

Rapport INRIA 1994 — Programme 6
Méthodes numériques des sciences de l'ingénieur

PROJET MENUISIN

3 mai 1995

PROJET MENUSIN

Méthodes numériques des sciences de l'ingénieur

Localisation : *Rocquencourt*

Mots-clés :

1 Composition de l'équipe

Responsable scientifique

Patrick Le Tallec, professeur, université de Paris 9

Responsable permanent

Americo Marrocco, directeur de recherche, INRIA

Secrétariat

Christiane Demars, INRIA

Conseillers scientifiques

Jacques Périaux, Dassault-Aviation

Benoit Perthame, professeur, université de Paris 6

Olivier Pironneau, professeur, université de Paris 6

Personnel INRIA

Jean-François Bourgat, directeur de recherche

Marie-Odile Bristeau, directeur de recherche

Fadi El Dabaghi, chargé de recherche

Frédéric Hecht, directeur de recherche

Marie-Hélène Lallemand, chargé de recherche

Bijan Mohammadi, chargé de recherche

Ingénieur expert

Yan Xiang

Chercheurs extérieurs

Roland Glowinski, professeur, université de Paris 6

Youchoun Qiu, ATER université de Paris 6

Taoufik Sassi, ATER université de Paris 9

Marc Thiriet, CNRS, université de Paris 7

Chercheurs post-doctorants

Alan William Craig, ERCIM, jusqu'en juin 1994

Chercheurs doctorants

Francisco Baron, boursier INRIA jusqu'en septembre 1994

Manolo Castro-Diaz, boursier INRIA, depuis février 1994

Giovanni Cornetti, boursier Gouv. Italien

Nicolas Devaux, boursier Cifre, PSA

Abderrazzak El Boukili, boursier INRIA

Ahmed Kaiss, boursier INRIA, jusqu'en mars 1994

François Mallinger, boursier INRIA

Jean Mouro, boursier Cifre, PSA

José Alberto Rodrigués, boursier Gouv. Portugais

Thierry Sabourin, université de Bordeaux

Anabelle Zebic, boursière INRIA, jusqu'en avril 1994

Stagiaires

Guy Martin Borret, stagiaire X, du 15 avril au 31 juillet

2 Présentation du projet

Le projet MENUSIN de l'INRIA-Rocquencourt a été créé en 1972 par J.L. Lions. Son objectif était de combler le fossé en matière d'algorithmique numérique entre les recherches plus théoriques faites sur ce sujet dans les laboratoires de l'Université et du CNRS et les implémentations industrielles. Le projet s'est spécialisé dans la résolution numérique des équations aux dérivées partielles (EDP) pour les sciences de l'ingénieur (MENUSIN \equiv MEthodes NUmériques pour les Sciences de l'INGénieur). Les techniques les plus fréquemment utilisées dans ce cadre sont la méthode des éléments finis pour approcher les problèmes posés et des

méthodes itératives implicites pour résoudre les systèmes algébriques non linéaires de très grande taille obtenus par discrétisation.

Les méthodes numériques pour les EDP sont utilisables dans des domaines très divers des Sciences de l'Ingénieur, de la Technique, de la Mécanique, de la Physique,... Parmi les raisons majeures du développement continu de ces méthodes, il y a d'une part, la possibilité de simuler des phénomènes trop complexes pour être étudiés par les méthodes analytiques ou expérimentales, et d'autre part, la nécessité de compléter l'approche expérimentale par des simulations numériques plus rapides et plus souples.

Pour une situation mécanique ou physique donnée, le développement d'un modèle numérique nécessite de choisir une modélisation mathématique adaptée, d'en vérifier la cohérence, de proposer des stratégies d'approximation efficaces, de mettre au point des algorithmes stables et performants pour la résolution sur ordinateur du problème approché, enfin de valider le modèle en comparant les prédictions obtenues à la réalité physique ou industrielle. Tout en cherchant à maîtriser l'ensemble de ce processus, le projet MENUSIN s'est de fait plus spécialisé sur l'aspect algorithmique. Dans ce travail, le projet a maintenu depuis sa création trois caractéristiques :

- des rapports étroits avec les Universités qui permettent de participer ou de rester en contact avec les derniers développements des techniques de Mathématiques Appliquées;
- un matériel informatique et des logiciels de pointe, qui sont bien évidemment indispensables au développement de méthodes numériques performantes, utilisant au mieux le matériel informatique disponible et restant proches des applications réelles;
- des contacts industriels sur tous ses axes de recherche, nécessaires pour mieux définir et orienter ces recherches, indispensables pour apprécier les problèmes que pose l'implémentation réelle des algorithmes et pour valider les résultats obtenus.

Pour 1994, les domaines d'activités scientifiques ont été les suivants :

- Méthodes numériques en mécanique des fluides : modèles de turbulence, couplage fluide structure, solveurs,
- Modélisations cinétiques en mécanique des fluides et en physique,
- Electromagnétisme et semiconducteurs,

- Outils et environnement pour le calcul scientifique : maillages, solveurs, optimisation de formes.

Par ailleurs, le projet a participé à l'action en calcul parallèle décrite dans un chapitre spécifique.

3 Actions de recherche

3.1 Méthodes numériques en mécanique des fluides

3.1.1 Généralités

Il s'agit là d'un sujet extrêmement riche en applications.

D'un point de vue méthodologique, la résolution des problèmes de mécanique des fluides fait appel à l'ensemble de l'arsenal des méthodes numériques (différences et éléments finis, méthodes spectrales, méthodes particulaires, algorithmique numérique, optimisation, contrôle optimal...). Il faut aussi noter que l'impact sur l'Informatique est très important et l'un des champs d'applications prioritaires des ordinateurs de haut de gamme actuels et en développement est précisément la résolution numérique de problèmes de la mécanique des fluides. Nos principaux collaborateurs industriels sur ce sujet restent les industries Dassault-Aviation, le CEA-CESTA et PSA.

Le travail de cette année s'est concentré d'une part sur les problèmes de modélisation physique (turbulence, écoulements en eaux peu profondes, écoulements non Newtoniens, gaz raréfiés), d'autre part sur les solveurs numériques.

3.1.2 Modélisation de la turbulence et lois de paroi

Participants : G. Cornetti, N. Devaux, B. Mohammadi, O. Pironneau

La modélisation de la turbulence reste un des grands axes de recherche de la mécanique des fluides. L'action du projet s'est concentrée sur la validation numérique de différents modèles proposés dans la littérature. En premier lieu, dans le cadre du programme *Recherche et Qualification* du projet européen Hermès, nous avons effectué une étude des corrections de compressibilité à inclure dans les calculs d'écoulements hypersoniques. Ces corrections ont été implémentées et testées dans un environnement de calcul sur maillages non structurés [44].

La seconde action en turbulence se place dans le cadre du projet européen *ETMA*: Efficient Turbulent Models in Aerodynamics. Cette action sera finalisée par une participation au workshop de Manchester et concerne la réalisation de diverses études d'écoulements turbulents en collaboration avec l'Inria-Sophia (SINUS). Le but est la validation et le développement de nouveaux modèles de turbulence ainsi que d'outils numériques pour l'intégration de ces modèles.

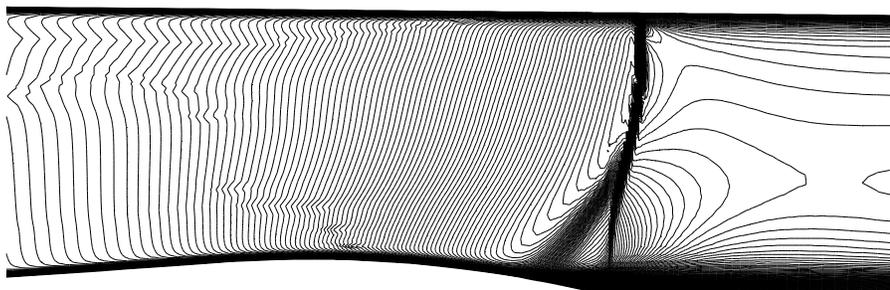


Figure 1 : λ choc. Calcul turbulent $k - \varepsilon$ + lois de paroi, $M_\infty = 0.615$, $Re/m = 1.35 \cdot 10^7$. Solveur de Riemann d'Osher, Volumes Finis-Galerkin

Enfin le dernier aspect concerne le développement de lois de paroi permettant une utilisation cohérente et mathématiquement correcte des modèles de turbulence de type $k - \varepsilon$. En liaison avec diverses analyses théoriques justifiant l'introduction de ces lois de paroi (conférence de O. Pironneau à Tokyo), nous avons effectué une analyse numérique fine de l'effet de ces lois de paroi sur la simulation d'un écoulement sur une plaque et sur une marche descendante et comparé à divers résultats expérimentaux. L'accord calcul expérience est très bon en dehors des zones de recirculation où la loi de paroi (logarithmique en vitesse) n'est pas suffisamment réaliste. Le problème est maintenant d'affiner le modèle utilisé sans lui faire perdre de sa généralité.

Une autre application des lois de paroi a été étudiée dans le cadre du calcul des écoulements en eaux peu profondes. L'utilisation des équations de Navier-Stokes tridimensionnelles avec frontière libre, discrétisées avec peu de couches d'éléments finis peut conduire à des simulations réalistes à condition de décrire correctement les lois de paroi sur le fond [32].

3.1.3 Ecoulement tridimensionnel de fluide non-newtonien en modélisation sanguine

Participants : G. Martin Borret, M. Thiriet

L'objet de cette étude est de comparer les champs de vitesse d'un fluide non-newtonien ayant un comportement similaire à celui du sang et d'un fluide newtonien ayant la viscosité du sang habituellement choisie ($\mu_\infty \sim 3 \text{ mPa.s}$), dans des domaines et avec des conditions identiques, de manière à tester l'hypothèse de comportement newtonien du sang. La relation entre le taux de cisaillement et la viscosité du sang comporte trois parties selon la valeur du taux de cisaillement : (1) un comportement newtonien, de viscosité μ_0 , aux taux de cisaillement très faibles, (2) un comportement rhéofluidifiant intermédiaire et (3) un comportement newtonien, de viscosité μ_∞ , aux forts taux de cisaillement. Le modèle de Carreau permet de décrire le comportement du sang. Les calculs sont effectués avec le code incompressible 3D *NSP13D*.

Dans un coude (angle de 90 degrés, rapport de courbure 1/10), le champ de vitesse *non-newtonien* et le champ de vitesse *newtonien* calculé avec la viscosité μ_∞ sont très différents, quelque soit le nombre de Reynolds. Le pic de vitesse axiale est situé à une distance beaucoup plus grande de la paroi externe. Le champ de vitesse tend plus rapidement vers un profil établi. Les courbes isovaleurs de la vitesse dans une section droite restent assez circulaires, l'aspect en croissant disparaît (Fig. 2). Le champ de vitesse est plus proche du champ de vitesse *newtonien* obtenu avec une viscosité μ_0 . Dans la bifurcation symétrique, aucun décollement n'est observé pour $Re < 2000$. Le champ de vitesse non-newtonien est, comme dans le coude, plus proche du champ de vitesse calculé avec la viscosité μ_0 .

3.1.4 Interactions Fluide-Structure

Participants : P. Le Tallec, J. Mouro

Il s'agit d'un travail effectué en collaboration avec PSA Peugeot-Citroën. De nombreux composants hydrauliques utilisés dans les amortisseurs comportent des clapets qui sont soit souples et se déforment sous la pression de l'huile, soit montés sur des ressorts. Le réglage de ces clapets

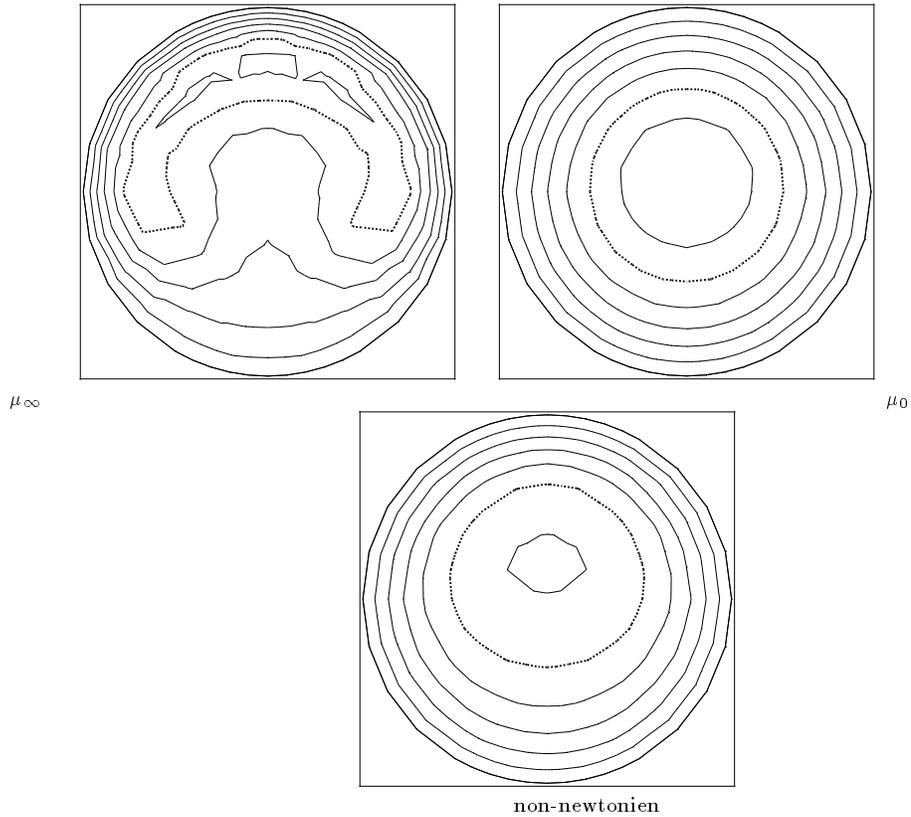


Figure 2 : Champs de la vitesse axiale dans le coude pour trois viscosités différentes et pour un nombre de Reynolds de 500. Isovaleurs de la vitesse axiale dans la section droite à 62° de l'entrée du coude. L'aspect en croissant des courbes correspondant à des valeurs élevées de la vitesse disparaît lorsque $\mu = \mu_0$, $\mu(\dot{\gamma})$.

est délicat compte tenu du grand nombre d'exigences contradictoires (confort, tenue de route,...).

On caractérise donc un amortisseur en termes de débit fonction de la perte de charge et l'on cherche à simuler son fonctionnement en modélisant le couplage entre les clapets et l'huile minérale qui s'écoule.

Le but de notre démarche est donc de valider un modèle numérique de couplage fluide-structure dans le cas d'une huile incompressible et d'une

coque en grands déplacements. Les premières étapes de cette simulation ont été:

- caractérisation du problème physique et premiers essais sur banc statique.
- implémentation d'un modèle de couplage scalaire sur solution stationnaire. Ce modèle tend à sous-estimer les pertes de charge.
- écriture d'un modèle et d'un algorithme de couplage vectoriel valable en écoulement instationnaire. Cet algorithme est adapté à la méthode de résolution SIMPLE utilisée dans le code FIRE de PSA et garantit a priori l'équilibre entre le clapet et l'écoulement à chaque pas de temps.
- en collaboration avec le projet Modulef, définition et implémentation d'un élément fini de type DKT pour le modèle de coques géométriquement exactes développé entre autres par J. Simo. Ce modèle s'écrit indépendamment de toute base locale et ne fait aucune approximation de la géométrie; il est particulièrement adapté à notre problème puisque c'est la section de passage, donc la géométrie de la déformée du clapet qui détermine la perte de charge. Cet élément, rigoureusement identique au DKT Plaque pour les problèmes linéaires en plaque, donne des résultats excellents pour toute une gamme de problèmes de coques minces en grands déplacements.
- définition et caractérisation d'un nouveau banc d'essais dynamique et premiers tests d'amortisseurs pour des fréquences de 1 à 10 Hz.

La suite des travaux va consister à implémenter un prototype du couplage vectoriel de façon à tester l'algorithme, à l'intégrer dans le code FIRE et à le corrélérer aux nombreuses mesures effectuées sur le banc dynamique. Par ailleurs, le modèle de couplage fluide structure ainsi développé devrait avoir de nombreuses autres applications, en particulier dans le cadre de la modélisation des écoulements sanguins dans des artères souples (voir § précédent)

3.1.5 Algorithmes multigrilles

Participant : M.H. Lallemand

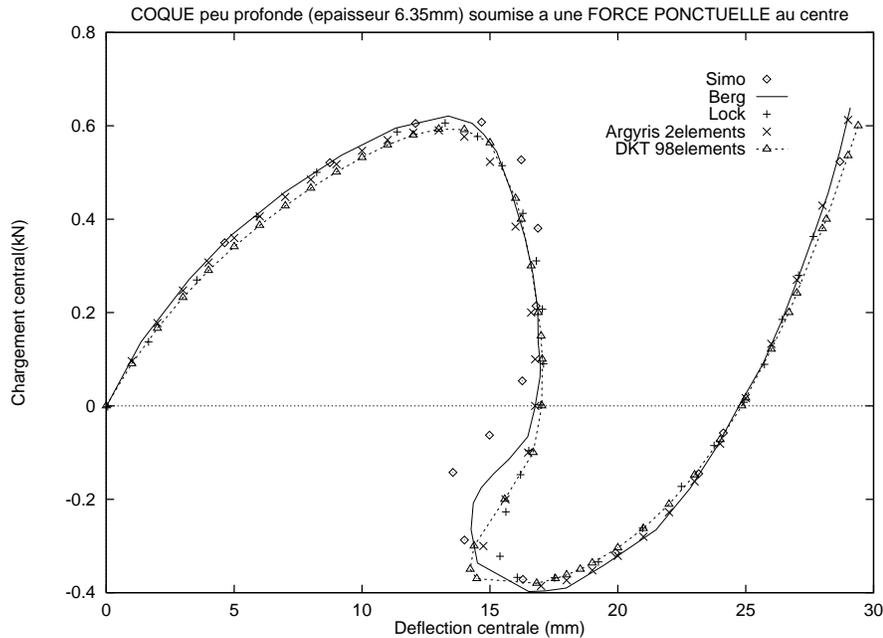


Figure 3 : *Flambement. Résultat du calcul et comparaison aux résultats de la littérature*

L'approche choisie est géométrique (volumes finis généralisés) et vise la résolution des équations d'Euler et de Navier-Stokes pour des écoulements de fluides compressibles, en mettant l'accent sur l'étude d'algorithmes parallèles et multi-niveaux. Il existe principalement deux façons d'envisager des solveurs multi-niveaux sur machines parallèles. La première consiste à paralléliser chaque étape (conceptuellement séquentielle) de la résolution multigrille et conduit inévitablement au problème d'un parallélisme réduit: plus le nombre de degrés de liberté est petit et moins actifs sont les processeurs initialement affectés pour la résolution du problème au niveau le plus fin. Une deuxième manière de procéder consiste à envisager un solveur multigrille conceptuellement parallèle. Pour ce faire, et s'inspirant des travaux faits dans les références ^{1, 2} on décompose le problème résiduel initial en deux sous problèmes in-

¹J.Chan and R.Tuminaro: A survey of parallel multigrid algorithm, RIACS Tech. Report 87.22

²J.Xu: Iterative methods by space decomposition and subspace correction, SIAM Review,34,581-613,1992

dépendamment solvables. La partie oscillante du résidu est corrigée sur le niveau le plus fin et sa partie lisse sur un niveau plus grossier. Des premiers résultats (1-D) pour deux niveaux de grilles, effectués en collaboration avec B. Koobus du projet Sinus de Sophia Antipolis sont donnés dans [64]. L'extension à plusieurs niveaux et à des modèles d'équations plus complexes est en cours. En parallèle, l'écriture du problème résiduel fait l'objet de nouveaux développements [13].

3.1.6 Logiciels de calcul

Participants : N. Devaux, F. Hecht, B. Mohammadi

L'effort logiciel s'est axé cette année autour de deux logiciels. Le logiciel *NSP1B3* de calcul d'écoulements tridimensionnels incompressibles par éléments finis tétraédriques P1-bulles a été modifié afin d'y inclure divers modèles de turbulence (travail en collaboration avec PSA) et des conditions aux limites plus complètes (fig 4).

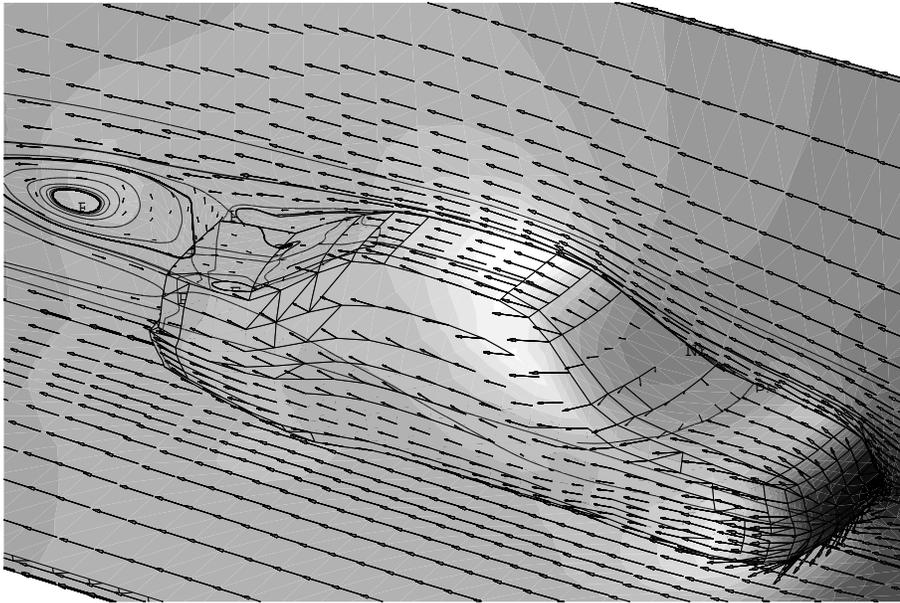


Figure 4 : *Ecoulement autour d'une voiture; isobares et lignes de courant.*

La seconde action a concerné *NSC2KE* [71]. Ce logiciel offre plusieurs possibilités pour résoudre les équations de la mécanique des fluides com-

pressibles pour des configurations 2D et axisymétriques. L'utilisateur peut choisir entre les schémas de Roe, Osher, Cinétique, Hybride (cinétique corrigé pour les discontinuités de contact) et SUPG. Le modèle de turbulence $k - \varepsilon$ est disponible avec les lois de parois ou une approche bi-couche. Ce solveur autonome est en libre service et a fait l'objet d'un dépôt au CPL. Ce solveur a été distribué à une trentaine de laboratoires à travers le monde (Europe, USA, Japon), et est largement utilisé dans l'enseignement (Ecole Polytechnique, Universités de Paris 6, de Houston, d'Idaho,...).

3.2 Modélisations cinétiques

3.2.1 Généralités

Les modèles cinétiques permettent une description physique fine des milieux particuliers par une analyse de l'évolution des populations de particules à position et vitesse données. Leur utilisation est nécessaire pour la simulation de gaz raréfiés tels qu'on les trouve à haute altitude autour des corps de réentrée ou à l'intérieur des réacteurs à diffusion de vapeur. Leur simulation numérique est cependant délicate et exige de gros moyens de calcul.

Dans ce cadre, le projet MENUSIN s'attache à développer, étudier et valider divers outils numériques de simulation, adaptés aux situations pratiques étudiées [7] [19] [59].

3.2.2 Couplage adaptatif des équations de Boltzmann et de Navier-Stokes

Participants : J.F. Bourgat, P. Le Tallec, F. Mallinger, B. Perthame, O. Pironneau

Les travaux de recherche effectués cette année s'insèrent dans le cadre du projet Européen Hermès. Cette recherche s'effectue en collaboration avec les chercheurs du groupe du Professeur Neunzert de l'université de Kaiserslautern.

Pour réaliser des calculs d'écoulements externes hypersoniques en régime semi-dense tels qu'on les rencontre dans les écoulements autour d'engins spatiaux en haute atmosphère, nous avons implémenté une technique de couplage des équations de Boltzmann et de Navier-Stokes, fondée sur une interprétation cinétique des flux. Divers résultats numériques

sont obtenus sur des domaines fixés a priori. Par la suite, afin de déterminer de manière automatique les domaines de calcul Boltzmann et Navier-Stokes, nous avons étudié et implémenté deux critères mathématiques, le premier basé sur l'analyse directe de la distribution cinétique de Chapman-Enskog, le second basé sur l'analyse de certains résidus variationnels de l'équation de Boltzmann. Ce deuxième critère se ramène au calcul des résidus des équations de Grad associés à la méthode des treize moments. Nous avons comparé différents résultats numériques obtenus pour différentes formes des équations de Grad. Les résultats les plus intéressants sont obtenus pour les équations de Grad en forme non-conservative.

Ces deux études, conduites séparément, ont abouti à l'implémentation d'un algorithme global de couplage adaptatif. Cet algorithme comprend la phase de pré-traitement qui consiste à déterminer de manière automatique les domaines de calcul Boltzmann et Navier-Stokes, puis la phase de couplage des solveurs Boltzmann et Navier-Stokes (algorithme de marche en temps [60]).

Dans un souci de clarté, cet algorithme a été implémenté de telle sorte que l'inter-dépendance des différents codes utilisés se limite à l'échange de fichiers de données. Cette technique de couplage est maintenant efficace (Figure 5). La validation des résultats numériques est obtenue par comparaison avec une solution Boltzmann de référence.

Les travaux que nous avons réalisés s'appliquent à des gaz monoatomiques pour les critères, et s'étendent à des gaz diatomiques monotempératures pour le couplage des équations de Boltzmann et de Navier-Stokes. Nos travaux s'orientent maintenant vers la généralisation du couplage global adaptatif au cas des gaz diatomiques monotempératures.

3.2.3 Etude cinétique de couches limites en régime transitionnel

Participants : J.F. Bourgat, P. Le Tallec, B. Mohammadi, B. Perthame

Le but de cette étude réalisée pour le CEA-CESTA, est de développer et valider des conditions aux limites de glissement permettant de modéliser les écoulements semi-raréfiés à l'aide des équations de Navier-Stokes. Les régimes visés sont des écoulements hypersoniques à nombre de mach

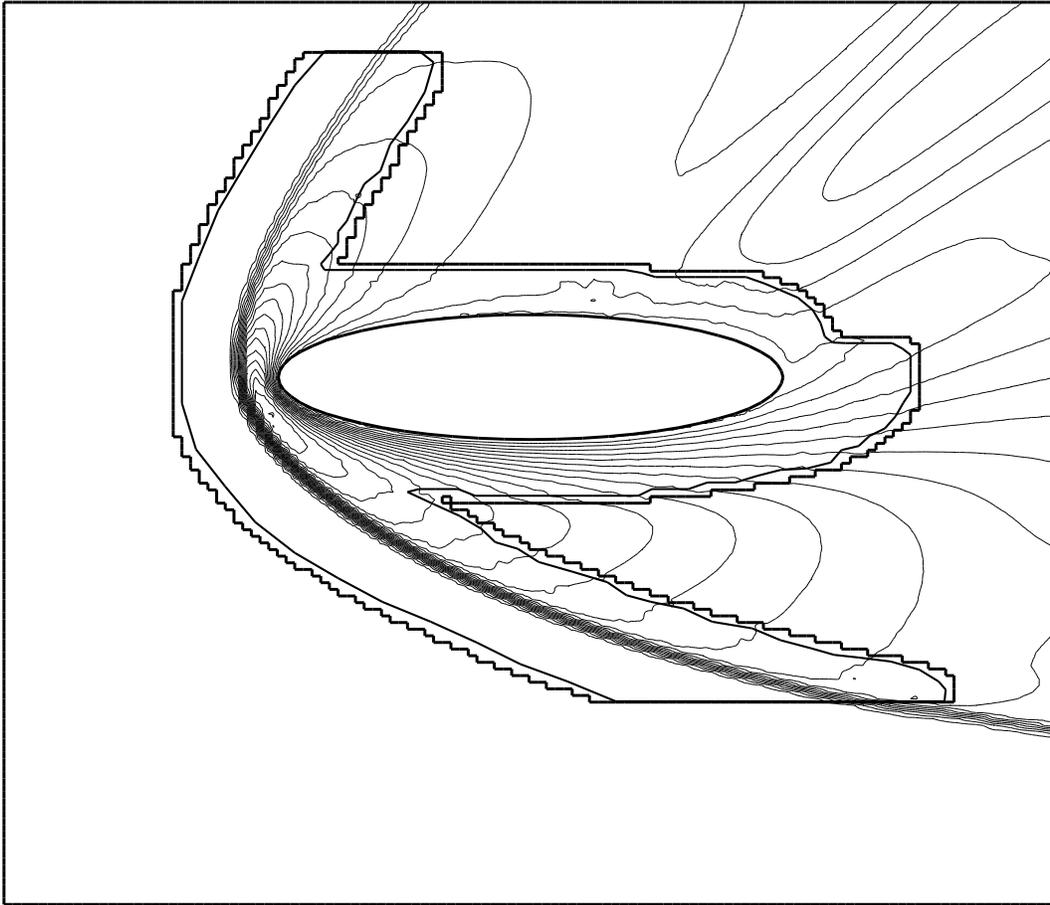


Figure 5 : Isovaleurs de la température à Mach 20 et pour un angle d'attaque de 30° . On distingue les zones Boltzmann et Navier-Stokes.

élevé (20), à faible nombre de Reynolds ($Re/m < 100000$) et à basse température.

Nous avons comparé numériquement, dans un cadre bidimensionnel, les modèles analytiques de Grad, Gupta-Scott, Coron aux modèles cinétiques de couches limites. De nombreux essais, pour différentes incidences et différentes raréfactions, ont mis en évidence l'intérêt et la pertinence du modèle de Grad reliant les sauts de vitesse et de température à la paroi aux flux de friction et de chaleur.

A la suite de cette étude, les conditions aux limites de Grad ont été introduites dans un calcul Navier-Stokes et ont donné des résultats voisins de ceux obtenus directement par un calcul Boltzmann dans le cas de calculs à faible nombre de Knudsen. Cette dernière approche est cependant dix fois moins chère en temps calcul.

3.2.4 Autres applications physiques

Participants : J.F. Bourgat, P. Le Tallec, B. Perthame

En collaboration avec M^r. Duval (Ecole des Mines de Nancy), nous avons élaboré un logiciel *Boltzmann axisymétrique* pour simuler l'évaporation d'un métal en fusion dans le vide et son dépôt sur une surface réceptrice.

En collaboration avec M^r. Chardin (Ecole des Mines de Paris et société Teknoson), on a aussi simulé, à l'aide de l'équation de Boltzmann axisymétrique, le traitement de surface de pièces métalliques par l'impact d'un grand nombre de billes d'acier mises en mouvement par des parois vibrantes. Le but est d'estimer les vitesses d'impact. Les résultats obtenus montrent que le phénomène est bien modélisable par l'équation de Boltzmann. Il faudrait maintenant faire une vraie simulation tridimensionnelle car dans la pratique, le problème n'est pas toujours axisymétrique.

3.2.5 Logiciel Boltzmann

Participants : J.F. Bourgat, P. Le Tallec, B. Perthame

Les études sur l'évaporation métallique et le grenailage nous ont conduit à mettre au point un logiciel Boltzmann axisymétrique, calculant les écoulements internes de gaz raréfiés, dans une enceinte cylindrique. Le logiciel **BOL2D** de simulation bidimensionnelle de l'équation de Boltzmann a aussi été modifié.

- Le domaine d'écoulement est maintenant à frontière quelconque.
- Le calcul de flux sortants à travers une surface quelconque est aussi possible, notamment pour le couplage Boltzmann Navier-Stokes.
- On peut aussi visualiser la distribution des vitesses des particules avec comparaison à la Maxwellienne et à la distribution de Chapman-Enskog.

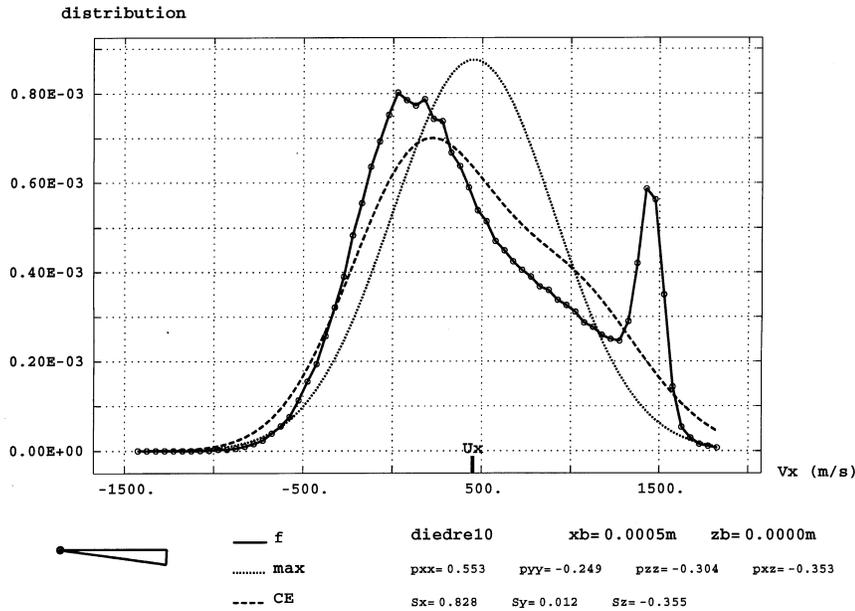


Figure 6 : *Distribution de la vitesse tangentielle des particules au début de la face supérieure d'un dièdre en incidence (-10°). Comparaison avec la distribution Maxwellienne et la distribution de Chapman-Enskog associées.*

3.2.6 Schémas cinétiques en Mécanique des Fluides

Participants: B. Khobalatte (Post Doc. Lausanne), B. Perthame, Y. Qiu

Le but de ce travail est de développer grâce à une bonne compréhension des modèles cinétiques, des schémas cinétiques permettant la résolution numérique stable des équations d'Euler ou de Navier-Stokes compressibles.

Dans une autre direction, nous avons appliqué le schéma de "fluctuation splitting" de P. Roe et H. Deconinck à la résolution numérique d'une formulation cinétique des équations de Navier-Stokes. L'intérêt de ces schémas vient de la qualité des résultats obtenus en advection libre et de leur simplicité. Les premiers schémas de l'an dernier ont été développés. Leurs propriétés de convergence et de stabilité entropique ont été confirmés [12] [19] [48]. Le passage à l'ordre 2 semble cependant difficile.

3.3 Electromagnétisme, semi-conducteurs

3.3.1 Généralités

Ces thèmes regroupent la simulation des semiconducteurs, des phénomènes d'électromagnétisme et l'étude de la trace radar des avions.

Ces recherches ont un impact direct sur l'industrie des composants pour divers domaines, informatique, télécommunications, équipements automobiles et aéronautiques par exemple. Les travaux correspondants se font principalement en collaboration avec le CNET, Dassault-Aviation et la DRET.

3.3.2 Equations de Maxwell instationnaires

Participants : F. El Dabaghi, O. Pironneau, A. Zebic

Les équations de Maxwell modélisent les phénomènes de propagation et de réflexion d'ondes électromagnétiques. Leur résolution peut se faire en variables (x, t) ou dans le domaine fréquentiel.

Un premier axe de recherche porte sur la prise en compte de milieux de propagation hétérogènes à la surface d'obstacles diffractant les ondes électromagnétiques. Dans ce cadre, le développement et le calcul par homogénéisation de conditions aux limites équivalentes à des peintures inhomogènes a été poursuivi. Ces conditions peuvent s'appliquer aux équations d'Helmholtz ou de Maxwell dans le cas où la longueur d'onde du signal incident est grande par rapport à l'épaisseur de peinture, et ont été validées sur divers cas tests académiques [73].

Enfin, l'étude de conditions aux limites absorbantes a été poursuivie dans le cadre des équations de Maxwell, écrites par rapport aux variables (x, t) , dans le cas de milieux non homogènes ou de frontières courbes. La factorisation du symbole pseudo-différentiel de l'opérateur des ondes ou de l'opérateur vectoriel de Maxwell a été effectuée pour un problème à coefficients variables dans un domaine borné à frontière courbe. Une approximation asymptotique de ce symbole a été construite à l'aide des approximants de Padé, conduisant à une condition aux limites absorbante du second ordre. Cette condition a été implémentée dans le cadre du calcul bidimensionnel de réfraction d'ondes sur maillage non structuré.

3.3.3 Résolution des équations de Maxwell harmoniques

Participants : M.O. Bristeau, R. Glowinski, J. Périaux

On considère les équations de Maxwell instationnaires et on cherche les champs diffractés par un obstacle en régime harmonique, ceci en vue d'applications à des problèmes de radar et de furtivité.

On utilise pour ce faire une méthode de contrôlabilité exacte afin d'accélérer la convergence vers les solutions harmoniques. En 2D, on a généralisé la méthode, déjà testée pour le mode transverse magnétique (TM) au mode transverse électrique (TE), ce qui a nécessité l'adjonction d'un terme de pénalisation. Le code mis en œuvre a été testé sur différentes géométries et en particulier sur les problèmes tests du " *Workshop on Approximations and Numerical Methods for the Solution of Maxwell Equations*". D'autres fonctionnelles de coût ont aussi été testées. Sur la frontière artificielle, on applique une condition absorbante d'ordre 2. La méthodologie a aussi été développée et testée pour la résolution de l'équation de Helmholtz tridimensionnelle, ce qui représente une étape en vue de la résolution des équations de Maxwell en trois dimensions d'espace.

En suivant les travaux de A. Zebic, on a enfin évalué le domaine d'application des conditions de frontière équivalentes à une couche mince de matériau diélectrique sur un obstacle.

3.3.4 Semiconducteurs

Participants : A. El Boukili, F. Hecht, P. Le Tallec, A. Marrocco, B. Perthame

Pour la simulation numérique du comportement électronique de composants semi-conducteurs, nous utilisons pour le moment le modèle de *dérive-diffusion*. Ce dernier peut s'appliquer à un grand nombre de composants. Cette étude se fait en collaboration avec le CNET-Bagneux.

Les variables utilisées pour décrire le modèle mathématique sont le potentiel électrostatique φ et les quasi-niveaux de Fermi φ_n et φ_p pour les électrons et les trous respectivement. Le schéma d'approximation de ce système d'équations aux dérivées partielles non linéaires est réalisé à l'aide d'une formulation aux éléments finis mixtes. Cette approximation qui conduit à un système de 6 équations à 6 inconnues permet d'avoir

une meilleure précision sur des grandeurs physiques importantes comme les courants.

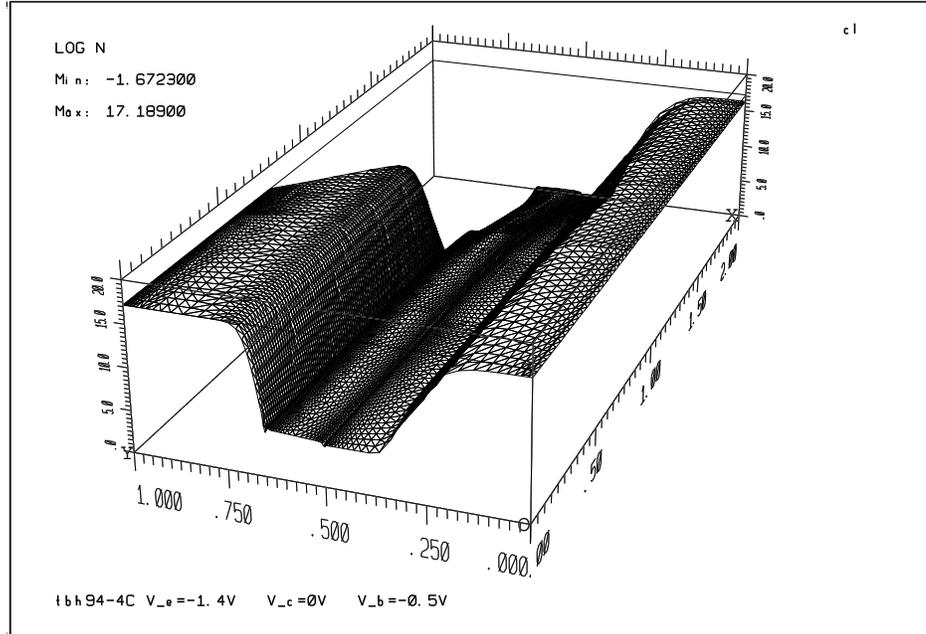


Figure 7 : *Transistor bipolaire à hétérojonctions. Distribution des électrons (échelle log) lorsque l'effet transistor s'amorce. Potentiels collecteur: 0.V, emetteur: -1.4V, Base: -0.5V*

Après différents tests numériques sur les schémas de résolution, nous avons retenu la variante consistant à considérer de façon séquentielle les équations, utilisant un schéma de Douglas-Rachford pour l'équation de Poisson et un schéma d'Euler implicite pour les équations de continuité. Ce choix offre un bon compromis entre facilité d'implémentation et efficacité. Ces schémas en temps sont utilisés comme une technique permettant d'obtenir la solution stationnaire du problème. Afin d'augmenter la vitesse de convergence vers cet état, on utilise en outre des pas de temps locaux. Ces derniers sont actualisés automatiquement au cours des itérations. L'analyse numérique de ces différents schémas et des opérateurs mathématiques associés a été effectuée par El Boukili. Un modèle de couches limites pour le quasi-niveau de Fermi associé aux porteurs minoritaires au voisinage des contacts ohmiques a été introduit dans la formulation du problème (voir précédent rapport). Cette année

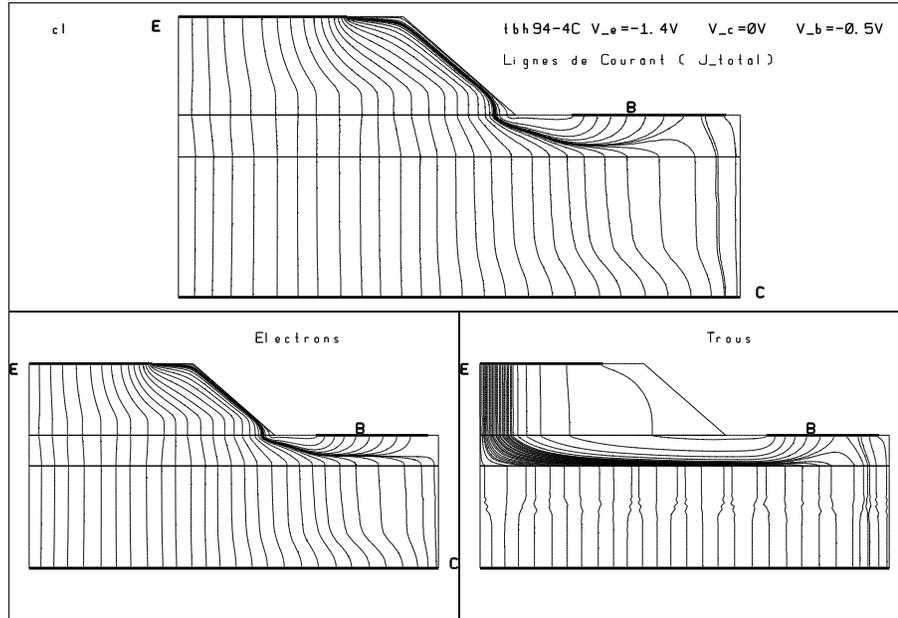


Figure 8 : *Transistor bipolaire à hétérojonctions. Lignes de courants (électrons, trous et électrons+trous) lorsque l'effet transistor s'amorce. Potentiels collecteur: 0.V, emetteur: -1.4V , Base: -0.5V*

des structures 2D réalistes ont été simulées. Tout d'abord un J.F.E.T. (transistor à effet de champ) a servi à calibrer et valider le logiciel de simulation. Les courbes caractéristiques $I_D(V_D)$ -courant de drain en fonction du potentiel appliqué- pour différentes valeurs du potentiel de grille (le potentiel de la source restant fixé par exemple à la valeur zéro) ont été obtenues et se sont montrées conformes aux résultats espérés. Les résultats obtenus ne sont pas très sensibles aux maillages utilisés.

Nous nous sommes ensuite intéressés aux transistors bipolaires (NPN) à homojonctions ou à hétérojonctions, en vue d'en calculer le gain en courant dans une plage de fonctionnement normal-direct, c'est à dire lorsque la jonction Emetteur-Base est polarisée en direct et la jonction Base-Collecteur en inverse. Les courbes de gain semblent moins sensibles aux maillages dans le cas où l'on simule un transistor bipolaire à homojonctions que dans le cas où l'on simule un T.B.H. (transistor à hétérojonctions). Dans ce dernier cas, le quasi-niveau de Fermi pour les électrons présente une forte variation (analogue à une discontinuité)

au niveau de l'hétérojonction et un maillage raffiné (adapté) doit être utilisé dans cette région. Un estimateur d'erreur locale a été développé et doit être inclus dans un outil d'adaptation de maillages.

3.3.5 Calcul des capacités à l'intérieur d'une puce électronique

Participant : F. Hecht

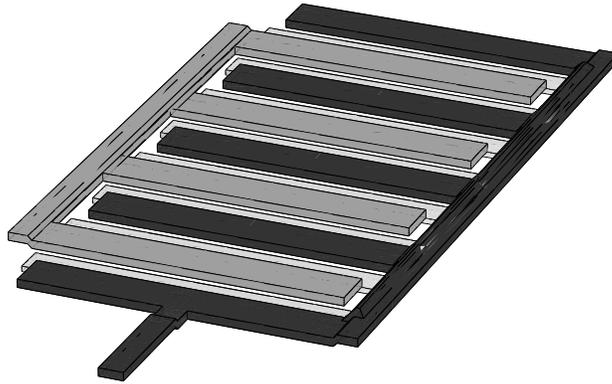


Figure 9 : *Visualisation des contacts d'un transistor replié*

Le problème posé par le CNET-CNS consiste à calculer les capacités inter-conducteurs à l'intérieur d'une puce électronique. Les équations à résoudre sont simples, mais le domaine de calcul est de géométrie très compliquée. La solution apportée a été de mettre au point un générateur automatique de maillage à partir des données technologiques disponibles: épaisseurs de métallisation, épaisseur des oxydes intercouches, forme des contacts, géométrie des fils conducteurs. Les données sont d'abord traduites sous la forme d'une fonction discontinue donnant les cotes des métallisations, puis introduites dans un générateur automatique de maillages tridimensionnels.

3.4 Outils et environnement pour le calcul scientifique

3.4.1 Introduction

Pour tous les domaines industriels mentionnés plus haut, la modélisation numérique a besoin d'un environnement spécifique. Cet environnement est constitué de mailleurs adaptatifs, de solveurs algébriques efficaces, de logiciels de sortie graphique, d'outils permettant d'utiliser les modèles développés dans une boucle d'optimisation automatique, et de calculateurs parallèles. Sans cet environnement, la recherche ne peut pas dépasser le stade académique. Le projet Menusin est donc naturellement amené à travailler sur ces différents outils et ce en collaboration avec les autres projets de Calcul Scientifique de l'INRIA. Pour bien mettre en évidence cette collaboration, tout l'aspect lié au calcul parallèle est regroupé dans un chapitre distinct.

3.4.2 Mailleurs adaptatifs

Participants : M. Castro, P.L. George (MODULEF), F. Hecht, E. Saltel (MODULEF)

Les résultats numériques actuels dépendent fortement de la qualité des maillages utilisés et sont très difficiles à valider. Il est donc maintenant nécessaire d'optimiser les maillages jusqu'à l'obtention d'un résultat validé. Cette démarche nécessite trois niveaux d'outils :

- *i*) des logiciels de génération automatique de maillages (EMC2 et GHS3D développés par les projets MENUSIN et MODULEF),
- *ii*) des logiciels d'adaptation de maillage, permettant d'adapter des maillages existants à des critères géométriques (métriques) donnés par les utilisateurs,
- *iii*) des stratégies de calcul d'erreurs a posteriori et de certification des résultats permettant de définir les critères de l'étape *ii*).

Le projet s'est intéressé cette année à l'adaptation de maillages tridimensionnels. Pour ce faire, quatre étapes sont nécessaires.

- *i*) Il faut d'abord définir la géométrie indépendamment des logiciels de CAO utilisés, dont les informations sont lourdes et peu maniables. Nous avons donc choisi de reconstruire les contours à partir de la donnée initiale d'un maillage de peau et du calcul d'une paramétrisation C^1 de chaque maille.

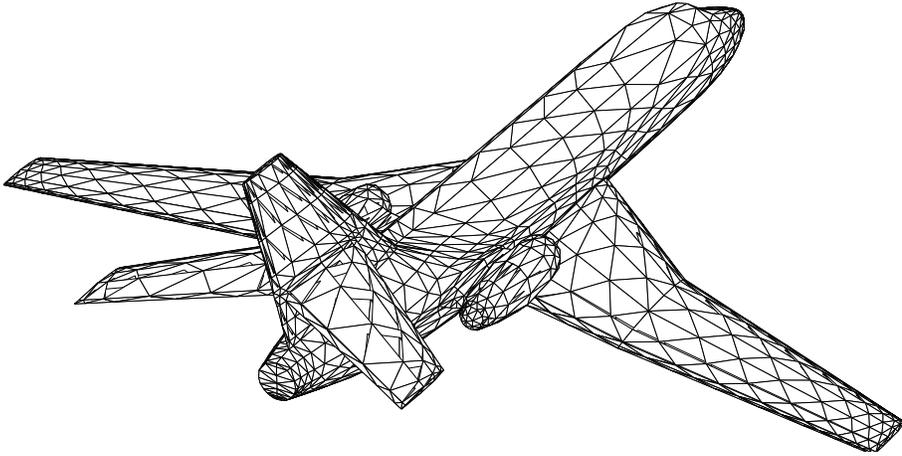


Figure 10 : *Maillage initial du Falcon.*

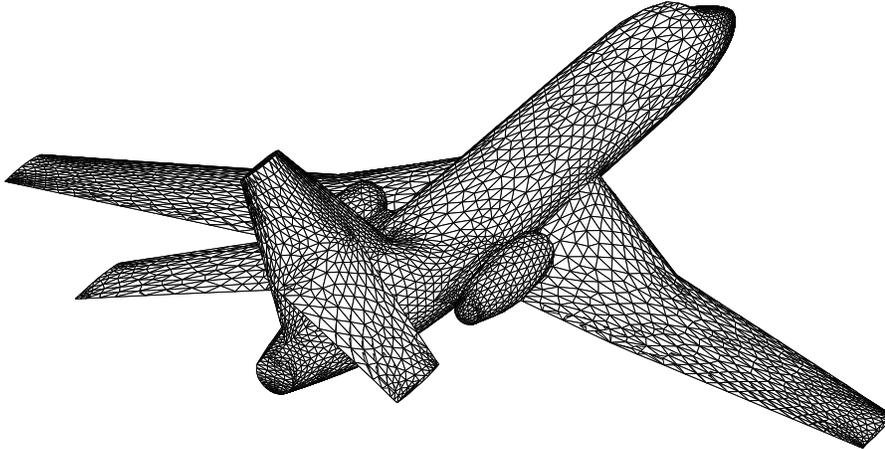


Figure 11 : *Maillage de peau adapté avec critère géométrique.*

- *ii*) Il faut ensuite construire des critères permettant de définir la forme et la taille optimale de chaque maille. Ces critères peuvent provenir de calculs d'erreurs a posteriori que nous avons développé pour les problèmes de Poisson, de Stokes ou de semi-conducteurs, du calcul du Hessien d'une solution approchée (la température en Mécanique de Fluides compressibles) ou bien de considérations purement géométriques. Ces informations permettent alors de construire une métrique adaptée au problème.

- *iii*) Il faut ensuite remailler les contours par déplacement-projection des nœuds, insertion de nœuds supplémentaires sur le contour, et permutations d'arêtes. Le but est d'obtenir des mailles qui dans la métrique du point *ii*) soient des triangles équilatéraux de côté unité.
- *iv*) La dernière étape consiste à générer le maillage volumique conforme à la métrique du point *ii*). Cette étape est en cours d'implémentation dans le cadre d'une collaboration avec le projet MODULEF et la Société Simulog.

3.4.3 Optimisation de formes

Participants: F. Baron, J. Herskovitz (Brésil), P. Le Tallec, O. Pironneau, Y. Xiang

La conception optimale de formes consiste à utiliser les modèles numériques de comportement développés au préalable pour optimiser la forme de l'objet étudié. Cette action est le débouché naturel d'une stratégie de modélisation et est un outil indispensable en contrôle actif des écoulements et des structures tel qu'on le prévoit dans un proche avenir.

Trois applications ont été plus particulièrement considérées:

- l'optimisation de formes aérodynamiques sous contraintes électromagnétiques, en collaboration avec le CEA-CESTA. Le calcul de l'état aérodynamique est effectué par des algorithmes de marche en espace, le calcul électromagnétique utilise des éléments finis $P1$ et une condition aux limites absorbante DtN exacte.
- l'optimisation de formes de riblets dans le cadre du projet européen ECARP. Le calcul de l'écoulement utilise un solveur PNS spécialement développé pour le problème.
- l'optimisation de la forme d'une digue.

Tous ces calculs utilisent un algorithme de point intérieur développé par J. Herskovitz, et un calcul analytique du gradient de la fonction coût par état adjoint. Le cœur du problème consiste à intégrer ce calcul d'état adjoint dans les solveurs directs existants.

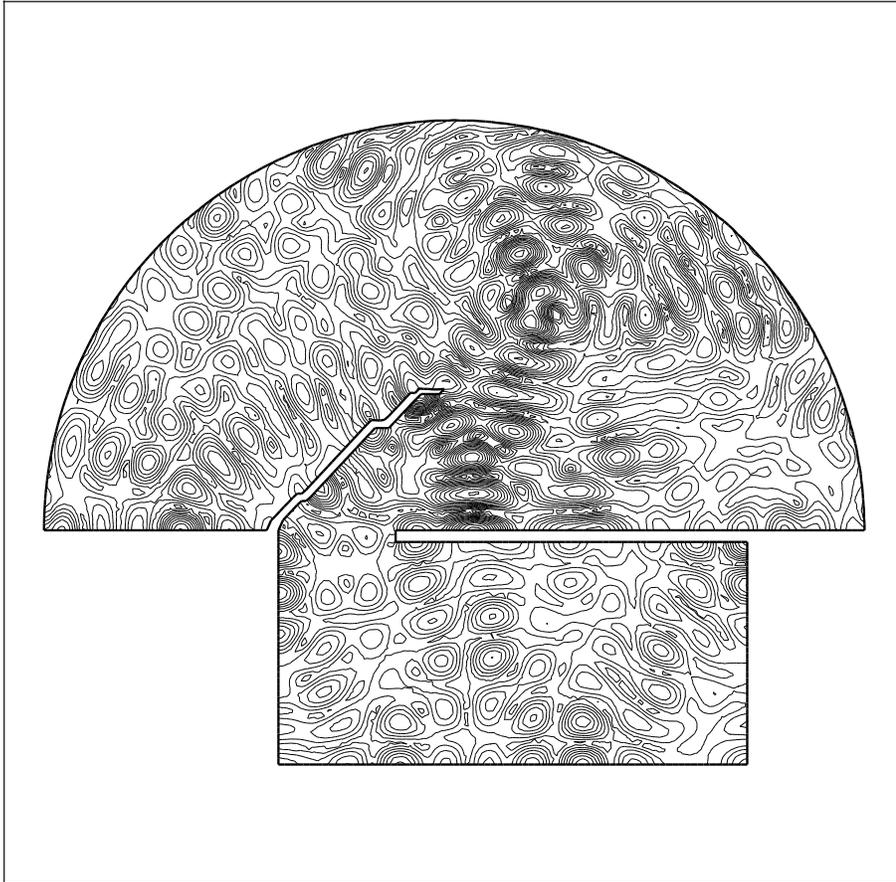


Figure 12 : *Optimisation de la forme d'une digue pour minimiser les remous dans le port.*

4 Actions industrielles

Il existe une importante collaboration avec les équipes de Dassault-Aviation sur les méthodes de simulation numérique en mécanique des fluides, la modélisation de la turbulence, les méthodes de sous-domaines et récemment l'électromagnétisme. La plupart de ces actions se font dans le cadre de contrats DRET, Brite-Euram et CNES. D'autres actions en mécanique des fluides sont menées avec PSA.

Dans le domaine de la simulation numérique des composants semiconducteurs, il existe une collaboration étroite avec le CNET.

Par ailleurs, le projet coopère de manière étroite avec le CEA-CESTA à Bordeaux dans le domaine de la modélisation des gaz raréfiés et de l'optimisation de formes. Les logiciels de maillages sont développés en collaboration avec Simulog.

Citons enfin les contacts établis à des degrés divers avec l'Aérospatiale et le CEA-Limeil (gaz raréfiés), l'ONERA et l'EDF (calcul parallèle).

5 Actions nationales et internationales

Il existe de nombreux contacts entre les chercheurs du projet et les centres de recherche et de calcul des Universités de Pavie, de Séville, de Malaga, avec l'Université Technique de Lisbonne, avec le Politecnico de Turin, avec l'Université Laval du Québec, l'Université du Minnesota à Minneapolis, l'Université du Colorado à Denver et à Boulder, le Courant Institute à New-York et le Texas Institute for Computational Applied Mathematics (Austin, Texas), avec le Tata Institute (Bombay et Bangalore), l'Université Nationale Polytechnique d'Athènes, l'Université Fédérale de Rio de Janeiro et l'École Mohamadia d'Ingénieurs (Rabat). Cette collaboration se traduit en particulier par l'échange de visiteurs, d'étudiants doctoraux ou post-doctoraux. Citons en particulier les échanges fréquents avec le professeur J. Herskovitz sur les problèmes d'optimisation de formes.

En dehors de ces contacts privilégiés et du flux régulier de visiteurs étrangers reçus par le projet, l'action internationale de MENUSIN s'est concentrée sur trois axes principaux.

Le premier axe est un accord de collaboration INRIA-NSF, portant sur l'étude et le développement de méthodes de décomposition de domaines et de solveurs hiérarchiques adaptés au calcul parallèle. Cet accord implique l'INRIA, l'ONERA et les Universités du Colorado et du Texas (Rice et Texas A et M). Dans ce cadre, deux chercheurs de l'Université du Colorado ont effectué un séjour de 3 semaines dans le projet MENUSIN. Réciproquement, B. Mohammadi a séjourné à l'Université du Colorado à Boulder pour mettre en place une collaboration sur l'intégration de modèles de turbulence dans des codes de calcul parallèles.

Le second axe est la mise en place d'une collaboration franco-russe en Calcul Scientifique et Mécanique des Fluides. Outre la DRET, les parte-

naires de cette action sont le projet SINUS, le CNRS, Dassault-Aviation, l'Université de Moscou, le centre de Modélisation Mathématique de Moscou, l'Université de Tomsk, le Centre de Calcul et l'Institut de Mécanique des Fluides de Novosibirsk. Deux axes sont particulièrement privilégiés:

- le calcul d'écoulements en régime raréfiés avec le professeur Ivanov qui a séjourné à l'Inria en février 1994 et qui reviendra avec son équipe en décembre,
- le techniques de décomposition de domaines et de domaines fictifs (séjour de Yu .A. Kuznetsov, S. Nepomniastchy et stage de longue durée de A. Bespalov débutant en novembre 1994).

En outre le projet a organisé un séminaire de calcul scientifique dans le cadre du centre de recherche franco-russe Liapunov.

Enfin, les recherches sur les écoulements de gaz raréfiés sont menées en contact étroit avec le groupe de "*Technomathematik*" de l'Université de Kaiserslautern.

Pour conclure, rappelons que le projet est coorganisateur du séminaire IDENT-MENUSIN-MODULEF (mensuel), organisateur du groupe de travail Méthodes numériques et environnement, et que dans ce cadre plusieurs chercheurs et professeurs ont été accueillis, dont :

- J. Rappaz (EPFL, Lausanne)
- J. Herskovitz (Université de Rio de Janeiro, Brésil)
- M. Sever (The Hebrew University, Jerusalem)
- Yu. Kuznetsov (Academy of Sciences, Moscow)
- G. Gatica (Université de Conception, Chili)
- N. Bellomo (Politecnico di Torino)
- Z. Zhu (CSIRO Melbourne, Australie)
- J.M.R. Graham (Imperial College, Londres)
- C.V. Ramakrishnan (Indian Institute of Technology, Delhi)
- F. Potra (University of Iowa)
- A.J. Kearsley (Rice University, Houston)
- B. Khobalatte (EPFL, Lausanne)
- M. Tabata (Tokyo University, Japan)

6 Diffusion des résultats

6.1 Diffusion de produits

Nous donnons ci-dessous une liste de logiciels réalisés dans le projet au cours des dernières années et diffusés dans des laboratoires extérieurs

OPTMSH: Module de maillage en 2D, version adaptative.

OPTMTR: Générateur de métrique pour OPTMSH.

EMC2: Logiciel de maillage automatique interactif 2D (réalisé en collaboration avec MODULEF).

NSP1B3: Navier-Stokes incompressible 3D, éléments finis P^1 bulle/ P^1 .

MACFEM: Eléments finis sur MacIntosh.

LGCAPA: Calcul de capacités extrinsèques en 3D.

NS2DCA: Résolution des équations de Navier-Stokes 2D compressible par correction rotationnelle en éléments finis P^1 bulle/ P^1 .

GHS3D: Module de maillage en 3D (réalisé en collaboration avec MODULEF).

BOL2D: Logiciel de calcul des écoulements bidimensionnels de gaz raréfiés (Version 2).

NSC2KE: Logiciel de résolution des équations d'Euler et de Navier-Stokes compressible en 2D ou axisymétrique, en laminaire ou turbulent. Possibilité de flux de Roe-Osher, cinétique ou SUPG. Modèle de turbulence $k - \varepsilon$ avec loi de paroi ou bi-couche (collaboration SINUS).

6.2 Actions d'enseignement

6.2.1 Enseignement universitaire

- Analyse numérique et mécanique des fluides, cours de DEA, université Paris 6 (O. Pironneau).
- Mathématiques appliquées, cours de DEA, université Paris 6 et Ecole Polytechnique (B. Perthame).
- Calcul scientifique approfondi, cours de DEA, université Paris 9 (P. Le Tallec).
- Biomécanique, cours de DEA, université Paris-Créteil (M. Thiriet).

- Méthodes numériques en dynamique des gaz, cours de Majeure, Ecole Polytechnique (P. Le Tallec).
- Analyse numérique, cours de 2^e cycle de Mécanique, université de St-Quentin en Yvelines (F. El Dabaghi).

6.2.2 Séminaires et formation permanente

- Franco-Russian seminar on scientific computing, Centre Liapunov, Moscou, février 1994 (B. Mohammadi, P. Le Tallec).
- Méthodes de Monte Carlo et applications aux gaz raréfiés, Ecoles CEA-EDF-INRIA, Rocquencourt, février 1994 (P. Le Tallec).
- Méthodes numériques en électromagnétisme, Ecoles CEA-EDF-INRIA, Rocquencourt, avril 1994 (M.O. Bristeau).
- On optimal shape design for aerodynamics, Von Karmann Institute, may 1994 (O. Pironneau).
- Lectures on turbulence modelling, Ecole franco-espagnole de mathématiques appliquées, Séville, septembre 1994 (O. Pironneau).
- Les méthodes numériques en mécanique des fluides, stage F03, ENSTA, Paris, octobre 1994 (A. Marrocco).

6.3 Participation aux manifestations

- 4^e Colloque maghrébin sur les modèles numériques de l'ingénieur, novembre 1993, Alger.
- Conference on numerical methods for scattering of electromagnetic waves, december 1993, Washington.
- 57^e Rencontre entre physiciens théoriciens et mathématiciens, décembre 1993, Strasbourg.
- CFD software users meeting, may 1994, Basel.
- Workshop on computational electromagnetics, may 1994, Oxford.
- 26^e Congrès national d'analyse numérique, juin 1994, Les Karellis (Savoie).
- ASME Meeting, june 1994, Lake Tahoe, USA.
- 4th International Conference on hyperbolic equations, june 1994, New-York.

- NASECODE X Conference, june 1994, Dublin.
- 6th Biennial IEEE Conference on Electromagnetic Field Computation, july 1994, Aix-les-Bains.
- ICNSFD, july 1994, Bangalore, India.
- WCCM III Conference, august 1994, Chiba, Japan.
- Second Conference on Computational Structure Technology, august 1994, Athens.
- ECCOMAS Conference, september 1994, Stuttgart.
- Ecole Simulacion Numerica en Mecanica y Fisica, septembre 1994, Séville.
- 8th Conference of the European Consortium for Mathematics in Industry, september 1994, Kaiserslautern.
- Workshop on semiconductor modelling with the French Network of the CNRS SPARCH, october 1994, Nice.
- Symposium on numerical methods for environmental problems, 1994, Malaga.
- 2nd World Congress of Biomechanics, 1994, Amsterdam.

6.4 Activités extérieures

P. Le Tallec participe au Comité Directeur des Ecoles d'été CEA-EDF-INRIA et assure l'organisation scientifique des écoles sur les problèmes non linéaires appliqués.

7 Publications

Livres et monographies

- [1] P. LE TALLEC, «Domain decomposition methods in computational mechanics», *Advances in computational mechanics* (North-Holland), 1994, Volume 1.

Thèses

- [2] F. J. BARÓN LÓPEZ, *Optimizacion de forma con restricciones, en problemas acoplados de ondas y mecanica de fluidos*, thèse de doctorat, Universidad de Malaga, marzo 1994.

- [3] A. KAISS, *Le modélisation numérique du comportement viscoélastique de l'œil et du contact œil-trépan*, thèse de doctorat, Université de Paris 9, juillet 1994.
- [4] M. THIRIET, *Etude des écoulements dans les voies aériennes proximales et les artères de gros calibre*, Habilitation à diriger des recherches, Univ. Paris VII, juin 1994.
- [5] A. ZEBIC, *Conditions de frontière équivalentes en électromagnétisme*, thèse de doctorat, Université de Paris 6, juin 1994.

Articles et chapitres de livre

- [6] Y. ACHDOU, Y. A. KUZNETSOV, O. PIRONNEAU, «Substructuring preconditioners for the $Q1$ mortar element method», *Numerische Mathematik*, to appear, accepted.
- [7] J. F. BOURGAT, L. DESVILETTE, P. LE TALLEC, B. PERTHAME, «Microreversible collisions for polyatomic gases and Boltzmann's H-Theorem», *Eur. J. Mech. B/Fluids* 13, 2, 1994, p. 237-254.
- [8] M. O. BRISTEAU, J. ERHEL, P. FEAT, R. GLOWINSKI, J. PÉRIAUX, «Solving the Helmholtz equation at high wave numbers on a parallel computer with a shared virtual memory», *Int. J. of Supercomputer Applications and High Performance Computing* 9.1, 1995.
- [9] M. O. BRISTEAU, R. GLOWINSKI, J. PÉRIAUX, «Wave Scattering at high wave numbers using Exact Controllability and Finite Element Methods», *IEEE Transactions on Magnetics*, submitted.
- [10] C. CONCA, C. PARES, O. PIRONNEAU, M. THIRIET, «A computational model of Navier-Stokes equations with imposed pressure and velocity fluxes», *Int. J. Numer. Methods in Fluids*, to appear, accepted.
- [11] F. HECHT, A. MARROCCO, «Mixed finite element simulation of heterojunction structures including a boundary layer model for the quasi-Fermi levels», *COMPEL*, 1994, to appear in december.
- [12] B. KHOBALATTE, B. PERTHAME, «Maximum principle on the entropy and 2^{nd} order kinetic schemes», *Math. of Comp.* 62, 205, 1994, p. 119-131.
- [13] B. KOOBUS, M.-H. LALLEMAND, A. DERVIEUX, «Unstructured Volume-Agglomeration MG: Solution of the Poisson equation», *International Journal for Numerical methods in Fluids*, 18, 1994, p. 27-42.
- [14] P. LE TALLEC, P. NICOLAS, «Modélisation numérique des transferts d'humidité en milieu poreux», *Revue européenne des éléments finis*, 3, 1994, p. 57-101.

- [15] P. LE TALLEC, C. RAHIER, «Numerical models of steady rolling for nonlinear viscoelastic structures in finite deformations», *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 37, 1994, p. 1159–1186.
- [16] P. LE TALLEC, T. SASSI, «Domain decomposition with nonmatching grids: Augmented lagrangian approach», *Math. of Comp.*, to appear, accepted.
- [17] P. LE TALLEC, «Numerical methods for nonlinear three dimensional elasticity», in: *Handbook of Numerical Analysis*, North Holland, 1994, p. 465–624, Volume 3, P.G. Ciarlet and J.L. Lions (Ed.).
- [18] B. MOHAMMADI, O. PIRONNEAU, «Compressibility corrections and two layer $k - \varepsilon$ models for hypersonic turbulent flows on unstructured grids», *Journal of CFD*, to appear, submitted.
- [19] B. PERTHAME, Y. QIU, B. STOUFFLET, «Sur la convergence des schémas *Fluctuation-Splitting* pour l'advection et leur utilisation en dynamique des gaz», *C.R.A.S. Paris, série I 319*, 1994, p. 283–288.
- [20] B. PERTHAME, Y. QIU, «A variant of Van Leer scheme for hyperbolic systems», *J. Comput. Phys.* 112, 2, 1994, p. 370–381.
- [21] O. PIRONNEAU, «Applied mathematics and turbulence modelling», *Int. J. Numer. Methods in Eng.*, to appear, accepted.
- [22] C. RIBREAU, M. THIRIET, «Steady flow in descending collapsed tubes», *J. of Biomechanics*, to appear, submitted.
- [23] M. THIRIET, «Mesure des contraintes et des déformations en Biomécanique», *Rev. pratique de contrôle industriel, GAMAC-info 188*, 1994, p. 26–28.

Communications à des congrès, colloques, etc.

- [24] Y. ACHDOU, O. PIRONNEAU, A. ZEBIC, «Effective boundary conditions for Maxwell equations», in: *Proceedings of the Conference on numerical methods for scattering of electromagnetic waves*, R. Lohner (éd.), Washington, december 1993.
- [25] Y. ACHDOU, O. PIRONNEAU, «Numerical simulation of laminar flow at high Reynolds number», in: *Proceedings of 5th Confernce on CFD*, Daiguji (éd.), Sendai, 1993.
- [26] F. J. BARÓN LÓPEZ, J. PÉRIAUX, O. PIRONNEAU, «Coating and shape optimization for Maxwell-Helmholtz equations», in: *Proceedings of 5th Confernce on CFD*, Daiguji (éd.), Sendai, 1993.
- [27] F. J. BARÓN LÓPEZ, O. PIRONNEAU, «Optimal design of a brake waterer», in: *Proceedings WCCM III*, Daiguji (éd.), Chiba, Japan, august 1994.

- [28] M. O. BRISTEAU, R. GLOWINSKI, V. KWOK, J. PÉRIAUX, «Contribution to Problems A and C using Exact Controllability Method.», *in: Proceedings of the Workshop on Approximations and Numerical Methods for the solution of Maxwell Equations.*, R. Lohner, J. Périaux, H. Steve (éd.), J.Wiley and Sons, november 1993.
- [29] M. O. BRISTEAU, R. GLOWINSKI, J. PÉRIAUX, «On The Numerical Solution of the Helmholtz Equation at Large Wave Numbers using Exact Controllability Methods. Application to Scattering», *in: Domain Decomposition Meth. in Science and Engineering*, A. Quarteroni, J. Périaux, Y. A. Kuznetsov, O. Widlund (éd.), A.M.S., p. 399,420, 1994. Contemporary Mathematics ,Vol.157.
- [30] H. CHEN, J. HE, R. GLOWINSKI, A. KEARSLEY, J. PÉRIAUX, O. PIRONNEAU, «Remarks on optimal shape design problems», *in: Proceedings JamesonUS symposium*, C. Caughey (éd.), Cornell, november 1994.
- [31] G. CORNETTI, P. LE TALLEC, O. PIRONNEAU, «Une méthode des caractéristiques-Galerkin pour les équations de Navier-Stokes dans un domaine mince avec frontière libre», *in: Proceedings du 26^e Congrès national d'analyse numérique*, Les Karellis (Savoie), juin 1994.
- [32] G. CORNETTI, B. MAURY, O. PIRONNEAU, «Modelling of shallow waters with 3D Navier-Stokes equations», *in: Proceedings of the Symposium on Numerical methods for environmental problems*, C. Pares (éd.), Malaga, 1994.
- [33] A. EL BOUKILI, «Mixed finite element approach and nonlinear implicit schemes for drift-diffusion equation solution of heterojunction semiconductor devices», *in: NASECODE X Conference*, Boole Press, p. 13–14, Dublin, june 1994.
- [34] F. EL DABAGHI, M. C. DRUGUET, D. ZEITOUN, «Parallel computation of inviscid steady hypersonic flow on KSR1», *in: Proceedings of the Second European Computational Fluid Dynamics Conference, ECCOMAS*, S. Wagner, al. (éd.), J.Wiley Int. Ed., Stuttgart, september 1994.
- [35] F. EL DABAGHI, «Résolution par éléments finis des équations de Maxwell 2D instationnaires et conditions aux limites absorbantes du 2nd ordre complètes», *in: 4^{ème} Col. Maghrébin sur les modèles Numériques de l'Ingénieur*, Alger, novembre 1993.
- [36] F. EL DABAGHI, «Full 2nd order absorbing boundary conditions for 2D unsteady Maxwell equations», *in: Workshop on Computational Electromagnetics*, UCINA-Oxford University Computing lab., may 1994.
- [37] M. HALARD, P. LE TALLEC, «Optimization of nonlinear structures and meshes», *in: Proceedings of 2nd Conference on Computational Structures Technology*, Civil Comp. Press, p. 113–118, Athens, 1994.

- [38] F. HECHT, A. MARROCCO, «Mixed finite element simulation of hetero-junction structures including a boundary layer model for the quasi-Fermi levels», *in: NASECODE X Conference*, Boole Press, p. 50–51, Dublin, june 1994.
- [39] P. LE TALLEC, F. MALLINGER, «Couplage Boltzmann Navier-Stokes», *in: Proceedings 57^e Rencontre entre Physiciens théoriciens et Mathématiciens*, Université Louis Pasteur, Strasbourg, décembre 1993.
- [40] P. LE TALLEC, J. MANDEL, M. VIDRASCU, «Parallel domain decomposition algorithms for solving plate and shell problems», *in: Proceedings of 2nd Conference on Computational Structures Technology*, Civil Comp. Press, p. 139–146, Athens, 1994.
- [41] P. LE TALLEC, E. SALTEL, M. VIDRASCU, «Solving large scale structural problems on parallel computers using domain decomposition techniques», *in: Proceedings of 2nd Conference on Computational Structures Technology*, Civil Comp. Press, p. 127–132, Athens, 1994.
- [42] P. LE TALLEC, «Modélisation et analyse numérique des problèmes d'élasticité en grandes déformations», *in: Proceedings du 26^e Congrès national d'analyse numérique*, Les Karelis (Savoie), juin 1994.
- [43] A. MARROCCO, «Mixed finite element and operator splitting techniques for drift-diffusion equations», *in: Workshop on semiconductor modelling with the French Network of the CNRS SPARCH*, Université de Nice, octobre 1994.
- [44] B. MOHAMMADI, O. PIRONNEAU, «Compressibility corrections for two-equations models for hypersonic turbulent flows», *in: Proceedings of the Second European Computational Fluid Dynamics Conference, EC-COMAS*, S. Wagner, al. (réd.), Masson et J.Wiley Int. Ed., Stuttgart, september 1994.
- [45] B. MOHAMMADI, O. PIRONNEAU, «On wall laws in CFD», *in: Proceedings of ICFD*, Bangalore, INDIA, 1994.
- [46] B. MOHAMMADI, O. PIRONNEAU, «Teaching CFD with F.E. Software», *in: Proceedings ASME summer meeting*, Hafez (réd.), Lake Thao, USA, 1994.
- [47] B. MOHAMMADI, O. PIRONNEAU, «Wall-laws for turbulent flows», *in: Proceedings WCCM III*, Daiguji (réd.), Chiba, Japan, august 1994.
- [48] B. PERTHAME, Y. QIU, B. STOUFFLET, «Sur la convergence des schémas *Fluctuation-Splitting* pour l'advection et leur utilisation en dynamique des gaz», *in: Proceedings of the 4th International Conference on hyperbolic equations*, New-York, june 1994.
- [49] O. PIRONNEAU, «Some research trends in CFD», *in: Proceedings of CFD Software users meeting*, M. Bercovier (réd.), Basel, may 1994.

- [50] C. RIBREAU, M. THIRIET, «Laminar and turbulent steady flow in inclined highly collapsed tubes», *in: 2nd World Congress of Biomech.*, Amsterdam, 1994.
- [51] M. THIRIET, F. HECHT, «Periodic developping flow in bends», *in: 2nd World Congress of Biomech.*, Amsterdam, 1994.
- [52] A. ZEBIC, «Etude de conditions aux limites équivalentes à une couche de peinture composite pour les équations de Maxwell en domaine fréquentiel», *in: Proceedings du 26^e Congrès national d'analyse numérique*, Les Karellis (Savoie), juin 1994.

Cours polycopiés

- [53] C. ODDOU, M. THIRIET, *Modélisation*, Université de Paris VII, DEA de Biomécanique, 1994.
- [54] O. PIRONNEAU, *Lectures notes on turbulence modelling*, Ecole franco-espagnole de mathématiques appliquées à Séville, doctorat, septembre 1994.
- [55] O. PIRONNEAU, *Optimal shape design for aerodynamics*, Von Karmann Institute, Post-graduate, may 1994.

Rapports de recherche et publications internes

- [56] Y. ACHDOU, O. PIRONNEAU, A. ZEBIC, «Effective boundary conditions for thin coating», *Rapport de recherche n°94001*, Université Pierre et Marie Curie, 1994.
- [57] Y. ACHDOU, O. PIRONNEAU, «Wall laws», *Rapport de recherche*, Université Pierre et Marie Curie, juin 1994.
- [58] F. J. BARÓN LÓPEZ, P. LE TALLEC, «Etudes d'algorithmes pour l'optimisation de formes aérodynamiques sous contraintes électromagnétiques», *Rapport de contrat CEA-CESTA*, INRIA, juillet 1994.
- [59] N. BELLOMO, P. LE TALLEC, B. PERTHAME, «On the solution of the nonlinear Boltzmann equation», *Rapport de recherche n°25*, Politecnico di Torino, 1994.
- [60] J. F. BOURGAT, P. LE TALLEC, F. MALLINGER, B. PERTHAME, Y. QIU, «Couplage Boltzmann Navier-Stokes», *rapport de recherche n°2281*, Inria, mai 1994.
- [61] J. F. BOURGAT, P. LE TALLEC, «Etude cinétique de couches limites en régime transitionnel», *Rapport de contrat CEA-CESTA*, INRIA, octobre 1994.

- [62] F. EL DABAGHI, M. C. DRUGUET, «Performances de calcul parallèle sur KSR1 pour la résolution numérique des équations d'Euler en régime hypersonique hors équilibre thermo-chimique avec une méthode de type volumes-finis», *Rapport de recherche n°2112*, INRIA, novembre 1993.
- [63] J. HE, O. PIRONNEAU, «Optimal shape design in laminar flow», *Rapport de recherche*, Université Pierre et Marie Curie, juin 1994.
- [64] B. KOOBUS, M.-H. LALLEMAND, «An additive standpoint in parallel two-level multigrid algorithms», *Rapport de recherche*, INRIA, (à paraître).
- [65] P. LE TALLEC, F. MALLINGER, «Couplage adaptatif Boltzmann Navier-Stokes en régime raréfié», *Rapport final de contrat HERMES*, INRIA, janvier 1994.
- [66] A. MARROCCO, «Simulation des dispositifs à hétérojonctions, éléments finis mixtes, techniques de splitting et pas de temps locaux. Simulation numérique du J.F.E.T.», *Rapport Intermédiaire de contrat CNET n°4*, INRIA, janvier 1994.
- [67] A. MARROCCO, «Simulation des dispositifs à hétérojonctions, éléments finis mixtes, techniques de splitting et pas de temps locaux. Simulation du transistor à hétérojonctions (I): premiers essais, mise à jour des problèmes dus au maillage», *Rapport Intermédiaire de contrat CNET n°5*, INRIA, avril 1994.
- [68] A. MARROCCO, «Simulation des dispositifs à hétérojonctions, éléments finis mixtes, techniques de splitting et pas de temps locaux. Simulation du transistor à hétérojonctions (II): étude numérique de la convergence en fonction du maillage, comparaisons avec le transistor à homojonctions», *Rapport Intermédiaire de contrat CNET n°6*, INRIA, juillet 1994.
- [69] G. MARTIN BORRET, «Etude du comportement non-newtonien du sang dans les coudes et bifurcations», *rapport de stage X*, Inria, juillet 1994.
- [70] B. MOHAMMADI, «Comparison of SUPG and FVG Techniques on KSR-1», *rapport de recherche n°2357*, Inria, 1994.
- [71] B. MOHAMMADI, «NSC2KE, an User-Guide», *rapport technique n°164*, INRIA, 1994.
- [72] B. PERTHAME, «An introduction to the theory of random particles methods for Boltzmann equation», *rapport de recherche n°2218*, Inria, avril 1994.
- [73] A. ZEBIC, «Calculs d'ondes diffractées par des obstacles revêtus de couches minces de matériaux absorbants», *rapport de recherche n°2091*, INRIA, novembre 1993.

8 Abstract

MENUSIN project is specialized in the study and development of *numerical models for Science and Engineering*. Directed first by Prof. R. Glowinski, then by Prof. O. Pironneau, it is presently under the scientific responsibility of Prof. P. Le Tallec. Located in Rocquencourt, in the close vicinity of Paris, its research staff is composed of seven senior scientists, three permanent advisers (B. Perthame, J. Periaux, O. Pironneau) and an average of eight doctoral students.

Since its beginning, MENUSIN has tried to stick to three basic principles, which are :

- a close collaboration with the University system,
- a direct access to modern computer facilities, consisting nowadays of a network of workstations and easy connections with supercomputers (CRAY C98) or experimental parallel architectures (KSR1),
- industrial contacts on all its research topics.

Today, these research topics can be grouped into four main applications :

- **Compressible viscous flows**, centered schemes, automatic mesh adaptation, turbulence models and associated numerical procedures, algebraic multigrid solvers.
- **Kinetic models**, boundary conditions and numerical solvers for the Boltzmann Gas Kinetic equation, kinetically based schemes for compressible flows.
- **Semiconductor modelling, Maxwell equations**, numerical modelling of heterojunction semiconductors via mixed finite elements, absorbing boundary conditions for Maxwell equation, diffraction by exact controllability.
- **Technical environment for scientific computing**, automatic mesh generation, domain decomposition techniques, optimum design, large strain viscoelasticity.

Table des matières

1	Composition de l'équipe	1
2	Présentation du projet	2
3	Actions de recherche	4
3.1	Méthodes numériques en mécanique des fluides	4
3.1.1	Généralités	4
3.1.2	Modélisation de la turbulence et lois de paroi . . .	4
3.1.3	Écoulement tridimensionnel de fluide non-newtonien en modélisation sanguine	6
3.1.4	Interactions Fluide-Structure	6
3.1.5	Algorithmes multigrilles	8
3.1.6	Logiciels de calcul	10
3.2	Modélisations cinétiques	11
3.2.1	Généralités	11
3.2.2	Couplage adaptatif des équations de Boltzmann et de Navier-Stokes	11
3.2.3	Étude cinétique de couches limites en régime transitionnel	12
3.2.4	Autres applications physiques	14
3.2.5	Logiciel Boltzmann	14
3.2.6	Schémas cinétiques en Mécanique des Fluides . .	15
3.3	Electromagnétisme, semi-conducteurs	16
3.3.1	Généralités	16
3.3.2	Equations de Maxwell instationnaires	16
3.3.3	Résolution des équations de Maxwell harmoniques	17
3.3.4	Semiconducteurs	17
3.3.5	Calcul des capacités à l'intérieur d'une puce élec- tronique	20
3.4	Outils et environnement pour le calcul scientifique	21

Rapport d'activité INRIA 1994 — Annexe technique

3.4.1	Introduction	21
3.4.2	Mailleurs adaptatifs	21
3.4.3	Optimisation de formes	23
4	Actions industrielles	24
5	Actions nationales et internationales	25
6	Diffusion des résultats	27
6.1	Diffusion de produits	27
6.2	Actions d'enseignement	27
6.2.1	Enseignement universitaire	27
6.2.2	Séminaires et formation permanente	28
6.3	Participation aux manifestations	28
6.4	Activités extérieures	29
7	Publications	29
8	Abstract	36