Habilitation à diriger des recherches

Université Pierre et Marie Curie (Paris VI)

Spécialité : Mathématiques

Présentée par Patrick Ciarlet.

Préconditionnements matriciels et théorie des graphes.

Résolution des équations de Maxwell et de modèles approchés.

Publié sous la référence : Rapport de Recherche ENSTA n° 314, en avril 1998.

Résumé

Dans le cadre de ce mémoire, nous présentons des travaux que nous avons choisi de classer selon deux catégories.

Tout d'abord, ceux relatifs au calcul numérique intensif, dont l'outil privilégié est depuis quelques années déjà l'ordinateur d'architecture parallèle ou massivement parallèle. Nous avons isolé deux grandes classes de problèmes à résoudre.

La première est celle de l'adaptation de méthodes numériques connues à ce type d'architecture, en vue de résoudre des systèmes linéaires creux de grande taille. Plus précisément, nous avons considéré les systèmes linéaires issus de la discrétisation par différences finies de problèmes aux limites elliptiques du second ordre, du type

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left(a\frac{\partial u}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(b\frac{\partial u}{\partial y}\right)=f,$$

à coefficients positifs éventuellement discontinus, dans le carré unité, avec une condition au bord de type Dirichlet. Le système discret résultant $A\,u_h = f_h$ est tel que la matrice A est symétrique définie positive. Il est ainsi loisible de calculer u_h grâce à un algorithme itératif tel que celui du gradient conjugué préconditionné.

Notre travail a donc consisté en la définition et en l'étude de préconditionnements matriciels de A, qui possèdent les deux propriétés suivantes. La première est d'être numériquement efficaces, c'est-à-dire proches de A^{-1}, afin que l'algorithme converge en peu d'itérations. La seconde est d'être bien adaptés aux besoins spécifiques du calcul parallèle, i. e. que leur mise en œuvre informatique débouche sur un taux de parallélisation proche de 1. Naturellement, nous avons choisi une méthode du type décomposition de domaine, pour laquelle le carré unité est découpé soit en bandes, soit en carrés **[2]**, **[12]**. Par ailleurs, nous avons également étudié un autre type de préconditionnnement, basé cette fois sur un découpage rouge/noir des inconnues **[3]**.

L'avantage de la discrétisation par différences finies du problème à résoudre sur un domaine carré permet de s'affranchir d'une difficulté importante qui apparaît lorsque l'on souhaite utiliser une méthode de décomposition de domaine dans un domaine quelconque (par exemple lors d'une discrétisation par éléments finis). En effet, comment découper de façon "optimale" un tel domaine de calcul ?

C'est à cette question que, dans un second temps, nous avons essayé d'apporter une réponse pratique. Pour cela, nous avons considéré le problème plus général de partitionnement d'un graphe. Entre autres, cette modélisation, qui consiste à s'abstraire du domaine de calcul pour ne retenir que la représentation sous forme d'un graphe, présente un avantage important, celui de ne plus avoir à prendre en considération la dimension géométrique (2d ou 3d).

Pour partitionner un graphe, il existe deux catégories d'heuristiques, selon que l'on utilise pour ce faire la donnée du graphe dans sa totalité (heuristiques "globales"), ou simplement une partie de celui-ci (heuristiques "locales").

La plupart des heuristiques globales sont récursives. Parmi ces méthodes récursives, nous avons étudié, pour la plus connue d'entre elles, dite RSB (Recursive Spectral Bisection), la qualité de la partition obtenue en montrant qu'elle satisfait à un critère d'optimalité (cf. **[8]**).

En ce qui concerne les heuristiques locales, nous avons conçu une méthode "gloutonne". Cette méthode a été analysée à la fois d'un point de vue théorique et d'un point de vue pratique **[4]**.

Dans ce cadre, nous avons comparé les performances de plusieurs heuristiques sur un ensemble de graphe-tests. En premier lieu, en mesurant la qualité de la partition construite ainsi que le temps de calcul nécessaire à l'obtention de celle-ci (voir **"Recursive partitioning methods..."**). Ensuite, en couplant la construction de ces partitions à la résolution d'un problème elliptique par une méthode de décomposition de domaine itérative, en vue d'estimer l'influence de telles heuristiques sur le problème numérique proprement dit **[13]**.

Enfin, toujours dans l'optique de l'utilisation de méthodes multiniveaux (décomposition de domaine ou multigrille), nous avons analysé le problème de la génération de maillages grossiers basée sur la contraction d'un maillage triangulaire 2d donné **[6]**.

La seconde catégorie de travaux présentés ci-après est l'étude de problèmes théoriques et numériques liés à la résolution du système des équations de Maxwell temporelles, ainsi que de certains modèles approchés, dans un domaine borné.

Parmi ces modèles, nous avons notamment considéré les équations de la magnétostatique, ou système en "div-**rot**", dans lequel on néglige la dépendance en temps du champ électromagnétique. Certains de ces résultats sont en particulier applicables au système de Stokes. Nous avons également travaillé à la résolution du modèle de Darwin, qui est obtenu en négligeant la partie à divergence nulle du courant de déplacement dans le système de Maxwell.

En premier lieu, nous avons considéré le cas d'un domaine Ω de $\mathbf{R}^3$, de frontière régulière, connexe, mais ne possédant pas la propriété de simple connexité. On peut, en soustrayant un certain nombre de coupures (nappes régulières de $\mathbf{R}^2$), rendre l'ouvert simplement connexe, de frontière (pseudo-)lipschitzienne et appliquer alors les résultats classiques.

Sur ce type d'ouverts, cf. **[1]**, nous avons introduit des décompositions de Helmholtz pour les fonctions de $L^2(\Omega)^3$. Ceci nous a permis d'établir l'existence et l'unicité de la solution des équations de la magnétostatique pour une condition aux limites de type conducteur parfait, dans les espaces fonctionnels idoines. De même, nous avons pu caractériser la solution des équations du modèle de Darwin **[10]**.

Par la suite, nous avons étudié la résolution des équations de Maxwell temporelles dans un domaine polygonal de $\mathbf{R}^2$ non nécessairement convexe, c'est-à-dire en présence de coins rentrants. Dans le cas d'une condition aux limites de type conducteur parfait et pour des termes sources réguliers, la solution est de régularité H^1 en espace lorsque le domaine est convexe. Ce n'est plus vrai dans le cas général. En conséquence, nous avons construit une décomposition de la solution en une partie régulière (dans H^1), et une partie singulière (**[5]**, **[11]**). Cette partition de la solution repose sur la décomposition orthogonale d'espaces fonctionnels. Ceci nous a permis de définir une méthode de discrétisation : par éléments finis conformes dans H^1 pour la partie régulière ; par une méthode de décomposition de domaine pour la partie singulière, qui prend en compte la connaissance explicite de l'allure de la solution singulière au voisinage des coins rentrants.

Dans $\mathbf{R}^3$ **[9]**, nous avons entamé l'extension de ces travaux à des domaines polyédriques non convexes à frontière lipschitzienne. Ainsi, la caractérisation d'une décomposition orthogonale de l'espace $L^2(\Omega)$ a été réalisée.

Pour finir **[7]**, nous avons étudié la discrétisation par éléments finis du modèle de Darwin sur des domaines polyédriques à frontière lipschitzienne. Nous avons comparé les méthodes conformes dans $H(\mathbf{rot}\,;\Omega)$ et $H(\mathrm{div}\,,\mathbf{rot}\,;\Omega)$ et obtenu les estimations d'erreur relatives à chaque approche.

Extended abstract

In this report, we present theoretical and practical results in the fields of scientific computing and numerical analysis. Hereafter, we arrange these results into two categories.

First of all, those related to intensive numerical computations and to their favorite tools, which are the parallel and massively parallel computers. In this field, we distinguish two classes of problems to be solved.

The first class is that of adapting, to this type of architecture, already existing numerical methods to solve large sparse linear systems. More precisely, we have studied those linear systems which come from the discretization by finite differences of second order elliptic problems of the type

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left(a\,\frac{\partial u}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(b\,\frac{\partial u}{\partial y}\right)=f,$$

with non negative piecewise smooth coefficients, in the unit square, with a Dirichlet boundary condition. The resulting linear system $A\,u_h = f_h$ is such that A is a symmetric positive definite matrix. It is then possible to compute u_h with the help of an iterative algorithm such as the well-known preconditioned conjugate gradient method.

Therefore, we have defined and studied (matrix) preconditioners of A with the following natural properties. The first one is to be numerically efficient, that is to be close to A^{-1}, so that the algorithm converges after a small number of iterations. The second one is that these preconditioners are well-suited for parallel computing, or in other words that their implementation on parallel architectures leads to an optimal parallelization rate (as close as possible to one). Naturally, we have partitioned the unit square into either strips or boxes and used a domain decomposition approach **[2]**, **[12]**. We have also studied another type of preconditioners, based on a red-black reordering of the set of unknowns **[3]**.

Obviously, the main advantage of discretizing the problem (on a square) by finite differences is that, in this way, it is possible to avoid a major difficulty which appears when one wishes to apply a domain decomposition method (on any computational domain), for instance with a finite element approach. Indeed, how should one partition "optimally" the domain?

In the second place, we have tried to address this difficulty. For that, we have studied the more general problem of graph partitioning. In particular, this framework, which consists in modeling the computational domain as a graph, leads to a geometry-free problem. As a matter of fact, the dimension (2d or 3d) has not to be taken into account.

To partition a graph, there exist two main categories, depending whether the data structure of the graph is used as a whole ("global" heuristics), or one substructure after the other ("local" heuristics).

Global heuristics are usually recursive. Among recursive methods, the foremost is the Recursive Spectral Bisection. In **[8]**, we have proved that the partition induced by RSB satisfies to an optimality criterion.

We have also conceived a greedy method, which falls into the local heuristics category. This method has been analysed from both theoretical and practical points of view **[4]**.

In this framework, we have compared several partitioning heuristics on a set of test-graphs. In **"Recursive partitioning methods..."**, we have measured several parameters related to the quality of the partitions thus obtained, together with the CPU time needed to build them. In **[13]**, we have coupled these partitioners to a PDE solver package, in order to estimate the impact of these heuristics on the numerical problem to be solved.

To conclude for this class, we have analysed in **[6]** the coarse mesh generation problem, for 2d triangular meshes. This problem usually appears when multilevel methods, either domain decomposition or multigrid, are used.

The second class corresponds to the study of the solution to the time-dependent Maxwell equations, and to some of its approximate models, in a bounded domain, from the point of view of functional and numerical analyses.

Among these models, we have considered the magnetostatic equations, or $\nabla \times -\mathrm{div}$ problem, in which the dependence in time of the electromagnetic field is neglected. A number of results that have been proved are applicable to the Stokes system of equations. We have also worked on the resolution of the Darwin model, which is derived from Maxwell's equations by neglecting the divergence-free part of the displacement current.

In the first place, we have studied the case of a bounded, connected but not simply connected, domain Ω of $\mathbf{R}^3$ with a smooth boundary. It has been assumed that the domain could be made simply connected by removing (smooth) cuts. The resulting domain has a (pseudo-)Lipschitz continuous boundary on which the classical theory can be used.

On this type of domain, cf. **[1]**, we have introduced the Helmholtz decomposition of elements of $L^2(\Omega)^3$. For the magnetostatic equations, existence and uniqueness results have then been established in the case of a perfectly conducting material enclosing the domain. In a similar manner, existence and uniqueness results have also been obtained for the Darwin model **[10]**.

Then, we have considered the resolution of the time-dependent Maxwell equations in a non convex polygonal domain of $\mathbf{R}^2$, i. e. with reentrant corners. In the case when there is a perfectly conducting boundary condition in conjunction with smooth source terms, one can expect $H^1(\Omega)$ regularity in a convex domain. This does not hold in the more general case. As a consequence, we have built a splitting of the solution into a regular part (which belongs to $H^1(\Omega)$), and a singular part (**[5]**, **[11]**). This splitting of the solution is based on orthogonal decompositions of functional spaces. This allows to define a discretization of the problem by the classical $H^1(\Omega)$-conforming finite elements for the regular part, and to introduce a domain decomposition method for the singular part, which takes into account the explicit knowledge of the singularity around reentrant corners.

In $\mathbf{R}^3$, we have begun the extension of the above mentioned theory to Lipschitz continuous polyhedral domains. In particular, we have determined an orthogonal decomposition of the space $L^2(\Omega)$ in **[9]**.

Last but not least, we have studied the finite element discretization of the Darwin model on Lipschitz continuous polyhedral domains in **[7]**. We have compared the $H(\nabla\times;\Omega)$- and $H(\nabla\times,\mathrm{div}\,;\Omega)$-conforming finite element methods and obtained the associated error estimates.

Liste de publications

Articles

[1] A decomposition of $L^2(\Omega)^3$ and an application to magnetostatic equations. *Math. Models Meth. App. Sci.*, 3(3):289–301, 1993.

[2] Implementation of a domain decomposition method well-suited for (massively) parallel architectures. *High Speed Comp.*, 6(1):157–182, 1994.

[3] Repeated red-black ordering: a new approach. *Numerical Algorithms*, 7:295–324, 1994.

[4] On the validity of a front-oriented approach to partitioning large sparse graphs with a connectivity constraint. (en collaboration avec Françoise Lamour) *Numerical Algorithms*, 12:193–214, 1996.

[5] Résolution des équations de Maxwell dans un domaine avec un coin rentrant. (en collaboration avec Franck Assous et Eric Sonnendrücker) *C. R. Acad. Sci. Paris, t. 323, Série I*:203–208, 1996.

[6] Does contraction preserve triangular meshes? (en collaboration avec Françoise Lamour) *Numerical Algorithms*, 13:201–223, 1996.

[7] Finite element convergence for the Darwin model to Maxwell's equations. (en collaboration avec Jun Zou) *Modél. Math. Anal. Numér.*, 31(2):213–250, 1997.

[8] On the optimality of the median cut spectral bisection graph partitioning method. (en collaboration avec Tony F. Chan et W. K. Szeto) *SIAM J. Sci. Comput.*, 18:943–948, 1997.

[9] Une caractérisation de l'orthogonal de $\Delta(H^2(\Omega) \cap H^1_0(\Omega))$ dans $L^2(\Omega)$. (en collaboration avec Franck Assous) *C. R. Acad. Sci. Paris, t. 325, Série I*:605–610, 1997.

[10] A decomposition of the electromagnetic field. Application to the Darwin model. (en collaboration avec Eric Sonnendrücker) *Math. Models Meth. App. Sci.*, 7(8):1085–1120, 1997.

[11] Resolution of the Maxwell equations in a domain with reentrant corners. (en collaboration avec Franck Assous et Eric Sonnendrücker) *A paraître dans Modél. Math. Anal. Numér.*

Conférences avec comité de lecture

Ê

[12] A comparison of three iterative algorithms based on domain decomposition methods. Dans D. E. Keyes et J. Xu, editeurs, *Domain decomposition methods in scientific and engineering computing*, volume 180, pages 387–393. AMS, Contemporary Mathematics,

1994.

[13] On the influence of the partitioning schemes on the efficiency of overlapping domain decomposition methods. (en collaboration avec Françoise Lamour et Barry F. Smith) Dans *Fifth symposium on the frontiers of massively parallel computation.* IEEE, IEEE Computer Society Press, 1995.
Ê

Note technique

Recursive partitioning methods and greedy partitioning methods: a comparison on finite element graphs. (en collaboration avec Françoise Lamour) Rapport Technique CAM 94-09, UCLA, Dept of Mathematics, Los Angeles, CA 90024-1555, U.S.A., 1994.
Ê

Articles en préparation

Fully discrete finite element approaches for time-dependent Maxwell's equations. (en collaboration avec Jun Zou) *soumis à Numerische Mathematik.*

A characterization of the singular part of the solution to Maxwell's equations in a polyhedral domain. (en collaboration avec Franck Assous, Pierre-Arnaud Raviart et Eric Sonnendrücker) *soumis à Mathematical Methods in the Applied Sciences.*

Densité des fonctions régulières dans les sous-espaces de $H(\mathrm{div}\,,\mathbf{rot}\,;\Omega)$ tels que $\mathbf{v}\cdot\mathbf{n}\in L^2(\partial\Omega)$ ou $\mathbf{v}\times\mathbf{n}\in L^2(\partial\Omega)^3$. (en collaboration avec Christophe Hazard et Stephanie Lohrengel) *en préparation.*

Tools for solving the div-**curl** problem with mixed boundary conditions in a polygonal domain. *en préparation.*