
Projet SINUS

Simulation Numérique dans les Sciences de l'Ingénieur

Localisation : *Sophia Antipolis*

Mots-clés : approximation, base de données, calcul scientifique, combustion, écoulement hypersonique, élément fini, équation d'Euler, équation de Navier-Stokes, maillage automatique, méthode spectrale, multigrille, optimisation de formes, parallélisme, parallélisation automatique, turbulence, volume fini.

1 Composition de l'équipe

Responsable scientifique

Alain Dervieux, DR INRIA, jusqu'au 1er juillet 1996
Jean-Antoine Désidéri, DR INRIA, depuis le 2 juillet 1996

Assistante de projet

Patricia Maleyran, TR INRIA

Personnel INRIA

Rémi Abgrall, CR, jusqu'au 31 août 1996, à l'université de Bordeaux I depuis le 1er septembre 1996
Hervé Guillard, CR
Laurent Hascoët, CR
Stéphane Lanteri, CR

Ingénieurs experts

Gilles Carré, à partir du 1er novembre 1996
Jean-Michel Malé
Nathalie Marco

Chercheurs invités

Irina Graur, Institute of Mathematic Modelling, Moscou, du 9 au 19 avril 1996
Angelo Iollo, institut Polytechnique de Turin, du 11 au 24 juillet 1996
Georgij Kobelkov, université de Moscou, du 20 mai au 20 juin 1996

Chercheurs post-doctorants

Romuald Carpentier, bourse CNES
Benoît Duval, bourse INRIA, depuis le 1er juillet 1996

Chercheurs doctorants

Laurent Angeli, bourse INRIA
Olivier Botella, allocataire MESR
Christophe Debiez, bourse INRIA
Benoît Duval, bourse CIFRE-SIMULOG, jusqu'au 30 juin 1996
Luc Fournier, bourse BDI-CNRS/INRIA, à partir du 15 novembre 1996
Jérôme Francescato, allocataire MESR
Cyril Godart, bourse INRIA
Dominique Guézengar, bourse BDI-CNRS/INRIA
Régis Martin, bourse CIFRE-SIMULOG, jusqu'au 31 janvier 1996
Katherine Mer, allocataire MESR
Cécile Viozat, bourse CNES/INRIA

Conseiller scientifique

Roger Peyret, DR CNRS

2 Présentation du projet

Le projet SINUS effectue des travaux de recherche dans les domaines de la modélisation mathématique et de la simulation numérique en physique des milieux continus et particulièrement en mécanique des fluides.

La modélisation mathématique permet l'étude de phénomènes complexes (phénomènes physiques par exemple) en introduisant une représentation mathématique, reposant souvent sur un système d'équations aux dérivées partielles. Certaines propriétés qualitatives ou quantitatives du phénomène peuvent alors être mises en évidence par l'étude mathématique, en utilisant les techniques de l'analyse fonctionnelle, ou, plus souvent, par la simulation numérique.

En recherche, la simulation numérique joue, pour l'analyse des phénomènes, un rôle complémentaire à celui de l'expérimentation en laboratoire ; elle peut aussi constituer un terrain d'expérimentation lors de simulations directes d'instabilités par exemple. D'autre part, pour l'étude de nouveaux produits industriels, la simulation numérique complète efficacement les tests de mise au point : ses deux avantages sont une grande rapidité de mise en œuvre et la possibilité de prendre en compte des conditions d'expériences difficiles ou trop coûteuses à obtenir en laboratoire.

La simulation numérique peut donc jouer un rôle à la fois pour l'amélioration de technologies classiques (par exemple, le moteur à piston), mais aussi pour la mise au point rapide de nouvelles techniques (par exemple pour l'industrie spatiale). Dans les deux cas, les outils doivent devenir suffisamment précis, robustes et efficaces pour être manipulés par des processus automatiques de conception optimale.

Spécialisé dans la mécanique des fluides numérique, le projet mène des études sur les écoulements compressibles en aérodynamique, dans le domaine des écoulements hypersoniques réactifs, et dans celui de la combustion en phase gazeuse ; les applications visées concernent les industries du transport et de l'énergie : aéronautique, automobile, espace, électricité. Des filières de recherche à finalité industrielle sont développées, comme l'étude et la mise au point de méthodes d'éléments finis, aptes à des calculs en géométries complexes et répondant à des besoins industriels précis.

Le projet s'intéresse aussi aux problèmes posés par l'implémentation d'algorithmes numériques sur architecture parallèle. Cela passe par des activités de portage et d'évaluation de performance

d'algorithmes initialement développés sur architecture séquentielle ou vectorielle, l'analyse de nouveaux algorithmes de résolution particulièrement bien adaptés à ce type d'architecture et l'étude et le développement d'outils d'aide à la parallélisation orientés calcul scientifique.

3 Actions de recherche

3.1 Méthodes d'approximation

Mots-clés : approximation, élément fini, volume fini.

Participants : Rémi Abgrall, Romuald Carpentier, Christophe Debiez, Alain Dervieux, Jean-Antoine Désidéri, Katherine Mer, Cécile Viozat

Le projet SINUS a travaillé à la mise au point d'une filière numérique reposant sur des méthodes décentrées d'ordre deux (schéma MUSCL de van Leer) adaptées aux maillages non-structurés avec degrés de liberté attachés aux sommets, grâce à une formulation Mixte Eléments/Volumes finis (MEV). Dans ce qui suit, on décrit les activités en cours autour des schémas MEV-MUSCL. Cette filière donne lieu à la fois à des analyses et développements théoriques, à des travaux numériques innovants (approximations, algorithmes, modélisation) et à des applications industrielles, notamment au travers du code N3S-MUSCL dont l'INRIA partage la propriété avec SIMULOG et EDF.

3.1.1 Modèle de viscosité en maillage non-structuré anisotrope

Participants : Alain Dervieux, Katherine Mer

Des modèles de viscosité du quatrième ordre ont été étudiés précédemment par les auteurs^{1 2}, sur des maillages triangulaires réguliers au sens des éléments finis. Dans [778, 761], on a étendu ces analyses au cas de maillages anisotropes pour des problèmes de convection-diffusion avec convection dominante. Le schéma étudié est basé sur une formulation mixte Eléments Finis/Volumes Finis (EF/VF) centrée avec une dissipation sous forme variationnelle. La dissipation est définie à l'aide d'une métrique locale d'étirement. On définit une classe de maillages étirés dans les couches limites à l'aide de certaines propriétés, et des estimations d'erreur en norme de l'énergie sont obtenues sur ces maillages. On compare ensuite la dissipation étudiée à la dissipation du quatrième ordre intervenant dans plusieurs schémas basés sur une formulation EF/VF.

3.1.2 Schémas à faible diffusion transverse

Participants : Christophe Debiez, Alain Dervieux

Les travaux dans ce domaine ont permis de mettre au point plusieurs formes de cellules de volumes finis adaptées aux couches limites et notamment de calculer des écoulements turbulents avec traitement adapté aux valeurs faibles du nombre de Reynolds qui caractérisent l'écoulement proche de la paroi [772].

¹K. Mer, *Variational analysis of a mixed finite element finite volume scheme on general triangulations*, Rapport INRIA No. 2213, (1994).

²C. Debiez, A. Dervieux, K. Mer and B. Nkonga, *Computation of unsteady flows with mixed finite-volume/finite-element upwind methods*, Proceedings of the 9th International Conference on Finite Elements in Fluids, New Trends and Applications, Venice, Italie, 15-21 Octobre, pp. 77-86, (1995).

3.1.3 Schémas à dissipation d'ordre six

Participants : Christophe Debiez, Alain Dervieux

Les schémas MEV-MUSCL utilisés dans les applications industrielles auxquelles SINUS est associé sont robustes, précis à l'ordre deux sur des maillages non-structurés peu étirés mais encore assez dissipatifs dans ces conditions. Une version à viscosité artificielle du sixième ordre a été construite. Sans limiteur, cette nouvelle version permet de nombreux calculs hors de portée jusqu'ici de la version de base (reposant sur une viscosité du quatrième ordre). Une version LED/positive a été construite. Dans le cas scalaire linéaire, la positivité est rigoureusement établie sur maillage arbitraire. Cette version permet des calculs de tubes à chocs beaucoup plus précis et sans oscillation. Enfin une version implicite a été construite, son efficacité et son caractère positif sont prédits par l'analyse [771]. Au total il s'agit bien d'une version de MEV-MUSCL meilleure sur tous les points importants que le schéma précédent, et appelée à le remplacer dans de nombreuses applications [750]. Un article a été soumis à la revue *Computers & Fluids*³.

3.1.4 Écoulements à petit nombre de Mach

Participants : Romuald Carpentier, Alain Dervieux, Cécile Viozat

Le schéma MUSCL a été conçu pour le calcul d'écoulements transsoniques et supersoniques. Dans le cas d'écoulements à petit nombre de Mach, un certain nombre de problèmes rendent impossible l'application du schéma dans sa forme originale :

- le décentrage devient trop dissipatif,
- le schéma implicite ne converge plus aussi bien vers les solutions stationnaires,
- les méthodes de relaxation se ralentissent,
- les erreurs d'arrondi deviennent prépondérantes.

Des travaux récents permettent de résoudre chacune de ces difficultés. Nous avons notamment donné une base théorique et précisé des solutions aux deux premiers points précédents. Il en résulte une méthode numérique précise à l'ordre deux, encore un peu moins efficace que les méthodes spécialisées pour l'incompressible dans leur domaine d'application, mais capable de calculer une très grande gamme d'écoulements et notamment des écoulements à la fois localement petit Mach et localement supersoniques, une configuration qui se rencontre notamment dans des moteurs de fusées.

3.1.5 Équations de Saint Venant

Participants : Alfredo Bermudez (université de Saint Jacques de Compostelle), Alain Dervieux, Jean-Antoine Désidéri, Maria Elena Vasquez (université de Saint Jacques de Compostelle)

Il s'agit d'une collaboration qui avait démarré dans le cadre d'une action intégrée. L'étude porte sur le calcul de l'écoulement marin dans la ria de Pontevedra avec comme objectif à terme de faire certaines études de contrôle de pollution. Ce type d'écoulement d'eau peu profonde est modélisé par les équations de Saint Venant qui sont obtenues par intégration des équations de convection suivant la profondeur. Il en résulte un système d'équations hyperboliques avec terme source faisant intervenir la donnée géométrique. Techniquement, on a étendu plusieurs schémas de décomposition de flux à ces équations et construit une méthode d'intégration implicite applicable au cas de maillages triangulaires non-structurés. En particulier on a discuté la propriété de conservativité du schéma et démontré l'efficacité de l'intégration implicite en temps [767].

³C. Debiez and A. Dervieux, *Mixed-Element-Volume MUSCL Methods with weak viscosity for steady and unsteady flow calculations*, soumis à *Computers & Fluids*, (1996).

3.1.6 Equations de Hamilton-Jacobi en non-structuré

Participants : Rémi Abgrall

Nous avons poursuivi cette année les travaux commencés. Tout d'abord, on a montré la convergence des deux schémas développés l'an dernier (Schémas de Godunov et Lax Friedrichs en maillage non-structuré) pour lesquels nous avons donné des estimations d'erreur. Ce travail s'est soldé par une publication⁴. Ensuite, on s'est intéressé au traitement numérique des conditions aux limites dans une approche de type *solutions de viscosité discontinues*. On a pu mettre au point une méthode générale valable pour les conditions de Dirichlet et de Neumann et montrer la convergence du schéma obtenu. On a aussi montré que tous ces schémas vérifient un principe du maximum discret ce qui permet d'aborder certains problèmes avec des conditions aux limite discontinues⁵.

3.1.7 Calcul de temps d'arrivée multiples pour l'équation eiconale

Participants : Rémi Abgrall, Jean David Benamou (projet ONDES)

Le but de cette étude est de calculer numériquement les temps d'arrivées d'un front d'ondes dans un terrain inhomogène tel que ceux rencontrés en géophysique. En faisant une approximation haute fréquence, le temps d'arrivée du front vérifie en première approximation l'équation eiconale dont on cherche les solutions multivaluées. J.-D. Benamou a imaginé une méthode qui comporte trois phases : partitionnement du domaine de calcul en sous-domaines pouvant se recouvrir, calcul de la solution de viscosité de l'équation eiconale dans chacun de ces sous domaines, regroupement des diverses solutions. Le partitionnement s'effectue en utilisant l'information fournie par la forme des caractéristiques (les rayons de l'optique géométrique). Le calcul de la solution de viscosité, dans des domaines de forme *a priori* quelconque, s'effectue à l'aide des méthodes développées dans le paragraphe 3.1.6 en utilisant la condition aux limites de Soner, pour laquelle on peut encore démontrer la convergence du schéma. Les résultats ont été présentés au workshop « Calcul de temps d'arrivée multiples » qui s'est tenu à Rocquencourt du 16 au 18 septembre 1996. Une publication est soumise [766].

3.1.8 Schémas ENO et analyse multiéchelle

Participants : Rémi Abgrall, Thomas Sonar (université de Hamburg, Allemagne)

Dans ce travail, qui se situe dans le cadre d'une action intégrée PROCOPE, nous avons poursuivi les efforts engagés les précédentes années en nous concentrant sur l'approche de T. Sonar. Celle-ci consiste à utiliser, dans les schémas ENO ou l'analyse multiéchelle, des splines à support compact plutôt que des polynômes par morceaux. L'avantage théorique est que ces splines particulières ont des propriétés optimales dans des espaces de Beppo-Levi. L'ensemble des travaux effectués au cours du programme fait l'objet d'une publication soumise au journal ZAMM⁶. Ils ont été présentés au cours d'une conférence invitée du colloque "Écoulements à grande vitesse" organisé par le CEA du 13 au 15 mai 1996 [747].

⁴R. Abgrall, *Numerical discretisation of first order Hamilton-Jacobi equations on triangular meshes*, accepté pour publication dans Comm. Pure Appl. Math., (1996).

⁵R. Abgrall, *Numerical discretisation of the boundary conditions for first order Hamilton-Jacobi equations*, soumis à Comm. Pure Appl. Math., (1996).

⁶R. Abgrall, S. Lanteri, T. Sonar and O. Friedrichs, *ENO schemes for compressible fluid dynamics*, soumis à ZAMM, (1996).

3.1.9 Qualité des approximations numériques en compressible

Participant : Rémi Abgrall, Smadar Karni (Courant Institute, USA)

La question récurrente à toute simulation numérique est de savoir comment la comparer à celles effectuées par des schémas concurrents. Dans ce travail qui a juste débuté, l'idée est d'utiliser des résultats obtenus par Tadmor, Nossanay et Tassa qui, pour des équations hyperbolique scalaires, obtiennent des estimations d'erreurs dans une norme particulière. Nous souhaitons *expérimenter* cette idée.

3.1.10 Simulation numérique et contrôle sur l'équation des ondes 1D

Participants : Rémi Abgrall, Jonathan Goodman (Courant Institute, USA)

On s'intéresse au problème du contrôle de la solution des ondes sur $[0, 1]$, avec une condition de Dirichlet homogène en $x = 0$ et une condition $u(1, t) = v(t)$ en $x = 1$, où v est le contrôle. De nombreux résultats existent sur le cas continu et sont très classiques. Quand on cherche à simuler numériquement ce problème, la situation devient plus complexe, et le calcul délicat car le problème numérique est mal conditionné. On peut interpréter cela en disant que le schéma numérique possède plusieurs vitesses de propagation, et en conséquence, certains paquets d'ondes numériques ont des vitesses de groupe nulles. Nous avons cherché à comprendre ce phénomène et à caractériser des schémas pour lesquels le contrôle approché est aisé⁷.

3.1.11 Schémas vraiment multidimensionnels

Participants : Rémi Abgrall, Hermann Deconinck (von Karman Institute for Fluid Dynamics, Belgique)

Une collaboration a été engagée avec le VKI. On a participé à l'analyse du schéma *N-scheme system* imaginé par H. Deconinck et ses étudiants. Les résultats ont été présentés au cours d'une conférence invitée à la 6ème conférence internationale « Hyperbolic problems : theory and application » qui a eu lieu à Hong Kong en juin 1996.

3.2 Méthodes de résolution

Mots-clés : élément fini, multigrille, schémas implicites, volume fini.

Participants : Marie-Claude Ciccoli (université de Rouen), Alain Dervieux, Jean-Antoine Désidéri, Jérôme Francescatto, Hervé Guillard

3.2.1 Analyse de schémas implicites

Participants : Marie-Claude Ciccoli (université de Rouen), Jean-Antoine Désidéri,

Dans la méthode des résidus corrigés, on considère deux approximations discrètes de la même équation aux dérivées partielles. La première, Φ_1 , est simple à inverser mais généralement peu précise. Par exemple, lorsqu'on discrétise une équation d'advection pure par un schéma (décentré) du premier ordre, on aboutit à un système linéaire à diagonale dominante que l'on peut facilement résoudre par relaxation itérative. La seconde, Φ_2 , est de la précision souhaitée, mais son inversion beaucoup plus délicate. On construit alors un algorithme itératif implicite dans lequel on résout une suite de problèmes dans lesquels on est amené à inverser Φ_1 tout en obtenant l'inverse de Φ_2 à la limite. Dans la littérature, de nombreux autres types de combinaison (Φ_1, Φ_2) ont été utilisés et notamment la combinaison différences finies/approximation spectrale.

⁷R. Abgrall and J. Goodman, *Ill conditioning of the boundary control problem for a non-dissipative lumped parameter system*, Courant Institute of Mathematical Sciences, en préparation, (1996).

Les propriétés essentielles de convergence de ces schémas ont été établies précédemment avec le Prof. P.-W. Hemker du CWI dans un cadre représentatif des équations d'Euler. Plus récemment, en collaboration avec M.-C. Ciccoli, on a examiné pour le modèle hyperbolique linéaire des préconditionneurs plus généraux faisant intervenir des approximations centrées dont on a démontré les potentialités théoriques supérieures [770]. On a aussi proposé des algorithmes itératifs adaptés pour l'inversion dans la phase linéaire. Enfin, on a entamé une expérimentation numérique de ces algorithmes dans le cadre des équations d'Euler [749].

3.2.2 Méthodes multigrille

Participants : Alain Dervieux, Jérôme Francescatto

Les méthodes multigrille par agglomération, introduites par le projet dès 1986, s'appliquent efficacement à des maillages non-structurés peu étirés. Elles ont été étendues aux maillages fortement étirés⁸ [773] et pour des écoulements turbulents avec modèles proche paroi bas Reynolds (intégration jusqu'à la paroi)[774]. La stratégie choisie repose sur un semi-déraffinement directionnel et a permis de traiter efficacement des calculs sur des maillages présentant des rapports de forme de 5000. Ces résultats ont fait l'objet de deux présentations orales dans des manifestations scientifiques internationales[751, 748]. Un article a été soumis à la revue *Computers & Fluids*⁹.

3.2.3 Méthode multigrille algébrique par agglomération

Participants : Hervé Guillard, Petr Vanek (université du Colorado à Denver, USA)

Les méthodes multigrille par agglomération introduites par A. Dervieux et M.-H. Lallemand¹⁰ pour les équations d'Euler sont construites sur une base géométrique en terme d'agglomération de volumes de contrôle. Il est cependant possible d'en dégager une interprétation purement algébrique en terme de condensation des matrices. Ces méthodes sont alors des candidates naturelles pour la construction de méthodes de résolution de systèmes linéaires de type boîte noire pouvant s'appliquer à une large palette de discrétisations. On a montré précédemment l'intérêt de définir des prolongements utilisant des opérateurs de lissages¹¹ construits à partir des matrices elles-mêmes, puis on a élaboré une stratégie qui permet de conserver la largeur de bande de la matrice initiale. Le travail actuel effectué en collaboration avec P. Vanek vise d'une part à comparer deux stratégies d'agglomération différentes : l'une fondée sur une agglomération de 2^d inconnues, l'autre sur une agglomération par groupe de 3^d inconnues (d est la dimension de l'espace), et d'autre part à donner une base théorique plus solide à ces méthodes.

3.2.4 Méthodes multiniveau pour les équations paraboliques instationnaires

Participants : Rabah Bey (université de Saint-Etienne), Martine Marion (Ecole Centrale de Lyon), Hervé Guillard

Les méthodes multiniveau sont des méthodes dans lesquelles les fonctions inconnues sont représentées par une somme de termes représentant des échelles de plus en plus fines. Ces méthodes sont encore très peu utilisées pour l'approximation des équations d'évolution. Au cours d'un stage de DEA, R. Bey a étudié un schéma dans lequel différents pas de temps sont utilisés selon les échelles considérées. Le

⁸J. Francescatto, *Résolution de l'équation de Poisson sur des maillages étirés par une méthode multigrille*, Rapport de Recherche Inria No. 2712, Novembre 1996, (<http://www.inria.fr/RRRT/RR-2712.html>).

⁹J. Francescatto and A. Dervieux, *Semi-coarsening for agglomeration MG : application to turbulent flows*, soumis à *Computers & Fluids*, (1996).

¹⁰M.-H. Lallemand, H. Steve, A. Dervieux, *Unstructured multigridding by volume agglomeration: current status*, *Computers and Fluids*, Vol. 21, No. 3, pp. 397-443, (1992).

¹¹H. Guillard et N. Marco, *Some aspects of multigrid methods on non-structured meshes*, Proceedings of the conference of copper mountain on multigrid methods, 3-7 Avril Copper Mountain, Colorado, (1995).

ystème à approcher est constitué d'une équation linéaire parabolique forcée par un terme source basse fréquence. Contrairement à la démarche naturelle, on associe de grands pas de temps aux échelles spatiales les plus fines. La raison heuristique guidant ce choix réside dans la nature dissipative de l'équation : sur des temps longs, l'énergie associée aux petites échelles est décroissante, et il n'est donc pas utile d'être très précis dans la représentation de ces échelles. Ce schéma a été étudié dans le cadre d'une approximation de type éléments finis bi-grille. On a obtenu des estimations d'erreurs *a posteriori*. Les tests numériques confirment les résultats de l'analyse théorique.

3.3 Maillages

3.3.1 Utilisation d'un mailleur topologique en géométrie déformable

Participants : Benoît Duval, Thierry Coupez (CEMEF), Hervé Guillard

Le but de cette étude est d'évaluer le mailleur topologique MAT¹² dans le cas de maillages déformables de géométries de moteur à combustion interne. Elle se situe dans le cadre d'un partenariat entre l'INRIA, le CEMEF de l'ENSMP et la direction de la recherche de Renault. L'originalité du mailleur topologique MAT est de construire un maillage sur la base d'opérations locales telles que remaillages d'une coquille, ajout de points, inversion de diagonales, etc. opérations qui n'affectent qu'un petit nombre d'éléments à la fois. L'efficacité de cette méthode réside dans le traitement couplé des opérations sur la surface et le volume, sans avoir à remailler la totalité du domaine 3D. La première partie du travail a été d'adapter le mailleur MAT (conçu à l'origine pour des écoulements de fluides non-newtoniens) aux spécificités des écoulements moteurs. La suite de ces travaux portera sur l'intégration de MAT dans un code industriel (N3S-MUSCL) et la prise en compte de la redistribution des logiques frontières affectées aux nœuds ou aux faces. A l'avenir, d'autres études vont pouvoir être entreprises pour, par exemple, contrôler la taille des éléments engendrés en fonction des erreurs d'approximations numériques (maillage adaptatif).

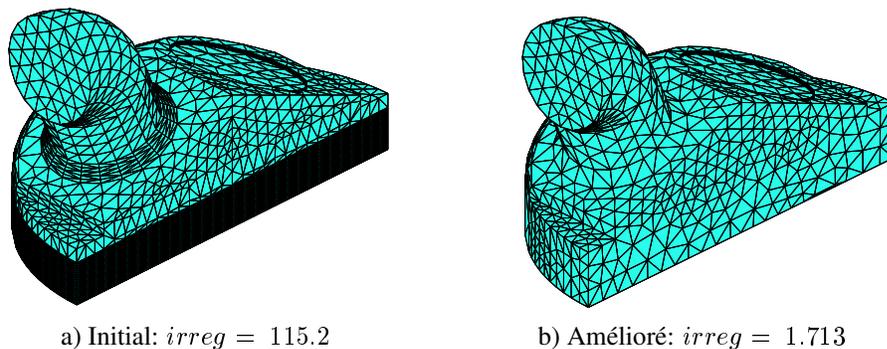


Figure 1: Maillages de peau: irrégularité maximale

¹²T. Coupez, *Maillage et remaillage automatique 3D par une technique générale d'amélioration de topologie*, Journée d'étude CSMA, vers l'automatisation des calculs éléments finis, INRIA Rocquencourt, 9 Juin 1994.

3.3.2 Couplage remaillage surfacique-maillage volumique

Participants : Benoît Duval, Hervé Guillard

Les calculs dans des géométries déformables au cours du temps nécessitent une gestion fine du maillage. Il faut en effet éviter que les déformations de la géométrie n'induisent une détérioration trop importante de la qualité du maillage. Au cours des études précédentes, il était vite apparu que la qualité du maillage de peau avait une influence déterminante sur le maillage global, et, pour cela, un remaillageur surfacique OPTSURF intégrant un ensemble de techniques de remaillages de surfaces avait été mis au point. Ce remaillageur surfacique est indépendant de toutes données de CAO, et le respect de la géométrie est réalisé au travers du respect d'un critère de courbure. Dans le travail actuel, le remaillageur surfacique OPTSURF a été couplé au maillageur volumique GHS3D développé par le projet GAMMA à Rocquencourt et plusieurs cas-tests représentatifs d'écoulements d'intérêt industriel ont été étudiés.

3.3.3 Maillages adaptatifs et multirésolution

Participants : Rémi Abgrall, Alain Dervieux, Bernadette Palmerio (université de Nice/Sophia Antipolis)

Le projet propose et développe depuis plusieurs années une théorie de l'approximation adaptative. L'idée de base consiste à remplacer dans les analyses la taille de la plus grande maille du maillage par le nombre total de points. Dans ces conditions, nous montrons que les méthodes adaptatives sont susceptibles d'être précises à l'ordre deux pour des solutions non régulières alors que les méthodes uniformes (non adaptatives) sont précises au mieux à l'ordre un¹³. Ceci ne s'applique pas à toutes les méthodes adaptatives dans toutes les conditions, et, notamment, on montre qu'en tridimensionnel les méthodes de division isotrope ne peuvent pas être précises à l'ordre deux sur des discontinuités surfaciques. Ce dernier résultat explique les performances décevantes de ces méthodes en 3D et renforce l'intérêt des méthodes anisotropes.

3.4 Modélisation physique

3.4.1 Modélisation physique et numérique des écoulements hypersoniques

Participants : Jean-Antoine Désidéri, Luc Fournier (université de Nancy), Cyril Godart, Maria-Vittoria Salvetti (université de Pise)

L'énergie d'une molécule polyatomique admet plusieurs modes de stockage (énergie de translation, de rotation, de vibration électronique, etc.). Lors de la traversée d'un choc très fort, tel que celui en avant d'un engin spatial hypersonique, en conséquence de l'importante élévation de température, ces modes énergétiques sont très fortement déséquilibrés. Le long de la trajectoire de la molécule après la traversée du choc, les collisions avec les autres molécules ont pour effet de *relaxer* ces modes énergétiques vers l'équilibre (chimique, thermique, etc.). Le nombre de collisions nécessaires pour atteindre l'équilibre dépend du mode considéré.

Dans ce domaine, notre action de recherche, en amont de l'usage courant des codes d'exploitation, a pour but d'évaluer la sensibilité des écoulements hypersoniques (eulériens ou visqueux) hors-équilibre au degré de raffinement de la modélisation chimique et thermodynamique (couplages des modes hors-équilibre entre eux, termes de transport, catalyse à la paroi, etc.), et le coût des méthodologies numériques rendues nécessaires pour leur prise en compte.

¹³A. Dervieux and B. Palmerio, *Multimesh and multiresolution analysis for mesh adaptive interpolation*, accepté pour publication dans Appl. Numer. Math., (1996).

Méthode implicite pour les écoulements hors-équilibre visqueux –

Dans le cadre de notre collaboration avec l'université de Pise on a amélioré une méthode d'intégration implicite pour les écoulements hypersoniques visqueux dans laquelle on prend en compte une modélisation complexe du tenseur de diffusion et étudié ses performances numériques [763]. Ce code a également servi à réaliser certaines comparaisons calculs/expériences [781].

Catalyse à la paroi –

Dans les écoulements hypersoniques réels, les phénomènes chimiques et thermiques dont le mélange gazeux réactif est le siège sont modifiés au voisinage de la paroi par la présence de l'agent solide. Dans la couche de choc d'un écoulement de rentrée, les espèces monoatomiques sont prédominantes. En frappant la paroi, elles se recombinent et les réactions de recombinaison qui sont fortement exothermiques augmentent considérablement le flux de chaleur à la paroi par rapport au modèle de paroi non catalytique. Il est donc très important d'inclure ce phénomène dans la simulation d'un écoulement hypersonique visqueux pour obtenir une approximation réaliste du flux de chaleur pariétal. On a étudié par voie numérique différents modèles d'interaction gaz-paroi pour des écoulements hypersoniques autour de corps émoussés. Dans ces modèles, l'agent solide intervient comme catalyseur. Dans la modélisation la plus fine, on tient compte de réactions élémentaires telles que l'adsorption des atomes, les réactions de recombinaison et les différentes désorptions [757].

Validation des écoulements à grande vitesse –

La difficulté qui existe à reproduire expérimentalement les conditions du vol à grande vitesse, ainsi que les incertitudes portant sur la modélisation même de ces écoulements, font de la validation des méthodes numériques une question centrale des études en hypersonique [754, 755]. Notre activité dans ce domaine nous a conduit notamment à mettre en place des bases de données spécialisées dans lesquelles la comparaison calculs/expériences joue un rôle important. En particulier, on développe un logiciel pour reconstruire à partir de résultats de simulations numériques d'écoulements des images généralement fournies par l'expérience (interférogrammes, ombroscopies, strioscopies). Notons que ce logiciel est développé de façon à permettre un traitement distribué d'une image par bloc sur un réseau de stations.

3.4.2 Modèles de turbulence de l'aérodynamique externe

Participants : Gilles Carré, Jérôme Francescatto, Dominique Guézengar, Hervé Guillard, Michel Ravachol (Dassault Aviation)

Longtemps considérée comme l'apanage des méthodes structurées, la modélisation statistique fine des écoulements turbulents compressibles est désormais un domaine dans lequel les méthodes non-structurées sont couramment utilisées.

Une des préoccupations industrielles est la qualité de la prédiction par des modèles suffisamment simples. Les investigations ont porté sur des modèles $k-\epsilon$ avec loi de paroi ou traitement bas Reynolds, en recherchant les modifications les plus simples pour une amélioration suffisante de la prédiction. Ce type d'étude nécessite de calculer des solutions quasi-indépendantes de la finesse du maillage, ce qui suppose la mise au point de méthodes numériques performantes.

Les améliorations suivantes ont été étudiées : introduction des modifications de Mellor et de Menter (prise en compte des gradients de pression, du déséquilibre dans les lois de parois), prise en compte des variations de masse volumique, calculs de quantités dépendant de la distance à la paroi. Des écoulements de plaque, de rampe, de marche et autour de profils ont permis la validation des modèles

développés. Cette validation s'est faite en coopération avec Dassault Aviation, Ecole Centrale de Lyon, et avec Simulog et ont donné lieu à une communication à ECCOMAS'96 et à un article soumis.

3.4.3 Turbulence compressible

Participants : Jean-Paul Dussauge (IRPHE Marseille), Dominique Guézengar, Hervé Guillard

Les modèles de turbulence font intervenir un certain nombre de constantes spécifiques aux modèles utilisés, constantes qui sont en général définies à partir d'écoulements de référence ou bien calées sur la base d'optimisation numérique. En régime compressible, lorsque la masse volumique varie fortement, pour que les modèles puissent reproduire les caractéristiques d'écoulement connus, il apparaît que les jeux de constantes doivent vérifier des relations que l'on appellera relations de compatibilité. Ces relations ne sont pas actuellement prises en compte dans les modèles. Cette constatation nous avait amenés l'année dernière à proposer une modélisation où l'une des constantes du modèle $k - \epsilon$ (σ_ϵ en l'occurrence) devenait fonction des gradients de masse volumique. Cette modélisation a été étudiée cette année. Les résultats sont très satisfaisants sur les couches de mélange, nettement moins sur les couches limites.

Les relations de compatibilité ont aussi été utilisées pour tenir compte des variations de la masse volumique dans le cadre des modèles dits de compressibilité dont on sait qu'ils sont nécessaires pour le calcul des couches de mélange supersoniques. Les résultats obtenus ne remettent pas en cause les modèles de compressibilité mais ont le mérite de mettre en lumière les effets respectifs dus aux variations de masse volumique et les effets de compressibilité proprement dits.

Enfin, on s'est intéressé cette année à l'étude, dans un cadre compressible, des modèles algébriques aux tensions de Reynolds. Il s'agit de modèles qui, sans avoir toute la complexité des modèles aux tensions de Reynolds, sont capables de représenter des situations fortement anisotropes. Les modèles proposés par Shi, Zhu et Lumley ainsi que celui dû à Gatski et Speziale ont été testés. Ces modèles donnent d'excellents résultats pour le calcul de marches descendantes en régime subsonique (écoulement sur lequel ils ont été calés). En revanche, ils se sont montrés extrêmement décevants pour le calcul de rampes supersoniques. Les rampes supersoniques sont en effet des écoulements très complexes faisant intervenir de multiples interactions entre un choc détaché, une couche limite et une zone de recirculation. Curieusement, les résultats obtenus avec le modèle $k - \epsilon$ standard avec loi de paroi sur cette configuration sont assez satisfaisants. Une modélisation anisotrope valide sur cet écoulement semble toujours à trouver.

3.4.4 Modèles non conservatifs en modélisation de la turbulence

Participants : Souleymane Coulibaly (université de Nice/Sophia Antipolis), Hervé Guillard

Les systèmes du premier ordre issus des modélisations statistiques de la turbulence présentent la particularité de ne plus être sous forme conservative. Les méthodes numériques basées sur des techniques de volumes finis n'ont plus alors d'interprétation simple en terme de flux au travers des interfaces entre volumes de contrôle. Les discrétisations doivent alors reposer sur d'autres principes. Dans ce stage de DEA, qui fait suite au stage de S. Hariz effectué l'année dernière sur le même thème, S. Coulibaly a étudié l'extension d'un solveur de type Roe non conservatif au modèle $k - \epsilon$ dans le cas 2-D. Le schéma construit présente un bon comportement numérique.

3.4.5 Couplage acoustique-tourbillon

Participant : Romuald Carpentier

Cette étude s'intéresse aux problèmes de tourbillons détachés (instabilités hydrodynamiques) générant une onde de pression (instabilité acoustique) dans une chambre demi-close bidimensionnelle où

l'écoulement est subsonique (programme ASSM P230 de l'ONERA). L'étude de ce type de phénomène par simulation numérique conduit à des résultats radicalement différents suivant que l'on utilise des maillages quadrangulaires ou triangulaires : dans le premier cas la solution obtenue est instationnaire alors que dans le second cas l'écoulement est stationnarisé. Dans les deux cas, les schémas considérés utilisent une approximation MUSCL en pentes centrées. L'analyse des erreurs numériques sur un modèle linéaire montre une dissipation numérique importante dans la configuration triangulaire par rapport à la configuration quadrangulaire et a donné lieu à la publication d'un rapport de recherche [769].

En parallèle, une étude semblable a été effectuée sur le code numérique SIERRA de l'ONERA ayant pour base le schéma de Mac Cormack. Il ressort d'une même étude linéaire que le schéma de Mac Cormack peut être mis en situation inconditionnelle d'instabilité, ce pourquoi il est toujours accompagné d'un terme de viscosité artificielle d'ordre 2 ou 4. Il a tendance à retarder l'advection et donne, pour le cas test qui nous intéresse, une fréquence d'onde acoustique de 2600 Hz. Ces travaux ont donné lieu à des présentations orales et écrites au sein du CNES et de l'ONERA. Une classe de $\beta\gamma$ schémas en quadrangle a été mise au point dans la perspective d'obtenir des résultats plus précis (linéairement d'ordre 4) et a donné lieu à un travail de vectorisation pour utiliser au mieux les possibilités du CRAY C98 de l'IDRIS (dans le cadre des heures CPU allouées pour l'année 1996). Le code résultant délivre une performance de 450 Mflop/s. Les simulations effectuées nous permettent de constater, en jouant sur l'erreur dispersive du schéma, un établissement de l'onde acoustique sur une fréquence de 2600 Hz ou 3500 Hz (Fig. 2). Notre attention se porte maintenant sur les points suivants : écoulement à faible nombre de Mach, influence de la viscosité physique et prise en compte de modèles de turbulence.

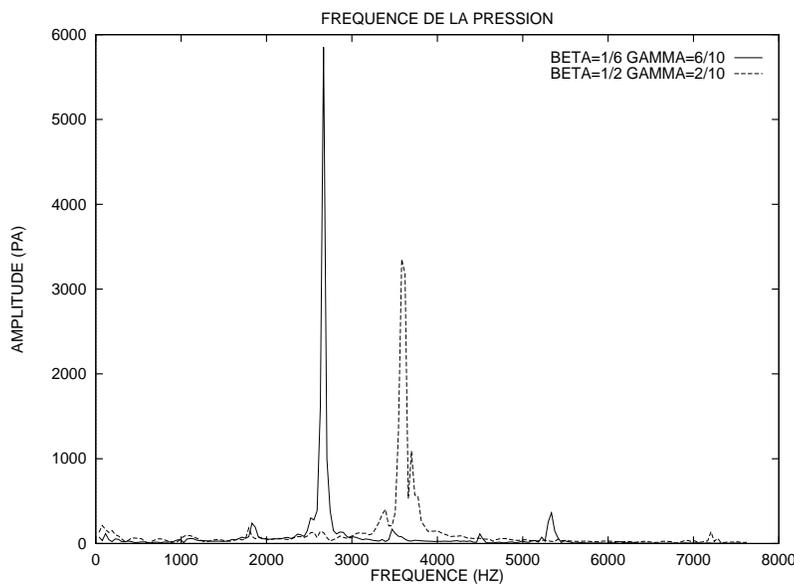


Figure 2: Réponse spectrale de la pression en fonction de la dispersion

3.4.6 Couplage fluide-structure

Participants : Charbel Farhat (université du Colorado à Boulder, USA), Bruno Koobus (université du Colorado à Boulder, USA), Stéphane Lanteri, Serge Piperno (Cermics)

La collaboration entre les projets SINUS et CAIMAN et le *Center for Aerospace Structures* de l'université du Colorado à Boulder (C. Farhat et B. Koobus) autour du thème modélisation et simulation numérique de l'aéroélasticité existe depuis maintenant trois ans. Cette année a vu certaines évolutions sur

l'environnement mis au point en 95 pour la simulation numérique du couplage fluide/structure dans le cas tridimensionnel ¹⁴ sur plateforme parallèle hétérogène. Ces améliorations sont principalement le fruit du séjour postdoctoral de B. Kobbus (à Boulder depuis juillet 95) ; elles concernent l'amélioration du schéma implicite d'intégration en temps (prise en compte de la formulation du second ordre proposée par H. Guillard et R. Martin[746]) et étude de modèles de turbulence instationnaires (pour l'instant développés et dans le cadre bidimensionnel).

En parallèle avec la collaboration citée ci-dessus, nous avons démarré depuis janvier 1996 une action transversale avec plusieurs projets de l'INRIA Rocquencourt : J. Mouro, P. Le Tallec et M. Thiriet (projet M3N), M. Vidrascu (projet MOSTRA) et F. Hecht (projet GAMMA). Ce groupe de travail "couplage fluide/structure" s'est fixé comme objectif de réaliser sous 18 mois deux ou trois expériences numériques sur des problèmes et géométries modèles, mettant en jeu un environnement de simulation basé sur des développements en dynamique des fluides, dynamique des structures et adaptation de maillage réalisés dans chacune des équipes. Ces simulations à caractère démonstratif devraient constituer une base solide pour des collaborations à plus long terme. En local avec S. Piperno, des résultats préliminaires ont été obtenus sur l'étude du phénomène de flottement d'une plaque plane en régime supersonique. Ces calculs mettent en jeu le module de calcul de l'écoulement fluide tel qu'il est utilisé aujourd'hui dans l'équipe de C. Farhat à Boulder. Le module structure repose sur une modélisation simplifiée (modèle de poutre monodimensionnelle) mettant en jeu une discrétisation du type différences finies et une intégration en temps par une méthode de Newmark. Dans un avenir proche, ce module sera remplacé par un solveur structural plus élaboré provenant du projet M3N. Les simulations sont effectuées sur le calculateur parallèle SGI Power Challenge Array du Centre Charles Hermite de Nancy. Des résultats préliminaires ont notamment été présentés lors de la conférence « Parallel Computational Fluid Dynamics 96 » [759].

3.4.7 Simulation directe de turbulence compressée

Participants : Olivier Botella, Roger Peyret

Dans un moteur à piston, la turbulence est fortement en déséquilibre, soumise à des phénomènes de rotation et d'anisotropie, caractères très imparfaitement pris en compte par les modélisations actuelles. La mise au point d'un code de simulation directe de turbulence compressée est effectuée dans le cadre d'une thèse, afin de disposer d'une base de données numériques permettant de guider la modélisation et de valider les modèles. À terme, ce code prédira les écoulements régis par les équations de Navier-Stokes, dans un domaine cylindrique soumis à une compression anisotrope.

Un code calculant les équations de Navier-Stokes dans un domaine cartésien bidimensionnel, par un schéma de projection de type Chorin-Temam, a été mis au point ¹⁵[768]. L'approximation spatiale est effectuée par une méthode spectrale de type Tchebyshev. L'application de ce code au calcul de l'écoulement dans une géométrie bidimensionnelle en compression a nécessité la résolution du problème posé par la présence de conditions aux limites discontinues, qui polluent les résultats du code spectral. La méthode retenue pour résoudre ce problème de singularités consiste à décomposer les variables du problème en une partie analytique connue, qui est une solution particulière des équations de Stokes munies des conditions aux limites discontinues, et une partie possédant des conditions aux limites régulières, qui est développée en polynômes de Tchebychev. Cette technique a été validée sur le problème classique de la cavité entraînée, dont les conditions aux limites comportent des singularités du même type que le problème du piston.

¹⁴C. Farhat, S. Lanteri, M. Lesoinne and P. Stern, *High performance solution of three-dimensional nonlinear aeroelastic problems via parallel partitioned algorithms : methodology and preliminary results*, accepté pour publication dans *Comput. Syst. in Eng.*, (1996).

¹⁵O. Botella, *On the solution of the Navier-Stokes equations using Chebyshev projection schemes with third-order accuracy in time*, accepté pour publication dans *Computers & Fluids*, (1996).

3.5 Optimisation

3.5.1 Algorithmes Génétiques

Participants : Jean-Antoine Désidéri, Bertrand Mantel (Dassault Aviation), Nathalie Marco, Jacques Périaux (Dassault Aviation)

Cette étude est motivée par la complexité accrue des problèmes d'optimisation en aérodynamique industrielle en raison de la forte non-linéarité des modèles physiques, du couplage pluri-disciplinaire, des critères d'optimisation multiples, et des contraintes géométriques, aérodynamiques et de fabrication. On cherche donc à développer des optimiseurs robustes capables d'explorer rapidement de grands espaces de recherche, sans hypothèse de différentiabilité et en présence de multiples optima locaux. Les Algorithmes Génétiques (AG) qui simulent les mécanismes de l'évolution naturelle (sélection, croisement, mutation) sont perçus comme une réponse possible à cet objectif ambitieux.

On a entamé une étude de faisabilité d'AG dans laquelle on cherche à évaluer les performances d'un AG pour la résolution d'un problème modèle 1D de contrôle, modélisé par une équation de la chaleur, contrôlée par un terme source. La fonctionnelle à minimiser dépend de l'écart de l'état final à un état cible, d'une pénalisation de l'amplitude du contrôle et d'un paramètre ε contrôlant la raideur du système [777].

On s'oriente maintenant vers l'optimisation multicritère. Ici, il n'existe pas de définition unique de la *fonction d'adaptation* sur laquelle se base la sélection, mais chaque nouvelle génération permet d'enrichir une base de données statistique sur la dynamique du système. On peut alors classer les solutions par *fronts de Pareto* et, à convergence, identifier le lieu des points d'équilibre, c'est-à-dire l'enveloppe des optima que le système peut atteindre. Ce concept est en cours de vérification pour des problèmes d'aérodynamique bidimensionnelle (optimisation de forme de profil d'aile pour la réduction de traînée). On projette ensuite de considérer le problème plus difficile de l'optimisation d'une voilure, pour lequel il sera indispensable d'avoir recours au calcul parallèle.

3.5.2 Optimisation de forme et différentiation automatique

Participants : Alain Dervieux, Jean-Michel Malé, Christèle Faure (projet SAFIR), Nicole Rostaing-Schmidt (projet SAFIR), Bruno Stoufflet (Dassault Aviation)

Le projet participe au thème 2 du programme d'ingénierie concourante GENIE. Le thème 2 est plus particulièrement concerné par la manipulation logique de programmes de calcul. Plusieurs types de manipulation de codes sont étudiés dans ce thème ; nous nous occupons ici plus particulièrement de l'aspect différentiation automatique de programmes écrits en FORTRAN 77. Le but de l'étude en cours est de démontrer, pour les numériciens, l'intérêt du concept de différentiation automatique de code, dès lors qu'il s'agit de développer un programme d'optimisation de forme aérodynamique reposant sur une modélisation par les équations d'Euler en stationnaire.

GENIE phase I –

Dans la première phase de GENIE, qui s'est terminée le 23 juin 1996, le projet devait réaliser une maquette démonstrative 2D d'optimisation, en produisant les dérivées nécessaires avec l'outil ODYSSEÉ, en particulier la matrice du système adjoint. Cette partie a été menée à bien, et s'est matérialisée sous la forme d'une démonstration dans les locaux de Dassault le 27 février 1996, ainsi que par la fourniture d'un rapport. Cette partie a fait l'objet d'une communication au congrès "Computational differentiation : techniques, applications, and tools" à Santa Fe, Arizona en février 1996 ; un article a été soumis et accepté pour publication dans les actes de ce même congrès [762].

Une version d'un programme d'optimisation de forme aérodynamique 3D existant au sein du projet a été utilisée pour démontrer la faisabilité en 3D d'un logiciel d'optimisation dont les gradients seraient générés par ODYSSEÉ. Des résultats préliminaires avec une résolution d'état à l'ordre 2 et un gradient à l'ordre 1 ont été obtenus et ont fait l'objet de deux communications [760, 753].

Contrat relais INRIA-Dassault –

Dans le cadre de ce contrat relais, nous nous sommes engagés à réaliser une première version d'une maquette de logiciel d'optimisation 3D avec un gradient d'ordre deux. Pour ce faire, il est nécessaire de réécrire le noyau du programme de résolution (calculs des flux) de la même manière qu'en 2D. Il est également nécessaire de calculer les dérivées de ces flux par rapport aux valeurs des inconnues sur les points du maillage.

C'est ici que les différences sensibles apparaissent entre le 2D et le 3D. En trois dimensions d'espace, il est hors de question de stocker une matrice adjointe sur un maillage raisonnable, même en ne stockant que les termes non nuls. Il faut donc modifier notre façon de procéder et faire générer par ODYSSEÉ, non plus $\nabla[W]\Psi$, mais ${}^t\nabla[W]\Psi \cdot dp$, où nous avons noté Ψ le flux élémentaire sur un segment du maillage, et W les inconnues dont dépend Ψ . Cette modification nécessite la réécriture d'un solveur linéaire sans stockage de type Jacobi multiples ; ces deux tâches sont en cours de réalisation. D'autre part, une version parallèle du programme 3D est en cours de mise au point avec S. Lanteri ; elle fonctionne avec un gradient d'ordre 1 et une résolution d'état d'ordre 2.

Perspectives –

La phase II du programme GENIE, actuellement en discussion, devrait permettre au projet SINUS de compléter son savoir faire en matière d'utilisation des techniques de manipulation de code et de participer à l'étude des interactions entre différentiation automatique et aide à la parallélisation. Dans le cadre de ce programme, en effet, le projet doit fournir une maquette de logiciel d'optimisation de formes 3D, parallélisée et dont les gradients (à l'ordre 2) auront été obtenus par différentiation automatique. L'efficacité de cette maquette doit être suffisamment éloquent pour que les industriels soient intéressés par ce type d'approche.

3.6 Génie logiciel et parallélisme

3.6.1 Parallélisation par découpage de maillage

Participant : Laurent Hascoët, Stéphane Lanteri

On a réalisé une première version d'un outil de placement automatique des communications entre sous-maillages. Cette version a permis d'obtenir de premiers résultats conformes à ce qui était fait précédemment à la main, sur des exemples simplifiés et mono-procéduraux. L'outil a été réalisé de manière originale sous la forme d'une mise en correspondance entre le graphe de dépendances du programme et un automate fini définissant le schéma choisi de recouvrement entre sous-maillages. Cet algorithme est non-déterministe : il apparaît plusieurs solutions possibles, qui mènent chacune à un placement différent des communications. L'outil permet d'énumérer ces différentes solutions, par "backtrack".

Le travail restant à accomplir, comme prévu dans la phase 2 de GENIE, est de développer cette première version, pour obtenir un outil applicable à des programmes réels, de grande taille et comportant de nombreux sous-programmes. Ces résultats ont été présentés hors de l'INRIA, d'une part à Marseille lors de la journée "Génie logiciel" du CREMIS, d'autre part au CEA Saclay lors d'une réunion de travail. Un rapport a été rédigé en vue d'une soumission à une conférence internationale.

3.6.2 Activité autour de l'outil PARTITA

Participants : Pierre-Yves Calland (LIP Lyon), Laurent Hascoët

L'intégration de l'outil BOUCLETTE dans PARTITA est terminée. Elle permet à PARTITA de bénéficier automatiquement de la parallélisation poussée de BOUCLETTE sur certaines boucles. Les premiers essais ont montré la robustesse du résultat, mais on regrette la trop faible proportion de boucles adaptées au traitement par BOUCLETTE dans les programmes réels. Des suggestions ont été faites à l'équipe concernée au LIP, pour tenter d'augmenter cette proportion. D'autre part, un nouveau langage cible, HPF, a été ajouté à PARTITA. PARTITA dispose donc désormais d'un mode HPF, pour lequel le code généré utilise le plus souvent possible, lorsque la parallélisabilité le permet, les structures de contrôle spécifiques de HPF, qui sont les boucles HPF INDEPENDANT et les boucles FORALL. L'autre point pour une bonne génération de programmes HPF est le choix des directives d'alignement des données sur les processeurs. Dans ce domaine, on a défini une méthode interactive de choix de ces alignements, reposant sur une présentation graphique de l'ensemble des contraintes sur cet alignement. Cette présentation repose sur une structure nouvelle, que nous appelons *graphe d'alignement des variables*. Un rapport sur ce sujet a été rédigé, dans le cadre du projet EUREKA EUROTOPS[782].

3.6.3 Factorisation de portions de programmes impératifs

Participants : Laurent Angeli, Laurent Hascoët

L'implémentation de l'outil de factorisation de sous-programmes est terminée. Elle permet de détecter et d'extraire des sous-programmes depuis des sources FORTRAN, sans limitation syntaxique (boucles, tests, entrées-sorties, sous-programmes). Tous les algorithmes sont spécifiés, y compris ceux qui traitent des manipulations de boucles (décalages, déroulages, etc.). Des premiers essais sur des codes réalistes ont déjà permis de détecter des portions similaires et factorisables.

3.7 Calcul parallèle

3.7.1 Activités autour du logiciel N3S-MUSCL

Participants : Stéphane Lanteri, Mark Lorient (SIMULOG)

Cette année a vu la fin du projet ESPRIT EUROPORT HPCN3S dans lequel SIMULOG était impliqué et qui portait sur la parallélisation SPMD du noyau N3S-MUSCL. Pour ce qui nous concerne, nous avons terminé l'étude sur l'influence de la stratégie de partitionnement (avec ou sans recouvrement) sur les performances, et plus particulièrement sur les propriétés de scalabilité des solveurs parallèles construits. L'approche avec recouvrement d'ordre un (bande interface de largeur un tétraèdre) se prête bien aux schémas de type volumes finis ; c'est l'option adoptée dans le cadre du projet HPCN3S. L'approche sans recouvrement est plus caractéristique des méthodes d'éléments finis. Dans le contexte du schéma mixte EF/VF mis en jeu dans N3S-MUSCL, elle permet de minimiser l'effort de programmation pour adapter la version séquentielle existante, mais se caractérise par des redondances dans les opérations arithmétiques aux interfaces entre sous-domaines. L'option sans recouvrement est plus délicate à programmer, mais elle contribue à améliorer sensiblement les performances de l'algorithme parallèle résultant. Ceci est illustré sur la figure 3 ci-dessous où l'on compare l'évolution du temps CPU en fonction de la taille du maillage global d'une part, et du nombre de processeurs d'autre part, pour un nombre d'itérations fixé à 10 d'un calcul Euler implicite autour d'une géométrie d'aile ONERA M6. Le maillage grossier (sur 4 processeurs) contient 15460 noeuds alors que le maillage fin (sur 32 processeurs) contient 115530 noeuds. Ces calculs ont été réalisés sur IBM SP-2. L'option sans recouvrement sera prise en compte dans la version parallèle de N3S-MUSCL durant l'année 97, en étroite collaboration avec SIMULOG (proposition en cours de négociation avec RENAULT dans le cadre du projet ESPRIT HPS-ICE

pour lequel SIMULOG est sous-contractant de RENAULT). Ces travaux ont donné lieu cette année à la publication de deux articles en revue[745]¹⁶.

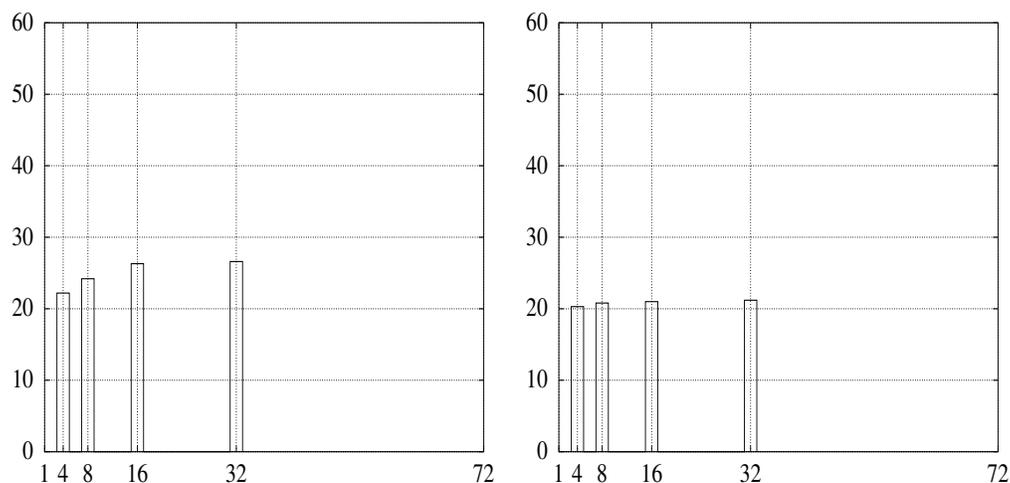


Figure 3: Simulations numériques parallèles sur IBM SP-2
 Comparaison entre approches avec (figure gauche) et sans (figure droite) recouvrement
 Temps CPU pour 10 itérations en fonction du nombre de processeurs

3.7.2 Parallélisation de schémas ENO

Participants : Rémi Abgrall, Stéphane Lanteri

Les schémas ENO (*Essentially Non Oscillatory*) ont une précision spatiale accrue grâce à l'emploi de fonctions polynômiales de degré élevé pour représenter la solution. Ces polynômes sont calculés à partir des données interprétées comme l'approximation de la valeur moyenne des inconnues sur les cellules de contrôles dans une méthode de discrétisation de type volumes finis. Cependant, des difficultés sont immédiatement rencontrées quand on essaie de généraliser ces schémas sur des maillages triangulaires ou tétraédriques : il n'y a alors plus de direction privilégiée. En conséquence, la construction de polynômes de degré élevé sur ces maillages conduit à un problème d'approximation avec des données réparties de manière aléatoire. De plus, la reconstruction doit être effectuée à chaque pas de temps et dans chaque cellule de contrôle. Étant donné que la phase de reconstruction est généralement coûteuse, on est obligé de limiter l'ordre de précision à trois, même sur les calculateurs les plus puissants existant aujourd'hui. Afin de réduire le coût de ces schémas et donc de les rendre plus compétitifs, deux stratégies sont étudiées dans le cadre d'une action intégrée PROCOPE dans laquelle notre partenaire Allemand est le DLR à Gottingen (Prof. T. Sonar). La première consiste dans la prise en compte d'une technique d'analyse multiéchelle (voir la section 3.1.8) ; la seconde se concentre sur la parallélisation SPMD d'un schéma ENO en éléments finis triangulaires. Pour ce qui concerne ce dernier point, notre contribution porte d'une part sur l'adaptation d'une technique de partitionnement de maillage à la molécule d'approximation d'un schéma précis au troisième ordre et, d'autre part, sur la prise en compte d'une stratégie de recouvrement calculs/communications. Les premiers résultats obtenus (sur IBM SP-2 du CNUC à Montpellier) ont fait l'objet de deux communications, dont une à la conférence ECCOMAS'96[758].

¹⁶S. Lanteri and M. Lorient, *Large-scale solutions of three-dimensional compressible flows using the parallel N3S-MUSCL solver*, accepté pour publication dans *Concurrency: Pract. and Exp.*, (1996).

3.7.3 Optimisation de forme aérodynamique 3D

Participants : Stéphane Lanteri, Jean-Michel Malé

Dans le cadre de notre participation au thème 2 du programme GENIE (Réingénierie, voir section 3.5.2) nous sommes amenés à mettre au point un environnement d'optimisation de formes aérodynamiques utilisable sur plateforme parallèle. Cette étude, visant une application par définition multidisciplinaire, met en jeu les éléments suivants :

- comme point de départ, un code (thèse de N. Marco ¹⁷) pour l'optimisation de voilures tridimensionnelles reposant sur une méthode de type gradient et intégrant : un module de calcul d'un écoulement stationnaire Eulérien (approche mixte éléments/volumes finis et technique MUSCL) et des routines de calcul de dérivées de fonctions complexes (par exemple pour le calcul de la matrice Jacobienne de l'état adjoint ou pour le calcul du produit de cette matrice par une direction de descente). Ces routines sont obtenues par utilisation de l'outil de différentiation automatique **ODYSSÉE** développé dans le projet SAFIR;
- un outil d'aide à la parallélisation de calculs éléments finis par découpage de maillage (voir section 3.6.1). Cet outil est développé dans le cadre du programme GENIE par L. Hascoet.

L'outil développé par L. Hascoet a pour objet de faciliter la parallélisation de codes complexes tel que celui considéré ici. La stratégie de parallélisation par partitionnement de maillage a servi de base à une phase de spécification des points d'entrée et des fonctionnalités de l'outil. Par ailleurs, pour permettre l'évaluation de l'outil en question, le programme GENIE prévoit aussi une activité de parallélisation "manuelle". Cette étude porte sur trois éléments importants de l'environnement d'optimisation complet : (1) la résolution de l'état direct (l'écoulement Eulérien), (2) la résolution de l'état adjoint puisqu'il s'agit ici d'une méthode de gradient et (3) la méthode hiérarchique de paramétrisation de la forme à optimiser. Cette étape de parallélisation est en cours; des premiers résultats ont été présentés à la conférence ECCOMAS'96[753].

4 Actions industrielles

4.1 Consortium N3S-NATUR

Le succès d'un ensemble de méthodes préconisées par le projet SINUS conduit au rapprochement de plusieurs filières industrielles et à leur association dans le cadre d'un consortium de développement apte à la construction d'un code de Mécanique des fluides moderne et généraliste. Le consortium N3S-NATUR en cours de formation concerne les organismes suivants : Ecole Centrale de Lyon, INRIA, EDF, RENAULT, SNECMA, METRAFLU et SIMULOG.

4.2 Lancement du programme N3S-PMG

Ce programme de recherche et développement, qui a démarré le 1er novembre 1996 et durera trois ans, sera réalisé essentiellement dans le cadre du projet SINUS avec une sous-traitance SIMULOG. Il occupera un ingénieur à plein temps, et un doctorant à mi-temps. Le but est d'adapter un algorithme multigrille par agglomération à une version parallèle du code N3S. Les industriels suivants financent ce programme : CNES, EDF, RENAULT et SNECMA.

¹⁷N. Marco, *Optimisation de formes aérodynamiques 2D et 3D par une méthode multiniveau en maillages non-structurés*, thèse de l'université de Nice-Sophia Antipolis, Mention Sciences de l'Ingénieur, (1995).

4.3 Participation au programme spatial

Le projet a contribué ces dernières années à spécifier une nouvelle version du code THESEE, développé par la société BERTIN pour le CNES et la SEP, dont la version V7 utilise l'approximation MUSCL en non-structuré. Le projet participe maintenant activement à plusieurs actions amont destinées à renforcer ou étendre les fonctionnalités des codes reposant sur cette approximation et notamment de THESEE ; dans cette perspective, les études suivantes ont été financées par le CNES : couplage acoustique-tourbillon (post-doc de R. Carpentier), approximations à faible dissipation (thèse de C. Debiez), adaptation petit Mach des codes d'aérodynamique (thèse de C. Viozat, cofinancement RENAULT).

4.4 Programme moteur à piston

Outre sa participation au montage du consortium N3S-NATUR décrit plus haut, RENAULT finance deux études amont, l'une sur les re-maillages qui nous associe avec le CEMEF (post-doc de B. Duval), l'autre sur les écoulements petit Mach (thèse de C. Viozat).

4.5 Action prospective sur les algorithmes génétiques

Cette coopération avec Dassault Aviation porte sur une étude de faisabilité d'application d'algorithmes génétiques à l'optimisation multicritère de formes aérodynamiques (post-doc de N. Marco).

5 Actions nationales et internationales

5.1 Actions nationales

A. Dervieux a participé au Conseil Scientifique du CEMEF (Ecole des Mines).

Hervé Guillard est membre de la commission N3S et membre de l'association CREMIS à Marseille.

5.2 Actions européennes

Le projet participe aux actions intégrées suivantes :

- PROCOPE (« Approximation optimale et analyse multiéchelle pour les schémas volumes fins adaptés aux maillages triangulaires. ») dans laquelle sont impliqués R. Abgrall et S. Lanteri (pour l'INRIA Sophia Antipolis) et T. Sonar et D. Hempel (DLR Göttingen, Allemagne). Cette action a débuté le 1er janvier 1995 pour une durée de 2 ans. L'objet de l'étude est de combiner les compétences en mécanique des fluides numérique des deux groupes de recherche (projet SINUS pour l'INRIA et le groupe de numériciens du DLR Göttingen). Le thème visé concerne les schémas numériques de type ENO (Essentiellement Non Oscillant) et les techniques d'analyse multiéchelle. Les schémas étudiés doivent fonctionner sur des maillages non-structurés. L'objectif principal de l'étude est d'augmenter l'efficacité des méthodes numériques résultantes en considérant et éventuellement combinant plusieurs approches : calcul effectif de la reconstruction dans les schéma ENO et l'analyse multiéchelle, exploitation de la structure multiéchelle, décomposition de domaines et parallélisme.
- TOURNESOL (« Schémas multidimensionnels monotones de type *shock capturing* et *cell vertex* pour les équations d'Euler et Navier-Stokes. Schémas ENO pour les écoulements instationnaires. ») dans laquelle sont impliqués A. Dervieux et C. Viozat (pour l'INRIA), R. Abgrall (université de Bordeaux I), les Profs H. Deconinck et G. Degrez (von Karman Institute for Fluid Dynamics, Belgique). Cette action débutera officiellement le 1er Janvier 1997 pour une durée de 2 ans.

L'objet de l'étude est de continuer et d'amplifier une collaboration dont le but principal est la construction de schémas vraiment multidimensionnels décentrés pour les équations d'Euler et de Navier-Stokes. On cherchera notamment à incorporer des idées issues des méthodes décentrées multidimensionnelles dans des schémas numériques du type SUPG. D'autres sujets connexes tels que l'estimation *a priori* d'erreur pour l'adaptation de maillages et la précision temporelle pour les écoulements instationnaires seront aussi considérés.

Le projet est partenaire du « Thematic Network » INGENET (« Networked Industrial Design and Control Optimization Using Genetic Algorithms and Evolution Strategies ») dont le but est de mettre en place un réseau de sites compétents dans le domaine des algorithmes génétiques et de leurs applications à l'optimisation industrielle et d'exploiter les techniques de bases de données industrielles développées dans le projet (participants : J.-A. Désidéri et N. Marco). Dans ce cadre, le projet a organisé le 16 décembre 1996 à Sophia Antipolis, une journée de présentation d'INGENET aux partenaires européens potentiels.

5.3 Actions internationales

Le projet développe le concept de *networkshop* : il s'agit de stimuler la coopération scientifique par la constitution d'un réseau de laboratoires, d'une base de donnée partagée par ce réseau, à fort contenu scientifique et technologique (données d'expériences, de calcul, logiciels) et d'une ou plusieurs manifestations scientifiques permettant la comparaison des travaux des participants sur des problèmes communs. Notons que cette activité a suscité une participation importante de R. Fournier du SEMIR dans le développement d'un logiciel de visualisation, VIGIE, dont l'exécutable est remis à jour régulièrement et mis à disposition dans le domaine public. Ce logiciel très convivial a été conçu pour le déroulement interactif d'atelier de calcul scientifique et il permet en particulier la comparaison de plusieurs solutions apportées à un même problème par différents auteurs.

Le projet coopère avec l'équipe de dynamique des structures du Prof C. Farhat (université du Colorado à Boulder) sur le thème "couplage fluide/structure en aérodynamique". Une troisième proposition NSF est en cours de mise en place.

Le projet participe à un programme de coopération DFG/CNRS dans le cadre du GDR "mécanique de fluides numérique" dirigé par P. Bontoux. Ce programme nous associe avec l'université de Duisbourg (Prof D. Haenel et Prof R. Vilsmeier) pour une étude des méthodes numériques en maillages multiélément.

Cette année a vu la mise en place d'une coopération avec l'institut Polytechnique de Turin (Prof M. Pandolfi) et le constructeur aéronautique ALENIA (V. Selmin) qui prendra notamment la forme du post-doc d'A. Iollo (actuellement à l'ICASE) soutenu par le programme européen TMR.

J.-A. Désidéri a participé au Colloque "Three Years of French-Russian Cooperation at the Liapunov Institute" (28-29 octobre 1996, à Moscou, Russie).

6 Diffusion des résultats

6.1 Enseignement

6.1.1 Enseignement universitaire

Méthodes multigrille, DEA d'analyse numérique, UNSA, 15 h, (A. Dervieux).

- Schémas d'approximation pour l'hyperbolique non-linéaire**, DEA d'analyse numérique, UNSA, 15 h, (J.-A. Désidéri).
- Méthodes de résolution itératives**, cours de troisième année de l'ESSI, option calcul scientifique, commun avec le DEA d'analyse numérique, UNSA, 30 h, (J.-A. Désidéri).
- Introduction à l'analyse numérique**, cours de première année de l'ESSI, 16 h, (J.-A. Désidéri).
- Fluides compressibles**, cours en Maîtrise d'ingénierie mathématique, UNSA, 25 h, (R. Abgrall, J.-A. Désidéri).
- Modèles industriels en turbulence**, DEA de turbulence et systèmes dynamiques, UNSA, 12 h, (H. Guillard).
- Mécanique de fluides numérique parallèle**, cours et td/tp de troisième année de l'ESSI, option calcul scientifique, 20 h, (S. Lanteri).

6.1.2 Thèses

- Thèses en cours :
 1. Laurent Angeli, « Extraction de sous-programmes, intégration dans un outil de transformation de code FORTRAN. », spécialité informatique, UNSA.
 2. Olivier Botella, « Simulation directe de turbulence compressée », spécialité sciences de l'ingénieur, UNSA.
 3. Jérôme Francescato, « Algorithmes multigrille non-linéaires pour des écoulements turbulents à bas Reynolds », spécialité mathématiques appliquées, UNSA.
 4. Cyril Godart, « Simulation numérique d'écoulements hypersoniques complexes », spécialité mathématiques appliquées, UNSA.
 5. Dominique Guézengar, « Modélisation et simulation numérique d'écoulements cisailés turbulents compressibles », spécialité mécanique, option mécanique des fluides, université de Marseille II.
 6. Luc Fournier, « Algorithmes multigrille parallèles pour les systèmes raides issus de certains modèles statistiques de la turbulence et application à des écoulements complexes tridimensionnels », spécialité sciences de l'ingénieur, UNSA.
 7. Cécile Viozat, « Approximations multiéléments et couches limites turbulentes », spécialité sciences de l'ingénieur, UNSA.
- Thèses soutenues en 1996 dans le projet :
 1. Christophe Debiez, « Approximation et linéarisation d'écoulements aérodynamiques instationnaires », spécialité mathématiques appliquées, UNSA, novembre 1996.
 2. Benoît Duval, « Optimisation de maillages non-structurés dans des géométries déformables », spécialité physique, université de Rouen, juin 1996.
 3. Régis Martin, « Développement de méthodes de calcul efficaces pour des écoulements instationnaires en géométrie déformable », spécialité mathématiques appliquées, UNSA, février 1996.
 4. Katherine Mer, « Analyse des approximations décentrées ou stabilisées pour l'aérodynamique instationnaire », spécialité mathématiques appliquées, UNSA, décembre 1996.
- Des membres du projet (A. Dervieux, J.-A. Désidéri et H. Guillard) ont participé à 5 jurys de thèse dont 4 en tant que rapporteurs.

6.1.3 Stages

Le projet a accueilli les stagiaires suivants :

- Luc Fournier, « Simulation numérique d'expériences en régime hypersonique », stage de DEA mécanique et énergétique de Nancy, 3 mois.
- Soulemane Coulibaly, « Schémas globaux en modélisation de la turbulence », stage de DEA analyse numérique, UNSA, 4 mois.
- Rabah Bey, « Schémas multiniveau pour les équations dissipatives » , stage de DEA analyse numérique, université de Saint-Etienne, 4 mois.

6.2 Participation à des conférences et colloques

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

6.3 Organisation de colloques et de cours

L. Hascoët a organisé un séminaire de trois jours du 1 au 3 juillet 1996, sur le thème "techniques de développement pour codes numériques". Ce séminaire, destiné en particulier aux doctorants, a été suivi par 60 personnes, dont 25 extérieures à l'INRIA.

J.-A. Désidéri a participé au comité d'organisation du Colloque National d'Analyse Numérique ("CANICE", La Londe des Maures, 28-31 mai 1996) et y a organisé avec H. Guillard un mini-symposium portant sur les méthodes multigrille.

J.-A. Désidéri a participé au comité d'organisation de la Conférence ECCOMAS, Paris, 9-13 septembre 1996.

6.4 Diffusion de produits

6.5 Édition d'ouvrages

J.-A. Désidéri est co-éditeur des actes de la Conférence ECCOMAS, Paris, 9-13 septembre 1996 (trois volumes : *Computational Methods in Applied Sciences '96*, *Computational Fluid Dynamics '96* & *Numerical Methods in Engineering '96*, John Wiley & Sons Publish.).

J.-A. Désidéri est l'un des six co-éditeurs de la série *Computational Methods in Applied Sciences*, John Wiley & Sons. Cette année a vu l'édition des actes du « Third Franco-Russian Workshop on Experimentation, Modelling and Computation in Flow, Turbulence and Combustion », qui s'est déroulé à Tachkent (Ouzbekistan) du 24 au 28 avril 1995.

6.6 Activités extérieures

J.-A. Désidéri est trésorier du GAMNI/SMIAI (Groupement pour l'Avancement des Méthodes Numériques pour l'Ingénieur/Société de Mathématiques Appliquées et Industrielles).

7 Publications

Documents d'habilitation à diriger des recherches

- [738] H. GUILLARD, *Contribution à l'étude numérique d'écoulements à faible nombre de Mach*, habilitation à diriger des recherches, université d'Aix-Marseille I, février 1996.

Thèses

- [739] C. DEBIEZ, *Approximation et linéarisation d'écoulements aérodynamiques instationnaires*, thèse de doctorat, université de Nice-Sophia Antipolis, novembre 1996.
- [740] B. DUVAL, *Optimisation de maillages non-structurés dans des géométries déformables*, thèse de doctorat, université de Rouen, juin 1996.
- [741] R. MARTIN, *Développement de méthodes de calcul efficaces pour des écoulements instationnaires en géométrie déformable*, thèse de doctorat, université de Nice-Sophia Antipolis, février 1996.

Articles et chapitres de livre

- [742] R. ABGRALL, «How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations : a quasi conservative approach», *J. Comput. Phys.* 125, 1996, p. 150–160.
- [743] A. DERVIEUX, «About the basic numerical methods», in : *Handbook of Computational Fluid Mechanics*, R. Peyret (réd.), Academic Press, 1996, ch. 1, p. 1–23.
- [744] H. GUILLARD, B. LARROUTUROU, «Modélisation numérique en combustion subsonique», *Images des Mathématiques, CNRS Modélisation de la Combustion*, 1996, p. 77–88.
- [745] S. LANTERI, «Parallel solutions of compressible flows using overlapping and non-overlapping mesh partitioning strategies», *Parallel Computing* 22, 7, 1996, p. 943–968.
- [746] R. MARTIN, H. GUILLARD, «A second order defect correction scheme for unsteady problems», *Computers & Fluids* 25, 1, 1996, p. 9–27.

Communications à des congrès, colloques, etc.

- [747] R. ABGRALL, S. LANTERI, T. SONAR, «ENO schemes for compressible fluid dynamics», in : *Actes du Colloque sur les Ecoulements à Grande Vitesse, Modélisation Physique et Numérique, organisé par le CEA/CESTA, université de Bordeaux I/Laboratoire MAB, INRIA, Gujan-Mestras*, 1996.
- [748] G. CARRÉ, A. DERVIEUX, J. FRANCESCOTTO, «On anisotropic MG and on FMG algorithms for Navier-Stokes analysis on unstructured meshes», in : *Proceedings of the Third ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conference and Second ECCOMAS Conference on Numerical Methods in Engineering*, J.-A. Désidéri, C. Hirsch, P. Le Tallec, M. Pandolfi, J. Périaux (réd.), *Computational Fluid Dynamics '96*, John Wiley & Sons, p. 611–615, Paris, 1996.
- [749] M. CICCOLI, J.-A. DÉSIDÉRI, «Variants of the defect-correction algorithm for hyperbolic equations – application to the solution of the Euler equations», in : *Proceedings of the Third ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conference and Second ECCOMAS Conference on Numerical Methods in Engineering*, J.-A. Désidéri, C. Hirsch, P. Le Tallec, M. Pandolfi, J. Périaux (réd.), *Computational Fluid Dynamics '96*, John Wiley & Sons, p. 394–400, Paris, 1996.
- [750] A. DERVIEUX, C. DEBIEZ, «Application of Mixed-Element-Volume MUSCL methods with 6th order viscosity», in : *Proceedings of the Third ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conference and Second ECCOMAS Conference on Numerical Methods in Engineering*, J.-A. Désidéri, C. Hirsch, P. Le Tallec, M. Pandolfi, J. Périaux (réd.), *Computational Fluid Dynamics '96*, John Wiley & Sons, p. 414–420, Paris, 1996.

- [751] A. DERVIEUX, J. FRANCESCETTO, G. CARRÉ, «Fats solvers for unstructured finite volume methods», in : *Proceedings of the First International Symposium on Finite Volumes for Complex Applications, Problems and Perspectives*, F. Benkhaldoun, R. Vilsmeier (réd.), HERMES, p. 15–28, INSA de Rouen, 1996.
- [752] A. DERVIEUX, I. LEKAKIS, «ETMA : Efficient Turbulence Models for Aeronautics», in : *Proceedings of the Third ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conference and Second ECCOMAS Conference on Numerical Methods in Engineering*, J.-A. Désidéri, C. Hirsch, P. Le Tallec, E. Oñate, M. Pandolfi, J. Périaux, E. Stein (réd.), *Computational Methods in Applied Sciences '96*, John Wiley & Sons, p. 485–490, Paris, 1996.
- [753] A. DERVIEUX, N. MARCO, J.-M. MALÉ, S. LANTERI, B. STOUFFLET, «Parametrization of unstructured shapes and application to 3D aerodynamical shape design», in : *Proceedings of the Third ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conference and Second ECCOMAS Conference on Numerical Methods in Engineering*, J.-A. Désidéri, C. Hirsch, P. Le Tallec, E. Oñate, M. Pandolfi, J. Périaux, E. Stein (réd.), *Minisymposia of ECCOMAS'96, Optimal shape design in fluid mechanics*, John Wiley & Sons, Paris, 1996.
- [754] J.-A. DÉSIDÉRI, M.-V. SALVETTI, «La philosophie de validation des codes», in : *Actes du Colloque sur les Ecoulements à Grande Vitesse, Modélisation Physique et Numérique, organisé par le CEA/CESTA, université de Bordeaux I/Laboratoire MAB*, INRIA, Gujan-Mestras, France, 1996.
- [755] J.-A. DÉSIDÉRI, J. PÉRIAUX, «Validation of high speed flow simulations by means of network data base», in : *Proceedings of the Third ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conference and Second ECCOMAS Conference on Numerical Methods in Engineering*, J.-A. Désidéri, C. Hirsch, P. Le Tallec, E. Oñate, M. Pandolfi, J. Périaux, E. Stein (réd.), *Computational Methods in Applied Sciences '96*, John Wiley & Sons, p. 300–306, Paris, 1996.
- [756] S. GAUTHIER, H. GUILLARD, T. LUMPP, J.-M. MALÉ, R. PEYRET, F. RENAUD, «A spectral domain decomposition technique with moving interfaces for viscous compressible flows», in : *Proceedings of the Third ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conference and Second ECCOMAS Conference on Numerical Methods in Engineering*, J.-A. Désidéri, C. Hirsch, P. Le Tallec, M. Pandolfi, J. Périaux (réd.), *Computational Fluid Dynamics '96*, John Wiley & Sons, p. 834–844, Paris, 1996.
- [757] C. GODART, J.-A. DÉSIDÉRI, M.-V. SALVETTI, «Numerical comparison of wall catalysis models for hypersonic reactive air flows», in : *Proceedings of the Third Workshop on Modelling of Chemical Reactions Systems*, Heidelberg, Germany, 1996.
- [758] S. LANTERI, R. ABGRALL, «Parallel solutions of unsteady compressible flows using ENO schemes on unstructured triangular meshes», in : *Proceedings of the Third ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conference and Second ECCOMAS Conference on Numerical Methods in Engineering*, J.-A. Désidéri, C. Hirsch, P. Le Tallec, M. Pandolfi, J. Périaux (réd.), *Computational Fluid Dynamics '96*, John Wiley & Sons, p. 1032–1037, Paris, 1996.
- [759] S. LANTERI, B. NKONGA, S. PIPERNO, «Domain partitioning and message passing for the distribution of unstructured mesh calculations on MIMD platforms: application to steady and unsteady compressible flow simulations», in : *Proceedings of the Parallel Computational Fluid Dynamics 96 Conference*, P. Schiano, A. Ecer, J. Périaux, N. Satofuka (réd.), Elsevier Science Publishers B.V., Nort Holland, Capri, Italie, 1996.
- [760] J.-M. MALÉ, N. ROSTAING-SCHMIDT, N. MARCO, «Automatic differentiation : an application to optimum shape design in aeronautics», in : *Proceedings of the Third ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conference and Second ECCOMAS Conference on Numerical Methods in Engineering*, J.-A. Désidéri, C. Hirsch, P. Le Tallec, E. Oñate, M. Pandolfi, J. Périaux, E. Stein (réd.), *Minisymposia of ECCOMAS'96, Automatic differentiation of programs and large scale optimization*, John Wiley & Sons, Paris, 1996.
- [761] K. MER, «Fourth-order dissipation on unstructured stretched meshes for convection diffusion problems», in : *Proceedings of the First International Symposium on Finite Volumes for Complex Applications, Problems and Perspectives*, F. Benkhaldoun, R. Vilsmeier (réd.), HERMES, p. 193–200, INSA de Rouen, 1996.
- [762] B. MOHAMMADI, J.-M. MALÉ, N. ROSTAING-SCHMIDT, «Automatic differentiation in direct and reverse modes: application to optimum shapes design in fluid mechanics», in : *Computational Differentiation : Techniques, Applications, and Tools*, M. Berz, C. Bischof, G. Corliss, A. Griewank (réd.), SIAM, 1996.

- [763] M. SALVETTI, J.-A. DÉSIDÉRI, «An implicit finite-element method for the computation of viscous non-equilibrium hypersonic flows», in : *Proceedings of the Third ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conference and Second ECCOMAS Conference on Numerical Methods in Engineering*, J.-A. Désidéri, C. Hirsch, P. Le Tallec, M. Pandolfi, J. Périaux (éd.), *Computational Fluid Dynamics '96*, John Wiley & Sons, p. 250–256, Paris, 1996.
- [764] C. VIOZAT, «Causes and cure of unfavourable behaviour at low Mach number for an implicit upwind scheme», in : *Proceedings of the First International Symposium on Finite Volumes for Complex Applications, Problems and Perspectives*, F. Benkhaldoun, R. Vilsmeier (éd.), HERMES, p. 185–192, INSA de Rouen, 1996.
- [765] C. VIOZAT, «Comportement d'une famille de schémas décentrés à petit nombre de Mach», in : *Actes du 28ème Congrès National d'Analyse Numérique*, La Londe-Les Maures, 1996.

Rapports de recherche et publications internes

- [766] R. ABGRALL, J. BENAMOU, «Big ray tracing and eikonal solver on unstructured grids : application to the computation of a multi-valued travel-time in the Marmousi model», *rapport de recherche n°3019*, Inria, octobre 1996, soumis à Geophysics, <http://www.inria.fr/RRRT/RR-3019.html>.
- [767] A. BERMÚDEZ, A. DERVIEUX, J.-A. DÉSIDÉRI, M. VÁSQUEZ, «Upwind schemes for the two-dimensional shallow water equations with variable depth using unstructured meshes», *rapport de recherche n°2738*, Inria, décembre 1995, <http://www.inria.fr/RRRT/RR-2738.html>.
- [768] O. BOTELLA, «Résolution des équations de Navier-Stokes par des schémas de projection Tchebychev», *rapport de recherche n°3018*, Inria, octobre 1996, <http://www.inria.fr/RRRT/RR-3018.html>.
- [769] R. CARPENTIER, «Comparaison entre des schémas 2D de type Roe sur maillage régulier triangle ou quadrangle I : calculs aux sommets - pentes centrées», *rapport de recherche n°2824*, Inria, mars 1996, <http://www.inria.fr/RRRT/RR-2824.html>.
- [770] M. CICCOLI, J.-A. DÉSIDÉRI, «Spectral analysis of defect-correction algorithms for hyperbolic equations», *rapport de recherche n°2831*, Inria, mars 1996, <http://www.inria.fr/RRRT/RR-2831.html>.
- [771] C. DEBIEZ, «Approximations décentrées à faible dissipation pour des problèmes hyperboliques», *rapport de recherche n°2811*, Inria, février 1996, <http://www.inria.fr/RRRT/RR-2811.html>.
- [772] C. DEBIEZ, «Contribution à l'étude des schémas aux volumes finis décentrés à faible dissipation transverse», *rapport de recherche n°2985*, Inria, septembre 1996, <http://www.inria.fr/RRRT/RR-2985.html>.
- [773] A. DERVIEUX, J. FRANCESCATTI, «A semi-coarsening strategy for unstructured MG with agglomeration», *rapport de recherche n°2950*, Inria, juillet 1996, <http://www.inria.fr/RRRT/RR-2950.html>.
- [774] J. FRANCESCATTI, «Modèles bas-Reynolds appliqués à une couche limite compressible», *rapport de recherche n°2837*, Inria, mars 1996, <http://www.inria.fr/RRRT/RR-2837.html>.
- [775] C. GODART, M.-V. SALVETTI, J.-A. DÉSIDÉRI, «Catalyse hétérogène pour les écoulements hypersoniques», *rapport de recherche n°3041*, Inria, novembre 1996, <http://www.inria.fr/RRRT/RR-3041.html>.
- [776] B. KOOBUS, C. FARHAT, «Time-accurate schemes for computing two- and three-dimensional viscous fluxes on unstructured dynamic meshes», *rapport de recherche n°2823*, Inria, mars 1996, <http://www.inria.fr/RRRT/RR-2823.html>.
- [777] N. MARCO, C. GODART, J.-A. DÉSIDÉRI, B. MANTEL, J. PÉRIAUX, «A genetic algorithm compared with a gradient-based method for the solution of an active-control model problem», *rapport de recherche n°2948*, Inria, juillet 1996, <http://www.inria.fr/RRRT/RR-2948.html>.
- [778] K. MER, «Fourth-order dissipation on unstructured anisotropic meshes for convection-diffusion problems», *rapport de recherche n°2953*, Inria, juillet 1996, <http://www.inria.fr/RRRT/RR-2953.html>.

Divers

- [779] A. DERVIEUX, «Difficultés liées à l'implémentation des modèles de turbulence et besoins industriels», juin 1996, Journée FIRTECH Calcul Scientifique.
- [780] B. DUVAL, «Evaluation de MAT dans le contexte de géométries moteurs 3D déformables», octobre 1996, Rapport intermédiaire de contrat (3 mois).
- [781] L. FOURNIER, «Simulation numérique d'expériences en régime hypersonique», juin 1996, Rapport de stage de DEA.
- [782] L. HASCOET, «Aide à la migration vers HPF», septembre 1996, EUREKA EUROTOPS EU-933.

8 Abstract

The activities of SINUS contribute to the progress of methods of numerical modelling, from the analysis of mathematical and physical models, to the computer implementation of the solution algorithms. Our efforts are to find new methods (approximation, solution algorithms), to analyse models and schemes, and to experiment them. Today's application domain is the simulation of compressible reactive flows (aerodynamics, hypersonics, combustion), with an extension to first-order hyperbolic systems in general. The main methods that are produced are : upwind TVD finite-element methods applicable to non-structured meshes, self-adaptive meshes, implicit and multigrid schemes, spectral methods, parallel algorithms ; these methods are to prepare a new generation of CFD codes that will be more friendly (due to more general meshes, to extra robustness provided by TVD and strongly implicit formulations), and more adapted to intensive/parallel calculations. Besides our colleagues of numerical methods, our usual collaborators are : physicists (for the analysis of fundamental phenomena, and help in modelling), computer scientists (software chain for parallelism with emphasis on numerics and environments), software industries (numerical methods, design of codes), application-oriented industries (contribution to physical modelling, numerical methods, design of codes).