

Projet NUMATH

*Analyse Mathématique & Traitement Numérique de Modèles
Non linéaires*

Nancy

THÈME 4B



*R*apport
d'Activité

1999

Table des matières

1	Composition de l'équipe	3
2	Présentation et objectifs généraux	4
3	Fondements scientifiques	5
3.1	Méthodes de perturbations et multi-échelles	5
3.2	Optimisation de formes	6
3.3	Contrôle et Stabilisation	7
4	Domaines d'applications	8
4.1	Panorama	8
4.2	Problèmes Non Linéaires en électromagnétisme	8
4.2.1	Applications aux métaux liquides	8
4.2.2	Applications aux plasmas	8
4.3	Prédicibilité et simulation numérique pour les modèles océaniques	9
4.4	Chimie moléculaire	9
5	Logiciels	10
5.1	Bibliothèque Para++	10
6	Résultats nouveaux	11
6.1	Problèmes Non Linéaires en électromagnétisme	11
6.1.1	Dérivation mathématique du modèle rayon de Larmor fini et développement asymptotique de l'équation de Vlasov dans un champ magnétique fort	11
6.1.2	Développement et parallélisation de la méthode semi-Lagrangienne pour l'équation de Vlasov	11
6.1.3	Étude des méthodes Euleriennes pour l'équation de Vlasov	11
6.1.4	Méthode de correction hyperbolique pour les équations de Maxwell	12
6.1.5	Simulation numérique de faisceaux de particules	12
6.1.6	Extraction de particules d'un plasma	12
6.2	Contrôle et identification de formes	13
6.2.1	Aspects théoriques généraux.	13
6.2.2	Problèmes à frontière libre.	14
6.2.3	Identification d'inclusions et de fissures	14
6.2.4	Calcul numérique de formes	14
6.3	Stabilisation de structures flexibles	15
6.3.1	Stabilisation d'un système hybride	15
6.3.2	Analyse spectrale	15
6.3.3	Contrôlabilité exacte et applications	15
6.3.4	Analyse et contrôle des interactions fluide-structure	16
6.4	Prédicibilité et simulation numérique pour les modèles océaniques.	17
6.4.1	Orbites périodiques instables et attracteur.	17

6.4.2	Étude de la structure de l'attracteur du modèle barotrope de l'océan. . .	17
6.4.3	Quelques questions sur le modèle Quasi-Géostrophique multicouche. . .	18
6.4.4	Modélisation mathématique de la circulation thermohaline de l'océan mondial.	18
6.5	Chimie moléculaire.	18
6.5.1	Potentiel électrostatique	19
6.5.2	Dynamique moléculaire	19
6.5.3	Couplage de méthodes	20
7	Contrats industriels (nationaux, européens et internationaux)	20
7.1	TEMAS	20
7.2	CEA	20
8	Actions régionales, nationales et internationales	21
8.1	Actions régionales	21
8.1.1	Centre Charles Hermite	21
8.1.2	Autres	21
8.2	Actions nationales	21
8.2.1	Action de Recherche Coopérative SIMBIO	21
8.2.2	Action de Recherche Coopérative OPINel	22
8.2.3	Groupe de Mission Mercator	22
8.2.4	Participations à des GDR	22
8.2.5	Responsabilités nationales et locales assurées par les membres du projet :	22
8.3	Actions européennes	22
8.3.1	Projet PROCOPE	22
8.3.2	Projet PROCOPE numéro 98158	22
8.3.3	Projet Polonium	23
8.4	Relations internationales	23
8.4.1	Lawrence Berkeley National Laboratory	23
8.4.2	Projet Lyapounov	23
8.5	Visites et invitations de chercheurs	23
9	Diffusion de résultats	23
9.1	Animation de la Communauté scientifique	23
9.2	Participation à des colloques, séminaires, invitations	24
9.2.1	Congrès internationaux	24
9.2.2	Colloques et workshops	24
9.2.3	Invitation à des séminaires et cours	24
9.3	Enseignement	25
10	Bibliographie	25

Numath est un projet commun à l'INRIA, au CNRS et à l'université Henri Poincaré, via l'Institut Elie Cartan de Nancy¹ (UMR 7502 CNRS-INRIA-UHP).

1 Composition de l'équipe

Responsable scientifique

Olivier Coulaud [Directeur de Recherche Inria, depuis octobre]

Responsable permanent

Francis Conrad [Professeur (UHP)²]

Assistante de projet

Céline Cordier [CDD INRIA]

Personnel INRIA

Evgueni Kazantsev [Chargé de Recherche]

Personnel CNRS

Eric Sonnendrücker [Chargé de Recherche]

Personnel UHP

Christine Kazantsev [Maître de Conférences]

Bruno Pinçon [Maître de Conférences ESIAL³]

Jean-Rodolphe Roche [Maître de Conférences]

Jan Sokolowski [Professeur]

Marius Tucsnak [Professeur]

Ingénieurs experts

Rachid Krenenou [INRIA]

Chercheurs post-doctorants

Pierre-Eric Bernard [Post Doctorant INRIA, jusqu'en février]

Mohammed Hayouni

Arian Novruzi [ATER jusqu' en août]

Chercheurs doctorants

Antoine Chapelon [Allocataire, oniteur]

Francis Filbet [Allocataire INRIA]

Gilles Frémiot [Allocataire, moniteur UHP]

Geoff O'Dowd [Professeur agrégé]

Fatima Zahra Saouri [ATER ULP⁴, de septembre 98 à août 99]

1. IECN

2. Université Henri Poincaré

3. Ecole Supérieure d'Informatique et Applications de Lorraine

4. Université Louis Pasteur

Laurence Viry [Ingénieur UHP]

Collaborateurs extérieurs

Philippe Laurençot [Chargé de Recherche CNRS-IECN⁵]

Didier Schmitt [Maître de Conférences UHP-IECN]

Pierre Bertrand [Professeur UHP-LPMI⁶]

Alain Ghizzo [Professeur UHP-LPMI]

Bernard Maigret [Professeur UHP-LCTN⁷]

Stagiaires

Nazha Bouchia [juillet-août]

Raphaël Christien [juillet-août]

Thomas Cohu [juillet-septembre]

Léo Agelas [juillet-septembre]

2 Présentation et objectifs généraux

Numath est un projet commun à l'INRIA, au CNRS et à l'Université Henri Poincaré, via l'Institut Elie Cartan de Nancy (UMR 7502 CNRS-INRIA-UHP).

L'activité du projet relève de l'utilisation des mathématiques pour la résolution de problèmes des sciences de l'ingénieur. Elle est plus particulièrement centrée (sans que ce soit limitatif) sur l'étude des équations aux dérivées partielles non linéaires sous les trois aspects : **analyse mathématique, traitement numérique, modélisation et applications.**

Les recherches effectuées peuvent se situer à divers maillons, à savoir : la modélisation mathématique, l'étude théorique des modèles obtenus, la description d'une méthodologie de résolution, la conception d'algorithmes numériques adéquats et leur implantation effective. Les travaux sont menés avec le double souci de résoudre des problèmes précis, points de départ de la réflexion, et de dégager des méthodes ou de développer des outils à portée plus générale.

Les domaines d'applications peuvent donc être variés. Les questions mathématiques soulevées relèvent quant à elles, des équations ou systèmes d'équations aux dérivées partielles, de leur contrôle et, par extension, des problèmes d'optimisation sous-jacents, ainsi que de leur approximation et résolution.

Les centres d'intérêt plus spécifiques du projet peuvent être classés comme suit :

1. Contrôle et stabilisation : il s'agit de la stabilisation de systèmes vibrants modélisés par des EDP tels que les antennes de satellites, les parties flexibles de robots et d'installations industrielles.
2. Optimisation de formes et problèmes connexes : les applications sous-jacentes sont liées au domaine de la mécanique du solide (identification de fissures, ...).

5. Institut Elie Cartan de Nancy

6. Laboratoire de Physique des Milieux Ionisés, Nancy

7. Laboratoire de Chimie Théorique de Nancy

3. Méthodes numériques et algorithmes parallèles.

L'investissement récent vers les applications de la chimie moléculaire continue à prendre de l'importance dans le projet. Par ailleurs, un effort tout particulier est fait pour participer aux activités de parallélisme du Centre Charles Hermite⁸ (CCH). Ceci se concrétise par l'utilisation intensive du parallélisme sur les thèmes demandeurs de gros calculs (magnétohydrodynamique, turbulence dans les plasmas, optimisation de formes 3-d, modèles en océanographie et météorologie, chimie moléculaire, ...), par la responsabilité de quatre opérations du CCH et dans la participation à une autre opération (plasma).

3 Fondements scientifiques

3.1 Méthodes de perturbations et multi-échelles

Mots clés : couche limite, perturbation singulière.

Participants : Pierre Bertrand, Jean-Pierre Brancher, Olivier Coulaud, Evgueni Kazantsev, Philippe Laurençot, Didier Schmitt, Eric Sonnendrücker, Laurence Viry.

Glossaire :

méthodes multi-échelles méthodes faisant intervenir différentes échelles de temps ou d'espace.

Résumé : *Les applications traitées dans le projet (biologie, chimie, électromagnétisme, océanographie,...) font apparaître des phénomènes avec des échelles multiples en espace ou en temps. Nous analysons ces phénomènes, d'une part pour en déduire des modèles soit plus précis soit plus rapides, d'autre part pour construire des algorithmes plus efficaces.*

Dans de nombreux problèmes traités dans le projet, les phénomènes en jeu apparaissent à différentes échelles d'espace et de temps. Ceci se traduit dans les équations par la présence de petits paramètres, qui induisent des couches limites, des zones de transitions. Dans ces régions, la solution présente des variations brutales, qui sont numériquement difficiles à traiter.

Deux approches peuvent être envisagées pour traiter ces problèmes. La première consiste à écrire un développement de la solution en fonction du paramètre étudié puis à construire formellement le système satisfait par le premier terme du développement. Une des difficultés est de montrer que le système limite ainsi construit est bien la limite du système initial lorsque le paramètre tend vers zéro. La connaissance du comportement de la solution dans les couches limites ou des zones de transitions permet de construire des méthodes de décomposition de domaines particulièrement rapides. La deuxième approche consiste à simuler les phénomènes de plus petites échelles du petit paramètre par une loi plus au moins empirique. Cette approche autorise des discrétisations moins fines et conduit à des temps d'exécution plus rapides.

8. Centre lorrain de compétence en modélisation et calcul à hautes performances

3.2 Optimisation de formes

Participants : Gilles Frémiot, Mohammed Hayouni, Arian Novruzi, Jean Roche, Jan Sokolowski.

Mots clés : optimisation de forme, problème inverse, problème variationnel et à frontière libre, théorie du potentiel, dérivée topologique, équation intégrale, méthode de Newton.

Glossaire :

optimisation de formes optimisation du domaine géométrique pour un système décrit par des équations aux dérivées partielles

Résumé :

Nous sommes intéressés par les problèmes d'optimisation de formes issus d'optimisation de structures en mécanique des solides et des problèmes à frontière libre. Nous étudions les conditions d'optimalité pour les problèmes définis sur des surfaces en dimension 3. D'autre part, on développe des méthodes de type Newton avec des convergences superlinéaires pour traiter les problèmes d'optimisation de formes en trois dimensions.

L'optimisation de formes intervient dans des domaines variés tels que la conception, l'étude de nouveaux matériaux, l'optimisation de pièces sous contraintes (ailes d'avions, moules, ...). Il s'agit de minimiser une fonction coût dépendant de la géométrie du domaine, en général une énergie, sous certaines contraintes. On peut traiter par cette méthode de nombreux problèmes à frontière libre (lévitation haute fréquence, problème de contacts pour les coques, ...). Par rapport aux techniques d'optimisation classique, la difficulté réside dans le fait que la solution est un domaine géométrique (un segment, une surface, un volume). Nous devons adapter les méthodes usuelles (dérivation, point critique, ...) à ce nouveau cadre. Une des premières questions à traiter, après l'existence du point critique, pour les méthodes numériques est la caractérisation des conditions d'optimalité du 1^{er} ordre (équation d'Euler généralisée ou inégalité variationnelle) et du 2^e ordre. La condition du 1^{er} ordre donne l'équation satisfaite par la solution. La condition du 2^e ordre intervient lorsque l'on s'intéresse aux questions de stabilité de la forme, et dans la construction de méthodes numériques de type Newton.

D'un point de vue numérique, l'objectif est de développer des méthodes numériques d'optimisation de formes adaptées pour traiter les problèmes en dimension 3. Pour cela, nous intéressons aux méthodes de type Quasi-Newton et Newton qui conduisent à des techniques d'optimisation de formes avec des vitesses de convergence superlinéaire. Une des difficultés liées à la méthode de Newton réside dans la construction de la dérivée seconde de l'énergie. Pour résoudre la condition d'optimalité, nous utilisons les méthodes intégrales en posant le problème sur la surface.

Le savoir-faire acquis sur l'analyse mathématique et la simulation numérique de ces modèles nous conduit à élargir notre champ d'applications et à considérer des problèmes connexes nouveaux, à savoir :

- problèmes de contacts pour des coques, des plaques,
- problèmes en plasticité,
- identification de fissures ou inclusions dans un solide par des méthodes non destructives.

3.3 Contrôle et Stabilisation

Mots clés : contrôlabilité, stabilisation, commande frontière, commande distribuée, système hybride.

Participants : Francis Conrad, Geoff O’Dowd, Fatima Zahra Saouri, Marius Tucsnak.

Résumé : *Ces travaux relèvent du contrôle et de la stabilisation d’équations aux dérivées partielles d’évolution, au moyen de feedbacks linéaires ou non linéaires, distribués ou frontière. Les applications concernent le couplage fluide-structure et les systèmes élastiques vibrants tels que : structures spatiales flexibles, antennes, assemblage de systèmes mécaniques, matériaux intelligents, bras robots en torsion ou en flexion, pont roulant.*

Etant donné un système élastique vibrant, on cherche des contrôles par retour d’état qui stabilisent le système. C’est une problématique fortement liée à la contrôlabilité exacte. Les contrôles sont distribués ou appliqués sur le bord du domaine, ou sur un ensemble fin de l’intérieur. Ils peuvent faire intervenir des dérivées en temps d’ordre aussi élevé que dans le modèle, par exemple une corde ou une poutre avec masses en des points intérieurs ou frontières. On obtient alors des systèmes dits hybrides (couplage EDP-EDO), dont l’étude présente des difficultés spécifiques.

L’utilisation de multiplicateurs pour obtenir des estimations, le couplage avec la théorie des perturbations compactes de Gibson-Russell, permettent d’obtenir des résultats de stabilité forte ou uniforme, ou de non stabilité selon les commandes.

Une question intéressante concerne l’obtention plus explicite du taux de stabilisation, en fonction des lois de feedback. Les ingénieurs mesurent le degré de stabilisation d’un système amorti en calculant le spectre (approché) du système. Il est donc intéressant de savoir si ce spectre caractérise effectivement le taux de décroissance uniforme de l’énergie. Ce problème est non trivial pour les systèmes de dimension infinie, même en dimension un d’espace. Une analyse spectrale fine peut permettre de vérifier dans certains cas que les modes propres du système constituent une base de Riesz de l’espace d’énergie, et d’en déduire le taux optimal de décroissance de l’énergie.

Parmi les autres thèmes où il reste encore beaucoup de questions ouvertes, on peut citer : le lien entre les problèmes de contrôle en dimension infinie et ceux résultant de l’approximation de ces problèmes en dimension finie ; les applications de l’analyse de Fourier non harmonique au contrôle des structures ; les problèmes de contrôle actif grâce à des matériaux intelligents. Par exemple le couplage fluide-structures : il s’agit de l’étude du contrôle actif d’un écoulement fluide sur la structure environnante grâce à des “matériaux intelligents”. Ce problème a des applications dans des secteurs comme l’étude des grandes structures spatiales ou la réduction du bruit dans les avions.

4 Domaines d'applications

4.1 Panorama

Mots clés : environnement, santé, électromagnétisme, plasma, mécanique des solides, chimie moléculaire, météorologie.

Nous nous intéressons aux questions mathématiques liées aux propriétés des équations (existence, unicité, régularité, comportement asymptotique, ...), à leur discrétisation (résultats d'approximations, ...), aux algorithmes numériques pour les résoudre ainsi qu'à leur parallélisation. Nous étudions ces questions principalement dans trois domaines : l'électromagnétisme, la météorologie et la chimie moléculaire. La mécanique des solides est aussi abordée mais de manière moins forte.

4.2 Problèmes Non Linéaires en électromagnétisme

Mots clés : perturbation singulière, méthode multi-échelle, magnétohydrodynamique, plasma, fusion, décomposition de domaine, calcul parallèle, équation de Maxwell, équation de Vlasov.

Résumé : *Nous étudions deux domaines où le champ électromagnétique joue un rôle important. Le premier concerne le traitement des métaux liquides par champ magnétique (brassage, chauffage, guidage...). Le deuxième concerne le déplacement de particules chargées qui est un enjeu important pour la fusion thermonucléaire ou les tubes de faisceaux de particules.*

4.2.1 Applications aux métaux liquides

L'une des motivations importantes concerne la modélisation des procédés de traitement électromagnétique des métaux liquides. Ceci recouvre de nombreuses applications ; certaines bien établies dans les traitements industriels des métaux, d'autres en cours d'étude. La modélisation complète doit prendre en compte les phénomènes électromagnétiques, hydrodynamiques et thermiques, tout ceci avec plusieurs types de frontières libres : air/métal liquide ou liquide/solide pour la solidification. Le modèle s'écrit avec les équations de Maxwell, les équations de Navier-Stokes et des lois de comportement à préciser. Nous considérons le cas où les courants imposés sont de "hautes fréquences". Notre but consiste à justifier l'approximation dite de "hautes fréquences" dans laquelle le champ magnétique ne pénètre pas à l'intérieur du conducteur.

Lorsque les courants imposés sont de hautes fréquences, le problème à frontière libre se ramène à un problème d'optimisation de forme ; aussi les problèmes de lévitation magnétique servent de test aux algorithmes développés dans le cadre de l'optimisation de forme.

4.2.2 Applications aux plasmas

L'étude de déplacements de particules chargées est un problème important dans l'obtention d'énergie de fusion. Ce problème fait partie des "grands challenges" numériques aux USA. Pour

simuler le déplacement de particules chargées dans leurs champs auto-consistants, on résout numériquement les équations de Vlasov-Maxwell en remplaçant éventuellement les équations de Maxwell par un modèle approché comme Poisson. Vu les échelles de temps très différentes intervenant dans ces problèmes, il faut développer des modèles et des méthodes numériques adaptés.

4.3 Prédicibilité et simulation numérique pour les modèles océaniques

Mots clés : environnement, prédicibilité, attracteur, modèle quasi-géostrophique, géophysique, système parabolique non linéaire.

Glossaire :

Prédicibilité estimation du temps pendant lequel la prédiction est valable.

Résumé : *Les recherches concernent l'étude de la prédicibilité des circulations océaniques et atmosphériques et de leurs attracteurs.*

Le problème général de la prédicibilité consiste à estimer l'évolution de l'erreur due aux données et à prédire au bout de combien de temps cette erreur devient prédominante dans le calcul et interdit donc toute prévision. Cela conduit entre autres à l'étude théorique et numérique de l'attracteur du système. Plus précisément, on aborde les questions suivantes.

Tout d'abord, pour l'estimation numérique de la prédicibilité du modèle quasi-géostrophique barotrope de circulations océaniques pour un intervalle de temps fini, on utilise une caractéristique bien connue de la prédicibilité d'un système non linéaire que sont les exposants de Lyapunov, qui mesurent la croissance de la perturbation lorsque le temps tend vers l'infini. On étudie la généralisation des exposants de Lyapunov par les exposants locaux pour indiquer localement l'augmentation de l'erreur, pendant un intervalle de temps.

Le problème de prédicibilité est lié à celui de l'assimilation des données. Les circulations océaniques du mois dernier sont-elles nécessaires pour prévoir celles de demain? De plus, à partir de mesures des circulations sur la surface, données par les satellites, peut-on reconstruire les circulations de l'océan en entier? C'est le problème d'unicité de la solution du modèle quasi-géostrophique multicouche lorsque la solution de la couche supérieure est imposée.

Enfin, une difficulté fondamentale dans la modélisation des systèmes turbulents, en particulier l'océan, est le développement de mouvements à une échelle plus petite que la résolution numérique accessible. Ces mouvements transportent les quantités dynamiques de façon complexe, se traduisant par des effets de diffusion turbulente pour les grandeurs moyennées à l'échelle de la grille numérique. La paramétrisation de ces effets est un des problèmes essentiels en modélisation océanique pour réduire la taille de la grille nécessaire pour la résolution (i.e on diminue le nombre de variables du problème).

4.4 Chimie moléculaire

Mots clés : santé, simulation biologique, dynamique, couplage, équation intégrale, parallélisme, dynamique moléculaire, méthode du continuum.

Résumé : *Nous nous intéressons aux simulations de gros systèmes moléculaires.*

lares en biologie. Trois axes sont privilégiés : la méthode du continuum pour prendre en compte les effets du solvant autour d'une protéine, les algorithmes en dynamique moléculaire, ainsi que les algorithmes de couplages pour les méthodes hybrides (mécanique quantique, dynamique moléculaire et continuum).

Les problèmes qui nous intéressent sont issus des gros systèmes moléculaires (>50 000 atomes) en biologie comme l'étude des protéines, des membranes, ... dans des solvants ioniques ou non. Ces problèmes sont importants notamment dans le domaine de la santé pour la construction de nouveaux médicaments, pour comprendre des réactions des mécanismes chimiques, ... Un autre problème concerne la détermination par des méthodes de dynamique moléculaire de la structure tri-dimensionnelle d'une protéine (folding).

Les problèmes mathématiques issus de ces applications et que nous abordons dans le projet concernent d'une part la justification des algorithmes déjà utilisés et d'autre part le développement de nouveaux algorithmes pour un grand nombre d'atomes, des schémas d'intégration pour des temps longs, la prise en compte des différentes échelles de temps. Le parallélisme est un des outils principaux pour nous permettre d'obtenir des méthodes efficaces.

5 Logiciels

5.1 Bibliothèque Para++

Participant : Olivier Coulaud [correspondant].

Mots clés : interface C++, échange de messages.

Résumé : *Para++ est une bibliothèque C++ dont l'objectif est de faciliter l'accès aux bibliothèques traditionnelles de communication par passage de messages. Para++ apporte essentiellement deux simplifications : une structuration des tâches et une simplification dans l'utilisation de PVM et de MPI.*

Para++ est une bibliothèque C++ dont l'objectif est de faciliter l'accès aux bibliothèques traditionnelles de communication par passage de messages. Para++ apporte essentiellement deux simplifications :

- une simplification sur la structure même de l'application parallèle, grâce à l'introduction d'une hiérarchie dans les tâches la constituant. Para++ intègre notamment des possibilités de programmation M-SPMD (Multiple-SPMD, Single Program Multiple Data) ;
- une simplification dans l'utilisation des services de deux bibliothèques de communications : PVM et MPI. Grâce à l'introduction d'objets C++, l'utilisateur peut construire, envoyer et recevoir des messages de manière simplifiée.

La première diffusion de Para++ date de juin 1995. Cette version a été améliorée à plusieurs reprises, conduisant à la diffusion de la bibliothèque actuelle via la page web :

<http://www.inria.fr/parapp/>.

La version 2.x tourne sur toute station de travail, PC sous Linux, Solaris ainsi que sur Paragon, SP2, PowerChallenge, Origin2000. Parmi les sites qui ont téléchargé le package, on

retrouve notamment beaucoup d'universités (allemandes, américaines et françaises, mais également australiennes, africaines, japonaises, etc.), quelques organismes gouvernementaux, ainsi que quelques organismes commerciaux. Une liste de diffusion a été créée pour faire le lien avec les utilisateurs (para++@loria.fr).

6 Résultats nouveaux

6.1 Problèmes Non Linéaires en électromagnétisme

6.1.1 Dérivation mathématique du modèle rayon de Larmor fini et développement asymptotique de l'équation de Vlasov dans un champ magnétique fort

Participant : Eric Sonnendrücker.

Dans la suite de nos travaux sur l'étude asymptotique de l'équation de Vlasov dans un champ magnétique fort, en utilisant des techniques d'homogénéisation, notamment la notion de limite deux-échelles, nous avons réussi à retrouver rigoureusement le modèle rayon de Larmor fini, d'approximation des équations de Vlasov-Poisson[35]. En outre nous avons réalisé un développement asymptotique à deux échelles de l'équation de Vlasov dans un champ magnétique fort et un champ électrique donné [34].

6.1.2 Développement et parallélisation de la méthode semi-Lagrangienne pour l'équation de Vlasov

Participants : Pierre Bertrand, Olivier Coulaud, Alain Ghizzo, Jean-Rodolphe Roche, Eric Sonnendrücker.

Comme alternative aux méthodes particulières qui ont l'inconvénient d'engendrer un fort bruit numérique, nous avons développé une méthode semi-Lagrangienne pour la résolution numérique de l'équation de Vlasov qui consiste à évaluer la fonction de distribution aux points d'un maillage dans l'espace des phases [21]. Pour que ces méthodes puissent être utilisées en deux dimensions (en réalité la fonction de densité est une fonction à quatre dimensions deux d'espace et deux de phase) ou plus, une parallélisation efficace est indispensable [5]. Dans ce cadre là, nous avons développé des codes de Vlasov parallèles en dimension 2, 4 et 6 à l'aide des directives OpenMP. La bibliothèque complète est en bonne voie d'avancement aussi bien pour les versions OpenMP que MPI. Nous avons développé des transpositions de matrice à base d'algorithme de type hypercube pour des décompositions de données non classiques issues des fonctions de densité qui sont des fonctions à 4 et 6 variables.

6.1.3 Étude des méthodes Euleriennes pour l'équation de Vlasov

Participants : Olivier Coulaud, Francis Filbet, Eric Sonnendrücker.

Plutôt que d'utiliser des méthodes semi-lagrangienne sur des maillages réguliers, nous nous intéressons aux méthodes Euleriennes basées sur des schémas volumes finis. Dans ce cadre, nous

avons prouvé la convergence d'un schéma de type volumes finis pour la résolution numérique du système de Vlasov-Poisson et, obtenu des estimations d'erreur dans un cas particulier (donnée initiale à support compact).

Nous avons conçu un code orienté objet C++ pour la résolution numérique de l'équation de Vlasov, et validé plusieurs méthodes (MUSCL, ENO, simple reconstruction). Suite à la participation de F. Filbet au CEMRACS'99 à Luminy nous avons été amenés à appliquer ce code pour la résolution numérique de l'équation de Vlasov-Fokker-Planck-Landau dans le cas non-homogène.

6.1.4 Méthode de correction hyperbolique pour les équations de Maxwell

Participants : Eric Sonnendrücker, Laurence Viry.

Nous disposons maintenant, suite au travail de thèse de L. Viry d'un code PIC en C++ flexible permettant d'incorporer et de tester diverses méthodes numériques ainsi que de traiter une large palette de problèmes physiques liés au plasmas. Nous avons pu comparer grâce à ce code différentes méthodes numérique permettant d'imposer que les conditions sur la divergence restent satisfaites lors de la simulation numérique des équations de Maxwell en temps long. Une méthode purement hyperbolique et conservant le caractère relativiste des équations de Maxwell a été développée dans ce but [14]. Ce travail est effectué en collaboration avec C.-D. Munz (IAT, univ. Stuttgart) , R. Schneider, U. Voss (INR, Forschungszentrum Karlsruhe).

6.1.5 Simulation numérique de faisceaux de particules

Participant : Eric Sonnendrücker.

Nous avons implanté une méthode semi-Lagrangienne pour la résolution de Vlasov en 2D (4D dans l'espace des phases) dans le code WARP. Cette méthode a pu être comparée aux méthodes PIC utilisées traditionnellement dans ce genre de problèmes. Le code a également été appliqué pour la simulation de certains problèmes liés aux accélérateurs d'ions lourds comme l'évolution d'un faisceau initialement semi-Gaussien et la formation de halo. Ce travail est réalisé en collaboration avec A. Friedman du Lawrence Berkeley National Laboratory.

6.1.6 Extraction de particules d'un plasma

Participant : Jean-Rodolphe Roche.

Nous nous intéressons à la détermination de la frontière libre dans un problème d'extraction de particules d'un plasma. D'un point de vue numérique on transforme le problème à frontière libre en un problème d'optimisation de formes où l'équation d'état du système est l'équation de Vlasov-Poisson. L'objectif principal est de développer des techniques en 2-d et 3-d permettant d'aborder des applications autour du dessin optimal de tubes hyperfréquences, de la séparation isotopique et de l'implantation ionique en traitement de surfaces.

6.2 Contrôle et identification de formes

6.2.1 Aspects théoriques généraux.

Participants : Mohammed Hayouni, Gilles Fremiot, Arian Novruzi, Jan Sokolowski.

Dérivation Topologique. La dérivée topologique permet de localiser le lieu géométrique de la structure élastique où peut apparaître un trou. Des applications sont données pour des équations elliptiques, un système d'élasticité en dimension deux [18] et trois [20]. C'est un des sujets de recherche dans le cadre du projet POLONIUM [1], [19] [17], [18], [9], [24], [31] et [29].

Dérivation par rapport au domaine. Nous présentons dans [9] un théorème précisant la structure de la dérivée eulérienne d'une fonctionnelle de forme différentiable définie dans un domaine qui possède des fissures et qui est de ce fait non régulier.

Ce théorème étend la formule de Hadamard au cas des domaines non réguliers. Ce résultat est alors utilisé pour un ouvert fissuré avec différentes conditions sur la fissure (travail de thèse de G. Frémiot).

Dans [15] on établit une estimation C^α non-globale sur le bord pour le gradient de la solution d'un problème de Neumann extérieur dans \mathbb{R}^3 , qui est la dérivée par rapport à la forme d'un autre problème de Neumann. On prouve une estimation de bord fine sur le gradient de ce problème, qui montre qu'il décroît quand la distance du support de la donnée au bord croît (principe de Saint-Venant). L'estimation obtenue permet de réduire considérablement le coût du calcul de gradient.

Régularité et continuité par rapport à la forme. Dans [11] on considère en dimension $N \geq 2$ le problème d'optimisation de forme où l'inconnue est un ouvert de mesure prescrite minimisant l'énergie du problème de Dirichlet. En utilisant une méthode de pénalisation du problème variationnel associé, nous obtenons un résultat d'existence et de régularité de la fonction d'état et par conséquent, l'existence du domaine cherché.

Dans [10], on étudie la question de l'existence des points critiques pour la fonctionnelle énergie qui apparaît dans la modélisation bidimensionnelle du formage électromagnétique d'un métal liquide. Cette fonctionnelle dépend de la forme, i.e. d'un domaine du plan, via son périmètre et la solution du problème de Dirichlet sur ce domaine. Les points critiques recherchés sont les domaines qui réalisent un état d'équilibre dans ce procédé de formage. En utilisant le théorème des fonctions implicites, on donne une condition suffisante sur le courant électrique pour l'existence de formes régulières lorsque le métal a une tension superficielle suffisamment élevée.

Dans [26], on étudie la monotonie et la continuité, par rapport aux variations du domaine au sens de Hausdorff, de la solution du problème à frontière libre de Bernoulli. Ensuite on établit un résultat d'existence pour une classe de problèmes d'optimisation de formes liée au problème précédent. Puis en utilisant les transformations conformes, on propose une méthode numérique pour cette classe de problèmes en dimension deux.

6.2.2 Problèmes à frontière libre.

Participant : Jan Sokolowski.

On étudie la modélisation, l'identification et le contrôle en mécanique des solides pour des problèmes de contacts pour des coques, des plaques, des problèmes en plasticité et l'identification des fissures pour des plaques élastiques. Pour ces modèles, nous montrons l'existence de solutions faibles [27].

Nous nous intéressons dans [28] à un problème d'optimisation de forme relatif à la modélisation d'endurcissement par induction. Le modèle mathématique consiste en une formulation potentielle vectorielle pour les équations de Maxwell couplée au bilan d'énergie et à une EDO afin de décrire la phase de transition solide-solide dans l'acier pendant le chauffage. En agissant sur la forme de l'anneau, nous contrôlons la fraction de volume de la phase à haute température. L'anneau est modélisé par un tube et est défini par une courbe de vitesse unité. Le problème d'optimisation de forme est formulé pour l'ensemble des courbes admissibles. Nous prouvons l'existence d'un contrôle optimal. On utilise la méthode de la dérivée matérielle afin d'obtenir le gradient de forme de la fonctionnelle de coût. Enfin, on établit, dans le cas d'un tube optimal, les conditions nécessaires d'optimalité du premier ordre.

6.2.3 Identification d'inclusions et de fissures

Participants : Gilles Frémiot, Jean-Rodolphe Roche, Jan Sokolowski.

Actuellement, nous commençons l'étude de la dimension trois. En particulier, nous considérons des inclusions avec des angles ; les solutions de l'équation d'état ont alors une partie singulière. La formule de Griffith est aussi obtenue dans le cas tridimensionnel. Dans ce cas, la fissure bidimensionnelle est incluse dans un domaine tridimensionnel [13].

6.2.4 Calcul numérique de formes

Participants : Arjan Novruzzi, Jean-Rodolphe Roche.

Application au magnétoformage La résolution de problèmes d'optimisation de formes avec un nombre important de paramètres de contrôle est possible à condition d'utiliser tout l'arsenal de techniques adaptatives de l'optimisation et de la résolution d'équations aux dérivées partielles. Aussi a-t-on travaillé cette année sur plusieurs aspects de ces techniques.

Nous savons que la convergence de méthodes d'optimisation de type "Newton-like", théoriquement superlinéaire, dépend en fait totalement de la précision avec laquelle on résout l'équation d'état [16]. On a étudié la propagation des erreurs dans ces algorithmes dans le cas de l'optimisation de formes afin d'établir des critères d'adaptation des maillages. Un deuxième aspect étudié a été la résolution d'équations intégrales par des méthodes de type panel clustering dans une application de formage électromagnétique.

6.3 Stabilisation de structures flexibles

6.3.1 Stabilisation d'un système hybride

Participants : Francis Conrad, Geoff O'Dowd.

Pour un modèle simplifié de pont roulant (câble flexible attaché à un chariot et transportant une masse) qu'on ne peut stabiliser uniformément par des feedbacks frontière classiques en vitesse, la stabilisation uniforme avec des feedbacks d'ordre plus élevé (on prend en compte la vitesse de rotation) avait été obtenue [25]. Dans le cas où on ne prend pas en compte la position dans le terme de feedback, on peut transformer le système en une équation plus simple (qui n'est plus de type hybride), mais qui admet pour solutions stationnaires toutes les constantes. L'étude asymptotique en temps de ce problème est en cours.

Pour des feedbacks (en vitesse) dissipatifs mais non monotones, l'absence éventuelle de compacité forte empêche l'utilisation directe du principe de LaSalle. La stabilité forte ou faible a été obtenue en utilisant une technique d'invariants qui permet de se ramener au principe de LaSalle en supposant seulement une monotonie locale [8]. Avec des feedbacks non linéaires monotones d'ordre plus élevé, des estimations (non uniformes) de la vitesse de décroissance sont obtenues (en fonction du comportement du feedback au voisinage de zéro). Enfin, l'analyse du modèle lorsque le câble est remplacé par une poutre encastree ou articulée au chariot, avec feedback vitesse, a été faite. La stabilité forte est prouvée pour un feedback dissipatif, mais pas forcément monotone [7]. Ceci a servi de motivation (et de base) pour les deux dernières parties de la thèse de Geoff O'Dowd [2]. Il s'agit de résultats de stabilité faible pour une équation abstraite, avec dissipation non monotone. L'extension à des modèles plus complexes de pont roulant (câble de longueur variable, déplacement du système en trois dimensions) est en cours.

6.3.2 Analyse spectrale

Participants : Francis Conrad, Fatima Zahra Saouri.

Pour une poutre avec masse à un bout, l'obtention du taux optimal a été établie dans certains cas particuliers de feedback d'ordre élevé, car on se ramène au problème de la poutre sans masse, avec feedback en vitesse, pour lequel on sait démontrer l'existence d'une base de Riesz par analyse asymptotique du spectre du système et utilisation de résultats de perturbation (Bari). On peut retrouver ce résultat en utilisant la théorie de Shkalikov qui donne un cadre général pour vérifier qu'un système de vecteurs propres généralisés de l'opérateur forme une base de Riesz de l'espace d'énergie, technique particulièrement adaptée aux systèmes (par exemple hybrides) où la valeur propre apparaît dans les conditions au bord [30]. Le cas d'une poutre avec masse ou moment d'inertie plus général est en cours d'étude et rentre dans ce cadre.

6.3.3 Contrôlabilité exacte et applications

Participants : Francis Conrad, Marius Tucsnak.

La contrôlabilité exacte (qui est un concept plutôt théorique) permet, si elle est établie, de nombreuses applications : stabilisation par feedback direct, stabilisation par bouclage via

une équation de Riccati, contrôle H^∞ . Dans une série de travaux en cours (avec George Weiss, Kais Ammari) on donne des cadres précis où contrôlabilité implique stabilisabilité [32]. Ces résultats étendent un résultat de A. Haraux, valable uniquement pour des contrôles bornés et font l'objet de la thèse de Kais Ammari. Les résultats généraux sont ensuite appliqués à des modèles de poutres et de plaques élastiques [32]. Dans le cas d'un feedback ponctuel, on établit des estimations valables même lorsque les solutions n'ont pas une énergie décroissante exponentiellement [32]. Par ailleurs, on considère le problème de la contrôlabilité simultanée d'une structure flexible et d'un système de dimension finie. Le résultat principal (avec G. Weiss) énonce que les deux systèmes sont simultanément contrôlables si les deux spectres sont disjoints [22]. Une attention particulière sera accordée aux développements de méthodes de calcul permettant une implémentation effective des contrôles. Pour des raisons de robustesse, on est intéressé par des contrôles en boucle fermée.

Dans de nombreux problèmes l'utilisation de capteurs et d'actionneurs co-localisés permet de donner des lois de feedback très simples. Il n'est pas immédiat d'établir l'efficacité de ce type de méthodes par une analyse théorique car les constantes intervenant dans les estimations sont souvent difficiles à estimer. C'est pour cette raison qu'on se propose d'utiliser la simulation numérique pour estimer les taux de décroissance et éventuellement de trouver le positionnement optimal des actionneurs.

En ce qui concerne le calcul effectif des contrôles exacts, on étudie le développement d'une méthode nécessitant la résolution d'une équation de Riccati d'évolution. Cette approche est nouvelle, même pour les systèmes d'équations différentielles ordinaires, cas où on a obtenu les premiers résultats numériques.

L'implémentation de ce type de méthode pour des problèmes concrets provenant de l'hydraulique (en collaboration avec le projet CONGE) ou des problèmes de pont roulant est en cours.

6.3.4 Analyse et contrôle des interactions fluide-structure

Participants : Antoine Chapelon, Marius Tucsnak.

Savoir comment agir sur un écoulement fluide est un problème d'intérêt primordial dans de nombreux domaines d'applications : aéronautique, questions de pollutions et d'environnement, régularisation de mouvements fluides et de vibrations dans des réservoirs ou des tuyaux, etc. Pour ce type de problèmes la réduction à un modèle de dimension finie est loin d'être immédiate.

Le plus souvent le fluide entoure ou est contenu dans une structure élastique qui interagit avec lui. Il convient alors d'étudier des systèmes fluide-structure. Ce sujet est en pleine effervescence actuellement. Dans ce type de problème, un système d'EDP modélisant le fluide à l'intérieur d'une cavité (Laplace, ondes, Stokes ou Navier-Stokes) est couplé avec les équations modélisant le mouvement d'une partie du bord (corps rigide ou élastique). Les difficultés d'une telle étude sont nombreuses, car il s'agit de problèmes de type frontière libre. Nous avons pour l'instant étudié l'existence des solutions dans le cas du mouvement d'un corps rigide à l'intérieur d'un fluide visqueux [3], [4]. Les travaux en cours portent sur la convergence des méthodes numériques de type ALE, en vue de leurs applications aux problèmes de contrôle.

6.4 Prédicibilité et simulation numérique pour les modèles océaniques.

Résumé : *Le problème général dans l'étude du climat consiste en l'étude théorique et numérique de l'attracteur du système ainsi que de ses particularités telles que processus de bifurcations, points stationnaires et orbites périodiques.*

6.4.1 Orbites périodiques instables et attracteur.

Participant : Evgueni Kazantsev.

Calcul des orbites périodiques. Une méthode numérique de détection des orbites périodiques instables sur l'attracteur d'un système dynamique non linéaire est proposée [23]. Cette méthode utilise les mêmes techniques que l'assimilation de données, ce qui simplifie son implantation aux modèles géophysiques. Cette méthode a été utilisée pour trouver numériquement quelques orbites périodiques du modèle barotrope de l'océan. Les particularités de la méthode ont été étudiées et comparées avec d'autres méthodes. La fraction du temps passé par la trajectoire dans un voisinage d'une orbite périodique a été comparée avec les caractéristiques d'instabilité. La dimension de l'attracteur a été approximée comme la moyenne des dimensions locales dans les voisinages d'orbites périodiques.

Sensibilité de l'attracteur. La connaissance des orbites périodiques nous permet aussi d'étudier la sensibilité de l'attracteur du modèle. La description de l'attracteur d'un système chaotique par les orbites périodiques instables a été utilisée pour le développement d'une méthode d'estimation *a priori* de la sensibilité des moments statistiques de la solution du système sur l'attracteur [36]. Cette méthode utilise l'approche linéaire. Elle permet de déterminer la perturbation du forçage extérieur qui maximise la norme de la perturbation d'un moment statistique.

Cette méthode a été appliquée au modèle de Lorenz. Les estimations ont été comparées avec les perturbations des moments statistiques calculées directement par intégration du modèle. La comparaison montre qu'il suffit d'avoir une centaine d'orbites périodiques pour calculer les estimations *a priori*; et que l'approche linéaire reste valable jusqu'à des perturbations du forçage de grande norme.

6.4.2 Étude de la structure de l'attracteur du modèle barotrope de l'océan.

Participants : Christine Kazantsev, Evgueni Kazantsev.

L'existence de l'attracteur de l'approximation de dimension finie du modèle a été prouvée ainsi que la convergence de l'attracteur du modèle discrétisé vers l'attracteur du modèle original. Quelques propriétés des solutions stationnaires du modèle sont examinées [6].

La structure de l'attracteur est expliquée en partie par la séquence de bifurcations à laquelle le système est soumis par les variations des paramètres principaux. La particularité du système est l'existence de deux bassins "presque invariants" de l'attracteur chaotique avec des transitions très rares entre eux. Les maxima dans le spectre de l'énergie correspondent soit à la fréquence

principale de la solution périodique apparue dans la bifurcation de Hopf soit aux fréquences du phénomène de Feigenbaum.

6.4.3 Quelques questions sur le modèle Quasi-Géostrophique multicouche.

Participants : Christine Kazantsev, Evgueni Kazantsev.

Estimation numérique de la prédictibilité pour un intervalle de temps fini. Une caractérisation bien connue de la prédictibilité d'un système non linéaire est donnée par les exposants de Lyapunov qui mesurent la croissance de la perturbation en temps infini. On considère la généralisation des exposants de Lyapunov, les exposants locaux pour indiquer l'augmentation d'erreur localement, pendant un temps fini. On a étudié les particularités numériques de l'algorithme, telles que l'influence de la variation de la résolution utilisée, le nombre de couches considérées pour la discrétisation verticale du bassin, la convergence des exposants de Lyapunov dans la limite $T \rightarrow \infty$, la précision des différents schémas en temps, etc. La structure géographique du mode le plus instable par rapport aux petites perturbations est analysée. Les variations de ce mode sont relativement faibles pour de faibles variations de l'approximation numérique du problème. Par contre elles sont beaucoup plus sensibles aux variations de l'intervalle de temps de prévision [12].

6.4.4 Modélisation mathématique de la circulation thermohaline de l'océan mondial.

Participant : Christine Kazantsev.

Ce travail s'inscrit dans une chaîne de recherche qui comprend l'analyse mathématiques du modèle, les techniques numériques et des expériences physiques. Pour le modèle de l'océan global en équations primitives et coordonnées σ . Du point de vue du calcul, on essaie de construire un modèle flexible qui permettra de faire des expériences numériquement stables pour des petits coefficients de viscosité, différentes structures de maillage et différents lissages du relief.

6.5 Chimie moléculaire.

Participants : Pierre-Eric Bernard, Olivier Coulaud, Rachid Krenenou, Bruno Pinçon.

Résumé : *Les recherches concernent ici le domaine de la chimie moléculaire et plus particulièrement la simulation pour des systèmes biologiques. Trois axes sont développés, à savoir :*

- *le calcul du potentiel électrostatique autour d'une molécule plongée dans un solvant,*
- *le développement d'algorithmes parallèles efficaces pour la dynamique moléculaire.*

- le couplage de méthodes pour construire une méthode hybride MQ/DM/CM permettant le suivi de réaction chimique dans de gros systèmes

Ces différents projets sont aussi développés en collaboration avec le LCTN et au travers de l'action coopérative SIMBIO.

6.5.1 Potentiel électrostatique

Nous nous intéressons au calcul du champ électrostatique autour d'une molécule lorsqu'elle est plongée dans un solvant non ionique. Le problème est écrit sous la forme d'une équation intégrale et est résolu par une méthode de collocation. Cette année l'accent a été mis d'une part sur la génération de «bons» maillages pour de grosses molécules. D'autre part, nous avons continué à améliorer le calcul du potentiel et de son gradient pour pouvoir les utiliser dans le couplage dynamique moléculaire continuum (ARC Simbio).

Maillage : Le calcul du potentiel par une méthode intégrale nécessite d'avoir un "bon maillage" de la surface moléculaire. Cette surface est analytique par morceaux et est constituée de morceaux de sphères et de tores. Pour obtenir un maillage de cette surface, nous utilisons le programme MSMS⁹ qui ayant une complexité en $N \ln(N)$, où N est le nombre d'atomes de la molécule, est très rapide. Cette surface est génériquement \mathcal{G}_1 mais dans certaines conditions elle n'est pas localement bien définie. Malgré ces singularités, ce programme génère une triangulation conforme au sens des connectivités, mais qui peut être assez mauvaise au voisinage d'une singularité initiale (pics, triangles quasi retournés). La triangulation issue de MSMS est utilisée pour visualiser la surface moléculaire mais pas pour calculer des grandeurs sur celle-ci. Nous avons développé un programme qui, partant d'une triangulation obtenue avec MSMS, permet de supprimer les problèmes dus aux singularités et de déraffiner selon une carte de tailles issue de critères géométriques

Enfin, on voudrait aussi pouvoir raffiner et déraffiner localement ces triangulations suivant des critères issus d'erreur d'interpolation tout en respectant des critères géométriques. Actuellement nous travaillons sur le problème de la carte de taille issue de la majoration de l'erreur d'interpolation lorsque la surface est représentée par une triangulation quadratique courbe et une interpolation linéaire de la fonction.

6.5.2 Dynamique moléculaire

Dans le cadre de l'action incitative, nous avons entrepris d'améliorer le code Takakaw développé au sein du projet Apache au dessus d'Athapascan. Le code parallèle est basé sur une décomposition spatiale de l'espace en boîtes, avec plusieurs stratégies d'équilibrage de charge. D'autres fonctionnalités ont été introduites dans le code à savoir l'anti-rotation du centre de masse et une dynamique sous contraintes, algorithme Shake, pour supprimer les hautes fréquences entre les atomes d'hydrogène et les atomes lourds. Les algorithmes standards pour résoudre l'ensemble des contraintes non linéaires ont été implantés (Newton Gauss-Seidel et Newton SOR). De plus, nous avons développé un algorithme de type Newton par bloc qui

9. http://www.scripps.edu/pub/olson-web/sanner/html/msms_home.html

permet de traiter les contraintes par bloc de contraintes indépendantes. Un bloc correspond à toutes les liaisons entre un atome lourd donné et les atomes d'hydrogène reliés à cet atome. La taille des blocs ainsi construits pour les problèmes de biologie est au plus 3x3. Cette approche permet de gagner un facteur 2 sur la résolution des contraintes pour une saturation de 10^{-12} . [33].

6.5.3 Couplage de méthodes

L'objectif est de fournir à l'utilisateur chimiste une méthode efficace de couplage mécanique quantique, dynamique moléculaire et méthode du continuum ainsi qu'un environnement de simulation distribué. Nous nous concentrons pour l'instant sur le couplage entre la dynamique moléculaire et la méthode du continuum pour calculer le potentiel électrostatique. Ce couplage implique de calculer le potentiel et le champ électrique de réaction du solvant sur la molécule par une méthode intégrale, puis d'échanger ces informations avec la dynamique. Le couplage est réalisé à l'aide d'un schéma d'intégration à pas multiples, et de ce fait le potentiel de réaction est évalué toutes les x itérations. Pour coupler le code de dynamique moléculaire TAKAKAW et le code électrostatique nous avons utilisé le bus logiciel CORBA. Ce bus à objets repartis fonctionne selon un modèle objet Client/Serveur et assure la transparence des communications entre applications hétérogènes (différents langages de programmation, modèle de parallélisme). De plus pour le suivi de la simulation nous avons développé en Java un client qui permet de visualiser un certain nombre de gradeurs comme la température, l'énergie, le temps moyen d'une itération, la charge des processeurs ...

7 Contrats industriels (nationaux, européens et internationaux)

7.1 TEMAS

Participants : Francis Conrad, Olivier Coulaud, Rachid Krenenou, Eric Sonnendrücker.

Le projet qui a démarré en 97, se situe dans le cadre du programme européen INTERREG2, en collaboration avec les universités allemandes de Saarbrücken (A. Louis) et Kaiserslautern (H. Neunzert) ainsi qu'avec l'École de Mines de Nancy (D. Ablitzer). L'objectif du projet est d'organiser en commun des actions de consultation, d'expertise et de coopération dans le domaine des mathématiques appliquées avec le milieu industriel (PME/PMI) interrégional allemand et lorrain. Le projet est financé sur 3 ans.

7.2 CEA

Participant : Eric Sonnendrücker.

Contrat avec le CEA Bruyères-Le-Chatel pour le développement d'une méthode de décomposition de domaines pour la parallélisation d'un code tridimensionnel pour la résolution des équations de Maxwell sous forme d'équations des ondes avec contraintes.

8 Actions régionales, nationales et internationales

8.1 Actions régionales

8.1.1 Centre Charles Hermite

Le projet est fortement impliqué dans la vie du Centre Charles Hermite¹⁰ et dans ses activités

- O. Coulaud : directeur adjoint du Centre, membre du conseil des opérations et du comité des bourses, responsable du programme Beta-test sur l'**ORIGIN 2000**, responsable de l'opération simulation moléculaire complexe.
- Ch. Kazantsev : responsable de l'opération sur la Prédicibilité des circulations océaniques et atmosphériques.
- J.R. Roche : membre du conseil des opérations et du comité des bourses, responsable du séminaire, responsable de l'opération Algorithmes parallèles d'optimisation de formes en magnétoformage.

8.1.2 Autres

Projet Applications des théories de la mécanique statistique à la paramétrisation de la turbulence océanique de l'Institut National des Sciences de l'Univers (E. Kazantsev) ;

Groupe de **R**echerche sur les **I**nteractions **É**lectromagnétiques dans les **F**luides démarré dans un plan pluriformation qui regroupe le LEMTA, le GREEN et le projet NUMATH (O. Coulaud, R. Krenenou, E. Sonnendrücker, J.R. Roche).

8.2 Actions nationales

8.2.1 Action de Recherche Coopérative SIMBIO

Participants : Pierre-Eric Bernard, Olivier Coulaud, Rachid Krenenou, Bruno Pinçon, Bernard Maignet.

Les partenaires sont le projet APACHE (UR Rhône-Alpes), le CEA Grenoble (Direction des Sciences du Vivant) ainsi que le LCTN (Laboratoire de Chimie théorique de Nancy) Le but de cette action est de concevoir une plate-forme pour la simulation moléculaire complexe. Celle-ci servira d'une part à concevoir, étudier et tester de nouveaux algorithmes numériques parallèles. D'autre part, elle sera un outil de simulation performant pour la modélisation moléculaire. Nous envisageons pour la construction d'une plate-forme d'adopter une approche modulaire pour obtenir un outil évolutif et efficace. Plus de détails sur le programme de recherche et sur l'avancement des travaux se trouvent sur la page web

<http://www.iecn.u-nancy.fr/Textes/Recherche/Equipes/Numath/SIMBIO/index.html>

10. Centre lorrain de compétence en modélisation et calcul hautes performances

8.2.2 Action de Recherche Coopérative OPINel

J.R Roche et J. Sokolowski participent à cette action dont le but est de concevoir, d'étudier et de tester de nouveaux algorithmes, basés sur les techniques dites de «points intérieurs» pour l'optimisation de systèmes non linéaires dans lesquels les contraintes d'inégalité doivent être prises en compte. Voir la page web de l'action <http://www-rocq.inria.fr/gilbert/opinel/opinel.html>

8.2.3 Groupe de Mission Mercator

C. et E. Kazantsev participent au projet du Groupe Mission Mercator intitulé "*Schémas d'ordre élevés pour le modèle MERCATOR*". Le responsable du projet est E. Blayo du projet IDOPT.

8.2.4 Participations à des GDR

Optimisation et contrôle actif de formes (G. Frémiot, M. Hayouni, A. Novruzi, J.R. Roche, J. Sokolowski),

Méthodes variationnelles en météorologie et océanographie (E. Kazantsev),

Couplage d'équations (O. Coulaud, M. Tucsnak),

Simulation de particules chargées (O. Coulaud, F. Filbet, J.R. Roche, E. Sonnendrücker).

Automatique, groupe thématique "contrôle des fluides" (M. Tucsnak),

8.2.5 Responsabilités nationales et locales assurées par les membres du projet :

A l'Inria : participation au comité des Projets de l'Inria-Lorraine (O. Coulaud).

Dans les instances universitaires et Cnrs : Conseil National des Universités (Ch. Kazantsev); comité de programme de l'IDRIS (O. Coulaud); participation au Conseil de Laboratoire de l'Institut Elie Cartan (F. Conrad, O. Coulaud, Ph. Laurencot, J.R. Roche, J. Sokolowski); Commission de spécialistes 25 ème et 26 ème sections de l'Université Henri Poincaré Nancy I et Nancy II (F. Conrad, O. Coulaud, J. Sokolowski, B. Pinçon, J. R. Roche); Commission de spécialistes de l'université de Metz (Ch. Kazantsev, F. Conrad); Commission de spécialistes de l'université de Strasbourg (Ch. Kazantsev, M. Tucsnak).

8.3 Actions européennes

8.3.1 Projet PROCOPE

Le thème du projet concerne l'étude du déplacement de particules chargées. Les partenaires nationaux sont le CEA Bruyères-Le-Chatel et le Centre de mathématiques appliquées de l'Ecole Polytechnique. Les partenaires Allemands sont le Forschungszentrum de Karlsruhe et l'Université de Stuttgart.

8.3.2 Projet PROCOPE numéro 98158

Le thème du projet concerne l'étude des équations non linéaires. Le partenaire en Allemagne est le WAIS à Berlin.

8.3.3 Projet Polonium

Participants : Gilles Frémiot, Jean-Rodolphe Roche, Jan Sokolowski.

Le thème du projet concerne des problèmes d'optimisation de formes dans les matériaux. Les partenaires sont le Laboratoire de mathématiques de l'université de Besançon, les laboratoires d'informatique des systèmes et de mécanique (Pologne). Cette année les échanges suivants ont eu lieu : A. Zochowski (Varsovie), T. Lodygowski (Poznan), D. Bucur (Besançon) et J. Sokolowski (Nancy). de Karlsruhe et l'Université de Stuttgart.

8.4 Relations internationales

8.4.1 Lawrence Berkeley National Laboratory

Collaboration avec le Lawrence Berkeley National Laboratory (Accelerator and Fusion Research Department) sur l'étude numérique et le développement de logiciels pour l'étude de la faisabilité de la fusion inertielle par ions lourds (E. Sonnendrücker).

8.4.2 Projet Lyapounov

Participants : Christine Kazantsev, Eugène Kazantsev.

Projet "Sensibilité des modèles climatiques aux petites perturbations extérieures et équations adjointes" de l'Institut Franco-Russe A.M. Lyapunov, soutenu jusqu'en juin 2000.

Ce projet est en collaboration avec O. Talagrand (LMD), E. Blayo, F.-X. Le Dimet (IDOPT), S. Hoang-Hong (GRGS, Toulouse), V.P. Dymnikov (Institut de Mathématiques Numériques de l'Académie des Sciences de Russie).

8.5 Visites et invitations de chercheurs

Invitation dans le projet de S. Avdonin (St Petersburg), S. Cox (Rice Univ., USA), S. Hansen (Iowa State univ., USA), A. Khludnev (Novosibirsk), T. Lewinski (Varsovie), Z. Liu (Minnesota, USA), B. Vernescu (Woruster, USA), G. Weiss (Londres), E. Zuazua (Madrid).

Membre du projet invité : Imperial College (M. Tucsnak).

9 Diffusion de résultats

9.1 Animation de la Communauté scientifique

Organisation de la conférence internationale: "Contrôle des systèmes gouvernés par des équations aux dérivées partielles", du 8 au 12 mars à Nancy.

Groupe de travail Besançon-Metz-Nancy-Strasbourg sur le contrôle de systèmes distribués

9.2 Participation à des colloques, séminaires, invitations

9.2.1 Congrès internationaux

Particle Accelerator Conference 99, New-York, Etats-Unis 29 mars - 3 avril 1999 (E. Sonnendrücker). Partial Differential Equations on Multistructures, Luminy(CIRM), Avril 19-24 (J Sokolowski),

ICIAM, the Fourth International Congress on Industrial and Applied Mathematics, Edinburgh, Scotland, 5-9 juillet 1999 (O. Coulaud, J Sokolowski, J. R. Roche) ,

19th IFIP TC7 Conference on System Modelling and Optimization Cambridge, Angleterre, July 12-16 ; International Conference on Multifield Problems, University of Stuttgart (Allemagne), Octobre 6-8 ; IEEE Conference on Decision and Control Phoenix, Arizona, USA. December 7-10 (J. Sokolowski),

WIAS Workshop "Systems with Hysteresis" Berlin, 20-24 septembre 1999, (J. Sokolowski),
3rd World Congress of Structural and Multidisciplinary Optimization (WCSMO-3) Buffalo/Niagara (J. Sokolowski),

conférence invitée

AMS-IMS-SIAM Summer Research Conference "Differential Geometric Methods in the Control of Partial Differential Equations, University of Colorado, Boulder, juin 27-juillet 1 ; Eurocor Conference on Qualitative Properties of Partial Differential Equations, 11-13 octobre 1999, Université de Haute Alsace, Mulhouse (J Sokolowski),

Control of coupled systems, Lincoln, Nebraska, USA, 4-10 aout 1999 (M. Tucsnak)

9.2.2 Colloques et workshops

"Optimisation de formes" Luminy(CIRM), 21-25 juin ((J. Sokolowski))

"Numerical methods for kinetic and hyperbolic equations" Ferrara Italie, déc. (F. Filbet)

Colloque invité

4^e Journées d'Analyse non Lineiare de l'Université Cadi Ayyad, Marrakech, Maroc, 27-29 avril (J Sokolowski) ,

3^e séminaire sur l'algorithmique numérique et appliquée aux problèmes industriels, 11-12 mars, Rennes (O. Coulaud).

9.2.3 Invitation à des séminaires et cours

séminaires Université de Grenoble (F. Conrad), Université de Savoie (Ch. Kazantsev), CER-MICS (J.R. Roche), Université de Bordeaux : Labri et MAB (O. Coulaud), CEA, École Polytechnique Université de Metz, Weierstrass Institut Berlin (E. Sonnendrücker), Inria-Rocquencourt (J. Sokolowski)

9.3 Enseignement

La majorité des membres du projet sont des enseignants-chercheurs et s'investissent donc largement dans des enseignements universitaires :

- licence de mathématiques : Analyse numérique (M. Tucsnak).
- maîtrise de mathématique : équations aux dérivées partielles, (F. Conrad), analyse numérique et des éléments finis, (J. Sokolowski)
- Cours de D.E.A. : EDP (F. Conrad, M. Tucsnak)
- Cours de D.E.S.S. - I.M.O.I : éléments finis et EDP, (Ch. Kazantsev), différences finies et EDP, Volumes Finis (J.R. Roche), recherche opérationnelle (J Sokolowski), compléments d'analyse numérique (F. Conrad, Ch. Kazantsev), calcul parallèle, méthode de décomposition de domaines (O. Coulaud), Fortran (E. Kazantsev)
- Cours de D.E.S.S. - I.D.C : Option Mathématiques (J.R. Roche)
- Agrégation de Mathématiques, option Analyse Numérique, (J.R. Roche).

10 Bibliographie

Livres et monographies

- [1] V. KOMORNIK, J. SOKOLOWSKI (éditeurs), *Recent Advances in Control of Partial Differential Equations, special issue of Control and Cybernetics*, 28, 3, Systems Research Institute of the Polish Academy of Sciences, 1999.

Thèses et habilitations à diriger des recherches

- [2] J. O'DOWD, *Stabilisation de systèmes distribués au moyen de contrôles dissipatifs non monotones*, Thèse de l'Université Henri Poincaré, Nancy 1, IECN, 1999.

Articles et chapitres de livre

- [3] C. CONCA, J. S. MARTIN, M. TUCSNAK, « Weak solutions of the equations modelling the motion of a rigid body in a viscous fluid », *Communications in Partial Differential Equations*, à paraître.
- [4] C. CONCA, J. S. MARTIN, M. TUCSNAK, « Motion of a rigid body in a viscous fluid », *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Série I* 328, 1999, p. 473–478.
- [5] O. COULAUD, E. SONNENDRÜCKER, E. DILLON, P. BERTRAND, A. GHIZZO, « Parallelisation of Semi-Lagrangian Vlasov Codes », *J. Plasma Phys.* 61, 1999, p. 435–448.
- [6] V. DYMNIKOV, E. KAZANTSEV, C. KAZANTSEV, « On the genetic memory of the chaotic attractor of the barotropic ocean model. », *Chaos, Solitons and Fractals*, à paraître.

- [7] E. FEIREISL, J. O'DOWD, « Stabilisation of a hybrid system: an overhead crane with beam model », *Portugaliae Math*, à paraître.
- [8] E. FEIREISL, J. O'DOWD, « Stabilisation of a hybrid system by non linear non monotone feedback », *SMAI COCV*, à paraître.
- [9] G. FREMIOT, J. SOKOLOWSKI, « Structure de la dérivée eulérienne d'une fonctionnelle de forme différentiable dans le cas d'un ouvert fissuré. », *Siberian Mathematical Journal*, à paraître.
- [10] M. HAYOUNI, A. NOVRUZI, « Sufficient condition for existence of solutions of a free boundary problem », *Quarterly of Applied Mathematics*, à paraître.
- [11] M. HAYOUNI, « Lipschitz continuity of the state function in a shape optimization problem », *Journal of Convex Analysis* 6, 1, 1999, p. 71–90.
- [12] E. KAZANTSEV, « Local Lyapunov exponents of the quasi-geostrophic ocean dynamics. », *Applied Mathematics and Computation* 104, 1999, p. 217–257.
- [13] A. KHLUDNEV, J. SOKOLOWSKI, « Griffith formula and Rice integral for elliptic equations with unilateral conditions in nonsmooth domains », *European Journal of Applied Mathematics* 10, 1999, p. 379–394.
- [14] C.-D. MUNZ, R. SCHNEIDER, E. SONNENDRÜCKER, U. VOSS, « Maxwell's equations when the charge conservation is not satisfied », *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.* 328, 5, 1999, p. 431–436.
- [15] A. NOVRUZI, « Estimation C^α sur le bord pour le gradient de la dérivée par rapport à la forme d'un problème de Neumann en R^3 », *Proceedings of Royal Society of Edinburgh*, à paraître.
- [16] A. NOVRUZI, J. R. ROCHE, « Newton method in 3-d shape optimization problem », *BIT* 40, 1, 1999.
- [17] J. SOKOLOWSKI, A. ZOCHOWSKI, *Topological derivative in shape optimization*, Kluwer academic publishers, à paraître dans Encyclopedia of Optimization.
- [18] J. SOKOLOWSKI, A. ZOCHOWSKI, « On topological derivative in shape optimization », *SIAM Journal on Control and Optimization* 37, 4, 1999, p. 1251–1272.
- [19] J. SOKOLOWSKI, A. ZOCHOWSKI, « Topological derivative for optimal control problems », *Control and Cybernetics* 3, 1999.
- [20] J. SOKOLOWSKI, A. ZOCHOWSKI, « Topological derivatives for elliptic problems », *Inverse Problems* 15, 1, 1999, p. 123–134.
- [21] E. SONNENDRÜCKER, J. ROCHE, P. BERTRAND, A. GHIZZO, « The Semi-Lagrangian Method for the Numerical Resolution of the Vlasov Equation », *J Comput. Phys.* 149, 1999, p. 201–220.
- [22] M. TUCSNAK, G. WEISS, « Simultaneous controllability and applications », *SIAM J. on Control*, à paraître.

Communications à des congrès, colloques, etc.

- [23] E. KAZANTSEV, « Unstable periodic orbits and Attractor of the Lorenz Model. », *in: Proceedings of the Fourth Extended conference Predictability of atmospheric and oceanic circulations.*, French-Russian A.M.Liapunov Institute on Applied Mathematics & Computer Science., p. 96–105, 1999.
- [24] T. LEWINSKI, J. SOKOLOWSKI, A. ZOCHOWSKI, « Justification of the bubble method for the compliance minimization problems of plates and spherical shells », *in: 3rd World Congress of Structural and Multidisciplinary Optimization (WCSMO-3)*, 1999. à paraître.

Rapports de recherche et publications internes

- [25] F. CONRAD, A. MIFDAL, « Uniform stabilization of a hybrid system with a class of nonlinear feedback laws », *Prépublication n° 21*, Institut Elie Cartan, 1999.
- [26] M. HAYOUNI, A. HENROT, N. SAMOUH, « On the Bernoulli Free Boundary Problem and related Shape Optimization Problems », *Prépublication n° 30*, Institut Elie Cartan, 1999, Soumis à Interfaces and Free Boundaries.
- [27] D. HOEMBERG, A. KHLUDNEV, J. SOKOLOWSKI, « On an equilibrium problem for a cracked body with electrothermoconductivity », *Prépublication n° 23*, Institut Elie Cartan, 1999.
- [28] D. HOEMBERG, J. SOKOLOWSKI, « Optimal shape design of inductor coils for surface hardening », *rapport de recherche*, INRIA, 1999.
- [29] L. JACKOWSKA-STRUMILLO, J. SOKOLOWSKI, A. ZOCHOWSKI, « The topological derivative method and artificial neural networks for numerical solution of shape inverse problems », *rapport de recherche*, INRIA, 1999.
- [30] F. Z. SAOURI, « Stabilisation d'une poutre. Etude du taux optimal de décroissance de l'énergie élastique », *Prépublication n° 20*, Institut Elie Cartan, 1999.
- [31] J. SOKOLOWSKI, A. ZOCHOWSKI, « Topological derivatives of shape functionals for elasticity systems », *Prépublication n° 35*, Institut Elie Cartan, 1999.

Divers

- [32] K. AMMARI, M. TUCSNAK, « Pointwise feedback stabilization of Euler Bernoulli beam », soumis.
- [33] P.-E. BERNARD, O. COULAUD, « Parallel Constrained Molecular Dynamics », soumis.
- [34] E. FRÉNOU, P.-A. RAVIART, E. SONNENDRÜCKER, « Asymptotic Expansion of the Vlasov Equation in a Large External Magnetic Field », en préparation, 1999.
- [35] E. FRÉNOU, E. SONNENDRÜCKER, « The finite Larmor radius approximation », 1999.
- [36] E. KAZANTSEV, « Sensitivity of Attractor to external influences: Approach by Unstable Periodic Orbits », soumis.