NOTICE UTILISATEUR ETENDUE DE L'INTEGRATEUR ALGEBRO-DIFFERENTIEL (E.D.A.) D.I.S.Co.'



```
SUBROUTINE DISCO ( FX, DFDXX, DFDXXOT, / N, /X, / XDOT, /T, /TOUT, / ITOL, /RTOL, ATOL/, / ITASK, / ISTATE, IOPT/, / RWORK, / LRW, / IWORK, / LIW, MF/, / GEX, / LG, JROOT, BOOL/, RPAR, LRP/, IPAR, LIP)/
```

FX, DFDX, DFDXDOT, GEX sont des sous-programmes à fournir par l'utilisateur.

Les arguments d'appel utilisés uniquement en entrée sont :

```
FX, DFDX, DFDXDOT, N, TOUT, ITOL, RTOL, ATOL, ITASK, IOPT, LRW, LIW, MF, GEX, LG, BOOL, RPAR, LRP, IPAR, LIP
```

Les arguments utilisés en entrée et en sortie sont :

X, XDOT, T, ISTATE, JROOT

Les matrices de travail RWORK, IWORK sont également utilisées pour les entrées optionnelles et conditionnelles, et pour les sorties optionnelles.

La validité des arguments d'entrées sera minutieusement contrôlée lors du premier appel puis ne sera plus vérifiée sauf si un changement des arguments est signalé par ISTATE = 3 en entrée.

REMARQUE SUR LA DÉCLARATION IMPLICITE EN FORTRAN:

Dans ce document, sauf indication contraire explicite, les identificateurs commençant les lettres I, J, K L, M ou N sont de type INTEGER

FX:

Nom du s.p. créé par l'utilisateur pour le calcul du vecteur des résidus : F = G(T,X) - A(T,X) * XDOT

T = variable indépendante d'intégration

X = vecteur des variables

XDOT = vecteur des approximations des dérivées de X (=dX/dT)

F = vecteur des résidus

<u>Appel:</u> SUBROUTINE FX(N,T,X,XDOT,F,RPAR,LRP,IPAR,LIP)

 ${\tt DIMENSION} \ \, {\tt X(N)} \, , {\tt XDOT(N)} \, , {\tt F(N)} \, , {\tt RPAR(LRP)} \, , {\tt IPAR(LIP)} \,$

entrées: N, T, X, XDOT, RPAR, IPAR

sorties: F

FX doit être déclaré EXTERNAL dans le programme appelant.

DFDX:

Nom du s.p. créé par l'utilisateur calculant la matrice dF/dX. La forme de la matrice dF/dX est définie par MITER. Il est nécessaire uniquement si MITER est impair.

Appel: SUBROUTINE DFDX(N,T,X,XDOT,P,LROWP,ML,MU,RPAR,LRP,IPAR,LIP)

DIMENSION X(N), XDOT(N), P(LROWP, N), RPAR(LRP), IPAR(LIP)

entrées: N, T, X, XDOT, RPAR, IPAR, ML, MU

sorties : P

Cas de matrice pleine : MITER = 1 (ou 2)

 dF_i/dX_i est chargé dans P(i,j)

Cas de matrice bande : MITER = 3 (ou 4)

 $dF_i/dX_j \ est \ charg\'e \ dans \ P(i\hbox{-} j\hbox{+} MU\hbox{+} 1,j)$

Cas de matrice tridiagonale blocs bordée :

MITER = 5 (ou 6)

(cf. Notice à part)

Cas de matrice creuse : MITER = 7 (ou 8)

 dF_i/dX_i est chargé dans P(k)

avec k tel que IWORK(150+k) = i et IWORK(150+NE+k) = j

Dans tous les cas, P est réinitialisé par L'intégrateur EDA : seuls les éléments non-nuls devront être chargés. Chaque appel à DFDX est précédé d'un appel à FX.

Une approximation de dF/dX est parfois suffisante, surtout dans le cas de bandes minces.

DFDX doit être déclaré EXTERNAL dans le programme appelant.

DFDXDOT :

Nom du s.p. créé par l'utilisateur calculant la matrice dF/dXDOT. La forme de la matrice dF/dXDOT est définie par MITER. Il est nécessaire uniquement si MITER est impair.

Cas de matrice pleine : MITER = 1 (ou 2)

dF_i/dXDOT_i est chargé dans Q(i,j)

Cas de matrice bande : MITER = 3 (ou 4)

 $dF_i/dXDOT_i$ est chargé dans Q(i-j+MU+1,j)

Cas de matrice tridiagonale blocs bordée :

MITER = 5 (ou 6)

(cf. Notice à part)

Cas de matrice creuse : MITER = 7 (ou 8)

dF_i/dXDOT_i est chargé dans Q(k)

avec k tel que IWORK(150+k) = i et IWORK(150+NE+k) = j

Dans tous les cas, Q est réinitialisé par L'intégrateur EDA : seuls les éléments non-nuls devront être chargés. Chaque appel à DFDXDOT est précédé d'un appel à FX.

DFDXDOT doit être déclaré EXTERNAL dans le programme appelant

N:

Taille du système d'équations.

Utilisé uniquement en entrée.

N peut diminuer mais pas augmenter au cours de la résolution.

Si N diminue (avec ISTATE = 3 en entrée), les valeurs des composantes restants seront inchangés si elles sont nécessaires dans un des s.p.

х:

Vecteur de réels pour les variables dépendantes (Variables d'état du système)

Utilisé en entrée et sortie dans le premier appel (ISTATE = 0 ou 1).

Utilisé en sortie uniquement lors des appels suivants.

Lors du premier appel, X doit contenir le vecteur des valeurs initiales. En sortie, il contient les valeurs de X solution au temps t.

XDOT:

Vecteur de réels pour les valeurs de dX/dT.

Dimension: N

En entrée :

ISTATE = 0 : L'intégrateur EDA calcule lui-même par une procédure spécifique les

valeurs initiales de dX/dT et ceci même si A est singulière (cas d'un système EDA).

Procédure à mettre en oeuvre dans le cas de recherche de conditions initiales

(cohérence à l'initialisation) et dans le traitement des discontinuités.

ISTATE = 1 : XDOT doit contenir les valeurs initiales.

ISTATE = 2 ou 3 : XDOT est libre.

En sortie:

Si L'intégrateur EDA s'arrête prématurément avec ISTATE = -1, -4 ou -5 (problème à l'intégration, cf. plus loin) alors XDOT contient les résidus F.

т:

C'est la variable indépendante du problème.

En entrée :

Il contient la valeur initiale de la variable d'intégration.

En sortie:

Après chaque appel, il contient la valeur à laquelle la solution a été évaluée (habituellement identique à TOUT).

Lors de retour sur erreur, T correspond au dernier point atteint.

TOUT:

La prochaine valeur de T à laquelle on désire une solution.

ATTENTION : La valeur de TOUT conditionne la valeur du pas initial (Si TOUT est grand, le pas initial le sera également).

Entrée uniquement

Au départ : ISTATE = 0 ou 1

TOUT peut être égale à T pour un seul appel.

Si TOUT <> T : indique le sens de l'intégration donné par son signe.

ITASK = 2 ou 5 (mode pas-à-pas)

TOUT est ignoré après le premier appel.

ITASK = 1, 3 ou 4:

TOUT est nécessaire à chaque appel.

TOUT n'est pas nécessairement monotone.

Si l'on veut effectuer un retour en arrière dans l'intégration.

TOUT doit être compris dans l'intervalle de T en cours :

TCUR-HU, TCUR (TCUR et HU, cf. sorties optionnelles plus loin).

ITOL :

Indicateur du type de contrôle des erreurs.

Uniquement entrée.

RTOL :

Paramètre de tolérance sur les erreurs relatives.

Scalaire ou vecteur de dimension N.

Uniquement entrée.

ATOL :

Paramètre de tolérance sur les erreurs absolues.

Scalaire ou vecteur de dimension N.

Uniquement entrée.

Ces trois paramètres définissent le contrôle des erreurs par l'intégrateur.

Le vecteur des erreurs locales doit vérifier l'inégalité :

eur des erreurs locales doit vérifier l'inégalité:
$$\frac{\sqrt{\sum \left(\frac{E'_i}{EWT_i}\right)^2}}{N} \leq 1$$
Eur (=) epsilon

où EWT est un vecteur défini comme suit :

Si l'un de ces paramètres est un scalaire, il n'aura pas à être dimensionné dans le programme appelant.

Les erreurs globales pourront être estimées en résolvant le problème plusieurs fois avec des tolérances plus faibles. Tous les paramètres RTOL et ATOL devront être réduits uniformément.

ITASK :

Indicateur du type de résolution demandé.

Entrée uniquement.

- 1 Calcul de X à T = TOUT par dépassement et interpolation.
- 2 Faire un seul pas puis retour.
- 3 Arrêt et sortie au premier point pour lequel T est supérieur à TOUT.
- 4 Calcul classique de X à T = TOUT mais sans dépasser au-delà de t = TCRIT. TCRIT se situe à ou après TOUT. (RWORK(1)=TCRIT, cf. entrées optionnelles plus loin) Utile en cas de singularité à TCRIT ou après.
- 5 Combinaison de 2 et 4 arrêts, lorsque T = TCRIT

ISTATE :

Indicateur de l'état des calculs.

Entrée et sortie

en entrée :

- 0 Premier appel pour ce problème. D.I.S.Co calcule les valeurs initiales de dX/dT, il initialise également le processus.
- 1 Idem mais les valeurs de dX/dT sont données par l'utilisateur.
- 2 Calcul en cours : pas de modification de paramètres d'entrée excepté peut-être TOUT et ITASK.
 - si ITOL, RTOL et/ou ATOL sont modifiés sous ISTATE=2, les nouvelles valeurs seront utilisées mais non vérifiées.
- 3 Calcul en cours : changement de paramètres d'entrée autres que TOUT et ITASK : changement autorisé pour N, ITOL, RTOL, ATOL, IOPT, LRW, LIW, MF, MU, ML et les entrées optionnelles exceptée HO.

Un appel préliminaire avec TOUT = T n'est pas considéré comme premier appel car aucune initialisation n'est faite. Donc, le premier appel avec TOUT <> T doit se faire avec ISTATE = 0 ou 1.

en sortie:

- 0 ou 1 aucune progression : TOUT = T et ISTATE = 0 ou 1. Toutefois un compteur permet de détecter et de prévenir des appels répétés identiques.
- 2 l'intégration s'est faite correctement.
- 3 Occurrence d'un événement à T.
- -1 le nombre de pas maximum a été dépassé lors de cet appel, l'intégration s'est

- toutefois faite normalement. Pour continuer, l'utilisateur peut relancer avec ISTATE > 1 ou modifier le nombre de pas maximum MXSTEP par les entrées optionnelles pour éviter ce type d'erreurs.
- -2 les résultats sont demandés avec une précision incompatible avec la précision de la machine utilisée. Cela a été détecté avant la fin de l'intégration mais celle-ci s'est faite normalement jusque-là. Pour continuer, il faut modifier les tolérances et ISTATE mis à 3. L'entrée optionnelle TOLSF peut être utilisée à ce propos (si cette condition est détectée avant le premier pas, ISTATE = -3 est renvoyé).
- -3 détection d'une entrée illégale avant le premier pas, voir les messages écrits pour des précisions. Si une boucle infinie d'appel est détectée, cela provoquera l'arrêt de l'intégration.
- -4 il y a eu plusieurs défauts sur les tests d'erreurs sur le pas en cours mais l'intégration était correcte jusqu'ici. Le problème présenterait une singularité où les entrées seraient inappropriées.
- -5 il y a plusieurs défauts sur les tests de convergence sur le pas en cours mais l'intégration était correcte jusqu'ici, peut-être dus à un manque de précision de l'opérateur dynamique (Vérifier en premier lieu, le sous-programme DFDXDOT).
- -6 pour certains i, EWT_i = 0 lors de l'intégration, on demande une précision infinie sur une variable infinitésimale, mais l'intégration était correcte jusqu'ici.
- -7 inutilisé
- -8 L'intégrateur EDA a été dans l'impossibilité de calculer dX/dT demandé par ISTATE = 0. L'initialisation est trop loin de la solution.

IOPT :

Indicateur d'utilisation d'entrées optionnelles au cours de cet appel.

Entrée uniquement :

- 0 pas d'entrées optionnelles.
- 1 une ou plusieurs entrées optionnelles ou conditionnelles. (cf. plus loin).

RWORK :

Vecteur de travail de réels (zone de travail pour L'intégrateur EDA)

Dimension: 278 + 11* N + 5 * NE + 3 * LG (méthode de GEAR)

avec : N = Taille du système

NE = Nombre d'éléments de P

Matrice pleine : NE = N * N

Matrice bande : NE = (MU + ML + 1) * N

Matrice TBB : NE = (cf. Notice à part)

Matrice creuse : NE défini par l'utilisateur

LRW :

Dimension de RWORK déclarée par l'utilisateur (sera vérifié).

LRW=278 + 11* N + 5 * NE + 3 * LG (méthode de GEAR)

IWORK :

Vecteur de travail d'entiers

Dimension = 251 + 36 * N + 5 * NE (méthode de GEAR)

Les premières valeurs correspondent à des données conditionnelles ou optionnelles en entrées ou sorties.

Entrées conditionnelles :

IWORK(1) = ML IWORK(2) = MU

Ce sont les largeurs de bandes inférieure et supérieure des matrices : DFDX et DFDXDOT

Ces largeurs excluent la diagonale principale :

Largeur totale de la bande = ML + MU + 1

Ils ne sont nécessaires que si MITER = 3 ou 4.

IWORK(4) = NE

Nécessaire que si MITER = 7 ou 8

LIW :

Dimension de IWORK déclarée par l'utilisateur (sera vérifié).

LIW = 251 + 36 * N + 5 * NE (méthode de GEAR)

Les zones de travail ne doivent pas être modifiées entre deux appels à D.I.S.Co sur un même problème, exceptées les entrées optionnelles.

MF :

Indicateur de méthode d'intégration

Valeurs possibles: 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28

En fait, MF est une combinaison de deux paramètres :

MF = 10*METH + MITER

METH indique la méthode d'intégration :

- 1 Méthode implicite d'ADAMS-MOULTON
- 2 Méthode de GEAR

MITER indique le stockage de l'opérateur dynamique :

- 1 Matrice dense fournie par DFDX et DFDXDOT
- 2 Matrice dense calculée numériquement
- 3 Matrice bande fournie par DFDX et DFDXDOT
- 4 Matrice bande calculée numériquement
- 5 Matrice TBB fournie par DFDX et DFDXDOT
- 6 Matrice TBB calculée numériquement
- 7 Matrice creuse fournie par DFDX et DFDXDOT
- 8 Matrice creuse calculée numériquement

GEX:

Sous-programme fourni par l'utilisateur dans lequel les évènements sont décrits sous la forme : G(X)=0.

Appel:

SUBROUTINE GEX(N,T,X,XDOT,G,LG,RPAR,LRP,IPAR,LIP)

DOUBLE PRECISION T,X(N),XDOT(N),G(LG),RPAR(LRP)

INTEGER IPAR(LIP)

LG:

Nombre d' évènements.

JROOT :

Table de mise à feu des évènements.

Vecteur contenant les indices des évènements atteints si ISTATE=3 en retour.

JROOT(I)=1 si L'évènement G(I) est atteint à T=T(évènement), sinon JROOT(I)=0.

BOOL :

Vecteur de réels de dimension N. Non modifié par l'intégrateur.

Ce vecteur doit être rempli de 0.0 ou de 1.0:

BOOL(I)=0.0 L'erreur sur la variable I n'est pas prise en compte lors du calcul de l'erreur de troncature.

BOOL(I)=1.0 L'erreur sur la variable I est prise en compte lors du calcul de l'erreur de troncature.

RPAR :

Vecteur de réels de dimension LRP. Non modifié par l'intégrateur.

Ce vecteur permet le stockage d'une zone paramètre à des fins diverses.

LRP:

Entier, longueur de la zone paramètre réelle.

IPAR:

Vecteur d'entiers de dimension LIP. Non modifié par l'intégrateur.

Ce vecteur permet le stockage d'une zone paramètre à des fins diverses.

LIP:

Entier, longueur de la zone paramètre entière.

ENTREES OPTIONNELLES:

Nous présentons, ici, la liste des entrées optionnelles utilisables lors de la séquence d'appel. Pour chaque variable, nous indiquerons le nom utilisé dans cette documentation et la localisation dans le programme, sa définition et sa valeur par défaut.

Leur utilisation nécessite que IOPT = 1, toutes les valeurs seront alors examinées.

Une valeur à zéro revient à demander la valeur par défaut.

TCRIT RWORK(1): On impose que le calcul se fasse à la valeur de T=TCRIT. \leftrightarrow HO RWORK(5): Valeur du premier pas. \leftrightarrow Valeur par défaut définie par l'intégrateur. **HMAX** RWORK(6): Valeur maximale du pas autorisée. Valeur par défaut : infinie. **HMIN** RWORK(7): Valeur minimale du pas autorisée. Valeur par défaut : 0. (n'est pas utilisée avant d'avoir atteint TCRIT avec ITASK = 4 ou 5). $MAXORD \leftrightarrow$ IWORK(5): Ordre maximum autorisé. Valeur par défaut : 12 pour METH = 1 5 pour METH = 2Une valeur supérieure sera ramenée à la valeur par défaut. Un changement en cours de résolution peut provoquer une diminution de l'ordre en cours. **MXSTEP** IWORK(6): Nombre maximum de pas lors d'un appel à l'intégrateur. Valeur par défaut : 500. **MXHNIL** IWORK(7): Nombre maximum de message indiquant le passage d'un pas T + H = T. Valeur par défaut : 10. Si valeur négative, la valeur par défaut sera prise. MSBP IWORK(8): Nombre de pas effectués avant réactualisation de l'opérateur \leftrightarrow dynamique. **CHOUT** IWORK(9): Canal de sortie pour impression de l'opérateur dynamique à chaque réactualisation. 0 = Pas d'impression. 6 = Ecran. **ERRUN** IWORK(70): Canal de sortie pour l'impression des messages d'erreurs de l'intégrateur. 0 = Pas d'impression. 6 = Ecran.

SORTIES OPTIONNELLES:

Ces variables donnent des indications sur le fonctionnement de l'intégrateur. Toutes ces valeurs sont définies lors d'un retour à la fin d'un processus correct ou après un retour sur erreur avec ISTATE = -1, -2, -4, -5 ou -6. Après retour avec -3 ou -8 les valeurs seront inchangées sauf peut-être pour TOLSF, LENRW, LENIW.

Pour chaque retour sur erreur, les sorties concernées seront définies.

HU	\leftrightarrow	RWORK(11): Valeur du dernier pas en T exécuté correctement.	
HCUR	\leftrightarrow	RWORK(12): Valeur du pas en cours.	
TCUR	\leftrightarrow	RWORK(13) : Valeur courante de la variable indépendante. Le plus souvent	
		TCUR = T sauf s'il y a eu une interpolation.	
TOLSF	\leftrightarrow	RWORK(14) : Coefficient d'échelle de tolérance > 1. Utilisé si un cas de	
		ISTATE = -2 ou -3 se présente. L'intégrateur EDA propose	
		ce facteur multiplicatif pour RTOL et ATOL lorsque ITOL	
		reste inchangé, il devrait permettre de réussir le pas	
		envisagé.	
		L'utilisateur peut également utiliser un autre procédé de	
		modification des paramètres de tolérance.	
NST	\leftrightarrow	IWORK(11): Nombre de pas déjà exécutés.	
NRE	\leftrightarrow	IWORK(12): Nombre d'appel de FX.	
NJE	\leftrightarrow	IWORK(13): Nombre d'évaluation de l'opérateur dynamique donc nombre	
		d'appel à DFDXDOT et (si MITER = 1 ou 4) de DFDX, ainsi	
		que le nombre de décomposition LU.	
NQU	\leftrightarrow	IWORK(14): Dernier ordre utilisé avec succès.	
NQCUR	\leftrightarrow	IWORK(15): Ordre prévu pour le prochain pas.	
IMXER	\leftrightarrow	IWORK(16): Indice du rapport E/EWT le plus grand, en cas de retour avec	
		ISTATE = -4 ou -5.	
LENRW	\leftrightarrow	IWORK(17): Longueur courante de RWORK.	
LENIW	\leftrightarrow	IWORK(18): Longueur courante de IWORK.	

Les deux vecteurs suivants correspondent à des zones de RWORK. Nous indiquons l'adresse de départ.

YH
$$\leftrightarrow$$
 21: Matrice "historique" de NORDSIECK, de taille NYH *
$$(NQCUR+1) \ où \ NYH \ est \ la \ valeur \ initiale \ de \ N$$

$$pour \ j=0,1, \ NQCUR, \ on \ a \ les \ termes$$

$$(HCUR**j/j!) \ * \ d(X \ pr\'edit)/dT \ \'evalu\'es \ \grave{a} \ T = TCUR.$$

$ACOR \qquad \ \ \longleftrightarrow \qquad LENRW\text{-}N\text{+}1: Vecteur \ de \ dimension \ N.$

Contient les estimations des erreurs locales sur X.

Défini uniquement pour des retours avec ISTATE = 2.