

Projet M3N

Multi-Modèles et Méthodes Numériques

Rocquencourt

THÈME 4B



*R*apport
d'Activité

2000

Table des matières

1	Composition de l'équipe	3
2	Présentation et objectifs généraux	4
3	Fondements scientifiques	5
3.1	Lois de parois, optimisation et contrôle des fluides visqueux	5
3.2	Fluides avec des frontières mobiles	7
3.3	Modélisation des Semi-conducteurs	8
3.4	Analyse particulière des fluides à l'échelle microscopique	9
4	Domaines d'applications	9
5	Logiciels	10
6	Résultats nouveaux	11
6.1	Modélisation, optimisation et contrôle pour les fluides turbulents	11
6.1.1	Validation de lois de paroi pour des écoulements non stationnaires	11
6.1.2	Lois de paroi généralisées: une approche couche limite	12
6.1.3	Optimisation de formes aérodynamiques 3D	14
6.2	Algorithmes numériques et modélisation pour les fluides avec des frontières mobiles	15
6.2.1	Interaction fluide-structure	15
6.2.2	Magnétohydrodynamique des métaux liquides	16
6.2.3	Schéma cinétique pour les équations de Saint-Venant	18
6.2.4	Écoulements diphasiques	20
6.3	Applications bio-médicales	23
6.3.1	Appareil respiratoire	23
6.3.2	Veine et valvule	24
6.3.3	Foie	25
6.4	Semi-conducteurs	25
6.5	Dans le domaine du microscopique et du cinétique	28
6.5.1	Modèles BGK Gaussiens	28
6.5.2	Écoulements gazeux en milieu poreux	29
6.5.3	Application du modèle BGK gaussien à la condensation sur une plaque infinie	30
6.5.4	Simulation et optimisation des canaux fluidiques	31
6.5.5	Asymptotique haute fréquence pour Helmholtz	31
7	Contrats industriels (nationaux, européens et internationaux)	32
7.1	Action Optimisation de forme en mécanique des fluides	32
7.2	Action Modélisation simplifiée de gaz dilués	32
7.3	Action Décision	32
7.4	Action Schémas cinétiques pour les équations de Saint-Venant	32

7.5	Action Aluminium	33
8	Actions régionales, nationales et internationales	33
8.1	Actions Régionales	33
8.2	Actions nationales	33
8.3	Actions financées par la Communauté Européenne	33
8.3.1	Décision	33
8.4	Relations bilatérales internationales	34
8.4.1	Méditerranée	34
8.5	Accueil de chercheurs étrangers	34
9	Diffusion de résultats	34
9.1	Animation de la communauté scientifique	34
9.2	Actions d'enseignement	35
9.3	Autres Enseignements	35
9.4	Participation à des colloques	35
10	Bibliographie	36

1 Composition de l'équipe

Responsable scientifique

Benoit Perthame [Professeur, Université de Paris 6]

Responsable permanent

Americo Marrocco [DR]

Assistante de projet

Maryse Desnous [TR, en commun avec MACS et Gamma]

Personnel INRIA

Jean-François Bourgat [DR, 4/5]

Marie-Odile Bristeau [DR, 4/5]

Jean-Frédéric Gerbeau [CR]

Marie-Hélène Lallemand-Tenkès [CR, 4/5, congé de maternité février-septembre]

Collaborateurs extérieurs

Patrick Le Tallec [Professeur, Ecole Polytechnique]

Bijan Mohammadi [Professeur, Université de Montpellier II]

Marc Thiriet [CR CNRS]

Chercheurs invités

Ramaz Botchorishvili [Tbilissi (Géorgie)]

Doctorants

Pierre Andries [boursier X]

Rodolfo Araya [boursier Gouv. du Chili et INRIA, jusque mai 2000]

Gabriel Barrenechea [boursier INRIA]

Mugurel Stanciu [boursier INRIA]

Stagiaires

Abdou-Semyiou Adedjouma [Université du Bénin, 6 mois]

David Benqué [Stage ENSAM, 2 mois]

Florent Bersani [Stage X, 2 mois]

Olivier de Chivré [Stage DEA, Paris Dauphine, 3 mois]

Benoit Coussin [Mastère X, 5 mois]

Valérie Roziere [Stage X, 2 mois]

2 Présentation et objectifs généraux

Créé en 1996, le projet M3N (Multi-Modèles et Méthodes Numériques) se donne pour objectif de développer des approches numériques pluridisciplinaires en Mécanique, en Physique et en Sciences de l'Ingénieur. Il s'agit d'analyser, de coupler, d'optimiser différents modèles numériques pour simuler et concevoir des systèmes physiques complexes. Ces modèles s'écrivent le plus souvent sous la forme d'équations aux dérivées partielles **couplées** qui expriment sous forme mathématique les lois de conservation de la physique et les comportements des matériaux constitutifs. Ces équations sont ensuite discrétisées par des méthodes numériques variées, en maillages non structurés, ce qui réduit le problème initial à plusieurs systèmes couplés d'équations non linéaires à grand nombre d'inconnues (de plusieurs milliers à plusieurs millions) qu'il faut résoudre sur ordinateur par des méthodes adéquates. Les méthodes numériques peuvent être du type éléments finis, volumes finis, particulaires. Le projet regroupe ces activités d'approximation sur maillages non structurés, de développement de méthodes numériques et de modélisation asymptotique autour des thèmes suivants :

- Modélisation, optimisation et contrôle de fluides visqueux turbulents : développement de lois de paroi, construction de maillages adaptés, optimisation de formes en présence de fluides incompressibles turbulents.
- Modélisation de fluides en présence de frontières mobiles : surfaces libres, couplage fluide-structure. On étudie aussi les modèles de Saint-Venant en régime rapide (hyperbolique), leur couplage avec les modèles de Navier-Stokes. Les applications à des écoulements biomécaniques sont un des axes importants de ce thème.
- Modélisation multi-échelle des semi-conducteurs : mise en oeuvre de modèles de dérive diffusion, énergie-transport ou cinétique avec adaptation de maillages pour l'étude de transistors bipolaires de taille submicronique.
- Développement analyse et couplage de modèles cinétiques ou hybrides pour l'étude de fluides complexes : gaz raréfiés, fluides diphasiques, canaux fluidiques.

Le projet M3N se concentre donc dans le secteur des méthodes numériques pour les fluides et les semi-conducteurs. Dans le domaine de la dynamique des Fluides on s'intéresse surtout à la prise en compte de frontières mobiles, de surfaces libres, ou de parois mobiles dans des applications biomécaniques. Pour ces sujets, il travaille en partenariat avec des industriels ou des laboratoires extérieurs sur des projets précis (étude d'applications ou développement d'outils).

3 Fondements scientifiques

De manière traditionnelle, l'analyse et la conception en milieu industriel utilisent les différents modèles disponibles de manière successive et découplée. Cette approche est mise en défaut aujourd'hui par la complexité des nouveaux projets technologiques. Le concept de modélisation multidisciplinaire consiste alors à développer et valider des hiérarchies de modèles physiques et numériques pour pouvoir les utiliser de manière complémentaire ou couplée dans un processus d'analyse, de conception ou d'optimisation. La réalisation d'un tel objectif nécessite de :

- savoir passer de manière continue d'un niveau de modélisation physique à un autre, afin de pouvoir les utiliser de manière couplée et consistante. Le couplage ou la transition se font par développement asymptotique ou par décomposition de domaines;
- savoir analyser les fondements mathématiques des algorithmes numériques retenus et en déduire les méthodes numériques les plus performantes et les mieux adaptées. Il est en particulier important de savoir démontrer des estimations d'erreur afin de garantir les résultats.
- savoir intégrer les modèles numériques dans une boucle d'optimisation et de contrôle. La conception optimale de formes demande à utiliser les modèles numériques de comportement développés au préalable pour optimiser la forme de l'objet étudié.

Dans cette optique générale, les sujets de recherche du projet M3N se sont orientés autour des cinq axes décrits ci-dessous.

3.1 Lois de parois, optimisation et contrôle des fluides visqueux

L'action du projet se concentre sur la validation et l'adaptation numérique des modèles de base utilisables dans les calculs à grande échelle. L'idée est donc de simuler les écoulements turbulents instationnaires en utilisant un modèle de type $k - \varepsilon$ couplé à des lois de parois adaptées près des obstacles ^[MP94]. Cette technique est intéressante par sa simplicité et son faible coût. Contrairement à ce qui est communément admis, il est possible de prédire ainsi de façon précise l'écoulement autour de configurations difficiles, si on utilise des stratégies d'intégration temporelle et spatiale précises et une implémentation fine des lois de paroi. Les expériences numériques montrent cependant que pour les écoulements les plus généraux, il

[MP94] B. MOHAMMADI, O. PIRONNEAU, *Analysis of the K-Epsilon TURBULENCE MODEL*, *Research in Applied mathematics*, John Wiley & Sons, 1994, Ciarlet, P. G. and Lions, J.-L. Eds.

faut enrichir le modèle $k - \varepsilon$ classique, pour prendre en compte les effets tridimensionnels, en ajoutant par exemple des termes d'ordre 2 aux tensions de Reynolds. D'un point de vue théorique, l'introduction de ces nouveaux termes implique une remise en cause de la stabilité du système et donc du solveur utilisé. Il faut donc étudier ces aspects et prendre des mesures nécessaires à une stabilisation numérique.

Un autre problème particulièrement important dans ce cadre est l'étude des écoulements sur des parois rugueuses. A titre d'exemple, les coques des bateaux, les pales de turbines ou encore le bouclier thermique d'une tuyère qui subit une abrasion sous l'effet de la chaleur ne sont pas parfaitement lisses et présentent des rugosités qui modifient les performances aérodynamiques du corps étudié. La difficulté est de traiter les différentes échelles de grandeurs contenues dans le domaine. En effet, la nécessité d'une description précise des rugosités associée au fait que la vitesse dans la couche limite passe de zéro à $O(1)$ sur une distance $\delta \approx O(\sqrt{\text{viscosité}})$, oblige à utiliser des maillages extrêmement fins. En raison de ce coût élevé pour résoudre les équations de Navier-Stokes sur de tels domaines, les ingénieurs traitent généralement seulement les grandes échelles en négligeant l'état rugueux du domaine. Ces approximations s'avèrent souvent insuffisantes pour retrouver les bons profils expérimentaux. Il est donc indispensable de mettre au point de nouvelles approches pour traiter les petites échelles à un faible coût. Les lois de parois apparaissent alors comme une alternative pour retirer du domaine de calcul la région de fort gradient contenant les rugosités. Les lois de parois sont des conditions aux limites équivalentes imposées à l'intérieur du domaine, ayant l'objectif de simuler l'influence de la paroi sur l'écoulement. Les premières lois de parois, établies de façon empirique pour des parois lisses sont souvent dites logarithmiques parce que elles sont établies dans une région de la couche limite où la vitesse suit un profil logarithmique. Elles restent valables sur les parois rugueuses, mais certaines constantes doivent être modifiées en fonction de la géométrie de l'obstacle. Cependant, jusqu'à présent, aucune stratégie générale n'a été mise au point pour simuler de façon automatique l'influence des différentes géométries de rugosités sur l'écoulement global. De plus, ces lois de parois manquent d'une base mathématique solide permettant d'établir une analyse d'erreur, et de construire de nouvelles lois plus générales qui s'adaptent automatiquement à la forme de la rugosité. Le projet M3N cherche donc à développer de nouveaux cadres mathématiques et numériques pour construire et analyser des nouvelles lois de parois prenant mieux en compte les effets thermiques locaux ou les rugosités géométriques. Un premier cadre s'appuie sur une résolution quasi-analytique des équations dans la couche limite, avec utilisation locale d'un modèle logarithmique de viscosité turbulente. Cette résolution locale est couplée à l'extérieur par des conditions aux limites (de couplage) issues des méthodes de décomposition de domaine. Une autre approche utilise une méthode de développement asymptotique à deux échelles.

Le dernier aspect de la recherche est d'essayer d'optimiser ou de contrôler de manière quasi-automatique les formes aérodynamiques des objets étudiés. L'idée est de mettre au point une chaîne d'optimisation en étudiant chacun de ses aspects :

1. le choix de la stratégie de discrétisation des formes de l'objet permettant de se ramener à un problème d'optimisation classique dans R^n . Ceci exige de savoir paramétrer proprement dans R^n l'ensemble des configurations admissibles Ω situées dans un voisinage d'une forme de référence Ω_o , et de savoir déformer le maillage du domaine de calcul pour

- s'adapter aux variations de formes obtenues en cours d'algorithme;
2. l'utilisation d'un algorithme d'optimisation adapté. Les techniques de points intérieurs qui résolvent l'ensemble des équations d'optimalité par un algorithme de quasi-Newton tout en restant strictement à l'intérieur de l'ensemble des configurations admissibles se révèlent bien adaptées à ce type de problèmes;
 3. la mise en oeuvre d'une stratégie de calcul de gradient ou de sensibilité qui traite les équations d'état implicites par des techniques d'état adjoint;
 4. l'utilisation de la différentiation automatique de programme pour obtenir automatiquement à partir de solveurs directs les logiciels calculant les gradients des équations d'état explicites et les dérivées partielles du Lagrangien.

Cette approche est assez générale. Son efficacité locale dépend avant tout: de la pertinence de la paramétrisation de formes et de la fonction coût choisies, de l'efficacité de la discrétisation (du maillage) et des solveurs utilisés pour résoudre les équations d'état discrètes, de la forme de départ utilisée.

3.2 Fluides avec des frontières mobiles

La compréhension des mécanismes d'interactions entre un fluide et une paroi (surface libre, solide élastique en déplacement) est d'une importance capitale dans des applications variées, rivières, écoulements sanguins, respiration.

Les travaux récents des différentes équipes de recherche, et en particulier du projet M3N, ont permis de dégager et d'analyser une méthodologie générale pour la résolution numérique des problèmes d'interactions entre un fluide visqueux en écoulement et une surface libre ou une structure souple en déplacement. Cette méthodologie repose sur divers concepts de modélisation.

1. L'analyse asymptotique permet de d'obtenir des modèles simplifiés lorsque cela est possible. On est alors conduit à des modèles de type Saint-Venant qui peuvent permettre soit une simulation directe soit d'éviter certaines conditions aux limites.

Le calcul d'écoulements rapides à surface libre est en effet souvent trop complexe pour être réalisé par la résolution directe des équations de Navier-Stokes tridimensionnelles. C'est le cas des exemples de l'hydraulique: écoulements de rivières, zones d'inondations, marées.

Des modélisations plus simples que celle de Navier-Stokes ont montré leur efficacité depuis longtemps, en particulier les équations de Saint-Venant permettent de tels calculs. Elles posent toutefois de grandes difficultés numériques de par leur régime hyperbolique (convection dominante) et les équilibres hydrauliques à préserver.

Les recherches du projet M3N dans cet axe ont consisté à déduire des méthodes numériques robustes et précises permettant de réaliser des calculs de tels écoulements. Ce sont des méthodes de volumes finis fondées sur des solveurs cinétiques [9]. Elles sont utilisées en maillage non-structuré et préservent les équilibres; elles permettent des bathymétries complexes et le calcul de façon stable et robuste de transport de polluants.

2. Dans le cas d'une interface entre fluide et structure on cherche à respecter des propriétés énergétiques et le principe de l'action et de la réaction : on impose la continuité cinématique des vitesses à travers l'interface, et on vérifie la continuité des efforts grâce à la formulation variationnelle choisie. On utilise pour chaque sous-système les formulations classiques les plus adaptées au sous-problème considéré : pour le fluide formulation ALE (*Arbitrary Lagrangian Eulerian*) avec actualisation de la géométrie du domaine par un algorithme d'adaptation de maillage ou formulation Eulerienne avec condition de transpiration, formulation en Lagrangien total pour la structure. On calcule les grands déplacements de la structure sans approximations de la géométrie, y compris pour les coques, à l'aide de modèles dits géométriquement exacts (modèles étudiés les années passées), et on contrôle strictement dans ce calcul l'erreur de discrétisation commise;

Le premier problème à surmonter dans cette approche est de savoir discrétiser proprement les différentes composantes du système étudié. Ce problème déborde en fait largement de notre cadre et fait l'objet d'une collaboration avec le projet MACS.

Le second problème est ensuite d'adapter et d'appliquer ces techniques à la solution de problèmes industriels ou médicaux complexes, comme les calculs d'écoulements autour des grands ponts, l'analyse des anévrismes, le calcul d'écoulements sanguins... Ceci peut se réaliser, grâce à une résolution par éléments finis du problème fluide interne et un calcul aussi par éléments finis des grandeurs mécaniques et des contraintes à la paroi, par l'utilisation des stratégies de couplage fluide-structure préalablement développées.

3.3 Modélisation des Semi-conducteurs

La simulation numérique de dispositifs à semiconducteur continue à faire l'objet d'études intensives dans le monde et en France. On espère, par ce biais, pouvoir prévoir le comportement a priori de dispositifs avant leur réalisation effective ou, en partant d'un état de l'art donné, optimiser leurs paramètres technologiques. Dans les études de modélisation de composants, cette approche est en outre très utilisée pour construire des modèles plus simples qui seront intégrés dans des logiciels de simulation de circuits. Le secteur cible est ici l'électronique rapide et les télécommunications.

Le modèle de base est un modèle de dérive-diffusion. Ce modèle est associé à des équations aux dérivées partielles elliptiques hétérogènes, nonsymétriques et fortement nonlinéaires. Les hétérogénéités sont particulièrement violentes puisque les densités électroniques peuvent varier d'un facteur de plusieurs milliards. La résolution numérique de ces équations de dérive diffusion nécessite donc des méthodes d'approximation spécifiques, des maillages adaptés et des solveurs algébriques robustes. L'axe de travail du projet M3N dans ce cadre utilise des éléments finis mixtes ^[BF91] de bas degré, permettant de conserver exactement les courants au niveau discret, des maillages nonstructurés adaptatifs, et une stratégie de résolution nonlinéaire utilisant transitoire artificiel, relaxation des équations et méthode de Newton ^[GL89]. Cette stratégie né-

[BF91] F. BREZZI, M. FORTIN, *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*, Springer Series in Computational Mathematics, Springer-Verlag, 1991.

[GL89] R. GLOWINSKI, P. LE TALLEC, *Augmented Lagrangian and Operator Splitting Methods in Non-linear Mechanics*, Studies in Applied Mathematics, SIAM, 1989.

cessite de résoudre une succession de problèmes algébriques linéaires nonsymétriques, très mal conditionnés et de grande taille, pour lesquels il faut adapter les algorithmes de calcul matriciel existants.

Par ailleurs, la miniaturisation des dispositifs simulés, conduit à étudier des modèles plus riches que le modèle de dérive-diffusion classique. En particulier, pour prendre en compte les phénomènes thermiques, il est nécessaire de faire entrer en jeu l'énergie des porteurs. Les deux principaux modèles fluides incorporant une équation de conservation de l'énergie sont le modèle hydrodynamique et le modèle de transport d'énergie. Ils dérivent tous deux de l'équation de transport de Boltzmann, mais les liens avec les données physiques réelles doivent être éclaircis pour bien comprendre les principes et limites de validité de ces nouveaux modèles.

3.4 Analyse particulière des fluides à l'échelle microscopique

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 entre autres pour la simulation de gaz raréfiés tels qu'on les trouve à haute altitude autour des corps de réentrée, à l'intérieur des réacteurs à diffusion de vapeur ou dans certaines configurations de milieux poreux ou de microtubes. La modélisation des couches limites cinétiques en est un exemple typique, particulièrement importante en pratique car il s'agit de prédire le comportement aérodynamique des engins volant à haute altitude en atmosphère raréfiée ou semi-raréfiée. L'information recherchée dans ces couches limites est de savoir relier les sauts de vitesse et de température à la paroi aux valeurs des forces de frottement et de flux de chaleur. Le problème fondamental dans ces applications est d'identifier la distribution des particules en vitesse. Pour un gaz en équilibre, la distribution des vitesses des molécules est maxwellienne. Cependant, pour des écoulements raréfiés à très grande vitesse autour de surfaces solides, apparaissent des zones de fort déséquilibre. Tant que la distribution des vitesses reste proche d'une maxwellienne on peut utiliser des modèles continus. Si elle s'en écarte un peu plus, il faut résoudre l'équation de Boltzmann.

Dans tous les cas, la simulation numérique de ces modèles cinétiques a été réalisée à base de méthodes particulières aléatoires exigeant de gros moyens de calcul.

Afin de réduire les coûts, plusieurs approches numériques ont été proposées

- des méthodes de couplage Boltzmann/Navier-Stokes dont un élément est le solveur cinétique
- des modèles simplifiés (BGK-Gaussiens) dont la validation numérique a été poussée très loin.

Ces travaux ont été réalisés avec le CESTA pour des corps de réentrée.

4 Domaines d'applications

Les modèles numériques sont maintenant un outil de base de l'ingénieur, et sont le noyau dur des activités de conception assistée par ordinateur. On peut dégager plusieurs tendances dans l'évolution de ce domaine qui motivent directement le travail de recherche du projet M3N.

D'une part, les équations utilisées font de plus en plus appel à des modélisations physiques ou chimiques fines et multiples. Ces nouveaux modèles sont utilisés dans les secteurs de haute technologie (semiconducteurs, spatial), de l'environnement, dans le milieu biomédical,.... Leur maîtrise conditionne souvent le succès des grands projets technologiques du futur. Il leur faut donc savoir modéliser, mais aussi intégrer et identifier des modèles multiples, optimiser, valider et gérer les acquis. Les équipes de conception ont donc besoin à la fois de modèles numériques, de mailleurs adaptatifs, de solveurs puissants, d'estimateurs d'erreur, d'optimiseurs, tels que les étudie le projet M3N.

Ceci explique les nombreux contacts et contrats que le projet maintient avec le monde biomédical, industriel ou avec le secteur électronique. A titre d'exemple, on peut citer les partenariats avec plusieurs hôpitaux, le CEA, EDF, Air Liquide ou Valéo.

5 Logiciels

Nous donnons ci-dessous une liste de logiciels dont certains ont été réalisés au cours des dernières années dans le projet Menusin et que M3N continue à diffuser dans des laboratoires extérieurs, soit dans le cadre de collaborations ciblées, soit par mise à disposition gracieuse.

OPTMTR: Générateur de métrique pour OPTMSH (avec le projet Gamma).

EMC2: Logiciel de maillage automatique interactif 2D (avec le projet Gamma).

BOL2D: Logiciel de calcul des écoulements bidimensionnels pour les gaz dilués polyatomiques régis par les équations de Boltzmann. La méthode numérique est de type particulière aléatoire (Monte-Carlo).

Participants : Pierre Andries, Jean-François Bourgat [correspondant], Patrick Le Tallec, Benoit Perthame.

NSC2KE-NSC3KE: Logiciel de résolution des équations d'Euler et de Navier-Stokes compressible en 2D, axisymétrique ou 3D, en laminaire ou turbulent. Méthode de volumes finis d'ordre 2 avec possibilité de flux de Roe-Osher (collaboration SINUS), cinétique ou SUPG. Modèle de turbulence $k-\varepsilon$ avec loi de paroi ou bi-couche (uniquement en 2D-axi). Lois de parois généralisées pour la prise en compte des effets thermiques et de compressibilité. Extension aux domaines déformables et conditions aux limites de transpiration pour le contrôle.

Participant : Bijan Mohammadi [correspondant].

NSIKE: Logiciel de calcul des écoulements incompressibles tridimensionnels gouvernés par les équations de Navier-Stokes. La méthode numérique est basée sur la méthode de projection de Chorin, la discrétisation par les éléments finis couplée avec les techniques *residual distribution*. Pour les écoulements turbulents le modèle $k-\varepsilon$ avec lois de paroi ou méthode bi-couche est utilisé. Extension aux écoulements en repère tournant. Extension aux modèles de turbulence prenant en compte les effets 3D. Extension aux domaines déformables.

Participants : Gorazd Medić¹, Bijan Mohammadi [correspondant], Mugurel Stanciu.

OPTIMA-TASCOPT: Plateforme d'optimisation et contrôle d'instationnarités, utilisant la différentiation automatique pour les gradients, une gestion 'CAD-Free' de la déformation des surfaces, la déformation de maillage volumique, des interfaces avec des outils CAD suivant les applications, la gestion des repères tournants pour des applications turbomachines. Ce produit est interfacé avec NSC2KE, NSC3KE, NSIKE. Les algorithmes d'optimisation sont basés sur une formulation *système dynamique* où l'on cherche les points fixes de l'ensemble *fluide-structure-optimiseur*. Un point fixe peut être par exemple une forme optimale ou une loi de contrôle fonction du temps. Cette formulation a permis une extension aux problèmes de contrôle d'instationnarités ainsi qu'une extension aux configurations multi-modèles. Une interface existe aussi avec les mailleurs du projet Gamma (**emc2**, **Bamg**, **ghs3d**).

Participants : Gorazd Medić², Bijan Mohammadi [correspondant OPTIMA], Mugurel Stanciu [correspondant TASCOPT].

HET_2D: Logiciel de recherche destiné à la simulation numérique de dispositifs semi-conducteurs. Les modèles mathématiques implémentés sont les modèles de *Dérive-Diffusion* et *Energie-Transport*. Les variables utilisées pour la formulation sont le potentiel électrostatique et les quasi-niveaux de Fermi auxquelles s'ajoute la température électronique dans le cas du modèle *Energie-Transport*. L'approximation est faite en 2D avec des éléments finis mixtes de bas degré. Ce logiciel a servi à des calculs comparatifs dans des collaborations avec Thomson-LCR, IEF, SGS-Thomson. Un interfaçage avec le logiciel **Bamg** du projet Gamma a été réalisé pour l'adaptation automatique de maillage (en dérivation-diffusion pour le moment).

Participants : Americo Marrocco [correspondant], Philippe Montarnal³, Abderrazzak El Boukili⁴, Frédéric Hecht⁵.

6 Résultats nouveaux

6.1 Modélisation, optimisation et contrôle pour les fluides turbulents

6.1.1 Validation de lois de paroi pour des écoulements non stationnaires

Participants : Gabriel Barrenechea, Patrick Le Tallec.

Mots clés : loi de paroi, mécanique des fluides, écoulements non stationnaires.

1. ancien doctorant M3N

2. ancien doctorant M3N

3. ancien doctorant M3N

4. ancien doctorant M3N

5. LAN, Université Paris 6.

Résumé : *L'étude de lois de parois obtenues par homogénéisation a été poursuivie. Après la dérivation de ces lois, l'implémentation effective a été réalisée.*

Dans le cadre de sa thèse, G. Barrenechea étudie les écoulements non stationnaires sur des parois rugueuses, fixes ou mobiles. Dans ce cas, le coût de calcul est très élevé, du fait que l'on doit considérer l'influence des petites échelles sur l'écoulement global. Dans la première année de sa thèse (période 1998-1999), des nouvelles conditions aux limites équivalentes (lois de paroi), imposées sur une frontière homogénéisée ont été déduites, au premier et deuxième ordre, en utilisant une technique d'analyse asymptotique [49]. Plus précisément, si Γ^0 est la paroi homogénéisée et ε est la taille caractéristique des rugosités, les lois de paroi s'écrivent:

$$\begin{aligned} u^1(\mathbf{x}, t) &= \varepsilon \overline{\chi_1^{-1}} \frac{\partial u^1}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{x}, t) \\ u^2(\mathbf{x}, t) &= 0, \end{aligned} \tag{1}$$

sur $\Gamma^0 \times (0, T)$, où $\mathbf{u} := (u^1, u^2)$, au premier ordre, et

$$\begin{aligned} \nu_0 \varepsilon \frac{\partial u^1}{\partial \mathbf{n}} - \frac{\nu_0}{\chi_1^1} u^1 + \varepsilon \frac{\overline{\chi_1^{2'}}}{\chi_1^1} \frac{\partial p}{\partial \mathbf{s}} + \\ \varepsilon \left(\frac{\overline{\chi_1^{2'}}}{\chi_1^1} + \nu_0 \frac{\overline{\chi_1^{2''}}}{(\chi_1^1)^2} \right) \frac{\partial u^1}{\partial t} + \nu_0 \frac{\overline{\chi_1^2}}{(\chi_1^1)^3} (u^1)^2 = 0, \\ u^2 = 0, \end{aligned} \tag{2}$$

sur $\Gamma^0 \times (0, T)$, à l'ordre deux. Dans les deux cas, les constantes $\overline{\chi_1^1}, \dots$ sont des constantes calculées à partir de la résolution d'un problème de Stokes, dans une cellule contenant seulement une rugosité.

Une analyse numérique a été faite pour le cas de la loi d'ordre deux, et l'écriture d'un code de calcul pour les équations de Navier-Stokes non stationnaires a été commencée.

Durant la période 1999-2000, l'écriture et validation du code ont été poursuivies. Les lois de parois ont été validées pour le cas d'une plaque plane (le cas rugueux est en cours de validation), via une méthode de séparation des opérateurs, laquelle avait été utilisée pour construire le solveur Navier-Stokes. L'analyse de troncature linéaire a déjà été faite.

6.1.2 Lois de paroi généralisées: une approche couche limite

Participants : Bijan Mohammadi, G. Puigt⁶, Mugurel Stanciu.

Mots clés : loi de paroi, mécanique des fluides, turbulence.

Résumé : *Une approche de type couche limite a été proposée pour réaliser des lois de parois pour des écoulements visqueux compressibles avec thermique. Celle-ci a été validée par rapport à l'expérience.*

6. Valéo

Notre approche dans la mise au point des lois de paroi s'assimile à une décomposition de domaines automatique des régions proche et loin des parois. On utilise ainsi en région proche-paroi une réduction en dimension et un algorithme de couplage permettant un raccord d'ordre 2, dans la direction normale, entre les solutions obtenues dans les deux régions. Ceci veut dire qu'il n'existe pas de lois de paroi universelles de type 'loi logarithmique', et que la loi de paroi doit être compatible avec le modèle utilisé loin des parois. Ceci est un défaut traditionnel lors de l'utilisation des lois de paroi. Dans le passé, nous avons développé des lois permettant la prise en compte des effets proche-paroi lors des simulations d'écoulements turbulents décollés et instationnaires. Nous avons ensuite étendu le domaine de validité de ces lois à la prédiction des couches limites thermiques, et en particulier à une bonne prédiction des transferts thermiques à la paroi. Le but est de fournir des modules simples à interfacer avec des codes de simulation commerciaux et industriels et donc n'utilisant que des informations locales. Les lois de parois

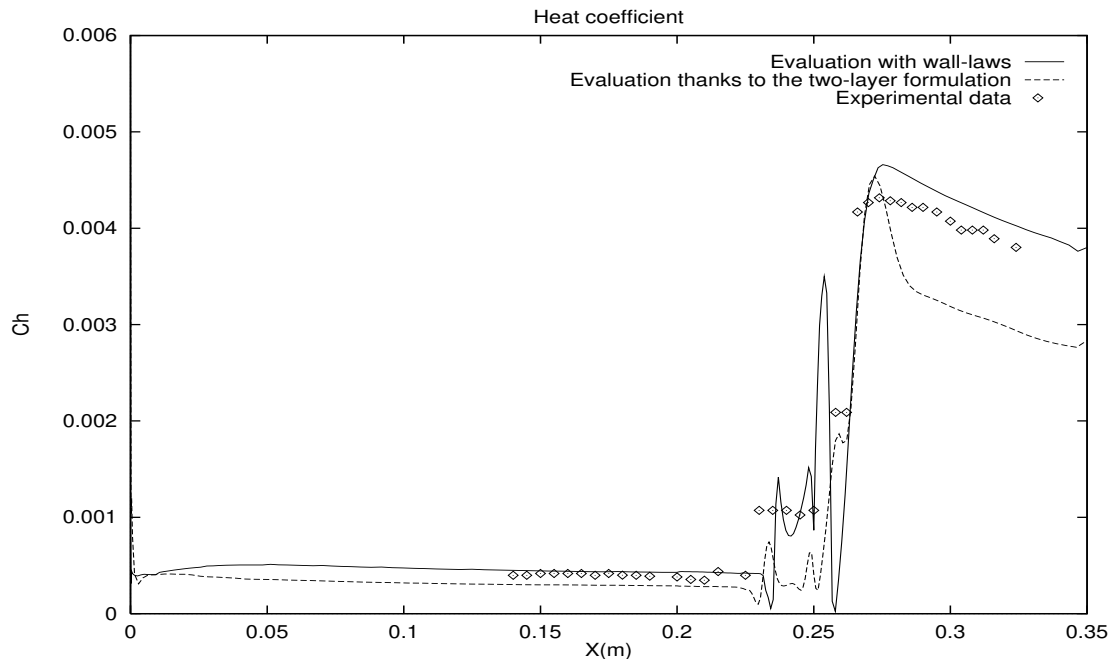


FIG. 1 – LOIS DE PAROIS. *Rampe de compression isotherme* ($M_\infty = 5$, $Re_\infty = 4.10^7$, $T_{wall} = 288K$ and $T_\infty = 83K$): coefficient de transfert thermique pariétal obtenu par les lois de parois ou par une simulation avec le modèle de turbulence $k - \varepsilon$ bi-couche.

développées prennent en compte de manière directe les aspects compressible et visqueux de l'écoulement. En particulier, nous donnons les procédures de calcul de la masse volumique à la paroi réelle et celle du calcul de la viscosité. Ce sont deux des paramètres essentiels. Le dernier paramètre est la vitesse de frottement qui permet de calculer une des composantes du tenseur des efforts à la paroi, mais aussi les conditions aux limites sur les flux thermiques.

Les lois de parois développées ont été validées sur divers cas-tests pour lesquels des données expérimentales étaient disponibles. Les simulations ont par ailleurs montré les lacunes du modèle de turbulence $k - \varepsilon$ bi couche utilisé dans la région proche-paroi. Ceci peut se justifier

par l'extrapolation du modèle de turbulence incompressible aux écoulements compressibles.

Actuellement, nous étendons le domaine d'application de ces lois aux parois rugueuses par une approche n'utilisant pas la résolution de problèmes de cellule mais plutôt la résolution d'un problème de contrôle d'état où les paramètres sont les constantes des lois de paroi généralisées pour paroi lisse.

6.1.3 Optimisation de formes aérodynamiques 3D

Participants : Bijan Mohammadi, Olivier Pironneau⁷, Mugurel Stanciu.

Mots clés : algorithme numérique, mécanique des fluides, optimisation de forme.

Résumé : *La plateforme OPTIMA permet de réaliser l'optimisation de forme en aérodynamique. Plusieurs améliorations ont été apportées concernant la génération de maillage, la prise en compte d'écoulements en rotation, l'algorithme d'optimisation.*

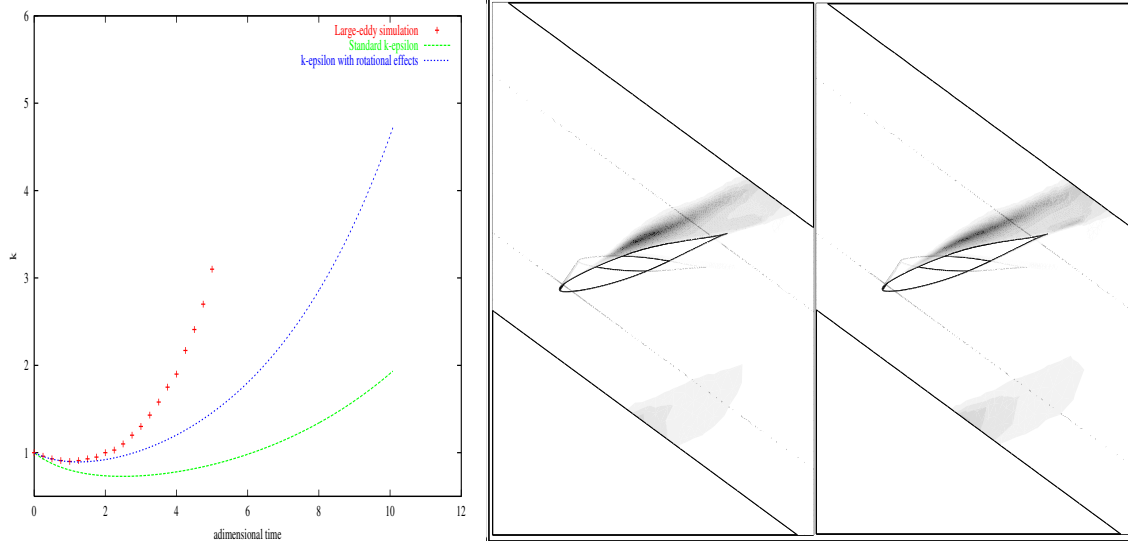
Dans le cadre des contrats Valeo et Decision, nous avons poursuivi le développement de notre plateforme d'optimisation pour les configurations aéronautiques. Dans le premier cas, nous sommes intéressés par l'optimisation de formes de pales de ventilateurs de refroidissement moteur pour l'augmentation du rendement (minimisation du couple de résistance), tout en gardant une différence de pression amont-aval constante. Dans ce cadre, nous avons interfacé notre plateforme OPTIMA et l'environnement industriel de Valeo basé sur une paramétrisation CAO 3D et le solveur commercial TASCflow.

Un point important pour l'application des nos algorithmes dans un environnement industriel a été la génération de maillages pour le solveur TASCflow et l'optimiseur TASCOPT. Les maillages structurés mono et multi-bloc TASCflow ont plusieurs topologies: en H, O, C. Pour les calculs 2D et 3D des pales de ventilateurs, des maillages spécifiques ont été créés avec un espace de travail autour de la pale. Pour améliorer la qualité des maillages et donc de la résolution numérique, nous avons développé un opérateur elliptique pour la génération de maillage pour les blocs autour de la pale.

Pour pouvoir traiter des applications spécifiques aux turbomachines, des termes de rotation ont été rajoutés aux équations Navier-Stokes et le solveur NSIKE a été modifié pour la simulation des écoulements en rotation. De plus, des corrections ont été introduites sur la viscosité turbulente pour la prise en compte des effets de rotation. Ces corrections sont fonctions du nombre de Richardson qui mesure le rapport rotation/cisaillement. Ces corrections ont été calées sur des résultats de simulations directes pour un écoulement simple. Dans ce sens, cette approche revient à ajouter une constante au modèle $k - \varepsilon$ pour la prise en compte des effets de rotation.

La seconde participation concerne l'optimisation de formes pour le transport aéronautique civil. Le but est une évaluation des méthodes de minimisation par points intérieurs, notamment lors de l'utilisation des gradients incomplets. Cependant, comme notre démarche est basée sur l'utilisation des algorithmes de type gradient exprimés à travers des systèmes dynamiques,

7. LAN, université Paris 6.



(a) Configuration académique pour le calage du modèle de turbulence en rotation pour un taux de rotation et cisaillement donné $\Omega/S = 0.25$, $c_R = 2.5$. Evolution de k en temps.

(b) Ecoulement turbulent rotationnel autour d'une pale de ventilateur. Niveaux de k avec le modèle $k - \varepsilon$ standard (gauche) et $k - \varepsilon$ non-linéaire avec effets de rotation (droite).

FIG. 2 – OPTIMISATION DE FORMES AÉRODYNAMIQUES. *Effets de rotation pour le modèle de turbulence $k - \varepsilon$.*

nous avons adapté les algorithmes existants à ce contexte plus propice à une optimisation multi-modèle.

Les autres points essentiels de notre approche concernent l'utilisation de la différentiation automatique pour l'accès aux sensibilités, l'adaptation de maillage par contrôle de métrique locale pour une convergence en maillage des problèmes d'optimisation et simulation, l'utilisation d'une paramétrisation CAD-Free pour la gestion des déformations et enfin, l'évaluation incomplète des gradients qui permet une réduction drastique du coût de calcul.

6.2 Algorithmes numériques et modélisation pour les fluides avec des frontières mobiles

6.2.1 Interaction fluide-structure

Participants : Jean-Frédéric Gerbeau, Patrick Le Tallec, Serge Piperno⁸, Marina Vidrascu⁹.

Mots clés : interaction fluide-structure, onde de pression.

8. projet CAIMAN, Sophia-Antipolis

9. projet MACS, Rocquencourt

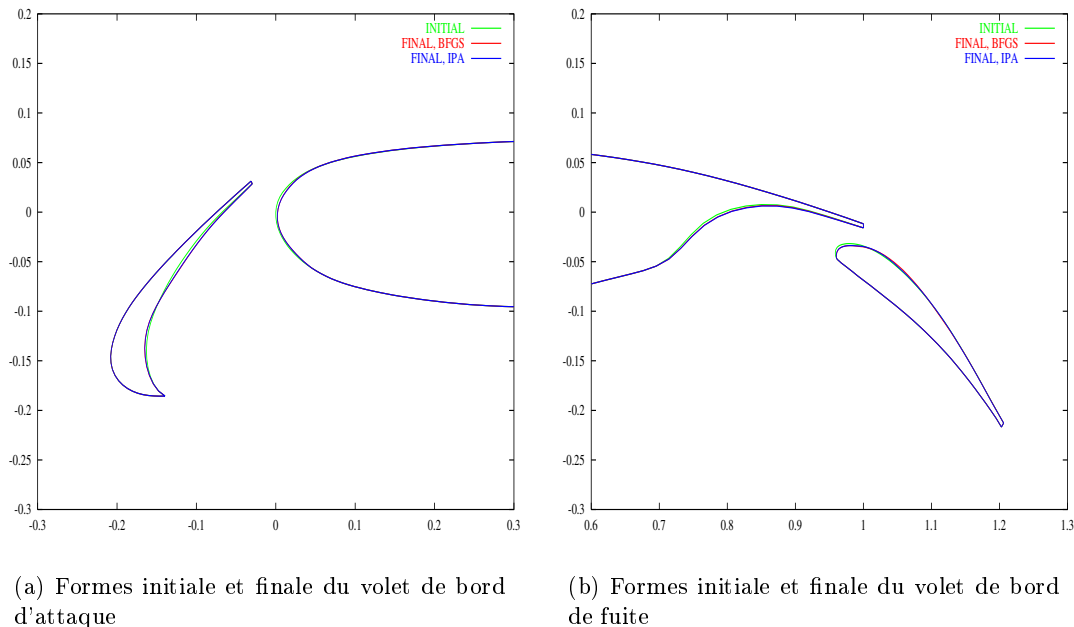


FIG. 3 – OPTIMISATION DE FORMES AÉRODYNAMIQUES. *Optimisation d'un profil d'aile multi-corps dans un écoulement turbulent. Les méthodes d'optimisation BFGS et IPA ont permis de réduire le ratio C_d/C_l de 15%.*

Résumé : *On vise à réaliser un coupleur robuste pour les équations de la mécanique des fluides (Navier-Stokes) et les équations de la mécanique des structures (coques en grands déplacements dans le cas présent) en vue d'applications médicales comme la simulation de l'écoulement sanguin dans des artères.*

L'action coopérative sur les interactions fluide-structure (achevée le 31/01/99) avait permis la mise en place d'un "coupleur" chargé de faire interagir un code de mécanique des fluides (NSI3, F. Hecht) et un code de calcul de coques en grands déplacements (M. Vidrascu). Il nous a paru intéressant d'utiliser ces outils pour des calculs de propagation d'ondes de pression dans des conduites (modélisant par exemple des artères), en partant des résultats obtenus à l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne lors du post-doc de J.-F. Gerbeau [42].

Nous nous sommes jusqu'à présent heurté à des instabilités numériques. Des travaux sont en cours pour comprendre les problèmes rencontrés. La mise au point d'un coupleur robuste reste un objectif important en vue des applications biomédicales.

6.2.2 Magnétohydrodynamique des métaux liquides

Participants : Olivier de Chivré, Jean-Frédéric Gerbeau, Claude Le Bris¹⁰.

Mots clés : surface libre, magnétohydrodynamique.

10. CERMICS, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées

Résumé : *Les recherches effectuées dans ce domaine sont liées à la simulation numérique de la fabrication industrielle de l'aluminium par électrolyse. Les points plus spécifiquement abordés concernent le couplage entre les équations fluides (Navier-Stokes) et les équations magnétiques (Maxwell) d'une part et le traitement de l'interface libre entre deux liquides non miscibles d'autre part.*

Nous cherchons à simuler numériquement la fabrication industrielle de l'aluminium par électrolyse. Ces études sont menées en partenariat avec le CERMICS et Aluminium Pechiney.

Schématiquement, une cuve à électrolyse d'aluminium fonctionne de la manière suivante : un courant électrique de forte intensité traverse de haut en bas deux liquides non miscibles. Le liquide supérieur est un mélange à base d'alumine, le liquide inférieur est de l'aluminium fondu. Le courant électrique crée un champ magnétique intense et des forces électromagnétiques qui agitent les fluides et l'interface qui les sépare. Ces déplacements pouvant provoquer un court-circuit dans la cuve, on cherche à mieux les comprendre et à les maîtriser.

Nous modélisons ce système par les équations de la magnétohydrodynamique (MHD) incompressible et nous nous concentrons sur deux difficultés: d'une part le traitement du couplage entre les équations de Navier-Stokes et celles satisfaites par le champ magnétique, d'autre part le traitement de l'interface libre séparant les deux fluides.

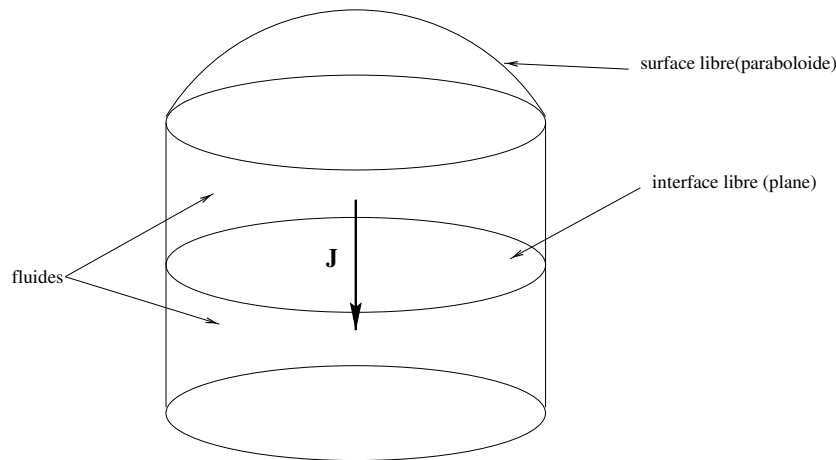


FIG. 4 – MAGNÉTOHYDRODYNAMIQUE. *Représentation schématique de l'expérience.*

Concernant le couplage, nous avons fait jusqu'à présent le choix d'un algorithme monolithique, c'est-à-dire pour lesquels le champ magnétique, la vitesse et la pression sont calculés simultanément. Cet algorithme conserve numériquement l'énergie, il est par conséquent très robuste. La contrepartie est qu'il conduit à des systèmes linéaires non symétriques de grande taille. En partant de ce schéma, nous avons proposé une méthode de pas fractionnaire [50] calquée sur le θ -schéma développé pour les équations de Navier-Stokes. Son application à la MHD présente des propriétés intéressantes: les sous-problèmes couplés sont symétriques (non définis), tandis que les sous-problèmes non symétriques sont découplés et les difficultés qu'ils posent sont comparables au cas hydrodynamique pur (terme de Navier). Cette approche semble donc offrir un bon compromis entre schémas monolithiques et schémas complètement découplés.

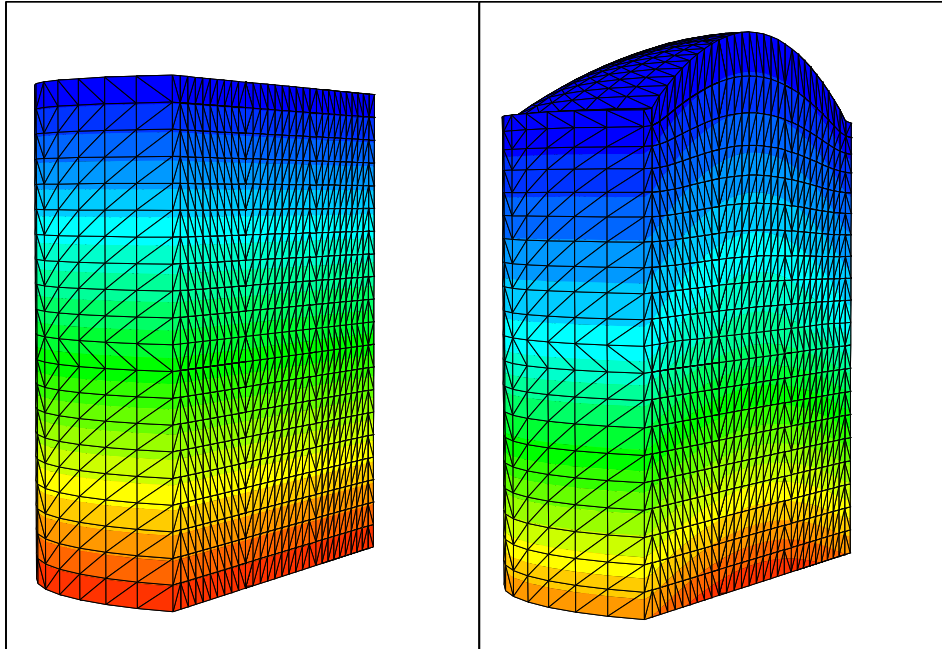


FIG. 5 – MAGNÉTOHYDRODYNAMIQUE. *Maillage et isovaleurs de la pression, en présence de la gravité seule (à gauche), en présence d'un champ magnétique (à droite)*

Concernant le problème d'interface libre, nous avons proposé et implémenté une formulation "arbitraire Lagrange Euler" (ALE) du système de la MHD. Comme première validation, nous avons reproduit l'expérience de laboratoire suivante: deux fluides contenus dans un réservoir cylindrique sont traversés par un courant homogène. L'interface entre les deux fluides ainsi que la surface supérieure sont libres. L'état stationnaire du système est connu: les fluides sont au repos, l'interface est horizontale, la surface supérieure est un parabolöide.

Les suites de cette étude porteront sur l'amélioration du schéma de transport, l'interface et sur l'application à des configurations industrielles.

6.2.3 Schéma cinétique pour les équations de Saint-Venant

Participants : Ramaz Botchorishvili, Marie-Odile Bristeau, Benoit Coussin, Jean-Frédéric Gerbeau, Benoit Perthame, Alexis Vasseur¹¹.

Mots clés : Equations de Saint-Venant, modélisation, volumes finis, schémas cinétiques, termes sources, schémas d'équilibre, conditions limites, transport de polluant.

Résumé : *Différents aspects des équations de Saint-Venant ont été étudiés: justification des termes de friction et du coefficient de Boussinesq, méthode de résolution par un schéma cinétique avec prise en compte de la bathymétrie, des condi-*

11. CNRS-Université de Nice

tions aux limites, du frottement ou du transport d'un polluant, schémas d'équilibre pour des lois de conservation scalaires avec des termes sources raides.

Les équations de Saint-Venant permettent de simuler des écoulements à surfaces libres en eaux peu profondes comme dans les rivières, les lacs, les régions côtières, etc... Ces équations s'écrivent sous forme d'un système hyperbolique de lois de conservation dont une difficulté est sa dégénérescence pour une hauteur d'eau nulle.

Différents résultats ont été obtenus sur ce système d'équations ou sur des modèles plus simples de lois de conservation scalaires: modélisation, convergence pour des schémas d'équilibre, méthode de résolution avec prise en compte de la bathymétrie, des conditions aux limites, du transport d'un polluant.

En ce qui concerne la modélisation de certains termes dans le système de Saint-Venant: nous partons des équations de Navier-Stokes avec surface libre et de leur approximation hydrostatique et nous établissons les équations de Saint-Venant avec la viscosité, des termes de friction et un coefficient de Boussinesq [52].

Nous avons également poursuivi l'étude de schémas numériques pour la résolution des équations de Saint-Venant. Nous avons développé en 99 une méthode de résolution par des schémas cinétiques qui ont la propriété essentielle d'assurer la positivité de la hauteur d'eau dans les zones avec interfaces sol mouillé-sol sec [37]. Cette méthode s'applique sur des maillages non structurés par une approche volumes finis.

Une autre difficulté que nous avons traitée pour la résolution de ces équations est la prise en compte du terme source modélisant la bathymétrie, sachant que le schéma doit préserver différents équilibres. Dans le cadre du travail sur ce sujet, nous avons étudié des schémas d'équilibre pour des lois de conservation scalaires avec des termes sources raides et on a obtenu pour ces schémas un résultat de convergence [38]. Une des difficultés dans l'étude de la convergence est l'absence de bornes BV pour ce problème. Grâce à la formulation cinétique, on donne une preuve de convergence qui n'utilise que le fait que toutes les inégalités d'entropie discrètes sont vérifiées pour déduire la compacité forte des solutions approchées. Nous avons aussi développé des schémas cinétiques implicites pour des lois de conservation scalaires [39]. Nous montrons la convergence vers une solution entropique stationnaire dans le cas de lois de conservation homogènes. Dans le cas des lois de conservation avec terme source, nous couplons l'approximation implicite avec une approximation raide des dérivées partielles en espace.

Pour la prise en compte du frottement sur le fond qui joue un rôle important dans les zones où la hauteur d'eau est très faible, on utilise la loi de Manning-Strickler. Ce terme non linéaire est traité semi-implicitement.

Si on couple au système de Saint-Venant une équation d'advection d'une variable passive (température, polluant), le schéma cinétique permet d'assurer la conservation et la monotonie de cette variable [40]. Une modification du schéma initial a permis de réduire de façon notable la viscosité du schéma.

Il est important pour préserver les propriétés du schéma de l'appliquer sur tous les noeuds du maillage y compris les noeuds frontières, mais les conditions aux limites dont dispose l'hydraulicien ne portent pas sur les quantités qui sont prises en compte par le schéma. Pour les définir, on utilise les invariants de Riemann du système, et on peut ensuite appliquer le schéma cinétique sur les segments frontières ce qui permet entre autres d'assurer la positivité de la

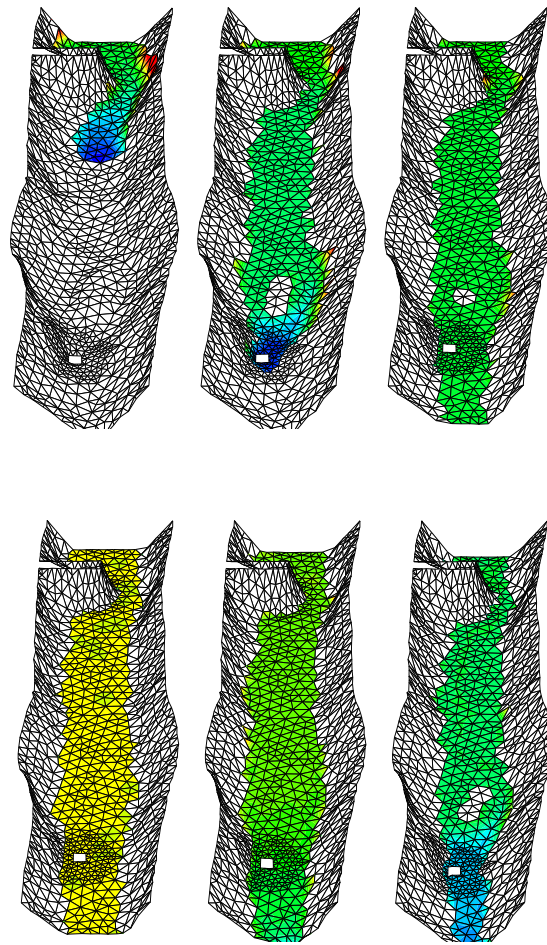


FIG. 6 – SAINT-VENANT. *Remplissage (haut) et vidange (bas) du lit d'une rivière*

hauteur d'eau sur les frontières. Des cas tests où l'on remplit ou vide le lit d'une rivière ont permis de valider cette prise en compte des conditions aux limites (voir Figure (6), et aussi animations sur <http://www-rocq.inria.fr/m3n>).

Un code basé sur cette méthodologie a été développé et validé dans le projet. D'autre part cette approche a aussi été intégrée dans le code Telemac-2D de l'EDF dans le cadre d'un contrat.

6.2.4 Ecoulements diphasiques

Participants : Marie-Hélène Lallemand-Tenkès, Benoit Perthame, Richard Saurel¹³,

Rémi Abgrall², Boniface Mkonga².

Mots clés : écoulements diphasiques, mécanique des fluides compressibles.

Résumé : *On s'intéresse aux problèmes diphasiques où l'on suppose que chaque fluide est compressible. Le modèle utilisé est un modèle à 6 équations traduisant les différentes lois de conservation pour chaque phase, supplémenté d'une équation de transport pour la fraction volumique.*

On a mis l'accent sur une des étapes du processus de résolution, à savoir l'étape de relaxation instantanée des pressions aux interfaces.

On s'intéresse pour l'instant aux problèmes diphasiques (écoulements faisant intervenir deux fluides comme l'air et l'eau par exemple), où chacun des fluides est considéré compressible. On privilégie l'approche de Abgrall et Saurel ^[SA99] qui conduit à un système à six équations, supplémenté d'une équation d'advection pour l'évolution de la fraction volumique. Le système obtenu est hyperbolique de par l'hypothèse de compressibilité.

Le choix de ce modèle est motivé par le fait qu'il permet de traiter aussi bien de problèmes d'écoulements diphasiques que de problèmes multifluides avec interface mais aussi et surtout parce que le système obtenu est hyperbolique et permet donc ainsi d'utiliser un seul solveur pour sa résolution numérique.

La résolution numérique se fait principalement en 3 étapes: une première étape consiste à résoudre le système par un solveur hyperbolique non conservatif adapté au cas multiphasique, une étape éventuelle de relaxation des vitesses pour les interfaces (si la vitesse est différente pour chacune des phases) et une étape de relaxation instantanée des pressions pour les conditions de pressions aux interfaces. C'est cette troisième étape qui a fait l'objet du travail effectué depuis le second trimestre 99, avec une interruption de 7 mois (congé de maternité).

Cette étape est en particulier cruciale pour les problèmes à interface où la condition d'égalité des pressions à l'interface est la condition la plus difficile à remplir. Elle est aussi déterminante pour les applications relatives aux problèmes de détonique, de chocs forts ou de phénomènes de cavitation. Cette étape de relaxation de pression est présente aussi chez d'autres auteurs [CEAG⁺97,BLK82,KSB⁺97,BMS⁺99]. Son traitement n'avait pas fait l'objet d'étude particulière.

-
1. IUSTI Marseille
 2. Université de Bordeaux
 3. SMASH

-
- [SA99] R. SAUREL, R. ABGRALL, « A Multiphase Godunov Method for Compressible Multifluid and Multiphase Flows. », *Journal of Computational Physics* 150, 1999, p. 425–467.
- [CEAG⁺97] F. COQUEL, K. EL AMINE, E. GODLEWSKY, B. PERTHAME, P. RASCLE, « A Numerical method using upwind schemes for the resolution of two-phase flows. », *Journal of Computational Physics* 136, 1997, p. 272–288.
- [BLK82] P. BUTLER, M. LAMBECK, H. KRIER, « Modeling of shock development and transition to detonation initiated by burning in porous propellant beds. », *Combust. Flame* 46, 1982, p. 75–93.
- [KSB⁺97] A. KAPILA, S. SON, J. BDZIL, R. MENIKOFF, D. STEWART, « Two-phase modeling of DDT: structure of the velocity relaxation zone. », *Physics of Fluids* 9, 12, 1997, p. 3885–3897.
- [BMS⁺99] J. BDZIL, R. MENIKOFF, S. SON, A. KAPILA, D. STEWART, « Two-phase modeling of DDT in

Shock tube problem: NX = 101 - Mixture densities at time T = 229.e-6 s.

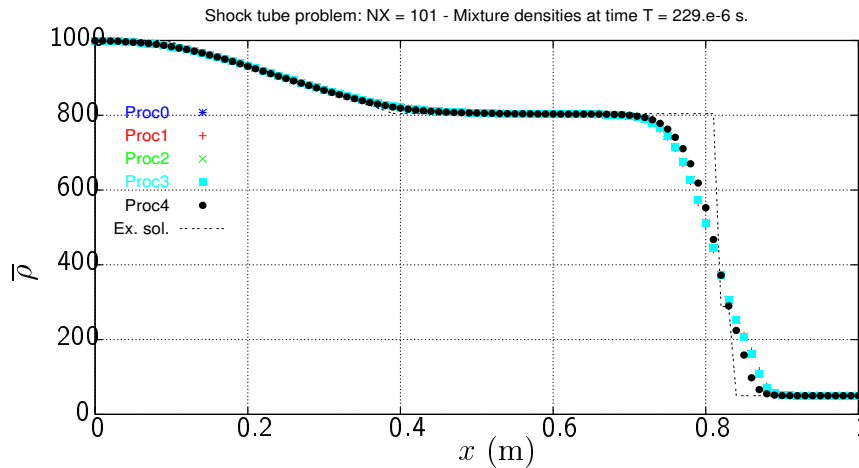


FIG. 7 – ÉCOULEMENTS DIPHASIQUES. *Masses volumiques du mélange à $t = 229.10^{-6}$ s. obtenues pour différentes procédures de relaxation instantanée des pressions - Tube à choc air/eau (101 points).*

Cette étude, faite en collaboration avec R. Saurel [43], a permis en particulier de mettre au point une méthode quasi-directe qui est à la fois plus efficace (en termes de coût CPU) et plus précise que les procédures de relaxation existantes, comme on peut le constater sur la figure 7 donnant les masses volumiques du mélange et sur la figure 8 donnant les vitesses d'équilibre pour un problème de tube à choc air/eau (cf. [43] pour les détails) pour différentes procédures de relaxation instantanée des pressions utilisées (la nouvelle procédure étant référencée comme étant la procédure *Proc4*).

Cette nouvelle méthode consiste à réécrire le système différentiel (en temps) relatif aux énergies totales, en variables physiques (pressions, fractions volumiques et vitesses du son). Cette formulation a l'avantage d'être valide pour des équations d'état générales et est généralisable aux écoulements multiphasiques.

Ce travail a donné lieu à un rapport de recherche [43]. Un article plus complet, donnant d'autres approches récentes que l'on comparera entre elles, est en cours.

Pour la suite, on s'intéressera à l'élaboration d'un solveur multiphasique plus précis que l'extension multiphasique du schéma HLL déjà existante. Cette réalisation se fait en collaboration avec Rémi Abgrall et Richard Saurel.

Ce travail s'inscrit dans le cadre du contrat Renault (ARC moteur) évoqué dans le rapport 99 ainsi que dans l'optique du nouveau projet INRIA **SMASH** dont le statut administratif devrait être précisé dans les prochains mois.

Shock tube problem: NX = 101 - Mixture velocities at time T = 229.e-6 s.

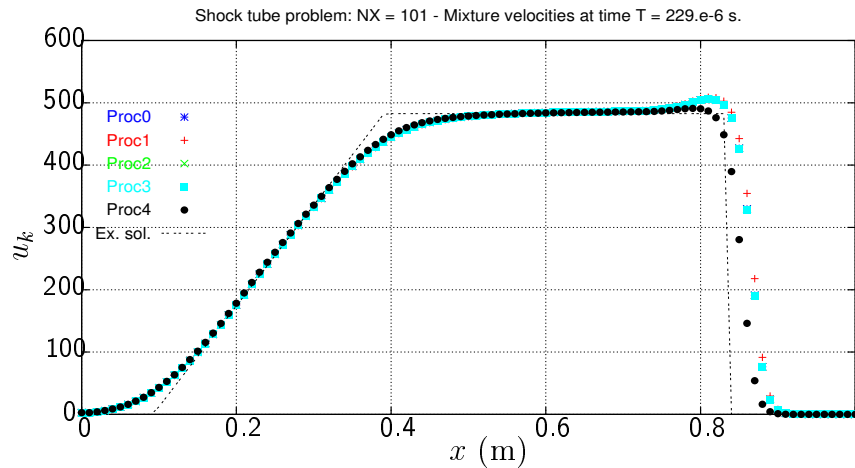


FIG. 8 – ECOULEMENTS DIPHASIQUES. Vitesses d'équilibre à $t = 224.10^{-6}$ s. obtenues pour différentes procédures de relaxation instantanée des pressions - Tube à choc air/eau (101 points).

6.3 Applications bio-médicales

6.3.1 Appareil respiratoire

Participants : Jean-Frédéric Gerbeau, Marc Thiriet.

Le projet porte sur la conception d'un démonstrateur d'aide à la décision en pneumologie a été élaboré. Le réseau de conduits respiratoires, l'environnement immédiat et le moteur ventilatoire sont inclus dans un modèle constitué de six composants à explorer isolément, avec des conditions aux limites appropriées, puis à coupler. Les voies respiratoires sont divisées en 3 étages, (1) les voies aériennes supérieures extrathoraciques, elles-mêmes composées de plusieurs domaines en série et en parallèle (nez / bouche, pharynx, larynx) (2) les conduits intrathoraciques proximaux de l'arbre trachéo-bronchique (de la trachée B0, aux bronches de cinquième génération B5) et (3) les territoires bronchiques distaux.

Les grands objectifs sont en particulier les suivants : (1) préciser les propriétés de l'écoulement dans les voies respiratoires, (2) étudier le transport des aérosols, (3) dépister, surveiller et traiter les apnées subites, (4) déterminer le moment du sevrage en réanimation (mesure des pertes de charge). Pour les aspects mathématiques, il s'agit (1) de définir le cadre mathématique, (2) de mettre au point les algorithmes et les conditions aux limites, et (3) de développer des logiciels de couplage : interaction fluide-structure (particules ensemencées, parois des conduits), transition entre régimes d'écoulement, et enfin interface entre les divers étages des conduits respiratoires. En raison de la complexité, de la diversité et de la variabilité du système ventilatoire, l'écoulement tridimensionnel dans les étages 1 et partiellement 2 (B0-B3) sera couplé aux modèles unidimensionnels et 0D dans les autres parties des voies aériennes.

Ce projet est mené en collaboration avec l'unité 492 de l'INSERM, le CIERM du CHU Kremlin-Bicêtre, la compagnie Air Liquide, le Laboratoire d'Analyse Numérique (LAN), U.M.R. CNRS 7598, de l'université Pierre et Marie Curie, le Département de Mathématiques et Applications de l'ENS Ulm et le projet CAIMAN de l'INRIA.

6.3.2 Veine et valvule

Participants : David Benque, Jean-Frédéric Gerbeau, Marc Thiriet.

La modélisation numérique de l'écoulement sanguin dans un tronçon veineux muni d'une valvule monocuspide est un problème de type interaction fluide-structure. Les difficultés viennent en particulier de la structure (non-linéarité des matériaux, grands déplacements de la valvule, y compris dans une veine supposée rigide dans un premier temps, contact entre la valvule et la paroi), de l'écoulement instationnaire et du couplage des modules numériques, structure et écoulement.

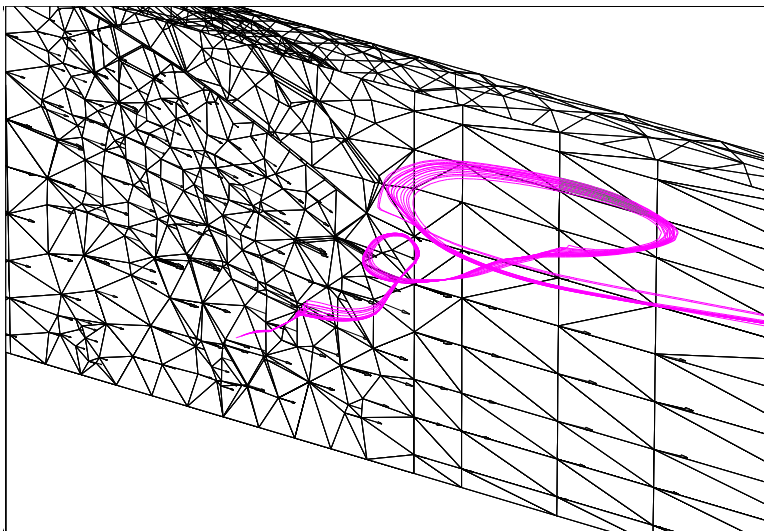


FIG. 9 – APPLICATIONS BIOMÉDICALES. *Écoulement dans une veine.*

Au cours de la première étape, la déformation de la valvule, supposée être une simple coque (masse volumique $\rho = 10^{-6} \text{ kg/mm}^3$, module d'Young $E = 0.2 \text{ MPa}$ et coefficient de Poisson $\nu = 0.48$), de surface gauche, immergée et encastrée sur son bord d'attache elliptique, a été étudiée lorsqu'une pression lui est appliquée. Une telle investigation évite de traiter du problème de contact. Ce code utilise une technique de Newmark avec une résolution par la méthode de Newton à chaque pas de temps. L'élément fini utilisé est de type DKT.

Des calculs d'écoulement dans une veine valvulée rigide, partiellement occluse, ont été effectués. Le domaine comporte, outre le tronçon valvulé, deux courts tubes cylindriques rectilignes,

en amont ($L = 4.5 d - d$:diamètre) et en aval ($L = 4.75 d$). La forme de cette singularité explique les caractéristiques tridimensionnelles locales de l'écoulement.

6.3.3 Foie

Participants : Luc Soler¹², Hervé Delingette¹³, Marc Thiriet, Marina Vidrascu¹⁴.

L'étape actuelle de notre contribution au système d'apprentissage à la chirurgie laparoscopique consiste à fournir un maillage du foie comportant les 8 segments fonctionnels du foie qui sont déterminés par la distribution des vaisseaux sanguins intraparenchymateux (Fig. 10). Les interfaces ou cloisons virtuelles à l'intérieur du parenchyme hépatique entre ces segments servent de zone de dissection chirurgicale.

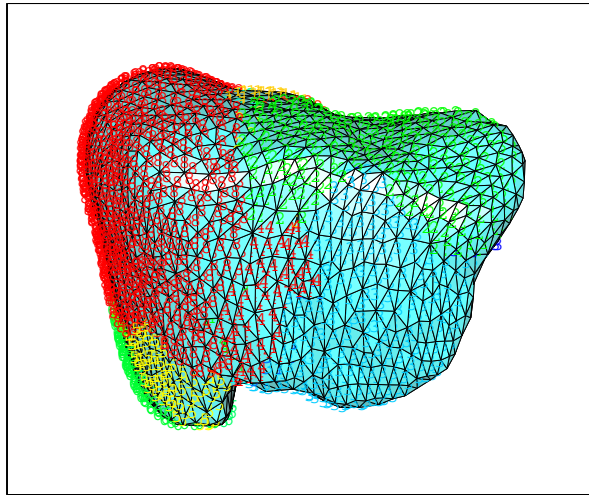


FIG. 10 – APPLICATIONS BIOMÉDICALES. *Maillage du foie. Les références définissent les segments fonctionnels du foie.*

6.4 Semi-conducteurs

Participants : Americo Marrocco, Frédéric Hecht¹⁵.

Mots clés : algorithme numérique, élément fini, logiciel numérique, modélisation, semi-conducteur.

Résumé : *Les activités de recherche liées à la simulation numérique des phénomènes de transport dans les matériaux semi-conducteurs se sont poursuivies cette*

12. IRCAD

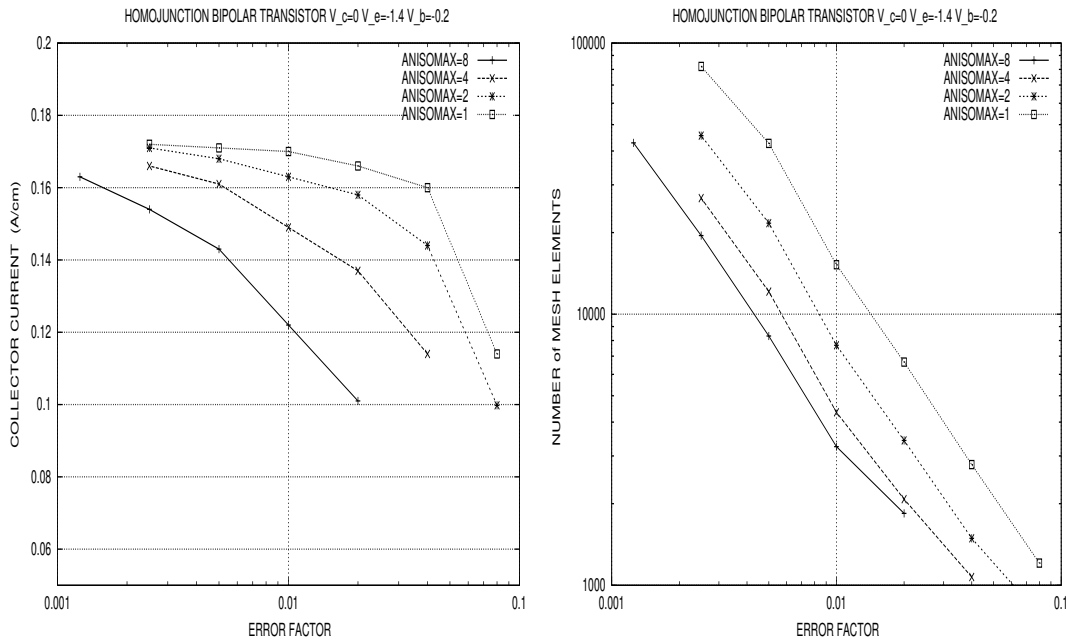
13. Projet EPIDAURE, Sophia-Antipolis

14. projet MACS, Rocquencourt

15. LAN, Université Paris 6.

année d'une part dans le domaine de l'adaptation de maillage, dans la mise en œuvre de techniques permettant la simulation des phénomènes transitoires et d'autre part dans les techniques de parallélisation du code *Het-2d*.

Les simulations numériques relatives à l'adaptation de maillage pour les dispositifs à hétérojonctions se sont poursuivies et des résultats dans ce domaine ont été présentés au cours de deux conférences (Numelec-2000 et ECCOMAS-2000) [32] [31]. On a pu mettre à jour que les éléments finis mixtes triangulaires de Raviart-Thomas (RT_0), bien qu'ils aient montrés des qualités indéniables vis à vis de certaines propriétés physiques, supportaient mal l'anisotropie (géométrique) au regard de la précision de la solution calculée (convergence en h).



(a) Valeur du courant au collecteur d'un transistor bipolaire (homojonctions) en fonction de l'erreur de discrétisation acceptée et du facteur d'anisotropie (max) autorisé sur les triangles.

(b) Nombre d'éléments correspondants.

FIG. 11 – SEMI-CONDUCTEURS. *Adaptation de maillage pour un transistor bipolaire. Convergence des grandeurs physiques (courant de collecteur) en fonction du maillage mais aussi de l'anisotropie géométrique acceptée pour les triangles. Pour les dispositifs à hétérojonctions, les convergences sont moins régulières, la valeur des courants augmente, cette fois-ci avec l'anisotropie.*

Au cours d'une réunion de travail (préliminaire) avec OPTO+ (GIE entre le CNET et Alcatel), sont apparus plusieurs problèmes nouveaux se situant plus ou moins dans la suite

de nos travaux antérieurs avec le CNET. Parmi ces préoccupations nouvelles venait, dans les fortes priorités, la simulation des phénomènes transitoires dans les dispositifs semi-conducteurs. L'étude et l'analyse de ceux-ci devraient permettre une paramétrisation plus précise des modèles de schémas équivalents à injecter dans une "simulation circuit".

A première vue, sachant déjà résoudre le problème statique, la résolution du problème physique d'évolution devrait être immédiate car composée, (après discrétisation en temps) d'une succession de problèmes de même nature que le problème statique, mais en principe plus simples à résoudre numériquement. Il a suffi dans la mise en œuvre de remplacer la fonction non linéaire ($U(n, p)$) modélisant la génération-recombinaison par une autre fonction non linéaire (possédant des propriétés mathématiques analogues)

$$U(n, p) \implies [U(n, p) + \frac{q \cdot n}{\Delta t}] - \alpha$$

pour l'équation de continuité des électrons et

$$U(n, p) \implies [U(n, p) + \frac{q \cdot p}{\Delta t}] - \beta$$

pour l'équation de continuité des trous. n et p sont les densités d'électrons et de trous respectivement, α et β sont des quantités données (connues) à l'instant considéré, q est la charge électronique et Δt est le pas de discrétisation en temps (physique).

Au cours des essais numériques nous avons constaté que si Δt est "*trop petit*" la convergence de l'algorithme permettant d'obtenir l'état "quasi-statique", c'est à dire la solution "physique" au temps $t + \Delta t$, devient problématique voire impossible pratiquement (décroissance extrêmement lente des différents résidus). Evidemment si Δt est "*suffisamment grand*" l'algorithme fonctionne efficacement car on se retrouve (en fait) à résoudre le problème statique. L'algorithme mise en œuvre dans Het-2d pour la résolution du problème statique consiste à faire un découplage (par relaxation) des équations constituant le modèle de dérive-diffusion. Le processus de résolution traite successivement chaque équation en gelant la valeur des inconnues autres que l'inconnue principale à la dernière valeur connue (calculée). Un couplage très important entre les équations risque évidemment de mettre à mal un tel procédé. C'est certainement ce qui se passe lorsque Δt devient de plus en plus petit; rappelons que la charge ("second membre") dans l'équation de Poisson est donnée par

$$-q(n - p - Dop)$$

et que n et p dans les équations de continuité du modèle transitoire sont d'autant plus prépondérants que Δt est petit. Un des moyens de pallier la mauvaise convergence de l'algorithme, visiblement due à la relaxation faite sur les équations du système, était d'appliquer le schéma de discrétisation en temps implicite, non plus sur chaque équation successivement mais sur tout le système. Ainsi la méthode de linéarisation de Newton-Raphson (plus délicate ici à implémenter) conduit à résoudre des systèmes linéaires plus volumineux mais la convergence globale est retrouvée et les courbes de décroissance des résidus sont analogues à (sinon meilleures que) celles précédemment obtenues lors de résolution de problèmes statiques. On peut maintenant prendre des pas de temps aussi petits que l'on veut (pour le transitoire) sans être confronté à un comportement surprenant du schéma de résolution. Cette implémentation a naturellement été faite dans le cadre d'une approche en espace par éléments finis mixtes.

La collaboration avec le CERFACS pour la mise en œuvre des techniques de décomposition de domaines afin de simuler le fonctionnement de dispositifs semi-conducteurs sur des machines multi-processeurs ou sur un réseau de stations de travail s'est poursuivie. Une première implémentation sur une machine multi-processeur de l'INRIA (HP9000 -serie V2250) a été réalisée en juillet par J.C.Rioual (Cerfacs). Quelques problèmes de *scalabilité* dans l'algorithmique *décomposition de domaines* subsistent. Les travaux réalisés dans ce cadre ont donné lieu à une présentation à la conférence sur la décomposition de domaines (DD13, Lyon) [30].

6.5 Dans le domaine du microscopique et du cinétique

Mots clés : équation de Navier-Stokes, équation de Boltzmann.

6.5.1 Modèles BGK Gaussiens

Participants : Pierre Andries, Jean-François Bourgat, Benoit Perthame.

Résumé : *Le modèle BGK-Gaussien (ou ES-BGK) simplifie le noyau de collision de l'équation de Boltzmann. Nous avons, par de nouveaux tests, montré que le modèle BGK classique n'était pas satisfaisant, ni en écoulement raréfié ni en écoulement transitionnel et que le modèle ES-BGK, après amélioration de la probabilité de collision était convenable en écoulement raréfié et excellent en écoulement transitionnel. Dans ce dernier cas il permet des calculs plus rapides que l'équation de Boltzmann.*

Notre objectif est de remplacer l'équation de Boltzmann qui modélise les écoulements de gaz raréfiés par des modèles plus simples et moins coûteux en temps calcul lorsque l'on veut passer aux gaz semi-raréfiés. Le noyau de collision étant l'élément le plus complexe de cette équation, le modèle BGK consiste à le linéariser, mais le nombre de Prandtl qui en découle est supérieur aux valeurs expérimentales. Le modèle ES-BGK qui fait l'objet de nos travaux en est une variante qui consiste à remplacer l'équilibre local supposé maxwellien par un équilibre gaussien. Il permet de faire varier et d'adapter le nombre de Prandtl et ainsi de fournir des coefficients de transport aux équations de Navier-Stokes. Notre travail a consisté à montrer que le modèle ES-BGK bien que n'étant pas dérivé directement de l'équation de Boltzmann, peut décrire correctement les écoulements semi-raréfiés (ou transitionnels) et qu'il peut faire mieux que le modèle BGK.

A la suite des travaux théoriques et numériques initiés en 1998 et dont la réalisation numérique fine s'est poursuivie en 1999, nous avons réalisé des tests complémentaires de comparaison Boltzmann/ES-BGK et notamment des écoulements globaux autour d'un dièdre. Des cas raréfiés et transitionnels ont été pris en compte afin de comparer les modèles BGK, ES-BGK et Boltzmann. Ils ont mis en évidence la supériorité du modèle ES-BGK sur BGK dans les deux types d'écoulements et la supériorité du modèle ES-BGK sur Boltzmann pour certains écoulements transitionnels.

Nous avons d'autre part amélioré le point faible du modèle ES-BGK qui est l'étalement du choc de Mach dans son raccord avec l'écoulement à l'infini et qui se détériore au fur et à mesure que le gaz devient plus raréfié. Pour cela nous avons introduit plusieurs formules de température et constaté qu'elles pouvaient prendre des valeurs sensiblement différentes dans le choc et surtout au pied du choc. Ceci nous a conduit à modifier la fréquence de collision ES-BGK en introduisant des corrections liées à ces températures. Nous avons ainsi obtenu plusieurs coefficients correcteurs qui donnent une bonne amélioration du choc de Mach valable aussi bien pour les écoulements raréfiés que transitionnels et qui de plus ne détériore pas le reste de la solution et améliore les coefficients aérodynamiques.

6.5.2 Ecoulements gazeux en milieu poreux

Participants : Jean-François Bourgat, Benoit Perthame.

Résumé : *L'équation de Boltzmann permet de modéliser les écoulements gazeux en milieu poreux. Nous avons testé son utilisation pratique afin d'aider à la validation de modèles macroscopiques.*

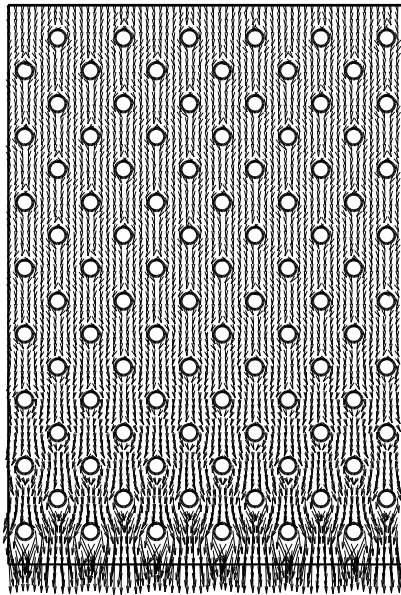


FIG. 12 – ECOULEMENTS GAZEUX EN MILIEU POREUX.

Simulation à l'aide de l'équation de Boltzmann d'un écoulement gazeux à travers une membrane représentée par 16 couches de barres. Pression nulle à la paroi inférieure.

Pour un matériau poreux dont les cavités sont de l'ordre du libre parcours moyen du gaz considéré, la modélisation fine de l'écoulement ne peut plus se faire par des modèles continus.

Par contre, l'équation de Boltzmann, qui modélise habituellement les écoulements de gaz dilués, peut être utilisée.

Nous avons dans le cadre d'une collaboration avec le CEA-CESTA étudié la faisabilité de calculs bidimensionnels à partir de notre logiciel BOL2D pour une plaque modélisée par de nombreuses couches de barres séparées par des intervalles de l'ordre du libre parcours moyen. Après avoir introduit des conditions aux limites périodiques dans l'équation de Boltzmann pour se ramener à une dimension de plaque de l'ordre de son épaisseur, nous avons testé divers écoulements autour d'une centaine de barres disposées sur une dizaine de couches.

Ces calculs directs ont pour but d'aider à la mise au point d'un modèle macroscopique homogénéisé. Dans une deuxième étape nous nous proposons d'étudier le transfert thermique entre la phase gazeuse et la phase solide. Les applications sont la CVI (Chemical Vapor Infiltration) et l'ablation.

6.5.3 Application du modèle BGK gaussien à la condensation sur une plaque infinie

Participants : Pierre Andries, Kazuo Aoki¹⁶.

Résumé : *Le modèle BGK gaussien est utilisé pour résoudre numériquement un problème d'écoulement mettant en jeu un équilibre fluide-vapeur aux conditions limites.*

Le problème de l'écoulement d'un gaz autour d'une plaque infinie en équilibre fluide-vapeur est d'une très grande importance car les solutions obtenues par les modèles cinétiques donnent les conditions aux limites à utiliser pour le flot (obéissant aux équations d'Euler) d'un gaz autour d'objets sur lesquels il se condense.

Ces valeurs sont obtenues numériquement en utilisant des équations cinétiques. Les conditions aux limites sont particulières: la distribution est maxwellienne à la paroi (à une température donnée et une pression de vapeur saturante) ainsi qu'à l'infini (à une vitesse donnée et des conditions à déterminer).

En utilisant les symétries du problème (monodimensionnel en position et bidimensionnel en vitesse), on aboutit à une grande simplification de l'équation du modèle BGK gaussien (qui n'est pas valable si l'on utilise l'équation de Boltzmann) et la résolution numérique peut se faire par une méthode de différences finies très précise et peu coûteuse.

Lorsque l'écoulement est subsonique, à nombre de Mach et température donnés il n'existe qu'une seule densité satisfaisant à l'équilibre fluide-vapeur de la paroi; lorsque l'écoulement est supersonique la densité est supérieure à une densité critique.

Une table de ces densités (environ 1000 valeurs) a été obtenue.

16. Université de Kyoto

6.5.4 Simulation et optimisation des canaux fluidiques

Participant : Bijan Mohammadi.

Résumé : *Le but de cette étude est la recherche de formes optimales pour les canaux fluidiques permettant de séparer par exemple des quantités microscopiques ayant des mobilités différentes. L'une des applications est la détection d'espèces faiblement présentes dans un liquide.*

Nous montrons l'application de notre plateforme d'optimisation pour la conception des canaux fluidiques à fonctionnement électroosmotique. Le but de ces configurations est la détection et la séparation de quantités microscopiques ayant des mobilités différentes lorsque suspendues dans un fluide et soumises à un champ électrique.

Pour réaliser des configurations compactes de canaux, on est amené à introduire des coudes. Ceci implique, du fait de la variation du champ électrique, une grande dispersion des espèces transportées et nuit donc fortement aux capacités de séparation de l'ensemble. Le but est de proposer des formes minimisant cet effet et permettant ainsi la réalisation de canaux de longueur maximale sur une surface minimale et ayant la meilleure résolution possible. A cet effet, on considère deux types de coudes avec des angles de 90 et 180 degrés. Actuellement, on s'intéresse à l'extension de cette approche au contrôle des concentrations par l'utilisation croisée de deux champs électriques. Le but est de rendre détectable des espèces faiblement présentes par une augmentation de leur concentration volumique.

6.5.5 Asymptotique haute fréquence pour Helmholtz

Participants : Jean-David Benamou¹⁷, Benoit Perthame, François Castella¹⁸, Olof Runborg¹⁹.

Le formalisme de Wigner a été étudié pour les équations de Helmholtz afin d'en justifier la limite haute fréquence. Partant de la fonction d'onde décrite par

$$\Delta u + \omega^2 n^2 u = S(x)$$

où $S(x)$ représente une source, ω la fréquence et avec des conditions de radiation à l'infini, on définit la fonction de Wigner

$$w(x, \xi) = TF_{y \rightarrow \xi} u(x + \frac{\varepsilon y}{2}) \bar{u}(x - \frac{\varepsilon y}{2})$$

avec $\varepsilon = \omega^{-1}$. A la limite haute fréquence, celle-ci vérifie l'équation de l'optique géométrique qui a la structure d'une équation cinétique

$$\xi \cdot \nabla_x w + \nabla_x \frac{n^2}{2} \cdot \nabla_\xi w = \Sigma(x, \xi)$$

17. Projet Ondes

18. CNRS-Rennes

19. Post-doc européen -M3N et ENS-

Nous avons justifié entièrement cette limite haute fréquence dans ce cadre qui évite les problèmes de caustique.

Dans un premier temps le cas d'une source ponctuelle a été étudié (rapport de recherche [BCKP99]). Les travaux réalisés permettent de traiter des sources plus complexes (source concentrée sur une courbe, une surface) et d'identifier la source Σ en haute fréquence selon la position x dans l'espace et la fréquence ξ . Divers régimes apparaissent (propagatif, elliptique, caractéristique), voir le rapport de recherche [41]

7 Contrats industriels (nationaux, européens et internationaux)

7.1 Action Optimisation de forme en mécanique des fluides

Participants : Bijan Mohammadi, Mugurel Stanciu.

Cette action correspond à un contrat avec VALEO TM pour une durée de trois ans (mi 1998- mi 2001). Des pales de ventilateurs de refroidissement moteur ont été calculées de façon à optimiser l'écoulement de l'air. Le rendement du ventilateur est ainsi augmenté. Notons que cette étude est réalisée en trois dimensions.

7.2 Action Modélisation simplifiée de gaz dilués

Participants : Pierre Andries, Jean-François Bourgat, Benoit Perthame.

La collaboration avec le CEA-CESTA qui a pour objet la conception et la validation de nouveaux modèles numériques pour le calcul d'écoulements transitionnels raréfié/dense, plus simples que l'équation de Boltzmann, a été poursuivie par un contrat pour l'année 2000, portant sur l'amélioration des modèles de relaxation.

7.3 Action Décision

Participant : Bijan Mohammadi.

Etude en optimisation de formes pour le transport aéronautique civil, (voir aussi 8.3.1).

7.4 Action Schémas cinétiques pour les équations de Saint-Venant

Participants : Marie-Odile Bristeau, Benoit Coussin, Benoit Perthame.

Cette étude fait l'objet d'un contrat avec le LNHE de l'EDF. Le schéma cinétique pour des volumes finis a été intégré dans le code TELEMAC-2D.

[BCKP99] J.-D. BENAMOU, F. CASTELLA, T. KATSAOUNIS, B. PERTHAME, « High Frequency Limit of the Helmholtz Equations », *rapport de recherche n° 3785*, Inria, octobre 1999, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-3785.html>.

7.5 Action Aluminium

Participants : Jean-Frédéric Gerbeau, Claude Le Bris²⁰.

Contrat avec l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées dans le cadre d'une collaboration avec Aluminium Pechiney sur la modélisation mathématique de l'électrolyse de l'aluminium.

8 Actions régionales, nationales et internationales

8.1 Actions Régionales

Le projet est associé étroitement et en priorité aux Universités de Paris 6, Paris Dauphine, à l'Ecole Polytechnique et à l'Ecole Normale Supérieure : participation aux formations doctorales, accueil de thésards ou de stagiaires, collaboration de Professeurs de ces Institutions au projet ou réciproquement. Le projet s'est aussi rapproché de l'Université de Versailles Saint-Quentin en participant activement au DEA de Modélisation, Simulation et Applications de la Physique.

Par ailleurs, le projet est membre du Firtech Calcul Scientifique de la région parisienne, qui regroupe industriels et laboratoires intéressés par les problèmes de modélisation numérique en milieu industriel. Le travail de thèse de Rodolfo Araya a été partiellement financé par une bourse de ce Firtech.

Enfin, le projet est à l'origine d'un club anévrisme qui a vu le jour en 1997, et qui réunit en dehors des personnels des projets Epidaure, Gamma et MACS intéressés, A. Gaston, chef du service de neuroradiologie au CHU Henri Mondor à Créteil, J. Bittoun, responsable du CIERM à l'hôpital de Kremlin Bicêtre.

8.2 Actions nationales

Le projet M3N participe à l'ACI " *Catastrophes Naturelles* " en collaboration avec différents laboratoires: ENS-DMA, Cemagref Lyon, IMF Toulouse, LMF/INSA Lyon, LMFA Lyon. Cette action a débuté en octobre 2000, la contribution du projet porte principalement sur la dérivation des équations de Saint-Venant à partir de Navier-Stokes et le couplage de modèles Saint-Venant 1D-2D.

Au niveau du CNRS, le projet M3N participe à trois groupements de recherche (GdR): couplage d'équations, optimisation, et physique des particules chargées (Sparch). Ces GdR ont un fort pôle d'intérêt à Toulouse et Montpellier. Le projet a des relations privilégiées avec l'Université de Montpellier, des collaborations avec l'UR de Rennes.

8.3 Actions financées par la Communauté Européenne

8.3.1 Décision

M3N participe, grâce à B. Mohammadi, au projet européen DECISION réunissant l'INRIA, Dassault Aviation, Nag, VTT, l'université de Jyväskylä et des industriels finlandais. Le but du

²⁰. CERMICS, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées

projet est de développer :

- une plateforme d'intégration d'outils de conception permettant le partage effectif d'informations en vue de la réalisation de projets de conception complexe via des stratégies reconnues d'optimisation, actuelles et à venir. Les composantes principales de cette technologie d'optimisation regroupent : des disciplines couplées, des optimiseurs déterministes traditionnels, des optimiseurs stochastiques (algorithmes génétiques et recuit simulé), optimisation multi-critères combinant algorithmes génétiques parallélisés et concepts d'optima de Pareto ou Nash, contraintes.
- une base de données contenant les descriptions des spécifications utilisées pour des castests d'optimisation, à la fois de la part des fournisseurs du projet (INRIA, VTT, université de Jyväskylä) et des utilisateurs finaux (Dassault Aviation et les industriels finlandais), un logiciel de visualisation spécialisé, des indications sur les processus d'optimisation.

8.4 Relations bilatérales internationales

8.4.1 Méditerranée

Une coopération franco-tunisienne faisant intervenir M3N, le LAN-Paris 6 et IPEST-EPT, sur le thème de la simulation numérique des écoulements particuliers vient de débiter.

8.5 Accueil de chercheurs étrangers

- R. Botchorishvili, Tbilissi, Géorgie, (3 mois).
- I. Gamba, Texas University, USA, (1 semaine).
- M. Fortin, Université Laval, Canada, (1 semaine).

9 Diffusion de résultats

9.1 Animation de la communauté scientifique

P. Le Tallec participe au Comité Directeur des Ecoles d'été CEA-EDF-INRIA, et est membre du Comité Scientifique et Technique de l'ONERA ainsi que du Conseil Scientifique de l'Institut Liapunov. B. Perthame et P. Le Tallec assurent l'organisation scientifique des écoles CEA-EDF-INRIA sur les problèmes non linéaires appliqués. Les sessions organisées en 2000 ont été :

- Schémas distribués en mécanique des Fluides et Applications (avril 2000).
- Acoustique avec écoulements (septembre 2000).
- Modélisation numérique de polymères à l'échelle mésoscopique (novembre 2000).

Benoit Perthame est éditeur en chef de la revue M2AN, éditeur des revues CALCOLO, CPDE et SIAM J. Math. Analysis, Marie-Odile Bristeau fait partie du Comité Editorial de la revue Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering.

9.2 Actions d'enseignement

- Mathématiques appliquées, cours de DEA, université Paris 6 et Ecole Polytechnique (B. Perthame).
- Introduction aux systèmes hyperboliques, cours de DEA, université Paris 6 (B. Perthame).
- Biomécanique, cours de DEA (national) , (M. Thiriet).
- Calcul scientifique, cours à l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, (J.F. Gerbeau).

9.3 Autres Enseignements

- Ecole CEA-EDF-INRIA: Schémas distribués en mécanique des fluides (avril 2000), Schémas cinétiques pour les équations de Saint-Venant , par M-O. Bristeau
- Cours Evolution equations, juillet 2000 à Prague, par B. Perthame

9.4 Participation à des colloques

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

- CMAP-X, workshop février 2000 (R. Botchorishvili)
- GAMM, colloque sur l'optimisation de formes, Gottingen , mars 2000 (B. Mohammadi)
- NUMELEC 2000, Poitiers, mars 2000 (A. Marrocco)
- EuroDays 2000, "Innovative Tools for Scientific Computation in Aeronautical Engineering", Paris, mars 2000 (M.O. Bristeau)
- CMAP-X, workshop mai 2000 (M.O. Bristeau)
- DECISION M30 Meeting, Paris, mai 2000 (B. Mohammadi)
- Conférence sur les Méthodes numériques pour les systèmes hyperboliques, Valencia, mai 2000 (B. Perthame)
- IMA Conference on Non equilibrium phenomena, Minneapolis, mai 2000 (B. Perthame)
- Workshop sur les méthodes incomplètes d'optimisation et de contrôle, Weierstrass Institute à Berlin, mai 2000 (B. Mohammadi)

- 5^{eme} workshop Franco-Russo-Finlandais, Helsinki, juin 2000 (J.F. Gerbeau)
- CANUM, Colloque national d'analyse numérique, Port d'Albret-Vieux Boucau , juin 2000 (J.F. Gerbeau, M. Thiriet)
- RGD2000 Conference, Sydney, juillet 2000 (P. Andries)
- ECCOMAS 2000, Barcelone, septembre 2000 (G. Barrenechea, A. Marrocco, B. Mohammadi, M. Stanciu)
- DECISION M36 Meeting, Barcelone septembre 2000 (B. Mohammadi)
- MIMM, Ann Arbor Michigan, septembre 2000 (B. Perthame)
- 11th ECMI Conference, Palerme, septembre 2000 (M.O. Bristeau)
- DD13, Conference on Domain Decomposition Methods, Lyon, octobre 2000 (A. Marrocco)
- AMIF, 2^{eme} congrès international “Applied Math. for Industrial Flows”, Pise, octobre 2000 (J.F. Gerbeau)
- HJB2000, Paris, octobre 2000 (B. Perthame)
- MecanoTransduction 2000, (M. Thiriet)

10 Bibliographie

Ouvrages et articles de référence de l'équipe

- [1] N. BELLOMO, P. LE TALLEC, B. PERTHAME, «The solution of the nonlinear Boltzmann equation: a survey of analytic and computational methods», *Computer Math. Applic.* 30, 7, 1995, p. 21–30.
- [2] F. HECHT, A. MARROCCO, «Mixed finite element simulation of heterojunction structures including a boundary layer model for the quasi-Fermi levels», *in : NASECODE X Conference*, Boole Press, p. 50–51, Dublin, june 1994.
- [3] P. LE TALLEC, *Domain decomposition methods in computational mechanics*, North-Holland, 1994, Advances in computational mechanics, Volume 1.
- [4] A. MARROCCO, P. MONTARNAL, «Simulation des modèles energy-transport à l'aide des éléments finis mixtes», *C.R. Acad. Sci. Paris 323*, Série I, 1996, p. 535–541.
- [5] B. MOHAMMADI, O. PIRONNEAU, *Analysis of the K-Epsilon Turbulence Model*, Masson et J.Wiley Int. Ed., 1994.
- [6] B. MOHAMMADI, O. PIRONNEAU, «New Tools for Optimum Shape Design», *CFD Review*, 1995, Special Issue.
- [7] B. MOHAMMADI, O. PIRONNEAU, *Wall-Laws for Fluids, 2*, Wiley, 1998.
- [8] B. MOHAMMADI, *Mesh Adaption and AD for OSD, 11*, Gakuto Int., 1998, Math. Sc. and App.

- [9] B. PERTHAME, *An introduction to recent developments in theory and numerics for consevation laws*, *Lecture Notes in Comp. Sc. and Eng.*, 5, Springer, 1999, ch. An introduction to kinetic schemes for gas dynamics.
- [10] M. THIRIET, G. MARTIN-BORRET, F. HECHT, «Ecoulement rhéofluidifiant dans un coude et une bifurcation plane symétrique. Application à l'écoulement sanguin dans la grande circulation.», *J. Phys. III* 6, 1996, p. 529–542.

Thèses et habilitations à diriger des recherches

- [11] R. ARAYA, *Estimateurs d'erreur a posteriori pour des problèmes d'élasticité fortement hétérogènes*, thèse, Université Pierre et Marie Curie, octobre 2000.

Articles et chapitres de livre

- [12] P. ANDRIÈS, P. LE TALLEC, J. PERLAT, B. PERTHAME, «The Gaussian-BGK model of Boltzmann equation with small Prandtl numbers», *European Journal of Mechanics:B Fluids*, à paraître.
- [13] J.-D. BENAMOU, F. CASTELLA, T. KATSAOUNIS, B. PERTHAME, «High Frequency Limit of the Helmholtz Equations», *Rev.Math. Ibero-americana*, à paraître.
- [14] A. COHEN, B. PERTHAME, «Optimal approximation by particles and pseudo-particles methods», *SIAM, J. Math. Anal.*, 2000.
- [15] J.-F. GERBEAU, «A stabilized finite element method for the incompressible magnetohydrodynamic equations», *Numerische Mathematik*, à paraître.
- [16] J.-F. GERBEAU, C. LE BRIS, «A basic remark on some Navier-Stokes equations with body forces», *Appl. Math. Lett.* 13, 3, 2000, p. 107–112.
- [17] J.-F. GERBEAU, C. LE BRIS, «Comparison between two numerical methods for a magnetostatic problem», *Calcolo* 37, 1, 2000, p. 1–20.
- [18] J.-F. GERBEAU, C. LE BRIS, *Mathematical study of a coupled system arising in Magnetohydrodynamics*, *Lecture Notes in Pure and Applied Mathematics*, 215, Marcel Dekker Inc., 2000, p. 355–367.
- [19] P. E. JABIN, B. PERTHAME, *Notes on mathematical problems on the dynamics of particles interacting through a fluid*, *Modelling in Applied Sciences: A kinetic theory approach*, Birkhauser, Boston, 2000, ch. x, Bellomo, N. and Pulvirenti, M., Ed.
- [20] B. MOHAMMADI, O. PIRONNEAU, «Some new aspects in shape optimization for fluids», *CFD Journal* 9, 2, 2000.
- [21] B. MOHAMMADI, G. PUIGT, «Generalized wall functions for high speed flows over adiabatic and isothermal walls», *IJCFD*, à paraître.
- [22] B. MOHAMMADI, *Global quadratic dynamic minimization approaches for shape design with incomplete sensitivities on CAD-Free parametrization of multi-disciplinary configurations*, Birkart, 2000, Fast solution of discrete optimization problems.
- [23] M. STANCIU, B. MOHAMMADI, «Platform for multi-model design», *Turbulence, Flow and Combustion Journal*, à paraître.

- [24] M. THIRIET, C. RIBREAU, *Biomechanics Systems Techniques and Applications*, Leondes C., 2000, ch. Flow in thin-walled collapsible tubes.
- [25] M. THIRIET, C. RIBREAU, «Computational flow in a collapsed tube with wall contact», *Mec. Ind.*, 2000.
- [26] M. THIRIET, C. RIBREAU, *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, Gordon and Breach, 2000, ch. Computational values of entry lengths of laminar flow in uniformly collapsed veins.

Communications à des congrès, colloques, etc.

- [27] P. ANDRIES, B. PERTHAME, «The ES-BGK model for rarefied flows. Computations for a condensation problem», *in : RGD2000 Conference*, Sydney, 2000. CD-ROM.
- [28] G. BARRENECHEA, P. LE TALLEC, «Wall laws for unsteady Navier-Stokes equations», *in : ECCOMAS-2000 Conference*, Barcelona, september 2000. CD-ROM.
- [29] S. CARO, M. HENNER, S. MOREAU, M. STANCIU, S. AUBERT, P. FERRAND, «Unsteady rotor-stator interactions in automotive engine cooling fan systems», *in : 9th International Symposium on Unsteady Aerodynamics, Aeroacoustics and Aeroelasticity of Turbomachines*, 2000.
- [30] L. GIRAUD, J. KOSTER, A. MARROCCO, J. RIOUAL, «Two-level preconditioners for the Schur complement: an application to semiconductor device modelling», *in : Domain Decomposition 13*, Lyon, october 2000.
- [31] F. HECHT, A. MARROCCO, «Mesh adaption and numerical simulation of semiconductor devices», *in : ECCOMAS-2000 Conference*, Barcelona, september 2000. CD-ROM.
- [32] F. HECHT, A. MARROCCO, «Simulation numérique avec adaptation de maillage du modèle de dérive-diffusion pour les semi-conducteurs», *in : NUMELEC-2000*, Futuroscope, Poitiers, mars 2000.
- [33] B. KOOBUS, B. MOHAMMADI, G. PUIGT, «Distributed 3D shape optimization with incomplete sensitivities and CAD-Free framework for high-speed inviscid and viscous turbulent regimes», *in : AIAA Conference*, 4526, 2000.
- [34] M. STANCIU, B. MOHAMMADI, S. MOREAU, «Turbulent flow simulation and shape optimization in turbomachinery», *in : ECCOMAS-2000 Conference*, Barcelona, september 2000. CD-ROM.

Rapports de recherche et publications internes

- [35] P. ANDRIÈS, J. BOURGAT, B. PERTHAME, P. LE TALLEC, «Nouveaux modèles Gaussiens pour le calcul d'écoulements raréfiés», *Rapport de contrat CESTA-INRIA*, Décembre 1999.
- [36] P. ANDRIÈS, J. BOURGAT, B. PERTHAME, P. LE TALLEC, «Numerical comparison between the Boltzmann and ES-BGK models for rarefied gases», *Rapport de recherche n° 3872*, INRIA, janvier 2000, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-3872.html>.
- [37] E. AUDUSSE, M. O. BRISTEAU, B. PERTHAME, «Kinetic schemes for solving Saint-Venant equations with source terms», *Rapport de Recherche n° 3989*, INRIA, Juillet 2000, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-3989.html>.

- [38] R. BOTCHORISHVILI, B. PERTHAME, A. VASSEUR, «Schémas d'équilibre pour des lois de conservation scalaires avec des termes sources raides», *Rapport de Recherche n° 3891*, INRIA, Février 2000, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-3891.html>.
- [39] R. BOTCHORISHVILI, «Implicit Kinetic Schemes for Scalar Conservation Laws», *Rapport de Recherche n° 3972*, INRIA, Juillet 2000, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-3972.html>.
- [40] M. O. BRISTEAU, B. PERTHAME, «Transport of Pollutant in Shallow Water using Kinetic schemes», *Rapport de recherche*, INRIA, à paraître.
- [41] F. CASTELLA, B. PERTHAME, O. RUNBORG, «High frequency limit of the Helmholtz equation: source on a general curve», *rapport de recherche*, INRIA, à paraître.
- [42] L. FORMAGGIA, J.-F. GERBEAU, F. NOBILE, A. QUARTERONI, «On the Coupling of 3D and 1D Navier-Stokes equations for Flow Problems in Compliant Vessels», *Rapport de recherche n° 3862*, INRIA, 2000, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-3862.html>.
- [43] M.-H. LALLEMAND, R. SAUREL, «Pressure relaxation procedures for multiphase compressible flows», *Rapport de recherche*, INRIA, octobre 2000, à paraître.
- [44] B. MOHAMMADI, G. PUIGT, «Wall-laws for high speed flows over adiabatic and isothermal walls», *rapport de recherche n° 3948*, INRIA, 2000, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-3948.html>.
- [45] B. MOHAMMADI, J. SANTIAGO, J. MOLHO, «Design of minimal dispersion fluidic channels in a CAD-Free framework», *rapport de recherche n° 3982*, INRIA, 2000, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-3982.html>.
- [46] M. STANCIU, B. MOHAMMADI, «TASCOPT- A shape optimization platform for turbomachinery applications», *rapport de recherche n° 3803*, INRIA, 1999, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-3803.html>.
- [47] M. THIRIET, «Computational Flow Models in Cerebral Congenital Aneurisms», *Rapport de recherche n° 3768*, INRIA, sept. 1999, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-3768.html>.
- [48] M. THIRIET, «A Three-dimensional Numerical Model of a Critical Flow in a Collapsed Tube», *Rapport de recherche n° 3867*, INRIA, janvier 2000, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-3867.html>.

Divers

- [49] Y. ACHDOU, G. BARRENECHEA, P. LE TALLEC, F. VALENTIN, «Comparison of wall laws for unsteady incompressible Navier-Stokes equations over rough interfaces», en préparation.
- [50] O. DE CHIVRÉ, J.-F. GERBEAU, «A fractional-step method for the MHD equations», en préparation.
- [51] L. FORMAGGIA, J.-F. GERBEAU, F. NOBILE, A. QUARTERONI, «Defective boundary conditions for Navier-Stokes equations», en préparation.
- [52] J.-F. GERBEAU, B. PERTHAME, «Derivation of the Saint-Venant system with viscosity and numerical validation», en préparation.

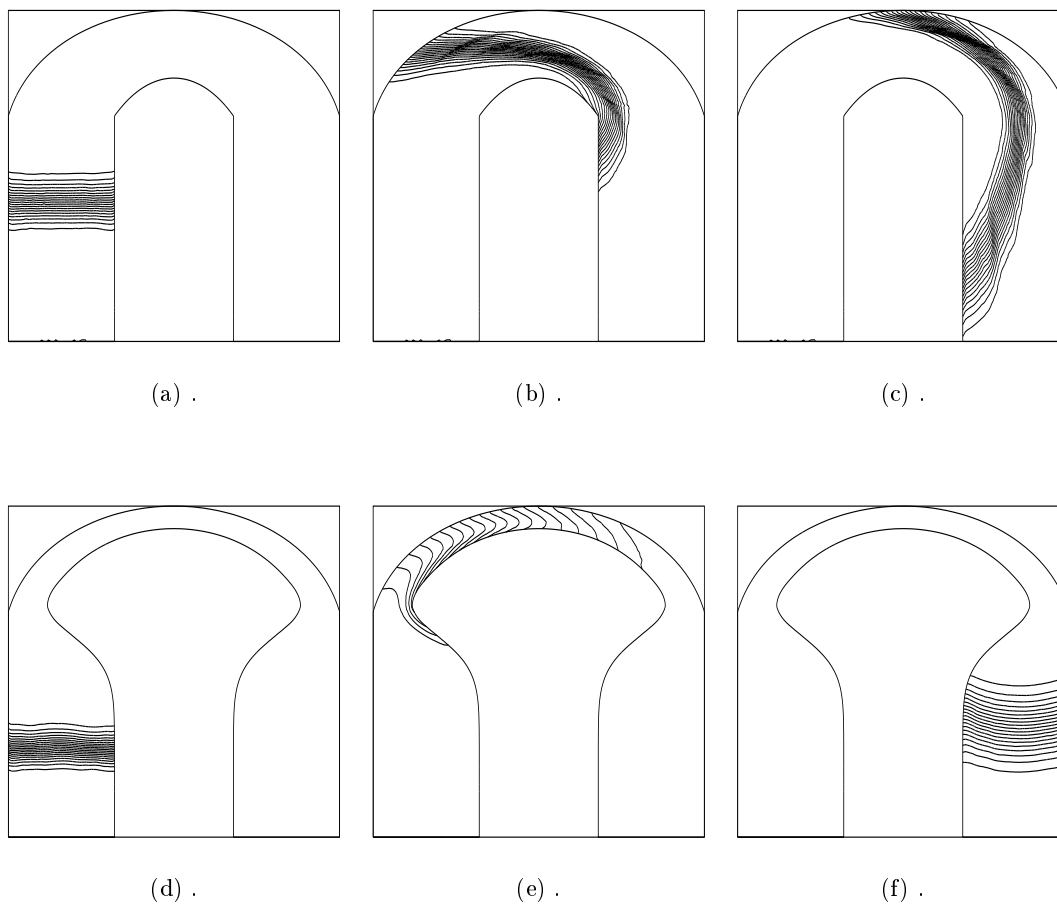


FIG. 13 – CANAUX FLUIDIQUES. (a,b,c): *Forme initiale pour un coude à 180 degrés et effet de la courbure sur les quantités chimiques transportées. On voudrait annuler le dérapage.* (d,e,f): *Forme finale et impact sur le dérapage qui a été complètement éliminé.*