

---

# Projet IDOPT

## Identification et optimisation de systèmes en physique et en environnement

---

**Localisation :** *Grenoble*

**Mots-clés :** identification de paramètres, problèmes inverses, optimisation, contrôle optimal, équations aux dérivées partielles, environnement.

### 1 Composition de l'équipe

#### Responsable scientifique

Jacques Blum, Professeur, université de Grenoble 1

#### Secrétaire

Khadija Rassouli, 1/4 de temps sur vacances

#### Personnel Inria

Anne Bagnérés, CR (à temps partiel à 70% depuis le 01/08/96)

#### Personnel des établissements partenaires (UMR 5523 Laboratoire de Modélisation et Calcul de l'IMAG)

Anestis Antoniadis<sup>1</sup>, Professeur, université de Grenoble 2

Eric Blayo, MC, université de Grenoble 1

Isabelle Charpentier<sup>1</sup>, CR CNRS (section 01)

Didier Girard<sup>1</sup>, CR CNRS (section 07)

François-Xavier Le Dimet, Professeur, université de Grenoble 1

Dinh Tuan Pham<sup>1</sup>, DR CNRS (section 01)

Patrick Witomski<sup>1</sup>, Professeur, université de Grenoble 1

#### Chercheur invité

Dan Tiba, Académie des Sciences de Roumanie (1 mois)

---

<sup>1</sup>Ces chercheurs ou enseignants-chercheurs n'effectuent qu'une partie de leur recherche au sein du projet IDOPT.

### Chercheurs doctorants

Emmanuel Blanchard, AMN ENS Lyon  
 Christophe Bonjour, PRAG INPG  
 Stéphane Bouchereau, allocataire MESR  
 Aïcha Bounaïm, boursière Inria  
 Sylvain Carme, allocataire BDI CNRS  
 Stéphane Despreaux, allocataire MESR  
 Mohamed Ghemires, allocataire MESR  
 El Houssein Khannous, vacataire université Grenoble 1  
 Mathias Marguliès, ingénieur CISI  
 Hans-Emmanuel Ngodock, boursier du gouvernement camerounais

### Collaborateurs extérieurs

Pierre Baras, Professeur, université de Savoie  
 Gérard Grégoire, Professeur, université de Lyon 2  
 Alain Le Breton, Professeur, université de Grenoble 1  
 Marie-Christine Roubaud, MC, université de Grenoble 1  
 Jacques Verron, DR CNRS au LEGI

## 2 Présentation du projet

Le projet *Idopt* est un projet commun au CNRS (département SPM), à l'université Joseph Fourier (Grenoble 1), à l'INPG et à l'Inria Rhône-Alpes. Ce projet est localisé au laboratoire LMC de l'Imag.

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

i) l'identification :

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, etc.). 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 :

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 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 peuvent être 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. Des techniques

stochastiques seront également utilisées pour résoudre les problèmes inverses (filtrage de Kalman, validation croisée, ondelettes).

Les deux grands thèmes d'application choisis sont :

- un certain nombre de problèmes de la physique (électro-magnétisme, physique des plasmas, cristalllogénèse, capillarité).
- la modélisation numérique performante pour les sciences de l'environnement (plus particulièrement météorologie, océanographie, hydrologie) et les méthodes d'assimilation de données.

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.

## 3 Actions de recherche

### 3.1 Techniques de résolution déterministes et stochastiques

*Participants* : Anestis Antoniadis, Jacques Blum, Aïcha Bounaïm, Isabelle Charpentier, Didier Girard, Alain Le Breton, François-Xavier Le Dimet, Hans-Emmanuel Ngodock, Dinh Tuan Pham, Marie-Christine Roubaud

*Mots-clés* : analyse de sensibilité, contrôle optimal, décomposition de domaine, estimation non paramétrique, filtrage, ondelettes, problème inverse, régression, régularisation, spline, synthèse modale, validation croisée.

Des méthodes ou outils sont développés dans le projet pour la résolution des problèmes inverses ou des problèmes de contrôle optimal. Ils se divisent en deux grandes classes : ceux qui sont déterministes et en particulier utilisent l'adjoint d'un système, et ceux qui sont stochastiques, qui vont du filtrage de Kalman à la validation croisée en passant par les méthodes d'ondelettes ou de splines. Ces méthodes seront utilisées dans les §3.2 et 3.3, associées à des applications ciblées.

#### 3.1.1 Etudes de sensibilité et méthodes du second ordre

Un modèle physique pour lequel une partie de l'information est manquante (coefficients, conditions initiales ou aux limites à identifier) peut être fermé par un principe variationnel minimisant, par exemple, un écart aux observations. Le problème est alors posé en utilisant la méthodologie du contrôle optimal et la solution est obtenue par résolution du système d'optimalité. De nombreuses applications en physique requièrent des études de sensibilité, qui ne sont rien d'autre que l'estimation du gradient d'une fonction réponse par rapport aux paramètres. On est donc amené, pour le calcul de sensibilité, à dériver le système d'optimalité et donc à tenir compte des propriétés au second ordre. De façon générale, on a introduit un adjoint du second ordre qui permet de résoudre ce problème. De plus ce système permet d'avoir accès à des propriétés du second ordre : spectre du hessien, produit hessien-vecteur avec des applications pour des algorithmes numériques performants de type Newton, etc. [486],[487],[488],[489]. Ces travaux ont été menés, notamment dans la thèse de H.-E. Ngodock [457], pour l'application en océanographie et ils font l'objet d'une collaboration avec Florida State University pour la météorologie.

#### 3.1.2 Dérivation automatique des modèles adjoints

Les techniques d'assimilation de données fondées sur le contrôle optimal utilisent l'adjoint du modèle pour estimer le gradient de l'écart entre les solutions du modèle et les observations. Ce gradient permet de mettre en œuvre des algorithmes d'optimisation menant à l'estimation de l'état optimal par rapport

aux observations. Une difficulté essentielle provient de la dérivation de cet adjoint qui est un travail difficile et long. Le projet SAFIR (Inria-Sophia) a développé un outil (ODYSSEE) permettant, à partir d'un code FORTRAN existant, d'en construire le code adjoint. Le potentiel d'application est très important, non seulement en géophysique, mais dans de nombreux autres domaines d'application où des études de sensibilité sont nécessaires. Deux étudiants de l'IUP de Mathématiques Appliquées et Industrielles de l'UJF (F. Hanifi et P.-O. Poete) ont passé 4 mois à l'université d'Oklahoma pour tester l'application d'ODYSSEE au modèle météorologique ARPS [503].

### 3.1.3 Méthodes de décomposition en sous-domaines

Dans sa thèse, A. Bounaïm poursuit un travail sur les Méthodes de Décomposition en sous-Domains (MDD) appliquées à un problème de contrôle optimal. L'idée motivant cette thèse est de minimiser simultanément la fonctionnelle coût et les raccordements à l'interface entre les sous-domaines en utilisant les méthodes de lagrangien augmenté. Dans le cas de la décomposition en deux sous-domaines, diverses considérations des contraintes à l'interface ont été prises en compte et des tests sur les lagrangiens augmentés associés à chaque cas ont été faits ainsi que la comparaison de leurs convergences [477]. De plus, ces algorithmes ont été comparés à une MDD avec recouvrement en utilisant la méthode alternée de Schwarz. Une étude mathématique de la convergence des différents algorithmes mis au point est en cours. Des tests vont à présent être implémentés sur la machine parallèle SPI de l'Imag. Ces travaux sont à mettre en parallèle avec ceux effectués par J.-D. Benamou dans le projet Ident de Rocquencourt.

### 3.1.4 Synthèse modale par décomposition de domaine avec recouvrement

Ces travaux sont réalisés par I. Charpentier en collaboration avec F. De Vuyst (u. Pierre et Marie Curie) et Y. Maday (ASCI et u. Pierre et Marie Curie) dans le cadre du laboratoire ASCI (CNRS).

La synthèse modale, méthode de calcul de valeurs propres pour des opérateurs compacts autoadjoints, est ici réalisée en introduisant la décomposition  $\cup_{k=1,\dots,K} \Omega_k$  avec recouvrement d'un domaine  $\Omega$ . Comme dans les versions plus classiques (sans recouvrement), on identifie les valeurs et vecteurs propres de l'opérateur pour le domaine  $\Omega$  à partir des valeurs et vecteurs propres locaux sur chacun des sous-domaines  $\Omega_k$ .

L'originalité de la méthode avec recouvrement réside en la convergence spectrale obtenue tant théoriquement que numériquement. Ces premiers résultats font l'objet de deux publications ([462] et [463]).

### 3.1.5 Problèmes inverses et ondelettes

Dans un ensemble de travaux maintenant publiés ou en cours de publication ([458],[469],[495],[496]), nous avons développé des méthodes d'identification de signaux noyés dans du bruit aléatoire par des méthodes de régression non paramétrique fondées sur les notions d'analyse multirésolution et de décomposition en ondelettes. Ces travaux ont introduit de nouveaux types d'estimateur pour des classes de fonctions "hétérogènes" (espaces de Besov) et ont également permis de comprendre plus profondément le mécanisme d'autres méthodes d'identification plus classiques.

La plupart des résultats théoriques obtenus sont de nature asymptotique dans le sens où le nombre d'observations dont on dispose tend vers l'infini. Comme tout résultat asymptotique, il y a certains doutes sur le bien fondé des propriétés asymptotiques lorsque l'on ne dispose que d'un nombre fini et limité d'observations. La limite du nombre d'observations nécessaire pour obtenir des résultats proches des résultats asymptotiques est une question importante que nous avons abordée. Nous avons également abordé le problème d'échantillonnage dans le cadre des analyses multirésolutions permettant la réalisation d'algorithmes d'identification aussi rapides que la FFT. Enfin nous avons établi les liens qui pouvaient exister entre algorithmes de régularisation pour des problèmes mal conditionnés [458], les méthodes de sélection de modèles [495] et les techniques linéaires de lissage à l'aide d'ondelettes.

En résumé l'ensemble de ces travaux nous ont permis :

- d’analyser le comportement de techniques d’identification fondés sur les ondelettes pour la résolution de problèmes inverses particuliers,
- de développer des algorithmes de calcul rapide pour l’identification,
- de bien cerner les problèmes susceptibles d’être résolus par de telles méthodes [469].

### 3.1.6 Techniques de validation croisée dans les problèmes inverses

D. Girard a poursuivi l’étude des versions randomisées de validation croisée et d’autres critères dans plusieurs directions, notamment :

- Les résultats de Härdle, Hall et Marron (1988) sur la performance asymptotique (vitesse de convergence) de la validation croisée (CV) ou de la GCV, et ses propres résultats sur la GCV randomisée (1992), ont été étendus à un cadre plus général. D’autre part, la légère détérioration inévitable due à la randomisation est précisément interprétée [464]. Par exemple, une pratique auparavant courante était de réduire le coût (d’un facteur  $k$ ) de la CV exacte, simplement en ne considérant les omissions que d’un point sur  $k$  (donc seulement  $n/k$  tests *leave-one-out* parmi les  $n$  tests possibles). Ce travail montre que déjà avec  $k = 2$ , la vitesse de convergence devient moins bonne que celle de la GCV randomisée utilisant 2 simulations (qui réduit, elle, le coût d’un facteur  $n/3$ ).

- Une (la ?) question primordiale pour l’intérêt pratique de ces techniques est bien sûr: “Peut-on se fier au choix fourni par la validation croisée pour le problème en main?”. Suite à la première réponse partielle donnée dans l’article de *Computational Statistics* (“si les choix (randomisés) obtenus ont une grande variabilité alors la validation croisée exacte est elle-même très questionnable”; heuristique qui a été étendue à un contexte non-linéaire dans le *rejoinder* [465] de la discussion de cet article), on a montré que l’on peut même 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 GCV randomisée [498]. Une amélioration très récente de cette méthodologie permet d’étendre son domaine d’application.

### 3.1.7 Régression multivariable par splines ANOVA

L’utilisation des modèles “multivariable interaction splines” (ou spline ANOVA) s’est considérablement développée ces dernières années (voir par exemple la *1994 Neyman Memorial Lecture des Ann. of Stat.*). Ils offrent en effet d’importants avantages par rapport aux maintenant traditionnelles splines multidimensionnelles du type “plaque-mince” : ils permettent la prise en compte d’information du style “deux variables explicatives ont des effets indépendants (ou quasi-indépendants) sur la réponse” ou bien “la réponse est périodique ou quasi-périodique (par ex. effets saisonniers se modifiant au cours des années) par rapport à une des variables”. Ici une question importante à résoudre est le choix du modèle le plus parcimonieux, et donc améliorer “l’interprétabilité” physique de la solution. Or plusieurs auteurs ont montré récemment que le principe de validation croisée a tendance à fournir des modèles trop complexes (qui ont néanmoins de bonnes qualités prédictives). Plusieurs remèdes sont actuellement étudiés. D. Girard a élaboré récemment [497] une méthode pour ce choix, utilisant l’estimation de l’incertitude intrinsèque de la fonction GCV (estimation obtenue via la GCV randomisée [498]). Les premières expériences numériques réalisées avec l’équipe de F. de Crecy au CEA sont très encourageantes (un rapport CEA 1995 décrit la version 4 du logiciel PLAQUE où cette méthodologie ANOVA est opérationnelle).

### 3.1.8 Filtrage de Kalman

Une des approches possibles pour le problème de l’assimilation de données dans les modèles numériques, et plus particulièrement en météorologie ou en océanographie, consiste à utiliser des méthodes de type filtrage. Dans cette approche stochastique, 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. Le caractère non linéaire des équations de dynamique dans les applications qui nous intéressent 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. Cependant, vu la dimension de l'état du système qui est souvent très grande, le filtre KBE usuel conduit a priori à des calculs prohibitifs. De plus, la grande taille de la matrice de covariance des erreurs de dynamique du modèle pose le problème de sa spécification d'une manière adéquate.

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 terme d'appliquer la méthode sur des données réelles. A cette fin, nous avons proposé un filtre de type Kalman étendu basé sur l'utilisation d'une matrice de covariance des erreurs singulière et de rang faible. Ce filtre opère selon le principe de ne pas faire de corrections dans les directions d'atténuation naturelle des erreurs. Les corrections sont effectuées uniquement dans des directions appartenant à un sous-espace vectoriel. Celui-ci est construit au départ par la méthode de fonctions orthogonales empiriques (EOF), mais évolue par la suite selon le modèle. Le filtre est baptisé SEEK (Singular Evolutive Extended Kalman) [500] et a été expérimenté avec succès par Gourdeau, Verron et Pham pour l'assimilation des données altimétriques dans un cadre réaliste d'un modèle aux équations primitives pour l'océan Pacifique tropical [494], [493]. De plus, une version améliorée et baptisée filtre SEIK (Singular Evolutive Interpolated Kalman) a également été proposée [491],[501]. Une étude de faisabilité basée sur un modèle quasi-géostrophique de taille réduite a montré sa bonne performance.

## 3.2 Identification et optimisation en physique

*Participants* : Anne Bagnérés, Pierre Baras, Emmanuel Blanchard, Jacques Blum, Christophe Bonjour, Stéphane Bouchereau, Stéphane Despreaux, El Houssein Khannous, Mathias Marguliès, Patrick Witomski

*Mots-clés* : calcul parallèle, capillarité, contrôle optimal, cristallogénèse, électromagnétisme, frontière libre, fusion nucléaire, micromagnétisme, optimisation de formes, plasma, problème inverse.

Les domaines applicatifs sont la physique des plasmas (pour la fusion nucléaire), le micromagnétisme (pour les têtes de lecture magnétiques), la cristallogénèse (procédé Bridgman de fabrication de cristaux) et la capillarité. Dans chacun de ces thèmes, une optimisation est faite, que ce soit pour identifier une quantité physique non connue, pour minimiser une énergie ou pour optimiser une forme ou une frontière libre.

### 3.2.1 Physique des plasmas

#### Identification de sources non linéaires dans un plasma de fusion

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  $\Psi$  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  $1/r \partial\Psi/\partial r$ .

De nombreux problèmes ouverts demeurent, comme le problème mathématique de l'identifiabilité de  $f_1$  et  $f_2$  à partir des mesures, et leur étude fait l'objet de la thèse d'Emmanuel Blanchard. Nous nous intéressons au cas cylindrique où l'équation (1) devient  $-\Delta\Psi = f(\Psi)$ , l'identifiabilité de  $f$  à partir de la condition de Neumann est un problème ouvert dans le cas général. Des études mathématiques et numériques ont été effectuées pour améliorer la compréhension de ce problème. Le problème est formulé par 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. La source  $f$  est identifiée par décomposition dans une base de  $B$ -splines cubiques. Un algorithme de choix automatique du paramètre de régularisation est développé, à l'aide des techniques de validation croisée, qui s'avèrent cependant assez coûteuses dans la pratique. À l'aide d'un changement de base par rapport à une norme dérivée de la norme  $H^2$ , l'identification peut être réalisée de façon satisfaisante dans une base d'ondelettes à support compact de I. Daubechies, sans terme de régularisation dans la fonctionnelle à minimiser [476].

### Identification et contrôle optimal de l'équilibre du plasma dans un Tokamak

Il s'agit d'identifier et 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 [460].

### 3.2.2 Problèmes d'optimisation en micromagnétisme

- i) La simulation de dispositif.

E. H. Khannous a soutenu sa thèse sur la simulation numérique des structures magnétiques dans les matériaux ferromagnétiques le 25 octobre [455]. Celle-ci portait sur la simulation du mouvement de parois et de lignes de Bloch par une approche simplifiée bidimensionnelle. Le problème initial est donné par l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) et est tridimensionnel. La paroi est supposée être une courbe qui se déplace sous l'effet d'un champ externe.

Dans un premier temps, il a résolu numériquement le modèle de Slonczewski. Il a formulé le calcul du champ démagnétisant dans le cas d'une paroi sans structure. Pour cela, il a fait une étude locale des singularités du champ au niveau de la paroi et a proposé une formule de quadrature pour l'approcher. L'étude a été ensuite généralisée au cas d'une paroi avec structures. La discrétisation du modèle de Slonczewski l'a conduit à étudier, entre autres, l'évolution d'une courbe sous l'influence de sa courbure. Un schéma semi-implicite a été proposé et une méthode d'approximation de la courbure pour une courbe définie par un nombre fini de points, analysée. Il a également développé un algorithme pour la résolution d'une équation aux dérivées partielles posée sur une courbe en mouvement.

Dans un second temps, il a proposé un modèle simplifié qui est, comme pour le modèle de Slonczewski, issu des équations de LLG. Celui-ci est donné par deux équations couplant la vitesse normale d'une courbe (centre de la paroi) et l'angle azimutal. Contrairement à Slonczewski, il a tenu compte des interactions entre les lignes de Bloch.

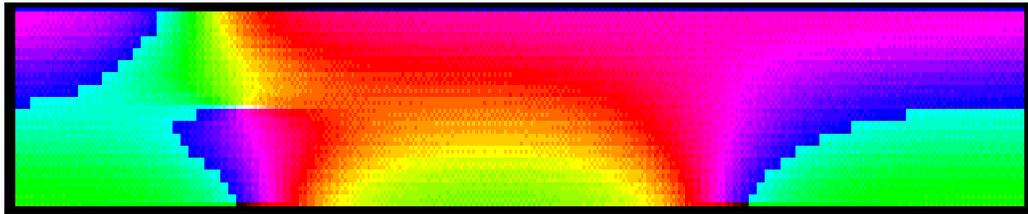
Il a terminé son travail par la validation des différentes discrétisations et approximations et a obtenu des résultats de la physique: domaines en labyrinthes, translation d'une bulle, annihilation de deux lignes déroulantes, déplacement de deux lignes enroulantes.

ii) Le développement d'un code parallèle résolvant l'équation de LLG.

A. Bagnérés continue son travail de développement et de validation d'un code 3D de simulation du déplacement d'une paroi contenant une chaîne de lignes de Bloch dans une portion parallélépipédique de matériau ferromagnétique. Ce code est implémenté sur machine parallèle [499].

Pour l'instant, la structure est supposée périodique suivant les deux directions du plan de la plaque. Un travail pour supprimer l'hypothèse de périodicité suivant une ou les deux directions est en cours. Il a fait l'objet d'un stage d'IUP [504]. Le calcul d'un champ, le champ démagnétisant, est à revoir complètement. On utilise, cette fois, sa formulation en produit de convolution que l'on calcule dans le domaine de Fourier. Les effets dus à la périodicité sont neutralisés en ajoutant une zone où le signal est mis à zéro et par troncature du noyau.

D'autre part, elle étudie la possibilité d'obtenir des états stationnaires à partir des équations de la dynamique. Il semble qu'un phénomène d'oscillation amortie d'une fréquence très longue rende le calcul difficile.



*Paroi magnétique contenant un point de Bloch (à gauche) et une ligne de Bloch (à droite). Ce résultat a été obtenu par un calcul sur un maillage régulier de  $128 \times 128 \times 16$  noeuds, sur calculateur massivement parallèle Paragon.*

iii) Études sur le problème de minimisation de l'énergie.

C. Bonjour a soutenu sa thèse le 30 octobre [454]. Cette thèse portait sur l'inversion de systèmes linéaires pour la simulation des matériaux ferromagnétiques et l'étude mathématique des singularités d'une configuration d'aimantation.

Une configuration d'aimantation dans un matériau ferromagnétique est un minimum d'une énergie composée de quatre termes : les énergies d'échange, d'anisotropie, démagnétisante et de Zeemann. De plus, l'aimantation est de norme constante. Il s'agit d'un problème de minimisation d'une fonctionnelle sous contrainte non linéaire. Le terme d'énergie démagnétisante est non local, ce qui introduit des difficultés tant du point de vue théorique que numérique.

Dans un premier temps, il a développé deux codes de résolution de systèmes linéaires provenant du problème de minimisation pour le LETI-CEA. Il a utilisé une méthode de type gradient conjugué pré-conditionné et une méthode d'expansion couplée à la première méthode.

Dans un second temps, il a démontré que les singularités d'une configuration d'aimantation sont en nombre fini à l'intérieur du matériau. Il a utilisé, pour cela, la théorie introduite par Schœn et Uhlenbeck pour les fonctions minimisant l'énergie de Dirichlet sur la sphère unité. Il a adapté cette théorie à l'énergie du micromagnétisme. Il a tenu compte, en particulier, du caractère non local de l'énergie démagnétisante.

### 3.2.3 Contrôle d'interfaces

#### Optimisation en cristallogénèse

M. Marguliès a écrit un modèle et mis au point un logiciel pour aider au contrôle 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 du procédé : la vitesse de tirage, l'orientation des réflecteurs

pour les échanges de chaleur par rayonnement. À l'instant initial, le matériau doit être fondu de telle façon que le germe soit juste à la température de fusion. À 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 doit rester stable. Après avoir fait une étude fine de la modélisation du processus, M. Marguliès a écrit le problème de contrôle. La variable d'état est l'enthalpie du système. Le procédé est régi par une EDP non linéaire (Stefan avec changement de phase et conditions de flux non linéaire sur la frontière). Ce problème non linéaire est traité avec les méthodes développées par E. Magenes, C. Verdi et A. Visintin. La recherche des paramètres optimaux est un problème d'optimisation non convexe avec contraintes non linéaires. M. Marguliès étudie la résolution du problème par pénalisation et également par les multiplicateurs de Lagrange. Il utilise le calcul de l'adjoint adapté à la méthode de résolution choisie pour le problème direct. Sa thèse a été soutenue en octobre 96 [456]. Les résultats font apparaître la prédominance des paramètres de contrôle du rayonnement et la nécessité d'affiner le modèle en prenant en compte la thermique dans le creuset.

### **Problème de la détermination d'une forme optimale en cristallogénèse**

C'est le sujet de thèse de S. Despreaux débutée en octobre 1995. Les méthodes classiques de cristallogénèse à partir d'un bain liquide ne produisent en général que des monocristaux de forme cylindrique. La réalisation de géométries complexes nécessite la mise en œuvre *a posteriori* d'étapes d'usinages délicats. Une alternative est la technique de préformage du cristal. Elle est basée sur l'utilisation des forces capillaires. Le matériau est d'abord fondu dans un creuset placé à l'intérieur d'un four. On réalise ensuite un ménisque liquide qui s'appuie sur une filière (frontière extérieure) et sur le cristal (frontière intérieure) qui se forme à partir d'un germe préorienté. Le problème est de savoir si l'on peut déterminer une forme de filière qui assure avec le cristal un contact liquide-solide à hauteur constante.

Cela nécessite évidemment de savoir résoudre le problème direct de la détermination de la forme du ménisque à frontières données. Il faut résoudre l'équation de la capillarité (elliptique non linéaire) avec des conditions aux limites de type Dirichlet sur la filière et Neumann non linéaire sur le cristal. S. Despreaux a obtenu des résultats d'existence dans la lignée des travaux de C. Gerhardt. Il étudie maintenant le développement de méthodes numériques pour calculer une forme optimale de filière. Une étude numérique préliminaire avait été réalisée par F. Babik dans son projet d'ingénieur à l'ENSIMAG [470].

### **Problèmes autour du phénomène de capillarité**

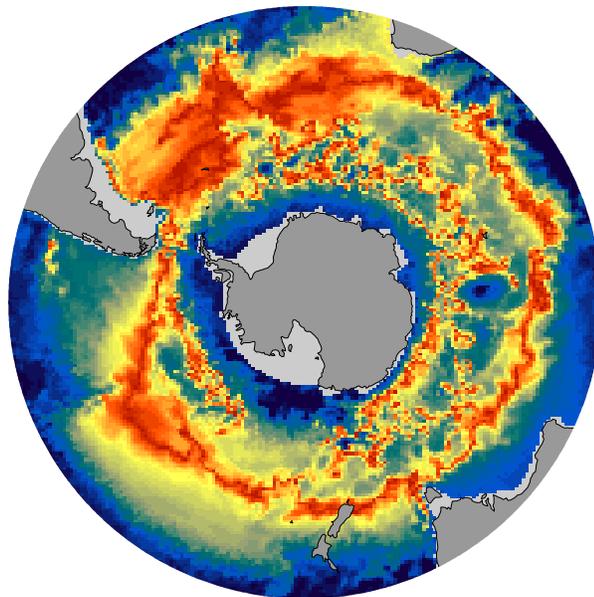
S. Bouchereau travaille sur la modélisation et la simulation numérique de l'évolution d'un fluide sous l'effet conjugué des forces de tension superficielle et d'un champ électrique [468]. Une goutte de liquide est posée sur un support conducteur. En l'absence de champ électrique la forme de l'interface résulte de l'équilibre entre les forces de tension superficielle et de gravitation. Lorsque l'on met la goutte sous une tension  $V$  que l'on fait croître, on observe une déformation de la surface libre. Il s'agit de calculer cette déformation. S. Bouchereau a tout d'abord envisagé le cas axisymétrique, ce qui est raisonnable pour des valeurs du potentiel entre 0 et 600 volts. Il a écrit un code de calcul par éléments finis pour la résolution du problème direct et une méthode de type cheminement avec pour paramètre  $V$ . Les résultats peuvent être comparés pour des petites valeurs du potentiel avec ceux obtenus par une approximation condensateur plan habituellement faite par les physiciens. Cependant on constate les limites de la méthode numérique lorsque l'angle de contact entre la goutte et le substrat devient très faible. Le calcul du potentiel est un problème de transmission dans un ouvert à coin qui devient singulier. Pour aller au delà des 600 volts il était donc nécessaire de passer en 3-D et de considérer les singularités qui apparaissent, portées par la frontière. S. Bouchereau a mis au point une méthode de calcul par éléments frontières et intégrales singulières. Son travail de thèse est actuellement interrompu par son service national (16 mois).

### 3.3 Méthodes numériques performantes pour l'environnement

*Participants* : Eric Blayo, Jacques Blum, Sylvain Carme, Mohamed Ghemires, Alain Le Breton, François-Xavier Le Dimet, Hans-Emmanuel Ngodock, Dinh Tuan Pham, Marie-Christine Roubaud, Jacques Verron

*Mots-clés* : assimilation de données, calcul parallèle, contrôle optimal, décomposition de domaine, filtrage, hydrologie, météorologie, océanographie, prédictibilité, prévision, problème inverse.

Depuis les années 60, la modélisation numérique est utilisée en météorologie en vue de la prévision. Avec les progrès de la physique des modèles et le développement du potentiel de calcul, les avancées réalisées ont été très importantes. Dans la chaîne de la prévision numérique, le problème de l'assimilation de données (c'est-à-dire comment intégrer les données d'observation dans les modèles) est devenu un point crucial tant du point de vue de la nécessité de mettre en œuvre des méthodes performantes que de celui du coût de calcul. Dans le domaine météorologique les méthodes variationnelles semblent devoir s'imposer pour le futur dans la plupart des centres importants : Météo-France, Centre Européen à Reading, NCEP à Washington. Dans les autres disciplines de la géophysique, la modélisation numérique a été jusqu'alors principalement utilisée en vue de la compréhension des phénomènes. Il y a maintenant une orientation plus forte vers la prévision, comme par exemple en océanographie où un projet opérationnel de prévision (Mercator) se met en place, supporté par de nouvelles observations satellitaires (Topex-Poseidon). Le problème d'assimilation de données se pose donc maintenant dans ces disciplines avec des spécificités nouvelles. Il est clair qu'il y a là source d'importantes études méthodologiques et algorithmiques en raison de la difficulté des problèmes rencontrés (non-linéarité et très grandes dimensions). Le problème sera abordé à la fois par des méthodes variationnelles et par des méthodes de filtrage, le but final étant de comparer l'efficacité de ces deux approches.



*Vue instantanée de la circulation océanique en surface dans la couronne circumpolaire antarctique (calculs effectués sur CRAY T3D)*

### 3.3.1 Modélisation des circulations océaniques

La modélisation des circulations océaniques dans un contexte réaliste pose de nombreux problèmes spécifiques. En effet, la complexité de l'environnement réel (irrégularité des côtes, de la bathymétrie, variabilité des forçages atmosphériques, etc.) met à jour des difficultés dans la représentation des phénomènes dynamiques, qui sont absentes des simulations en configuration académique.

Ainsi, J. Verron et E. Blayo avaient déjà abordé le problème, encore très ouvert, de la représentation des phénomènes de séparation de la côte des grands courants de bord Ouest, tels que le *Gulf Stream*. En adaptant la théorie analytique de couche limite de Munk, ils avaient développé une nouvelle formulation numérique de la condition de non-glissement qui, comparée à de nombreuses autres, est apparue comme menant à une meilleure représentation du détachement du jet [467].

Ce travail a été poursuivi cette année par une étude sur les schémas numériques à utiliser au voisinage de la côte de façon à mieux prendre en compte la forme réelle de celle-ci, même sur un maillage régulier de type différences finies. On a ainsi montré que l'erreur sur la solution numérique pouvait être considérablement réduite par une modification de ces schémas près des côtes.

Par ailleurs, les dimensions des problèmes océanographiques réels sont telles qu'elles impliquent l'utilisation d'algorithmes adaptés aux architectures des supercalculateurs. Le développement actuel des calculateurs massivement parallèles amène logiquement à adapter les modèles à ces nouvelles plates-formes. Un travail de comparaison de méthodes de décomposition de domaine appliquées à la résolution d'équations d'Helmholtz rencontrées dans les modèles océaniques avait été précédemment par E. Blayo et L. Debreu. Une version portable MPI du modèle quasigéostrophique (QG) réaliste de circulation océanique du LEGI a été réalisée cette année. Puis, elle a été appliquée en collaboration avec le LEGI à la modélisation du courant circumpolaire antarctique, les calculs étant effectués sur le Cray T3D du Centre Grenoblois de Calcul Vectoriel (CGCV-CEA) [474].

### 3.3.2 Assimilation de données en océanographie

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 :**

Dans ce travail, l'océan est simulé 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. Un effort tout particulier a porté sur le choix de la norme de l'espace de contrôle. 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. Une étude au second ordre de la fonctionnelle permet d'estimer l'erreur de l'identification et de quantifier la propagation

des informations de surface en profondeur. Ce travail a fait l'objet de la thèse de B. Luong soutenue en juillet 1995 et de plusieurs articles soumis à des journaux.

#### **Techniques de filtrage stochastique :**

Une autre approche du problème consiste à utiliser les méthodes de type filtrage. Comme indiqué au §3.1.8, un nouveau filtre (SEEK) a été développé dans le but de réduire les coûts de calcul très importants associés aux filtres classiques de type Kalman.

Dans ce cadre, S. Carne prépare une thèse de doctorat sur le développement et l'utilisation de méthodes de filtrage de rang réduit pour l'assimilation de données dans les modèles océaniques. L'objectif à court terme est de réaliser un logiciel opérationnel d'assimilation de données altimétriques satellitaires en Atlantique Nord, dans un modèle QG et utilisant le filtre mentionné plus haut. Cette réalisation est plus difficile que celle de Verron, Gourdeau et Pham [494] mentionnée au §3.1.8, car les modèles océaniques aux latitudes moyennes (par exemple en Atlantique Nord) présentent des non linéarités plus fortes. De plus on se sert ici de données réelles provenant du satellite. À plus long terme, nous envisageons d'implanter notre filtre dans des modèles aux équations primitives, à la physique plus complète.

### **3.3.3 Couplage d'un modèle météorologique et d'un modèle chimique : étude d'algorithmes numériques performants**

La prévision de l'évolution de la composition chimique de l'atmosphère nécessite :

- un modèle décrivant la dynamique de l'atmosphère ;
- un modèle de diffusion des constituants chimiques ;
- un modèle de cinétique chimique décrivant les interactions entre polluants ;
- des observations des champs météorologiques et des champs de concentration des composants.

La prévision ne pourra se réaliser que si l'on associe toutes ces informations. Une des difficultés essentielles provient du volume important de calcul nécessaire pour mettre en œuvre ces techniques. Notre premier travail était de tester et d'adapter un certain nombre d'algorithmes susceptibles d'être effectivement mis en œuvre. Eu égard à l'importance des problèmes de calcul et à la nature du problème, les recours aux techniques de calcul parallèle sont indispensables.

Pour la partie convection et diffusion, nous avons utilisé une technique directe, une décomposition de domaine et nous avons présenté une méthode hybride basée sur la combinaison des deux premières. Pour la parallélisation de la cinétique chimique, nous avons utilisé un schéma maître-esclaves. Les performances obtenues sur Cray T3D montrent ces limites quand le nombre de processeurs augmente. Nous utilisons actuellement une répartition de charge pour essayer d'augmenter l'efficacité. Deux alternatives restent à traiter : décomposition de la chimie selon les vitesses de réactions et décomposition avec interface [480].

### **3.3.4 Application de l'analyse de sensibilité à l'optimisation d'un système d'observation de l'océan**

La prévision numérique de l'évolution de l'océan dépend des observations qui sont effectuées, et donc du système d'observation. Nous nous intéressons aux observations d'altimétrie satellitaires. 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 par rapport aux observations. Traditionnellement, l'évaluation de la sensibilité se fait en utilisant l'adjoint du modèle. Mais 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. On a ainsi montré comment calculer la sensibilité de la condition initiale optimale (variable de contrôle), ainsi que celle d'une réponse fonctionnelle sous forme intégrale par rapport aux observations [486],[488],[489].

Nous nous plaçons ici dans le cadre d'un modèle déterministe d'océan (modèle QG de l'IMG, dont la version adjointe a été développée par B. Luong) et supposons que le modèle mathématique représente

parfaitement l'océan. Des hypothèses moins restrictives pourront être envisagées par la suite si les méthodes mises au point sont satisfaisantes. Les outils mis en œuvre sont les outils classiques de l'assimilation variationnelle : modèle adjoint et estimation du hessien, et qui demande des moyens de calcul considérables.

Des expériences d'assimilation variationnelle de données altimétriques simulées ont d'ores et déjà été menées en 1994 et 1995, et une première analyse de sensibilité des champs reconstitués par rapport aux paramètres d'observation est en cours [457],[483].

On cherche aussi une évaluation optimale des caractéristiques orbitales des satellites. Elles sont implicitement prises en compte au cours de l'assimilation par la projection de la solution du modèle sur les observations. Une étude est alors menée sur la sensibilité de la reconstitution des champs par rapport à cet opérateur de projection, le critère de sensibilité utilisé dans cette partie étant le conditionnement du hessien de la fonction-coût à minimiser.

Ce travail (Thèse de H.-E. Ngodock) s'inscrit dans une démarche de prospection et nous a fourni des outils qui peuvent être exploités dans des applications concrètes, notamment sur la sensibilité des quantités diagnostiques de l'écoulement océanique par rapport aux observations. On peut aussi envisager le choix d'autres critères de sensibilité pour l'optimisation de la configuration spatio-temporelle des observations.

### 3.3.5 Identification de coefficients en hydrologie

Les modèles utilisés en hydrologie comportent des paramètres, tels que les coefficients de conductivité hydraulique, qui ne sont pas directement accessibles à la mesure. Les techniques d'identification de type contrôle optimal permettent une estimation de ces grandeurs à partir de ces observations. Un travail d'identification de coefficients a été poursuivi par H.-E. Ngodock et J. Joergensen (étudiant stagiaire de l'université technique du Danemark). Ce travail a été réalisé au Laboratoire des Transferts en Hydrologie et Environnement de l'IMG avec la participation de G. Vachaud et R. Haverkamp dans le cadre du programme européen ECRASE. Par ailleurs les problèmes d'assimilation de données dans des modèles d'écoulement de surface ont été étudiés et mis en œuvre par deux étudiants de l'IUP Mathématiques Appliquées et Industrielles (G. Bourrat et C. Ollier) au laboratoire de Génie de l'Environnement de l'université d'Oklahoma [502].

## 4 Actions industrielles

Notre partenaire industriel privilégié est le CEA (Centre d'Études Nucléaires de Grenoble, Cadarache, CESTA).

*Participants* : Jacques Blum, Didier Girard

Une collaboration déjà ancienne existe avec le Département de Recherche sur la Fusion Contrôlée du Centre d'Études Nucléaires de Cadarache sur les problèmes d'identification et de contrôle en physique des plasmas. J. Blum est d'ailleurs conseiller scientifique du CEA (Cadarache).

Collaboration avec la CISI sur des problèmes de cristallogénèse, qui s'est traduite par le financement d'une thèse (M. Marguliès) et de plusieurs stages.

Collaboration avec le Service de Thermohydraulique des Réacteurs du CEA (Grenoble) et EDF sur les problèmes d'analyse de données expérimentales par modélisation non-paramétrique. D. Girard est conseiller scientifique du CEA pour ces problèmes.

## 5 Actions nationales et internationales

### 5.1 Actions nationales

Interactions avec d'autres projets Inria :

- APACHE : parallélisation d'algorithmes.
- IDENT : décomposition de domaines en contrôle optimal.
- NUMATH : frontières libres, océanographie.
- PROMATH : algorithmes d'optimisation.
- SAFIR : dérivation automatique d'un code adjoint (ODYSSEE).

Collaborations avec d'autres équipes de recherche en France :

- Laboratoire de Météorologie Dynamique de l'ENS (Paris): assimilation de données pour l'environnement.
- Laboratoire d'Aérodynamique de Toulouse : chimie de l'atmosphère.
- Équipe MEOM (Modélisation des Écoulements Océaniques et des Marées) du Laboratoire d'Écoulements Géophysiques et Industriels (Grenoble): océanographie.
- Laboratoire de Transferts en Hydrologie et Environnement (Grenoble): problèmes inverses en hydrologie.
- Département d'études des matériaux, section d'études de la solidification : Centre d'études nucléaires de Grenoble (CENG).
- Institut Laue-Langevin, Institut de Biologie Structurale du CENG et ESRF (Synchrotron): méthodes stochastiques pour les problèmes inverses.

Participation à des Groupements de Recherche (GR) CNRS :

- GR Plasmas chauds de la fusion magnétique.
- 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.

### 5.2 Actions internationales

#### 5.2.1 Europe de l'ouest

F.-X. Le Dimet participe au projet européen ECRASE (modélisation en hydrologie) et au programme *Mathematics and Climate* du Newton Institute, université de Cambridge. Il est membre de l'Educational Board d'ECMI (European Consortium for Mathematics in Industry).

Collaboration de D. Girard avec les Professeurs J.W. Kay et M. Titterton de l'université de Glasgow (séjour invité d'une semaine en juin 1996).

### 5.2.2 Europe de l'est

F.-X. Le Dimet 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.

### 5.2.3 Amérique

Sur le thème PHYSIQUE DES PLASMAS : collaboration avec M. Vogelius (Rutgers University)

Sur le thème MICROMAGNETISME : travail en collaboration avec le Jet Propulsion Laboratory à l'université de Boston (USA).

Sur le thème ENVIRONNEMENT : F.-X. Le Dimet collabore avec M. Navon (Florida State University) et avec l'université d'Oklahoma et avec le NCAR, Boulder, Colorado (Xiaolei Zou) sur des problèmes d'assimilation de données. Il a été invité deux mois au *Super Computer Computations Research Institute* de Florida State University.

Sur le thème TECHNIQUES STOCHASTIQUES : collaboration d'A. Antoniadis avec le professeur R. Carmona (University of California at Irvine (UCI)) et le professeur Mc Keague (université de Floride).

## 6 Diffusion des résultats

### 6.1 Actions d'enseignement

La plupart des membres du projet sont enseignants-chercheurs à l'université Joseph Fourier (les universités Grenoble 2, Lyon 2 et Chambéry sont également représentées au sein du projet).

Il y a un lien très fort avec le DEA de Mathématiques Appliquées de l'université Joseph Fourier et de l'Institut National Polytechnique de Grenoble (Ensimag), car la plupart des membres du projet y donnent des cours, et parce que c'est le vivier de nos étudiants en stage de DEA et en thèse. Parmi les cours enseignés par les membres du projet on peut citer :

- Commande optimale (J. Blum),
- Méthodes de calcul intensif pour les problèmes régis par des EDP (E. Blayo),
- Ondelettes et applications (A. Antoniadis),
- Assimilation de données en géophysique (F.-X. Le Dimet).

### 6.2 Participation à des colloques

Des membres de l'équipe ont participé à des conférences et *workshops* ; on se reportera à la bibliographie pour en avoir la liste.

### 6.3 Conférences invitées, tutoriels, cours, etc.

A. Antoniadis : [469]

E. Blayo : [473]

D. Girard : [481]

F.-X. Le Dimet : [484],[486],[487]

## 6.4 Animations scientifiques

D. Girard est membre du bureau éditorial de *Computational Statistics* depuis 1991.

J. Blum est rédacteur en chef adjoint de la revue électronique ESAIM: COCV (*Control, Optimization and Calculus of Variations*) et co-éditeur des Actes du colloque "Elasticité, visco-élasticité et contrôle optimal" (8<sup>èmes</sup> entretiens Jacques Cartier) dans l'ESAIM Proceedings.

J. Blum et F.-X. Le Dimet sont membres du groupe de travail "problèmes inverses" de l'OFTA (Observatoire Français des Techniques Avancées).

J. Blum est membre du comité de programmes d'IDRIS et du conseil des partenaires du CGCV (Centre Grenoblois de Calcul Vectoriel du CEA).

## 6.5 Diffusion de logiciels

Le logiciel OCEANASS d'assimilation de données d'altimétrie satellitaire, développé par B. Luong, a été mis à la disposition d'Ifremer.

# 7 Publications

## Thèses

[454] C. BONJOUR, *Inversion de systèmes linéaires pour la simulation des matériaux ferromagnétiques. Singularités d'une configuration d'aimantation.*, thèse de doctorat, université Joseph Fourier, octobre 1996.

[455] E. H. KHANNOUS, *Simulation du mouvement de parois et de lignes de Bloch dans les matériaux ferromagnétiques*, thèse de doctorat, université Joseph Fourier, octobre 1996.

[456] M. MARGULIÈS, *Contrôle optimal du procédé de cristallogénèse Bridgman vertical*, thèse de doctorat, université Joseph Fourier, octobre 1996.

[457] H. NGODOCK, *Assimilation de données et analyse de sensibilité: une application à la circulation océanique*, thèse de doctorat, université Joseph Fourier, mars 1996.

## Articles et chapitres de livre

[458] A. ANTONIADIS, «Smoothing noisy data with tapered coiffet series», *Scandinavian Journal of Statistics* 23, 3, 1996, p. 313–330.

[459] E. BLAYO, J. VERRON, J.-M. MOLINES, L. TESTARD, «Monitoring of the Gulf Stream path using Geosat and Topex/Poseidon altimetric data assimilated into a model of ocean circulation», *J. Marine Syst.* 8, 1996, p. 73–89.

[460] J. BLUM, *Identification et contrôle de l'équilibre du plasma dans un tokamak*, J. I. Diaz and A. Galindo eds, *Memorias de la Real Academia de Ciencias, Modelos Matematicos en Fisica de Plasmas*, Tome 30, 1996, p. 23–48.

[461] P. BRASSEUR, E. BLAYO, J. VERRON, «Predictability experiments in the North Atlantic ocean: outcome of a QG model with assimilation of Topex/Poseidon altimeter data», *J. Geophys. Res.* 101, 1996, p. 14161–14174.

[462] I. CHARPENTIER, F. DE VUYST, Y. MADAY, «Méthode de synthèse modale avec une décomposition de domaine par recouvrement», *C. R. Acad. Sci. Paris 322 (Série I)*, 1996, p. 881–888.

[463] I. CHARPENTIER, Y. MADAY, «Contrôlabilité numérique interne exacte pour l'équation d'ondes», *C. R. Acad. Sci. Paris 322 (Série I)*, 1996, p. 779–784.

[464] D. GIRARD, «Comparison of cross-validation, GCV and randomized GCV», *accepté pour publication dans The Annals of Statistics*, 1996.

- [465] D. GIRARD, «Rejoinder to the paper: The fast Monte-Carlo cross-validation and CL procedures: comments, new results and application to image recovery problems (with discussion)», *Computational Statistics* 3, 1996, p. 251–258.
- [466] Y. TRÉMOLET, F.-X. LE DIMET, «Parallel Algorithms for Variational Data Assimilation and Coupling Models», *Parallel Computing* 22, 1996, p. 657–674.
- [467] J. VERRON, E. BLAYO, «The no-slip condition and the Gulf Stream separation problem», *J. Phys. Oceanogr.* 26, 1996, p. 1938–1951.
- [468] P. WITOMSKI, «Approximation of the capillarity problem by an augmented lagrangian method», *Numerical Algorithms* 12, 1996, p. 321–346.

## Communications à des congrès, colloques, etc.

- [469] A. ANTONIADIS, «Détection de discontinuités dans un signal bruité», in : *CIRM, "Fonctions Splines et Ondelettes en Statistique"*, Montreal, Canada, 1996.
- [470] F. BABIK, P. WITOMSKI, T. DUFFAR, «Determination of the geometry of the die in shaped crystal growth processes by an optimal design method», in : *Proceedings of the Second International Workshop on Modelling in Crystal Growth*, Durbuy, Belgique, 1996.
- [471] J. BALLABRERA, J. VERRON, B. LUONG, J. BLUM, «Variational assimilation of altimeter data into a non-linear ocean model: the effect of spatial under-sampling», in : *Journées du GDR méthodes variationnelles en météorologie et océanographie*, La Londe les Maures, 1996.
- [472] E. BLAYO, T. MAILLY, J. VERRON, J.-M. MOLINES, «Complementarity of ERS-1 and Topex/Poseidon altimeter data: assimilation into a circulation model of the North Atlantic», in : *Proceedings of the Ocean Sciences Meeting, congrès de l'American Geophysical Union*, San Diego, USA, 1996.
- [473] E. BLAYO, «Assimilation of multi-satellite datasets into ocean models», in : *Topex/Poseidon Science Working Team Workshop*, Southampton, UK, 1996.
- [474] E. BLAYO, «Modélisation numérique des circulations océaniques et calcul parallèle», in : *Colloque du CEA "Expériences et perspectives en calcul parallèle"*, Grenoble, 1996.
- [475] E. BLAYO, «Vers des modèles réalistes de la circulation générale océanique», in : *Journées du PIR Environnement Vie Société*, Paris, 1996.
- [476] J. BLUM, H. BUVAT, «Identification of the Current Density Profile in a Tokamak», in : *Proceedings of the ICIAM Meeting, Issue 2*, p. 161–164, Hamburg, 1996.
- [477] A. BOUNAÏM, «A lagrangian approach to a domain decomposition method for an optimal control problem», in : *Ninth international conference on domain decomposition methods*, Ullensvang, Norvège, 1996.
- [478] S. CARME, D. PHAM, E. BLAYO, J. VERRON, «Application du filtre de Kalman de rang réduit à un modèle QG de l'Atlantique Nord», in : *Journées du GDR méthodes variationnelles en météorologie et océanographie*, La Londe les Maures, 1996.
- [479] I. CHARPENTIER, F. DE VUYST, Y. MADAY, «Component Mode Synthesis Methods by Subdomain Overlapping for Solving Eigenvalue Problems of Self-adjoint Operators», in : *Eccomas*, Paris, 1996.
- [480] M. GHEMIRE, F.-X. LE DIMET, «Discrete Adjoint Model and Atmospheric Chemistry Simulation», in : *3rd Workshop on Modelling of Chemical Reaction Systems*, Heidelberg, 1996.
- [481] D. GIRARD, «Smoothing parameter selection: a simple consistent estimate of the accuracy of cross-validated estimates», in : *Séminaire du département de Statistiques de l'université de Glasgow*, Glasgow, 1996.
- [482] L. GOURDEAU, J. VERRON, D. PHAM, A. BUSALACCHI, «A reduced-rank extended Kalman filter to assimilate altimeter data in a numerical model of the tropical Pacific.», in : *1996 Western Pacific Geophysics Meeting*, Brisbane, 1996.

- [483] F.-X. LE DIMET, H.-E. NGODOCK, M. NAVON, «Sensitivity Analysis in Variational Data Assimilation», in : *SIAM Meeting on Automatic Differentiation*, Santa-Fe, USA, 1996.
- [484] F.-X. LE DIMET, «Data Assimilation in Meteorology and Oceanography», in : *Chinese Society for Industrial and Applied Mathematics*, Canton, Chine, 1995.
- [485] F.-X. LE DIMET, «Assimilation de Données : une approche globale de la modélisation», in : *Journées du PIR Environnement Vie Société*, Paris, 1996.
- [486] F.-X. LE DIMET, «Information du second ordre et assimilation de données», in : *Journées du GDR méthodes variationnelles en météorologie et océanographie*, La Londe les Maures, 1996.
- [487] F.-X. LE DIMET, «Second Order Analysis in Variational Data Assimilation», in : *Mathematics for the Atmosphere and the Ocean*, Newton Institute for Mathematical Sciences, Cambridge, 1996.
- [488] F.-X. LE DIMET, «Second Order Information in Variational Data Assimilation», in : *Conference of the Lyapunov Center*, Moscou, 1996.
- [489] F.-X. LE DIMET, «Sensitivity Analysis and Optimal Control», in : *XVIIIth Symposium on Sensitivity and Optimization*, George Washington University, Washington, USA, 1996.
- [490] F.-X. LE DIMET, «Sensitivity and Predictability studies in the geosciences», in : *Proceedings of the ICIAM Meeting*, Hamburg, 1996.
- [491] D. PHAM, J. VERRON, «Filtre de Kalman singulier évolutif étendu et interpolé (SEEK et SEIK) pour l'assimilation de données océaniques», in : *Journées du GDR méthodes variationnelles en météorologie et océanographie*, La Londe les Maures, 1996.
- [492] C. TATHY, F.-X. LE DIMET, «Méthodes de contrôle pour l'assimilation de données», in : *Conférence CARI*, Niamey, 1996.
- [493] J. VERRON, L. GOURDEAU, D. PHAM, R. MURTUGUDDE, A. BUSALACCHI, «Assimilation of Topex/Poseidon altimeter data with a new Kalman filter in a GCM of the tropical Pacific», in : *Topex/Poseidon Science Working Team Workshop*, Southampton, UK, 1996.
- [494] J. VERRON, L. GOURDEAU, D. PHAM, «Un filtre de Kalman étendu de rang réduit appliqué à l'assimilation des données altimétriques dans un modèle de l'océan Pacifique tropical», in : *Journées du GDR méthodes variationnelles en météorologie et océanographie*, La Londe les Maures, 1996.

## Rapports de recherche et publications internes

- [495] A. ANTONIADIS, I. GIJBELS, G. GREGOIRE, «Model Selection using wavelet decomposition and applications», *rapport de recherche*, Institute of Statistics, Louvain-la-neuve, 1996, (discussion paper 9508, à paraître en 1996 dans *Biometrika*).
- [496] A. ANTONIADIS, D. PHAM, «Wavelet regression for random or irregular design», *rapport de recherche n°148*, LMC-IMAG, octobre 1995.
- [497] D. GIRARD, «Les "interaction-splines" (ou splines ANOVA) en régression non-paramétrique multivariable : généralisation de modèles additifs, qualités prédictives, choix des interactions entre variables explicatives», *rapport de recherche n°166*, LMC-IMAG, octobre 1996.
- [498] D. GIRARD, «Smoothing parameter selection: a simple consistent estimate of the accuracy of cross-validatory estimates», *rapport de recherche n°167*, LMC-IMAG, 1996.
- [499] R. KATTI, G. PATTERSON, J. RILEY, J. PEREDO, A. BAGNÉRÉS, «Supercomputer simulation of magnetic domain wall structure: vertical Bloch lines and vertical Bloch line data storage chips», *rapport de recherche*, Annual Report of the Concurrent Supercomputing Consortium, 1995.
- [500] D. PHAM, J. VERRON, M.-C. ROUBAUD, «A singular evolutive extended Kalman filter for data assimilation in oceanography», *rapport de recherche n°162*, LMC-IMAG, septembre 1996.
- [501] D. PHAM, «A singular evolutive interpolated Kalman filter for data assimilation in oceanography», *rapport de recherche n°163*, LMC-IMAG, septembre 1996.

## Divers

- [502] G. BOURRAT, C. OLLIER, «Identification of coefficients in a surface water model», septembre 1996, mémoire de stage d'IUP, Grenoble, réalisé au lab. of Environmental Engineering, University of Oklahoma.
- [503] F. HANIFI, P. POETE, «Using ODYSSEE for the derivation of the adjoint of a meteorological model», septembre 1996, mémoire de stage d'IUP, Grenoble, réalisé au Center for Advanced Prediction System, University of Oklahoma.
- [504] M. VALENTIN, «Etude d'algorithmes pour le micromagnétisme», septembre 1996, mémoire de stage d'IUP, Grenoble.

## 8 Abstract

A large number of domains of physics and mechanics 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 plasma in a Tokamak.
- Micromagnetism.
- Optimization of a crystallization oven.
- High performance numerical methods for environment.
- Data assimilation in meteorology and oceanography.

