerical solution of initial value problems in differential-algebraic equations*. North Holland, 1989, New-York.
- [41] A. BRUASET. *A survey of preconditioned iterative methods*. série Pitman Research Notes in Mathematics Series, Longman Scientific and Technical, 1995.
- [42] K. BURRAGE. *A special family of Runge-Kutta methods for solving stiff differential equations*. in « BIT », volume 18, 1978, pages 22-41.
- [43] J. BUTCHER. *Diagonally-Implicit Multi-Stage Integration Methods*. in « Applied Numerical Mathematics », numéro 380, volume 11, 1993, pages 347-363, North-Holland.
- [44] J. E. DENNIS, R. B. SCHNABEL. *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*. Prentice-Hall series in Computational Mathematics, 1983.
- [45] I. DUFF, A. ERISMAN, J. REID. *Direct Methods for Sparse Matrices*. Oxford Science Publications, 1986.
- [46] C. GEAR, G. GUPTA, B. LEIMKUEHLER. *Automatic integration of Euler-Lagrange equations with constraints*. in « Journal of Computing and Applied Mathematics », volume 12, 13, 1985, pages 77-90.

- [47] S. K. GODUNOV, O. P. KIRILJUK, V. I. KOSTIN. *Spectral portrait of matrices and criteria of spectrum dichotomy*. in « Computer arithmetic and enclosure methods », éditeurs J. HERZBERGER, L. ATHANASSOVA., 1991.
- [48] 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.
- [49] E. HAIRER, S. NØRSETT, G. WANNER. *Solving Ordinary Differential Equations, Nonstiff Problems*. édition Second Edition, Springer-Verlag, 1993, Volume 1.
- [50] E. HAIRER, G. WANNER. *Solving Ordinary Differential Equations, Stiff Problems and Differential Algebraic Problems*. édition Second Edition, Springer-Verlag, 1996, Volume 2.
- [51] P. C. HANSEN. *Rank-deficient and discrete ill-posed problems*. SIAM, 1997.
- [52] J. ORTEGA, W. RHEINBOLDT. *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*. série Computer science and applied mathematics, Academic Press, 1970.
- [53] Y. SAAD. *Analysis of Augmented Krylov subspace methods*. rapport technique, numéro 176, University of Minnesota, 1995.
- [54] Y. SAAD. *Iterative methods for sparse linear systems*. PWS publishing, 1995.
- [55] J. SANZ-SERNA, M. CALVO. *Numerical Hamiltonian Problems*. série Applied Mathematics and Mathematical Computation, numéro 7, Chapman and Hall, 1994.
- [56] G. L. G. SLEIJPEN, H. A. VAN DER VORST. *A Jacobi-Davidson iteration method for linear eigenvalue problems*. in « SIAM J. Matrix Anal. Appl. », volume 17, 1996.
- [57] L. N. TREFETHEN. *Pseudospectra of matrices*. in « Numerical Analysis », Longman Scientific and Technical, éditeurs D. F. GRIFFITHS, G. A. WATSON., 1991.