
Projet M3N

Multi-Modèles et Méthodes Numériques

Localisation : *Rocquencourt*

Mots-clés : algorithme numérique, base de données, calcul scientifique, calcul d'erreur, calcul des structures, contrôle, couplage, décomposition de domaine, électromagnétisme, élément fini, équation de Boltzmann, équation de Maxwell, équation de Navier-Stokes, hydrologie, logiciel numérique, loi de paroi, maillage adaptatif, mécanique des fluides, modélisation, optimisation de formes, semiconducteur, turbulence.

1 Composition de l'équipe

Responsable scientifique

Patrick Le Tallec, professeur, université de Paris Dauphine, détaché à l'Inria

Responsable permanent

Americo Marrocco, DR, Inria

Secrétaire

Christiane Demars, AI, Inria

Conseillers scientifiques

Jacques Périaux, Dassault-Aviation
Benoit Perthame, professeur, université de Paris 6

Personnel Inria

Jean-François Bourgat, DR
Marie-Odile Bristeau, DR
Fadi El Dabaghi, CR, détaché à mi-temps aux RSI
Marie-Hélène Lallemand, CR
Bijan Mohammadi, CR

Ingénieur expert

Claire Martin, octobre-décembre 1996

Chercheur extérieur

Marc Thiriet, CR CNRS, en disponibilité à l'Inria

Chercheurs invités

José Herskovits, Professeur, Univ. Fédérale de Rio de Janeiro, juin et septembre 1996
 Yuri-A. Kuznetsov, Professeur, Institute of Numerical Mathematics Moscou, septembre-décembre 1996
 Florian Potra, Professeur, Univ. of Iowa USA, avril-juillet 1996

Chercheurs doctorants

Paul Ayoub, boursier Inria
 Nicolas Devaux, boursier Cifre, PSA, jusqu'en juillet 1996
 Emmanuel Laporte, Ingénieur de l'Armement
 Philippe Montarnal, boursier Inria
 Jean Mouro, boursier Cifre, PSA, jusqu'en septembre 1996
 Jean-Philippe Perlat, boursier MESR
 Frédéric Valentin, boursier Gouv. Brésilien

Stagiaires

Ibrahim Bless-Ranero, Fluide-structure, Espagne, 4 mois
 Amna Chatti, Hydrologie, Tunisie, 6 mois
 André Duarte, Optimisation, Brésil, 2 mois
 Gorazd Medic, Turbulence, Croatie, 6 mois
 Tuomo Rossi, Contrôlabilité, Finlande, 3 mois

2 Présentation du projet

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.

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,
- savoir valider les modèles numériques retenus, et vérifier leur compatibilité,
- savoir les intégrer dans une boucle d'optimisation et de contrôle,
- savoir les utiliser de manière couplée et consistante.

Dans ce cadre, le projet M3N se concentre sur les domaines proches de la Mécanique des Fluides ou des Semi-Conducteurs et travaille avec des partenaires industriels sur des projets précis (étude d'applications ou développement d'outils). Le projet a donc regroupé ses activités de modélisation, d'approximation par éléments finis, et de développement de méthodes numériques autour de cinq actions pilotes :

1. Solveurs intégrés en Mécanique des Fluides.
2. Couplage Fluide-Structure en Grands Déplacements.

3. Couplage de Modèles à Echelle Multiple (turbulence, lois de paroi, modélisation cinétique en dynamique des gaz).
4. Modélisation des semi-conducteurs.
5. Optimisation et Contrôle.

3 Actions de recherche

3.1 Solveurs intégrés

Mots-clés : algorithmes numériques, base de données, calcul d'erreur, électromagnétisme, élément fini, hydrologie, logiciel numérique, maillage adaptatif, mécanique des fluides.

Les différents modèles sélectionnés pour une application donnée doivent pouvoir être développés et validés au niveau numérique. Cette validation est très importante dans un contexte multidisciplinaire où il faut constamment comparer différents modèles ou différentes conceptions en garantissant que cette comparaison n'est pas faussée par les incertitudes du calcul numérique.

3.1.1 Problèmes d'Hydrologie

Participants : Fadi El Dabaghi, Amna Chatti

ESIMEAU Système Intégré pour la Modélisation de Ressources en Eau

L'objectif principal de cette action transversale est de développer une infrastructure ouverte pour la réalisation d'un système intégré commun de simulation numérique, de traitement d'image et de gestion de données pour la prédiction et l'évaluation de phénomènes hydrauliques. ESIMEAU permettra un suivi et une gestion plus efficaces des ressources en eau (en particulier des zones méditerranéennes semi-arides). Ce projet, en cours de montage, regroupe de nombreux partenaires publics en France, Grèce, Algérie, Liban, Maroc et Tunisie.

La modélisation numérique sera faite à partir des équations d'Euler et de Navier-Stokes et s'appuie sur la décomposition de Helmholtz d'un champ de vecteur dans $L^2(\Omega)$ ($u = \nabla\phi + v$, $v = \nabla \times \psi$). La résolution numérique de ces équations dans un environnement éléments finis non structurés repose sur un algorithme de correction rotationnelle aux écoulements potentiels, combinée à la méthode des caractéristiques pour la convection.

La poursuite de cet axe de recherche se fait dans les directions suivantes:

1. Dans un cadre variationnel naturel $\psi \in H^1(\Omega)$ et $\omega \in H^{-1}(\Delta, \Omega)$, on propose une nouvelle formulation mixte d'un problème de Bilaplacien avec une méthode d'approximation optimale par éléments finis P^k de classe C^0 conduisant à une estimation d'erreur en $O(h^k)$ pour $k \geq 1$.
2. Etude de modélisation de problèmes de frontières libres et notamment des conditions aux limites absorbantes pour un écoulement rotationnel torrentiel ou fluvial.
3. Modélisation et résolution numérique des équations de Navier-Stokes incompressibles 2D/3D par une formulation en potentiel et vecteur vitesse ($\phi - v$) (décomposition de Helmholtz).

3.1.2 Solveur électromagnétique

Participants : Marie-Odile Bristeau, Paul Ayoub

Devant la très grande taille des problèmes à résoudre en électromagnétisme, il est nécessaire de pouvoir disposer dans ces domaines de solveurs tridimensionnels flexibles et rapides. L'action entreprise consiste à développer un solveur Maxwell 3D (instationnaire ou harmonique) parallèle, avec l'aide du projet ONDES, utilisant une approximation par éléments finis $P1$ conformes, suivant l'approche proposée par Raviart et al. La discrétisation temporelle est assurée par un schéma aux Différences Finies, et une méthode des Eléments Finis stabilisée $((P_1)^3/P_1)$ est utilisée pour la discrétisation spatiale. Le code, écrit en C++, a été validé sur un problème de diffraction électromagnétique autour d'une sphère conductrice.

3.1.3 Calcul d'erreurs

Participants : Marie-Hélène Lallemand, Bijan Mohammadi

Un élément indispensable dans la simulation numérique est de disposer de calculs d'erreurs a posteriori, permettant de valider un résultat existant, ou si nécessaire d'adapter le maillage utilisé. Les travaux récents du projet Gamma ont permis de développer des maillages adaptatifs et parallèles pilotés par une métrique locale. Il faut maintenant savoir relier ce choix de métrique à un calcul d'erreur fiable.

Notre contribution, en collaboration avec le projet Gamma, consiste en une meilleure définition de la métrique utilisée par les maillages en adaptation de maillages. En effet, la métrique basée sur l'équidistribution de l'erreur d'interpolation d'une seule variable s'est montrée insuffisante pour les problèmes à plusieurs inconnues, pour l'étude des couches limites et pour la capture de phénomènes multi-échelle. Nous avons donc introduit trois nouveaux ingrédients pour une meilleure prise en compte de ces situations:

- 1) l'utilisation d'une intersection simplifiée des métriques des différentes variables d'un système,
- 2) l'introduction d'une condition aux limites mixte pour les valeurs propres de la métrique à la paroi du corps, ce qui permet une prescription de la discrétisation par l'utilisateur suivant la physique du phénomène étudié,
- 3) l'utilisation d'un estimateur d'erreur en valeur relative, ce qui permet de capturer les phénomènes dans les zones où les variables sont faibles.

Ce dernier point nous a aussi permis d'éviter les problèmes de dimensionnement et de mise à l'échelle rencontrés dans le calcul des intersections de métriques.

Cette stratégie a d'abord été appliquée au calcul d'écoulements turbulents sur maillages non structurés (Figure 1).

Elle a été ensuite adaptée au cadre du projet européen MICA. Ce projet HPCN a pour finalité de mettre en place un réseau d'expertise en CFD auprès des PME en Europe. Dans ce cadre général, une des tâches de l'Inria est de mettre en place, au sein du code Phoenix, un adaptateur 3-D de maillages cartésiens structurés. Le produit développé est un logiciel autonome d'adaptation de maillages qui a pour données d'entrée, un maillage initial et une solution calculée sur ce premier maillage et pour données de sortie, le maillage adapté et la valeur de la solution après interpolation sur ce nouveau maillage.

3.1.4 Bases de données

Participant : Fadi El Dabaghi

La dernière étape de validation de codes se fait par comparaison des différentes approches numériques sur des cas tests significatifs dans le cadre de workshops et de bases de données. L'année 96 a vu le lancement officiel d'une base de données européenne en électromagnétisme (EEDB: European Electromagnetic Data Base), mise en place par le projet, en collaboration avec le projet SEMIR (Sophia)

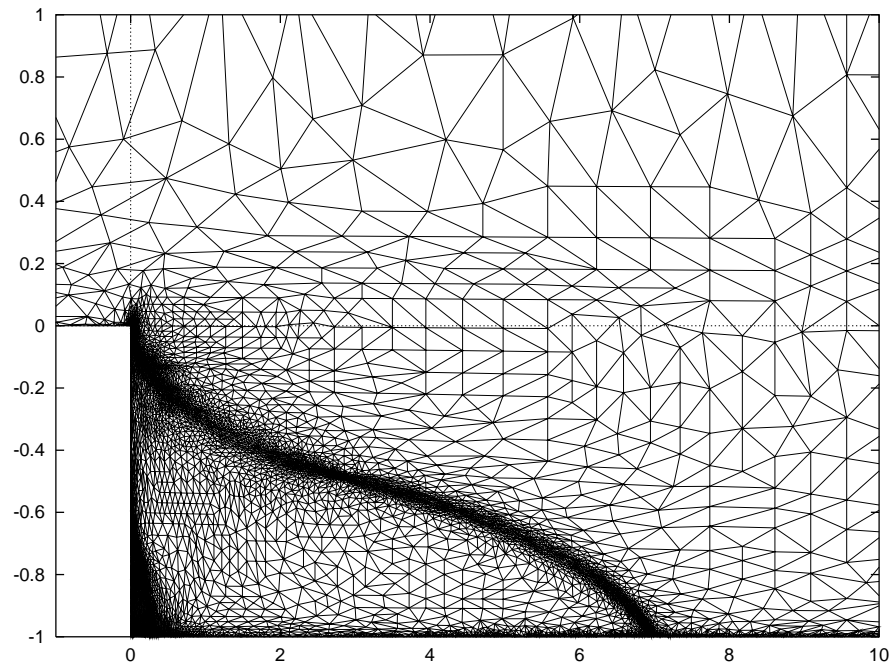


Figure 1: Adaptation de maillages pour écoulements turbulents.

et Dassault Aviation, et avec le soutien de la DRET. Cette base est constituée des résultats obtenus à l'occasion des derniers workshops internationaux sur le sujet, et peut être consultée à distance et de manière continue par ses adhérents (adresse provisoire: <http://clap.inria.fr:8000/EEDB/EEDB.html>).

3.2 Couplage Fluide-Structure

Participants : Patrick Le Tallec, Marc Thiriet, Jean Mouro, Ibrahim Bless-Ranero, Marina Vidrascu (avant-projet Mostra)

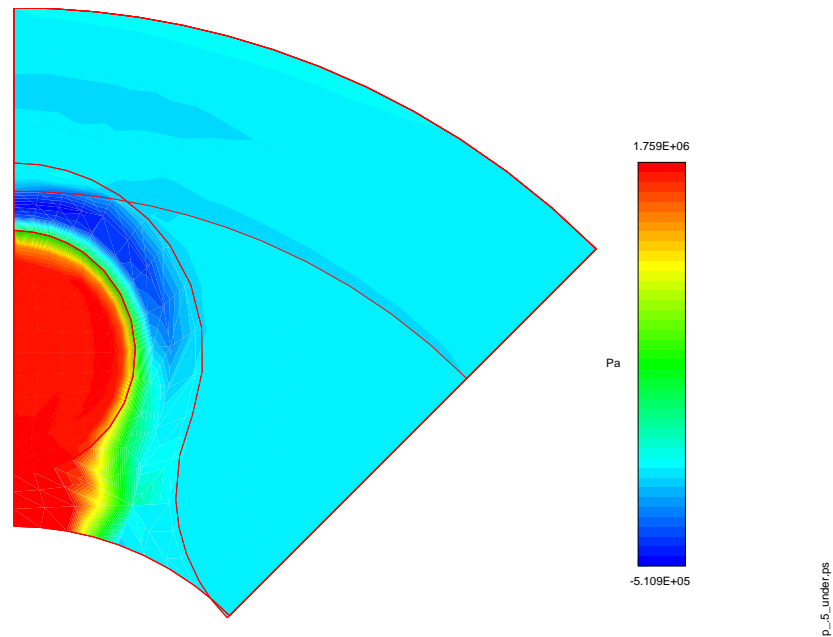
Mots-clés : algorithme numérique, couplage, décomposition de domaines, équation de Navier-Stokes, calcul des structures.

La compréhension des mécanismes d'interactions entre un fluide et un solide élastique en grands déplacements est d'une importance capitale dans de nombreuses applications industrielles : calculs d'amortisseurs hydrauliques, aéroélasticité en grands déplacements, écoulements sanguins. Ce thème a fait l'objet d'une thèse CIFRE, préparée conjointement dans le projet M3N et au Centre de Recherche du groupe PSA, et soutenue en septembre 1996.

Cette étude a 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 structure mince de type coque en grands déplacements [511].

Cette méthodologie propose de :

1. traiter de façon cohérente l'interface après discrétisation numérique (respect des propriétés énergétiques et du 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. Cette approche a été reprise dans les calculs d'aéroélasticité instationnaire effectués à l'Université de Boulder en liaison avec le projet INRIA-NSF sur les calculs à échelle multiple [560];



pression intrados
1C - 20 Hz - debit maxi

Figure 2: Distribution de la pression. (Avec l'aimable autorisation de PSA-Peugeot-Citroën)

2. utiliser pour chaque sous-système les formulations classiques les plus adaptées au sous-problème considéré : formulation ALE pour le fluide avec actualisation de la géométrie du domaine par un algorithme d'adaptation de maillage, formulation en Lagrangien total pour la structure;
3. utiliser des schémas d'intégration en temps implicites. Il a été montré au niveau théorique qu'un schéma d'Euler implicite n'introduisait pas d'instabilités artificielles, et au niveau pratique qu'un schéma de point milieu totalement couplé était à la fois stable, précis, et parfaitement conservatif;
4. calculer 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);
5. utiliser des algorithmes de couplage simples et faciles à implémenter. Un algorithme de type point fixe relaxé a été proposé, analysé et validé sur le cas du fonctionnement d'un amortisseur hydraulique à clapets souples. Cet algorithme est en cours de généralisation dans le cadre d'une action commune entre les projets Caiman, Gamma, Mostra, M3N et Sinus.

Application aux écoulements sanguins

Ce travail ouvre de nombreuses perspectives pour d'autres applications comme l'étude des écoulements sanguins dans des vaisseaux fortement déformables.

La veine peut être représentée par un tube collable, de forme plus ou moins écrasée selon les valeurs de la pression externe, pour une répartition de la pression interne donnée au moyen de modèles numériques d'écoulements. A partir d'une configuration non-contrainte supposée elliptique, la paroi devient d'abord ovale, les parois opposées entrent ensuite en contact en un point (p_c : pression du point de contact), enfin les parois opposées reposent l'une sur l'autre (p_l : pression de la ligne de contact, Fig. 3).

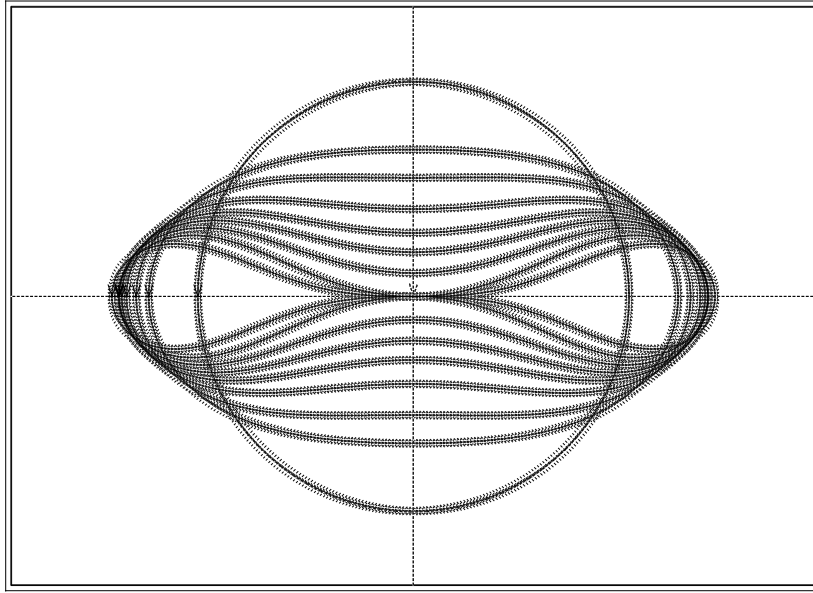


Figure 3: Déformation d'un tube collable obtenue à partir du calcul de la flexion d'une coque mince homogène isotrope, sans extension, soumise à un chargement uniforme. Section droite non-contrainte elliptique (coefficient d'excentricité de 1,005) et épaisseur de paroi nulle (surfaces mouillée et moyenne de la paroi confondues). Déplacement de la paroi au cours du collabage.

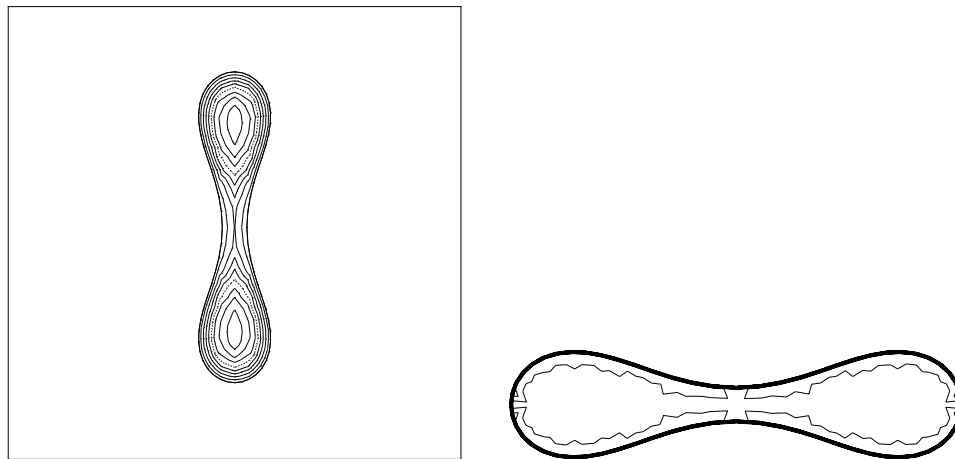


Figure 4: A gauche : isovitesses (10 valeurs $[0 - 27,5 \text{ cm/s}]$) dans la section droite située à $+39 d_h$ de l'entrée du conduit. Tube déformable, de longueur $L = 40 d_h$, collabé uniformément ($\partial A/\partial x = 0$) sous l'effet de la pression transmurale adimensionnelle $p = -2,35$. Écoulement permanent laminaire (nombre de Reynolds $Re = 10^3$). A droite : isovitesses (50, $[0-1,5 \text{ m/s}]$) dans le plan de la section droite située à $+32,5 d_h$ de l'entrée du conduit déformable. Écoulement permanent turbulent (nombre de Reynolds $Re = 10^4$).

Dans une telle configuration, le sang circule dans deux canaux localement parallèles, qui sont les parties extérieures laissées libres ; ainsi, la circulation du sang n'est pas bloquée. Par contre, les contraintes mécaniques sont appliquées sur les faces de la veine sur lesquelles s'insèrent les valvules. L'importance et la répétition de telles contraintes pourraient expliquer les déficiences fonctionnelles valvulaires et la gênèse de la maladie variqueuse.

Pour préparer un tel couplage fluide structure entre la forme de la paroi veineuse et l'allure de l'écoulement interne, nous avons étudié cette année des écoulements tridimensionnels, laminaires et turbulents (modèle $k - \epsilon$), en développement dans des configurations de référence (déformation uniforme dans la direction de l'axe du tube pour une série de pressions transmursales négatives) d'un conduit collabé (Fig. 4). Ces données serviront d'éléments de comparaison des résultats numériques obtenus par la suite avec le code d'interaction fluide-structure.

3.3 Couplage de modèles à échelle multiple

Participants : Patrick Le Tallec, Benoit Perthame, Jean-François Bourgat, Bijan Mohammadi, Nicolas Devaux, Jean-Philippe Perlat, Frédéric Valentin, Gorazd Medic

Mots-clés : turbulence, équation de Navier-Stokes, équation de Boltzmann, loi de paroi.

Le projet n'a pas pour objectif de développer des modèles physiques. Par contre, il est indispensable de comprendre les modèles proposés. Cet appui sur la physique est en particulier nécessaire pour définir la stratégie de choix et de couplage de modèles, aider à leur validation, et prévoir leur évolution future.

Deux domaines apparaissent critiques à court terme, du fait notamment de la présence d'échelles d'espace multiples à l'intérieur d'un même problème : la modélisation de la turbulence et la cinétique des particules.

3.3.1 Modélisation de la turbulence et lois de paroi

La modélisation de la turbulence reste un des grands axes et besoins du monde de la recherche et de l'industrie en mécanique des fluides. L'action du projet s'est concentrée récemment sur la validation numérique de différents modèles proposés dans la littérature.

Modèle $k - \epsilon$ et lois de parois.

Nous nous sommes particulièrement intéressés à la simulation d'écoulements turbulents instationnaires en utilisant un modèle de type $k - \epsilon$ et des lois de parois près des obstacles. Cette technique est intéressante par sa simplicité et son faible coût. Nous avons pu aussi démontrer que contrairement à ce qui est communément admis, il était possible de prédire de façon précise l'écoulement autour un cylindre de section carrée (cas test de Lyn) avec ces modèles (Figure 5). Les ingrédients de ce succès ont été une intégration temporelle et spatiale précise (ordre 3) et une implémentation fine des lois de paroi, utilisant :

- 1) une formulation faible permettant de prendre naturellement en compte la pression,
- 2) des lois de turbulence globales (i.e. valable $\forall y^+$),
- 3) une prise en compte des effets de pression et de convection,
- 4) un domaine de calcul restant proche de la paroi (i.e. $\delta \leq \frac{50\nu}{u_\tau}$),
- 5) des maillages fins adaptés.

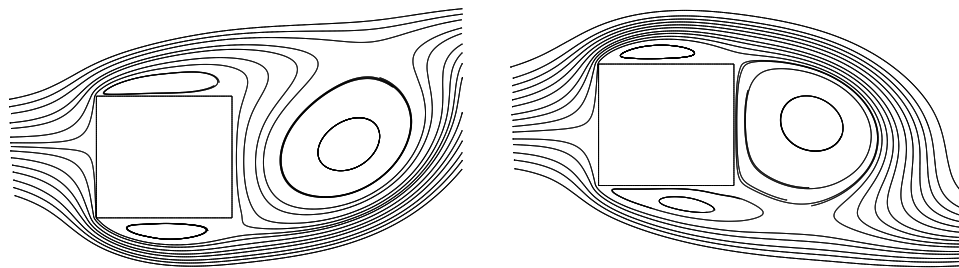


Figure 5: Lignes de courant à deux instants différents.

En effet, nous avons constaté que, trop souvent, les mauvais résultats associés à $k - \varepsilon$ provenaient de la méthode numérique utilisée. Actuellement, nous continuons notre investigation pour le cas du cylindre circulaire pour lequel nous nous intéressons en particulier à la prédiction du phénomène de la chute de la traînée (drag crisis). Les premiers résultats obtenus montrent que ce phénomène peut être détecté numériquement par notre technique de calcul.

Écoulements en Aérodynamique Externe

Dans le cadre d'une convention CIFRE entre le projet M3N et la Direction de la Recherche et des Affaires Scientifiques de PSA, associée à une thèse soutenue en mai 1996 [509], nous avons aussi étudié l'application de différents modèles de turbulence à la simulation numérique d'écoulements (turbulents) autour d'automobiles. Ces écoulements sont particulièrement délicats car ils sont fortement décollés. Trois modèles de turbulence ont été programmés et étudiés :

1. le modèle $k - \varepsilon$ standard avec loi de paroi,
2. le modèle $k - \varepsilon$ standard couplé avec le modèle de Chen et Patel à une équation pour k près de la paroi (modèle bicouche),
3. un modèle ASM avec terme d'influence de paroi et lois de paroi. La contribution turbulente aux équations de la quantité de mouvement moyenne est traitée en partie ici de façon implicite, afin de promouvoir la stabilité de l'algorithme et de garantir un minimum de réalisme de la turbulence, c'est-à-dire des tensions normales positives.

Après quelques cas-tests utilisant les trois modèles, nous avons appliqué les modèles $k - \varepsilon$ /loi de paroi et ASM/loi de paroi au calcul de l'écoulement autour d'une Peugeot 405. Le calcul bicouche n'a pas été possible sur cette automobile pour des raisons de temps de calcul.

Parois rugueuses

Les écoulements turbulents sur parois rugueuses sont très fréquents dans le monde industriel, mais ils posent des problèmes spécifiques vu la faible taille des rugosités par rapport aux dimensions des parois. Dans un premier temps, on s'est intéressé à la simulation numérique directe des écoulements compressibles turbulents au dessus de parois rugueuses, dans le cadre d'une collaboration avec le CEA/CESTA. On a pu ainsi valider l'application d'un modèle turbulent sur différentes géométries de rugosités, basé sur une approche bicouche, et vérifier dans certains cas les hypothèses de périodicité et de faible variation de flux à échelle locale qui servent à établir des lois de frottement équivalentes.

Le but est ensuite de trouver un cadre mathématique permettant d'obtenir ces lois de frottement simplifiées et de connaître et contrôler l'erreur commise. Deux approches mathématiques ont été suivies : analyse asymptotique avec une stratégie d'homogénéisation ou méthode de décomposition de domaine. En utilisant la deuxième approche, on a présenté une loi de paroi pour le problème de Stokes, dans laquelle l'erreur commise est bornée par un petit paramètre ε (l'amplitude des rugosités) [544].

3.3.2 Cinétique

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 ou à l'intérieur des réacteurs à diffusion de vapeur. Leur simulation numérique est cependant délicate et exige de gros moyens de calcul. Elle doit donc être couplée à des approches plus classiques de mécanique des fluides.

Trois tâches se dégagent dans ce contexte. La première tâche proposée est d'abord d'améliorer, de valider et d'interpréter les simulations numériques des écoulements cinétiques. La seconde tâche est de développer des modèles asymptotiques consistants qui permettent de passer d'une modélisation cinétique fine à un modèle hydrodynamique. La dernière tâche consiste à utiliser les deux niveaux de modèle de manière adaptative et couplée.

1. Simulation Numérique des Equations de Boltzmann

La stratégie numérique de base est une combinaison de méthodes particulières et de techniques de Monte Carlo.

Validation du code BOL2D par comparaison à l'expérience.

Des résultats expérimentaux obtenus en soufflerie raréfiée sur une plaque biseautée par le Laboratoire d'Aérodynamique du CNRS nous ont permis de valider notre code BOL2D (Boltzmann bidimensionnel) pour un gaz diatomique de viscosité VHS dans le cas d'un écoulement froid (énergie interne de vibration négligeable). Les densités coïncident bien, surtout près de la paroi et en début de plaque. Vers l'arrière, le choc calculé est légèrement plus haut et plus fermé.

Extension du code BOL2D aux parois concaves. Réflexions multiples.

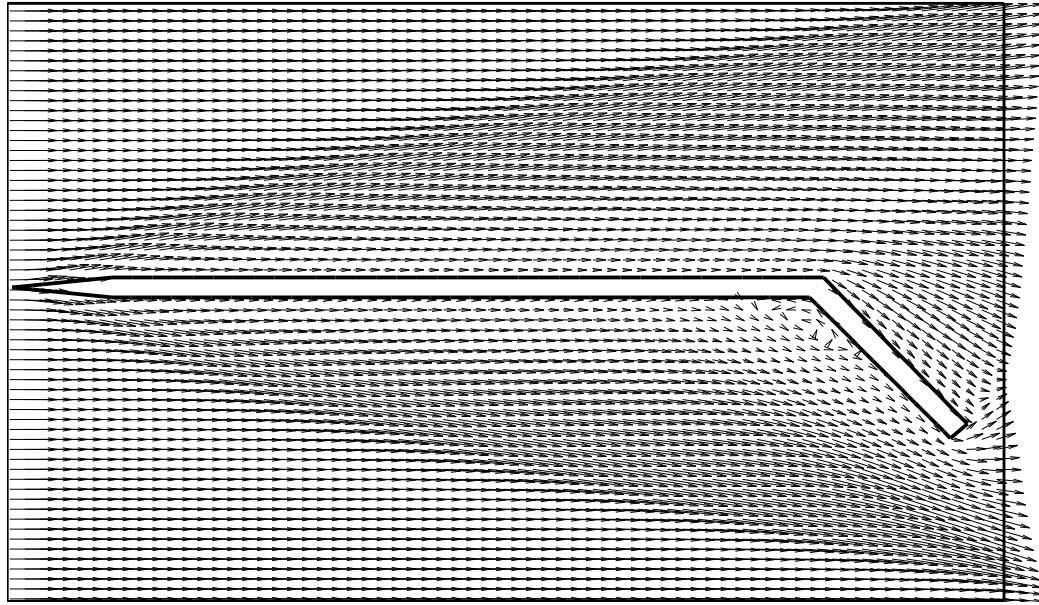


Figure 6: *Recirculation dans un dièdre à Mach 20.*

Les zones concaves d'une paroi rendent le calcul des réflexions délicat car dans un même pas de temps une molécule peut impacter plusieurs fois la paroi.

Dans le cas d'un écoulement externe, ce calcul précis permet de mettre en évidence des zones de recirculation (Figure 6). Pour un écoulement interne, le calcul des réflexions multiples est indispensable car une réflexion manquée entraîne une perte de particule, ce qui fausse rapidement les résultats.

Cette prise en compte des réflexions multiples alourdit le logiciel mais pas le temps calcul car leur proportion est assez faible.

Boltzmann instationnaire.

Afin de mieux suivre la convergence de l'algorithme vers la solution stationnaire et de capter d'éventuelles solutions instationnaires, nous avons calculé la solution à différents instants à partir de moyennes sur des intervalles de temps réduits.

Cette technique est utile dans les écoulements où les quantités intéressantes sont diffusées et non convectées, car la convergence est très lente et nécessite des dizaines de milliers de pas de temps.

La robustesse de la Méthode de Monte Carlo et la petitesse des pas de temps (inhérente à cette méthode explicite) permettent ainsi de bien suivre des phénomènes physiques transitoires de grande amplitude.

Etude de la couche limite en régime semi-raréfié.

La modélisation des couches limites cinétiques est particulièrement importante en pratique car elle permet 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.

On a étudié dans ce cadre l'écoulement d'un gaz semi-raréfié compris entre deux plaques parallèles dont l'une est animée d'une grande vitesse. Ce type d'écoulement, dit de Couette, présente des sauts de vitesse tangentielle et de température aux parois lorsque celles-ci sont maintenues à température constante.

Ces sauts calculés dans le cas monoatomique ou diatomique redonnent à 10% près les sauts donnés par les formules de Grad linéaires et non linéaires, et ceci pour des Knudsen allant jusqu'à 10^{-3} . Au-dessous, pour une vitesse de 1000 m/s, les sauts deviennent négligeables.

2. Modélisation asymptotique en régime transitionnel (voir 4.5)

Les régimes visés par cette étude sont des écoulements hypersoniques à nombre de Mach élevé (20), à faible nombre de Reynolds ($Re/m < 100000$) et à basse température. L'idée de base consiste à utiliser l'approximation exponentielle proposée par D. LEVERMORE pour approcher de manière positive et cohérente la densité cinétique des particules à vitesse et position données à l'intérieur de la couche limite. Nous y avons introduit cette année des conditions aux limites faibles qui permettent de décrire de manière consistante, au niveau macroscopique, les conditions aux limites cinétiques imposées aux particules au niveau microscopique.

Les propriétés du système aux moments et l'écriture au sens faible des conditions aux limites nous ont ensuite amenés à proposer un solveur cinétique pour exploiter numériquement le modèle. Les différentes étapes de ce schéma ont été implémentées. Nous proposons notamment un algorithme pour le calcul du modèle $F(\vec{x}, \vec{v}, t)$ par la résolution d'un problème de minimisation, et une règle d'intégration numérique pour le calcul des flux. Nous avons testé le modèle sur différentes applications numériques (problème de choc, écoulements de Couette). Ces résultats sont les premiers résultats numériques obtenus pour le modèle aux 14 moments.

Il est apparu alors que ce modèle convient parfaitement. Il peut simuler un écoulement de fluide proche de ceux modélisés par les équations de Navier-Stokes, tout en conservant les particularités cinétiques de l'écoulement (conditions de sauts à la paroi). L'optique éventuelle d'un couplage avec les équations de Navier-Stokes semble tout à fait réalisable à court terme.

3. Couplage adaptatif des équations de Boltzmann et de Navier-Stokes

Pour réaliser des calculs d'écoulements externes hypersoniques en régime semi-dense tels qu'on les rencontre dans les écoulements autour d'engins spatiaux en haute atmosphère, nous avons proposé une technique de couplage des équations de Boltzmann et de Navier-Stokes par demi-flux, fondée sur une interprétation cinétique des flux [561]. Ces travaux ont été étendus à des gaz diatomiques mono-températures. L'ensemble des techniques de couplage associées (écriture des modèles asymptotiques, détermination automatique des domaines, écriture des conditions d'interface, algorithme de couplage) a été décrit dans la thèse de F. Mallinger soutenue en septembre 1996.

3.4 Semi-conducteurs

Participants : Patrick Le Tallec, Benoit Perthame, Americo Marrocco, Philippe Montarnal, Frédéric Hecht (projet Gamma)

Mots-clés : algorithme numérique, élément fini, logiciel numérique, maillage adaptatif, modélisation, semiconducteur.

La simulation numérique de dispositifs à semi-conducteurs 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 technologique donné, optimiser leurs paramètres technologiques. Le secteur cible est ici l'électronique rapide et les télécommunications. Le partenaire privilégié est le CNET, auquel se rajoute Thomson (intégration de modèles quantiques). Les recherches sur la simulation numérique des dispositifs semi-conducteurs se sont poursuivies cette année selon deux axes principaux.

Le premier axe concerne la simulation des dispositifs III-V gouvernés par le modèle de dérive-diffusion (DD). Le dispositif typique qui nous intéresse est un T.B.H. (transistor bipolaire à hétérojonction(s)). Les simulations numériques effectuées ces dernières années ont montré que dans le cas de structures

hétérogènes, le maillage utilisé pour la discrétisation devait être suffisamment *raffiné* au voisinage de l'hétérojonction de façon à obtenir une convergence sur les valeurs des courants d'électrons et de trous, en particulier du courant d'électrons dans la base de notre T.B.H. (courant de porteurs minoritaires). Afin de surmonter ce genre de problèmes, nous avons développé deux stratégies:

1. En premier lieu, étant donné que les fortes singularités du quasi-niveau de Fermi ont lieu essentiellement dans la direction perpendiculaire à l'interface, une approximation localement 1D des équations semble licite. Nous avons donc développé un couplage numérique des éléments finis mixtes 2D actuellement utilisés à des éléments finis locaux 1D de même nature de façon à garder un maximum de cohérence dans la formulation.

Nous avons testé cette approche 2D-1D au niveau des contacts ohmiques; nous avons retrouvé les mêmes résultats -et en particulier sur les courants de minoritaires, plus problématiques- qu'avec la modélisation analytique de la couche limite, à condition de prendre des pas de maillage 1D suffisamment fins à l'interface (contact), -des pas de l'ordre de 10^{-20} Angströms pour certaines configurations-. Au niveau de l'hétérojonction, cet artifice semble aussi améliorer la précision de la solution pour un maillage 2D donné. Cependant une validation plus poussée reste à faire.

2. En second lieu, en collaboration avec le projet Gamma et dans le cadre d'un contrat FRANCE-TELECOM (notifié en mars 96), une étude est en cours sur l'adaptation de maillage.

Dans l'optique de pouvoir traiter numériquement des problèmes où les maillages peuvent devenir "très gros" (cela peut arriver dans des phases de validation), nous avons aussi mis en œuvre des méthodes de résolution de type itératif pour les systèmes linéaires issus de l'algorithme de Newton-Raphson: gradient conjugué (GC) et *generalised minimal residual* (GMRES), avec différentes possibilités de préconditionnement.

Pour les systèmes issus de l'équation de Poisson (systèmes symétriques définis positifs), nous n'avons rencontré aucune difficulté et obtenu un gain en performances assez appréciable; nous donnons ci-dessous les résultats obtenus pour la résolution complète du problème d'équilibre (nécessitant la résolution d'une quinzaine de systèmes linéaires), en faisant apparaître la taille du problème traité (nombre de degrés de liberté (NDL)), la taille (en mots) de la matrice stockée sous forme profil pour la méthode directe (Choleski) (MEM-D), et celle de la matrice de préconditionnement stockée sous forme morse (MEM-I) pour la méthode de gradient conjugué, ainsi que les temps CPU respectifs sur station de travail de type HP-735-100, les calculs étant réalisés en double précision.

NDL	METH. DIRECTE CHOLESKI	GRAD. CONJUGUE PRECOND. CHOLESKI-INCOMPLET
9770	MEM-D= 1 074 000 CPU = 40s	niv=0 MEM-I = 58 000 CPU = 40s niv=1 MEM-I = 67 000 CPU = 30s
38842	MEM-D= 8 860 000 CPU = 357s	niv=0 MEM-I = 232 000 CPU = 260s niv=1 MEM-I = 269 000 CPU = 175s
154 892	MEM-D= 72 000 000 CPU = 8000s	niv=0 MEM-I = 926 000 CPU = 2656s niv=1 MEM-I = 1 076 000 CPU = 500s

On peut remarquer que la technique itérative est très intéressante, surtout lorsque le nombre de degrés de liberté augmente. Malheureusement pour le problème statique le choix d'un "bon" préconditionneur pour GMRES dans le cas des matrices non symétriques semble plus délicat.

Le second axe étudie des modèles plus riches que le modèle de dérive-diffusion actuellement utilisé. Ces modèles deviennent nécessaires du fait de la miniaturisation des dispositifs simulés. En particulier, pour prendre en compte les phénomènes thermiques, il convient d'ajouter une équation de conservation de l'énergie.

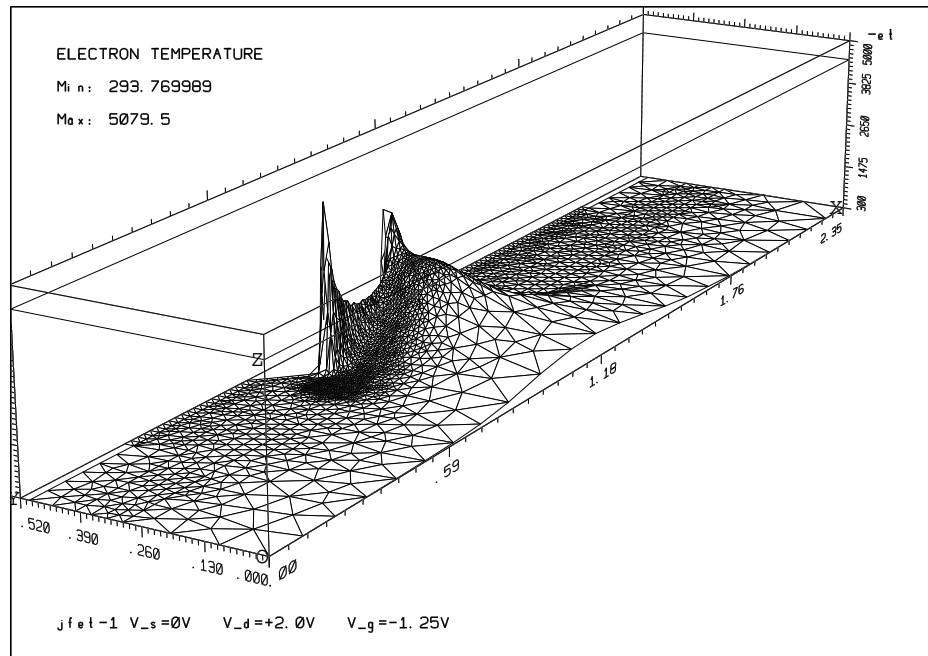


Figure 7: Distribution de la température électronique dans un JFET à grille 0.2μ . Simulation avec modèle énergie-transport.

Nous avons tout d'abord continué le travail théorique sur l'analyse asymptotique de l'équation de dérive-diffusion dans le cas dopage fort, champ fort (énergie thermique \ll énergie électrique) [566]. Nous avons aussi effectué différents tests numériques qui ont montré le meilleur comportement des schémas en variables quasi-niveaux de Fermi (φ_n, φ_p) par rapport aux schémas en variables concentrations des porteurs (n, p) [557].

Une étude bibliographique nous a ensuite permis de dégager deux modèles fluides incorporant une équation d'énergie : le modèle hydrodynamique et le modèle de transport d'énergie. Ces deux modèles dérivent de l'équation de transport de Boltzmann.

Pour les approfondir, nous avons étudié le cas d'un dispositif bipolaire à hétérojonctions (conformément aux préoccupations du CNET). Nous avons sélectionné pour les électrons deux types de modèles (hydrodynamique simplifié et transport d'énergie). Par contre, pour les trous nous avons conservé un modèle de dérive-diffusion. Le premier travail a consisté à symétriser les équations afin d'obtenir un système elliptique symétrique défini positif. Pour la résolution numérique nous avons ensuite généralisé les méthodes déjà employées pour la simulation du modèle de dérive-diffusion (approche éléments finis mixtes, transitoire artificiel, relaxation des équations, méthode de Newton). Nous avons fait le choix de traiter simultanément les équations de conservation de la masse et de l'énergie des électrons. Cela nous a amenés à développer une généralisation de la méthode des éléments finis mixtes pour un problème vectoriel non-linéaire [520, 542, 543].

La validation du code a été effectuée sur différents dispositifs : diodes balistiques à homojonctions et hétérojonctions, diode P-N, transistor JFET. Ces premiers résultats sont conformes aux attentes des physiciens.

Les premières perspectives résident dans l'amélioration du modèle physique et la poursuite des tests de validations. Il serait aussi intéressant d'affiner la connaissance du passage modèle cinétique / modèle fluide et des propriétés mathématiques du modèle fluide.

3.5 Optimisation et Contrôle

Participants : Patrick Le Tallec, Jacques Périaux, Marie-Odile Bristeau, Bijan Mohammadi, José Herskovits, Emmanuel Laporte, André Duarte, Tuomo Rossi

Mots-clés : algorithme numérique, contrôle, élément fini, logiciel numérique, mécanique des fluides, modélisation, optimisation de formes.

La conception optimale de formes consiste à utiliser les modèles numériques de comportement développés au préalable pour optimiser la forme de l'objet étudié. Le contrôle actif des écoulements et des structures tel qu'on le prévoit dans un proche avenir cherche à optimiser en temps réel certaines données du modèle pour améliorer les résultats. Enfin, plus généralement, les techniques de contrôle peuvent être utilisées comme outil de résolution ou de stabilisation de certaines équations.

3.5.1 Contrôlabilité appliquée aux Equations de Maxwell 3D en régime harmonique

On s'intéresse à la résolution numérique des équations de Maxwell 3D, pour la simulation de phénomènes de diffraction d'ondes électromagnétiques par des obstacles que l'on suppose dans un premier temps parfaitement conducteurs. Bien que l'on se place en régime harmonique, on considère une formulation temporelle des équations de Maxwell. Dans des études précédentes, on a montré, pour les cas 2D et 3D acoustiques, l'efficacité d'une formulation "Contrôlabilité Exacte" pour accélérer la convergence de la solution instationnaire vers le régime harmonique.

Cette méthodologie a été étendue aux cas vectoriels 2D et 3D. La formulation moindres carrés introduite conduit à la résolution du problème par un algorithme de gradient conjugué préconditionné. L'opérateur Laplacien qui, dans les cas scalaires, intervenait dans les équations d'état et adjointe, dans la fonction coût et dans le préconditionneur, est maintenant remplacé par l'opérateur " $\nabla \times \nabla \times - \nabla(\nabla \cdot)$ "; ceci permet entre autres de prendre en compte la contrainte sur la divergence.

On utilise une approximation par éléments finis P_1 ; le schéma en temps est explicite.

La condition aux limites sur l'obstacle est traitée par projection et sur la frontière artificielle on impose une condition absorbante de Silver-Muller. En ce qui concerne l'initialisation de l'algorithme, une solution initiale régulière satisfaisant les conditions aux limites est obtenue en passant de manière continue en temps de conditions aux limites nulles à celles associées aux données harmoniques. Ceci améliore la convergence vers la solution harmonique.

Pour inverser le problème algébrique intervenant dans le préconditionneur, on utilise de nouveau un gradient conjugué lui-même préconditionné par une technique de type correction de Krylov comme proposé par Y. Saad pour les problèmes à plusieurs seconds membres. Ce sujet est traité en collaboration avec J. Erhel-Chaux (Projet Aladin). L'intérêt de cette méthode est que le coût en mémoire peut être fixé par l'utilisateur et que le coût en opérations supplémentaires par itération est négligeable.

Un code 2D vectoriel a permis de tester la méthodologie qui a ensuite été généralisée pour les équations de Maxwell 3D. Des tests sur des cylindres ou sphères pour lesquels une solution analytique est connue ont permis de valider les résultats. Des calculs sur des géométries non convexes ont ensuite été effectués.

Le code 2D scalaire a aussi servi d'outil de base pour l'optimisation, en vue de la réduction de la SER, de la position d'antennes par algorithme génétique ; ceci a été développé par M. Séfrioui (Laforia-CNRS) et B. Mantel (Dassault Aviation).

3.5.2 Optimisation de formes en Aérodynamique Externe

Le travail consiste en la mise en place d'une chaîne automatique d'optimisation de formes aérodynamiques en 2D et 3D. Cependant la plupart des techniques développées sont utiles pour d'autres problèmes. Cette chaîne d'optimisation inclut des outils variés permettant:

* l'optimisation sous contrainte par une méthode de type gradient ou par des algorithmes de point intérieur,

- * le calcul du gradient par la différentiation automatique de programme,
- * la génération de maillages non-structurés de façon adaptative par contrôle local de la métrique,
- * la déformation conforme de formes et de maillages sans faire appel à la CAO,
- * la résolution des équations de la dynamique des fluides compressibles,
- * la modélisation de la turbulence.

Le gradient:

Les méthodes d'optimisation utilisées nécessitent de savoir calculer les gradients des fonctions coût. Pour les calculer, on peut soit utiliser les différences finies avec un coût proportionnel au nombre de paramètres de contrôle, soit résoudre le problème adjoint avec un coût invariant. L'originalité de ce travail a été l'utilisation intensive de la différentiation automatique par mode inverse. Ceci permet d'éviter le développement particulier d'un code adjoint, et d'y intégrer automatiquement les inconsistances des schémas numériques (comme la viscosité numérique). Des études ont été menées sur l'utilisation optimale du différentiateur automatique, notamment sur le stockage des états successifs du fluide au cours du temps, afin d'éviter une explosion du coût mémoire du code obtenu avec le différentiateur automatique. On utilise pour cela une technique de re-calcul.

Déformation:

Une autre originalité de ce travail a été de montrer la possibilité de considérer tout point de discrétisation appartenant à la forme comme point de contrôle (en 2 et 3D) et ceci sans perdre de l'efficacité. L'intérêt de cette approche est de pouvoir gérer les déformations de surface sans faire appel aux outils de la CAO qui sont de manipulation et différentiation difficiles. Ainsi, nous avons traité des configurations 3D avec plusieurs milliers de paramètres de contrôle.

Maillage adaptatif:

Jusqu'ici l'optimisation se faisait sur un espace de contrôle de taille donnée et sur des maillages à connectivité fixe (i.e. uniquement les coordonnées des points étaient variables pendant l'optimisation). L'autre particularité de ce travail est de coupler l'adaptation de maillages non-structurés et l'optimisation de forme. Ainsi, pendant l'optimisation, le nombre des paramètres de contrôle ainsi que les connections et le nombre de points des maillages sont variables. Bien entendu, un maillage de type Delaunay n'est pas du tout différentiable. L'idée a donc été d'inclure l'outil de l'optimisation dans la boucle d'adaptation de maillages plutôt que l'inverse.

Pour valider cette approche, on a étudié également la dépendance des fonctions de coût par rapport au maillage, à la fois de manière théorique et numérique. Sur le plan théorique, la formule du gradient d'une fonction par rapport à la forme a été établie pour les écoulements de Stokes. On sait que dans le cas d'une solution continue des équations régissant le fluide, la fonction de coût ne dépend que de la forme de la frontière. Après discrétisation, une dépendance par rapport aux nœuds internes du maillage apparaît. On a étudié cette dépendance numériquement.

Solveur fluide en non-structuré:

Les équations de la dynamique des fluides ont été résolues avec le solveur non-structuré volumes-finis-Galerkin de l'INRIA en 2D et 3D. Sur ce point, la particularité de ce travail a été de montrer la possibilité d'appliquer la différentiation en mode inverse à un code industriel sans apporter de changement a priori et d'analyser l'importance des différents termes des schémas numériques sur le gradient.

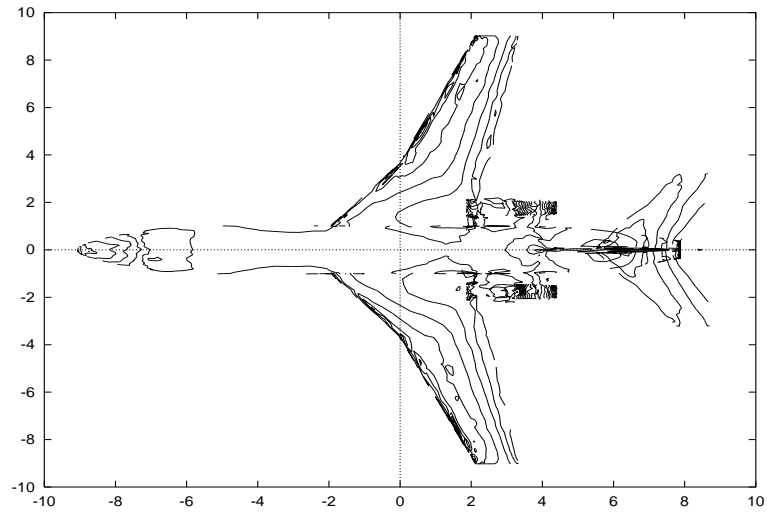


Figure 1: *Optimization of a business jet: Iso-Mach distribution, the target is to remove the depression over the cockpit and to smooth the shocks on the wings and engines.*

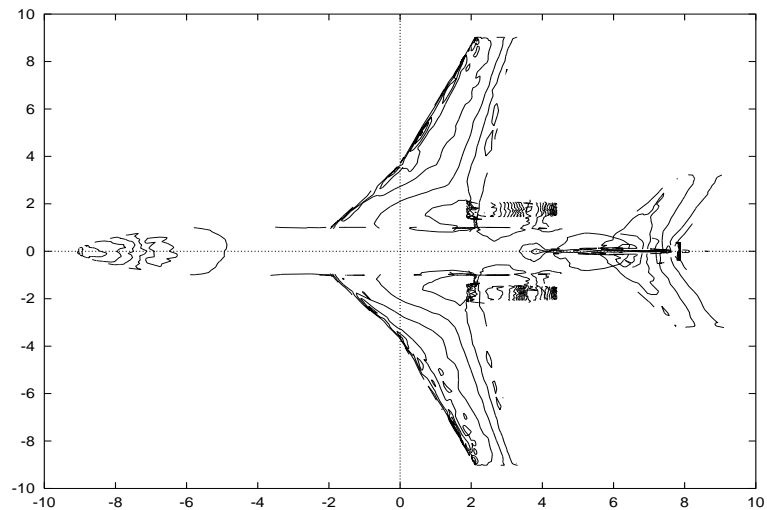


Figure 2: *Same Iso-Mach distribution, the depression over the cockpit has been reduced and the shocks on the wings and engines smoothed.*

Figure 8: *Optimisation 3D.*

La prise en compte dans le Jacobien d'un modèle $k - \varepsilon$ nous a permis de considérer les écoulements turbulents. Nous avons remarqué l'intérêt d'utiliser les lois de paroi en optimisation plutôt qu'une approche bas-Reynolds où une discrétisation beaucoup plus fine est nécessaire. Nous avons montré qu'une fois les nonlinéarités supplémentaires des opérateurs dans le cas turbulent traitées, l'optimisation pour un écoulement turbulent devient plus facile que pour le cas similaire en non-visqueux (i.e. à même nombre de Mach).

4 Actions industrielles

4.1 Action Fluide-structure

Participants : Patrick Le Tallec, Jean Mouro, Marina Vidrascu (projet Mostra)

L'action fluide-structure décrite dans le §3.2 a fait l'objet d'un contrat avec le GIE PSA-CITROEN pour la simulation numérique du fonctionnement d'un amortisseur hydraulique à clapets souples, qui s'est terminé en Septembre 1996.

4.2 Action Turbulence-Parois rugueuses

Participants : Patrick Le Tallec, Bijan Mohammadi, Frédéric Valentin, Olivier Pironneau (projet Gamma)

Cette action, décrite en §3.3.1, fait l'objet d'un contrat en cours avec le CEA-CESTA.

4.3 Action Base de données Maxwell

Participant : Fadi El Dabaghi

La mise en place de la base de données Maxwell a été financée partiellement par un Contrat DRET.

4.4 Action Optimisation

Participants : Patrick Le Tallec, Emmanuel Laporte

Dans le cadre d'un contrat avec le CEA-CESTA, et avec l'aide de l'Université Technique de Lisbonne agissant comme sous-traitant, l'INRIA a développé un logiciel fortran d'optimisation par points intérieurs (6.5).

4.5 Action Couches limites cinétiques

Participants : Patrick Le Tallec, Benoit Perthame, Jean-François Bourgat, Jean-Philippe Perlat

L'analyse des couches limites en régime raréfié (3.3.2) a fait l'objet d'un contrat avec le CEA-CESTA qui s'est terminé en octobre 1996.

4.6 Action Semi-conducteurs

Participants : Patrick Le Tallec, Benoit Perthame, Americo Marrocco, Philippe Montarnal, Frédéric Hecht (projet Gamma)

Suite aux Consultations thématiques lancées par France-Télécom-CNET en décembre 1994, ayant entre autres, pour thème *Nouvelles approches de simulation et de modélisation de composants photoniques et optoélectroniques*, un marché d'étude pour une durée de trois ans (avec le CNET), portant sur la *Modélisation et algorithmes de simulation des phénomènes intervenant aux temps très courts ou pour les petites dimensions*, a été notifié en mars 1996.

4.7 Action Mica

Participants: Patrick Le Tallec, Marie-Hélène Lallemand, Claire Martin, Frédéric Hecht (projet Gamma)

L'inria est partenaire du Contrat HPCN MICA, décrit au §5.2.

5 Actions nationales et internationales

5.1 Actions nationales

Au niveau national, le projet est associé étroitement et en priorité aux Universités de Paris 6, Paris Dauphine, et à l'Ecole Polytechnique : 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 dont le cadre coïncide parfaitement avec les nouveaux objectifs du projet.

Au niveau du CNRS, le projet M3N participe à trois groupements de recherche (GdR): couplage d'équations, optimisation, et physique des particules chargées (Sparch).

5.2 Actions internationales

5.2.1 Europe de l'ouest

En dehors de très nombreux contacts avec les diverses universités et centres de recherche européens, concrétisés par la venue de nombreux visiteurs européens, la principale collaboration européenne du projet M3N s'articule autour du projet Européen MICA. Ce projet, coordonné par la société de service CHAM en Angleterre, regroupe outre l'INRIA, le LSTM d'Erlangen, les Universités de Saragosse et d'Athènes, et dix industriels travaillant dans le secteur des fours ou de l'environnement. Ce projet HPCN a pour finalité de mettre en place un réseau de calcul et d'expertise en CFD auprès des PME en Europe, consultable par réseau électronique, et manipulant les données sous forme de réalité virtuelle.

5.2.2 Europe de l'est

Le second axe de l'activité internationale du projet est l'approfondissement de la collaboration franco-russe en Calcul Scientifique et Mécanique des Fluides autour de l'Institut Lyapunov. Outre la DRET, les partenaires de cette action sont le projet SINUS, le CNRS, Dassault-Aviation, l'Université de Moscou, l'Institut de Mathématique Numérique de Moscou, le Centre de Calcul et l'Institut de Mécanique des Fluides de Novosibirsk. Deux applications y sont particulièrement privilégiées :

- le calcul d'écoulements en régime raréfié avec le professeur Ivanov,
- le techniques de décomposition de domaines et de domaines fictifs en Mécanique des Fluides et en Electromagnétisme.

5.2.3 Amérique

L'axe suivant est la poursuite de l'accord de collaboration INRIA-NSF, portant sur l'étude et le développement de méthodes de décomposition de domaines et de solveurs hiérarchiques adaptés au calcul parallèle. Cet accord implique l'INRIA, l'ONERA et les Universités du Colorado et du Texas (Rice et Texas A et M). Un accent particulier est mis sur la collaboration fluide-structures avec l'Université

du Colorado (C. Fohrat). Cette collaboration devrait aussi s'étendre à l'Université de Californie à Davis (M. Hafez) pour les problèmes d'optimisation de forme en écoulements tridimensionnels visqueux. Une première action a démarré en ce sens cette année.

Citons pour terminer la collaboration du projet avec l'équipe de José Herskovits à l'université de Rio de Janeiro pour la mise au point d'algorithmes d'optimisation par points intérieurs adaptés à l'optimisation de formes.

6 Diffusion des résultats

6.1 Actions d'enseignement

- Méthodes de décomposition de domaines, cours de DEA, université de Bordeaux I (P. Le Tallec).
- Mathématiques appliquées, cours de DEA, université Paris 6 et Ecole Polytechnique (B. Perthame).
- Dynamique des Structures, cours de Majeure, Ecole Polytechnique (P. Le Tallec).
- Méthode numériques en mécanique des fluides, cours de DEA, Ecole Polytechnique et université Versailles-Saint-Quentin (B. Larroutou, P. Le Tallec).
- Simulation de la turbulence, cours de DEA, université Paris 6 (B. Mohammadi).
- Travaux dirigés de Contrôlabilité, Pôle universitaire Léonard de Vinci (M.O. Bristeau).
- Travaux dirigés en Méthodes numériques et informatique, université Versailles-Saint-Quentin (Ph. Montarnal).

6.2 Participation à des colloques

Des membres de l'équipe ont participé à des conférences et workshops ;

- SIAM Conference on Computational Differentiation, Santa Fe, février 1996.
- Colloque sur les architectures logicielles, Rabat, mars 1996.
- Workshop sur le transport quantique, Villeneuve d'Asq, mars 1996.
- Interaction Fluide-Structures, GDR-CNRS, Tunis, mars 1996.
- Optimisation de formes aérodynamiques, GDR-CNRS, mars 1996.
- French-Russian Workshop on computational mathematics and applications, Moscou, avril 1996.
- 28^{ème} Congrès National d'analyse numérique, La Londe Les Maures, mai 1996.
- Ecoulement à grande vitesse, Gujan Mestras, mai 1996.
- L'informatique scientifique au cœur des techniques du futur, La Défense, mai 1996.
- 1^{ère} Conférence Internationale sur les problèmes ouverts en transport des particules chargées, Paris, juin 1996.
- Ninth International Conference on Domain Decomposition Methods, Bergen, juin 1996.
- Algorithmes d'optimisation et dessin de forme en ingénierie, Orsay, juin 1996.
- Sixth AIAA/USAF/NASA/ISSMO Symposium on multidisciplinary analysis and optimization, Bellevue (USA), septembre 1996.

- Computation of free boundaries and optimal shapes, Lamoura, septembre 1996.
- ECCOMAS 96, Paris, septembre 1996.
- Numerical Simulation of Partial Differential Equations, Trieste, septembre 1996.

6.3 Conférences invitées, tutoriels, cours, etc.

Les membres du projet ont en particulier présenté des Conférences invitées aux colloques suivants :

- 4th International Conference on hypersonic flows (Houston, 1995),
- International Conference on Computer Methods for Water Ressources (Beirut, september 1995),
- Conservation laws (Oberwolfach, may 1996),
- 28^{eme} Congrès National d'analyse numérique (La Londe Les Maures, mai 1996),
- Séminaire au Collège de France (Paris, mai 1996),
- Ninth International Conference on Domain Decomposition Methods (Bergen, juin 1996),
- Iterative Methods Workshop, International Linear Algebra Year (Toulouse, juin 1996),
- International Conference on Numerical Methods in Fluids (Monterey, juin 1996),
- Nonlinear Analysis (Taiwan, june 1996),
- Symposium on DDM and Related Topics, Kyoto (juillet 1996),
- Jubilee of the Tata-Institute (Bangalore, août 1996),
- Numerical Simulation of Partial Differential Equations, Trieste, septembre 1996.

6.4 Animations scientifiques

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. 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 1996 ont été :

- Interaction fluide-structure (janvier 1996).
- Application des méthodes de points intérieurs (juin 1996).
- Méthodes numériques pour les écoulements diphasiques (novembre 1996).

Bijan Mohammadi a organisé la journée du Firtech Calcul Scientifique sur la mise en œuvre des modèles de turbulence en juin 1996.

Le projet, avec l'aide de l'UCIS et du service des Relations Extérieures de Rocquencourt, a été aussi très fortement impliqué dans l'organisation du congrès ECCOMAS 96 à Paris en Septembre 1996. Ce congrès, coprésidé par P. Le Tallec, a rassemblé près de 700 personnes. L'Inria en a assuré l'organisation scientifique, et a été associé à toutes les étapes de l'organisation.

B. Perthame a fait partie du comité scientifique des conférences:

- 6th International Conference on hyperbolic equations, (Hong-Kong, june 1996).
- International Conference on kinetic equations, (Ceremade, may 1996).

F. El Dabaghi a fait partie de l'organisation scientifique de cours et colloques suivants:

- Cours Inria-EPT sur la Résolution des Grands Systèmes (Tunis, septembre 1995).
- Follow-up session 3rd International Conference and Workshop on Approximations and Numerical Methods for the Solution of the Maxwell Equations, Co-chairman et responsable des cas tests du Workshop, (Oxford et Inria, novembre 1995).
- Colloque International sur la Modélisation et les Méthodes Numériques en Ingénierie Pétrolière, Inria-EPT, (Tunisie, Sept 95), Membre du comité d'organisation et Co-Chairman.
- Colloque sur les Architectures Logicielles, Inria-ENSIAS, (Rabat, mars 1996), Membre du comité d'organisation et Co-Chairman.
- Colloque sur l'Apport des Technologies de l'Information à la Gestion et à la Modélisation des Ressources en Eau en Zones Semi-Arides, (Inria, Rocquencourt, juillet 1996), Chairman.

6.5 Diffusion de logiciels

Nous donnons ci-dessous une liste de logiciels dont la plupart 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 dans le cadre d'un partenariat avec Simulog, soit par mise à disposition gracieuse.

OPTMSH: Module de maillage en 2D, version adaptative (avec projet Gamma).

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

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

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

LGCAPA: Calcul de capacités extrinsèques en 3D.

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

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

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

EIPack: Logiciel de résolution des problèmes de diffraction électromagnétique 3D par domaines fictifs (réalisé en collaboration avec l'Institute of Numerical Mathematics de Moscou).

IPA: Logiciel d'optimisation par points intérieurs.

7 Publications

Livres et monographies

- [505] J. A. DÉSIDÉRI, C. HIRSCH, P. LE TALLEC, E. OÑATE, M. PANDOLFI, J. PÉRIAUX, E. STEIN (réd.), *Computational Methods in Applied Sciences '96*, J.Wiley & Sons, 1996.
- [506] J. A. DÉSIDÉRI, C. HIRSCH, P. LE TALLEC, M. PANDOLFI, J. PÉRIAUX (réd.), *Computational Fluid Dynamics '96*, J.Wiley & Sons, 1996.
- [507] J. A. DÉSIDÉRI, P. LE TALLEC, E. OÑATE, J. PÉRIAUX, E. STEIN (réd.), *Numerical Methods in Engineering '96*, J.Wiley & Sons, 1996.

Documents d'habilitation à diriger des recherches

- [508] B. MOHAMMADI, *Méthodes et outils pour la mécanique des fluides numérique*, habilitation à diriger des recherches, université de Paris 6, 1996.

Thèses

- [509] N. DEVAUX, *Modélisation des tensions de Reynolds : application au calcul de l'écoulement autour d'automobiles*, thèse de doctorat, Univ. Poitiers, mai 1996.
- [510] F. MALLINGER, *Couplage des équations de Boltzmann et de Navier-Stokes*, thèse de doctorat, Univ. Dauphine, Paris, septembre 1996.
- [511] J. MOURO, *Interactions fluide-structure en grands déplacements. Résolution numérique et application aux composants hydrauliques automobiles*, thèse de doctorat, Ecole Polytechnique, septembre 1996.

Articles et chapitres de livre

- [512] 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.
- [513] N. BELLOMO, P. LE TALLEC, B. PERTHAME, «On the nonlinear Boltzmann equation. Solutions and applications to fluid dynamics», *Applied Mechanics Review*, 1996.
- [514] H. BOROUCAKI, P.L.GEORGE, B. MOHAMMADI, «Delaunay Mesh Generation Governed by Metric Specifications. Part II: Applications», *Finite Element in Analysis and Design*, 1996.
- [515] M. L. BRUSSEAU, R. ESTRELLA, R. S. MAIER, W. J. MAIER, R. M. MILLER, B. MOHAMMADI, «Estimation of Kinetic Rate Coefficients for 2,4-D Biodegradation During Transport in Soil Columns», in: *Environmental Studies*, Springer, 1996, IMA volumes in mathematics and its applications.
- [516] N. DEVAUX, F. HECHT, «Sur l'implémentation d'un modèle de turbulence ASM, et l'étude du sous-système algébrique non-linéaire associé», *C.R. Acad. Sci. Paris* 322, Série II b, 1996, p. 463–468.
- [517] F. HECHT, B. MOHAMMADI, «Mesh Adaption by Metric Control for Multi-scale Phenomena and Turbulence», *AIAA-97-0859*, 1997.
- [518] A. KAISS, P. LE TALLEC, «La Modélisation Numérique du Contact Oeil-Trépan», *Revue Européenne des Eléments Finis* 5, 3, 1996, p. 375–408.
- [519] J. MALÉ, B. MOHAMMADI, N. ROSTAING-SCHMIDT, «Direct and Reverse modes of Automatic Differentiation of Programs for Inverse Problems: Application to Optimum Shapes Design», in: *Computational Differentiation 96*, SIAM, 1996.
- [520] 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.
- [521] B. MOHAMMADI, O. PIRONNEAU, «On Wall Laws in CFD», in: *Lecture note in physics* 453, Springer, 1996.
- [522] B. MOHAMMADI, «Différentiation automatique par programmes et optimisation de formes aérodynamiques», *Matapli* 47, juillet 1996.
- [523] B. MOHAMMADI, «Optimal Shape Design, Reverse Mode of Automatic Differentiation and Turbulence», *AIAA-97-0099*, 1997.
- [524] B. PERTHAME, Y. QIU, B. STOUFFLET, «Sur la convergence des schémas fluctuation-splitting et leur application à la dynamique des gaz», *C.R. Acad. Sci. Paris*, 1996.
- [525] B. PERTHAME, C. W. SHU, «On positivity preserving finite volume schemes for gas dynamics», *Numerische Math.*, 1996.

- [526] 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.

Communications à des congrès, colloques, etc.

- [527] P. AYOUB, «Résolution numérique des équations de Maxwell par une méthode d'éléments finis conformes», in: *Actes du 28^{ième} Congrès National d'Analyse Numérique*, La Londe Les Maures, mai 1996.
- [528] H. BOROUCAKI, M. CASTRO, F. HECHT, P. L. GEORGE, B. MOHAMMADI, «Anisotropic Mesh Adaption in Two Dimensions for CFD», in: *Computational Fluid Dynamics 96*, J. A. Désidéri, C. Hirsch, P. Le Tallec, M. Pandolfi, J. Périaux (éd.), J. Wiley & Sons, p. 181–186, Paris, September 1996. Proceedings of ECCOMAS Conference.
- [529] J. F. BOURGAT, P. LE TALLEC, F. MALLINGER, «Adaptive Coupling between Boltzmann and Navier-Stokes Equations», in: *Colloque sur les Ecoulements à Grande Vitesse*, Arcachon, France, Mai 1996.
- [530] M.-O. BRISTEAU, R. GLOWINSKI, J. PÉRIAUX, «Waves scattering using Exact Controllability», in: *Numerical Methods in Engineering 96*, J. A. Désidéri, P. Le Tallec, E. Oñate, J. Périaux, E. Stein (éd.), J. Wiley & Sons, p. 96–103, Paris, september 1996. Proceedings of ECCOMAS Conference.
- [531] M. CLERC, P. LE TALLEC, M. MALLET, M. RAVACHOL, B. STOUFFLET, «Optimal Control for the Parabolized Navier-Stokes System», in: *Computational Fluid Dynamics 96*, J. A. Désidéri, C. Hirsch, P. Le Tallec, M. Pandolfi, J. Périaux (éd.), J. Wiley & Sons, p. 139–145, Paris, September 1996. Proceedings of ECCOMAS Conference.
- [532] A. EL BOUKILI, A. MARROCCO, «Arclength continuation methods and applications to 2D drift-diffusion semiconductor equations», in: *Numerical Methods in Engineering 96*, J. A. Désidéri, P. Le Tallec, E. Oñate, J. Périaux, E. Stein (éd.), J. Wiley & Sons, p. 658–663, Paris, september 1996. Proceedings of ECCOMAS Conference.
- [533] F. EL DABAGHI, C. FARHAT, «High Performance Computing and Finite Element Method in Fluid Flow and Acoustic Models», in: *Proc. of the Computer Methods for Water Ressources - CMWR III*, Beirut-Lebanon, september 1995. Tutorial.
- [534] F. EL DABAGHI, C. FARHAT, «Reculer les Frontières du Calcul Intensif: Architectures, Tendances et Besoins», in: *Actes du Colloque sur Les Architectures Logicielles*, Rabat-Maroc, mars 1996.
- [535] F. EL DABAGHI, «Parallel Algorithm and Performances for Solving Acoustic Unsteady Problems with Unstructured Finite Element», in: *Proc. of the Computer Methods for Water Ressources - CMWR III*, Beirut-Lebanon, september 1995.
- [536] M. HAFEZ, B. MOHAMMADI, O. PIRONNEAU, «Reverse Mode of Automatic Differentiation of Programs and Optimum Shapes Design», in: *15th ICNMF*, 1996.
- [537] E. LAPORTE, P. LE TALLEC, «Optimisation de formes et différentiation automatique», in: *Actes du 28^{ième} Congrès National d'Analyse Numérique*, La Londe Les Maures, mai 1996.
- [538] E. LAPORTE, P. LE TALLEC, «Optimisation de formes pour fluides instationnaires», in: *Proceedings of workshop Algorithmes d'Optimisation et dessin de forme en ingénierie*, 1996.
- [539] P. LE TALLEC, C. MARTIN, «A Nonlinear Elasticity Model for Structured Mesh Adaptation», in: *Computational Fluid Dynamics 96*, J. A. Désidéri, C. Hirsch, P. Le Tallec, M. Pandolfi, J. Périaux (éd.), J. Wiley & Sons, p. 275–281, Paris, September 1996. Proceedings of ECCOMAS Conference.
- [540] P. LE TALLEC, O. PIRONNEAU, F. VALENTIN, «Interfaces rugueuses et loi de paroi: application aux écoulements compressibles turbulents», in: *Actes du 28^{ème} Congrès National d'Analyse Numérique*, La Londe Les Maures, mai 1996.
- [541] P. LE TALLEC, M. VIDRASCU, «Generalised Neumann-Neumann Preconditioning for Iterative Substructuring», in: *Ninth International Conference on Domain Decomposition Methods*, P. Borstad, M. Espedal, D. Keyes (éd.), J. Wiley, Bergen, 1996.

- [542] A. MARROCCO, P. MONTARNAL, B. PERTHAME, «Simulation de modèles hydrodynamiques simplifiés et energy-transport à l'aide des éléments finis mixtes», in : *Actes du 28^{ème} Congrès National d'Analyse Numérique*, La Londe Les Maures, mai 1996.
- [543] A. MARROCCO, P. MONTARNAL, B. PERTHAME, «Simulation of the energy-transport and simplified hydrodynamic models for semiconductor equations using mixed finite elements», in : *Numerical Methods in Engineering 96*, J. A. Désidéri, P. Le Tallec, E. Oñate, J. Périaux, E. Stein (éd.), J. Wiley & Sons, p. 645–650, Paris, september 1996. Proceedings of ECCOMAS Conference.
- [544] B. MOHAMMADI, O. PIRONNEAU, F. VALENTIN, «Rough boundaries and wall laws», in : *Proceedings of the Conference on Finite Elements in Fluids: New trends and applications*, Venice (Italy), october 1995.
- [545] B. MOHAMMADI, «Nonlinear PDE and Automatic Differentiation of Programs», in : *Computational Fluid Dynamics 96*, J. A. Désidéri, C. Hirsch, P. Le Tallec, M. Pandolfi, J. Périaux (éd.), J. Wiley & Sons, p. 950–953, Paris, September 1996. Proceedings of ECCOMAS Conference.
- [546] B. PERTHAME, Y. QIU, B. STOUFFLET, «Kinetic discretization of gas dynamics using fluctuation-splitting», in : *Proceedings of the 5th International Conference on hyperbolic equations; theory, applications, computation*, J. Glimm (éd.), New-York, 1995.
- [547] R. GLOWINSKI, J. PÉRIAUX, M. SEFRIQUI, B. MANTEL, M. O. BRISTEAU, «Optimal Backscattering of an Active Reflector by means of Genetic Algorithms», in : *Computational Methods in Applied Sciences 96*, J. A. Désidéri, C. Hirsch, P. Le Tallec, E. Oñate, M. Pandolfi, J. Périaux, E. Stein (éd.), J. Wiley & Sons, p. 251–257, Paris, september 1996. Proceedings of Eccomas Conference.

Rapports de recherche et publications internes

- [548] M. AMARA, F. EL DABAGHI, «Une Méthode Optimale de Classe C^0 d'Approximation du bilaplacien», *Rapport de recherche*, Inria, 1996.
- [549] M. CLERC, P. LE TALLEC, M. MALLET, «Contrôle Optimal de Navier-Stokes Parabolisé», *Rapport de Recherche n°2653*, Inria, Rocquencourt, Septembre 1995.
- [550] F. COQUEL, B. MOHAMMADI, S. V. RAGHURAMA RAO, «A Boltzmann Scheme with Hybrid Upwind Splitting for Turbulent Viscous Flows around an After-Body Configuration», *Rapport de recherche n°95/3184*, labo. d'Analyse Numérique, Paris 6, 1996.
- [551] N. DEVAUX, F. HECHT, «Preliminary study of the non-linear system of an ASM turbulence model», *Rapport de recherche*, Inria, 1996.
- [552] F. HECHT, M.-H. LALLEMAND, P. LE TALLEC, «Technical Annex to the Periodic Progress Report I», *Rapport d'avancement*, Inria, juillet 1996.
- [553] P. LE TALLEC, J. MOURO, M. THIRIET, M. VIDRASCU, «Un Modèle Semi-discret de Couplage Fluide Structure», *Rapport de contrat PSA*, Inria, Rocquencourt, Février 1996.
- [554] P. LE TALLEC, J. MOURO, «Structures en grands déplacements couplées à des fluides en mouvement», *Rapport de recherche n°2961*, Inria, août 1996.
- [555] P. LE TALLEC, A. PATRA, «Nonoverlapping Domain Decomposition Methods for Adaptive hp Approximations for the Stokes Problem with Discontinuous Pressure Fields», *TICAM Report n°96/33*, Texas Institute for Computational and Applied Mathematics, Univ. of Texas at Austin, 1996.
- [556] P. LE TALLEC, J. P. PERLAT, «Analyse Numérique des Systèmes aux Moments de Livermore», *Rapport final de contrat CEA/CESTA*, Inria, Octobre 1996.
- [557] P. MONTARNAL, B. PERTHAME, «Analyse asymptotique des équations de dérive-diffusion et équations de Hamilton-Jacobi», *Rapport de recherche n°2885*, Inria, 1996.

Divers

- [558] M. AMARA, A. CHATTI, F. EL DABAGHI, «Une Méthode d'Elements Finis optimale de Classe C^0 pour les problèmes de fissure: Application aux plaques et validation numérique 2D», Rapport de recherche Inria, à paraître.
- [559] S. CHAABANE, F. EL DABAGHI, M. JAOUA, «On a non linear inverse problem of identifying unknown boundaries», Rapport de recherche Inria, à paraître.
- [560] C. FARHAT, M. LESOINNE, P. LE TALLEC, «Load and Motion Transfer Algorithms for Fluid/Structure Interaction Problems with Nonmatching Discrete Interfaces», submitted to AIAA Journal, 1996.
- [561] P. LE TALLEC, F. MALLINGER, «Coupling Boltzmann and Navier-Stokes Equations by Half Fluxes», submitted to JCP, 1996.
- [562] P. LE TALLEC, B. MOHAMMADI, F. VALENTIN, «Simulation des écoulements compressibles turbulents sur parois rugueuses», Rapport de recherche Inria, à paraître, 1996.
- [563] B. MOHAMMADI, O. PIRONNEAU, «Unsteady Flows computations with Wall-Laws and $k - \varepsilon$ Turbulence Model», submitted to Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1995.
- [564] B. MOHAMMADI, «Mesh Adaption and Automatic Differentiation for Optimal Shape Design», submitted to Int. J. Comp. Fluid Dynamics., 1996.
- [565] B. MOHAMMADI, «A New Optimal Shape Design Procedure for Inviscid and Viscous Turbulent Flow», submitted to Int. J. for Numerical Meth. in Fluid, 1996.
- [566] P. MONTARNAL, B. PERTHAME, «Asymptotic analysis of the drift-diffusion equations and Hamilton-Jacobi equations», submitted to Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, 1996.
- [567] M. THIRIET, AL., «Apports et limitations de la vélocimétrie par résonance magnétique nucléaire en biomécanique. Mesures dans un embranchement plan symétrique», soumis à J. Phys. III, 1996.

8 Abstract

This project aims to create and develop multidisciplinary numerical methods for the solution of complex problems in Engineering, Mechanics or Physics. This involves physical and mathematical modelling, finite element approximation, and the development of numerical methods. Five topics are more specifically addressed :

- Development of numerical solvers in Fluid Mechanics or Hydrology, integrating adaptive mesh generation, solution procedures on multiprocessors computers and error estimates,
- Fluid Structure interaction in large displacements,
- Coupling of multiscale models (turbulence, wall laws, kinetic modelling in rarefied gas dynamics),
- Semiconductor modelling,
- Optimum design and control.

RESEARCH THEMES

°Computing viscous flows (modelling and control of turbulence, fluid structure interaction, active control, hydrology).

°Simulation of semiconductors.

°Kinetic modelling of gases.

°Numerical methods in electromagnetism.

INDUSTRIAL AND INTERNATIONAL RELATIONS

°Contracts with Dassault, PSA, CEA-CESTA and CNET.

°Participation in Brite-type or HPCN European projects.

°Ongoing collaboration with the University of Kaiserslautern, and several laboratories in the Russian Academy of Science.

°Leading a joint INRIA-NSF project with the Universities of Colorado and Texas.