

Projet M3N

Multi-Modèles et Méthodes Numériques

Rocquencourt

THÈME 4B



*Rapport
d'Activité*

2001

Table des matières

1	Composition de l'équipe	3
2	Présentation et objectifs généraux	3
3	Fondements scientifiques	4
3.1	Lois de parois, optimisation et contrôle des fluides visqueux	5
3.2	Fluides avec des frontières mobiles	6
3.3	Modélisation des Semi-conducteurs	7
3.4	Analyse particulière des fluides à l'échelle microscopique	8
4	Domaines d'applications	8
5	Logiciels	9
5.1	OPTMTR	9
5.2	EMC2	9
5.3	BOL2D	9
5.4	NSC2KE-NSC3KE	9
5.5	NSIKE	9
5.6	OPTIMA-TASCOPT	10
5.7	HET_2D	10
6	Résultats nouveaux	11
6.1	Modélisation, optimisation, contrôle et algorithmes	11
6.1.1	Lois de paroi généralisées	11
6.1.2	Optimisation de formes aérodynamiques 3D	14
6.1.3	Analyse numérique et validation de lois de paroi pour des écoulements non stationnaires	19
6.1.4	Contrôle quantique	19
6.1.5	Méthodes de type base réduite pour les EDP paramétriques	21
6.2	Algorithmes numériques et modélisation pour les fluides avec des frontières mobiles	21
6.2.1	Magnétohydrodynamique des métaux liquides	21
6.2.2	Écoulements peu profonds à surface libre	22
6.3	Applications bio-médicales	24
6.3.1	Filtration des globules blancs du sang	24
6.3.2	Biomécanique et simulateurs médicaux	25
6.4	Semi-conducteurs	25
6.5	Dans le domaine du microscopique et du cinétique	29
6.5.1	Un modèle BGK consistant pour les mélanges de gaz	29
6.5.2	Écoulements gazeux en matériaux poreux, loi de Darcy généralisée	29
6.5.3	Diffusion gazeuse à très faible pression	30

7 Contrats industriels (nationaux, européens et internationaux)	30
7.1 Action Optimisation de forme en mécanique des fluides	30
7.2 Action Modélisation simplifiée de gaz dilués	30
7.3 Action Équations de Saint-Venant et écoulements en eaux peu profondes	30
7.4 Action Aluminium	30
8 Actions régionales, nationales et internationales	31
8.1 Actions régionales	31
8.2 Actions nationales	31
8.3 Relations bilatérales internationales	31
8.3.1 Europe	31
8.3.2 Méditerranée	31
8.3.3 Amériques	32
8.3.4 Asie	32
8.4 Accueil de chercheurs étrangers	32
9 Diffusion de résultats	32
9.1 Animation de la communauté scientifique	32
9.2 Actions d'enseignement	32
9.3 Autres enseignements	32
9.4 Participation à des colloques	33
10 Bibliographie	33

1 Composition de l'équipe

Responsable scientifique

Benoit Perthame [Professeur, Université de Paris 6]

Responsable permanent

Americo Marrocco [DR]

Assistante de projet

Maryse Desnoux [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]

Gabriel Turinici [CR, depuis oct. 2001]

Collaborateurs extérieurs

Bijan Mohammadi [Professeur, Université de Montpellier II]

Marc Thiriet [CR CNRS]

Chercheur post-doctorant

Theodoros Katsaounis [Heraklion, Grèce, depuis septembre 2001]

Doctorants

Pierre Andries [boursier X, jusque octobre 2001]

Emmanuel Audusse [boursier Paris 6, depuis septembre 2001]

Gabriel Barrenechea [boursier INRIA]

Mohamed Belhadj [boursier INRIA, depuis octobre 2001]

Chiara Simeoni [boursière de l'INdAM (Rome), septembre 2000]

Mugurel Stanciu [boursier INRIA, jusque septembre 2001]

Stagiaires

Mohamed Belhadj [Ecole Polytechnique de Tunis]

Mohamed Marchoud [Université Paris-Dauphine]

Jonathan Sillam [Université Paris XI]

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, particulières. 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, biologiques 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 résultats de stabilité, d'approximation ou des propriétés physiques (conservativité).
- savoir développer des méthodes algorithmiques efficaces pour la résolution des systèmes obtenus, voire leur parallélisation.

Dans cette optique générale, les sujets de recherche du projet M3N se sont orientés autour des quatre 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 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'adapteraient 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

[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.

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.

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 [18].

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, transports de polluants ou d'espèces biologiques nombreuses et dont les interactions sont complexes.

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. Une des directions de recherche actuelle est la prédiction numérique d'effets de nature biologique dans les études d'impact environnemental.

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 nécessite 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.

[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 Nonlinear Mechanics*, Studies in Applied Mathematics, SIAM, 1989.

3.4 Analyse particulaire des fluides à l'échelle microscopique

Les modèles cinétiques permettent une description physique fine des milieux particulaires 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 particulaires 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 maillages 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.

5.1 OPTMTR

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

5.2 EMC2

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

5.3 BOL2D

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

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).

5.4 NSC2KE-NSC3KE

Participant : Bijan Mohammadi [correspondant].

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.

5.5 NSIKE

Participants : Gorazd Medić ¹, Bijan Mohammadi [correspondant], Mugurel Stanciu.

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.

¹ancien doctorant M3N

5.6 OPTIMA-TASCOPT

Participants : Gorazd Medić ², Bijan Mohammadi [correspondant OPTIMA], Mugurel Stanciu [correspondant 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 maillieurs du projet Gamma (**emc2**, **Bamg**, **ghs3d**).

5.7 HET_2D

Participants : Americo Marrocco [correspondant], Philippe Montarnal ³, Abderrazzak El Boukili ⁴, Frédéric Hecht ⁵.

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 dérive-diffusion pour le moment). Il existe une version parallélisée via la décomposition de domaine (collaboration avec le CERFACS) pour certains modules.

²ancien doctorant M3N

³ancien doctorant M3N

⁴ancien doctorant M3N

⁵LAN, Université Paris 6.

6 Résultats nouveaux

6.1 Modélisation, optimisation, contrôle et algorithmes

6.1.1 Lois de paroi généralisées

Participants : Bijan Mohammadi, G. Puigt⁶.

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

L'objectif de cette année est la prise en compte de rugosités de paroi dans les lois de paroi pour écoulements supersoniques isothermes. On veut modéliser dans la région proche de la paroi le comportement des différentes variables des équations de Navier-Stokes : ρ, u, E , ainsi que celles du modèle de turbulence : k, ε . En effet, le principe des lois de paroi est d'éviter l'utilisation de modèles de turbulence bas-Reynolds qui sont numériquement très coûteux. Ceci est réalisé en créant une paroi fictive qui est translatée de $\delta \vec{n}$ de la paroi réelle (δ est un paramètre des lois de paroi et \vec{n} est le vecteur unitaire normal sortant de la paroi réelle). On espère ainsi éviter le calcul des régions où les gradients des variables sont les plus forts. La motivation est donc de prédire les flux à la paroi en utilisant les informations connues sur cette paroi fictive sans calculer la région intermédiaire qui contient cependant une grande partie de la physique de l'écoulement. Les premiers rapports ont montré la faisabilité de cette approche et nous avons validé les lois de paroi pour paroi lisse dans diverses configurations. Ici, nous allons prendre en compte les rugosités de paroi qui seront modélisées par une approche d'identification de paramètres. Nous validerons ensuite les modifications apportées aux lois précédentes.

Le travail est découpé en plusieurs étapes :

1. Nous explicitons les résultats déjà existants sur la prise en compte des rugosités
2. Nous nous attachons à montrer les capacités de nos lois de paroi à modéliser des écoulements super- et hyper-soniques. Deux cas-tests ont été envisagés et ont l'avantage de disposer de données expérimentales dans les deux cas paroi-lisse et paroi-rugueuse. Le premier cas est une rampe de compression isotherme à 35 degrés et à Mach 8.2. Les données expérimentales disponibles concernent le coefficient de transfert thermique pariétal (pour les deux situations). Dans le cas de l'écoulement sur paroi lisse, les lois de paroi reproduisent bien le transfert thermique en avant de la zone de recirculation. Par contre, après la zone de recirculation, les niveaux produits sont un peu trop élevés. Pour l'écoulement rugueux, le coefficient de transfert thermique pariétal en avant de la zone de recirculation est parfaitement évalué, mais cette évaluation est à nouveau mise en défaut après la recirculation. Les lois de paroi lisses ayant bien reproduit les variations de ce coefficient dans le cas de la rampe de compression de Delery à Mach 5, nous avons voulu expliquer ce phénomène. Pour cela, le modèle de turbulence $v^2 - f$ de Durbin a été implémenté dans notre code de calcul. Avec ce nouveau modèle, les niveaux obtenus sont en accord avec les données expérimentales (voir figure 1), ce qui prouve, comme nous l'avons fait remarquer dans nos précédents rapports, que la modélisation de la turbulence pour les écoulements fortement compressibles est loin d'être parfaite et que de nouveaux modèles doivent être mis au point.

⁶Valéo

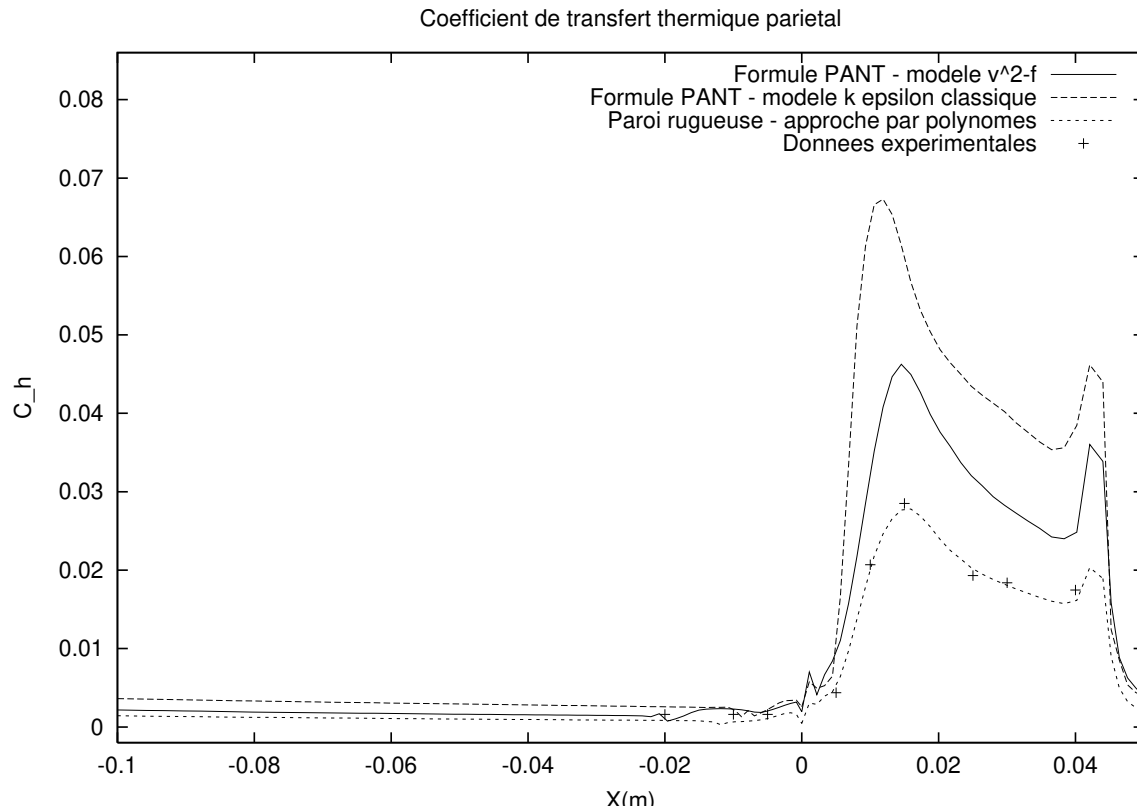


FIG. 1 – LOIS DE PAROIS. Rampe de compression isotherme rugueuse ($M_\infty = 8.2$, $Re_\infty = 8 \cdot 10^6$, $T_{wall} = 288K$ et $T_\infty = 1280K$) : coefficient de transfert thermique pariétal, comparaison des résultats obtenus par PANT avec ceux dus à notre approche.

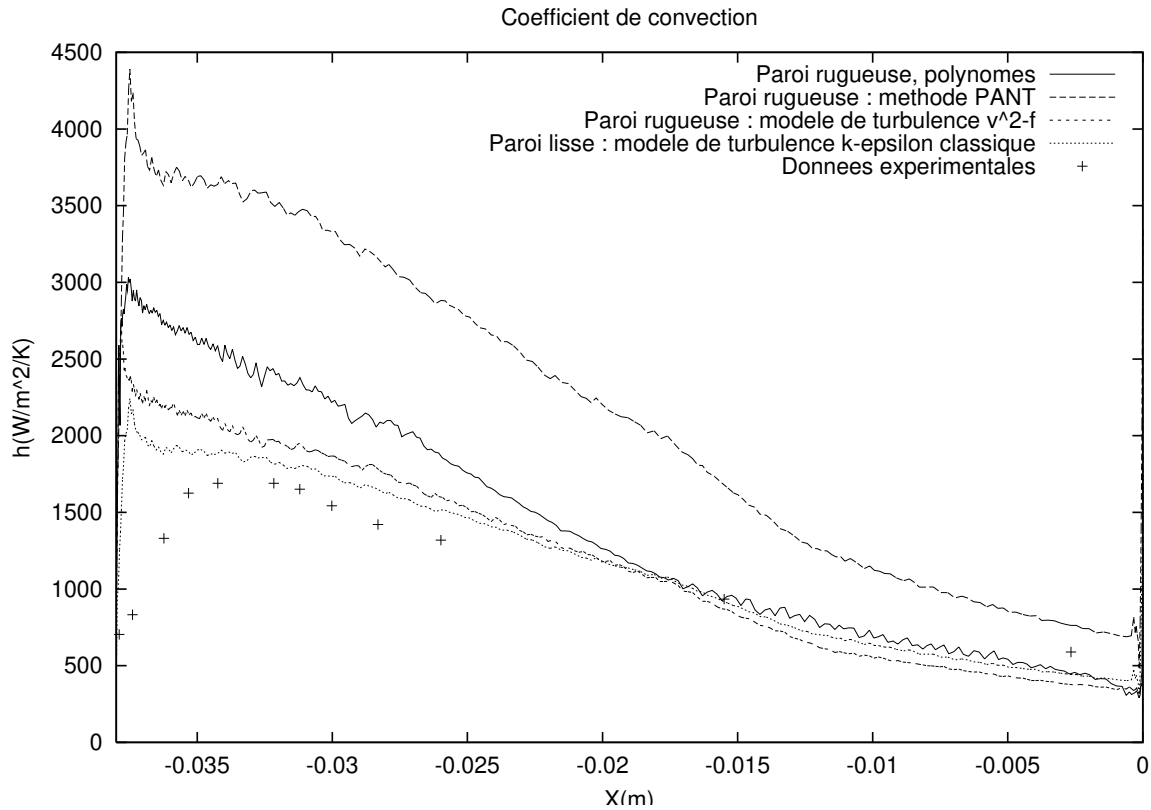


FIG. 2 – LOIS DE PAROIS. Sphère isotherme rugueuse ($M_\infty = 5.1$, $Re = 2.91 \cdot 10^6$, $T_\infty = 90.6K$, $T_{wall} = 288k$) : coefficient de convection de paroi. Comparaison entre l'analyse pour parois lisses, la méthode PANT et les lois de paroi. Les meilleurs résultats sont obtenus avec nos lois de paroi couplées avec le modèle de turbulence de Durbin. C'est la preuve des défauts de la modélisation de la turbulence.

Le second cas-test nous a été fourni par le CEA/CESTA et consiste en un corps de rentrée sphérique (programme RAFALE). La simulation sur paroi lisse a déjà été réalisée dans le cadre de la validation des lois de paroi pour parois lisses. Pour ce cas-test, toutefois, un petit bémol réside dans l'écoulement proche du point d'arrêt car l'écoulement est laminaire, et de ce fait, les niveaux de flux thermique calculés ne correspondent pas à ceux de l'expérience. Dans le cas rugueux, les niveaux du coefficient de convection thermique sont en accord avec les données expérimentales dans la seconde partie de l'écoulement. Dans la partie proche du point d'arrêt, nous avons un problème de sur-estimation du coefficient de convection qui vient lui-aussi du modèle de turbulence. C'est en effet la conclusion que l'on est amené à avoir en comparant les résultats du modèle de turbulence $k - \epsilon$ classique avec ceux calculés grâce au modèle $v^2 - f$ de Durbin (figure 2).

En conclusion, nous avons explicité les nouvelles lois de paroi pour écoulements sur parois rugueuses. Les premiers résultats des simulations sont en accord avec les données expérimentales, ce qui montre que notre méthode est efficace. Ces cas-tests ont aussi mis en avant les problèmes liés à la modélisation de la turbulence et il apparaît que le modèle de Durbin conduise aux meilleurs résultats. Bien sur, d'autres expériences numériques seront sans doute nécessaires pour finir de valider les lois, mais compte tenu de la généralité des polynômes trouvés, nous pensons que la validation sur d'autres cas-tests sera automatique, dans la mesure où la turbulence sera bien prise en compte. L'extension des lois de paroi aux écoulements 3D est ici aussi immédiate. En plus, la méthodologie utilisée est générique et permettra de prendre en compte des rugosités plus complexes (3D, forme quelconque,...).

6.1.2 Optimisation de formes aérodynamiques 3D

Participants : Bijan Mohammadi, Olivier Pironneau ⁷, Mugurel Stanciu.

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

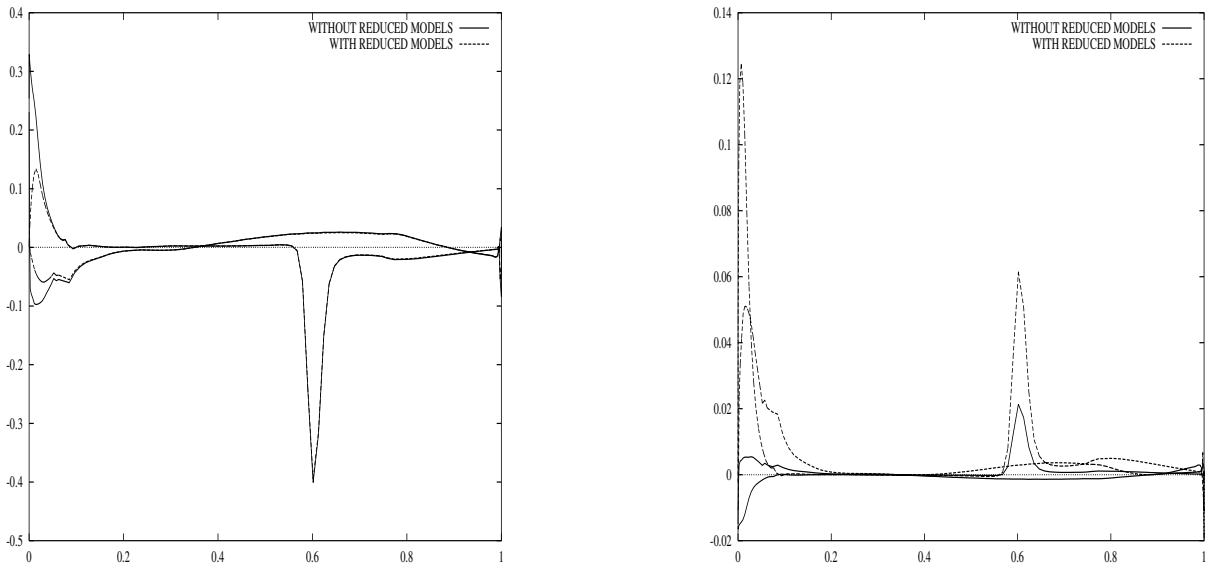
Les sensibilités incomplètes représentent la clé de notre stratégie d'optimisation. Grâce à ces approximations, des cas complexes peuvent être traités avec succès. L'approche des sensibilités incomplètes a été étudiée pour quelques exemples théoriques et validée pour de nombreux cas numériques.

Ensuite, des modèles physiques réduits ont été utilisés pour prendre en compte la partie du gradient négligée auparavant. Le modèle de couche limite et les lois de paroi permettent une meilleure évaluation des sensibilités incomplètes. Plus précisément, on considère un modèle réduit pour la définition de l'état $\tilde{W} \sim W$. Le gradient incomplet de J peut être amélioré en rajoutant la partie négligée auparavant, calculée maintenant avec le modèle réduit.

$$\frac{dJ}{dx_w} = \frac{\partial J(W)}{\partial x_w} + \frac{\partial J(W)}{\partial x_q} \frac{\partial x_q}{\partial x_w} + \frac{\partial J(W)}{\partial W} \frac{\partial \tilde{W}}{\partial x_q} \frac{\partial x_q}{\partial x_w} \left(\frac{W}{\tilde{W}} \right)$$

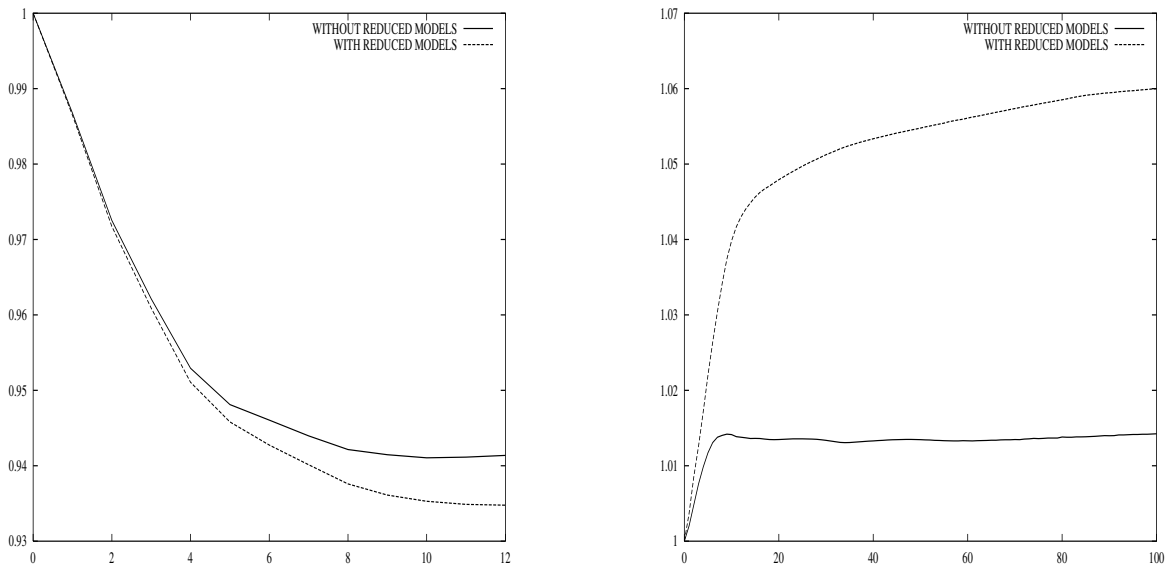
Les termes qui sont évalués avec des modèles réduits sont : $\frac{\partial P}{\partial y_w}$ et $(\nu + \nu_t) \frac{\partial}{\partial y_w} \left(\frac{\partial U}{\partial y} \right)$.

⁷LAN, université Paris 6.



Gradient de C_d par rapport à y au long de la corde. Gradient de $1/C_{li}$ par rapport à y au long de la corde.

FIG. 3 – OPTIMISATION DE FORMES AÉRODYNAMIQUES. Comparaison entre les sensibilités incomplètes avec et sans les modèles réduits de couche limite pour $J = C_d$ et $J = 1/C_{li}$.



Historique de C_d (C_d/C_d^0 pendant l'optimisation) Historique de C_{li} (C_{li}/C_{li}^0 pendant l'optimisation)

FIG. 4 – OPTIMISATION DE FORMES AÉRODYNAMIQUES. Résultats de l'optimisation avec et sans les modèles réduits de couche limite pour $J = C_d$ and $J = 1/C_{li}$.

En utilisant le modèle de couche limite, le gradient normal à la paroi de la pression est nul : $\frac{\partial \tilde{P}}{\partial y_w} = -\frac{\partial \tilde{P}}{\partial y} = 0$.

Un autre modèle réduit utilise les lois de paroi, où l'on remplace la condition de non-glissement de la paroi par une relation entre les variables et leurs dérivées : $\frac{\tilde{U}}{U_\tau} = f(U_\tau)$. Le terme $(\nu + \nu_t)\frac{\partial}{\partial y_w}\left(\frac{\partial U}{\partial y}\right) = 2U_\tau\frac{\partial U_\tau}{\partial y_w}$, nécessaire pour les sensibilités incomplètes, peut être évalué par : $\frac{\partial \tilde{U}}{\partial y_w} = \frac{\partial U_\tau}{y_w} \left[\frac{\ln(y^+)}{\kappa} + \beta - \frac{1}{\kappa} \right] - \frac{U_\tau}{\kappa(y - y_w)}$.

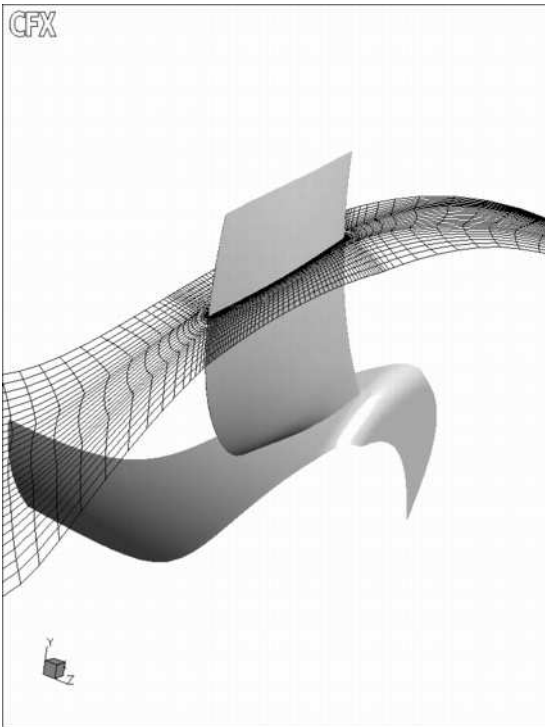
Ces modèles réduits sont valides dans la direction normale à la paroi. Ils doivent être utilisés pour améliorer les sensibilités incomplètes (figure 3); ainsi, la convergence de l'algorithme d'optimisation est plus rapide et plus efficace, surtout pour les coefficients aérodynamiques calculés dans une direction parallèle avec la forme (e.g. C_l , figure 4), et de plus, la physique du problème est mieux prise en compte dans le gradient.

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.

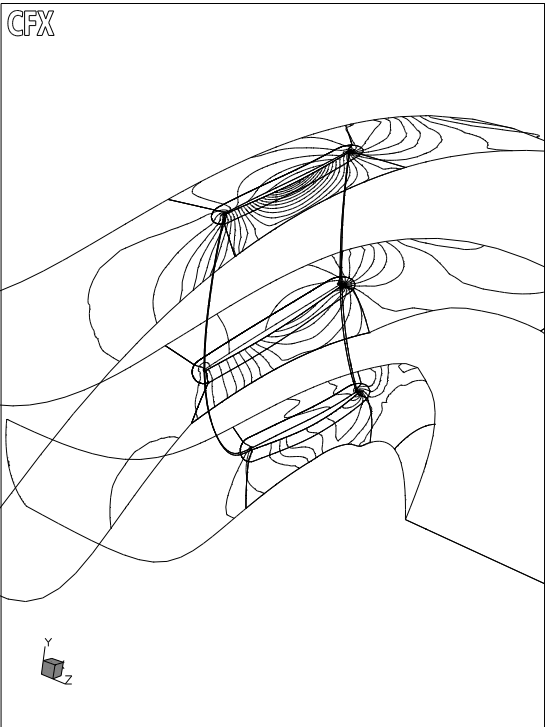
Dans le cadre du contrat VALEO, nous avons poursuivi le développement de notre plateforme d'optimisation pour les configurations turbomachines. Nous sommes intéressés par l'optimisation de formes de pales de ventilateurs de refroidissement moteur pour l'augmentation du rendement. Cela signifie la minimisation du couple de résistance, tout en gardant une différence de pression amont-aval constante. L'optimiseur **TASCOPT** interface notre plateforme d'optimisation avec le solveur commercial **TASCflow**, dans l'environnement industriel de Valeo basé sur une paramétrisation CAO 3D de pales de ventilateur.

Deux choix ont été proposés pour la description d'une pale de ventilateur. Le premier est de considérer que la géométrie est décrite par les points du maillage et est indépendante de la CAO. Dans ce cas des opérateurs de lissage pour la forme sont utilisés. Le deuxième est de considérer que la géométrie à optimiser est paramétrée et est liée à une représentation CAO. Dans ce cas la courbure et le callage de la pale ont été paramétrisés en fonction du rayon de la pale.

Plusieurs ventilateurs ont été optimisés avec ces techniques, dans les configurations de grille à aubes et de pale 3D (figure 5). Les différents types de descriptions géométriques ont été considérés La figure 6 donne le résultat pour une description géométrique indépendante de la CAO. Des validations expérimentales pour les formes optimisées ont été réalisées. Cette méthodologie d'optimisation est maintenant utilisée systématiquement dans le processus de calcul et conception de ventilateurs de VALEO Thermique Moteur.

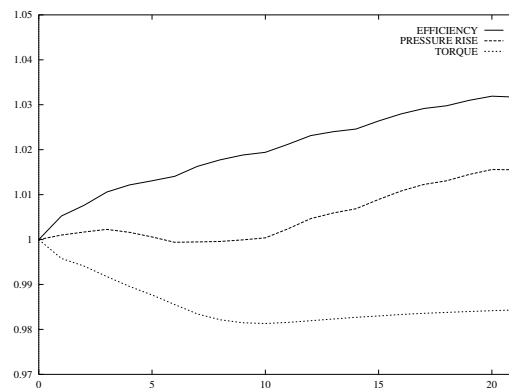


Domaine de calcul pour une pale

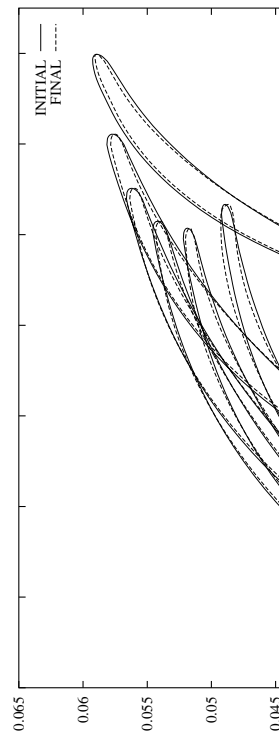


Lignes iso-pression

FIG. 5 – Ecoulement autour d'une pale.



Historique des performances de la pale pendant l'optimisation ($\eta/\eta_0, \Delta P/\Delta P_0, T_r/T_{r0}$)



Formes initiale et finale

FIG. 6 – Optimisation CAD-free de la pale : $J = T_r$.

6.1.3 Analyse numérique et validation de lois de paroi pour des écoulements non stationnaires

Participants : Gabriel Barrenechea, Patrick Le Tallec ⁸, Frédéric Valentin ⁹.

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

Dans le cadre de sa thèse, G. Barrenechea étudie les écoulements non stationnaires sur des parois rugueuses. Dans ce cas, le coût de calcul est très élevé, dû au fait qu'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 dérivées, au premier et deuxième ordre, en utilisant une technique d'analyse asymptotique (voir [1], Rapport 2000).

Dans la période 2000-2001, ce travail a été rédigé et les lois ont été numériquement implémentées. En fait, pour le cas d'un canal rugueux instationnaire la comparaison des différentes lois est présentée dans la Figure 7, où on voit que, dû principalement au fait que l'écoulement est instationnaire, la loi de paroi d'ordre deux est beaucoup plus performante.

D'un autre côté, durant la période 2000-2001, Gabriel Barrenechea a développé, analysé et implémenté une nouvelle méthode d'éléments finis stabilisée pour des problèmes de Stokes généralisés, issus de l'implémentation du θ -schéma linéaire pour l'équation de Navier-Stokes instationnaire. La méthode consiste à soustraire un terme dépendant du maillage de la formulation sans compromettre la consistance de la méthode. La construction du nouveau terme et du paramètre de stabilisation est basée sur la méthode de condensation de la bulle. La stabilité de la méthode et des estimations d'erreur optimales ont été démontrées, et des expériences numériques confirmant ces résultats théoriques ont été réalisées.

6.1.4 Contrôle quantique

Participant : Gabriel Turinici.

Mots clés : laser, feedback, systèmes quantiques.

Les avancées récentes dans la technologie des lasers et les résultats positifs des approches d'apprentissage du contrôle par feedback en boucle ouverte en laboratoire ont ouvert la voie à l'étude des méthodes (numériques et expérimentales) permettant de discriminer expérimentalement, c'est-à-dire induire des dynamiques différentes, entre des systèmes quantiques similaires (l'objectif historique des techniques de contrôle quantique). En collaboration avec Herschel Rabitz (Princeton), Baiqing Li (Princeton), et Viswanath Ramakhrisna (U.T. Dallas) une approche nouvelle a été proposée et étudiée au niveau numérique [20] et théorique (problème de la contrôlabilité) [32] permettant ainsi de passer à l'étape suivante : les implémentations expérimentales.

⁸Ecole Polytechnique

⁹LNCC, Brésil

At $t=0.06$

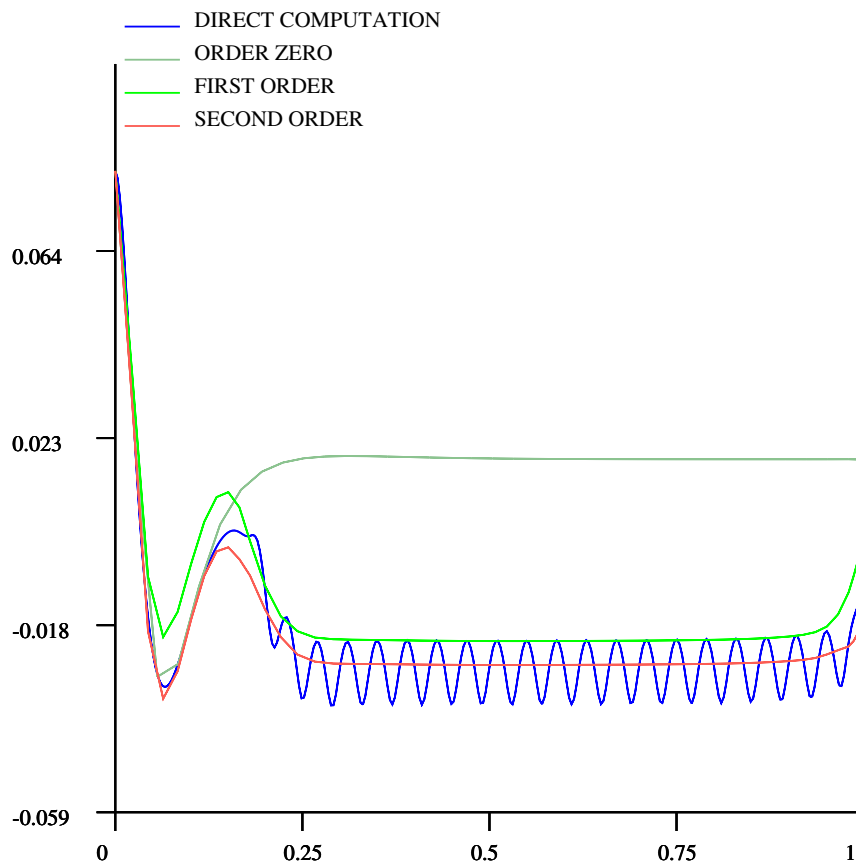


FIG. 7 – LOIS DE PAROIS. Coupe horizontale des solutions obtenues avec le calcul direct, et avec les lois de paroi du premier et deuxième ordre, après 30 pas de temps, sur une plaque rugueuse, avec un nombre de Reynolds $Re = 100$.

6.1.5 Méthodes de type base réduite pour les EDP paramétriques

Participant : Gabriel Turinici.

Mots clés : base réduite, équations aux dérivées partielles paramétriques.

En collaboration avec Antony T. Patera (et son équipe au MIT) et Yvon Maday d'une part et Eric Cancès, Claude LeBris et Yvon Maday d'autre part, des recherches ont été menées sur les discrétisations de type *base réduite* pour la résolution numérique des EDPs paramétriques. Cette méthode, qui consiste à chercher la solution de l'EDP pour un paramètre donné dans l'espace linéaire engendré par des solutions précalculées pour d'autres paramètres, s'est avérée très efficace dans l'étude d'une large classe de problèmes, surtout en conjonction avec des méthodes *a posteriori* pour qualifier et contrôler l'erreur. Afin de comprendre les assises théoriques de la méthode, une étude a été menée et des résultats sur la convergence exponentielle **globale** de cette approximation [21] ont été obtenus. L'extension de ces méthodes aux problèmes de minimisation et de calcul de valeurs propres (rencontrés par exemple lors des calculs *ab initio* de structure électronique) a fait l'objet d'un travail complémentaire[15].

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

6.2.1 Magnétohydrodynamique des métaux liquides

Participants : Jean-Frédéric Gerbeau, Claude Le Bris¹⁰, Tony Lelièvre¹¹.

Mots clés : surface libre, magnétohydrodynamique.

On s'intéresse à la simulation numérique de l'écoulement de deux fluides incompressibles traversés par un courant électrique en présence d'un champ magnétique. Les phénomènes physiques sont régis par les équations de la magnétohydrodynamique (MHD). Ces études, motivées par la fabrication industrielle de l'aluminium, sont menées en partenariat avec le CERMICS et la société Aluminium Pechiney.

Deux types de résultats nouveaux ont été obtenus cette année : d'une part des résultats théoriques concernant des propriétés de stabilité et de conservation des méthodes numériques utilisées, d'autre part des simulations numériques de phénomènes physiques complexes proches de situations industrielles.

Le problème considéré met en jeu deux fluides confinés dans une cuve et séparés par une interface libre. Nous avons adopté une formulation Arbitraire Lagrange Euler, le domaine de calcul suit donc la position de l'interface. De manière générale, des propriétés de conservation et de stabilité vraies sur un domaine fixe peuvent devenir fausses sur un domaine mobile. Dans notre cas, nous avons mis en évidence des transferts de masse parasites d'un fluide à l'autre quand certaines propriétés n'étaient pas satisfaites, parmi lesquelles une propriété de type « loi de conservation géométrique » (GCL). Cette même propriété est l'un des ingrédients qui nous permet d'établir la stabilité dans la norme de l'énergie de l'algorithme numérique.

¹⁰CERMICS, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées

¹¹CERMICS, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées

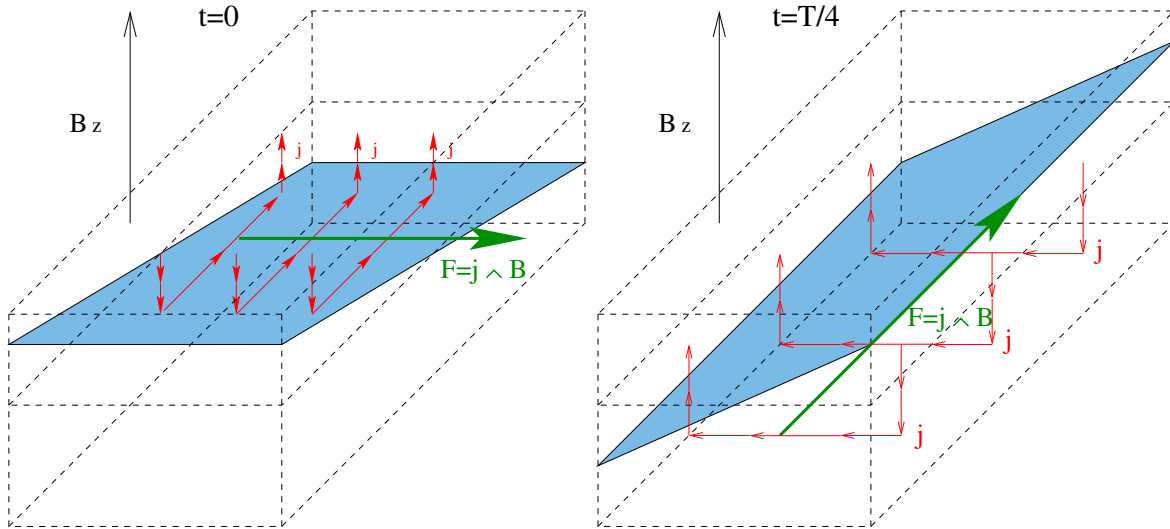


FIG. 8 – MAGNÉTOHYDRODYNAMIQUE. Le phénomène de « rolling ». La perturbation du courant électrique due à l'inclinaison de l'interface induit une force de qui provoque la rotation de l'interface.

Le phénomène physique pour lequel ont été obtenus les résultats de simulations les plus significatifs est appelé *metal pad rolling*. C'est un mécanisme considéré comme une source importante d'instabilités dans les cuves à électrolyse d'aluminium. Schématiquement, le principe est le suivant : des perturbations de l'interface séparant les deux fluides entraînent l'apparition de courants électriques horizontaux. Ces courants interagissent avec la composante verticale du champ magnétique et donnent naissance à une force électromagnétique qui provoque dans les fluides un mouvement de rotation et qui accentue la perturbation de l'interface (voir Figure 8).

Dans le passé, de nombreuses études réalisées sur l'électrolyse de l'aluminium ont expliqué *qualitativement* ce phénomène à l'aide de modèles linéarisés très simplifiés. Être capable de reproduire ce phénomène par simulation directe du système de la MHD non linéaire permet donc, d'une part, de valider notre approche par rapport à l'état de l'art, et d'autre part, d'accéder à des informations *quantitatives* importantes pour les applications pratiques.

6.2.2 Écoulements peu profonds à surface libre

Participants : Emmanuel Audusse, Marie-Odile Bristeau, Jean-Frédéric Gerbeau, Benoit Perthame, Chiara Simeoni.

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

Résumé : *Le système de Saint-Venant permet la simulation d'écoulements peu profonds à surface libre. On étudie la résolution de ce système par un schéma cinétique avec prise en compte de la bathymétrie, des conditions aux limites, du frottement,*

de la diffusion ou du transport d'un polluant.

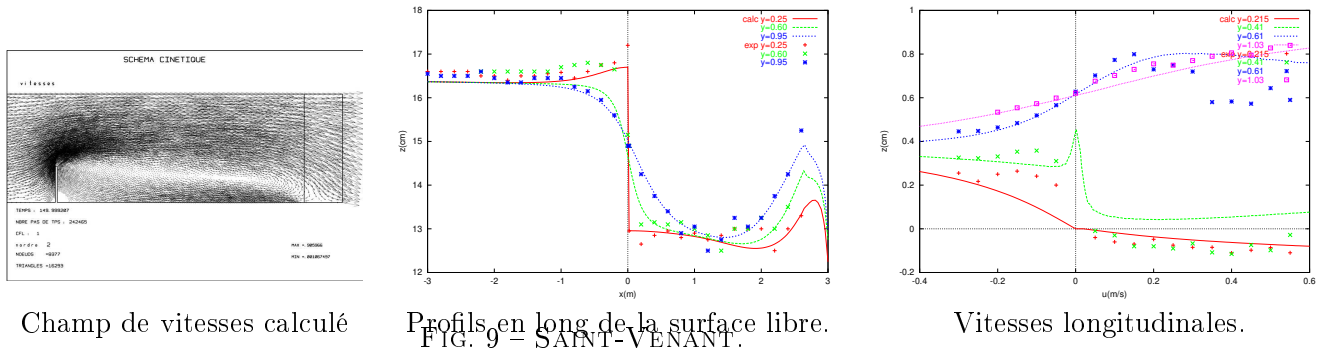


FIG. 9 – SAINT-VENANT.
Ecoulement dans un canal rectangulaire avec obstacle et seuil incliné à l'aval. Comparaison avec des mesures expérimentales.

Nous nous intéressons à la simulation d'écoulements peu profonds à surface libre tels que les rivières, les lacs, les régions côtières. Ceci concerne de nombreux problèmes liés à l'environnement : inondations, ruptures de barrage, transport et dispersion de polluants, réseaux d'irrigation, avalanches...

L'hypothèse d'écoulements « peu profonds » permet de simuler la plupart de ces phénomènes par les équations de Saint-Venant. Nous avons, d'une part, poursuivi l'étude de ces équations et le développement de méthodes numériques de résolution afin d'obtenir des codes (1D et 2D) robustes et efficaces, et d'autre part en fonction des partenaires et des applications concernées nous avons été conduits à la prise en compte de phénomènes « complémentaires » comme le transport de polluants [33] ou le frottement de Coulomb.

La méthode de résolution est basée sur un solveur cinétique appliqué sur des volumes finis.

Dans le cas monodimensionnel, nous avons développé une nouvelle approche pour la prise en compte du terme source modélisant la topographie du fond [25]. Dans l'interprétation cinétique du système, ce terme est traité comme une variation de potentiel aux interfaces des cellules. On démontre que le schéma déduit de cette discrétisation au niveau microscopique, préserve la positivité de la hauteur d'eau, l'état d'équilibre de l'eau au repos et satisfait une inégalité d'entropie.

On s'intéresse aussi à la formulation générale d'un schéma numérique pour des lois de conservation scalaires avec un terme source, s'appuyant sur une méthode de volumes finis sur un maillage non uniforme. On considère les problèmes de la définition rigoureuse d'un critère de consistance et de conditions suffisantes pour des solutions stationnaires et la démonstration, sous ces hypothèses, d'un résultat de convergence pour des termes sources « pas trop réguliers » est en cours.

Suite à l'étude menée en 2000, la prise en compte des conditions aux limites telle que les propriétés du schéma soient vérifiées aussi sur les noeuds frontières, a été intégrée dans le code 2D et les différents régimes (fluvial ou torrentiel) peuvent être imposés [41].

Afin d'améliorer la précision du solveur cinétique, on a appliqué une technique usuelle pour obtenir un schéma volumes finis d'ordre 2 (méthode de type MUSCL avec limiteur de Van

Albada) en la modifiant pour préserver la positivité de la hauteur d'eau et l'équilibre de l'eau au repos. Sous ces contraintes, on ne préserve pas, en théorie, l'ordre 2 mais on obtient, malgré tout, pour de nombreux essais numériques une solution plus précise qu'avec le solveur initial. Cette technique a aussi été appliquée à l'équation de transport d'un polluant.

En ce qui concerne ces problèmes de transport de polluants et de qualité de l'eau, une thèse démarre en Septembre 2001 en collaboration avec le LNHE/EDF. Le but de ce travail est de simuler l'évolution de polluants dans une rivière sur des temps « longs » avec prise en compte de différents phénomènes biologiques, sédimentation, érosion, etc...

Pour simuler au mieux, par les équations de Saint-Venant, les situations réelles, il est très important de prendre en compte les termes de diffusion, nous les avons actuellement intégrés avec un coefficient de viscosité constante.

Ces différentes améliorations du code 2D ont permis, dans le cadre de l'ACI « Prévention des Catastrophes Naturelles », des comparaisons avec des résultats expérimentaux obtenus au Laboratoire de Mécanique des Fluides de l'INSA Lyon. Il s'agit d'étudier l'effet d'un obstacle dans un canal horizontal de section rectangulaire et de préciser le domaine de validité du modèle de Saint-Venant.

Pour les écoulements d'eau, le frottement est habituellement modélisé par des lois de Chézy ou Manning-Strickler ([41]). Pour la simulation d'avalanches de débris ou de neige dense, on introduit un frottement de Coulomb qui doit permettre de simuler des états d'équilibre où la surface libre n'est pas horizontale. Une étude est en cours pour introduire ce frottement au niveau de l'interprétation cinétique du système et en déduire une discrétisation qui vérifie ces équilibres. Ce travail est motivé par une collaboration avec le Laboratoire de Modélisation et Tomographie Géophysique (IPGP, Paris 7).

Différentes animations représentant des solutions obtenues dans le cadre de ces études sur des problèmes à surface libre se trouvent sur <http://www-rocq.inria.fr/m3n>.

6.3 Applications bio-médicales

6.3.1 Filtration des globules blancs du sang

Participants : Jean-Frédéric Gerbeau, Jean-Luc Wautier ¹², Eric Cancès ¹³, Mohamed Belhadj ¹⁴.

Une collaboration a été amorcée avec l'Institut National de la Transfusion Sanguine (INTS) pour la modélisation d'écoulements sanguins extra-corporels.

Le sang destiné à être transfusé est filtré afin d'en retirer les globules blancs. Les résultats de cette filtration sont très loin d'être satisfaisants : avec les normes actuelles – pourtant insuffisamment restrictives – environ 15% des poches de sang doivent être éliminées. La modélisation mathématique de ce dispositif est quasiment inexistante. Bien que la filtration du sang mette en jeu des phénomènes microscopiques complexes (qui font d'ailleurs l'objet d'études à l'INTS) nous nous concentrerons, dans un premier temps, sur les aspects macroscopiques. Un premier modèle, très simple, a déjà été proposé. Des comparaisons pourront être faites avec des

¹²Institut National de la Transfusion Sanguine

¹³CERMICS, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées

¹⁴Ecole Polytechnique de Tunisie et projet M3N

expériences effectuées à l'INTS. Mohamed Belhadj commence sa thèse sur ce sujet en octobre 2001.

6.3.2 Biomécanique et simulateurs médicaux

Participant : Marc Thiriet.

Les travaux en biomécanique portent essentiellement sur l'élaboration de simulateurs médicaux des écoulements de biofluides air dans les voies respiratoires et sang dans le réseau macrocirculatoire. La première application est menée dans le cadre d'un projet RNTS 2001 « R-MOD », en collaboration avec le Centre de recherche CLAUDE DELORME¹⁵ de la compagnie Air Liquide, l'INSERM U 492 (Paris XII), l'INSERM U 494 (Paris VI), le projet ARTEMIS de l'INT et le CIERM du CHU Kremlin-Bicêtre (Paris XI). La seconde application est effectuée dans le cadre de l'ARC INRIA 2001-2002 « VITESV » avec les projets INRIA M3N, MACS, GAMMA, EPIDAURE et PRISME, le groupe « GRBM » du LAN, U.M.R. CNRS 7598 de l'UPMC et Franck Nicoud de l'Université de Montpellier II.

Ces projets portent sur la conception d'un démonstrateur d'aide à la décision en pneumologie, en cardiologie et en angiologie. Les principaux objectifs sont de préciser les propriétés des écoulements à l'état normal et pathologique et d'étudier le transport des particules convectées pour permettre de planifier la thérapeutique et d'évaluer le pronostic après traitement. La méthodologie est basée sur le couplage, transport d'espèces chimiques, interaction fluide-structure (particules ensemencées, parois des conduits), transition entre régimes d'écoulement, et utilisation de multimodèles 3D-1D-0D du fait du caractère instationnaire de l'écoulement et de la géométrie en réseau des bioconduits.

En outre, les recherches sur les paramètres hydrauliques (longueur d'entrée, contraintes de cisaillement à la paroi, ...) dans divers états de collabage de vaisseaux ont conduit à une série de publications. Il s'agit de fournir des données nécessaires à la conception de bancs expérimentaux et à l'interprétation des résultats aux spécialistes des cultures cellulaires sous flux.

6.4 Semi-conducteurs

Participants : Americo Marrocco, Jean-Christophe Rioual¹⁶.

Mots clés : algorithme numérique, élément fini, logiciel numérique, parallélisation, décomposition de domaine, semi-conducteur.

Résumé : *Les travaux liés à la simulation numérique des phénomènes de transport dans les matériaux semi-conducteurs ont conduit cette année à une amélioration significative du code Het_2d. L'implémentation de l'adaptation automatique de maillage combinée à celle de décomposition de domaine permet d'obtenir à présent des résultats plus précis en des temps de calcul nettement plus faibles. Des simulations avec des maillages de l'ordre de 800 000 éléments (qui n'étaient tout*

¹⁵<http://www.saclay-scientipole.org/fr/01saclay/10108air.htm>

¹⁶CERFACS

simplement pas envisageables auparavant) demandent environ 1h de CPU sur notre calculateur parallèle HP-V2250 (16 processeurs).

La première implémentation de la méthode de décomposition de domaine réalisée l'an dernier ne donnait pas entière satisfaction et l'utilisation de cette parallélisation était limitée. Les systèmes linéaires non symétriques, provenant des équations de continuité, étaient souvent « mal résolus » par *GMRES* et entraînaient une dégradation du comportement algorithmique en amont, dans la boucle de Newton et dans la boucle du schéma en temps artificiel.

Une normalisation des matrices et un meilleur préconditionneur pour *GMRES* semblent avoir résolu le problème et on peut à présent résoudre les problèmes de grande taille qui ne manquent pas de survenir lorsque l'on cherche à obtenir plus de précision sur la solution numérique (convergence en « h »). En premier lieu et à titre d'exemple, on peut donner les temps de calcul nécessaires à la résolution d'un problème statique, par exécution, soit de la version précédente du code utilisant (au plus bas niveau algorithmique) des méthodes directes (Cholesky et LU) soit de la version parallélisée (via la méthode de décomposition de domaine) utilisant des méthodes itératives (gradient conjugué et *GMRES* préconditionnés). Pour cet exemple le maillage (37356 éléments) n'est pas trop volumineux mais correspond à une « limite supérieure » de ce qui était « acceptable » pour un traitement utilisant les méthodes directes. Un fort raffinement de maillage nécessaire au voisinage de l'hétérojonction, conduit à un *profil* très volumineux pour les matrices et ce malgré une renumérotation des inconnues du problème.

Ainsi pour un calcul classique sur un transistor bipolaire à hétérojonction, consistant à appliquer un incrément de tension sur les contacts ohmiques (-0.2 Volt sur l'émetteur et -0.1 Volt sur la base), et à calculer le nouvel état d'équilibre, le gain en temps calcul a été assez spectaculaire (voir tableau ci-dessous).

Nb éléments	Temps CPU sur HP-V2250	
	Méthodes Directes (1 proc.)	Decomp. Domaine (16 proc.)
37 356	23h 29mn	< 2mn

Cette version parallélisée du code ouvre donc de nouvelles perspectives

- par la combinaison de l'adaptation de maillages et de la méthode de décomposition de domaine on a pu obtenir des résultats de simulation plus précis, les grandeurs physiques intéressantes ne dépendant pratiquement plus du maillage (même les valeurs des courants de porteurs minoritaires, qui sont les plus sensibles à la discrétisation, sont stabilisées). Un paramètre (*ERR*) dans le processus d'adaptation nous permet de demander une précision plus ou moins grande sur la solution et jouer ainsi directement sur la taille du maillage généré. On a pu ainsi calculer la solution sur des maillages de l'ordre de 800 000 éléments en environ une heure de CPUs (le nombre d'inconnues du problème non linéaire traité est alors approximativement 6 millions).

Une telle étape comprend,

- la *génération du nouveau maillage (global) par le module BAMG selon l'estimateur d'erreur*
- *l'interpolation de la solution précédente sur le nouveau maillage*
- *la découpe du maillage en N sous-domaines par le module DECOMP (Modulef)*
- *le « splitting » de la solution interpolée sur les sous-domaines pour servir de solutions*

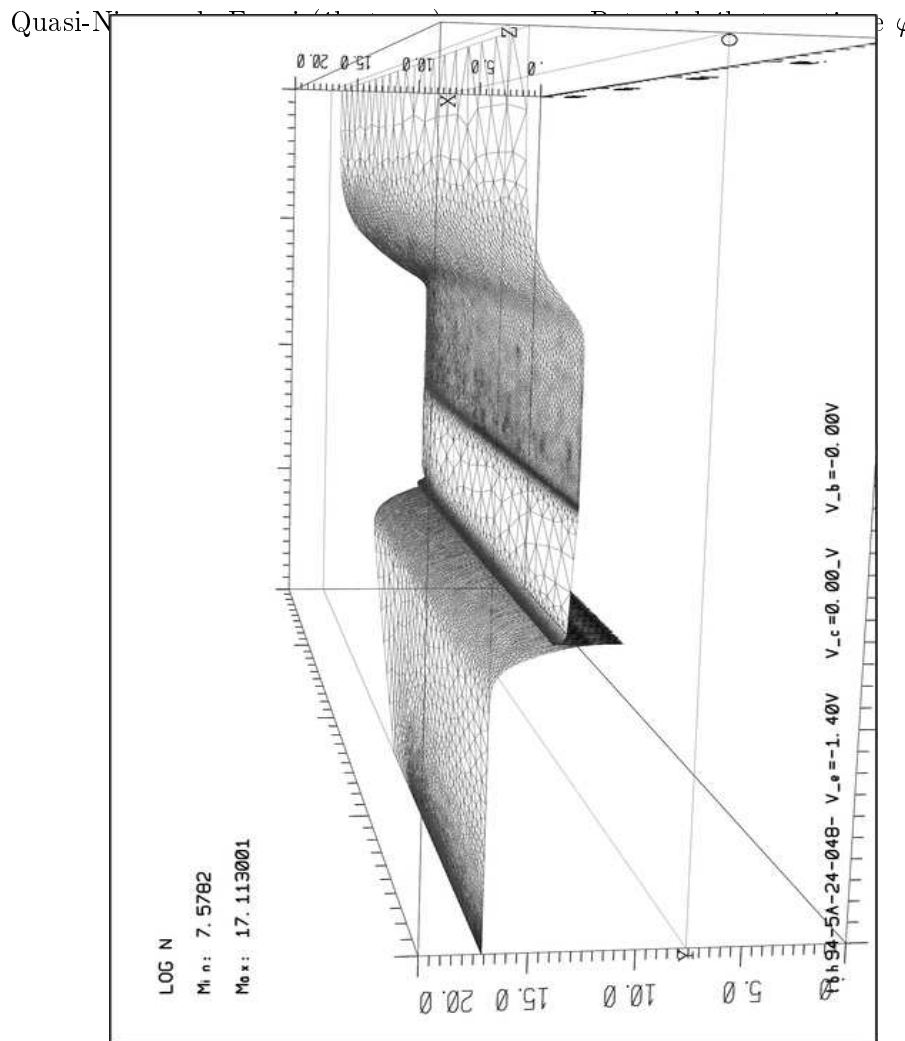
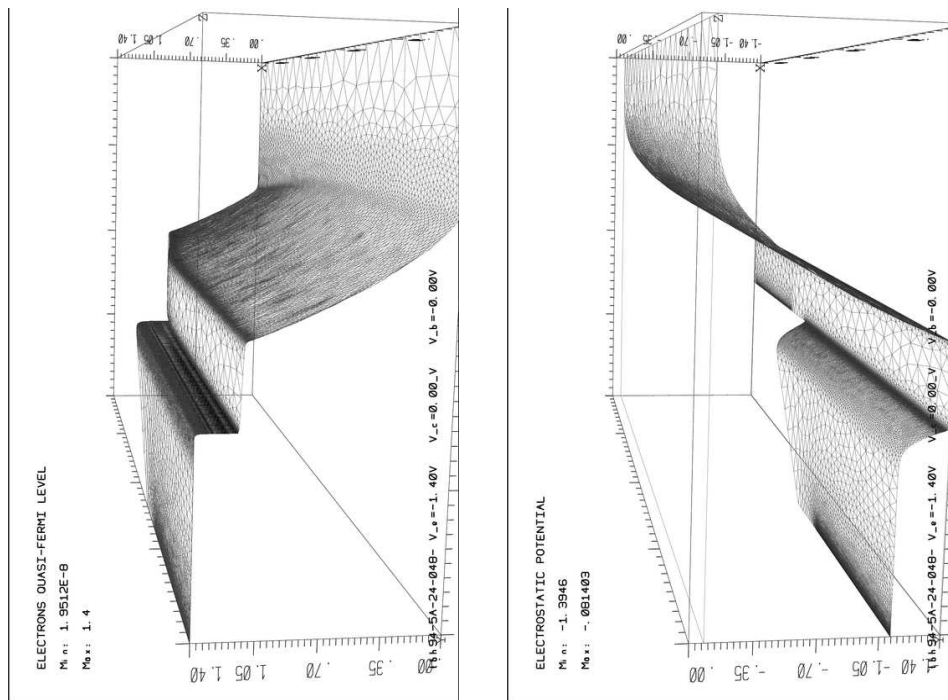


FIG. 10 – SEMI-CONDUCTEURS. Simulation d'un transistor bipolaire à hétérojonction. Le maillage comporte 328 252 éléments. Les valeurs des différents courants traversant la structure sont « stabilisés » (raffinement de maillage non nécessaire).

- initiales à la méthode de décomposition de domaine*
- *le préprocessing sur les sous-domaines pour établir les connectivités et voisinages*
- *la résolution proprement dite en parallèle sur N processeurs (décomposition de domaine)*
- *l'injection des solutions « locales » sur le maillage global*
- *le stockage des informations (pour exploitation et pour la poursuite des calculs)*

La figure (10) présente une partie de la solution d'un problème de dérive-diffusion pour un transistor bipolaire à hétérojonction. La polarisation correspond à un point de fonctionnement normal-direct. Le maillage (adapté), qui correspond à une approche éléments finis mixtes 2D, est composé de 328 252 triangles et est associé au paramètre d'erreur $ERR = 0.0025$. La figure (10-(a)) représente le quasi-niveau de Fermi des électrons et l'on peut voir la forte variation de cette fonction au niveau de l'hétérojonction (couche interne) entraînant une forte concentration de triangles au voisinage de l'interface. La fonction représentant le potentiel électrostatique (φ) donnée en figure (10-(b)) est moins méchante. Enfin la figure (10-(c)) donne la distribution de la densité d'électrons (libres) dans le dispositif. On distingue aisément la discontinuité de cette densité à l'hétérojonction. Le tableau suivant donne les valeurs des différents courants d'électrons (n) et de trous (p) à travers les différents contacts (Emetteur, Collecteur, Base) pour l'exemple choisi; on donne aussi les valeurs calculées pour un paramètre d'erreur deux fois plus petit $ERR = 0.00125$ conduisant à un maillage de 778 753 triangles (les variations sur les valeurs des différents courants sont très faibles).

ERR	Nb Elem.	$I_n Em$	$I_p Em$	$I_n Collect.$	$I_p Collect.$	$I_n Base$	$I_p Base$
0.0025	328 252	$3.80 \cdot 10^{-3}$	$3.90 \cdot 10^{-5}$	$-3.68 \cdot 10^{-3}$	$-4.29 \cdot 10^{-24}$	$-8.17 \cdot 10^{-5}$	$-6.94 \cdot 10^{-5}$
0.00125	778 753	$3.78 \cdot 10^{-3}$	$3.90 \cdot 10^{-5}$	$-3.66 \cdot 10^{-3}$	$-4.17 \cdot 10^{-24}$	$-8.18 \cdot 10^{-5}$	$-6.93 \cdot 10^{-5}$

- le couplage éléments finis 1D et 2D qui devrait réduire le nombre nécessaire d'éléments 2D pour une précision des résultats donnée -et devrait donc encore réduire le temps CPU pour la simulation- va pouvoir être validé. On pourra analyser l'influence de l'épaisseur de la couche 1D au niveau de l'hétérojonction ainsi que de la discrétisation dans celle-ci sur le résultat global. Ces résultats seront exposés dans un rapport de recherche [44].
- l'extension de la parallélisation pour la simulation mettant en œuvre le schéma totalement implicite (nécessaire pour suivre les phénomènes transitoires mais impliquant le traitement numérique de systèmes de plus grande taille) devrait aussi être intéressante. Les dispositifs nécessitant les modèles de type *Energy-Transport* devraient pouvoir être traités plus efficacement.
- la simulation de dispositifs dont la géométrie est « très aplatie » mais néanmoins constitués par un empilement de couches de différente nature et nécessitant un maillage « initial » de grande taille pourrait être envisagée maintenant.
- ...

6.5 Dans le domaine du microscopique et du cinétique

6.5.1 Un modèle BGK consistant pour les mélanges de gaz

Participants : Pierre Andries, Benoit Perthame.

Mots clés : équation de Boltzmann, modèle BGK, mélange de gaz.

Dans une collaboration avec K. Aoki (Université de Kyoto), nous considérons un mélange de gaz et nous introduisons un opérateur de collision de type relaxation (BGK) qui permet de retrouver plusieurs propriétés physiques fondamentales de l'équation de Boltzmann.

En fait, plusieurs modèles ont été proposés mais aucun ne satisfait les propriétés physiques suivantes : positivité de la fonction de distribution, coefficients d'échange corrects, inégalité d'entropie, principe d'indifférentiabilité. Nous montrons que toutes ces propriétés sont satisfaites pour notre opérateur et nous dérivons également l'équation de Navier-Stokes limite par un développement de Chapman-Enskog. Voir le rapport INRIA n°4230.

6.5.2 Ecoulements gazeux en matériaux poreux, loi de Darcy généralisée

Participants : Jean-François Bourgat, Benoit Perthame.

Mots clés : équation de Boltzmann, milieux poreux, loi de Darcy.

Résumé : *L'équation de Boltzmann permet de modéliser les écoulements de gaz en milieu poreux et est particulièrement adaptée au cas où le libre parcours moyen est de l'ordre de la porosité. Son utilisation nous a permis d'obtenir une validation numérique de la loi de Darcy généralisée qui prend en compte, à la fois, les gradients de pression et de température.*

On considère un écoulement de gaz parfait à travers une paroi poreuse constituée par des cylindres répartis périodiquement. Dans le cas d'une période de l'ordre du libre parcours moyen du gaz, nous pouvons calculer cet écoulement en résolvant l'équation de Boltzmann.

Dans le cadre d'une collaboration avec le CEA-CESTA, l'Université de Bordeaux (MAB) et l'ENS (DMA) ayant pour but la mise au point d'un modèle macroscopique homogénéisé sous forme d'une loi de Darcy généralisée, nous avons fait des calculs numériques directs en résolvant l'équation de Boltzmann afin de valider cette loi.

A partir de ces résultats nous avons calculé les moyennes dans chaque période de quantités telles que le débit, la masse volumique, la température, les gradients de masse volumique et de température dans la direction normale à la paroi.

Ces moyennes nous ont permis de vérifier que le débit reste constant à travers la paroi et qu'il peut s'exprimer en fonction des valeurs moyennes de la masse volumique, de la température et de leurs gradients via deux coefficients ne dépendant que du nombre de Knudsen poreux (rapport entre le libre parcours moyen et la taille de la porosité) et de la géométrie du milieu solide dans chaque période.

6.5.3 Diffusion gazeuse à très faible pression

Participant : Jean-François Bourgat.

Mots clés : équation de Boltzmann, diffusion.

En collaboration avec la société OXALIS-LASER nous étudions la diffusion d'un gaz injecté sous très faible pression dans un dispositif occupé par un autre gaz plus dense mais aussi sous faible pression.

Les libre parcours moyens considérés étant grands, l'utilisation de l'équation de Boltzmann est justifiée. Une première étape a consisté à adapter notre logiciel conçu pour un gaz monoespèce au cas de deux espèces dont la plus dense est supposée fixe.

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 établi pour une durée de trois ans. Celui-ci s'est achevé en septembre 2001. Des pales de ventilateurs de refroidissement moteur ont été calculées de façon à optimiser l'écoulement de l'air et à augmenter ainsi le rendement de ce ventilateur. Les simulations numériques ont été réalisées 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 à travers l'ENS (DMA).

7.3 Action Équations de Saint-Venant et écoulements en eaux peu profondes

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

Cette étude fait l'objet d'un contrat avec le LNHE de l'EDF. Les améliorations du schéma cinétique (conditions limites, ordre 2, diffusion) ont été intégrées dans le code TELEMACH-2D.

7.4 Action Aluminium

Participants : Jean-Frédéric Gerbeau, Claude Le Bris¹⁷.

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.

¹⁷CERMICS, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées

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.

Le projet collabore avec des Instituts de Recherche : le Centre National de Transfusion Sanguine (filtration du sang), en particulier avec une thèse en cours, le Laboratoire de Modélisation et Tomographie Géophysique (IPGP, Paris 7).

Le projet collabore aussi avec le CERMICS autour de problèmes d'écoulements sanguins et de magnéto-hydrodynamique.

Des relations étroites sont établies avec le Département de Mathématiques de l'ENS autour des écoulements raréfiés, de modèles bactériologiques et des écoulements à frontière mobile.

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 au groupement de recherche (GdR) : optimisation. Ce GdR a un fort pôle d'intérêt Montpellier. Le projet a des relations privilégiées avec l'Université de Montpellier, des collaborations avec l'UR de Rennes et celle de Nancy. Le projet collabore avec le CERFACS sur le thème des méthodes de décomposition de domaine.

8.3 Relations bilatérales internationales

8.3.1 Europe

Autour des équations de Saint Venant et méthodes numériques pour les systèmes hyperboliques, nous avons des collaborations avec l'Université d'Heraklion (Grèce). Des collaborations sont aussi établies avec les écoles polytechniques de Lausanne et de Milan pour la simulation de fluides visqueux avec frontières mobiles.

8.3.2 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 débuter.

8.3.3 Amériques

Des relations sont établies avec différents centres : Laval (Fortin), Ottawa (Bourgault), TICAM (Weeler), Iowa State University (Tidriri).

Plusieurs collaborations ont abouti à des publications ou des rapports de recherche (F.Valentin, LNCC). Des contacts sont établis avec l'IMPA (H.Frid).

Collaboration avec le département de Chimie de l'université de Princeton sur le thème de contrôle en chimie quantique.

8.3.4 Asie

Une collaboration sur la modélisation de gaz dilués multi-espèces a été développée avec K.Aoki (Université de Kyoto)

8.4 Accueil de chercheurs étrangers

- T. Katsouanis, Heraklion Grèce, (2 semaines).
- Y. Bourgault, Université d'Ottawa, (1 semaine).
- F. Saleri, Politecnico di Milano (1 semaine).
- M.D. Tidriri, Iowa State University (3 semaines).

9 Diffusion de résultats

9.1 Animation de la communauté scientifique

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

9.2 Actions d'enseignement

Introduction aux équations cinétiques, cours de DEA, université Paris 6 (B. Perthame).

Biomécanique, cours Ecole Doctorale de Mathématiques, Paris Centre , (M. Thiriet).

Calcul scientifique et Analyse, cours à l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, (J.F. Gerbeau).

Méthodes numériques en mécanique de fluides et MHD, cours de DEA, université Paris-Dauphine (J.F. Gerbeau)

9.3 Autres enseignements

- Méthodes numériques en Mécanique de fluides, Stage F03, ENSTA, du 3-7 décembre 2001, par A. Marrocco.

9.4 Participation à des colloques

Des membres de l'équipe ont participé à des congrès, à des conférences et *workshops* :

- Workshop Renault sur le Contrôle des Ecoulements, Guyancourt, novembre 2000 (B. Mohammadi)
- 13^{eme} Séminaire de Mécanique des Fluides Numérique du CEA, janvier 2001 (J.F. Gerbeau)
- Séminaire du Laboratoire d'Analyse Numérique, Paris 6, janvier 2001 (M. Thiriet)
- Séminaire de l'Ecole Polytechnique de Tunis, avril 2001 (J.F. Gerbeau)
- Séminaire du LNCC, Brésil, mai 2001 (J.F. Gerbeau)
- Séminaire du CERFACS, mai 2001, (M. Thiriet)
- Séminaire du LadHyX, Ecole Polytechnique, mai 2001, (M. Thiriet)
- Séminaire du LNCC, Brésil, mai 2001, (M. Thiriet)
- Les journées de Metz, mai 2001, (M. Thiriet)
- Congrès de la SMAI sur le « Modèles de turbulence et lois de paroi pour la mécanique des fluides », Pompadour, mai 2001 (B. Mohammadi)
- Séminaire « Equations aux Dérivées Partielles et Applications », IECN, Nancy, juin 2001 (M.O. Bristeau)
- Workshop on Flow Problems, Damstadt University of Technology, juin 2001 (C. Simeoni)
- First MIT Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics, Boston, juin 2001 (J.F. Gerbeau)
- CEMRACS, Marseille, juillet-août 2001 (G. Barrenechea, J.F. Gerbeau)
- Euroconférence TMR, Asymptotic Methods and Applications in Kinetic and Quantum-Kinetic Theory, Grenade, septembre 2001 (C. Simeoni)
- Journée thématique « Culture cellulaire sous flux », Marseille, septembre 2001, (M. Thiriet)
- Conférence : Cold Molecules 2001 (*Coherent Control and Cold Molecules*), Gif-sur-Yvette, octobre 2001 (G. Turinici)
- Séminaire du CRM, Université de Montréal, novembre 2001, (M. Thiriet)
- Ecole CEA-EDF-INRIA, Problèmes non linéaires : du micro au méso, Rocquencourt, novembre 2001 (G. Turinici)
- Second International Workshop on Optimal Control of Quantum Dynamics, Ringberg Castle, Tegernsee (Allemagne), décembre 2001 (G. Turinici)
- Séminaire sur le Méthodes numériques en calcul de structures électroniques, Université de Tübingen, décembre 2001 (G. Turinici)

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 inclu-

- ding 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] P. ANDRIES, *Etude d'équations modèles pour la simulation d'écoulements raréfiés*, thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, octobre 2001.
- [12] M. STANCIU, *Gradient Incomplet pour l'Optimisation de Formes en Aérodynamique. Applications aux Turbomachines*, thèse de doctorat, Université de Montpellier II, octobre 2001.

Articles et chapitres de livre

- [13] P. ANDRIES, J.-F. BOURGAT, P. LE TALLEC, B. PERTHAME, « Numerical comparison between the Boltzmann and ES-BGK models for rarefied gases », *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, à paraître.
- [14] P. ANDRIES, P. LE TALLEC, J. PERLAT, B. PERTHAME, « The Gaussian BGK model of Boltzmann equation with small Prandtl numbers », *European Journal of Mechanics : B Fluids*, septembre 2000, p. 813–830.
- [15] E. CANCÈS, C. LEBRIS, Y. MADAY, G. TURINICI, « Towards reduced basis approaches in ab initio electronic structure computations », *Journal of Scientific Computing*, à paraître en 2002.
- [16] A. COHEN, B. PERTHAME, « Optimal approximation by particles and pseudo particles methods », *SIAM J. Math. Anal.* 32, 3, 2001, p. 616–636.
- [17] 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 », *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, à paraître.
- [18] J.-F. GERBEAU, B. PERTHAME, « Derivation of viscous Saint-Venant system for laminar shallow water ; numerical validation », *Discrete and Continuous Dynamical Systems : Series B 1*, 1, 2001, p. 89–102.
- [19] J.-F. GERBEAU, « A stabilized finite element method for the incompressible magnetohydrodynamic equations », *Numerische Mathematik 87*, 1, Novembre 2000, p. 83–111.

- [20] B. LI, G. TURINICI, V. RAMAKHRISHNA, H. RABITZ, « Optimal Dynamic Discrimination of Similar Molecules Through Quantum Learning Control », *Journal of Chemical Physics*, à paraître.
- [21] Y. MADAY, A. PATERA, , G. TURINICI, « A Priori Convergence Theory for Reduced-Basis Approximations of Single-Parameter Elliptic Partial Differential Equations », *Journal of Scientific Computing*, soumis (sur invitation).
- [22] B. MOHAMMADI, G. PUIGT, « Generalized Wall Functions for Rough Walls using Data Assimilation », *IJCFD*, à paraître.
- [23] B. MOHAMMADI, G. PUIGT, « Mathematical and Numerical Analysis of an Alternative Well-Posed Two-Layer Turbulence Model », *M2AN*, à paraître.
- [24] S. NAILI, M. THIRIET, C. RIBREAU, « Tridimensional flow in uniformly collapsed tubes : wall shear stress », *EPJ-AP*, (accepté),à paraître.
- [25] B. PERTHAME, C. SIMEONI, « A kinetic scheme for the Saint-Venant system with a source term », *Calcolo*, à paraître,(Rapport de recherche ENS/DMA-01-13).
- [26] M. STANCIU, B. MOHAMMADI, S. MOREAU, « Low Complexity Models to Improve Incomplete Sensitivities for Shape Optimization », *IJCFD*, à paraître.
- [27] M. THIRIET, P. BRUGIÈRES, J. BITTOUN, A. GASTON, « Computational Flow Models in Cerebral Congenital Aneurisms : I. steady flow », *Méca. Ind. 2*, 2001, p. 107–118.
- [28] M. THIRIET, B. MAURY, Y. MADAY, « Modélisations des écoulements physiologiques basées sur l'imagerie médicale », *Matapli, SMAI 64*, 2001, p. 47–58.
- [29] M. THIRIET, S. NAILI, A. LANGLET, C. RIBREAU, *Biofluid Methods in Vascular and Pulmonary Systems*, Leondes C., 2001, ch. Flow in thin-walled collapsible tubes, p. 10–1 – 10–43.
- [30] M. THIRIET, S. NAILI, C. RIBREAU, « Entry length and wall shear stress in uniformly collapsed veins », *Computer Modeling in Engineering & Sciences*, (soumis, sur invitation),à paraître.
- [31] M. THIRIET, C. RIBREAU, *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, Gordon and Breach, 2001, ch. Computational values of entry lengths of laminar flow in uniformly collapsed veins, p. 731–736.
- [32] G. TURINICI, V. RAMAKHRISHNA, B. LI, H. RABITZ, « Optimal Discrimination of Multiple Quantum Systems : Controllability Analysis », *Physical Review A*, à paraître.

Communications à des congrès, colloques, etc.

- [33] M. O. BRISTEAU, B. PERTHAME, « Transport of Pollutant in Shallow Water using Kinetic schemes », in : *ESAIM Proceedings 10, CEMRACS 1999*, p. 9–21, 2001, <http://www.emath.fr/Maths/Proc/Vol.10>.
- [34] J.-F. GERBEAU, « Numerical simulations in magnetohydrodynamics with free surfaces », in : *Proceedings of the First MIT Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics, 2*, Elsevier, p. 1184–1187, 2001.
- [35] M. THIRIET, S. NAILI, C. RIBREAU, « Contraintes de cisaillement à la paroi exercées par un fluide en écoulement dans des vaisseaux uniformément collabés », *Cultures cellulaires sous flux*, 2001.
- [36] M. THIRIET, « Le sang, un fluide newtonien ou rhéofluidifiant », Journées de Metz 2001 “Écoulements de fluides non newtoniens”, 2001.

Rapports de recherche et publications internes

- [37] P. ANDRIES, K. AOKI, B. PERTHAME, « A consistent BGK-type model for gas mixtures », *rapport de recherche n°4230*, Inria, juillet 2001, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-4230.html>.
- [38] P. ANDRIES, J.-F. BOURGAT, B. PERTHAME, « Amélioration des modèles de relaxation pour le calcul des écoulements raréfiés et transitionnels », *rapport de contrat cesta*, Inria, février 2001.
- [39] G. BARRENECHEA, P. LE TALLEC, F. VALENTIN, « New Wall Laws for Unsteady Incompressible Navier-Stokes Equations over Rough Domains », *rapport de recherche*, Inria, à paraître.
- [40] G. BARRENECHEA, F. VALENTIN, « An unusual stabilized finite element method for a generalized Stokes problem », *rapport de recherche n°4173*, Inria, avril 2001, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-4173.html>.
- [41] M. O. BRISTEAU, B. COUSSIN, « Boundary Conditions for the Shallow Water Equations solved by Kinetic Schemes », *Rapport de recherche*, INRIA, à paraître.
- [42] L. FORMAGGIA, J.-F. GERBEAU, F. NOBILE, A. QUARTERONI, « Numerical treatment of defective boundary conditions for Navier-Stokes equations », *Rapport de recherche n°RR-4093*, INRIA, janvier 2001, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-4093.html>.
- [43] J.-F. GERBEAU, C. LE BRIS, T. LELIÈVRE, « Simulations of MHD flows with moving interfaces », *Rapport de recherche n°RR-4277*, Inria, octobre 2001, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-4277.html>.
- [44] A. MARROCCO, « Simulations numériques de dispositifs électroniques via éléments finis mixtes, adaptation de maillages et décomposition de domaine », *rapport de recherche*, Inria, à paraître.