

Rapport INRIA 1994 — Programme 6
Identification et optimisation de systèmes en
physique et en environnement

PROJET IDOPT

3 mai 1995

PROJET IDOPT

Identification et optimisation de systèmes en physique et en environnement

Localisation : *Grenoble*

1 Composition de l'équipe

Responsable scientifique

Jacques Blum, professeur, université Joseph Fourier

Personnel INRIA

Anne Bagnérés, CR

Personnel université ¹

Anestis Antoniadis, professeur, université Pierre Mendès France

Pierre Baras, professeur, université de Savoie

Eric Blayo, maître de conférences, université Joseph Fourier,
depuis le 1/10/94

Gérard Grégoire, professeur, université Lyon II

Alain Le Breton, professeur, université Joseph Fourier

François-Xavier Le Dimet, professeur, université Joseph Fou-
rier

Marie-Christine Roubaud, maître de conférences, université
Joseph Fourier, dans le projet depuis le 1/10/94

¹représentant un potentiel-recherche de 3 hommes-an.

Pierre Vial, maître de conférences, université Pierre Mendès
France, depuis le 1/10/94

Patrick Witomski, professeur, université Joseph Fourier

Personnel CNRS ²

Didier Girard, chargé de recherche, CNRS (Section 07)

Pham Dinh Tuan, directeur de recherche, CNRS (section 01)

Collaborateur extérieur

Jacques Verron, directeur de recherche, CNRS (section 12)

Chercheurs invités

Michael Vogelius, professeur, université Rutgers (USA), no-
vembre 1994

Chercheurs post-doctorant

Michel Mandallena, post-doctorat INRIA

Chercheurs doctorant

Christophe Bonjour, professeur agrégé, INPG

Stéphane Bouchereau, allocataire MESR

Hélène Buvat-Dousteyssier, boursière MESR

Mohamed Ghémires, boursier MESR

El Housseïne Khannous, vacataire UJF et INRIA

Bruno Luong, boursier MESR

Mathias Marguliès, boursier sur contrat Industrie-Recherche
CEA-CISI

Hans-Emmanuel Ngodock, boursier du gouvernement du Ca-
meroun

Yannick Trémolet, boursier MESR

Secrétaire

Bruno Rusconi, contrat emploi solidarité depuis le 16 mai
1994

Autres personnels

Didier Reignier, vacataire INRIA du 1er août au 30 sept. 1994

Aïcha Bounaïm, vacataire INRIA du 1er au 30 nov. 1994

²représentant un potentiel-recherche de 0.5 homme-an.

2 Présentation du projet

Idopt est un projet commun à l'INRIA Rhône-Alpes, au CNRS, à l'université Joseph Fourier et à l'INPG. Ce projet est localisé au laboratoire LMC de l'IMAG.

De nombreux domaines de la physique, de la mécanique, de la biologie, sont modélisés par des systèmes à paramètres répartis, régis par des équations aux dérivées partielles, qui décrivent le comportement spatio-temporel des inconnues du modèle. Deux types de problèmes se posent alors naturellement et leur étude fait l'objet de ce projet :

i) l'identification des systèmes à paramètres répartis :

Certains paramètres ou certaines fonctions intervenant dans ces modèles sont inconnus, ou plutôt mal connus (coefficients de diffusion dans des équations paraboliques, sources non linéaires dans des équations elliptiques, ..., conditions initiales ou conditions aux limites).

On se propose d'identifier ces paramètres ou fonctions à partir d'observations expérimentales : ce sont des problèmes inverses (par opposition à la résolution des équations elles-mêmes qui constitue le problème direct). La résolution de ces problèmes est une aide précieuse pour le physicien qui, en général, possède un modèle de son système, mais avec une large incertitude sur ses paramètres. La résolution du problème inverse lui fournit donc une information primordiale.

ii) l'optimisation de ces systèmes :

Les dispositifs expérimentaux sont pilotés par un physicien qui dispose en général d'un certain nombre de fonctions de contrôle qui lui permettent d'optimiser et éventuellement de stabiliser le système. Le travail du mathématicien consiste à déterminer de façon optimale ces fonctions, que ce soit sous forme d'un contrôle en boucle ouverte (préprogrammation) ou en boucle fermée (feedback stabilisant). Le rapport de ce type de problème avec l'automatique est manifeste.

Le lien entre les problèmes d'identification et ceux d'optimisation réside dans le fait qu'il s'agit, dans les deux cas, de minimiser une fonctionnelle dépendant de la solution de l'équation aux dérivées partielles (EDP). En effet, les problèmes d'identification sont ici formulés comme la minimisation de l'écart quadratique entre les observations expérimentales et les quantités correspondantes calculées par résolution du système d'équations ; les variables de contrôle sont, dans ce cas, les paramètres ou les

fonctions à identifier. La minimisation de fonctionnelles dépendant de la solution d'une EDP, par rapport à un vecteur de contrôle intervenant soit dans les conditions initiales, soit dans les conditions aux limites ou dans l'équation elle-même, relève de la théorie du contrôle optimal des EDP, due à J. L. Lions, et qui est donc utilisée dans les activités du projet.

Les deux grands thèmes d'application choisis sont :

- un certain nombre de problèmes de la physique (électro-magnétisme, physique des plasmas, cristallographie).
- la modélisation numérique performante pour les sciences de l'environnement (plus particulièrement, météorologie, océanographie, climatologie) et les méthodes d'assimilation de données faisant appel aux méthodes de contrôle optimal.

Sur l'ensemble de ces sujets d'application la démarche est identique :

- i) simulation numérique de ces systèmes complexes,
- ii) assimilation de données expérimentales dans des modèles de prévision,
- iii) éventuellement, optimisation du système.

Dans la plupart des cas et pour des applications réelles, la résolution de ce type de problèmes nécessite des ressources en calcul très importantes. Ceci justifie la mise au point et l'utilisation de techniques de calcul intensif et le recours à des machines à architectures parallèles.

3 Actions de recherche

3.1 Identification et optimisation en physique

3.1.1 Physique des plasmas

Participants : Jacques Blum, Hélène Buvat-Dousteyssier, Michael Vogelius

Mots-clés :

Identification de sources non linéaires dans des équations elliptiques :

Ce problème est motivé par l'interprétation des mesures expérimentales dans le plasma (gaz ionisé) d'un Tokamak (dispositif expérimental visant à confiner le plasma dans un champ magnétique).

L'équilibre axisymétrique du plasma est régi par une EDP elliptique non-linéaire qui s'écrit :

$$A\Psi = r f_1(\Psi) + 1/r f_2(\Psi) \quad (1)$$

avec $A = -\text{div}(1/r \text{ grad.})$

dans le plan de section méridienne du tore de coordonnées (r, z) . L'inconnue $\Psi(r, z)$ est le flux du champ magnétique ; l'opérateur A est elliptique linéaire ; le second membre de l'équation (1) représente la densité de courant du plasma. Le problème est d'identifier les fonctions $f_1(\Psi)$ et $f_2(\Psi)$ qui ne peuvent être mesurées directement dans le plasma. Pour ce faire, on dispose d'informations surabondantes :

* la mesure expérimentale du flux Ψ et de sa dérivée normale $\partial\Psi/\partial n$ sur le bord du domaine (conditions de Dirichlet et Neumann),

* la connaissance des intégrales sur un certain nombre de cordes verticales de la composante verticale du champ magnétique à savoir $1/r \partial\Psi/\partial r$. Le problème est alors formulé sous la forme de la minimisation de l'écart quadratique entre les mesures expérimentales et les grandeurs calculées ; une régularisation de Tikhonov est utilisée pour rendre le problème stable. Un code d'identification basé sur ces techniques a été développé en collaboration avec le CEA et la CISI (à Cadarache) et est utilisé de façon systématique par l'équipe du Tokamak Tore Supra, pour déterminer le profil de densité de courant du plasma et les lignes de flux . De nombreux problèmes ouverts demeurent, comme le problème mathématique de l'identifiabilité de f_1 et f_2 à partir des mesures (même dans le cas cylindrique où l'équation (1) devient $-\Delta\Psi = f(\Psi)$, l'identifiabilité de f à partir de conditions de Cauchy est un problème ouvert dans le cas général). Des études mathématiques et numériques sont effectuées pour améliorer la compréhension de ce problème [9, 18].

Identification des coefficients de diffusion-convection :

Le transport de matière et de chaleur à l'intérieur d'un plasma de fusion est modélisé par un ensemble d'équations de diffusion-convection, dont les coefficients sont calculés à partir de la théorie dite "néo-classique"

des collisions entre particules. Or, par suite d'instabilités magnétohydrodynamiques, le transport est "anormal" et les coefficients de diffusion ne sont pas conformes à la théorie. Il s'agit donc ici de les identifier à partir des mesures expérimentales de densités et de températures à des instants de mesure discrets. Ce travail est appliqué au dépouillement des résultats du transport dans le Tokamak Tore Supra (à Cadarache) et a fait l'objet d'un stage de DEA [33].

Contrôle optimal de l'équilibre du plasma dans un Tokamak :

Il s'agit de contrôler la frontière libre du plasma dans un Tokamak. Ce problème devient de plus en plus délicat car les machines sont de plus en plus grandes ; la puissance requise devient donc très importante et la forme du plasma devient également plus sophistiquée (séparatrice avec point hyperbolique), pour des raisons de nature physique (meilleur confinement du plasma). La difficulté provient de la nécessité d'identifier la frontière du plasma en temps réel, de façon à la contrôler. Ce travail a été réalisé pour Tore Supra, où le plasma est circulaire [16]. Il s'agit à présent de trouver une loi de feedback optimale (ou sous-optimale) qui permette de contrôler la forme et les déplacements du plasma à un coût réaliste. De façon à avoir une description plus fine de l'évolution de l'équilibre du plasma, il convient de coupler les équations d'équilibre à l'équation de diffusion résistive à l'intérieur du plasma. Ce travail est en cours, en collaboration avec le CEA (Cadarache).

3.1.2 Problèmes d'optimisation en diffraction électromagnétique

Participants : Jacques Blum, Michel Mandallena

Il s'agit du problème dit de furtivité où l'on se propose de trouver une forme et un revêtement optimal de façon à ce que la trace d'un engin sur un écran radar soit minimale. La modélisation de ce problème se fait à l'aide des équations de Maxwell, écrites sous forme intégrale. Le code de simulation utilisé est celui développé au CESTA et porte sur des objets cylindriques.

On étudie deux problèmes distincts :

* le meilleur revêtement qui minimise pour une forme donnée la SER (surface équivalente radar),

* la forme optimale qui minimise la SER tout en satisfaisant les contraintes aérodynamiques.

Le problème est formulé dans la terminologie du contrôle optimal, la fonction de contrôle étant, dans le premier cas, l'impédance de surface et, dans le second, la forme du domaine. Une variante du premier cas, à savoir l'optimisation des épaisseurs d'un corps multicouche, constitué de matériaux à la surface du conducteur parfait est également étudiée. Les systèmes d'optimalité sont écrits et des algorithmes de type gradient ont été utilisés ; un effort particulier a porté sur la vectorisation optimale du code, qui a permis d'ouvrir de nouveaux domaines d'application, en particulier le domaine des hautes fréquences. Le but de ces travaux est de montrer que l'on peut, en utilisant des méthodes numériques modernes, obtenir des outils de conception d'objets furtifs [1, 7].

3.1.3 Problèmes d'optimisation en micromagnétisme

Participants: Anne Bagnérés, Pierre Baras, Christophe Bonjour, El Housseine Khannous

Les matériaux ferromagnétiques présentent une aimantation de direction variable et de norme constante. Dans ces matériaux, on observe de larges régions, les domaines, où l'aimantation est d'un même sens perpendiculaire à la surface du matériau. Ces domaines sont séparés par des parois au centre desquelles l'aimantation a une tendance naturelle à s'orienter le long de celles-ci. Un changement d'orientation est une ligne de Bloch. Ces matériaux servent de base aux mémoires à ligne de Bloch dans lesquelles on codifie le "1" par la présence d'une paire de lignes et le "0" par son absence. Lors des opérations élémentaires : lecture, écriture, propagation, les lignes sont propagées sous l'action d'un champ extérieur. La conception nécessite la connaissance de la configuration d'aimantation avant et après chaque opération.

L'évolution en temps de l'aimantation \vec{m} est régie par les équations de Landau-Lifschitz-Gilbert (LLG)

$d\vec{m}/dt = -[\vec{H} \times \vec{m} + \alpha \vec{m} \times (\vec{H} \times \vec{m})]$, ($\alpha > 0$), où $\vec{H} = \vec{H}(\vec{m})$ est le champ effectif. Il contient les effets d'un champ externe, d'anisotropie, d'échange et d'un champ démagnétisant. Les champs d'échange et d'anisotropie sont locaux. Le champ démagnétisant H^d est non local et présent dans tout l'espace. Slonczewski a donné un modèle simplifié de

ces équations qui décrit le déplacement d'une paroi en bande.

* Dans le cadre d'une thèse dirigée par P. Baras, E. H. Khannous poursuit son travail sur la simulation de dispositif. Il a, tout d'abord, résolu numériquement les équations de Slonczewski. Il s'agit d'un système parabolique couplant le déplacement d'une courbe, la paroi, et l'évolution de l'angle azimutal de l'aimantation. Il est parti ensuite des équations de LLG pour faire une analyse mathématique plus fine du modèle de Slonczewski. Il utilise, pour cela, des techniques de développements asymptotiques en tenant compte des différents termes d'énergie du système [20].

* A. Bagnérés étudie numériquement l'évolution de l'aimantation dans une plaque rectangulaire 3D en partant cette fois de l'équation de LLG. Le calcul du champ démagnétisant est la partie difficile de la résolution. On suppose l'aimantation périodique dans les deux directions du plan de la plaque. Sous cette hypothèse, on peut donner une formulation explicite de H^d en fonction de \vec{m} , en utilisant la théorie des distributions. Un programme a été écrit pour un ordinateur parallèle, la Paragon. La programmation est de type parallélisme de données. L'exploitation se fait en relation avec le Jet Propulsion Laboratory, laboratoire de la Nasa et le Professeur Humphrey de l'université de Boston. Des résultats de calcul ont donné lieu à des articles et une communication dans une conférence internationale.

* Une étude de schémas en temps pour l'équation de LLG a fait l'objet du stage de DEA de D. Reignier et s'est poursuivie en stage d'été [36].

* C. Bonjour, dans le cadre d'une thèse sous la direction de P. Baras, a étudié les singularités des fonctions minimisant l'énergie du micromagnétisme. L'étude n'a été faite que pour le cas statique. En adaptant, point par point, la théorie de R. Schoen et K. Uhlenbeck, concernant les singularités des fonctions harmoniques minimisantes, il a montré que le nombre des singularités de l'aimantation à l'intérieur d'un matériau magnétique borné est fini [17].

3.1.4 Contrôle d'interfaces

Participants : Stéphane Bouchereau, Mathias Marguliès, Patrick Witomski

Optimisation en cristallogénèse :

Mathias Margulès travaille sur le contrôle optimal d'une méthode de cristallogénèse : le procédé Bridgman. Il s'agit de contrôler l'interface de cristallisation à partir de paramètres agissant sur la thermique (non linéaire) du procédé : la vitesse de tirage, l'orientation des réflecteurs pour les échanges de chaleur par rayonnement. Un important travail de modélisation a été fait pour obtenir le bon problème d'optimisation. A l'instant initial, le matériau doit être fondu de telle façon que le germe soit juste à la température de fusion. A l'instant final, le matériau doit être tout entier en dessous de la température de solidification. En cours d'évolution la forme de l'interface est stable. Le problème d'optimisation des paramètres est traité par la méthode de l'adjoint. La difficulté réside dans le contrôle d'une surface libre dont l'évolution est régie par des équations fortement non linéaires.

Problèmes autour du phénomène de capillarité :

L'étude des problèmes de simulation numérique sur les phénomènes de capillarité a été initialisée par P. Witomski pour le calcul d'une interface liquide-solide dans un autre procédé de cristallogénèse : la méthode Czochralski. Stéphane Bouchereau travaille sur la modélisation et la simulation numérique de l'évolution d'un fluide sous l'effet conjugué des forces de tension superficielle et d'un champ électrique. Une goutte de liquide est posée sur un support conducteur. En l'absence de champ électrique, la forme de l'interface résulte de l'équilibre entre les forces de tension superficielle et de gravitation. Lorsque l'on met la goutte sous une tension V et que l'on fait croître V , on observe une déformation de la surface libre. Il s'agit de calculer cette déformation et d'étudier ce qui se passe au voisinage d'une valeur critique (à déterminer) de la tension pour laquelle un phénomène de bifurcation semble se produire. Parallèlement à ce travail, S. Bouchereau a mis au point [30] une méthode de détermination du calcul de la constante de tension superficielle à partir de mesures au bord de la hauteur et de l'angle du ménisque dans le cas d'un fluide dans un récipient axisymétrique. Il s'agit d'un problème inverse dont la généralisation au cas de l'identification d'une tension variable est un problème ouvert. L'analyse numérique du problème direct a été faite par P. Witomski [31].

3.1.5 Identification de structures cristallographiques

Participant : Anestis Antoniadis

Les diagrammes de diffraction de poudre obtenus à l'aide de neutrons sont caractérisés par un spectre de raies (pic de diffraction de Bragg) noyé dans un bruit de fond (bruit d'ambiance, diffusion parasite, etc...), plus ou moins homogène et intense. Les données suivent une loi de Poisson, car chaque point du diagramme de diffraction est le résultat du comptage de particules diffractées par un détecteur.

Le problème d'identification est d'extraire de ce type de diagrammes d'une part la valeur du bruit de fond pour chaque angle de diffraction et d'autre part la position, la forme et l'intensité des pics de Bragg.

C'est dans ce but qu'en collaboration avec J. Berruyer de l'Université de Saint-Etienne et A. Filhol de l'ILL, nous avons développé ABFfit, un logiciel de maximum de vraisemblance pour l'affinement de diagrammes poissonniens, reposant sur des techniques paramétriques d'identification non linéaires.

Ce genre de méthodes est efficace lorsque le modèle paramétrique postulé rend bien compte des données. Mais si les données sont très précises et que le modèle paramétrique postulé est trop simple, l'adéquation n'est plus satisfaite entraînant un biais important sur les paramètres estimés et sur leur variance. C'est dans le but d'éliminer ces imprécisions que nous avons donc poursuivi l'étude précédente, en proposant une méthode hybride semi-paramétrique pour l'identification. Cette méthode estime les résidus de l'affinement paramétrique par une fonction spline de lissage qui est ensuite réinjectée dans le modèle comme bruit de fond déterministe. Les pics sont alors de nouveau affinés avec ce bruit de fond fixé. Ce travail a fait l'objet d'un stage à l'ILL et a été réalisé par Ivan Neyret, étudiant de DESS, sous la direction d'A. Antoniadis et A. Filhol. Les résultats obtenus sont encourageants et devraient aboutir à une publication dans *Acta Crystallographica*.

3.2 Méthodes numériques performantes pour l'environnement

3.2.1 Couplage d'un modèle météorologique et d'un modèle chimique : étude d'algorithmes numériques performants

Participants : François-Xavier Le Dimet, Mohamed Ghemires

La prévision de l'évolution de la composition chimique de l'atmosphère nécessite la prise en compte des équations de la dynamique de l'atmosphère et de la cinétique chimique pour un certain nombre d'espèces. On obtient ainsi un système complexe d'équations aux dérivées partielles non linéaires avec des temps caractéristiques qui peuvent être très différents. Les phénomènes physiques qui entrent en jeu : convection, diffusion et cinétique chimique, doivent être traités par des approches numériques différentes. Pour la partie convective, on utilise une méthode de flux corrigé qui permet la reconstitution des gradients forts. La diffusion est résolue par un schéma de Crank-Nicholson et la cinétique chimique par une méthode de Gear. Les modèles ont été testés et validés [19].

3.2.2 Assimilation de données en océanographie

Participants : Jacques Blum, Alain Le Breton, Bruno Luong, Marie-Christine Roubaud, Pham Dinh Tuan, Jacques Verron

Le problème se pose pour l'océan dans les mêmes termes que pour l'atmosphère : on cherche à réaliser des simulations numériques en contraignant les solutions du modèle avec des observations afin de répondre à des objectifs de prévision en un sens déterministe ou probabiliste.

L'atmosphère et l'océan sont des fluides géophysiques différenciés dans leurs comportements dynamiques par des échelles caractéristiques différentes (les échelles spatiales sont plus fines dans l'océan tandis que les échelles temporelles y sont plus longues que dans l'atmosphère). En outre, les observations océaniques sont beaucoup moins denses (en temps et espace) que les observations atmosphériques. Les nouvelles techniques satellitaires et notamment les mesures altimétriques doivent permettre

d'améliorer notablement la connaissance des circulations océaniques.

Techniques déterministes de contrôle optimal :

L'océan est modélisé par un modèle quasi-géostrophique à trois couches. La prévision de l'évolution de l'océan peut se réaliser si l'on dispose d'une condition à un instant initial. Elle est estimée, par des techniques de contrôle, à partir des données de surface (mesures altimétriques). L'adjoint du modèle QG a été écrit et vérifié. L'optimisation de la condition initiale par rapport aux mesures est obtenue par l'application d'algorithmes d'optimisation de type quasi-Newton (développés à l'INRIA par Lemaréchal et Gilbert dans le cadre du projet PROMATH). Une des principales difficultés provient de la dimension de la variable de contrôle, après discrétisation, qui est de l'ordre de 120 000. Nous avons effectué plusieurs expériences numériques pour illustrer l'importance de la durée d'assimilation qui doit satisfaire les deux contraintes suivantes : être plus courte que l'échelle de prédictibilité du modèle et assez longue pour permettre une bonne pénétration verticale des informations. Plusieurs techniques d'assimilation consistant à découper l'intervalle d'assimilation en sous-périodes et à traiter les données de façon séquentielle ou incrémentale ont été testées et comparées [25]. Le paramètre de régularisation a été déterminé par validation croisée généralisée [32].

Techniques de filtrage stochastique :

Dans l'approche stochastique du problème par des méthodes de type filtrage, l'état initial cherché est supposé aléatoire et par suite la dynamique du système est elle-même un processus stochastique ; les données apparaissent comme les valeurs d'un processus lié au processus d'état contaminées par un bruit d'observation. Il s'agit alors de déterminer une bonne approximation de l'espérance conditionnelle de l'état du système au vu des données ou, ce qui revient au même, si on suppose qu'aucun bruit de dynamique n'est présent, de l'espérance conditionnelle de l'état initial. Le caractère non linéaire des équations de dynamique conduit à l'utilisation d'un filtre sous-optimal dit de Kalman-Bucy étendu (KBE) dans lequel on linéarise les équations au voisinage de l'estimation courante de l'état.

L'objet du travail amorcé dans le cadre de ce projet consiste à mener une étude approfondie des possibilités de l'approche par filtrage et à comparer ses performances à celles de l'approche classique des moindres

carrés. Le travail réalisé a consisté en une modification du filtre KBE se prêtant mieux au calcul. En effet, vu la très grande dimension de l'état du système, le filtre KBE usuel conduit a priori à des calculs très lourds voire même prohibitifs. Le caractère local et régulier de la dynamique d'état et des mesures a pu être exploité pour la construction d'un schéma de filtrage pour lequel le coût de calcul est notablement réduit. Une première version de ce nouveau schéma de filtrage a été implantée et expérimentée dans le cadre d'un travail de stage de DEA [34]. Une version améliorée est actuellement en cours de réalisation. Il convient de noter que les participants à cette action ont développé, indépendamment de celle-ci, des travaux dans le domaine du filtrage [21].

3.2.3 Optimisation d'un système d'observation

Participants : François-Xavier Le Dimet, Hans-Emmanuel Ngodock, Jacques Verron

La prévision numérique de l'évolution de l'océan dépend des observations qui sont effectuées et donc du système d'observation. La définition et mise en place d'un réseau de satellites d'observation de l'océan se fait actuellement. Le but de ce travail est dans un premier temps la mise au point d'outils d'évaluation de la sensibilité de la reconstitution des champs océaniques par rapport aux observations. On cherche aussi une évaluation optimale des caractéristiques orbitales des satellites.

Traditionnellement, l'évaluation de la sensibilité se fait en utilisant l'adjoint du modèle. L'approche que l'on a de l'assimilation de données nécessite de tenir compte aussi des données dans les études de sensibilité.

Toute l'information (modèle et données) est contenue dans le système d'optimalité. C'est donc sur ce système que l'on doit mettre en œuvre l'analyse de sensibilité. Ces résultats ont été clairement montrés [22, 27].

3.2.4 Système avancé de prévision régionale : assimilation de données, étude algorithmique

Participants : François-Xavier Le Dimet, Yannick Trémolet

La prévision à court terme et très précise d'épisodes météorologiques cataclysmiques comme les tornades demande l'utilisation des modèles très complexes et de nombreuses données, notamment des données radar. Ce

travail est orienté vers la mise au point et la comparaison d'algorithmes parallèles pour l'assimilation variationnelle de données.

Les résultats obtenues sur des machines parallèles (SP1 de l'Imag et T3D du CENG) montrent une grande efficacité de ces algorithmes principalement due à la dimension plus petite des problèmes d'optimisation à résoudre [8, 28].

L'assimilation variationnelle de données conduit à l'utilisation de méthodes d'optimisation avec un grand nombre de variables (de l'ordre de $10^6 - 10^7$ pour les problèmes opérationnels). Il est donc important d'avoir des algorithmes efficaces. On a mené une étude sur la comparaison de méthodes de quasi Newton et Newton tronqué en collaboration avec l'équipe de I. M. Navon à Florida State University (FSU) [11].

3.2.5 Théorie de l'assimilation de données

Participant : François-Xavier Le Dimet

Les techniques d'assimilation de données, notamment les techniques variationnelles, ont connu de très importants développements ces dernières années, tant du point de vue théorique que pour leur mise en œuvre opérationnelle. Le champ d'application s'est étendu aussi aux analyses en sensibilité. Les principaux résultats qui ont été obtenus par notre équipe porte sur :

l'analyse au second ordre :

L'utilisation de l'opérateur Hessien par l'utilisation d'un adjoint au second ordre permet d'obtenir des informations intéressantes sur le conditionnement des problèmes d'optimisation et permet la mise en œuvre d'algorithmes efficaces de type Newton. Ce travail a été réalisé en collaboration avec l'équipe de I. M. Navon à FSU [10].

Les méthodes de nudging optimal :

Une façon traditionnelle en océanographie de prendre en compte des données dans un modèle est d'ajouter dans les équations du modèle un terme de "rappel" vers les observations. Cette technique d'insertion des données dans un modèle est dite "nudging". L'amplitude du rappel étant définie de façon empirique, nous avons montré qu'il était possible de calculer de façon optimale un terme de "nudging", ce qui amène une amélioration sensible des résultats existants. Ce travail a été réalisé avec FSU. [5, 6, 22, 23, 24].

3.3 Techniques déterministes et stochastiques

3.3.1 Méthodes de décomposition en sous-domaines

Participants : Jacques Blum, Aïcha Bounaïm

J. Blum a encadré A. Bounaïm sur un sujet de stage de DEA qui portait sur l'utilisation des méthodes de décomposition en sous-domaines pour résoudre des problèmes de contrôle optimal [35]. Un travail de pionnier avait été fait il y a une vingtaine d'années par Bensoussan, Lions et Glowinski sur ce sujet. C'est très récemment à la suite des développements du calcul parallèle que ce sujet a été réétudié par Benamou à l'INRIA Rocquencourt (dans le projet IDENT). A. Bounaïm a mis au point un algorithme qu'elle a testé sur une décomposition en 2 sous-domaines. Elle a obtenu une bonne convergence de l'algorithme.

Ce travail va se poursuivre en une thèse avec la recherche de nouveaux algorithmes, la mise en œuvre réelle sur des machines parallèles (en particulier le SP1 de l'IMAG) et l'application à des problèmes d'océanographie. La thèse comportera une partie numérique encadrée par J. Blum et une partie informatique encadrée par B. Plateau (ceci dans le cadre d'une collaboration IDOPT-APACHE).

3.3.2 Techniques stochastiques pour les problèmes inverses

Participants : Anestis Antoniadis, Hélène Buvat-Dousteyssier, Didier Girard, Gérard Grégoire

Problèmes inverses et ondelettes :

Il est connu que pour les problèmes inverses, surtout bruités, l'identification de paramètres est un problème mal posé et difficile. Les démarches naïves d'identification par inversion directe sont vouées à l'échec.

La théorie des ondelettes pour débruiter de tels problèmes a attiré récemment beaucoup d'intérêt dans la communauté scientifique. C'est dans ce cadre, et pour les utiliser dans les problèmes posés au sein de ce projet, que nous avons commencé à développer certains outils statistiques qui devraient s'avérer utiles dans les problèmes inverses d'identification.

L'idée consiste à décomposer l'objet que l'on veut identifier par une transformation en ondelettes orthogonales à support compact. L'objet est alors représenté par ses coefficients dans la base choisie d'ondelettes

et le fait d'utiliser des ondelettes orthogonales fait que la structure du bruit sur l'objet initial reste identique lorsqu'il est transporté par la transformation dans le domaine des coefficients. Le problème continu ainsi posé est alors transformé en un problème discret, plus facile à traiter. Une fois le problème traité de manière satisfaisante dans le domaine des coefficients, on revient par transformation inverse dans le domaine initial.

L'ensemble des travaux réalisés cette année avait pour but de développer des méthodes de régularisation (linéaires et non linéaires) pour ces problèmes discrets et d'établir leurs propriétés asymptotiques lorsque l'on dispose d'un grand nombre d'observations.

Pour une implémentation numérique rapide de ce type de méthode, il est nécessaire de supposer que l'objet de départ admet une décomposition en ondelettes avec un nombre fini de termes. Nous avons donc analysé les erreurs d'approximation qui découlent d'une telle hypothèse, d'abord dans un cas simple [2, 3, 29], et ensuite dans un cas plus complexe mais plus réaliste [12]. De plus, pour ne pas se restreindre au cas de problèmes bruités avec un bruit blanc, nous avons envisagé la généralisation de ces méthodes au cas d'un bruit hétéroscédastique [13].

Techniques de validation croisée dans les problèmes inverses :

Les diverses approches (du type régression non paramétrique, régularisation, pénalisation, approche markovienne, méthodes "du tamis", etc.) pour la résolution numérique de problèmes inverses (par exemple, l'identification de la perméabilité du sous-sol en modélisation de réservoirs pétroliers) fournissent généralement une famille de solutions indexées par un (ou quelques) paramètre(s) (appelés paramètres de régularisation ou hyperparamètres dans la terminologie bayésienne). Les techniques de validation croisée commencent à devenir une approche courante pour le choix de ces hyperparamètres quand les méthodes plus standard (telle que le maximum de vraisemblance) échouent. Malheureusement, excepté pour quelques cas bien structurés, les algorithmes exacts les plus performants développés par G. Golub, G. Wahba et leurs collaborateurs pour la validation croisée généralisée (GCV) nécessitent des décompositions en valeurs singulières de matrices dont l'ordre est la taille des données, et sont donc limités en pratique à des problèmes de petite taille (quelques centaines de données).

Dans le cadre linéaire, un résultat récent de D. Girard, basé sur une approximation de type Monte-Carlo, a permis de réduire considérablement

le coût de mise en œuvre de ces techniques. Ceci a déjà été appliqué à de nombreux domaines, citons entre autres:

- la restauration d'images bruitées (logiciel Gildas de l'Observatoire de Grenoble),
- le calcul de fonctions de régression multivariées (logiciel PLAQUES développé au CEA pour leur besoin en analyse de données et ensuite diffusé auprès d'EDF, Framatome, etc.).

D. Girard a poursuivi l'étude de ces procédures randomisées de validation croisée dans plusieurs directions :

Il est montré qu'une certaine modification de la GCV randomisée produit en fait de meilleurs résultats (asymptotiques) que la GCV exacte ; cette variante atteint même la meilleure précision possible (borne inférieure du type Cramer-Rao sur l'erreur d'estimation).

Même sans l'hypothèse d'un cadre asymptotique, il était clair dès le début qu'un petit nombre de simulations, disons 10, est toujours suffisant pour la version Monte Carlo du critère CL (alternative moins "puissante" que la validation croisée). Il a été établi récemment qu'en fait cette bonne propriété peut être "à peu près" étendue à la version Monte Carlo du critère GCV. Ces résultats théoriques, fondamentaux pour la pratique, ont pu être en fait étendus en un certain sens au cadre non-linéaire pour lequel une généralisation de ces techniques de Monte-Carlo avait été introduite en 89 et validée expérimentalement au LMC (thèse de L. Deshpande sous la direction de D. Girard) et par d'autres chercheurs depuis (citons, par exemple, G. Wahba et ses collaborateurs de la NASA concernés par l'assimilation des données en météorologie).

D. Girard et L. Desbat ont étudié le nouvel estimateur d'erreur proposé récemment par J. Rice comme amélioration de la validation croisée pour les problèmes de déconvolution. Ils ont mis en évidence son instabilité numérique et proposé une modification pour le rendre plus stable [4]. Cette modification a permis aussi d'étendre son domaine d'application (problèmes inverses non limités à la déconvolution).

Plus récemment, D. Girard a montré que l'on peut obtenir un estimateur "consistant" pour la distribution du paramètre validation croisée (et donc des intervalles de confiance pour le paramètre optimal) et ceci uniquement par simulation d'une certaine variante de la validation croisée randomisée.

4 Actions industrielles

A. Antoniadis est conseiller scientifique au groupe Synchrotron du LCCP, à l'institut de biologie structurale du CENG et à l'institut Laue Langevin.

Un contrat a été passé entre le CEA/CESTA et l'INRIA pour réaliser une étude sur les méthodes numériques d'optimisation en SER (furtivité électromagnétique). D'autre part, une collaboration existe avec le CEA (Cadarache) sur les problèmes de fusion contrôlée.

J. Blum est conseiller scientifique du CEA (Cadarache, Bordeaux).

D. Girard est conseiller scientifique auprès du CEA (Service de Thermohydraulique des Réacteurs) et EDF (Division Auscultation des Ouvrages) sur des problèmes d'analyse de données expérimentales par modélisation non-paramétrique.

P. Witomski travaille en liaison avec la CISI sur les problèmes de cristallogénèse.

5 Actions nationales et internationales

5.1 Actions nationales

Participation à des Groupements de Recherche (GR) Cnrs

- GR Plasmas de fusion.
- GR SPARCH (Simulation de faisceaux de particules chargées)
- GR Optimisation de forme.
- GR Méthodes variationnelles en météorologie et océanographie (F.-X. Le Dimet membre du comité scientifique).
- GR automatique.

J. Blum est membre du comité de lecture de la collection "Mathématiques et Applications" de la SMAI.

J. Blum est membre du comité du Comité de Programmes d'Idris.

5.2 Actions internationales

- Sur le thème **PHYSIQUE DES PLASMAS**
Association au projet européen JET et au projet international ITER (par le CEA).
- Sur le thème **MICROMAGNETISME**
Travail en collaboration avec le Jet Propulsion Laboratory et l'université de Boston (USA).
- Sur le thème **ENVIRONNEMENT**
F.-X. Le Dimet a été professeur invité à Florida State University de Juin à Septembre 1994.

Il est coordonnateur du projet INTAS (avec l'université de Namur, le CNR Cagliari, Max Planck Institut à Hambourg, le laboratoire de Mathématiques Numériques de Moscou et le centre de calcul de Novosibirsk) sur les méthodes mathématiques en climatologie.
Il participe au projet européen ECRASE (modélisation en hydrologie).
- Sur le thème **TECHNIQUES STOCHASTIQUES**
 - Collaboration avec le professeur R. Carmona (Université of California at Irvine (UCI)) et le professeur Mc Keague (université de Floride).
 - A. Antoniadis a été professeur invité à UCI, (juin-septembre 1994).
 - D. Girard est membre du bureau éditorial de Computational Statistics depuis 1991.

Séminaires sur invitation à l'étranger :

A. Bagnérés :

- Numerical Simulation in Micromagnetism, Caltech, USA, (avril 1994).

F.-X. Le Dimet :

- Alfred Wegener Institute, Bremerhaven, (novembre 1993).
- Massachusetts Institute of Technology, (décembre 1993).
- University of Oklahoma, (juillet 1994).
- National Center for Atmospheric Research, (août 1994).

- Florida State University, (août 1994).

Manifestations INRIA :

F.-X. Le Dimet :

- Ecole d'hiver INRIA-THOMSON, (décembre 1994).

- Séminaire NEC-INRIA, (septembre 1994).

6 Diffusion des résultats

6.1 Enseignement

La majorité des membres du projet sont enseignants-chercheurs. Ils sont donc largement impliqués dans des fonctions d'enseignement. A noter :

DEA de Mathématiques appliquées :

- Contrôle optimal des EDP (J. Blum).

- Méthodes numériques en mécanique des fluides (P. Baras).

- Calcul intensif (F.-X. Le Dimet).

- Problèmes inverses (A. Antoniadis - J. Blum).

IUP de Mathématiques appliquées et industrielles :

- Analyse fonctionnelle (TD assurés par A. Bagnérés).

6.2 Conférences et colloques

- SIAM Symposium on Control Problems in Industry, San Diego, 1994, (J. Blum), conférencier invité.
- GDR méthodes variationnelles sur l'assimilation de données en météorologie et océanographie, 1994, (B. Luong).
- EGS General Assembly, Grenoble, 1994, (H.-E Ngodock, F.-X. Le Dimet, Y. Trémolet et J. Verron).
- Journées de l'ASU, Neuchâtel, Suisse, Mai 1994 (A. Antoniadis).
- Journées Franco-Belges des Statisticiens, Ondelettes et Statistique, Villard-de-Lans, Novembre 1994, (A. Antoniadis et G. Grégoire).

- Communications au 26e congrès national d'analyse numérique, les Karellis, 1994 (C. Bonjour, E. H. Khannous, B. Luong, M. Ghémires, H. Dousteysier et F.-X. Le Dimet en temps que conférencier invité).

6.3 Organisation de colloques et de cours

F.-X. Le Dimet a été membre du comité d'organisation de l'assemblée générale de l'European Geophysical Society, Grenoble, Avril 1994 et organisateur de la session EGS sur l'assimilation de données.

A. Antoniadis est organisateur des Journées Franco-Belges des Statisticiens sur "Ondelettes et statistique", Villars de Lans, novembre 1994.

6.4 Autre

- Un groupe de travail du projet se réunit tous les quinze jours et a permis d'inviter H. T. Banks (North Carolina University), R. Kotiuga (Boston University), M. Vogelius (Rutgers University).

- Présentation de nos résultats au grand public lors des journées TEC94.

7 Publications (depuis octobre 1993, date de création du projet)

Thèses

- [1] M. MANDALLENA, *Utilisation de méthodes de contrôle optimal pour résoudre des problèmes liés à la furtivité électromagnétique*, thèse de doctorat, Université Joseph Fourier, octobre 1993.

Articles et chapitres de livre

- [2] A. ANTONIADIS, «Smoothing Noisy Data with Coiflets», *Statistica Sinica* 4(2), 1994, p. 651-678.
- [3] A. ANTONIADIS, *Wavelet methods for smoothing noisy data*, (Eds P.-J. Laurent, Le Mehauté, L. Schumaker, A. K. Peters), Massachusetts, 1994, p. 21-28.

- [4] D. GIRARD, L. J. DESBAT, «The minimum "reconstruction-error" choice of regularization parameters : some more efficient methods and their application to deconvolution problems», *SIAM J. Scientific and Statistical Computing*, à paraître.
- [5] F.-X. LE DIMET, M. OUBERDOUS, *Optimal Control and Data Assimilation*, 32, J. L. Lions and J. Diaz ed., Collection RMA, Masson.
- [6] F.-X. LE DIMET, M. OUBERDOUS, «Retrieval of Balanced fields : an optimal control technique», *Tellus*, décembre 1993.
- [7] M. MANDALLENA, J.-J. PESQUE, «Utilisation de méthodes de contrôle optimal pour minimiser la S.E.R. de cibles conductrices ou revêtues», *Revue Scientifique et technique de la Défense 1*, 1994.
- [8] Y. TREMOLET, F.-X. LE DIMET, D. TRYSTRAM, *Parallel Algorithms in Data Assimilation*, B0 796, W. Gentszsch, Uwe Harms, (eds) Springer-Verlag, Lecture Notes in Computer Sciences, p. 317-322.
- [9] M. VOGELIUS, «An inverse problem for the equation $\Delta u = -cu - d$ », *Annales de l'Institut Fourier*, 1994, à paraître.
- [10] Z. WANG, I. M. NAVON, F.-X. LE DIMET, «The second order Adjoint Analysis: Theory and Applications», *Meteorology and Atmospheric Physics 50*, 1994, p. 3-20.
- [11] X. ZOU, I. M. NAVON, BERGER, PHUA, F.-X. LE DIMET, «Numerical Experience with limited memory quasi-Newton and truncated Newton Methods», *SIAM J. on Optimization 3(B03)*, 1993, p. 582-608.

Communications à des congrès, colloques, etc.

- [12] A. ANTONIADIS, G. GRÉGOIRE, «Regression estimation with wavelet methods : unequally spaced data», in : *Journées Franco-Belges des Statisticiens, Ondelettes et Statistique*, Villard-de-Lans, novembre 1994.
- [13] A. ANTONIADIS, C. LAVERGNE, «Estimating variance functions in regression by wavelet methods», in : *Journées Franco-Belges des Statisticiens, Ondelettes et Statistique*, Villard-de-Lans, novembre 1994.
- [14] A. ANTONIADIS, «Smoothing noisy data with tapered coiflet series», in : *Journées de l'ASU*, Neuchâtel, Suisse, mai 1994.
- [15] J. BLUM, «Inverse problems in plasma physics», in : *Int. Conf. on Control and Estimation of Distributed Parameter Systems*, Vorau, 1993.
- [16] J. BLUM, «Identification and control of plasma equilibrium in a Tokamak», in : *SIAM Symposium on Control Problems in Industry*, San Diego, 1994.

- [17] C. BONJOUR, « Singularités des fonctions minimisant l'énergie du micro-magnétisme », *in : 26e congrès national d'analyse numérique*, Les Karelis, 1994.
- [18] H. DOUSTEYSSIER, « Un problème d'identification de source non-linéaire », *in : 26e congrès national d'analyse numérique*, Les Karelis, 1994.
- [19] M. GHEMIRE, « Couplage physico-chimique de l'atmosphère, étude de sensibilité », *in : 26e congrès national d'analyse numérique*, Les Karelis, 1994.
- [20] E. H. KHANNOUS, « Simulation numérique pour les matériaux ferromagnétiques », *in : 26e congrès national d'analyse numérique*, Les Karelis, 1994.
- [21] A. LE BRETON, « Continuous time stochastic models : linear problems of estimation, filtering and control », *in : Proc. 8th International Summer School on Proba. Th. and Math. Stat.*, 1994. A paraître.
- [22] F.-X. LE DIMET, « Data Assimilation : A global approach to modeling », *in : Actes de l' Ecole d'hiver "Calcul scientifique dans les systèmes"*, décembre 1993.
- [23] F.-X. LE DIMET, « Méthodes numériques en assimilation de données », *in : 26e congrès national d'analyse numérique*, Les Karelis, 1994.
- [24] F.-X. LE DIMET, « Sensitivity Studies in Presence of Data », *in : Proceedings of the International Workshop on Adjoint Applications*, Visegrad, août 1994.
- [25] B. LUONG, J. BLUM, J. VERRON, « Assimilation de données altimétriques dans un modèle fortement non linéaire d'océanographie », *in : 26e congrès national d'analyse numérique*, Les Karelis, 1994.
- [26] B. LUONG, « Quelques stratégies d'assimilation de données variationnelles dans un modèle de turbulence en océanographie », *in : GDR Méthodes Variationnelles sur l'assimilation de données en météorologie et océanographie*, 1994.
- [27] H.-E. NGODOCK, F.-X. LE DIMET, « Variational Data Assimilation and Sensitivity to Orbital Parameters », *in : EGS General Assembly, Annales Geophysicae*, Grenoble, 1994.
- [28] Y. TREMOLET, F.-X. LE DIMET, « Parallel Data Assimilation in Meteorology », *in : EGS General Assembly, Annales Geophysicae*, Grenoble, 1994.

Rapports de recherche et publications internes

- [29] A. ANTONIADIS, «Smoothing noisy data with tapered coiflet series», *rapport de recherche n°RR933-M*, LMC/IMAG, février 1994, En révision au Scandinavian Journal of Statistics.
- [30] S. BOUCHEREAU, «Une méthode de résolution du problème inverse de la capillarité dans le cas axisymétrique», *rapport de recherche*, LMC/IMAG, 1994, (à paraître).
- [31] P. WITOMSKI, «Analyse numérique de l'approximation du problème de la capillarité par une méthode de lagrangiens. Cas axisymétrique», *rapport de recherche*, LMC/IMAG, 1994, (à paraître).

Divers

- [32] E. BLANCHARD, «Optimisation du paramètre de régularisation pour des problèmes d'identification en océanographie», 1994, Mémoire de DEA de mathématiques appliquées, Grenoble.
- [33] F. CANEL, «Identification du coefficient de transport de la chaleur à partir des mesures expérimentales dans un tokamak», 1994, Mémoire de DEA de mathématiques appliquées, Grenoble.
- [34] A. HAW-KWAN-YUEN, «Filtre de Kalman étendu pour l'assimilation de données dans un modèle océanique quasi-géostrophique», 1994, Mémoire de DEA de mathématiques appliquées, Grenoble.
- [35] A. B. M, «Méthode de décomposition de domaine avec Lagrangien augmenté pour un problème de contrôle optimal régi par des équations aux dérivées partielles elliptiques», 1994, Mémoire de DEA de mathématiques appliquées, Grenoble.
- [36] D. REIGNIER, «Etude et évaluation de schémas en temps pour le problème du micromagnétisme», 1994, Mémoire de DEA de mathématiques appliquées, Grenoble.

8 Abstract

A large number of domains of physics, mechanics, biology are modeled by distributed parameter systems, governed by partial differential equations which describe the spatio-temporal behaviour of the unknowns of the model. Two types of problems arise then naturally and their study constitute the aim of this project:

1. Identification of distributed parameter systems.
2. Optimization of these systems.

The main applications treated in the frame of this project concern the following topics:

Plasma physics: identification and control of the equilibrium of the plasma in a Tokamak.

Stealth in aeronautics: minimization of the signature of a plane or a missile on a radar-screen.

- Micromagnetism.
- Crystallography and optimization of a crystallization oven.
- High performance numerical methods for environment.
- Data assimilation in meteorology and oceanography.

Table des matières

1	Composition de l'équipe	1
2	Présentation du projet	3
3	Actions de recherche	4
3.1	Identification et optimisation en physique	4
3.1.1	Physique des plasmas	4
3.1.2	Problèmes d'optimisation en diffraction électromagnétique	6
3.1.3	Problèmes d'optimisation en micromagnétisme	7
3.1.4	Contrôle d'interfaces	8
3.1.5	Identification de structures cristallographiques	10
3.2	Méthodes numériques performantes pour l'environnement	11
3.2.1	Couplage d'un modèle météorologique et d'un modèle chimique : étude d'algorithmes numériques performants	11
3.2.2	Assimilation de données en océanographie	11
3.2.3	Optimisation d'un système d'observation	13
3.2.4	Système avancé de prévision régionale : assimilation de données, étude algorithmique	13
3.2.5	Théorie de l'assimilation de données	14
3.3	Techniques déterministes et stochastiques	15
3.3.1	Méthodes de décomposition en sous-domaines	15
3.3.2	Techniques stochastiques pour les problèmes inverses	15
4	Actions industrielles	18
5	Actions nationales et internationales	18
5.1	Actions nationales	18
5.2	Actions internationales	19

6	Diffusion des résultats	20
6.1	Enseignement	20
6.2	Conférences et colloques	20
6.3	Organisation de colloques et de cours	21
6.4	Autre	21
7	Publications (depuis octobre 1993, date de création du projet)	21
8	Abstract	24