

*Projet Estime**Estimation de paramètres et modélisation  
en milieu hétérogène**Rocquencourt*

THÈME 4B



*R*apport  
*d'Activité*

2002



# Table des matières

<b>1. Composition de l'équipe</b>	<b>1</b>
<b>2. Présentation et objectifs généraux</b>	<b>1</b>
<b>3. Fondements scientifiques</b>	<b>2</b>
3.1. Problèmes inverses	2
3.1.1. D'où proviennent les problèmes inverses ?	3
3.1.2. Difficultés des problèmes inverses	3
3.2. Méthodes numériques pour les équations aux dérivées partielles	4
3.2.1. Éléments finis et volumes finis	4
3.2.2. Décomposition de domaines	4
3.2.3. Calcul parallèle	5
3.3. Méthodes numériques en optimisation	5
3.3.1. Algorithmes de points intérieurs non-linéaires	6
3.3.2. Autres méthodes numériques	6
3.3.3. Développements logiciels	7
<b>4. Domaines d'application</b>	<b>7</b>
4.1. Inversion sismique	7
4.2. Problèmes inverses en optométrie	8
4.3. Écoulement et transport en milieu poreux pour les problèmes d'environnement	8
4.3.1. Transport de radionucléides autour d'un site de stockage profond	9
4.3.2. Déplacements diphasiques	9
4.3.3. Identification de conductivités hydrauliques dans un aquifère	9
4.4. Quelques applications de l'optimisation	10
<b>6. Résultats nouveaux</b>	<b>10</b>
6.1. Inversion sismique	10
6.2. Problèmes inverses en optométrie	11
6.3. Écoulements en milieu poreux	11
6.3.1. Écoulements en milieu fracturé	11
6.3.2. Transport de contaminants	12
6.3.3. Couplage de codes et langage Caml	12
6.3.4. Couplage de code et calcul distribué	12
6.3.5. Décomposition de domaine espace-temps	13
6.3.6. Discrétisation en temps locale	13
6.3.7. Problèmes hyperboliques non-linéaires	13
6.4. Méthodes numériques pour l'optimisation	13
6.4.1. Tarification dans les réseaux de télécommunication	14
6.4.2. Courbure, géodésiques et moindres carrés	14
6.5. Développement de codes d'optimisation	14
6.5.1. QPB : minimisation d'une fonction quadratique sous contraintes de borne	14
6.5.2. OPINeL : un code d'optimisation de problèmes non linéaires par points intérieurs	15
6.5.3. LIBOPT : une librairie de problèmes d'optimisation	15
6.6. Calcul haute précision	16
<b>7. Contrats industriels</b>	<b>16</b>
7.1. Estimation de profils de température en détonique	16
7.2. Transport de radionucléides autour d'un site de stockage profond	16
7.3. Méthodes de décomposition de domaines globale en temps. Application au transport de déchets radioactifs	16
7.4. Conception de verres ophtalmiques progressifs	17

---

7.5. Tomographie sismique	17
<b>8. Actions régionales, nationales et internationales</b>	<b>17</b>
8.1. Actions nationales	17
8.2. Relations bilatérales internationales	17
<b>9. Diffusion des résultats</b>	<b>18</b>
9.1. Animation de la communauté scientifique	18
9.2. Enseignement universitaire	18
9.3. Autres enseignements	18
9.4. Participation à des colloques, séminaires, invitations	18
9.5. Diffusion de produits	19
9.6. Conseil en entreprises	20
<b>10. Bibliographie</b>	<b>20</b>

# 1. Composition de l'équipe

**Responsable scientifique**

Jérôme Jaffré [DR, Inria]

**Responsable permanent**

Michel Kern [CR]

**Assistantes de projet (avec le projet Ondes)**

Muriel de Bianchi [jusqu'au 31/1]

Hélène Kutniak [du 8/3 au 7/9]

Sandrine Boute [à partir du 1/10]

**Personnel Inria**

François Clément [CR]

J. Charles Gilbert [DR]

**Ingénieur associé**

Arnaud Vodicka [depuis le 1/9]

**Conseiller scientifique**

Guy Chavent [Université Paris 9]

**Collaborateur extérieur**

Hassan Kaddouri [Université du Littoral]

**Chercheur invité**

Tom Russell [University of Colorado, Denver, États-Unis, du 1/9 au 31/12]

Veerappa Gowda [Tata Institute, Bangalore, Inde, du 1/12 au 31/12]

**Chercheurs post-doctorants**

Xavier Jonsson [post-doctorant Inria à l'Université de Northwestern, États-Unis, depuis le 1/3]

Youssef Loukili [Université de Kenitra, Maroc]

Martial Mancip [depuis le 1/10]

**Doctorants**

Philippe Al Khoury [bourse Cifre Auxitrol, Universités de Paris 9 et 10]

Frédéric Delbos [Institut Français du Pétrole, Université de Paris 6]

Vincent Martin [bourse Andra, Université de Paris 9]

Amel Sboui [bourse Inria, Université de Paris 9, à partir du 1/12]

**Stagiaires**

Jean André [DEA, Université de Paris 6, du 15/4 au 14/8]

Linda Nigole [IUP, Université de Paris 9, du 1/4 au 30/6]

Caroline Pineau-Marescal [IUP, Université de Paris 9, du 1/4 au 30/6]

Guillaume Pierre [DESS, Université Paris 6, du 1/4 au 31/8]

Amel Sboui [DEA, Université de Paris 9, du 15/4 au 30/9]

Henriette Sickout-Mavoungou [Maîtrise Université Paris Sud, du 1/3 au 31/7]

## 2. Présentation et objectifs généraux

La modélisation numérique des milieux hétérogènes nécessite la mise en œuvre d'un certain nombre de méthodes spécifiques. L'exemple le plus important d'un tel milieu est le sous-sol. D'une part, on cherche à réaliser des images de sa structure par des méthodes sismiques ou électromagnétiques ; ces problèmes sont par essence des problèmes d'estimation de paramètres. D'autre part, on modélise numériquement divers types d'écoulements en milieu poreux : transport de contaminants pour les problèmes d'environnement, ou déplacements d'hydrocarbures pour l'ingénierie pétrolière. Le cœur d'un réacteur nucléaire est un autre exemple de milieu hétérogène. Dans ce cas, on étudie son comportement neutronique.

Tous ces problèmes ont une physique compliquée et des techniques appropriées doivent être utilisées pour les modéliser numériquement. De plus, les milieux étudiés sont difficiles d'accès et l'estimation de paramètres joue donc un rôle essentiel dans leur modélisation.

S'appuyant sur l'expertise de ses membres concernant les méthodes numériques et les aspects théoriques et pratiques de l'identification, le projet Estime a pour objectif de mettre au point des méthodes à la fois efficaces et précises pour la résolution des problèmes mentionnés ci-dessus.

Les travaux de l'équipe sont centrés sur les domaines d'applications suivants :

- la modélisation numérique des écoulements de fluides en milieu poreux, avec applications aux problèmes d'environnement ou à la simulation de réservoirs pétroliers,
- l'inversion sismique,
- la modélisation numérique en neutronique.

La plupart de ces applications nécessitent de grandes ressources de calcul, et fournissent des exemples naturels pour utiliser le calcul parallèle. Le projet s'intéresse donc aux aspects algorithmiques (décomposition de domaines), ainsi qu'à la mise en œuvre effective de ces méthodes sur divers calculateurs parallèles.

Un aspect important de l'activité du projet provient de ce que les problèmes d'estimation de paramètres sont le plus souvent formulés sous forme de problèmes d'optimisation avec ou sans contraintes. Le projet cherche donc aussi à développer les techniques d'optimisation numérique pour les problèmes de grande taille. Outre les applications mentionnées ci-dessus, cette discipline touche aussi à d'autres domaines qui varient d'année en année ; mentionnons la conception optimale de verres ophtalmiques, l'optimisation de formes aérodynamiques, la tarification dans les réseaux de télécommunication, la tomographie sismique.

## 3. Fondements scientifiques

### 3.1. Problèmes inverses

**Mots clés :** *problème inverse, estimation de paramètre, moindres carrés.*

*Glossaire*

**Problème mal posé** Problème dont la solution n'existe pas, ou si elle existe, n'est pas unique ou ne dépend pas de façon continue des données

**Moindres carrés** On cherche à minimiser l'erreur quadratique entre les mesures réelles et les quantités correspondantes calculées par le modèle pour divers jeux de paramètres

Un problème inverse, ou d'estimation de paramètres, consiste à rechercher les coefficients d'une équation aux dérivées partielles, à partir de mesures sur sa solution. Une formulation aux moindres carrés utilisant les techniques de contrôle optimal est une façon naturelle de poser ce problème.

Les problèmes inverses sont typiquement mal posés, ce qui donne une grande importance à leur formulation. D'autres difficultés spécifiques sont dues à la grande taille des problèmes rencontrés, au calcul exact du gradient de la fonction coût, au choix de la paramétrisation, ainsi qu'aux questions théoriques liées à l'identifiabilité.

### 3.1.1. D'où proviennent les problèmes inverses ?

Considérant une équation aux dérivées partielles ou un système de telles équations, le problème direct consiste à calculer la solution, connaissant les coefficients et les termes sources. Cependant, ces coefficients et ces termes sources sont souvent mal connus. Pour terminer la modélisation, il faut donc encore résoudre le problème inverse : étant données des mesures sur une observation de la solution, calculer une estimation des coefficients et/ou des termes sources de l'équation ou du système d'équations considéré.

La classe de problèmes considérés actuellement porte essentiellement sur l'estimation de coefficients. Ceux-ci peuvent dépendre soit de la variable d'espace, soit du temps, soit être des fonctions de la solution (non-linéarités de l'équation). Le problème d'estimation de paramètres est formulé comme un problème de minimisation au sens des moindres carrés, la variable de minimisation étant le vecteur des paramètres à estimer, et la fonction à minimiser étant une évaluation en norme  $L^2$  de la différence entre l'observation calculée par le modèle avec un jeu donné de paramètres et celle mesurée effectivement. Dans les problèmes abordés le nombre de paramètres sera grand (d'une vingtaine à un million), ce qui conduit à l'utilisation pour l'optimisation de méthodes itératives de type gradient utilisant l'état adjoint.

### 3.1.2. Difficultés des problèmes inverses

Les problèmes inverses, tels qu'ils viennent d'être rapidement décrits, présentent de nombreuses difficultés liées à leur non-linéarité, à leur taille, au fait qu'ils sont très gourmands en temps de calcul et qu'ils sont souvent mal posés. Ils se formulent comme des problèmes d'optimisation, souvent de grande taille.

Depuis les travaux de J.-L. Lions et de G. Chavent au début des années 70 montrant comment résoudre les problèmes d'estimation de coefficients par les techniques de contrôle optimal, le savoir-faire a considérablement évolué et on peut aujourd'hui identifier les directions de recherche suivantes comme essentielles :

- Choix de la formulation : suivant la façon dont est formulé le problème inverse-choix des paramètres à estimer, choix de la fonctionnelle à minimiser-le problème de minimisation associé est plus ou moins bien posé. Une bonne compréhension du problème physique est nécessaire pour faire les bons choix.
- Choix de la paramétrisation : c'est souvent un problème non trivial de choisir la représentation discrète des paramètres à estimer. Ce choix a aussi une influence sur le conditionnement du problème de minimisation associé et sur l'unimodalité de la fonction coût, comme l'a montré le succès des paramétrisations multi-échelles.
- Génération automatique de logiciels : l'écriture de programmes calculant le gradient par la méthode de l'état adjoint est toujours longue et laborieuse, alors que cette procédure pourrait être automatisée. Deux voies, s'appliquant à des situations différentes sont possibles : génération automatique simultanée des programmes de calcul de la fonction à minimiser et de son gradient-ainsi le programme Gradj écrit en Maple et développé au sein de Ident et Estime-, ou génération du seul programme de calcul du gradient à partir d'un programme déjà existant de calcul de la fonction à minimiser-voie choisie par exemple par Odyssée développé au sein du projet Safir. Cette deuxième voie s'impose quand de gros programmes de calcul existent déjà, alors que la première est plus adaptée quand le simulateur peut être réécrit.
- Efficacité dans la résolution du problème direct : dans les problèmes que nous considérons la résolution du problème direct est très coûteuse. On doit donc chercher à améliorer les techniques de résolution de ce problème-amélioration des méthodes numériques, utilisation du parallélisme-ou à utiliser des modèles simplifiés. Une partie de ce travail est fait en dehors du projet (par exemple dans le projet Ondes pour la sismique, et dans le projet Aladin pour l'algèbre linéaire).
- Identifiabilité : la question se pose toujours, de façon théorique et pratique, de savoir si les mesures sont suffisantes pour estimer les paramètres que l'on cherche, et comment l'incertitude sur les mesures se répercute sur les paramètres estimés. Les questions de stabilité et d'identifiabilité sont donc au cœur de l'estimation de paramètres et sont intimement liées au choix de la paramétrisation.

- Optimisation : les problèmes inverses se ramenant à des problèmes d'optimisation, il est nécessaire d'avoir à sa disposition des méthodes d'optimisation efficaces adaptées aux difficultés de ces problèmes, en particulier non-linéarité, grande taille, coût important de la fonction à minimiser.

## 3.2. Méthodes numériques pour les équations aux dérivées partielles

**Mots clés :** *élément fini, volume fini, calcul parallèle, décomposition de domaine.*

*Glossaire*

**Décomposition de domaine** Technique de résolution d'un problème qui consiste à partitionner son domaine de définition en plusieurs sous-domaines.

**MPI, Message Passing Interface** Spécification d'une bibliothèque standard permettant de faire communiquer des processus s'exécutant sur des processeurs différents d'une machine parallèle.

Les méthodes de discrétisation appropriées pour les problèmes en milieu hétérogène sont les volumes finis centrés sur les mailles et les éléments finis mixtes ou mixtes-hybrides. Les méthodes de décomposition de domaine sans recouvrement permettent de décomposer le domaine de calcul en sous-domaines sur lesquels sont définis des modèles physiques différents. La mise en œuvre parallèle est une nécessité pour les problèmes de grande taille.

### 3.2.1. Éléments finis et volumes finis

Les méthodes de volumes finis centrés sur les mailles sont particulièrement adaptées aux problèmes où les coefficients varient beaucoup. C'est le cas, en particulier, des problèmes concernant les écoulements en milieu poreux. Ainsi la composante normale vitesse de Darcy,  $\vec{u} = -K \overrightarrow{\text{grad}} P$ , reste régulière même lorsque la perméabilité absolue  $K$  varie beaucoup, pour satisfaire les propriétés de conservation des différents fluides (phases). Cette situation se retrouve dans d'autres applications comme la diffusion neutronique ou les semi-conducteurs. En utilisant les moyennes harmoniques de  $K$ , les méthodes de volumes finis centrés sur les mailles permettent d'obtenir de bonnes approximations de la vitesse de Darcy, même lorsque  $K$  varie beaucoup, tout en respectant les propriétés de conservation au niveau de la maille de discrétisation.

Les méthodes d'éléments finis mixtes sont une généralisation de ces méthodes de volumes finis centrés sur les mailles qui, s'appuyant sur des formulations variationnelles, ont permis de traiter le cas des maillages non-structurés utilisant des mailles triangulaires ou tétraédriques. Les éléments finis mixtes ont permis aussi de traiter le cas où  $K$  n'est plus ni un coefficient scalaire ni même une matrice diagonale, mais une matrice pleine en dimension 2 ou 3. Cependant ces méthodes sont plus coûteuses que les méthodes de volumes finis puisqu'il faut résoudre un système linéaire pour déduire la vitesse  $\vec{u}$  de la pression  $P$ . De plus, étant plus abstraites car basées sur la formulation variationnelle, ces méthodes ont moins d'attrait pour les physiciens.

Une direction de recherche prometteuse explorée actuellement consiste à chercher des transformations algébriques permettant de calculer une approximation mixte en utilisant seulement des inconnues de type volume fini, ce qui permet de concilier la souplesse de l'approximation mixte et l'efficacité numérique des volumes finis.

### 3.2.2. Décomposition de domaines

Les méthodes de décomposition de domaines peuvent être utilisées en vue d'une implémentation parallèle efficace, mais elles peuvent être aussi un outil pour assembler des domaines dans lesquels des modèles physiques différents doivent être utilisés.

Pour les écoulements finis en milieux poreux, on peut être ainsi amené à utiliser un modèle monophasique dans une partie du domaine qui est saturée, un modèle diphasique ou triphasique dans une région qui est non-saturée, un modèle double porosité là où le milieu est fracturé, et des failles peuvent traverser le milieu. Parfois, même si le modèle ne change pas, une variation brusque du milieu-changement de type de roche-introduit des conditions de transmission non-standard sur l'interface.

Pour ce genre de problèmes, les méthodes de décomposition de domaine sans recouvrement sont appropriées. Elles permettent de faire coïncider les sous-domaines de calcul avec les sous-domaines physiques. Évidemment, ces méthodes doivent pouvoir utiliser des pas de temps locaux car les échelles de temps associées aux différents sous-domaines peuvent varier beaucoup.

### 3.2.3. Calcul parallèle

Comme cela a été souligné plus haut, aussi bien les problèmes inverses que la modélisation en milieu poreux sont de gros consommateurs de calcul. Il est donc naturel de se tourner vers les techniques utilisant le calcul parallèle, tant pour réduire le temps de calcul, que pour accéder à une mémoire plus importante.

Une classe de méthodes générales pour obtenir des algorithmes parallèles pour la résolution d'équations aux dérivées partielles sont les méthodes de décomposition de domaine. Ces méthodes ont été étudiées de façon intensive dans le cas des problèmes elliptiques. Elles constituent actuellement le moyen le plus général d'obtenir des applications portables et efficaces sur une large gamme d'ordinateurs parallèles. Leur mise en œuvre effective est facilitée par l'existence de bibliothèques telles que MPI. Nous étudions des extensions de leur champ d'application dans différentes directions :

- Pour la simulation d'écoulements en milieu poreux. Il s'agit d'adapter la méthode à des problèmes avec des conditions de raccord non-standards sur l'interface, par exemple conditions de discontinuité, conditions non-linéaires, conditions non-locales.
- Pour le calcul de criticité dans les réacteurs nucléaires qui se formule comme un problème aux valeurs propres non-symétrique. Nous proposons d'étendre à ce problème la méthode de synthèse modale qui n'a été utilisée jusqu'ici que dans le cas d'opérateurs symétriques.
- Pour la simulation de la propagation des ondes par des méthodes d'éléments finis. L'utilisation des éléments d'ordre élevés développés au sein du projet Ondes conduit à une méthode explicite pour laquelle la mise en œuvre est plus simple que pour les problèmes stationnaires.

## 3.3. Méthodes numériques en optimisation

**Mots clés :** *optimisation sous contraintes, algorithme de points intérieurs, programmation quadratique successive (PQS), algorithme de quasi-Newton.*

*Glossaire*

**Algorithmes de points intérieurs** Méthodes numériques d'optimisation adaptées à la résolution de problèmes présentant des conditions de complémentarité, comme les problèmes avec contraintes d'inégalité, l'optimisation semi-définie, les inéquations variationnelles. Dans cette approche, les itérés sont maintenus dans l'intérieur du domaine admissible. On les qualifie de non-linéaires s'ils sont conçus pour résoudre des problèmes non linéaires.

**Programmation quadratique successive (PQS, SQP en anglais)** méthode du type Newton pour les problèmes d'optimisation avec contraintes, qui transforme ce dernier en une suite de problèmes quadratiques sous contraintes linéaires ; voir [1].

**Méthodes de quasi-Newton** Techniques numériques d'optimisation permettant de construire une approximation d'un hessien à partir des dérivées premières. Celles-ci permettent d'éviter le calcul coûteux des dérivées secondes et d'accélérer la convergence des algorithmes du premier ordre.

Les problèmes inverses ou d'estimation de paramètres considérés dans le projet Estime se formulent en général comme des problèmes d'optimisation d'une fonctionnelle de moindres carrés. C'est pourquoi il existe dans le projet une activité de recherche dans le domaine de l'optimisation.

En termes généraux, on s'intéresse aux méthodes numériques pour résoudre les problèmes qui reviennent à minimiser un critère scalaire  $x \in \mathbb{R}^n \mapsto f(x) \in \mathbb{R}$ , les variables à optimiser  $x$  devant éventuellement vérifier des contraintes d'égalité  $c_E(x) = 0$  et d'inégalité  $c_I(x) \leq 0$ , où  $c_E : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{m_E}$  et  $c_I : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{m_I}$ . Nous nous plaçons dans le contexte de l'optimisation différentiable, où les fonctions  $f$ ,  $c_E$  et  $c_I$  sont régulières, par exemple de classe  $C^1$ .

### 3.3.1. Algorithmes de points intérieurs non-linéaires

Les méthodes de points intérieurs (PI) sont récemment apparues comme pouvant offrir une approche intéressante pour résoudre des problèmes d'optimisation non-linéaires avec contraintes. Ces méthodes ont été introduites au milieu des années 80 en optimisation linéaire (minimisation d'un critère linéaire sous des contraintes affines). Elles ont donné lieu à de nombreuses études après qu'à la suite des travaux de Karmarkar on ait montré qu'elles pouvaient être beaucoup plus efficaces que l'algorithme du simplexe jusqu'alors utilisé, notamment lorsqu'il y a un grand nombre de contraintes d'inégalité. Les algorithmes adaptés à l'optimisation linéaire sont à présent bien stabilisés.

Les succès remportés par les méthodes de PI en optimisation linéaire avec un grand nombre de contraintes ont conduit de nombreux chercheurs à étendre les concepts de base de l'approche à d'autres types de problèmes d'optimisation. Ces dernières années, d'importants efforts ont été fournis pour développer ces techniques en optimisation semi-définie positive (critère linéaire et contraintes de semi-définie positivité sur la valeur matricielle prise par une application affine des inconnues), en optimisation sous contraintes coniques (généralisation du problème précédent), en optimisation convexe, etc ...

L'application de l'approche par PI aux problèmes d'optimisation non-linéaires généraux est plus récente et constitue une part importante de nos recherches. Ces problèmes sont très difficiles à résoudre, d'une part du fait des contraintes d'inégalité (parce que l'on ne sait pas à l'avance quelles vont être les contraintes  $c_i$ ,  $i \in I$ , qui seront nulles - on dit actives - en la solution) et d'autre part du fait de la non convexité éventuelle de ces problèmes. L'approche par PI repousse astucieusement « à l'infini » la première difficulté, en introduisant un paramètre  $\mu > 0$  perturbant les conditions d'optimalité, là où la combinatoire du problème s'exprime (dans les conditions de complémentarité). On fait tendre celui-ci progressivement vers zéro, pour forcer les itérés à se rapprocher de la solution. Cette technique permet donc de maîtriser la combinatoire intrinsèque de ces problèmes, liée à la détermination des contraintes actives. La seconde difficulté est plus classiquement surmontée par l'utilisation de techniques quasi-Newtoniennes ou d'une approche combinant région de confiance ou recherche linéaire et gradient conjugué tronqué.

Le projet développe un code d'optimisation non linéaire généraliste fondé sur cette approche : OPINEL, voir la section 6.5.2.

### 3.3.2. Autres méthodes numériques

Dans la résolution des grands problèmes, le calcul des dérivées premières et secondes reste une difficulté importante, malgré les progrès réalisés en différentiation automatique. En optimisation, les *méthodes de quasi-Newton* ont été conçues pour permettre de construire une approximation d'un hessien à partir de gradients calculés en divers points. On comprend bien en effet que la variation du gradient lorsque l'on passe d'un itéré à l'autre donne de l'information sur les dérivées secondes. Cette technique qui s'est beaucoup développée dans les années 70 et 80 continue à être étudiée pour s'appliquer à des contextes particuliers ou nouveaux. Citons :

- l'optimisation sur les variétés,
- les méthodes de points intérieurs,
- les problèmes de moindres-carrés non linéaires (pour approcher les dérivées secondes des résidus et accélérer ainsi l'algorithme de Gauss-Newton),
- génération dynamique de préconditionneurs quasi-newtoniens dans la résolution de systèmes linéaires en cascade.

Le projet ne se cantonne pas à ces deux aspects de l'optimisation (points intérieurs et quasi-Newton), mais contribue au développement d'autres méthodes numériques, notamment en optimisation quadratique (activation de contraintes, gradient avec projection, relaxation lagrangienne) et en optimisation à deux niveaux.

### 3.3.3. Développements logiciels

Le projet participe à l'enrichissement de la librairie de codes d'optimisation MODULOPT<sup>1</sup>, en y insérant divers logiciels. Les contributions en cours de développement sont :

- OPINEL : code d'optimisation non linéaire généraliste utilisant les points intérieurs,
- QPB : optimisation de grands problèmes quadratiques convexes, utilisant le gradient conjugué, l'activation de contraintes, le gradient avec projection et la relaxation lagrangienne,
- LIBOPT : un environnement informatique permettant de tester de problèmes venant de diverses collections (CUTE, COPS, MODULOPT) et écrits en langage variés (FORTRAN, C, C++, MATLAB, SCILAB, AMPL).

## 4. Domaines d'application

### 4.1. Inversion sismique

**Participants :** Guy Chavent, François Clément, J. Charles Gilbert.

**Mots clés :** *sismique, problème inverse, migration.*

*Glossaire*

**MBTT, Migration-Based TravelTime** Nom de la méthode d'inversion sismique développée à l'Inria-Rocquencourt. Après séparation des propriétés de propagation et de réflexion dans les paramètres recherchés, la méthode MBTT consiste essentiellement en l'introduction d'une inconnue de réflectivité en temps de parcours reliée à la réflectivité en profondeur par une étape de migration.

**Migration** Opération consistant à estimer une image de la réflectivité en profondeur du sous-sol à partir des données de sismiques-réflexion en réalisant une inversion linéaire approchée de l'équation des ondes. Elle dépend d'une hypothèse sur le propagateur dans le milieu.

**Propagateur** Inconnue représentant la partie lisse du paramètre vitesse de propagation des ondes, c'est-à-dire ses composantes basses fréquences spatiales.

Les recherches du projet ont pour but d'automatiser autant que possible l'inversion sismique. Elles sont fondées sur la méthode MBTT associée à différents modèles de propagation : équation des ondes acoustiques, approximation paraxiale, méthode de rayons.

L'inversion sismique consiste à construire une image du sous-sol à partir de la mesure en surface de la réponse de ce sous-sol à des ébranlements sismiques. Ces réponses représentent la réflexion des ondes sismiques sur les interfaces entre les couches géologiques (réflecteurs).

L'état actuel de l'art de l'ingénieur consiste à faire une inversion « manuelle » des données sismiques, manuelle signifiant simplement qu'il n'y a pas d'algorithme conduisant automatiquement à la solution du problème inverse. Par ailleurs, il est certain que ces méthodes rencontrent de grandes difficultés quand la géométrie est compliquée ou dans le cas des fonds marins (problème des réflexions multiples).

L'inversion de données sismiques est, a priori, un cas particulier d'estimation de paramètres dans une équation aux dérivées partielles : il s'agit d'estimer la vitesse du milieu en chaque point du sous-sol, ce qui donne ainsi l'image cherchée de ce sous-sol. Mais, à la différence de nombre de problèmes d'estimation de paramètres, dans la pratique, l'inversion sismique n'est pas en général un problème mal posé au sens habituel, car les données sont extrêmement redondantes. En effet, une fois que l'on a fait une hypothèse sur la vitesse avec laquelle les ondes acoustiques se propagent dans le sous-sol, en utilisant un opérateur de migration, les données enregistrées pour chaque tir permettent d'obtenir une image stable du sous-sol, mais limitée à la zone illuminée par le tir considéré. Ces images ne sont acceptables que si elles se superposent bien d'un tir à

<sup>1</sup> <http://www-rocq.inria.fr/estime/modulopt>.

l'autre, ce qui n'a lieu que si l'hypothèse faite au départ sur la vitesse est correcte. C'est la détermination de cette « vitesse de migration » qui constitue la difficulté principale de l'inversion sismique : il s'agit d'arriver à mettre en cohérence les nombreuses images complexes du sous-sol obtenues à partir d'une campagne sismique pouvant comporter plusieurs centaines de tirs.

La formulation standard par moindres carrés est inefficace pour la détermination d'une vitesse de migration satisfaisante car de nombreux minima locaux rendent impossible la détermination du minimum global par des méthodes d'optimisation locales. Le nombre d'inconnues déterminant (la partie lisse de) la vitesse (quelques centaines à quelques milliers) et le coût d'une évaluation du critère (qui nécessite la résolution d'une équation des ondes par tir) limitent beaucoup l'intérêt des algorithmes d'optimisation globale. On est donc conduit à chercher des reformulations du problème susceptibles d'être résolues par des méthodes d'optimisation locale.

La reformulation MBTT (Migration-Based TravelTime), développée précédemment dans le projet Ident, a montré sa capacité à élargir de façon spectaculaire le domaine d'attraction du minimum global (thèses de F. Clément, R.-E. Plessix et B. Lavaud).

Ces travaux étaient soutenus depuis 1995 par l'industrie pétrolière sous la forme du consortium SIGMA. Malheureusement les concentrations intervenues dans ce milieu (acquisition d'Amoco par BP et d'Elf par Total Finis) ont amené à arrêter ce consortium début 1999.

Les axes de recherche actuels portent sur l'exploitation des possibilités ouvertes par ces travaux en vue de traiter des données plus complexes (prise en compte des multiples, inversion 3-D du fond de l'eau), en collaboration avec Ifremer.

## 4.2. Problèmes inverses en optométrie

**Participants :** Guy Chavent, François Clément.

**Mots clés :** *équation du transfert radiatif, paramétrisation, analyse de sensibilité.*

Les mesures spectroscopiques étant de plus en plus précises et accessibles, elles ouvrent la possibilité à de nouvelles méthodes non intrusives pour évaluer des caractéristiques de gaz dans des milieux semi-transparents soumis à des hautes températures et/ou des hautes pressions, telles la température ou la concentration. Le problème direct correspond alors à la résolution de l'équation du transfert radiatif qui exprime le bilan énergétique entre les phénomènes d'émission et d'absorption du rayonnement pour chaque longueur d'onde considérée. L'analyse de la sensibilité des luminances évaluées en sortie par rapport aux distributions de température et de coefficient d'absorption monochromatique détermine des indicateurs permettant de guider le choix des paramètres à estimer. Ensuite, l'inversion consiste à mettre en œuvre un algorithme de minimisation, les dérivées étant calculées de façon efficace par la technique de l'état adjoint.

## 4.3. Écoulement et transport en milieu poreux pour les problèmes d'environnement

**Participants :** Guy Chavent, François Clément, Jérôme Jaffré, Michel Kern, Jean Roberts (Projet Ondes).

**Mots clés :** *écoulement en milieu poreux, hydrogéologie, pollution, environnement, simulation de réservoir pétrolier, élément fini, volume fini, décomposition de domaine, problème inverse.*

Les problèmes d'hydrogéologie sont des problèmes d'écoulement en milieu poreux dont la physique peut être très compliquée. L'objectif du projet est la mise au point de techniques performantes pour de tels problèmes, en particulier des méthodes basées sur les éléments finis mixtes et la décomposition de domaine sans recouvrement. Les problèmes d'estimation de paramètres sont aussi très importants car on n'a accès à la connaissance du sous-sol que très localement.

La création récente du projet Estime correspond à un redémarrage de la modélisation numérique d'écoulements en milieu poreux en privilégiant les problèmes d'environnement, alors que dans le passé, l'accent avait été surtout mis sur les problèmes de réservoirs pétroliers.

Notre recherche dans ce domaine est orientée principalement suivant trois directions. Une première direction concerne la mise au point de techniques numériques performantes pour traiter des problèmes à la

physique de plus en plus compliquée. Vu le caractère hétérogène du sous-sol, il s'agit d'associer domaines de calcul et régions homogènes et de coupler l'ensemble grâce aux méthodes de décomposition de domaines, avec éventuellement utilisation d'éléments joints quand les maillages ne se raccordent pas. Une deuxième direction concerne la modélisation des milieux fracturés. Ces deux sujets font l'objet d'une collaboration avec J. Roberts du projet Ondes. Enfin nous mentionnerons comme troisième direction de recherche le problème de l'estimation des coefficients apparaissant dans les modèles : perméabilité absolue, perméabilités relatives, pression capillaire à partir des mesures disponibles.

Sur la modélisation directe comme sur les problèmes inverses une collaboration suivie existe avec P. Ackerer et R. Mosé de l'Institut de Mécanique des Fluides de l'Université Louis Pasteur à Strasbourg.

#### **4.3.1. Transport de radionucléides autour d'un site de stockage profond**

Un projet à long terme consiste à construire un modèle numérique du déplacement des radionucléides dans le sous-sol autour d'un site de stockage profond de déchets nucléaires dans le cadre d'études dirigées par l'Andra (Agence Nationale pour les Déchets Radioactifs, J. Jaffré fait partie de son Conseil Scientifique). Le déplacement est de type miscible (une seule phase) car les radionucléides sont dissous dans l'eau. Cela conduit à un système couplé de plusieurs équations de type diffusion-convection, modélisant le transport de chacun des radionucléides, et d'une équation elliptique, calculant le champ des vitesses de Darcy. Évidemment, le milieu considéré n'est pas homogène et est en fait composé de diverses couches géologiques. De plus, il faut prendre en compte la présence de fractures qui sont, dans les cas qui nous intéressent, des milieux poreux bidimensionnels de grande perméabilité. Si ces fractures ne sont pas trop nombreuses, on les modélisera individuellement. Lorsqu'elles sont trop nombreuses on doit avoir recours à des modèles appropriés (modèles à double porosité par exemple).

Les méthodes de décomposition de domaines sans recouvrement sont pour nous surtout un moyen de coupler les modèles différents utilisés dans les différentes parties du domaine, y compris les fractures les plus grandes. Elles doivent être associées aux méthodes d'éléments joints pour permettre d'associer entre eux des sous-domaines dont les maillages ne se raccordent pas. Enfin, les échelles de temps pouvant être très différentes suivant les sous-domaines, les techniques de pas de temps locaux doivent être utilisées. Rappelons à ce propos que l'ordre de grandeur de la durée d'une simulation pour le problème considéré est la dizaine de milliers d'années.

#### **4.3.2. Déplacements diphasiques**

Malgré sa relative simplicité physique, le modèle des déplacements diphasiques en milieu poreux reste un problème modèle très intéressant. Dans le cas incompressible, il se ramène à une équation de diffusion-convection non-linéaire dont le terme de diffusion dégénère couplée à une équation elliptique.

On s'intéresse au cas d'un milieu hétérogène où les hétérogénéités se traduisent par des discontinuités dans les non-linéarités du système au passage d'un type de roche à l'autre. Cependant certaines quantités restent continues (composante normale des vitesses de Darcy et pression de chacune des phases, pression capillaire) alors que d'autres sont discontinues (saturation et pression globale). Cela conduit naturellement à l'utilisation de techniques de décomposition de domaines sans recouvrement non-linéaires et avec des conditions aux interfaces non-standards.

Pour la discrétisation, les méthodes de volumes finis basées sur les éléments finis discontinus et les éléments finis mixtes-hybrides sont particulièrement appropriées. Dans ce cadre, on utilisera des méthodes de décomposition de domaine sans recouvrement. Là encore, on étudiera l'utilisation de pas de temps locaux appropriés à la physique des différents domaines. Les techniques étudiées devront être assez robustes pour permettre le passage au cas limite sans diffusion capillaire.

#### **4.3.3. Identification de conductivités hydrauliques dans un aquifère**

Comme il n'est pas possible d'avoir une connaissance directe des conductivités hydrauliques dans un milieu saturé en eau, il est nécessaire de les estimer à partir des mesures piézométriques disponibles en un certain nombre de puits. Il s'agit en fait de l'estimation du coefficient de diffusion dans une équation parabolique. On utilise pour cela une méthode de moindres carrés.

Cependant, d'une part le nombre de mesures est très insuffisant pour estimer une valeur de conductivité par maille, mais d'autre part ce coefficient est en réalité constant par zone en raison de la géologie, les zones n'étant pas connues. Pour en tenir compte, différentes approches sont possibles. Par exemple, on peut régulariser la fonction à minimiser par la norme  $L^1$  du gradient du paramètre à estimer, comme cela a été proposé par K. Kunisch. Des techniques semblables sont utilisées en traitement d'images. Une autre façon de procéder consiste à utiliser des indicateurs de raffinement introduits par G. Chavent et qui permettent de découper le domaine en un nombre « minimum » de zones où les paramètres sont constants. Ces indicateurs sont calculés à partir du gradient de la fonction à minimiser, considérée comme dépendant d'un paramètre par maille de discrétisation ; le gradient étant calculé par la méthode de l'état adjoint.

## 4.4. Quelques applications de l'optimisation

**Participants :** Guy Chavent, J. Charles Gilbert.

**Mots clés :** *verres ophtalmiques, tomographie sismique, tarification dans les réseaux de télécommunication.*

Les applications de l'optimisation sont très nombreuses. Outre l'estimation de paramètres, la commande optimale et les problèmes de tarification dans les réseaux de télécommunication sont des sources importantes de problèmes d'optimisation.

Les applications de l'optimisation sont nombreuses, variées et constamment renouvelées. Le modèle décrit une situation où il s'agit de déterminer un ensemble de paramètres de manière à minimiser un critère. Les paramètres doivent souvent satisfaire certaines contraintes toujours difficiles à prendre en compte. Parfois, il s'agit de modèles en dimension infinie ; qui demandent donc que l'on passe par une phase de discrétisation (en espace et/ou en temps).

Outre les problèmes d'estimation de paramètres déjà mentionnés (en sismique et pour les écoulements en milieu poreux), on présente quelques applications en cours d'étude pour lesquelles on trouvera des informations plus loin.

- *La conception optimale de verres ophtalmiques progressifs.* Pour concevoir des verres ophtalmiques progressifs destinés à corriger la presbytie, on est amené à déterminer l'équation d'une surface progressive (placée en général sur la face avant du verre) de manière à obtenir les propriétés de correction prescrites pour un porteur donné (puissance du verre pour la vision de près et de loin). La géométrie particulière de celle-ci en fait une surface asphérique et introduit un astigmatisme de surface, de même nature que l'astigmatisme cornéen d'un porteur. Le contrôle de cet astigmatisme est une tâche importante lors de la conception d'un design progressif. Cela conduit à un problème de moindres carrés non linéaire avec contraintes d'égalité et d'inégalité, où l'on cherche à minimiser les écarts entre des grandeurs de nature géométrique ou optique évaluées en certains points de la surface progressive ou pour certaines directions de regard, et celles souhaitées pour le verre optimisé. Ce travail a été proposé par la société ESSILOR (Saint-Maur-des-Fossés). Pour plus d'information, voir la section 7.4.
- *Tomographie sismique*, où nous intervenons sur les méthodes numériques d'optimisation et pas directement sur la modélisation. Voir la section 7.5.
- *Tarification dans les réseaux de télécommunication.* Voir la section 6.4.1.

## 6. Résultats nouveaux

### 6.1. Inversion sismique

**Participants :** Guy Chavent, François Clément, Youssef Loukili.

**Mots clés :** *estimation du dispositif d'acquisition, formulation en temps, migration.*

Durant son stage de post-doc, Y. Loukili a poursuivi le développement du code Fortran 90 de C. Leleu pour la détermination du dispositif d'acquisition à partir de données de sismique très haute résolution 3-D. Les

modifications ont porté principalement sur l'écriture et l'intégration d'un module d'entrées/sorties adapté au format industriel SEG-Y, sur la gestion de la mémoire (les données sismiques sont maintenant lues tir par tir) et sur des spécificités liées à la gestion de données sismiques réelles (nombre de tir variable par ligne, sens de navigation ayant une influence directe sur la gestion du masque de migration). Ces modifications ont été validées sur des données réelles fournies par l'Ifremer.

## 6.2. Problèmes inverses en optométrie

**Participants :** Philippe Al Khoury, Guy Chavent, François Clément.

**Mots clés :** *équation du transfert radiatif, métrologie avionique, détonique, paramétrisation, analyse de sensibilité.*

Les travaux portant sur l'étude du problème inverse associé à l'équation du transfert radiatif se sont développés dans le cadre de deux applications distinctes.

La thèse de P. Al Khoury s'est poursuivie sous la direction de G. Chavent, P. Hervé (LEEE, Université de Paris 10 à Ville d'Avray) et F. Clément en relation avec la société Auxitrol spécialisée en métrologie avionique et spatiale. L'étude sur le gaz carbonique ( $CO_2$ ) réalisée dans le cadre du projet européen Aerojet a été finalisée par la conception et la mise en œuvre d'un appareil de mesure non intrusive. Une étude similaire portant sur l'eau ( $H_2O$ ) a débuté dans le cadre du projet européen Rapiere. Pour cette molécule, de nouvelles paramétrisations ont été testées (fonctions constantes par morceaux, splines d'ordre 1 et 3) et l'analyse de sensibilité a permis de quantifier le nombre de paramètres indépendants identifiables pour chacune de ces paramétrisations. Ensuite, la méthode a été validée par une inversion de mesures réelles sur un statoréacteur. Par ailleurs, les tables de propriétés spectroscopiques relatives à la molécule d'eau (permettant de générer les tables de coefficient d'absorption) ont également été obtenues par inversion à partir de spectres expérimentaux, le problème direct ayant été validé par comparaison avec les spectres théoriques fournis par le logiciel FASCODE. Ce travail a été réalisé en liaison avec la thèse de P. Chelin sous la direction de P. Hervé, dont la soutenance est prévue en janvier 2003.

G. Chavent et F. Clément ont poursuivi leurs travaux sur l'identification de profils de température pendant la détonation d'un explosif liquide (le nitrométhane) en relation avec G. Baudin (Centre d'Études de Gramat) et V. Bouyer (LEEE, Université de Paris 10 à Ville d'Avray). Dans ce cas, le phénomène physique de l'amorçage de la détonation n'étant pas complètement connu, le but est de quantifier la validité d'un modèle physique. Contrairement à l'étude précédente, les coefficients d'absorption du milieu ne sont pas connus, puisque les substances en présence, issues de la décomposition de l'explosif, sont mal connues. Le modèle proposé se décomposait en trois phases : apparition d'un premier choc, puis apparition d'un second choc (onde de superdétonation) qui rattrape le premier, et enfin établissement de l'onde de détonation. La nature des profils des paramètres nous a suggéré une paramétrisation de la température par une loi de conservation scalaire (apparition et propagation de chocs) et du coefficient d'absorption par interpolation en fonction de la température (les différentes substances étant principalement liées à des niveaux de température distincts). L'analyse de sensibilité nous a permis d'isoler, pour un niveau de bruit donné, les paramètres identifiables de façon stable. Le résultat principal est que les paramètres les plus sensibles sont le délai d'apparition du front de superdétonation et sa valeur. Ensuite, l'inversion de mesures synthétiques pour quatre cas tests nous a permis de confirmer ces résultats. Cette étude a mené à la réalisation du logiciel d'inversion de profils de température IPTEMP comportant environ 10000 lignes de code MATLAB. La confrontation du code à des mesures réelles nous a permis de suggérer une modification du modèle physique en ajoutant l'apparition d'un choc intermédiaire avant la superdétonation, ce qui rejoindrait d'autres modèles proposés dans la littérature.

## 6.3. Écoulements en milieu poreux

**Mots clés :** *fractures, double porosité, décomposition de domaine, problème inverse, changement d'échelles.*

### 6.3.1. Écoulements en milieu fracturé

**Participants :** Jérôme Jaffré, Vincent Martin, Jean Roberts (Projet Ondes).

L'échelle considérée est telle que les fractures ou failles, considérées elles-mêmes comme un milieu poreux de grande perméabilité, peuvent être modélisées individuellement. Les fractures sont alors représentées par des interfaces. Des techniques habituelles de sous-structuration (décomposition de domaines sans recouvrement) permettent alors de se ramener à un problème sur les interfaces.

J. Roberts, J. Jaffré et V. Martin ont étudié la validité du modèle présenté dans la thèse de C. Alboin et l'ont étendu au cas où la fracture est remplacée par une barrière géologique (faible perméabilité). Toute une gamme de modèles dépendant d'un paramètre a pu ainsi être mise en place. Une étude théorique et numérique a permis la validation des modèles pour certaines valeurs du paramètre [10]. Par ailleurs, comme l'extension du modèle a été réalisée en faisant simplement une « moyenne » adéquate des équations, il est utile poursuivre les travaux théoriques : une étude asymptotique, guidée par certains travaux de Sanchez-Palencia, pourra montrer plus précisément dans quelles conditions les modèles approchent l'écoulement « réel ».

### 6.3.2. *Transport de contaminants*

**Participants :** Mohamed Belhadj (Projet M3N), Jean-Frédéric Gerbeau (Projet M3N), Jérôme Jaffré, Michel Kern, Vincent Martin.

Un projet a été monté entre J.-F. Gerbeau et son doctorant M. Belhadj (projet M3N) d'une part et J. Jaffré, V. Martin, M. Kern d'autre part. Ce projet vise à réaliser un code d'écoulement et de transport 3D, écrit en C++, qui permette de faire de la décomposition de domaines. Le code vise à être une bibliothèque assez large d'éléments finis : jusqu'à présent, des éléments finis de type Lagrange ( $P1$  et  $P2$ ) étaient principalement utilisés. Des éléments finis mixtes de Raviart-Thomas ont été ajoutés.

Le code d'écoulement est basé sur les méthodes mixtes hybrides. La partie transport utilise une méthode mixte pour l'opérateur de diffusion et une méthode de type Galerkin discontinu pour la convection. Un limiteur de pente adéquat doit être utilisé.

L'étape suivante sera la mise en place de la décomposition de domaines non-conforme d'un côté, et des méthodes utilisant des pas de temps variables pour le traitement de la convection notamment.

### 6.3.3. *Couplage de codes et langage Caml*

**Participants :** François Clément, Jérôme Jaffré, Michel Kern, Martial Mancip, Vincent Martin, Arnaud Vodicka, Pierre Weis (Projet Cristal).

La modélisation de phénomènes complexes tel le transport de contaminant dans le sous-sol nécessite de prendre en compte plusieurs aspects physiques intervenant à des échelles de temps et d'espace différentes. L'une des techniques utilisées est la méthode de décomposition de domaine sans recouvrement avec maillages non raccordants : chaque sous-domaine est affecté à un aspect physique distinct et le couplage entre les sous-domaines repose sur des problèmes posés aux interfaces.

L'une des difficultés de la mise en œuvre d'un tel couplage réside dans la réalisation de l'interface informatique entre les différents solveurs pré-existants à coupler : comment gérer le transit de l'information et quel algorithme implémenter pour assurer la convergence de la méthode (par exemple, basé sur des conditions de type Robin aux interfaces) ? Ce nouvel axe de recherche consiste à évaluer les facilités que pourraient apporter un langage de haut niveau, tel CAML, quant à la génération « automatique » de ces interfaces informatiques.

A. Vodicka et F. Clément, en collaboration avec P. Weis (du projet Cristal) et les autres membres du projet Estime, ont commencé à analyser le problème dans le cas simplifié du raccord de maillages pour le problème du Laplacien.

### 6.3.4. *Couplage de code et calcul distribué*

**Participants :** Michel Kern, Martial Mancip.

Une autre approche du couplage de code propose d'utiliser le calcul distribué pour coupler des codes situés sur des sites (informatiques) distincts. Ce travail est effectué dans le cadre de l'ACI Grid (Globalisation des ressources informatiques et des données) du Ministère de la Recherche. Le projet pluridisciplinaire HydroGrid, dont le coordinateur est M. Kern, regroupe des équipes de numériciens (Projets Estime et Aladin),

d'hydrogéologies et d'informaticiens (projet Paris) pour développer des modèles couplés en hydrogéologie. Les objectifs principaux sont les modèles d'écoulement avec densité variable (infiltration eau douce - eau salée), le transport réactif, et les réseaux de fracture.

M. Mancip travaille actuellement sur le premier de ces modèles. Il cherche à évaluer la possibilité de résoudre le problème global par une méthode de Newton-Krylov (sans former le Jacobien), et va créer un code couplé basé sur les travaux du projet Paris (Paco++).

### 6.3.5. Décomposition de domaine espace-temps

**Participants :** Michel Kern, Henriette Sickout-Mavoungou.

Dans la mesure où différentes régions du domaine d'étude présentent des propriétés physiques très différentes (variant parfois sur 6 ordres de grandeur), il est naturel de vouloir adapter la méthode numérique utilisée en fonction des caractéristiques du milieu considéré. En particulier, selon que le phénomène dominant est la convection où la diffusion, on sera amené à utiliser des pas de temps différents. Une possibilité est d'utiliser une méthode de décomposition de domaines espace-temps : on résout globalement le problème sur chaque sous domaine sur l'intervalle de temps complet (avec des méthodes éventuellement différentes, et des pas de temps différents dans chaque sous domaine), et l'on assure le raccord des quantités calculées sur le bord espace-temps du domaine.

Cette approche s'inspire de travaux de M. Gander, L. Halpern et F. Nataf sur les méthodes dites de « Schwarz Waveform relaxation », qui viennent elles-mêmes de méthodes parallèles pour les équations différentielles. Les avantages d'une telle approche sont que l'on peut résoudre dans chaque sous-domaine de façon indépendante, et que les communications entre sous-domaines n'ont lieu qu'à la fin d'une simulation complète (et non pas à chaque pas de temps, comme c'est le cas avec les méthodes locales en temps).

Dans le cadre de son stage de maîtrise, H. Sickout-Mavoungou a appliqué cette méthode à un problème de convection-diffusion-réaction en une dimension d'espace, avec des coefficients discontinus. Elle a obtenu des conditions de transmission optimales (du point de vue du taux de convergence de l'algorithme de décomposition de domaines). Nous achevons actuellement les tests numériques.

### 6.3.6. Discrétisation en temps locale

**Participants :** Jérôme Jaffré, Amel Sboui.

Dans un problème de transport de contaminants dans un sous-sol hétérogène la vitesse varie beaucoup suivant la perméabilité des régions. Dans les programmes actuels le même pas de temps est utilisé dans tout le domaine. Pendant son stage de DEA, A. Sboui a montré dans un cas simple qu'il était possible d'avoir des pas de temps adaptés aux différents sous-domaines, ce qui devrait amener des gains en temps de calcul importants.

### 6.3.7. Problèmes hyperboliques non-linéaires

**Participants :** Veerappa Gowda, Jérôme Jaffré.

Lorsqu'on modélise les écoulements diphasiques dans un milieu à plusieurs types de roches, en négligeant la capillarité, on obtient une équation hyperbolique non-linéaire avec une fonction de flux discontinue en espace. Cette équation avait déjà été étudiée pour le cas où, à la frontière entre les deux types de roche les fonctions de flux ne se coupent pas. Avec Adimurthi et V. Gowda du Tata Institute à Bangalore, India, J. Jaffré a étendu l'étude au cas où les fonctions de flux se coupent, démontrant la convergence d'une famille de schémas numériques de type volumes finis utilisant des solveurs de Riemann appropriés. La méthode des « singular mappings » a dû être utilisée pour obtenir des bornes sur la variation totale.

## 6.4. Méthodes numériques pour l'optimisation

Notons la sortie du livre [1], de l'article [6] et de la soutenance de deux thèses reliées au thème de l'optimisation numérique : celles de X. Jonsson [2] et d'E. Karas [3].

Nous renvoyons à la section 7.5 pour la description de nos travaux sur la mise au point d'un algorithme de type SQP (Programmation Quadratique Successive) pour très grands problèmes de moindres-carrés, dans

lequel les problèmes quadratiques supposés strictement convexes sont résolus par lagrangien augmenté, activation de contraintes et gradient avec projection.

#### 6.4.1. Tarification dans les réseaux de télécommunication

**Participants :** Jean André, J. Charles Gilbert, Mustapha Bouhtou (France Télécom).

Certains problèmes de tarification dans les réseaux de télécommunication (ou plus généralement dans les réseaux de transport) peuvent s'exprimer sous la forme de problème d'optimisation à deux niveaux. Au niveau supérieur le propriétaire d'une partie du réseau détermine les tarifs sur ses lignes de manière à maximiser son profit ; au niveau inférieur les usagers choisissent les lignes par où faire transiter leurs demandes, de manière à minimiser leurs frais. Ces problèmes ont en fait un caractère combinatoire qui les rend très difficiles. En particulier, les conditions d'optimalité du problème inférieur sont des contraintes non qualifiées pour le problème supérieur. Il s'agit d'un cas particulier de problèmes d'OCE (Optimisation avec Contraintes d'Équilibre, MPEC en anglais). Ces derniers se rencontrent souvent dans les problèmes d'optimisation où intervient le marché. Ces problèmes de tarification ont aussi été considérés par le projet METALAU, mais avec des approches différentes des nôtres.

Nous avons commencé cette année un travail sur ces problèmes, suite à des contacts avec France Télécom (M. Bouhtou). Le stage de DEA de J. André [24] avait pour but de voir ce que les méthodes de points intérieurs pouvaient apporter. Dans l'approche proposée, on relaxe les conditions de complémentarité faisant partie des conditions d'optimalité du problème inférieur. Si comme fonction des tarifs, le critère du problème original est discontinu (avec de nombreux maxima locaux donc), il est régulier dans le problème relaxé. De plus quand le paramètre de relaxation est grand, la combinatoire initiale s'amenuise. L'idée de l'algorithme proposé est de suivre un (ou le) maximum de profit lorsque le paramètre de relaxation tend vers zéro. L'algorithme a été testé « en vrai grandeur » sur un cas-test proposé par France Télécom. L'approche est prometteuse, mais complexe. Elle demande certainement que l'on s'y investisse davantage, ce que nous avons l'intention de faire.

#### 6.4.2. Courbure, géodésiques et moindres carrés

**Participants :** Philippe Al Khoury, Guy Chavent, Linda Nigole, Caroline Pineau-Marescal.

Une nouvelle méthode de recherche unidimensionnelle pour les problèmes de moindres carrés non linéaires est en cours de test. Cette approche utilise une borne sur la courbure dans la direction de descente, et remplace la géodésique dans l'espace des paramètres par la géodésique dans l'espace des observations. Cet algorithme a été comparé à d'autres stratégies de recherche de pas sur un cas test académique de difficulté réglable permettant de faire des expériences à difficulté croissante. Les premiers résultats obtenus de ces tests sont encourageants. Une étude approfondie du principe de la méthode a permis d'apporter une amélioration dans le cas de problèmes tests fortement non linéaires.

### 6.5. Développement de codes d'optimisation

#### 6.5.1. QPB : minimisation d'une fonction quadratique sous contraintes de borne

**Participants :** J. Charles Gilbert, Gilles Scarella (projet Ondes).

Le solveur QPB permet de minimiser des fonctions quadratiques strictement convexes ( $x \in \mathbb{R}^n \mapsto x^T A x + b^T x$ ,  $A$  symétrique définie positive) sous contraintes de borne (actuellement, uniquement des contraintes de positivité :  $x \geq 0$ ). Il est fondé sur des techniques d'activation de contraintes et de gradient-projection (pour identifier les contraintes actives) et utilise des factorisations de Cholesky (pour accélérer la convergence). Nous nous sommes inspirés des travaux de Moré et Toraldo (1989). Cette année, nous avons apporté les améliorations suivantes : modification des facteurs de Cholesky (plutôt que leur recalcul, en cas d'activation de contraintes lors de la minimisation sur une même face de l'ensemble admissible) et implémentation d'un nouvel algorithme de recherche linéaire brisée (le long du chemin projeté). Ces modifications ont amélioré nettement la robustesse et l'efficacité du solveur.

À terme, nous prévoyons d'intégrer les développements décrits en section 7.5.

### 6.5.2. OPINeL : un code d'optimisation de problèmes non linéaires par points intérieurs

**Participants :** Antonio Fuduli, J. Charles Gilbert.

La collaboration avec A. Fuduli (Université de Lecce, Italie) sur le développement d'OPINeL s'est poursuivie. Rappelons qu'il s'agit d'un code d'optimisation généraliste (avec prise en compte de contraintes fonctionnelles d'égalité et d'inégalité sur les paramètres à optimiser), utilisant une méthode de points intérieurs non linéaire et pouvant faire face à la non-convexité éventuelle du problème.

De manière à remédier à un manque occasionnel de robustesse du code, sur quelques problèmes très difficiles il est vrai, nous avons introduit la possibilité d'utiliser une globalisation par régions de confiance plutôt que par recherche linéaire. La prise en compte de la non-convexité se fait plus naturellement et plus efficacement. Cette technique permet aussi d'éviter l'effet néfaste d'emprisonnement des itérés, décrit par Wächter et Biegler. De manière à diminuer le coût de l'itération en cas de non acceptation du pas, le code fait de la recherche linéaire le long de la direction contrôlée par la région de confiance plutôt qu'un recalcul coûteux du déplacement avec une région plus petite.

Nous présentons à la figure 1,

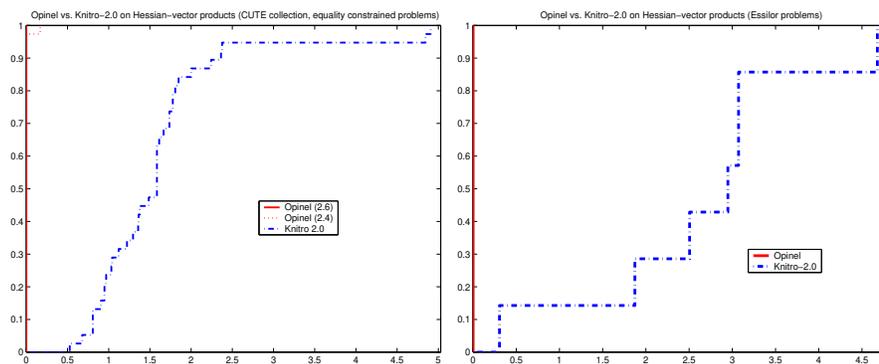


Figure 1. OPINeL et KNITRO 2.0 (collections CUTE à gauche et ESSILOR)

les profils de performance d'OPINeL (profils confondus avec l'axe vertical) et de KNITRO-2.0 (code développé par J. Nocedal et son équipe à l'Université de Northwestern à Evanston, USA), sur un sous-ensemble de problèmes-tests de la collection CUTE et sur des problèmes d'optique ophtalmique issus de notre collaboration avec la société Essilor (voir section 7.4). Plus la courbe est haute ou à gauche dans le graphique, mieux le logiciel se comporte. On compare ici le nombre de produits hessien-vecteur, qui représente la partie la plus importante du temps CPU pour les gros problèmes. On peut dire qu'OPINeL est sur ces problèmes en moyenne entre 4 et 9 fois plus rapide que KNITRO-2.0. La performance des deux codes serait plus semblable sur des critères tels que le nombre d'évaluations de fonction ou de gradient. Les résultats présentés ci-dessus sont relatifs à des problèmes avec contraintes d'égalité seulement. Des progrès restent à faire pour la prise en compte de contraintes d'inégalité. Ces résultats paraîtront dans [20][21].

### 6.5.3. LIBOPT : une librairie de problèmes d'optimisation

**Participant :** Xavier Jonsson.

Le développement de codes d'optimisation passe par des phases de validation des options implémentées, au moyen de tests sur des bancs d'essais de problèmes. La comparaison entre différentes options est difficile car l'effet des modifications dépend des problèmes d'optimisation considérés ; elle se fait aujourd'hui souvent par l'intermédiaire de profils de performance (la figure 1 donne des exemples de tels profils). La librairie LIBOPT a pour but d'aider à l'automatisation de ces phases de validation.

La librairie LIBOPT contient en particulier une collection de problèmes qui sont de nature soit industrielle (Renault, Essilor, ...), soit académique (collection CUTE, collection COPS, ...). Elle accepte des problèmes écrits dans des langages très différents (Fortran, Matlab, Ampl, C, ...). LIBOPT permet aussi d'automatiser

presque totalement les phases d'exécution et de comparaison de différents solveurs. Cette automatisation est rendue possible par l'écriture de scripts Perl qui constituent l'interface utilisateur/librairie et qui s'intègrent aisément à l'environnement Unix. Un utilisateur désirant comparer les performances en temps CPU des deux solveurs  $S_1$  et  $S_2$  sur trois collections de problèmes  $C_1$ ,  $C_2$  et  $C_3$  lancera une commande Unix du type :

```
-> mkopt -s S1 S2 -c C1 C2 C3 | runopt | showperf -CPU
```

La librairie actuelle comprend les collections Essilor, Renault, CUTE, COPS, MITT et des interfaces pour les solveurs OPINEL, KNITRO, NPSOL, LOQO. LIBOPT est donc pour l'instant une librairie de problèmes non linéaires et différentiables qui s'adressent à des solveurs généralistes. L'introduction de problèmes non différentiables et de solveurs ciblés est envisageable par la suite.

## 6.6. Calcul haute précision

**Participant :** Michel Kern.

M. Kern a obtenu le deuxième prix du défi « 100 Digits, 100 Dollars » organisé par N. Trefethen (Oxford). Il s'agissait de dix problèmes de calcul numérique dont l'énoncé tient en quelques lignes, et dont la réponse est un nombre. Ces problèmes étaient tirés de domaines divers des mathématiques appliquées : calcul d'intégrale oscillante, algèbre linéaire, optimisation de fonction avec un grand nombre de minima locaux, probabilités.

Il fallait calculer les dix réponses avec dix chiffres significatifs, soit 100 chiffres en tout. M. Kern a obtenu 99 chiffres exacts.

## 7. Contrats industriels

### 7.1. Estimation de profils de température en détonique

**Participants :** Guy Chavent, François Clément.

Le contrat avec le Centre d'Études de Gramat (DGA) portant sur l'écriture d'un code MATLAB pour la détermination de profils de température lors de la détonation d'un explosif liquide (le nitrométhane) s'est achevé en juin. Ces travaux sont venus en appui de la thèse de V. Bouyer préparée sous la direction de P. Hervé et soutenue en septembre 2002.

### 7.2. Transport de radionucléides autour d'un site de stockage profond

**Participants :** Jérôme Jaffré, Jean Roberts [Projet Ondes], Vincent Martin.

La thèse de V. Martin, dirigée par J. Roberts, est soutenue par l'Andra (Agence Nationale pour la gestion des Déchets RAdioactifs). Son sujet porte sur l'utilisation de méthodes de décomposition de domaines en espace et en temps pour la simulation de l'écoulement et du transport de contaminants à grande échelle avec une source de petite dimension.

### 7.3. Méthodes de décomposition de domaines globale en temps. Application au transport de déchets radioactifs

**Participant :** Michel Kern.

La simulation du transport de déchets radioactifs présente de nombreuses difficultés numériques. L'une d'elles est que les différentes couches géologiques (calcaire, argile, marnes,...) ont des propriétés physiques qui peuvent varier sur plusieurs ordres de grandeur. Ainsi, la couche d'argile dans laquelle sera située le site de stockage est très imperméable, la vitesse de Darcy  $y$  est très faible (ce qui est souhaitable), et le transport est diffusif. Dans la couche de calcaire immédiatement au-dessus, le transport est convectif.

Nous abordons ce problème par une méthode de décomposition de domaines espace-temps. Dans un premier temps, nous avons considéré le cas d'une équation de convection-diffusion-réaction.

Ce travail a été financé dans le cadre d'un contrat avec l'Andra.

## 7.4. Conception de verres ophtalmiques progressifs

**Participants :** J. Charles Gilbert, Xavier Jonsson.

Le contrat avec la Société Essilor Intl. (Saint-Maur-des-Fossés) sur le développement et l'amélioration des techniques numériques pour la conception de verres ophtalmiques progressifs s'est achevé en 2001 (contrat d'encadrement lié à une bourse Cifre). Il a donné lieu au travail de thèse de X. Jonsson [2]. Celle-ci a été soutenue en janvier 2002.

## 7.5. Tomographie sismique

**Participants :** Frédéric Delbos (IFP), J. Charles Gilbert, Roland Glowinski (Huston), Roland Masson (IFP), Delphine Sinoquet (IFP).

L'*inversion sismique* consiste, on l'a vu, à reconstituer la structure géologique du sous-sol à partir des informations recueillies lors de la propagation d'ondes dans le milieu exploré. En *tomographie sismique*, on se place dans le cadre simplifié de l'*optique géométrique*, où les ondes sont supposées se déplacer le long de rayons, que l'on s'attache à décrire. Ces rayons suivent des trajectoires incurvées si la vitesse de propagation n'est pas constante. Les temps de trajet des ondes entre sources et récepteurs après réflexions et réfractions à travers les interfaces entre couches sont mesurés. Ces données sont alors « inversées » pour retrouver la structure géologique (la position des interfaces et la vitesse de propagation dans les couches qu'elles séparent), par une technique de moindres-carrés.

Dans notre collaboration avec l'Institut Français du Pétrole (IFP), nous nous intéressons à la prise en compte de contraintes dans le processus d'identification : contraintes fonctionnelles sur la position des interfaces et sur les vitesses. La difficulté vient évidemment de la grande dimension du problème (en 2D, le nombre de variable est de l'ordre  $10^4$  et il y a à peu près autant de contraintes d'inégalité ; c'est la résolution de problèmes 3D qui est visée), de leur mauvais conditionnement (autour de  $10^9$  en 2D) et surtout du temps d'évaluation des fonctions définissant le problème. Ces caractéristiques nous ont orientés vers un solveur de type PQS (voir la section 3.3). La linéarité des contraintes et la structure de moindres-carrés font que les problèmes quadratiques à résoudre sont convexes. Ceux-ci sont résolus par une technique de lagrangien augmenté, avec activation de contraintes et gradient-projection, qui s'avère satisfaisante : la présence de contraintes augmente le temps de résolution d'un PQ par un facteur inférieur à 10, ce qui est raisonnable par rapport à ce que demanderait une approche par points intérieurs. Dans la suite de l'étude, nous nous concentrerons sur la minimisation partielle du lagrangien augmenté, de manière à diminuer le facteur sus-cité.

Les résultats obtenus ne sont pas encore publiés. Nous mentionnons cependant le rapport interne de l'IFP [19] sur l'utilisation de régions de confiance dans le même problème, mais sans contrainte ; un travail qui nous a occupé quelques mois et dont les résultats encourageants serviront de référence pour les problèmes avec contraintes.

# 8. Actions régionales, nationales et internationales

## 8.1. Actions nationales

Le projet Estime fait partie du GDR Momas (Modélisations Mathématiques et Simulations numériques liées aux études d'entreposage et de stockage souterrain de déchets radioactifs).

Le projet Estime participe au PNRH (Programme National de Recherche en Hydrologie, du CNRS), thème Transferts complexes en milieu poreux.

## 8.2. Relations bilatérales internationales

- J.Ch. Gilbert a poursuivi sa collaboration avec A. Fuduli de l'Université de Lecce (Italie), sur des travaux portant sur le développement d'algorithmes de points intérieurs en optimisation non linéaire (voir section 6.5.2). Dans ce cadre, il a été invité par l'Université de Lecce, du 10 au 21 juin.

## 9. Diffusion des résultats

### 9.1. Animation de la communauté scientifique

- J.Ch. Gilbert a arbitré des articles soumis à *Mathematical Programming*, *SIAM Journal on Optimization*, *Mathematics of Operations Research*, *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de Paris*.
- J. Jaffré a co-organisé avec M. Jaoua le 2<sup>e</sup> Colloque sur les Problèmes Inverses, le Contrôle et l'Optimisation de Formes (PICOF'02), Carthage, Tunisie, 10-12 avril.
- J. Jaffré a organisé les journées du PNRH (Programme National de Recherche en Hydrologie, du CNRS), thème Transferts complexes en milieu poreux, consacrées aux méthodes numériques, les 27 et 28 novembre à Rocquencourt.
- J. Jaffré a co-organisé avec F. Nataf les journées du GDR Momas les 19 et 20 décembre 2002 à Rocquencourt.
- M. Kern est l'organisateur du Colloquium de Rocquencourt
- M. Kern est secrétaire du GAMNI (Groupe pour l'Avancement des Méthodes Numériques de l'Ingénieur), un groupe de la SMAI.

### 9.2. Enseignement universitaire

- Université Panthéon-Sorbonne (Paris 1), DEA « Modélisation et Méthodes Mathématiques en Économie » : *Méthodes newtoniennes en optimisation avec contraintes*, 21 h., J.Ch. Gilbert.
- Université Pierre et Marie Curie (Paris 6), DEA « Optimisation, Jeux et Modélisation en Économie » : *Introduction aux algorithmes de points intérieurs*, 15 h., J.Ch. Gilbert.
- École Normale Supérieure de Cachan, DEA « Méthodes Numériques pour les Modèles des Milieux Continus » : *Méthodes numériques pour l'écoulement et le transport de contaminants en milieu poreux*, 6 h, M. Kern.
- Université de Paris 9, DESS Mathématiques de la Décision, Analyse Numérique, 21 h, J. Jaffré.
- Ecole Nationale d'Ingénieurs de Tunis (ENIT), DEA Mathématiques Appliquées, Volumes finis et éléments finis mixtes, 20 h, 28 mai-1er juin, J. Jaffré et J. Roberts.
- IMA (Institute for Mathematics and Applications, Minneapolis) summer graduate course at the University of Kentucky, Lexington, 8-12 juillet, Numerical methods for partial differential equations, J. Jaffré et J. Roberts.

### 9.3. Autres enseignements

- École des Mines de Paris. 1<sup>re</sup> année : *Calcul différentiel*, 22 h., F. Clément ; 1<sup>re</sup> année : *Intégration, mesure, transformation de Fourier, convolution*, 22 h., V. Martin ; 2<sup>e</sup> année : *Analyse numérique* (J. Henry), M. Kern est chargé de cours.
- École Nationale de Techniques Avancées (ENSTA). 2<sup>e</sup> année : *Optimisation différentiable : théorie et algorithmes*, 42 h., J.Ch. Gilbert ; 3<sup>e</sup> année : *Méthodes newtoniennes en optimisation avec contraintes*, 21 h., J.Ch. Gilbert.
- Pôle Universitaire Léonard de Vinci, École Supérieure d'Ingénieurs Léonard de Vinci, 5<sup>e</sup> année : *Problèmes inverses*, 40 h, M. Kern.
- Journées de formation de la Société ARTELYS intitulées « *Programmation non linéaire : modèles et algorithmes* », les 5-6 juin, 4 h., J.Ch. Gilbert.

### 9.4. Participation à des colloques, séminaires, invitations

- P. Al Khoury, *Inversion of spectroscopic data of CO<sub>2</sub> radiation*, 4th International Conference on Inverse Problems in Engineering, Rio de Janeiro, Brésil, 26-31 mai.

- G. Chavent, *Curvature steps and geodesic moves for nonlinear least squares descent algorithms*, 4th International Conference on Inverse Problems in Engineering, Rio de Janeiro, Brésil, 26-31 mai.
- F. Clément, *A time formulation for seismic waveform inversion*, 2<sup>e</sup> Colloque sur les Problèmes Inverses, le Contrôle et l'Optimisation de Formes, Carthage, Tunisie, 10-12 avril.
- F. Clément, *Problème inverse et analyse de sensibilité, application à un problème de détonique*, Séminaire du GDR MOMAS « Problèmes inverses et analyse de sensibilité », Nice, 14-15 novembre.
- F. Delbos : *Trust-region Gauss-Newton method for 3D reflection tomography*, « SIAM conference on Optimization », 20-22 mai, Toronto, Canada.
- J.Ch. Gilbert : *OPINeL, an interior-point software for nonlinear optimization*, conférence invitée à la « French-German-Polish Conference on Optimization », 9-12 septembre, Cottbus, Allemagne.
- J. Jaffré, *On the upstream mobility flux for multiphase flow in porous media*, ICM2002 satellite conference on scientific computing, Xi'An, China, 15-18 août, conférence invitée.
- J. Jaffré, Invitation de 3 jours au CWI, Amsterdam, de Willem Hundsdorfer. Présentation de *On the upstream mobility flux for multiphase flow in porous media*.
- J. Jaffré, *Le schéma aux mobilités amont pour les écoulements polyphasiques*, journées Modélisation du Programme National de Recherche en Hydrogéologie, thème Transferts complexes en milieu poreux, Méthodes numériques, Rocquencourt, 27-28 novembre.
- X. Jonsson : *BFGS preconditioning of a trust region algorithm for unconstrained optimization*, « SIAM conference on Optimization », 20-22 mai, Toronto, Canada.
- E. Karas : *Examples of ill-behaved central paths in convex optimization*, « SIAM conference on Optimization », 20-22 mai, Toronto, Canada.
- M. Kern, *Le projet Hydrogrid*, Club des utilisateurs du calcul parallèle de l'UR Sophia Antipolis, 17-18 juillet.
- M. Kern, *Les exercices Couplex*, journées Modélisation du Programme National de Recherche en Hydrogéologie, thème Transferts complexes en milieu poreux, Méthodes numériques, Rocquencourt, 27-28 novembre.
- V. Martin, *Generalized cell-centered finite volume methods for flow in porous media with faults*, Finite Volumes for Complex Applications 3, Porquerolles, France, 24-28 juin.
- V. Martin, *Simulation multidomaine pour le stockage de déchets*, Journée Andra des doctorants, Paris, France, 27 juin.
- J. Roberts, Invitation de 3 jours au CWI, Amsterdam, de Willem Hundsdorfer. Présentation de *Numerical modelling of flow in porous media with faults*.
- J. Roberts, *Modélisation numérique de l'écoulement et du transport dans un milieu fracturé*, journées Modélisation du Programme National de Recherche en Hydrogéologie, thème Transferts complexes en milieu poreux, Méthodes numériques, Rocquencourt, 27-28 novembre.

## 9.5. Diffusion de produits

- Diffusion de codes de la bibliothèque d'optimisation MODULOPT (en collaboration avec le projet NUMOPT). La distribution se fait sur demande uniquement ; via la page de la librairie (<http://www-rocq.inria.fr/estime/modulopt>). Nous donnons ci-dessous les destinataires des codes.
  - M1QN3 (optimisation sans contrainte, très grande taille) : INRA, Avignon (suivi de ressources agricoles et forestières, F. Baret) ; Institut d'Aéronomie Spatiale de Belgique, Bruxelles (émission de polluants atmosphériques, J.-F. Muller) ; Institute for Marine and Atmospheric Research, Université d'Utrecht, Pays-Bas (équilibre entre marée et fond de mer, J. van der Molen) ; École polytechnique de Montréal (inversion de résistivité 3D, M. Chouteau) ; Institut de météorologie norvégien, Oslo

(assimilation de données atmosphériques, A. Brattli) ; Institut Français du Pétrole, Reuil-Malmaison (tomographie sismique, A. Ehinger) ; Institut Royal de Météorologie des Pays-Bas, AE De Bilt (assimilation de données pour la détermination de la distribution verticale de l'ozone, H. Eskes).

- M2QN1 (optimisation avec contraintes de borne) : INRA, Avignon (suivi de ressources agricoles et forestières, F. Baret) ; Institut de Mécanique des Fluides et des Solides de Strasbourg (estimation de paramètres dans l'équation de diffusivité, Ph. Ackerer) ; Dept. of geography and environmental engineering, the Johns Hopkins univ. (optimisation des pêcheries dans les Grands Lacs, J.B. Kim).
- M4IP1 (OPINEL, optimisation avec contraintes d'égalité et d'inégalité) : France Télécom, Paris (optimisation à deux niveaux, M. Bouhtou).
- Le code IPTEMP d'inversion de profils de température à partir de mesures de luminance écrit en MATLAB a été mis à disposition du Centre d'Étude de Gramat (DGA).

## 9.6. Conseil en entreprises

- J.Ch. Gilbert est conseiller à l'Institut Français du Pétrole et y encadre F. Delbos sur une thèse portant sur la prise en compte de contraintes dans un problème de reconstitution du sous-sol par tomographie sismique (voir la section 7.5).
- J. Jaffré est membre du conseil scientifique de l'Andra (Agence Nationale pour la Gestion des Déchets Radioactifs).
- M. Kern est conseiller à l'Andra.

## 10. Bibliographie

### Livres et monographies

- [1] J. BONNANS, J. GILBERT, C. LEMARÉCHAL, C. SAGASTIZÁBAL. *Numerical Optimization - Theoretical and Practical Aspects*. Springer Verlag, Berlin, 2002.

### Thèses et habilitations à diriger des recherche

- [2] X. JONSSON. *Méthodes de Points Intérieurs et de Régions de Confiance en Optimisation Non Linéaire - Application à la Conception Optimale de Verres Opthalmiques Progressifs*. thèse de doctorat, Université de Paris 6, 2002.
- [3] E. W. KARAS. *Exemples de Chemins Centraux Non Réguliers et un Algorithme de Filtre pour l'Optimisation Non Linéaire*. thèse de doctorat, Université Fédérale de Santa Catarina (Brésil) et Université de Paris 1 Panthéon-Sorbonne, 2002.

### Articles et chapitres de livre

- [4] ADIMURTHI, J. JAFFRÉ, VEERAPPA GOWDA. *Godunov-type methods for conservation laws with a flux function discontinuous in space*. à paraître.
- [5] C. ALBOIN, J. JAFFRÉ, P. JOLY, J. E. ROBERTS, C. SERRES. *A comparison of methods for calculating the matrix block source term in a double porosity model for contaminant transport*. in « Computational Geosciences », volume 6, 2002, pages 523-543.

- [6] P. ARMAND, J. GILBERT, S. JAN-JÉGOU. *A BFGS-IP algorithm for solving strongly convex optimization problems with feasibility enforced by an exact penalty approach*. in « Mathematical Programming », volume 92, 2002, pages 393-424.
- [7] A. BOURGEAT, M. KERN, S. SCHUMACHER, J. TALANDIER. *The Couplex Models*. in « Computational Geosciences », 2003, à paraître.
- [8] G. CHAVENT. *Curvature steps and geodesic moves for nonlinear least squares descent algorithms*. in « Inverse Problems », 2003, à paraître.
- [9] W. HUNSDORFER, J. JAFFRÉ. *Implicit-explicit time stepping with spatial discontinuous finite elements*. in « Applied Numerical Mathematics », 2003, à paraître.
- [10] J. JAFFRÉ, J. ROBERTS, V. MARTIN. *Modelling Fractures and Barriers as Interfaces for Flow and Transport in porous media*. en préparation.
- [11] H. BEN AMEUR, G. CHAVENT, J. JAFFRÉ. *Refinement and coarsening indicators for adaptive parametrization : application to the estimation of hydraulic transmissivities*. in « Inverse Problems », volume 18, 2002, pages 775-794.

### **Communications à des congrès, colloques, etc.**

- [12] C. ALBOIN, J. JAFFRÉ, J. E. ROBERTS, C. SERRES. *Modeling fractures as interfaces for flow and transport in porous media*. in « Fluid flow and transport in porous media : mathematical and numerical treatment », série Contemporary mathematics, numéro 295, American Mathematical Society, éditeurs Z. CHEN, R. EWING., pages 13-24, 2002.
- [13] J. ERHEL, P. ACKERER, J.-R. DE DREUZY, H. LEROY, M. KERN, C. PEREZ. *Couplage par composants logiciels de codes d'hydrogéologie*. in « École d'hiver GRID 2002 : Calcul distribué, Metacomputing, Globalisation des Ressources », éditeurs E. JEANNOT, J. GUSTEDT, J. PAZAT, S. VIALLE., 2002.
- [14] J. JAFFRÉ, J. ROBERTS, V. MARTIN. *Generalized cell-centered finite volume methods for flow in porous media with fault*. in « Proc. 3rd Int. Symposium Finite Volumes for Complex Applications, Porquerolles, France, June 2002 », éditeurs R. HERBIN, D. K. EDS., pages 357-364, 2002.
- [15] J.-P. MINARD, M. BOUCHEZ, O. LEGRAS, I. VALLET, B. SARH, I. GÖKALP, P. HERVÉ, P. CHELIN, P. AL KHOURY. *RAPIERE : An innovative industrial optical measurement system for scramjet flows (first phase project final status 2002)*. in « Proc. of the 11th AIAA/AAAF Internat. Conf. on Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies », 2002.
- [16] P. AL KHOURY, P. HERVÉ, F. CLÉMENT, G. CHAVENT. *Inversion of spectroscopic data of  $CO_2$  radiation*. in « Proc. of the 4th Internat. Conf. on Inverse Problems in Engineering », 2002.

### **Rapports de recherche et publications internes**

- [17] G. CHAVENT. *A maximum curvature step and geodesic displacement for nonlinear least squares descent algorithms*. rapport technique, numéro 4383, Inria, 2002, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-4383.html>.

- [18] F. CLÉMENT, G. CHAVENT. *Détermination des profils de température pendant la détonation d'un explosif liquide, le nitrométhane*. rapport technique, numéro 4641, Inria, 2002, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-4641.html>.
- [19] F. DELBOS, D. SINOQUET, J. GILBERT, R. MASSON. *Trust-region Gauss-Newton method for the unconstrained reflection tomography problem in the software JERRY*. rapport technique, IFP, 2002.
- [20] A. FUDULI, J. GILBERT. *OPINeL : a truncated Newton interior-point algorithm for nonlinear optimization*. rapport technique, Inria, 2003, à paraître.
- [21] A. FUDULI, J. GILBERT, X. JONSSON. *BFGS preconditioning of an interior point method for nonlinear optimization*. rapport technique, Inria, 2003, à paraître.
- [22] P. HAVÉ, M. KERN, P. LEMUET. *Résolution numérique de l'équation des ondes par une méthode d'éléments finis d'ordre élevé sur ordinateur parallèle*. rapport technique, numéro 4381, INRIA, février, 2002, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-4381.html>.
- [23] M. KERN. *Solution to the SIAM "Hundred-dollar, Hundred-digit Challenge"*. rapport technique, numéro 4472, INRIA, 2002, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-4472.html>.

## Divers

- [24] J. ANDRÉ. *Tarification d'un réseau de télécommunication à l'aide de l'optimisation bi-niveaux*. 2002, Rapport de stage.
- [25] J. GILBERT. *Optimisation Différentiable - Théorie et Algorithmes*. 2002, <http://www-rocq.inria.fr/~gilbert/ensta/optim.html>, Ébauche de livre, mise à disposition libre via l'Internet.
- [26] Y. LOUKILI. *Estimation de la position du dispositif d'acquisition à partir de données réelles Très Haute Résolution 3-D*. 2002, rapport de post-doc.
- [27] H. SICKOUT-MAVOUNGOU. *Méthodes de décomposition de domaines globales en temps pour l'étude du stockage des déchets radioactifs*. 2002, rapport de stage.