

Dossier de renouvellement GdR CALCUL

Porteur du projet : Loïc Gouarin

1 Environnement du GdR

Le groupe CALCUL a été créé en 2003 au sein du département SPM du CNRS à l'intérieur du groupe MATHRICE (GdS 2754 du CNRS regroupant les administrateurs système et réseau des laboratoires de mathématiques). Depuis 2009, le groupe Calcul est structuré en deux entités reconnues par le CNRS

- ⇒ le GdR CALCUL (INSMI, CNRS),
- ⇒ le Réseau métier CALCUL (MI, CNRS).

Ce découpage a été mûrement réfléchi et correspond à deux aspects bien distincts des domaines du calcul scientifique et intensif que sont les aspects recherches et les aspects technologiques. Ils ne sont néanmoins pas disjoints et peuvent donc se recouper pour un certain nombre de thématiques.

Le GdR CALCUL s'intéresse aux nouvelles méthodes numériques et aux nouveaux algorithmes qui sont à la pointe de la recherche en calcul scientifique et intensif. Ces thématiques ont une forte composante en mathématiques appliquées et en informatique mais sont également pluridisciplinaires (physique, chimie, biologie, ...). En règle générale, la validation de ces nouvelles méthodes passe par l'élaboration de logiciels de calcul qui sont développés au sein des laboratoires et sont distribués à la communauté du calcul en France et à l'international.

Le GdR CALCUL a donc également un rôle essentiel à jouer dans la promotion de ces développements et dans leur apprentissage. Enfin, il peut proposer son expertise sur la parallélisation et l'optimisation des algorithmes en s'appuyant fortement sur le Réseau Calcul.

Il s'intéresse également à la visualisation des données et plus particulièrement aux traitements rapides de grandes masses de données et aux thèmes de recherche qui sont associés à cette problématique.

Le paysage du GdR et du Réseau CALCUL est résumé sur la figure [1](#).

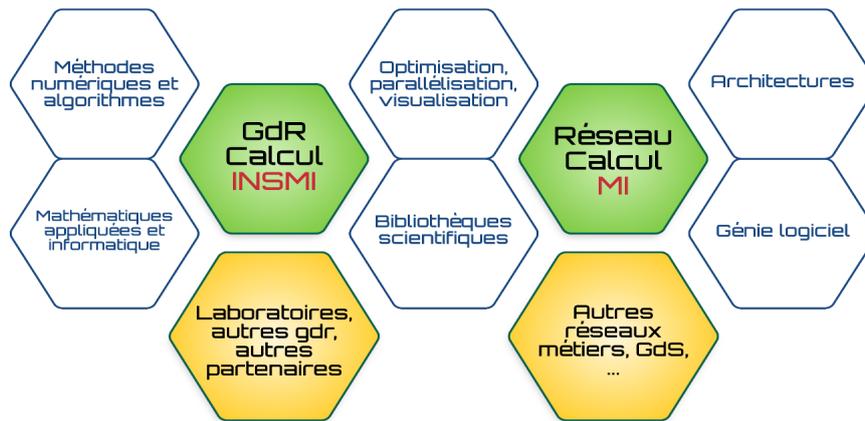


FIGURE 1 – Structuration du groupe CALCUL.

Depuis la création du GdR CALCUL en 2009, de nombreuses actions ont vu le jour permettant de constituer puis de renforcer la communauté autour du calcul en France. Le GdR CALCUL offre des formations sous forme d'écoles thématiques et des journées scientifiques. Il dispose également d'un site internet référençant ses actions avec les supports numériques associés et offre la possibilité au monde académique et privé de déposer des offres d'emploi (ingénieurs, doctorats, post-doctorats, ...). Il dispose également d'une liste de discussion de plus de 1500 abonnés.

Parmi les actions les plus révélatrices du GdR, nous pouvons citer :

- ⇒ organisation du CEMRACS en 2012,
- ⇒ organisation de mini-symposium chaque année aux congrès CANUM et SMAI,
- ⇒ école thématique sur les méthodes multigrilles en 2014,
- ⇒ journée sur la résolution du problème de Poisson en 2015,
- ⇒ journée sur la méthode de Galerkin discontinue et ses applications en 2015.

Nous constatons que le GdR CALCUL s'est essentiellement intéressé ces dernières années aux aspects qui touchent la résolution d'équations aux dérivées partielles. Or le calcul scientifique et intensif va bien au-delà que ce simple aspect et il est donc important que le GdR CALCUL se diversifie.

Le GdR CALCUL ne fera pas un historique des deux précédents mandats de quatre ans dans ce dossier de renouvellement mais s'attachera à démontrer sa grande ouverture tant au niveau des thématiques que de ses actions pour l'animation scientifique dans cette nouvelle version.

En effet, le GdR CALCUL souhaite étendre largement ses thématiques en s'intéressant à tous les domaines des mathématiques appliquées où le calcul scientifique ou intensif a un rôle prépondérant dans le processus de la recherche en France et à l'international. Pour ce faire, il a identifié huit thématiques qui semblent bien représenter ce que l'on peut faire en calcul aujourd'hui avec des problématiques fortes tant au niveau du savoir-faire que des besoins :

1. équations aux dérivées partielles,
2. algèbre linéaire creux et dense,

3. calcul et équations stochastiques,
4. traitement d'images,
5. optimisation et contrôle optimal,
6. calcul exact,
7. arithmétique par intervalles,
8. machine learning.

2 Description des nouvelles thématiques

Le GdR CALCUL a entrepris, depuis le mois d'octobre, une vaste réflexion sur les huit thématiques citées précédemment en s'appuyant sur des chercheurs experts capables d'avoir une vision large des problématiques du moment et des développements futurs pour chacune d'elles.

L'objectif de ces contributions est d'aborder les points suivants :

- ⇒ état de l'art actuel au niveau des méthodes numériques et des calculs réalisés,
- ⇒ besoins identifiés ou verrous,
- ⇒ perspectives permettant de répondre aux besoins : synergie avec d'autres composantes, formation, ...
- ⇒ liste des GdR abordant cette thématique.

afin d'une part de mener des actions concrètes et originales sur ces thématiques et d'autre part de créer du lien entre elles car il y a souvent des sujets connexes. Il ne faut pas oublier les interactions éventuelles avec d'autres GdR qui permettront à chacun d'étendre ses champs de compétences.

Certaines thématiques ont déjà des GdR ayant une activité forte de recherche sur les problématiques associées. C'est par exemple le cas du GdR MIA en traitement d'images, le GdR IM pour le calcul exact et l'arithmétique par intervalles ou encore le GdR MOA et le groupe MODE de la SMAI pour l'optimisation et le contrôle optimal. Le GdR CALCUL ne souhaite donc pas se substituer à ces structures mais interagir avec elles afin d'établir un état de l'art et des perspectives sur l'élaboration de nouvelles méthodes numériques et de nouveaux algorithmes. Le calcul scientifique et intensif jouent alors un rôle majeur dans tout ce processus de recherche. Il est également intéressant de réunir ces communautés autour du calcul pour créer du lien sur des problématiques qui peuvent parfois être très proches.

Dans la suite, nous détaillerons l'ensemble des thématiques au travers de contributions d'experts.

2.1 Équations aux dérivées partielles

Contributeurs : François Alouges et Bertrand Maury

Le lien entre les EDP et le calcul est au cœur de l'Analyse Numérique, depuis sa création dans les années 50. Celle-ci s'est développée énormément de sorte qu'il est devenu courant dans l'art de l'ingénieur de simuler des modèles mécaniques, acoustiques ou électronique grâce à des logiciels qui intègrent la modélisation du phénomène sous la forme d'une EDP et sa résolution par une méthode numérique adaptée. Ainsi, de nos jours, la plupart des véhicules (voitures, avions, bateaux, *etc.*) sont conçus grâce à la filière numérique qui étudie en résolvant les EDP

correspondantes des problèmes aussi divers que la déformation de l'habitacle, le bruit du moteur, la climatisation, l'aérodynamisme du véhicule ou encore sa compatibilité électromagnétique.

Actuellement, l'utilisation de la simulation numérique d'EDP tend à se diversifier et se complexifier. Les modèles utilisés sont souvent couplés de façon à pouvoir comprendre les interactions entre des phénomènes de nature différente et les descriptions doivent devenir plus précises. En parallèle de l'accroissement des puissances des ordinateurs, on assiste à une augmentation très sensible de la difficulté des problèmes à résoudre par le calcul numérique, et un élargissement du spectre des applications.

Ainsi, par exemple, la biologie et la médecine deviennent un des enjeux majeurs de la modélisation mathématique. Afin de mieux cerner l'effet d'un médicament, comme un aérosol que le patient doit inspirer, la simulation numérique pourra apporter une réponse grâce à une modélisation du phénomène par un couplage d'une description de type "mécanique des fluides" pour l'air, et cinétique pour la prise en compte des gouttes d'aérosol, le tout dans une géométrie complexe, la trachée. D'autres chercheurs veulent comprendre les mesures obtenues par un électrocardiogramme en simulant la propagation d'une onde électrique depuis la surface du cœur jusqu'aux extrémités du corps, en prenant en compte la diversité des matériaux rencontrés lors de son passage. L'imagerie médicale est elle aussi impactée par de nouveaux algorithmes qui permettent, grâce à un scanner rapide, de réaliser l'imagerie intérieure complète du patient. Le chirurgien peut dès lors répéter son opération virtuellement autant de fois qu'il le faut avant de la réaliser. Les équations aux dérivées partielles sont à la base de ces disciplines émergentes à l'interface entre les disciplines traditionnelles telles que la biologie, la physique et les mathématiques appliquées, et ces nouveaux enjeux ne se résoudront qu'en associant les cultures et les approches.

D'autres exemples montrent l'impact dans la société de l'étude et de la simulation des EDP. Ainsi, les dynamiques collectives, comme par exemple l'évolution de foules ou la modélisation des réseaux sociaux se font aujourd'hui grâce à de nouveaux modèles aux dérivées partielles. Un des enjeux de ce domaine consiste à comprendre l'influence de certaines stratégies à l'échelle microscopique sur le comportement à grande échelle du groupe. Les descriptions de ces phénomènes nécessitent souvent de grosses ressources de calcul et font quelquefois appel à l'ajout de termes stochastiques modélisant les quantités méconnues. Et, dans un autre ordre d'idées, les modèles de circulation routière, les propagations de tsunamis, ou la fonte et le mouvement des icebergs sont, à l'instar de la simulation météorologique, obtenus par simulation de modèles d'EDP.

Afin d'appréhender ces nouveaux domaines, le calcul numérique doit développer de nouveaux algorithmes. Les challenges actuels, qui visent à faire face aux problèmes de taille gigantesque, se répartissent en plusieurs catégories :

- ➔ **De nouveaux algorithmes.** Même des problèmes linéaires, faisant intervenir des milliards d'inconnues, ne peuvent être résolus sur les calculateurs actuels qu'au moyen de méthodes spécifiques. Ces 10 ou 15 dernières années ont vu fleurir des nouveaux concepts, comme les Fast Multipole Methods (FMM), la compression ACA ou les \mathcal{H} -matrices qui généralisent l'approche hiérarchique des matrices, et le principe "divide and conquer" à la base de l'algorithme FFT de Cooley et Tuckey. De nouveaux paradigmes viennent de naître comme la "Sparse Cardinal Sine Decomposition" qui adopte un nouveau point de vue pour discrétiser les transformées de Fourier tridimensionnelles.
- ➔ **Du parallélisme.** Pour pouvoir être implantées sur les machines de calcul actuelles, les algorithmes doivent nécessairement envisager du parallélisme massif. La parallélisme en espace fait l'objet des méthodes dites "de décomposition de domaines" qui ont connu un regain d'intérêt spectaculaire ces dernières années. Les problèmes temporels sont, quant à eux, traités par les méthodes "pararéelles" qui permettent, malgré la dépendance temporelle intrinsèque de paralléliser les résolutions en temps.

→ **De la simplification.** Dans une autre direction, les modèles envisagés sont très complexes et dépassent souvent largement les capacités actuelles des ordinateurs les plus puissants. Il faut aussi souvent simuler de nombreuses occurrences du modèle afin soit de déterminer la confiance que l'on peut avoir dans le résultat, soit optimiser un critère, souvent géométrique (par exemple, un profil d'aile pour augmenter la portance d'un avion). On est alors conduit à devoir simplifier le modèle. Les méthodes dites "de krigeage" ou de "plan d'expérience" permettent ce genre d'approche. On y trouve également les méthodes de bases réduites. Avoir des modèles simplifiés, obtenus de façon "automatique" à partir d'un modèle trop complexe fait aujourd'hui l'objet de nombreux travaux de recherche.

Le développement de méthodes numériques se heurte également à la juxtaposition complexe des modèles physiques. Parfois, les modèles intègrent des couplages forts entre phénomènes possédant des temps ou des échelles caractéristiques (très) différentes. Parfois, les données à traiter sont véritablement de taille monstrueuse. Souvent, il faut inventer de nouveaux schémas numériques, plus stables, plus rapides, plus précis de façon à rendre compte du phénomène recherché. En parallèle, les architectures des machines se sont complexifiées elles aussi. Les processeurs, dont la performance stagne depuis quelques années, utilisent, pour pouvoir augmenter leurs capacités, plusieurs cœurs de calcul, et sont interconnectés au sein d'un même nœud de calcul en partageant une partie de la mémoire. Les nœuds, interconnectés via un réseau rapide permettent également un calcul réparti. Toutefois, l'utilisation de ces machines requiert une véritable expertise. Pouvoir profiter de cette hiérarchie nécessite bien souvent de redéfinir ou réadapter voire repenser les algorithmes existants. Les traditionnelles méthodes de type "éléments finis" ou "différences finies" qui permettent de proposer rapidement des schémas numériques pour résoudre des EDP, se voient perfectionnées en "méthodes de décomposition de domaines" ou "méthodes multi-niveaux" de façon à exploiter le parallélisme intrinsèque des machines. Une difficulté persiste néanmoins au niveau des langages et modèles de programmation qui restent encore trop près des machines et requièrent que l'utilisateur s'investisse dans des concepts informatiques très proches de la machine et plus loin de l'algorithme lui-même. Des langages de plus haut niveau (par exemple, Python, Matlab, Octave ou Julia) commencent à permettre du parallélisme efficace de manière relativement simplifiée mais cette approche est assez loin d'être généralisée.

La fédération d'une communauté liée au calcul, comme celle à laquelle le GdR Calcul s'adresse est primordiale. L'échange souple et rapide d'informations concernant le calcul est un atout de même que les activités de dissémination des dernières techniques que le groupe effectue au sein de la communauté. Le domaine est très largement évolutif et nécessite beaucoup d'agilité. Par ailleurs, l'expertise des laboratoires académiques dans la résolution numérique de modèles aux dérivées partielles doit être transférée aux entreprises. Des partenariats dans ce sens commencent à émerger mais encore trop timidement. Toutefois, des programmes nationaux du type de HPC-PME, promu par GENCI pourraient être un bon levier dans cette direction.

2.2 Algèbre linéaire creuse et dense

Contributeur : Laura Grigori, Clément Pernet

2.2.1 Algèbre linéaire numérique

Le développement d'algorithmes robustes et hautement parallèles pour l'algèbre linéaire numérique est un sujet d'une importance cruciale pour les simulations numériques ainsi que d'autres applications scientifiques et industrielles, dans lesquelles ces problèmes surviennent fréquemment. Deux défis sont facilement identifiés dans ce contexte. En premier, les problèmes à résoudre sont de grande taille car les simulations numériques utilisent une résolution de plus en plus grande. Ensuite, les ordinateurs deviennent plus rapides, mais leur architecture devient de plus en plus

complexe. Concevoir des algorithmes qui les exploitent efficacement est une tâche difficile. Pour relever ces défis, plusieurs directions de recherche sont importantes dans ce contexte.

Algorithmes pour l’algèbre linéaire minimisant les communications Un des défis majeurs dans le calcul haute performance est l’écart qui croît de manière exponentielle entre le temps nécessaire pour effectuer des opérations flottantes et le temps nécessaire pour transférer des données, que ce soit entre les différents niveaux de la hiérarchie mémoire ou entre les différents processeurs d’une machine parallèle. Pour résoudre ce problème, une approche qui a été introduite ces dernières années consiste à développer des algorithmes qui permettent de minimiser les communications. Des résultats ont été obtenus en algèbre linéaire dense principalement, où des bornes sur la complexité en terme de communication pour les méthodes directes ont permis de montrer que les algorithmes classiques et implémentés dans des bibliothèques comme Lapack ou Scalapack ne permettent pas de minimiser les communications. De nouveaux algorithmes ont été introduits, ces algorithmes sont optimaux en terme de communication et permettent d’être plus scalables sur les machines massivement parallèles. Étendre ces résultats à l’algèbre linéaire creuse et au-delà est un sujet de recherche actif.

Résolution de systèmes linéaires La conception d’algorithmes robustes pour la résolution de systèmes linéaires de grande taille sur des machines parallèles reste un sujet de recherche majeur, et concerne entre autres aussi bien les méthodes directes, que les méthodes itératives à base de sous-espaces de Krylov, les méthodes multigrilles, les méthodes de décomposition de domaines ou les méthodes hiérarchiques. Surmonter les limites en scalabilité de ces méthodes et exploiter le parallélisme massif et hiérarchique des machines parallèles actuelles et émergentes constituent des directions de recherche très actives.

Interaction entre les solveurs linéaires et non-linéaires De manière classique, les problèmes non-linéaires sont résolus à travers une séquence de solveurs linéaires utilisant des méthodes itératives comme les méthodes de sous-espaces de Krylov. Une interaction entre les solveurs linéaires et non-linéaires peut conduire à une mise en relation entre différents seuils de convergence et différentes erreurs, la possibilité d’extraire plus de parallélisme, et globalement à un temps de résolution plus court.

2.2.2 Algèbre linéaire exacte

En calcul exact comme en calcul numérique, l’algèbre linéaire est au cœur de la plupart des calculs intensifs. On y retrouve les trois grands types d’approches : méthodes itératives (*via* les algorithmes de Wiedemann, Lanczos et autres variantes autour de l’itération de Krylov), méthodes directes creuses, ou méthodes directes denses.

Le calcul exact se distingue en revanche au niveau de la diversité des arithmétiques de base utilisées qui impactent tous les niveaux algorithmiques de l’algèbre linéaire. Le calcul en précision arbitraire, pour les nombres entiers, les rationnels, mais aussi les grands corps finis, repose soit sur des implantations logicielles de l’arithmétique multi-précision, soit sur des remontées multi-modulaires ou p -adiques à partir de corps finis de taille machine. Ces corps finis peuvent alors utiliser avantageusement les unités arithmétiques des CPU (flottantes ou entières) et leur vectorisation. Enfin, les corps finis de très petite taille font appel au bit-packing ou au bit-slicing et reposent sur l’arithmétique booléenne.

Algèbre linéaire à précision machine En algèbre linéaire dense, l’utilisation du produit matriciel sous-cubique de type Strassen, possible en calcul exact, impose une structure récursive

à toute la pile algorithmique. La parallélisation efficace de telles tâches récursives est un défi que les nouveaux moteurs exécutifs en architecture multi-cœurs commencent à peine à relever, et doivent être conjugués avec un mappage de données cyclique à gros grain [41]. La résolution des dépendances via un DAG de flots de données, effective pour les algorithmes itératifs par blocs n'est pas pour l'instant réalisable en tâches récursives, de part la limitation des langages et des ordonnanceurs disponibles.

En algèbre linéaire creuse, aux stratégies standard de pivotage issues du calcul numérique s'ajoutent aussi certaines spécialisations, comme pour les matrices de Maccaulay [46], mêlant de façon hybride le calcul creux et dense. Dans cet esprit, l'adaptation au calcul exact des méthodes multi-frontales est à envisager.

Parallélisation de la haute précision L'approche multi-modulaire offre une parallélisation évidente et passant à l'échelle. A l'opposé, le calcul direct en arithmétique multi-précision augmente l'intensité de calcul pour un volume de données fixé, facilitant aussi la parallélisation. Cependant ces deux approches sont plus coûteuses en terme de travail total, et les meilleures complexités séquentielles sont atteintes *via* les remontées p -adiques et les compromis taille-dimension. La parallélisation de ces algorithmes récents reste encore peu traitée aussi bien au niveau algorithmique que des implantations. Il s'agit d'un verrou important dans plusieurs contextes applicatifs, comme en cryptanalyse (calcul de générateurs matriciels [53], ou réduction de réseaux euclidiens [62]) ou encore en calcul symbolique-numérique.

2.3 Calcul et équations stochastiques

Contributeur : Charles-Edouard Bréhier

L'utilisation de modèles basés sur des équations stochastiques (*i.e.* dépendant de quantités aléatoires) s'est développée récemment dans de nombreux domaines d'applications : par exemple en chimie, en biologie (neurosciences), en physique statistique, en finance. Même si les systèmes considérés ne sont pas intrinsèquement stochastiques, les termes aléatoires permettent en effet souvent de modéliser de façon simple certains phénomènes : fluctuations, quantification des incertitudes, passage microscopique-macroscopique...

L'approximation (discrétisation en temps) des Équations Différentielles Stochastiques (EDS), qui sont obtenues par perturbation (le plus souvent de type mouvement brownien) d'Équations Différentielles Ordinaires (EDO) est un sujet assez bien compris dans la littérature mathématique (analyse d'erreur, construction de schémas d'ordre élevé, comportement en temps long...).

Les Équations aux Dérivées Partielles Stochastiques (EDPS) sont elles obtenues soit en considérant des EDP à coefficients aléatoires, soit par perturbation d'une EDP par un terme stochastique de type brownien, dépendant de toutes les variables du système. Au niveaux théorique et numérique, de nombreuses questions restent ouvertes. Notamment l'écart reste grand entre les cas académiques considérés dans la littérature mathématique, et les besoins pour les applications.

Pour expliquer les spécificités de l'approximation des EDS et EDPS, considérons des équations d'évolution, avec perturbation de type brownienne. Pour ces deux types de problèmes, une discrétisation en temps est naturellement requise. Il est aussi souvent nécessaire de procéder à une approximation de type Monte-Carlo (discrétisation de l'aléa), c'est-à-dire de répéter l'expérience sur un (grand) nombre de réalisations indépendantes : les quantités d'intérêt sont généralement des espérances (moyennes) de la solution. Enfin, dans le cas EDPS, il est nécessaire

d'ajouter une discrétisation à la fois de la solution et de la perturbation stochastique (à valeurs dans un espace fonctionnel), donnant des systèmes d'EDS en grande dimension.

L'efficacité de ces méthodes dans ce cadre stochastique est *a priori* faible : les ordres de convergence en temps et en espace des méthodes standard (Euler, éléments finis) sont en général diminués par rapport au cadre déterministe (car les solutions sont moins régulières).

Concernant les aspects calcul, nous pouvons identifier les besoins suivants :

- ➡ A partir des existants dans le cadre déterministe, pouvoir intégrer des termes stochastiques ou des coefficients aléatoires.
- ➡ Tester sur des cas académiques de nouvelles méthodes de discrétisation, en particulier pour les EDPS (par exemple qui ne seraient pas des perturbations de schémas déterministes), de manière extensive, pour mettre en évidence les ordres de convergence.
- ➡ Tester sur des cas complexes, issus des applications, ces méthodes.

De plus, des aspects généraux liés à l'utilisation de méthodes de Monte-Carlo (nécessité d'un grand nombre de réalisations) sont les suivants :

- ➡ Faciliter l'utilisation de générateurs de nombre pseudo-aléatoires performants (Mersenne-Twister, et ces futurs successeurs).
- ➡ Paralléliser les algorithmes, pour effectuer efficacement les calculs indépendants : la difficulté concerne encore l'utilisation de générateurs aléatoires adaptés.
- ➡ Mettre en œuvre des techniques de réduction de variance, par exemple : multilevel Monte-Carlo, échantillonnage préférentiel, systèmes de particules en interaction.

Des objectifs naturels associés aux enjeux précédents sont alors :

- ➡ Fournir un support pour mettre en place les stratégies d'implémentation précédentes : soit à partir de codes existants, soit pour en développer de nouveaux, spécifiques au cas stochastique.
- ➡ A l'attention des spécialistes de probabilités et statistiques, présenter les actions du GdR. Notamment, faire connaître les moyens de calcul à disposition et favoriser leur utilisation.
- ➡ A l'attention des spécialistes d'analyse numérique et des EDP, présenter les particularités et les difficultés de la simulation stochastique.
- ➡ Favoriser les échanges entre théoriciens et praticiens des équations stochastiques, pour mettre en commun les modèles d'intérêt et les méthodologies les plus avancées.

Pour faire interagir ces différentes communautés, des journées pourront être organisées, avec plusieurs objectifs : formation (calcul, probabilités), échanges scientifiques pluridisciplinaires.

Dans cette thématique nouvelle par rapport à ses objectifs précédents, le GdR pourra d'une part dynamiser les calculs réalisés sur des équations stochastiques, en insistant sur leur importance pratique et sur leurs spécificités ; d'autre part, en profitant de ses expériences précédentes, il pourra favoriser l'interaction des communautés.

Les besoins en calcul liés aux équations stochastiques sont en constante augmentation : de tels modèles ne peuvent plus être mis de côté par les praticiens ; d'un point de vue mathématique ces équations sont mieux comprises ; et des méthodes numériques implantables et de coût acceptable sont à disposition. Sur ce sujet en développement, le GdR a beaucoup à apporter.

2.4 Traitement d'images

Contributeurs : Jérôme Bobin, Frederic Chazal, Emilie Chouzenoux, Laurent Condat, Julie Delon, Julie Digne, Stanley Durrleman, Jalal Fadili, Florent Krzakala, Sylvain Lefebvre, Bruno Lévy, Quentin Mérigot, Jean-Christophe Pesquet, Gabriel Peyré, Julien Tierny, Jean-Yves Tourneret, Julien Rabin.

2.4.1 Optimisation en imagerie

Optimisation convexe et non-convexe Les problèmes de grande taille en traitement d'image (tels que ceux rencontrés en restauration de vidéos, ou en reconstruction d'images médicales 3D) nécessitent la minimisation de fonctionnelles de plus en plus sophistiquées. Cette dernière décennie a vu l'essor des méthodes proximales par éclatement (voir *e.g.* [21]) ouvrant la voie au traitement parallèle des différents termes de la fonctionnelle à minimiser en exploitant les architectures de calculs modernes (GPGPU, multicœurs, clusters). L'accélération de la convergence de ces méthodes est au cœur des recherches actuelles. La question de la synchronisation des informations entre les nœuds de calcul est importante afin de développer des algorithmes parallèles et distribués efficaces. En particulier, une piste de recherche prometteuse concerne le développement de versions stochastiques de ces méthodes [60, 33, 66].

Applications en imagerie astrophysique Un domaine d'application important pour ces méthodes d'optimisation innovantes est l'imagerie astrophysique [45]. Les verrous actuels sont essentiellement liés au traitement de données de grande taille (plusieurs milliards de pixels). Les méthodes numériques doivent donc évoluer de sorte à gagner en rapidité de convergence, par l'utilisation de métriques variables voire de second-ordre [32, 22]. Les algorithmes d'optimisation stochastiques, incrémentaux, ou distribués permettront aussi la mise en œuvre de moyens de calcul parallèle intensif [43]. Certains des problèmes traités sont aussi non-convexes (*e.g.* séparation aveugle de sources), ce qui pose des défis supplémentaires, pour lesquels des développements théoriques récents [26] ouvrent des voies d'études à explorer.

2.4.2 Méthodes de Physique Statistique

Méthodes de simulation stochastique en grande dimension Les méthodes de simulation stochastique MCMC sont très populaires en inférence Bayésienne, notamment pour résoudre divers problèmes en imagerie. Les techniques classiques, telles que l'échantillonneur de Gibbs, ont un coût de calcul rédhibitoire pour ces problèmes. Les méthodes passant bien mieux à l'échelle utilisent l'algorithme de Metropolis-Hastings en s'inspirant du processus de diffusion de Langevin [67], ou en utilisant des techniques de Monte Carlo Hamiltonienne (HMC), voir par exemple [15] pour des applications en imagerie hyperspectrale. Les travaux de recherche actuels permettent de simuler de manière ingénieuse les composantes corrélées du vecteur inconnu [73], d'exploiter la géométrie Riemannienne de la loi d'intérêt [49] ou appliquent des méthodes proximales pour simuler des lois non différentiables [64].

Méthodes de passage de messages Les méthodes de passage de messages ont connu un important regain d'intérêt récent et ont permis le développement d'algorithmes rapides et efficaces pour résoudre certains problèmes inverses comme le « compressed sensing » [38]. Depuis, de nombreuses applications nouvelles et extensions sont apparues [44]. Ces méthodes peuvent ainsi être utilisées avec efficacité dans le cas d'images naturelles [70] et offrent des performances équivalentes avec l'état de l'art de reconstruction mais avec une réduction notable de la complexité.

2.4.3 Traitement d'images, vision par ordinateur et visualisation

Traitement d'images L'état de l'art en traitement d'images utilise des méthodes non-locales de comparaison de groupes de pixels (« patches »). L'utilisation d'un grand nombre d'images en haute résolution pose des problèmes majeurs en terme de temps de calcul (par exemple [51] pour des vidéos à grande dynamique). Les enjeux actuels en terme de calcul concernent principalement (i) la recherche rapide des plus proches voisins pour comparer les patches [20]; (ii) l'utilisation de structures génériques pour estimer des *a priori* dans l'espace des patches [50]; (iii) l'exploitation de structures géométriques pour modéliser le graphe d'adjacence des patches [72].

Vision par ordinateur La vision par ordinateur a été profondément impactée par les réseaux de neurones « profonds », qui ont permis des avancées significatives dans diverses applications (indexation, classification, reconnaissance) [30]. Ces méthodes sont cependant très gourmandes en termes de données annotées et requièrent des capacités de calculs très importantes (nécessitant des calculs intensifs sur GPU). Les classifieurs appliqués en sortie de ces réseaux posent aussi des verrous en termes de complexité, voir par exemple [65].

Imagerie Médicale L'imagerie médicale 3D occupe une place prépondérante dans le développement de nouveaux outils numériques au service de la médecine [18]. Ces outils nécessitent des développements spécifiques en traitement d'images, en particulier pour (i) la chirurgie guidée par l'image, (ii) la recherche de biomarqueurs reproductibles de pathologies, (iii) des études de groupe en neurosciences et au-delà. Les besoins en calcul qui sous-tendent ses développements sont considérables, et leur distribution sur des grappes est devenu indispensable. La visualisation interactive et la réalité augmentée (*e.g.* pour la chirurgie guidée) sont également des problématiques reliées très importantes. La plus grande tendance qui se dégage pour les prochaines années concerne la multimodalité : combiner de multiples modalités entre elles. Ceci ne fera qu'augmenter les besoins de développement d'algorithmes performants sur des architectures adaptées.

Visualisation scientifique La visualisation scientifique consiste à générer des représentations graphiques intelligibles et interactives de données scientifiques massives, pour l'exploration visuelle, l'analyse et l'interprétation de ces données. La visualisation scientifique vise à définir des algorithmes suffisamment légers pour une utilisation interactive des données. Parmi les défis rencontrés, on peut noter : (i) le rendu efficace de larges volumes de données scalaires [68], vectorielles [76] ou tensorielles [75]; (ii) l'extraction et l'exploration interactive de structures d'intérêt dans ces données, par exemple via des notions dérivées de la persistance homologique [42]. Un déséquilibre croissant s'observe récemment à la fois (i) entre la résolution très importante des appareils d'acquisition et la puissance des stations de travail dédiées à leur visualisation et leur analyse, (ii) entre les performances de calcul des super-calculateurs et les débits des réseaux rapatriant ces données. Il devient alors nécessaire de déplacer les méthodes d'analyse et de visualisation au plus près des infrastructures de calcul (analyse et visualisation in-situ [77]). Ces nouveaux paradigmes soulèvent un nombre importants de défis nouveaux [34] notamment de calcul parallèle (en mémoire partagée et distribuée).

2.4.4 Géométrie discrète, algorithmique et informatique graphique

Topologie algorithmique et analyse topologique des données L'estimation des propriétés de nature topologique et géométrique de données connaît un développement important depuis quelques années [24, 31]. Inférer et comprendre ces structures est important à la fois pour améliorer la compréhension et l'analyse des données et pour concevoir des algorithmes

plus performants pour le traitement de données en grande dimension. Optimiser les algorithmes de calcul topologique et développer des outils permettant de les réaliser à grande échelle et de façon parallèle ou distribuée est un enjeu important nécessitant à la fois des progrès théoriques et algorithmiques et des moyens de calcul conséquents.

Géométrie algorithmique et simulation numérique Les progrès récents en géométrie algorithmique et numérique permettent d’envisager l’utilisation de nouvelles techniques non-standards pour améliorer la précision des simulations numériques, tout en « collant » à la physique au plus près. Par exemple, il est possible de s’assurer que la discrétisation satisfasse pour chaque élément les lois de conservation physiques [29] (voir aussi § sur les EDPs non-linéaires). De grands progrès restent toutefois à accomplir pour permettre une transcription directe des lois de la physique dans un ordinateur : cette phase de discrétisation de l’espace reste difficile à accomplir pour des géométries compliquées (telles que l’intérieur d’un moteur d’avion) [48, 25], et l’industrie utilise encore massivement des approches manuelles pour générer des maillages à base d’hexaèdres, ce qui nécessite parfois des mois d’intervention [71]. Des approches automatiques sont actuellement développées, et permettront peut-être d’automatiser ce processus [36].

Méthodes géométriques pour les EDP non-linéaires Il est apparu récemment que certains objets classiques de géométrie algorithmique interviennent dans la construction de discrétisations convergentes d’EDP fortement non-linéaires (équation de Monge-Ampère) apparaissant notamment en transport optimal de masse [55, 37]. Ceci a des applications aussi diverses que l’économie, la physique mathématique ou le traitement de la géométrie. Il reste maintenant à améliorer l’efficacité des algorithmes utilisés, ce qui est crucial pour traiter des problèmes de taille réaliste. Des efforts sont aussi nécessaires afin de rendre ces méthodes suffisamment simples pour une utilisation routinière en intégrant notamment les outils de géométrie algorithmique dans des logiciels de calcul scientifique comme Python/NumPy.

Maillages et surfaces Les 20 dernières années ont vu l’apparition de méthodes de reconstruction permettant de passer de la mesure physique (nuages de points 3D) à un modèle complet à travers des étapes de filtrage, recalage et reconstruction par des méthodes s’appuyant sur des concepts de géométrie algorithmique [16] ou sur l’extraction d’iso-niveaux d’une fonction distance signée [52]. L’explosion des moyens d’acquisition 3D génère des masses de données gigantesques qui nécessitent des méthodes multi-échelles efficaces et rapides pour la visualisation et le traitement. Un deuxième défi majeur de ce domaine est l’hétérogénéité des données, à la fois en qualité et en nature des informations mesurées lors de l’acquisition. Un piste très prometteuse est l’utilisation réseaux de neurones [27], par exemple pour la comparaison de formes.

Impression 3D Les techniques de fabrication additive (dont l’impression 3D) ont connu un essor fulgurant ces dernières années, grâce au développement de nouveaux procédés et matériaux, mais se heurtent au problème de la modélisation des formes créées. Il est ainsi crucial de proposer des méthodes de modélisation qui permettent d’exploiter le plein potentiel de cette technologie. La double problématique du temps de création et du poids de données est un domaine très actif en informatique graphique : modélisation par l’exemple [56], traitements géométriques en volume [74], traitements d’image pour la fabrication [54], techniques de modélisation sous contraintes [19]. La synergie avec le domaine de l’optimisation topologique [14] sera un élément déterminant à encourager pour le développement de nouvelles méthodes de modélisation semi-automatiques. Les défis scientifiques sont multiples : optimisation conjointe de critères non-linéaires et divergents (*e.g.* apparence et rigidité [40]), formulation des contraintes des procédés de fabrication pour la modélisation semi-automatique (*e.g.* mécanismes [19, 35]), traitements

numériques robustes (*e.g.* opérations booléennes [54, 39]) et enfin algorithmes permettant l'optimisation et le traitement de grandes masses de données (*e.g.* micro-structures [74, 54, 63]).

Conclusion

Cette contribution constitue un état de l'art partiel mais représentatif des enjeux actuels au niveau des méthodes numériques et des calculs associés dans les domaines liés à l'imagerie au sens large. Ce tour d'horizon des verrous identifiés montre de façon très frappante à la fois la grande variété des problèmes rencontrés, mais surtout les fortes interactions avec des domaines connexes (*e.g.* optimisation, statistiques, apprentissage machine, informatique graphique, *etc.*). Les GdR MIA et CALCUL ont un certain nombre de sujets connexes où chacun pourrait apporter une plus-value certaine. Le GdR CALCUL s'intéresse depuis de nombreuses années à l'optimisation des algorithmes numériques et aux nouveaux paradigmes de programmation permettant d'avoir de bonnes performances sur les nouvelles architectures (GPU, Xeon Phi, ...). Il commence également à s'intéresser au traitement de grosses masses de données. Le GdR MIA, quant à lui, s'intéresse à des problèmes en traitement d'images devenant de plus en plus complexes d'un point de vue algorithmique parallèle et traitement de données rapide. Nos deux GdR auraient donc tout intérêt à interagir sous forme de rencontres scientifiques et d'écoles thématiques sur des enjeux communs.

2.5 Optimisation et contrôle optimal

Contributeurs : Didier Aussel et Jean-Baptiste Caillau

La récente étude sur l'impact socio-économique des mathématiques (EISEM) en France [9] le dit en peu de mots : "modéliser, simuler, optimiser". L'optimisation interagit avec un nombre croissant de disciplines scientifiques et d'applications (témoin les nombreux GdR en lien avec l'optimisation, aux côtés du groupe MODE de la SMAI [1] : GdR MOA [2], GdR Jeux [3], GdR MIA [4], GdR ISIS [5]...), générant des besoins toujours plus importants en calcul qui se structurent autour des trois "big" : big data (Internet of Things, notamment), big machines (challenge exascale, fin annoncée de la loi de Moore, et surtout de la loi de Dennard [11] avec la nécessité de baisser la consommation d'énergie), big algorithms.

"We like to say optimization is everywhere—every business and discipline and person has problems to solve."

Rosemary Berger (NEOS) in [13]

Dans [58], les sources de "huge-scale optimization problems" citées sont les suivantes :

- ⇒ internet (nouveau)
- ⇒ télécommunications (nouveau)
- ⇒ edp et schémas éléments finis (ancien)

(Voir Fig. 2 pour les tailles et coûts de calcul ou de stockage associés.)

Plus généralement, et de façon non-exhaustive, citons pour les applications de l'optimisation demandeuses en ressources de calcul les domaines ci-après :

1. smai.emath.fr/spip.php?article330
2. gdrmoa.math.cnrs.fr
3. sites.google.com/site/gdrjeux
4. fadili.users.greyc.fr/mia/links.php
5. gdr-isis.fr

Class	Operations	Dimension	Iter.Cost	Memory
Small-size	All	$10^0 - 10^2$	$n^4 \rightarrow n^3$	Kilobyte: 10^3
Medium-size	A^{-1}	$10^3 - 10^4$	$n^3 \rightarrow n^2$	Megabyte: 10^6
Large-scale	Ax	$10^5 - 10^7$	$n^2 \rightarrow n$	Gigabyte: 10^9
Huge-scale	$x + y$	$10^8 - 10^{12}$	$n \rightarrow \log n$	Terabyte: 10^{12}

FIGURE 2 – Nonlinear optimization : problem sizes [58].

- ⇒ apprentissage et statistique, classification, clustering (réseaux sociaux, netflix challenge, deep learning, neural and convolution networks...)
- ⇒ assimilation de données en météo
- ⇒ problèmes inverses en géoscience (sismique pour la recherche d'énergies fossiles)
- ⇒ conception aéronautique (avions, lanceurs spatiaux)
- ⇒ problèmes sur de très grands graphes
- ⇒ réseaux d'énergie (électricité), de matières premières (eau, pétrole, gaz), de télécommunications
- ⇒ finance temps réel ultra-rapide
- ⇒ image (source naturelle de problèmes de grande taille fortement parallélisables), voir [10]
- ...

Nombre de ces sujets se retrouvent dans thématiques affichées par des Instituts de Recherche Technologiques comme SystemX (transport, communication, sécurité, numérique et énergie; Palaiseau, www.irt-systemx.fr) et St Exupery (aéronautique, espace et systèmes embarqués; Toulouse, www.irt-saintexupery.com).

Les applications citées font appel à différentes branches de l'optimisation, comprise au sens large, notamment :

- ⇒ la programmation linéaire et la recherche opérationnelle
- ⇒ l'optimisation convexe, semi-définie, conique
- ⇒ le contrôle optimal (des edo, des edp)
- ⇒ l'optimisation en variables mixtes, continues et entières (=MIO, Mixed Integer Optimization)
- ⇒ l'optimisation globale, certifiée [17, 69]
- ⇒ l'optimisation et le contrôle stochastique
- ⇒ l'optimisation de forme
- ⇒ le transport optimal
- ⇒ la théorie des jeux
- ⇒ l'optimisation multi-disciplinaire (MDO)
- ...

Le lien avec le HPC (notamment l'algèbre linéaire numérique de grande taille pour les systèmes creux ou structurés) est très important pour les applications, voir par exemple [8].

"What if a computer program could allow you to submit an optimization problem you're trying to solve — say mapping out the most efficient route for you to run your errands — and send back the best solution? That's the general idea behind

- Speed up between CPLEX 1.2 (1991) and CPLEX 11 (2007): **29,000 times**
- Gurobi 1.0 (2009) comparable to CPLEX 11
- Speed up between Gurobi 1.0 and Gurobi 5.5 (2013): **20 times**
- Total speedup: **580,000 times**
- A MIO that would have taken 7 years to solve 20 years ago can now be solved on the same 20-year-old computer in less than one second.
- Hardware speedup: $10^{5.5} =$ **320,000 times**
- Total Speedup: **200 Billion times!**

FIGURE 3 – Progress of MIO [23].

the Network-Enabled Optimization Server, known as NEOS, a service supported by WID and Morgridge Institute for Research experts. With more than 1.8 million problems submitted to the server in 2013, NEOS's growing popularity stems from the increasing importance of optimization in science, engineering and business." [13]

Une évolution remarquable des logiciels d'optimisation est la mise à disposition en ligne non seulement de serveurs de calcul proposant les méthodes les plus performantes [28, 59, 57, 61], mais aussi de collections de benchmarks qui font référence dans le domaine. Dans le cas de NEOS [5], le service s'appuie sur les ressources du Argonne National Laboratory, de l'Arizona State University, de l'Université de Klagenfurt, et de l'Université de Minho. Parmi les domaines applicatifs couverts par les problèmes tests proposés, citons :

- ⇒ la bio-ingénierie
- ⇒ l'informatique
- ⇒ l'économie et la théorie des jeux
- ⇒ l'image
- ⇒ l'énergie
- ...

Pour mesurer l'évolution conjointe de la puissance de calcul et des algorithmes, citons finalement [23] à propos du gain en performance de l'optimisation en variables mixtes (MIO) : entre 1991 et 2015, celui-ci est estimé à un facteur de 10^{11} (voir Fig. 3). Avec pour conséquence la possibilité de résoudre très efficacement par MIO des problèmes de statistique et d'apprentissage.

On voit bien ici toute l'importance du calcul dans cette thématique ainsi que les enjeux futurs. Le GdR CALCUL travaillera donc avec le GdR MOA et le groupe MODE de la SMAI afin de créer des passerelles entre le calcul et les méthodes d'optimisation et de contrôle optimal. Enfin, cette thématique touche différents domaines comme le traitement d'images et le machine learning. Il serait donc intéressant de créer des événements conjoints entre ces différentes communautés.

2.6 Calcul exact

Contributeur : Nicolas Thiéry

2.6.1 Qu'est-ce que le calcul formel

Inspiré de https://fr.wikipedia.org/wiki/Calcul_formel :

Le calcul formel, ou parfois calcul symbolique, est le domaine des mathématiques et de l'informatique qui s'intéresse aux algorithmes opérant sur des objets de nature mathématique par le biais de représentations finies et exactes. Ainsi, un nombre entier est représenté de manière finie et exacte par la suite des chiffres de son écriture en base 2. Étant données les représentations de deux nombres entiers, le calcul formel se pose par exemple la question de calculer celle de leur produit. Le calcul formel est en général considéré comme un domaine distinct du calcul scientifique, cette dernière appellation faisant référence au calcul numérique approché à l'aide de nombres en virgule flottante, là où le calcul formel met l'accent sur les calculs exacts sur des expressions pouvant contenir des variables ou des nombres en précision arbitraire (en).

Comme exemples d'opérations de calcul formel, on peut citer le calcul de dérivées ou de primitives, la simplification d'expressions, la décomposition en facteurs irréductibles de polynômes, la mise sous formes normales de matrices, ou encore la résolution des systèmes polynomiaux. Plus généralement, on s'intéressera à la manipulation d'une très grande variété d'objets : groupes, variétés algébriques ou différentielles, courbes elliptiques, algèbres non commutatives, souvent en lien avec les mathématiques discrètes : structures combinatoires, graphes, ordres partiels, langages, automates.

2.6.2 Recherches théoriques en Calcul Formel

Sur le plan théorique, on s'attache en calcul formel à donner des algorithmes avec la démonstration qu'ils terminent en temps fini et la démonstration que le résultat est bien la représentation d'un objet mathématique défini préalablement. Autant que possible, on essaie de plus d'estimer la complexité des algorithmes que l'on décrit, c'est-à-dire le nombre total d'opérations élémentaires qu'ils effectuent. Cela permet d'avoir une idée a priori du temps d'exécution d'un algorithme, de comparer l'efficacité théorique de différents algorithmes ou encore d'éclairer la nature même du problème.

2.6.3 Calcul formel, logiciels, et applications

Sur le plan pratique, les premiers calculs symboliques ont été réalisés dans les années 50. À partir des années 80, des communautés se sont rassemblées pour mutualiser leurs efforts de développement, aboutissant à des bibliothèques spécialisées libres. En parallèle, l'apparition de systèmes généralistes commerciaux comme Maple ou Mathematica a fortement participé à faire connaître le calcul formel, en particulier pour l'enseignement. Enfin la dernière décennie a vu l'émergence du système généraliste libre Sage fédérant la plupart des bibliothèques libres de calcul formel.

Ces systèmes servent d'une part de bancs d'essais pour valider en pratique les recherches algorithmiques théoriques. Mais surtout, dans de nombreux domaines de recherche, le calcul formel est devenu un outil essentiel pour l'exploration informatique des objets d'étude ; exploration conduisant à des conjectures, qui peuvent ensuite être rigoureusement démontrées à la main ou dans certains cas, à l'aide d'assistants de preuve. Les résultats théoriques obtenus peuvent ensuite être appliqués à l'élaboration de nouveaux procédés de calcul plus efficaces, appelées à être intégrés aux logiciels développés.

2.6.4 Axes

- ➔ Les algorithmes qui combinent les techniques de calcul symboliques et numériques ont pris une importance croissante cette dernière décade. Le besoin de calculer robuste avec

des données imprécises ou bruitées, et de vitesse et de précision dans des problèmes algébriques ou hybrides-numériques, a encouragé de nouvelles synergies entre les mondes du calcul numérique et formel. C'est ainsi l'objet d'une série de conférences internationales : <http://symbolic-numeric-computation.org/>

→ Les dernières années ont vu l'apparition d'écosystèmes libres communs au calcul numérique et formel. Par exemple, la plateforme Python permet de faire simultanément du calcul formel et du calcul numérique. Cela donne l'opportunité de mutualiser les efforts pour traiter des enjeux communs : interfaces utilisateur (par ex. Jupyter), documents interactifs, reproductibilité, visualisation, parallélisme, etc. Voir par exemple le projet H2020 OpenDreamKit opendreamkit.org.

→ ...

Le GdR CALCUL tâchera de montrer l'importance du calcul exact dans le processus du calcul numérique et tâchera également de rapprocher les deux communautés : la communauté du calcul formel est à la recherche d'applications, la communauté du calcul numérique manipule des équations et a tout à y gagner de rester le plus longtemps dans un formalisme exact avant de passer à un algorithme numérique.

2.7 Arithmétique par intervalles

Contributrice : Nathalie Revol

L'arithmétique par intervalles consiste à calculer avec des intervalles plutôt qu'avec des valeurs : ces valeurs pouvant être entachées d'erreur (de mesures, de calcul préalable...), on les remplace par des intervalles les contenant à coup sûr. Ces intervalles peuvent être fins, pour tenir compte uniquement d'erreurs de mesure par exemple, ou larges pour couvrir toute une plage, étendue, de valeurs que l'on souhaite étudier. Cette garantie est ensuite propagée tout au long des calculs et on obtient *in fine* un encadrement des résultats recherchés.

Le paysage actuel des travaux menés autour de l'arithmétique par intervalles se décline schématiquement selon plusieurs directions.

On trouve d'une part des développements d'algorithmes de plus en plus sophistiqués, afin de résoudre un type de problème particulier, comme des méthodes d'ordre très élevé pour l'intégration d'équations différentielles ordinaires. On trouve d'autre part des travaux concernant des implantations de cette arithmétique, c'est-à-dire des données de type intervalle et des opérations élémentaires (arithmétiques, largeur, etc.) sur ces données. On trouve enfin le développement de bibliothèques, en général dédiées à un domaine spécifique, telles que IntLab pour l'algèbre linéaire, GlobSol pour l'optimisation globale, COSY ou CAPD pour les équations différentielles ordinaires et les systèmes dynamiques, Ibex pour la programmation par contraintes, SIVIA pour l'inversion ensembliste etc. Un effort de normalisation a abouti, en juillet 2015, à la publication d'une norme pour l'arithmétique par intervalles : IEEE 1788-2015 standard for interval arithmetic. On peut donc espérer que dans un futur proche, ces efforts soient concertés et en particulier que les développements logiciels soient compatibles.

S'il y a de bonnes raisons de penser que l'hétérogénéité du passé est en passe d'être jugulée, il reste cependant des obstacles à surmonter pour une plus large utilisation de l'arithmétique par intervalles dans les codes de calcul. Or cette arithmétique permet de répondre à deux types de besoins : le calcul ensembliste, c'est-à-dire le calcul valide sur toute une plage de valeurs pour les données, et dans ce cas cette plage est supposée être large, et l'étude de la qualité numérique d'un résultat, c'est-à-dire le calcul d'un encadrement garanti, et fin, d'une valeur ponctuelle

calculée. En général, les algorithmes diffèrent selon le type de besoin.

Les difficultés sont néanmoins les mêmes dans les deux cas. Un premier problème, souvent lié à une utilisation naïve de l'arithmétique par intervalles, est l'explosion des intervalles calculés : les résultats sont des intervalles trop larges pour fournir une information pertinente, telle que le signe d'une valeur par exemple. Une solution peut être la formation des utilisateurs, non pour en faire des experts, mais pour leur permettre une utilisation avisée du calcul par intervalles. Une autre solution pourrait être la mise à disposition de bibliothèques, à large domaine d'application et faciles d'utilisation. . . Mais qui restent encore à écrire ou au moins à assembler.

Un second problème est que le développement d'implantations efficaces est difficile : à cause des changements fréquents de modes d'arrondi pendant les calculs, on observe – en tout cas sur les architectures classiques, mais cela pourrait changer dans un avenir proche ou avec l'utilisation d'accélérateurs tels que les GPU ou les co-processeurs des Xeon Phi – un ralentissement des temps de calcul d'un à deux ordres de grandeur, en comparaison de calculs menés en arithmétique flottante usuelle, qui n'offrent donc aucune garantie sur le résultat calculé mais sont rapides. Ici encore, la mise à disposition de bibliothèques, qui implanteraient des algorithmes non naïfs pour éviter l'explosion de la largeur des intervalles résultats, qui seraient optimisés pour réduire le surcoût, en temps d'exécution, à un facteur idéalement de 3 et au pire de 10, et qui seraient faciles à prendre en main par des utilisateurs non experts, paraît un objectif à poursuivre.

Enfin, un dernier point important est de disposer d'exemples d'applications qui tirent déjà parti de calculs par intervalles, afin que des utilisateurs potentiels puissent déterminer si cette approche est adaptée à leurs problèmes et quels bénéfices ils peuvent en retirer.

Un axe « calcul par intervalles » trouverait tout à fait sa place au sein du GdR CALCUL :

- ➡ en fournissant des compétences, et le cas échéant des formations, en arithmétique des ordinateurs ;
- ➡ en ouvrant la problématique du calcul aux questions de qualité numérique et aux approches qui permettent d'apporter des réponses, sans se limiter à l'arithmétique par intervalles ;
- ➡ en profitant des compétences disponibles au sein du GdR CALCUL sur les questions d'optimisation de code, pour passer d'algorithmes sur le papier à des implantations efficaces en pratique ;
- ➡ en profitant de la connaissance pratique, au sein du GdR CALCUL, sur les applications pour identifier des applications pour lesquelles des calculs par intervalles apporteraient une réelle plus-value.

Cet axe permettrait enfin de tisser des liens avec d'autres GdR. Mentionnons le GdR IM : *Informatique Mathématique*, et en particulier le Groupe de Travail *Arithmétique* sur les questions de qualité numérique en lien avec l'arithmétique des ordinateurs, ainsi que le GdR MACS : *Modélisation, Analyse et Conduite des Systèmes dynamiques* et plus spécifiquement le Groupe de Travail *Méthodes Ensemblistes pour l'Automatique* où l'on rencontre de nombreuses applications qui utilisent avec profit l'arithmétique par intervalles.

2.8 Machine learning

Aujourd'hui, le Big Data est devenu une réalité et touche un grand nombre de domaines : les sciences humaines, la biologie, la physique, ... et bien entendu les mathématiques et l'informatique.

Les flots de données peuvent être de différentes natures : acquisition d'images au microscope en temps réel, analyse des réseaux sociaux, cartographie céleste, simulation dans le domaine du climat, ... Mais la problématique reste la même : comment extraire de l'information pertinente de ces données de grande dimension ?

Les méthodes statistiques traditionnelles sont inopérantes sur ce genre de problème et il est nécessaire de construire de nouvelles méthodes et de nouveaux algorithmes statistiques. Le machine learning tente de répondre à ces problématiques et est en plein essor actuellement.

Le GdR CALCUL s'intéressera à ces problématiques en se rapprochant notamment du GdR MADICS et des laboratoires de recherche travaillant activement dans ce domaine en proposant des journées scientifiques communes et éventuellement des formations sur les outils mis à disposition de la communauté.

3 Livre blanc

Suite au travail entrepris par le GdR CALCUL sur les différentes thématiques, celui-ci voudrait poursuivre ce travail en proposant à la communauté un livre blanc détaillant l'intérêt du calcul scientifique et intensif dans le travail de la recherche française. Ce document devra également mettre en perspective les besoins futurs ainsi que les prochaines problématiques dont devront faire face ces communautés.

4 Animation scientifique

Depuis ses huit années d'existence, le GdR CALCUL a essentiellement organisé des journées et des écoles thématiques. Si ces rencontres ont permis de favoriser les échanges et de mieux structurer la communauté autour du calcul, elles n'en restent pas moins limitées de part leur format : souvent des sujets très spécifiques adaptés à un public averti.

Pour ce renouvellement, le GdR CALCUL souhaite améliorer considérablement ses formats d'animation scientifique au même titre que ses thématiques.

4.1 Journées des doctorants

Les doctorants sont une part très importante de la recherche française en mathématiques appliquées. Leurs sujets sont en général dans l'air du temps et résument assez bien les problématiques du moment. Les aspects calcul sont loin d'être négligeables et permettent de valider leurs nouvelles méthodes en proposant des algorithmes de plus en plus complexes souvent à cheval sur différentes disciplines.

Il est important de mettre en avant ces nouvelles compétences. Le GdR CALCUL a donc un rôle important à jouer pour permettre aux doctorants de se rencontrer pour parler de leur problématique tout en facilitant les discussions avec le reste de la communauté. Il faut noter que ces aspects calcul bien que primordiaux dans l'élaboration de la thèse sont souvent négligés. Le doctorant se retrouve donc à devoir se former seul sur des thématiques qu'il ne maîtrise pas forcément en plus des aspects théoriques. Ces rencontres permettront également de mettre en lumière des manques en formation et d'y remédier soit à l'aide du GdR soit à l'aide du Réseau.

4.2 Journées des membres

La liste de discussion contient aujourd’hui plus de 1500 abonnés qui ont des horizons divers et variés et viennent du public ou du privé. Toutes nos actions sont diffusées par ce canal et nous permettent d’avoir une masse critique pour nos journées ou nos écoles : on peut compter en moyenne 40 participants par actions.

Il serait intéressant de proposer des journées où les membres du GdR CALCUL viendraient parler de leur travaux de recherche et/ou des problèmes rencontrés permettant ainsi de créer un lien plus fort que celui créé par une liste de discussion, favoriser des collaborations, aboutir à l’organisation de journées scientifiques sur des points clés. Ces journées pourront être organisées en lançant un appel à contribution sur le site web du GdR CALCUL. Les thématiques seront ici libres.

Ces journées dites « rencontres du GdR CALCUL » auront lieu une fois par an.

4.3 Journées scientifiques

Les huit thématiques citées précédemment permettront d’organiser deux ou trois journées par an. Le travail réalisé par les différentes contributions montre que les besoins sont variés et demandent des compétences bien spécifiques. Ces journées scientifiques devront tenir compte des points soulevés par les contributions et pourront prendre différents formats :

- ⇒ journée sur des méthodes numériques et/ou des algorithmes pour une thématique,
- ⇒ journée avec d’autres GdR sur des sujets communs,
- ⇒ journée sur des méthodes utilisées dans plusieurs thématiques (contrôle optimal et traitement d’images, EDP approchées et stochastiques, algèbre linéaire et calcul exact, ...).

L’organisation de ces journées se fera en étroite collaboration avec le comité scientifique du GdR CALCUL.

4.4 Ecoles thématiques

Le GdR CALCUL continuera de proposer des écoles thématiques en lien avec les huit thématiques retenues. Les financements permettent d’organiser des écoles en résidentiel ce qui favorise grandement les échanges, le partage de compétences et les collaborations éventuelles entre participants ou entre participants et intervenants. Dans la mesure du possible, nous continuerons à proposer une école thématique par an. Les sujets pourront être en lien avec les journées scientifiques. Ces écoles pourront également être sous la forme de rencontres sur une semaine sur une thématique bien précise en offrant une large place à des collaborations. Le GdR CALCUL pourra, par exemple, proposer à des chercheurs ou des ingénieurs de recherche de venir le matin présenter leurs travaux avec leur problématique et les points bloquants et laisser des après-midi libres pour du travail collaboratif.

4.5 Ateliers

Le GdR CALCUL pourra proposer des ateliers de 2 ou 3 jours regroupant entre dix et quinze personnes sur un sujet bien précis. Il y aura un orateur qui connaît bien le sujet et qui fera une présentation généraliste sur une demi journée. Il s’en suivra alors des demi journées de mise en pratique où les participants pourront appliquer une méthode numérique et/ou un algorithme vu pendant la demi journée de cours sur leur problématique.

4.6 Aides aux actions locales

Le GdR CALCUL pourra dans la limite de ces capacités financières aider des initiatives locales à monter des événements en lien avec le calcul que ce soit des journées de rencontre, des écoles, ... à destination du monde académique. Des structures locales existent déjà : LyonCalcul (<http://lyoncalcul.univ-lyon1.fr/>) et d'autres sont en train de se construire : à Paris Sud par exemple. Ce sont typiquement ces structures qui pourront bénéficier de cette aide.

4.7 Groupes de travail

La plupart des GdR que nous connaissons ont constitué des groupes de travail. Ces groupes peuvent être ponctuels ou de longue durée. Ce n'est pas aujourd'hui une pratique du GdR CALCUL. Pourtant la constitution de groupes de travail ponctuels peut être d'une grande utilité. Ils permettent de réunir des experts sur une ou plusieurs thématiques et de mener des réflexions sur l'état de l'art, sur les besoins de la communauté et de proposer des événements en avance de phase permettant une activité scientifique riche.

Ces groupes de travail seront bien évidemment en forte corrélation avec les thématiques scientifiques choisies.

5 CHAMANES : CHALLENGE Maths - Analyse Numérique - Entreprises pour la Simulation

CHAMANES s'inspire des SEME (Semaines d'Etude Mathématiques et Entreprises) organisées par AMIES dont le but est de fluidifier le transfert de connaissances académiques vers le monde de l'industrie, de créer des échanges fructueux, et de faire participer les participants industriels des dernières avancées de la recherche en mathématiques.

CHAMANES reprend cette idée en s'appuyant sur des sujets thématiques ayant un lien fort avec les méthodes numériques et les algorithmes et se fait en étroite collaboration avec AMIES et le GdR CALCUL.

Comme pour les SEME, un appel à projets permettant de retenir quatre ou cinq propositions d'industriels pour former les sujets d'étude est lancé et la constitution d'un groupe d'une vingtaine de jeunes chercheurs (doctorants et post-doctorants) est réalisée. Le changement ici est l'ajout de deux ingénieurs par projet. L'idée est de faire bénéficier aux jeunes chercheurs de l'expérience des ingénieurs concernant les outils de développement, les bibliothèques scientifiques, ... pour traiter un problème. Ces connaissances sont complémentaires à la formation initiale des jeunes chercheurs et seront bénéfiques dans leurs travaux de thèse.

Pour que cette semaine soit fructueuse pour l'ensemble des acteurs, il est important que les sujets soient travaillés en amont par les ingénieurs épaulés éventuellement par un ou deux seniors. L'idée est de préparer un environnement de travail comprenant toute une panoplie d'outils susceptible d'être utile aux jeunes chercheurs lors de la semaine CHAMANES. Ce travail de réflexion permettra également aux ingénieurs d'être les plus réactifs possible lors de cette semaine.

On rappelle ici le déroulement de la semaine qui est identique aux SEME. Le premier jour, chaque entreprise présente un problème de nature mathématique ayant un lien fort avec les méthodes numériques et les algorithmes qu'elle a identifiés comme bloquants et qui lui semblent

nécessiter des développements conceptuels innovants. Au cours de cette séance plénière à laquelle assistent de nombreux chercheurs et industriels, un véritable échange a lieu et des premières pistes et idées sont lancées. Pendant le reste de la semaine, les jeunes chercheurs travaillent par petits groupes à la résolution de ces problèmes avec les deux ingénieurs affiliés au projet. Les résultats obtenus sont présentés oralement à la fin de la semaine. Même si des chercheurs expérimentés se tiennent prêts à épauler les jeunes chercheurs, ces derniers ont toute liberté quant à l'orientation de leurs travaux. Un rapport est ensuite rédigé dans les mois qui suivent afin de constituer un point de départ pour d'éventuelles collaborations futures.

Le GdR CALCUL devrait initier cette semaine en 2016 mais aimerait poursuivre cette action également après le renouvellement du GdR en partenariat avec AMIES et les écoles d'ingénieurs.

6 Diffusion de l'information

Le GdR CALCUL s'appuiera sur sa liste de discussion et sur celles de ses partenaires pour diffuser l'information de ses différentes journées et de ses formations.

Il s'aidera également du site formation-calcul.fr qu'il a mis en place conjointement avec AMIES, la Maison de la Simulation et MaiMoSiNE dont le but est de centraliser l'information en lien avec les formations autour du calcul au sens large (calcul haute performance, langages et bibliothèques scientifiques, modélisation, mathématiques, statistiques, ...).

Ce recensement national est dédié aux formations continues et aux journées spécifiques. Les séminaires spécialisés ou colloques de recherche ne sont pas dans le périmètre de cette base, de même que les formations classiques/initiales (licence, école d'ingénieur, master). En revanche, les écoles ou les exposés pédagogiques pour former à l'utilisation d'un logiciel ou d'une méthode, même à l'intérieur d'un colloque, peuvent être répertoriés.

Enfin, il s'appuiera de son site web pour diffuser l'ensemble des supports numériques des actions proposées et réfléchira sur l'élaboration de cours en ligne en utilisant par exemple les notebooks [\[4\]](#).

7 Wikipedia du Numérique

La plus célèbre des encyclopédies en ligne, libre et participative, est devenue un outil intéressant en mathématiques : de l'avis général des mathématiciens, les articles sont devenus dans l'ensemble de bonne qualité, ils sont fréquemment consultés et de nombreux collègues participent à leur rédaction. Les articles concernant le calcul (méthodes numériques et leur implantation, mais aussi plus globalement tous les thèmes mentionnés dans ce document) semblent globalement moins bien traités et les articles de moindre qualité. Le GdR CALCUL propose de déclencher une dynamique d'amélioration pour les champs de la connaissance qui nous intéressent.

Cela pose deux problèmes :

1. La rédaction (ou l'amélioration) des articles : il pourrait être efficace de s'inspirer de certaines disciplines (informatique par exemple), où il est assez courant d'organiser des journées de travail, destinées à faire avancer la documentation de manière significative dans quelques domaines précis. Ceci pourrait se faire en présentiel ou non. L'intervention d'étudiants de bon niveau (niveau master, doctorants) serait à envisager.
2. L'étiquetage et la reconnaissance du travail effectué.

Nous souhaitons que les articles reçoivent un label « groupe CALCUL ». Ceci n'est guère possible dans Wikipédia où les articles peuvent, par définition, être modifiés par qui le souhaite. Une solution pourrait être d'avoir deux versions des articles, une sur Wikipédia (si possible dans les versions françaises et anglaises) et une sur un serveur du groupe Calcul. Il serait alors possible d'identifier les auteurs sur la version du groupe CALCUL, condition sûrement importante pour obtenir des collaborations.

Des contacts ont été pris avec les responsables français de Wikipédia pour discuter de ces aspects.

8 Reproductibilité

L'intérêt pour la recherche reproductible est un phénomène récent qui prend une ampleur sans précédent. On peut par exemple citer un document de la commission européenne [47] mettant en place un groupe de réflexion sur l'Open Science. Celui-ci définit quatre actions concrètes où des groupes de travail devront donner des recommandations à la commission européenne :

- ⇒ encourager les initiatives autour de l'Open Science,
- ⇒ lever les barrières pour l'Open Science,
- ⇒ intégrer et promouvoir la politique open access,
- ⇒ développer des infrastructures de recherche pour Open Science.

Les groupes de travail seront mis en place début 2016. D'autres initiatives débutent ([12]) demandant à tout article soumis d'avoir également le matériel nécessaire pour pouvoir reproduire les expériences et les calculs rencontrés dans celui-ci : étape indispensable à partir 2017 pour que l'article soit publié.

Il existe des plate-formes permettant de distribuer du matériels : zenodo [7] et figshare [1]. Enfin, des projets existent déjà dans certains domaines permettant de reproduire les résultats. On peut citer

- ⇒ IPOL Journal [3] : Image Processing On Line
- ⇒ PLOS [6] : Public Library of Science

En revanche, il ne semble pas y avoir d'initiatives dans ce sens du côté des mathématiques appliquées.

Le GdR CALCUL aimerait donc mener une réflexion sur ce sujet en montant un groupe de travail dont le but premier serait d'écrire un livre blanc sur les bonnes pratiques pour la reproductibilité et les modes de dépôt du matériel scientifique tout en montrant l'apport que pourrait avoir cette démarche sur la qualité des publications. Nous souhaitons également nous appuyer sur HAL [2] en leur proposant d'ajouter ces réflexions et de mettre en place une procédure permettant aux auteurs d'ajouter du matériel reproductible (la forme étant à réfléchir et devra s'appuyer sur de l'existant).

9 Organisation

9.1 Porteur du projet

Loïc Gouarin, loic.gouarin@math.u-psud.fr

Ingénieur de Recherche au CNRS, Laboratoire de Mathématiques d'Orsay

Coordonnées :

Laboratoire de Mathématiques

Université Paris-Sud

Bâtiment 425

91405 Orsay Cedex

Tel : (+33) 1 69 15 60 14

Fax : (+33) 1 69 15 67 18

9.2 Bureau

Le GdR CALCUL est constitué d'un bureau permettant de faire le lien avec le réseau CALCUL et les autres GdR. Il est l'organe exécutif du GdR. Les personnes faisant partie de ce bureau sont :

- ➔ Mark Asch, ANR,
- ➔ Matthieu Boileau, Institut de Recherche Mathématique Avancée, Strasbourg,
- ➔ Stéphane Cordier, AMIES, Grenoble,
- ➔ Sylvain Faure, Laboratoire de Mathématiques, Orsay,
- ➔ Alain Franc, INRA, Cestas,
- ➔ Loïc Gouarin, Laboratoire de Mathématiques, Orsay,
- ➔ Violaine Louvet, UMS GRICAD, Grenoble,
- ➔ Marc Massot, EM2C, Centrale-Supélec,
- ➔ Vincent Miele, LBBE, Lyon,
- ➔ Anne-Sophie Mouronval, MSSMat, Centrale-Supélec,
- ➔ Laurent Series, MAS, Centrale-Supélec.

9.3 Comité Scientifique

Le rôle du Comité Scientifique est de donner son avis sur le bilan scientifique et financier du GdR et de proposer au bureau du GdR des idées d'actions à mettre en œuvre. Il est composé de personnalités dont l'expertise est reconnue dans les diverses disciplines concernées par l'activité du GdR :

- ➔ Charles-Edouard Bréhier, Institut Camille Jordan, Lyon,
- ➔ Jean-Baptiste Caillaud, Statistique, Probabilités, Optimisation et Contrôle, Dijon,
- ➔ Stéphane Cordier, AMIES, Grenoble,
- ➔ Laura Grigori, INRIA, Rocquencourt,
- ➔ Konrad Hinsen, Centre de Biophysique Moléculaire, Orléans,
- ➔ Michel Kern, INRIA et Maison de la Simulation,
- ➔ Bertrand Maury, Laboratoire de Mathématiques, Orsay,
- ➔ Clément Pernet, Laboratoire de l'Informatique Parallélisme, Grenoble,

- ➔ Gabriel Peyré, CEREMADE, Paris-Dauphine,
- ➔ Stéphane Requena, Genci,
- ➔ Nathalie Revol, ENS, Lyon,
- ➔ Nicolas Thiéry, Laboratoire de Recherche en Informatique, Orsay,

10 Partenariats

Le GdR CALCUL a déjà un certain nombre de partenariats avec différents acteurs du paysage du calcul scientifique et intensif français. Il devra les entretenir et les renforcer.

En même temps, la rédaction de ce dossier de renouvellement a montré clairement l'existence d'un certain nombre de points d'ancrage entre GdR.

Le GdR CALCUL devra faire en sorte de créer de nouveaux liens avec les communautés identifiées.

Les structures où les partenariats sont à entretenir ou à créer sont

- ➔ AMIES,
- ➔ CPU,
- ➔ France Grilles,
- ➔ GdR MIA,
- ➔ groupe MODES de la SMAI,
- ➔ GdR IM,
- ➔ GdR ISIS,
- ➔ GdR Jeux,
- ➔ GdR MaDICS,
- ➔ GdR Mascot-Num
- ➔ GdR MOA,
- ➔ GdR Momas
- ➔ GdR Visu,
- ➔ Genci,
- ➔ Inra,
- ➔ Inria,
- ➔ Maison de la Simulation,
- ➔ ...

10.0.1 Equipes participantes

Cette liste est en cours de validation. Elle est donc susceptible de subir quelques petits changements.

Ville	Laboratoire	Correspondant
Amiens	LAMFA	V. Martin
Besançon	LMB	F. Langrognon
Bordeaux	IMB	H. Beaugendre
Bordeaux	INRA	A. Franc
Bordeaux	LABRI	J. Roman
Cachan	CMLA	C. Labourdette
Chatenay-Malabry	Fédération de Mathématiques	F. Laurent-Negre
Chatenay-Malabry	MSSMAT	A.S. Mouronval
Chatenay-Malabry	MAS	L. Series
Clermont	Laboratoire de Mathématiques	T. Dubois
Dijon	IMB (statistique, probabilités, optimisation et contrôle)	J.B. Caillaud et H. Cardot
Dijon	IMB (Mathématiques physiques)	N. Kitanine et C. Klein
Dijon	Centre de Calcul de Bourgogne	O. Politano
Grenoble	LJK	S. Labbé
Lille	Laboratoire Paul Painlevé	A. Mouton
Lyon	LIP	E. Caron
Lyon	ICJ	T. Dumont
Lyon	LBBE	V. Miele
Lyon	LMFA	A. Cadiou
Marne-la-Vallée	LIGM	J. Cherchia
Marseille	I2M	R. Herbin
Metz	LMAM	J.M. Sac Epée
Nice	Laboratoire J.A. Dieudonné	S. Descombes
Orléans	Centre de Biophysique Moléculaire	G. Kneller
Orsay	LMO	S. Faure
Paris	LJLL	F. Charles
Paris	MAP5	B. Grec
Paris	Equipe Alpine (INRIA, LJLL)	F. Nataf
Paris	ENS - DMA	T. Alazard
Pau	LMAP	C. Pierre
Perpignan	LIRMM	P. Langlois
Pointe à Pitre	LMIA	J. Laminie
Rennes	IRMAR	F. Castella
Ruel Malmaison	IFP Energies nouvelles	A. Anciaux-Sedrakian
Saclay	CMAP	R. Brizzi
Strasbourg	IRMA	M. Boileau
Toulouse	IMT	F. Couderc
Toulouse	IRIT (APO)	P. Amestoy
Villetaneuse	LAGA	G. Scarella

Références

- [1] figshare. <http://figshare.com/>.
- [2] Hal. <https://hal.archives-ouvertes.fr/>.
- [3] Ipol. <http://www.ipol.im/>.
- [4] Jupyter. <http://nbviewer.jupyter.org/>.
- [5] Neos : State-of-the-art solvers for numerical optimization. [.](#)

- [6] Plos. <https://www.plos.org/>.
- [7] zenodo. <http://zenodo.org/>.
- [8] Architectures innovantes de code pour le hpc. *36ème forum orap.* 2015.
- [9] étude sur l’impact socio-économique des mathématiques (eisem). 2015.
- [10] Gdr mia (mathématiques de l’imagerie et de ses applications), *étude prospective "calcul et imagerie"*, 2015.
- [11] L’évolution des technologies autour du hpc. la fin de la loi de moore? *35ème forum orap.* 2015.
- [12] opennessinitiative. <https://opennessinitiative.org/>, 2015.
- [13] Optimizing the world : One problem at a time. 2015.
- [14] G. Allaire. *Conception optimale de structures*. Mathématiques & applications. Springer, New York, 2007.
- [15] Y. Altmann, N. Dobigeon, and J.-Y. Tournet. Unsupervised post-nonlinear unmixing of hyperspectral images using a hamiltonian monte carlo algorithm. *IEEE Trans. Image Processing*, 23(6) :2663–2675, 2014.
- [16] Choi Amenta and Kolluri. The power crust. *6th ACM Symposium on Solid Modeling*, pages 249–260, 2001.
- [17] J. B. Anjos, M. ; Lasserre. *Handbook on Semidefnite, Conic and Polynomial Optimization*. Springer, 2012.
- [18] N. Ayache. Des images médicales au patient numérique. *Lecons inaugurales du Collège de France, Fayard*, 2015.
- [19] M. Bacher, S. Coros, and B. Thomaszewski. Linkedit : Interactive linkage editing using symbolic kinematics. *Transactions on Graphics (Proc. of SIGGRAPH)*, 34(4) :99 :1–99 :8, July 2015.
- [20] C. Barnes, F.-L. Zhang, L. Lou, X. Wu, and S.-M. Hu. Patchtable : Efficient patch queries for large datasets and applications. *ACM Transactions on Graphics (Proc. SIGGRAPH)*, 34(4) :97 :1–97 :10, July 2015.
- [21] H. H. Bauschke and P. L. Combettes. *Convex analysis and monotone operator theory in Hilbert spaces*. Springer, 2011.
- [22] S. Becker and M.J. Fadili. quasi-newton proximal splitting method. In *Adv. Neural Inf. Process. Syst. (NIPS)*, 2012.
- [23] D. Bertsimas. Statistics and machine learning via a modern optimization lens. *17th British-French-German Conference on Optimization*, 2015.
- [24] J.D. Boissonnat, M. Glisse, C. Maria, and M. Yvinec. The gudhi library : Simplicial complexes and persistent homology. *Proc. International Congress on Mathematical Software*, 8592 :167–174, 2014.
- [25] Jean-Daniel Boissonnat and Mariette Yvinec. *Algorithmic Geometry*. Cambridge University Press, New York, NY, USA, 1998.
- [26] J. Bolte, S. Sabach, and M. Teboulle. Proximal alternating linearized minimization for nonconvex and nonsmooth problems. *Math. Program.*, 146(1-2) :459–494, August 2014.
- [27] D. Boscaini, J. Masci, S. Melz, M. M. Bronstein, U. Castellani, and P. Vandergheynst. Learning class-specific descriptors for deformable shapes using localized spectral convolutional networks. *Computer Graphics Forum*, 34(5) :13–23, 2015.
- [28] L. Boyd, S. ; Vandenbergue. *Convex optimization*. Cambridge, 2009.
- [29] Y. Brenier. Calcul des lois de conservation par la méthode du transport-écroulement. *Rapport de recherche Inria*, 1981.
- [30] K. Chatfield, K. Simonyan, A. Vedaldi, and A. Zisserman. Return of the devil in the details : Delving deep into convolutional nets. *Proc. British Machine Vision Conference*, 2014.
- [31] F. Chazal, M. Glisse, C. Labruere, and B. Michel. Convergence rates for persistence diagram estimation in topological data analysis. *Proc. International Conference on Machine Learning*, pages 163–171, 2014.

- [32] P. L. Combettes and B. C. Vũ. Variable metric forward-backward splitting with applications to monotone inclusions in duality. *Optimization*, 63(9) :1289–1318, 2014.
- [33] P.L. Combettes and J.-C. Pesquet. Stochastic quasi-fejér block-coordinate fixed point iterations with random sweeping. *SIAM Journal on Optimization*, 25(2) :1221–1248, 2015.
- [34] DoE Advanced Scientific Computing Advisory Committee. Synergistic challenges in data-intensive science and exascale computing. *DOE ASCAC Data Subcommittee Report*, 2013.
- [35] S. Coros, B. Thomaszewski, G. Noris, S. Sueda, M. Forberg, R. W. Sumner, W. Matusik, and B. Bickel. Computational design of mechanical characters. *Transactions on Graphics (Proc. of SIGGRAPH)*, 32(4) :83 :1–83 :12, July 2013.
- [36] d. Sokolov, N. Ray, L. Unterreiner, and B. Levy. Hexahedral-dominant meshing. *Preprint hal-01203544*, 2015.
- [37] P. M. M. de Castro, Q. Mérigot, and B. Thibert. Intersection of paraboloids and application to minkowski-type problems. In *Proceedings of the Thirtieth Annual Symposium on Computational Geometry*, SOCG’14, pages 308 :308–308 :317, New York, NY, USA, 2014. ACM.
- [38] D. L. Donoho, A. Maleki, and A. Montanari. Message-passing algorithms for compressed sensing. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 106(45) :18914–18919, 2009.
- [39] M. Douze, J-S. Franco, and B. Raffin. Quicksng : Arbitrary and faster boolean combinations of n solids. *Inria Research Report 8687*, 2015.
- [40] J. Dumas, A. Lu, S. Lefebvre, J. Wu, and C. Dick. By-example synthesis of structurally sound patterns. *Transactions on Graphics (Proceedings of SIGGRAPH)*, 34(4) :137 :1–137 :12, July 2015.
- [41] Jean-Guillaume Dumas, Thierry Gautier, Clément Pernet, Jean-Louis Roch, and Ziad Sultan. Recursion based parallelization of exact dense linear algebra routines for gaussian elimination. *Parallel Computing*, pages –, 2015.
- [42] H. Edelsbrunner and J. Harer. Computational topology : An introduction. *American Mathematical Society*, 2009.
- [43] Cevher V. et al. Convex optimization for big data : Scalable, randomized, and parallel algorithms for big data analytics. *IEEE Signal Processing Magazine*, 32(5), 2014.
- [44] F. Krzakala et al. Statistical-physics-based reconstruction in compressed sensing. *Physical Review X*, 2.2 :021005, 2012.
- [45] Garsden H. et al. Lofar sparse image reconstruction. *Astron. and Astrophys.*, 575(A90), 2015.
- [46] Jean-Charles Faugère and Sylvain Lachartre. Parallel gaussian elimination for gröbner bases computations in finite fields. In *Proceedings of the 4th International Workshop on Parallel and Symbolic Computation*, PASCO ’10, pages 89–97, New York, NY, USA, 2010. ACM.
- [47] Directorate-General for Research and Innovation. New policy initiative. http://ec.europa.eu/research/swafs/pdf/pub_open_science/new_policy_initiative.pdf, 2015.
- [48] P. Frey and P. L. George. *Maillage, application aux éléments finis*. Hermes Science Publications, 1999.
- [49] M. Girolami and B. Calderhead. Riemann manifold langevin and hamiltonian monte carlo methods. *Journal of the Royal Statistical Society : Series B (Statistical Methodology)*, 73 :123–214, 2011.
- [50] T. Guillemot, A. Almansa, and T. Boubekeur. Covariance trees for 2D and 3D processing. *Proc. Computer Vision and Pattern Recognition*, pages 556–563, 2014.
- [51] N. K. Kalantari, E. Shechtman, C. Barnes, S. Darabi, D. B. Goldman, and P. Sen. Patch-based high dynamic range video. *ACM Trans. Graph.*, 32(6), 2013.
- [52] Kazhdan and Hoppe. Screened poisson surface reconstruction. *ACM Trans. Graphics*, 32(3), 2013.
- [53] T. Kleinjung, L. Nussbaum, and E. Thome. Using a grid platform for solving large sparse linear systems over $gf(2)$. In *Grid Computing (GRID), 2010 11th IEEE/ACM International Conference on*, pages 161–168, Oct 2010.
- [54] S. Lefebvre. IceSL : A GPU accelerated modeler and slicer. *Proc. 18th European Forum on Additive Manufacturing*, 2013.

- [55] B. Lévy. A numerical algorithm for l^2 semi-discrete optimal transport in 3D. *ESAIM M2AN*, 49(6) :1693–1715, 2015.
- [56] J. Martínez, J. Dumas, S. Lefebvre, and L-Y. Wei. Structure and appearance optimization for controllable shape design. *Transactions on Graphics (Proceedings of SIGGRAPH Asia)*, 34(6) :229 :1–229 :11, October 2015.
- [57] A. Nesterov, Y. ; Nemirovskii. Interior-point polynomial algorithms for convex programming. *SIAM*, 1994.
- [58] Y. Nesterov. Huge-scale optimization problems. *Francois Chair 2011-2012 lecture, Liege*.
- [59] Y. Nesterov. *Introductory Lectures on Convex Optimization : A basic course*. Springer, 2004.
- [60] Yu. Nesterov. Efficiency of coordinate descent methods on huge-scale optimization problems. *SIAM Journal on Optimization*, 22(2) :341–362, 2012.
- [61] S. J. Nocedal, J. ; Wright. *Numerical optimization*. Springer, 2006.
- [62] Andrew Novocin, Damien Stehlé, and Gilles Villard. An ill-reduction algorithm with quasi-linear time complexity : Extended abstract. In *Proceedings of the Forty-third Annual ACM Symposium on Theory of Computing*, STOC '11, pages 403–412, New York, NY, USA, 2011. ACM.
- [63] J. Panetta, Q. Zhou, L. Malomo, N. Pietroni, P. Cignoni, and D. Zorin. Elastic textures for additive fabrication. *Transactions on Graphics (Proceedings of SIGGRAPH)*, 34(4) :135 :1–135 :12, July 2015.
- [64] M. Pereyra, P. Schniter, E. Chouzenoux, J.-C. Pesquet, J.-Y. Tourneret, A. Hero, and S. McLaughlin. A survey of stochastic simulation and optimization methods in signal processing. *to appear in J. Sel. Topics Signal Process.*, 2016.
- [65] F. Perronnin, J. Sanchez, and T. Mensink. Improving the fisher kernel for large-scale image classification. *Proc. ECCV*, pages 143–156, 2010.
- [66] Peter Richtarik and Takaç Martin. Iteration complexity of randomized block-coordinate descent methods for minimizing a composite function. *Mathematical Programming*, 144(1-2) :1–38, 2014.
- [67] G. Roberts and R. Tweedie. Exponential convergence of langevin distributions and their discrete approximations. *Bernoulli*, 2(4) :341–363, 1996.
- [68] C. Silva, J. Comba, S. Callahan, and F. Bernardon. A survey of GPU-based volume rendering of unstructured grids. *Rev. de infor. teorica e aplicada*, 12(2) :9–29, 2005.
- [69] T. C. Solovyev, A. ; Hales. Formal verification of nonlinear inequalities with taylor interval approximations. *preprint*, 2013.
- [70] S. Som and P. Schniter. Compressive imaging using approximate message passing and a Markov-tree prior. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 60(7) :3439–3448, 2012.
- [71] M. Staten. Why is hex meshing so hard? *Defense & Space Sandia Labs*, 2011.
- [72] A. D. Szlam, M. Maggioni, and R. R. Coifman. Regularization on graphs with function-adapted diffusion processes. *The Journal of Machine Learning Research*, 9 :1711–1739, 2008.
- [73] D. A. van Dyk and T. Park. Partially collapsed gibbs samplers : Theory and methods. *Journal of the American Statistical Association*, 103 :790–796, 2008.
- [74] K. Vidime, S-P. Wang, J. Ragan-Kelley, and W. Matusik. OpenFab : A programmable pipeline for multi-material fabrication. *Transactions on Graphics (Proc. of SIGGRAPH)*, 32(4) :136 :1–136 :12, July 2013.
- [75] J. Weickert and H. Hagen. Visualization and processing of tensor fields. *Springer*, 2007.
- [76] D. Weiskopf. Gpu-based interactive visualization techniques. *Springer*, 2007.
- [77] H. Yu, C. Wang, R. Grout, J. Chen, and Ma K. In-situ visualization for large scale combustion simulations. *IEEE Comput. Graph. Appl.*, 30(3) :45–57, May 2010.