

*Projet M3N**Multi-Modèles et Méthodes Numériques**Rocquencourt*

THÈME 4B



*R*apport  
*d'Activité*

2002



# Table des matières

<b>1. Composition de l'équipe</b>	<b>1</b>
<b>2. Présentation et objectifs généraux</b>	<b>1</b>
<b>3. Fondements scientifiques</b>	<b>2</b>
3.1. Introduction	2
3.2. Fluides avec des frontières mobiles	2
3.3. Modélisation des Semi-conducteurs	3
3.4. Analyse particulière des fluides à l'échelle microscopique	4
<b>4. Domaines d'application</b>	<b>4</b>
<b>5. Logiciels</b>	<b>5</b>
5.1. Introduction	5
5.2. OPTMTR	5
5.3. EMC2	5
5.4. BOL2D	5
5.5. HET_2D	5
<b>6. Résultats nouveaux</b>	<b>5</b>
6.1. Biomathématiques et applications biomédicales	5
6.1.1. Modélisation et simulation des écoulements de biofluides	5
6.1.2. Écoulements sanguins	7
6.1.3. Filtration du sang	7
6.1.4. Chemotaxis	7
6.2. Algorithmes numériques et modélisation pour les fluides avec des frontières mobiles	8
6.2.1. Écoulements géophysiques à surface libre	8
6.2.2. Magnétohydrodynamique des métaux liquides	10
6.3. Semi-conducteurs	11
6.4. Modèles cinétiques appliqués à la diffusion gazeuse dans les milieux poreux nanométriques	11
<b>7. Contrats industriels</b>	<b>12</b>
7.1. Action Modélisation simplifiée de gaz dilués	12
7.2. Action Équations de Saint-Venant et écoulements en eaux peu profondes	12
7.3. Action Aluminium	12
<b>8. Actions régionales, nationales et internationales</b>	<b>12</b>
8.1. Actions régionales	12
8.2. Actions nationales	13
8.3. Relations bilatérales internationales	13
8.3.1. Europe	13
8.3.2. Méditerranée	13
8.3.3. Amériques	13
8.3.4. Asie	13
8.4. Accueil de chercheurs étrangers	13
<b>9. Diffusion des résultats</b>	<b>14</b>
9.1. Animation de la communauté scientifique	14
9.2. Actions d'enseignement	14
9.3. Autres enseignements	14
9.4. Participation à des colloques	14
<b>10. Bibliographie</b>	<b>15</b>



# 1. Composition de l'équipe

## Responsable scientifique

Benoit Perthame [Professeur, Université de Paris 6]

## Responsable permanent

Americo Marrocco [DR]

## Assistante de projet

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

## Personnel INRIA

Jean-François Bourgat [DR, retraité depuis octobre 2002]

Marie-Odile Bristeau [DR, 4/5 ]

Jean-Frédéric Gerbeau [CR]

## Collaborateur extérieur

Marc Thiriet [CR CNRS]

## Chercheur post-doctorant

Stéphanie Salmon [Onera, ARC VITESV]

## Doctorants

Emmanuel Audusse [boursier Paris 6]

Gabriel Barrenechea [boursier INRIA, jusque juin 2002]

Mohamed Belhadj [boursier INRIA]

Astrid Decoene [boursière INRIA, depuis octobre 2002]

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

## Stagiaires

Marie-Claude Desmarais [Ecole Polytechnique de Montreal]

Thomas Fortin [DEA, Université Paris VI]

Alexandra Franchitti [DEA, Université Paris VI]

Gwendal Wilczyk [DEA, MATMECA, Bordeaux]

# 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 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

### 3.1. Introduction

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 axes décrits ci-dessous.

### 3.2. Fluides avec des frontières mobiles

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

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

1. L'analyse asymptotique permet de d'obtenir des modèles simplifiés lorsque cela est possible. On est alors conduit à des modèles de type Saint-Venant qui peuvent permettre soit une simulation directe soit d'éviter certaines conditions aux limites.  
Le calcul d'écoulements rapides à surface libre est en effet souvent trop complexe pour être réalisé par la résolution directe des équations de Navier-Stokes tridimensionnelles. C'est le cas

des exemples de l'hydraulique : écoulements de rivières, zones d'inondations, marées, 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 [6]. 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 [36] 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 [37]. 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.

### 3.4. Analyse particulière des fluides à l'échelle microscopique

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

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

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

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

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

## 4. Domaines d'application

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

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

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



## 5. Logiciels

### 5.1. Introduction

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.

### 5.2. OPTMTR

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

### 5.3. EMC2

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

### 5.4. 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).

### 5.5. HET\_2D

**Participants :** Americo Marrocco [correspondant], Philippe Montarnal [ancien doctorant M3N], Abderrazzak El Boukili [ancien doctorant M3N], Frédéric Hecht [LAN, Université Paris 6. ].

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.

## 6. Résultats nouveaux

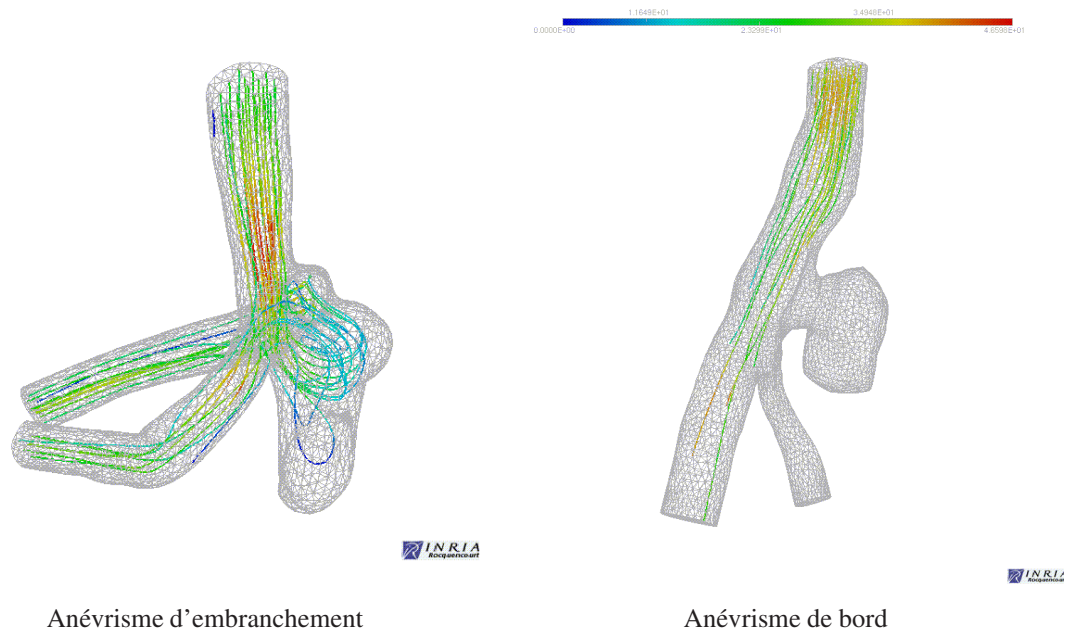
### 6.1. Biomathématiques et applications biomédicales

#### 6.1.1. Modélisation et simulation des écoulements de biofluides

**Participants :** Marie-Claude Desmarais, Alexandra Franchitti, Jean-Frédéric Gerbeau, Stéphanie Salmon, Marc Thiriet.

**Mots clés :** *biofluides, écoulements pulsés, modélisation géométrique.*

Les travaux ont porté cette année sur les écoulements physiologiques périodiques, avec deux applications. La première concerne les écoulements oscillants d'air, supposé incompressible au cours de la ventilation de repos, dans un modèle des voies aériennes proximales (pharynx et trachée). Ces travaux sont menés au sein du projet RNTS « *RMOD* ». La seconde porte sur les écoulements pulsés (signal d'entrée transformé de Fourier de la débitmétrie RMN *in vivo*) de sang, supposé newtonien, dans des anévrismes de bords et de régions d'embranchements. Cette recherche est effectuée dans le cadre de l'ARC INRIA « *VITESV* ». Quelle que soit l'application, les domaines de calcul sont obtenus par reconstruction 3D à partir des données de l'imagerie médicale.



*Figure 1. ECOULEMENT SANGUIN : a) dans un anévrisme cérébral congénital terminal (anévrisme d'embranchement) de l'artère sylvienne, b) dans un anévrisme sacculaire accidentel iliaque (anévrisme de bord) en amont de la bifurcation entre artères iliaque interne et iliaque externe. Les lignes de courant montrent que l'anévrisme d'embranchement est plus irrigué que l'anévrisme de bord, et donc davantage susceptible de se rompre*

Les collaborations avec les projets Epidaure, Gamma et Prisme, de l'INRIA ont permis de comparer plusieurs stratégies de modélisation géométriques. La reconstruction 3D

(1) soit traite un nuage de points, ensemble de points des contours de vaisseaux segmentés sur chaque coupe disponible de l'imagerie médicale, la connexion des points de couches adjacentes s'appuyant sur une triangulation de Delaunay après projection du plan d'une coupe sélectionné sur le plan de la coupe adjacente (une telle méthode permet de bien reconstruire les embranchements grâce à la fonction d'interpolation sur la surface),

(2) ou bien se base sur un rééchantillonnage des points de chaque coupe faisant suite à un traitement par spline cubique et une technique similaire à (1) mais avec un plan de projection fixé,

(3) ou bien part d'une iso-surface d'intensité, et, enfin,

(4) du calcul de l'axe des vaisseaux, dont la section droite est supposée circulaire, et de la reconstruction de la surface de la paroi vasculaire à partir du signal d'intensité. La facetisation obtenue est ensuite traitée pour fournir une triangulation compatible avec le calcul scientifique. De courts tubes rectilignes avec une extrémité correspondant à une section droite sont ajoutés aux entrée(s) et sorties du domaine maillé pour assurer une mise en place correcte des conditions aux limites. Ensuite, un remaillage conservant les courbures locales principales est effectué, suivi d'un maillage volumique.

En outre, le calcul de la contrainte de cisaillement à la paroi dans des configurations de veines collabées rectilignes à section droite uniforme a été poursuivi de façon à fournir des éléments de réflexion aux chercheurs qui travaillent sur les cultures de cellules endothéliales sous flux. De telles configurations permettent d'étudier les effets conjugués des gradients transversal et axial de la contrainte de cisaillement à la paroi - uniquement axiale -, représentés par la combinaison d'une force de traction et d'un couple de torsion agissant sur le centre d'inertie de la surface de la cellule.

### 6.1.2. Écoulements sanguins

**Participants :** Jean-Frédéric Gerbeau, Marina Vidrascu [ du projet MACS].

**Mots clés :** *modélisation, interaction fluide-structure.*

L'objet de l'étude est la simulation de l'interaction fluide-structure dans les grosses artères. Nous nous sommes heurtés depuis trois ans à de nombreuses difficultés pour étendre à la biomécanique des travaux réalisés antérieurement pour le génie civil (Serge Piperno, projet CAIMAN). L'implémentation dans le projet MACS de nouveaux éléments de coques (MITC) et l'utilisation de méthodes implicites pour le couplage fluide-structure a permis cette année de débloquer la situation. Nous disposons actuellement d'un coupleur fluide incompressible 3D - structures minces en grand déplacement, validé sur des cas tests de la littérature, et suffisamment robuste pour la simulation d'écoulements sanguins. Nous nous concentrons maintenant sur l'algorithme de couplage fluide-structure. En particulier, une méthode originale de type quasi-Newton a été proposée et est en cours de test [32].

### 6.1.3. Filtration du sang

**Participants :** Jean-Frédéric Gerbeau, Mohamed Belhadj, Benoit Perthame, Eric Cancès [du projet MicMac].

**Mots clés :** *modélisation, traitement du sang, diffusion, transport de polluant.*

Nous nous intéressons à la modélisation de la filtration du sang destiné aux transfusions. Le processus est le suivant : le sang passe à travers un filtre dont les fibres retiennent les globules blancs. Idéalement, il ne devrait rester aucun globule blanc dans le filtrat, ce qui est loin d'être le cas avec les techniques actuelles.

En collaboration avec l'Institut National de la Transfusion Sanguine (J.-L. Wautier), nous avons proposé un modèle de transport en milieux poreux avec filtration. Nous avons effectué l'analyse d'une version simplifiée de ce modèle :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t c + \operatorname{div} \mathbf{A}(c) - \sum_{i,j=1}^d \frac{\partial^2 \phi_{ij}(c)}{\partial x_i \partial x_j} = -k c s \quad \text{dans } \mathcal{D}'((0, T) \times \mathbb{R}^d), \\ \partial_t s = -k c s \quad \text{dans } \mathcal{D}'((0, T) \times \mathbb{R}^d), \\ c(0, x) = c_0(x) \geq 0 \quad \text{p.p. dans } \mathbb{R}^d, \\ s(0, x) = s_0(x) \geq 0 \quad \text{p.p. dans } \mathbb{R}^d, \end{array} \right.$$

où  $c$  désigne la concentration de globules blancs en solution et  $s$  la concentration de *sites libres* dans le filtre. L'étude a été effectuée sous des hypothèses très générales (en particulier le terme de diffusion peut complètement dégénérer) et la limite  $k \rightarrow \infty$  a été également analysée [30].

### 6.1.4. Chemotaxis

**Participants :** Americo Marrocco, Benoit Perthame.

**Mots clés :** *biomathématique, chemotaxis, algorithme numérique, élément fini, modélisation.*

Nous sommes partis d'un article de M.D. Betterton et M.P. Brenner intitulé « *Collapsing Bacterial Cylinder* » donnant un modèle pour le déplacement collectif de bactéries dans un milieu donné (modèle de Keller-Segel). Ces équations forment un modèle de dérive-diffusion transitoire qui ressemble fortement au modèle de dérive-diffusion de porteurs (électrons) dans un milieu semi-conducteur (au signe de la charge près). Nous avons donc adapté la formulation de façon à faire apparaître une variable analogue au quasi-Niveau de Fermi des semi-conducteurs pour pouvoir transcrire plus facilement l'approche et les algorithmes de résolution existant dans le code Het\_2d.

Vu les expériences numériques réalisées et les résultats obtenus pour la simulation numérique du transitoire dans les semi-conducteurs, nous avons directement implémenté le schéma totalement implicite (sur le système) au niveau de la discrétisation en temps (physique), ainsi que pour les systèmes intermédiaires (transitoires artificiels avec pas de temps locaux) provenant de l'algorithmique de résolution. Les algorithmes introduisant un découplage des équations s'étaient montrés inefficaces dans le cas des semi-conducteurs. Nous avons donc effectué différents tests en reprenant les grandeurs physiques données dans l'article cité plus haut. Nous avons

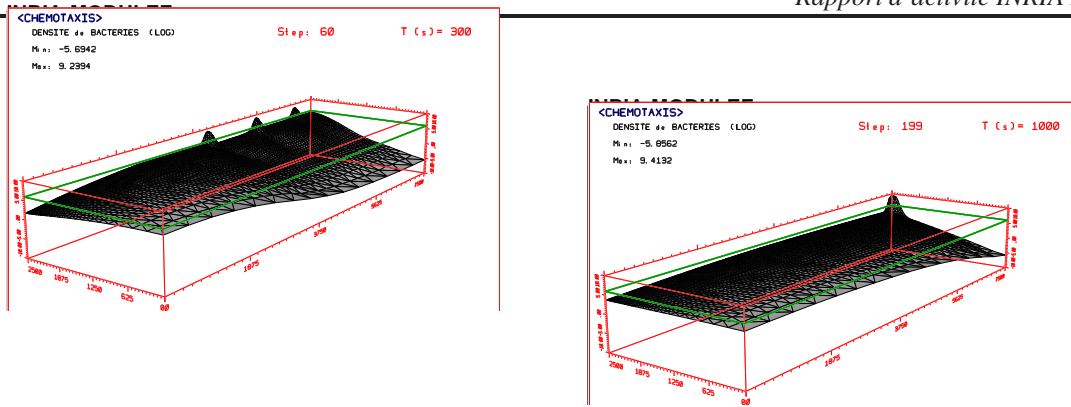
Localisation des pics de concentration  $t = 300s$ Distribution de la densité  $t = 1000s$ 

Figure 2. CONCENTRATION DES BACTÉRIES *Domaine de calcul : rectangle  $0.75cm \times 0.25cm$ . Production d'attractants limitée ( $\rho^* = 500\rho_0$ ). Densité initiale uniforme  $10^6 cm^{-3}$ .*

aussi pris en compte une variante du modèle dans lequel la production d'attractant n'est plus uniquement proportionnelle à la densité de bactéries mais diminue lorsque la concentration en bactéries devient trop importante (modélisation de l'effet de manque de nourriture pour les bactéries) ; l'évolution de la densité de bactéries est alors très différente [35].

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

### 6.2.1. Écoulements géophysiques à surface libre

**Participants :** Emmanuel Audusse, François Bouchut [ENS], Marie-Odile Bristeau, Astrid Decoene, Jean-Frédéric Gerbeau, Thodoros Katsaounis [ENS], Benoit Perthame, Chiara Simeoni, Gwendal Wilczyk.

**Mots clés :** *écoulements géophysiques, surface libre, lois de conservation, terme source, équations de Saint-Venant, schémas cinétiques, transport de polluant.*

Nous étudions la simulation d'écoulements géophysiques à surface libre principalement dans des situations où l'hypothèse d'écoulements peu profonds est valide. Pour le problème modèle de lois de conservation scalaires avec terme source, on démontre un résultat de convergence. Différentes améliorations des méthodes numériques de résolution du système de Saint-Venant ont été mises en oeuvre ainsi que pour l'équation supplémentaire du transport d'un polluant. On a aussi traité des modèles plus complexes tels que Saint-Venant multicouches. Nous nous intéressons à la simulation d'écoulements à surface libre tels que les rivières, les lacs, les régions côtières, les écoulements granulaires. Ceci concerne de nombreux problèmes liés à l'environnement : prévention et contrôle des inondations, onde de submersion due à une rupture de barrage, transport et dispersion de polluants, réseaux d'irrigation, avalanches...

Dans beaucoup de cas, l'hypothèse d'écoulements *peu profonds* permet de simuler ces phénomènes par les équations de Saint-Venant. D'une part, nous avons 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, pour les situations où cette hypothèse n'est pas justifiée, nous avons abordé l'étude d'un système de Saint-Venant multicouches et aussi du système de Navier-Stokes 3D à surface libre.

Par ailleurs, ces travaux nous ont conduit à l'étude de la convergence d'approximations numériques de lois de conservation hyperboliques scalaires avec terme source et une estimation d'erreur a été prouvée.

#### 1. Lois de conservation hyperboliques scalaires avec terme source

Cette étude a porté sur l'analyse des approximations numériques des lois de conservation scalaires avec terme source. On se concentre sur des schémas aux volumes finis semi-discrets, dans le

cas général d'un maillage non-uniforme. Pour définir des discrétisations appropriées du terme source, on introduit le formalisme spécifique de la méthode *Upwind Interface Source* et on établit des conditions sur les fonctions numériques telles que le solveur discret préserve les solutions stationnaires. Une définition rigoureuse de consistance est ensuite formulée, adaptée aux schémas d'équilibre, pour laquelle on est capable de prouver un théorème de convergence [27] de type Lax-Wendroff.

La méthode décrite précédemment est essentiellement d'ordre un en espace. Pour améliorer la précision, on développe des approches à haute résolution pour la méthode *Upwind Interface Source* et on montre que celles-ci sont un moyen efficace de dériver des schémas d'ordre plus élevé avec des propriétés convenables. On prouve une estimation d'erreur dans  $L^p$ ,  $1 \leq p < +\infty$ , pour laquelle un résultat optimal peut être obtenu dans le cas d'un maillage uniforme. On conclut alors que les mêmes taux de convergence  $\mathcal{O}(h)$  et  $\mathcal{O}(h^2)$  que dans les cas homogènes correspondants sont valables [26].

## 2. Equations de Saint-Venant

La méthode de résolution du système de Saint-Venant, développée les années précédentes, est basée sur un solveur cinétique appliqué sur des volumes finis, une des difficultés étant la prise en compte du terme source dû à la topographie du fond. Dans le cas monodimensionnel, nous avons développé en 2001 une approche où ce terme source est traité, dans l'interprétation cinétique du système, 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. En suivant les travaux sur les lois de conservation scalaires, ce schéma a été étendu à l'ordre 2 [34]. Ce code a permis des comparaisons avec des mesures expérimentales effectuées à l'IMFT (Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse) pour des écoulements dans un canal rectangulaire avec un obstacle sur le fond, on montre que l'on peut retrouver les différents régimes mis en évidence par les expériences [34] même si certains phénomènes ne peuvent pas être reproduits par le système de Saint-Venant. Par ailleurs nous avons poursuivi la validation du code 2D sur différents problèmes tests comme la rupture du barrage de Malpasset (LNHE/EDF) ou l'écoulement dans un canal courbe avec lit mineur et lit majeur (Compagnie Nationale du Rhone/Cemagref).

## 3. Système de Saint-Venant multicouches

Par définition, les équations de Saint-Venant ne permettent pas d'accéder à un profil vertical des vitesses dans l'écoulement. Or il est parfois souhaitable - notamment pour prendre en compte l'effet du vent sur un plan d'eau fermé ou pour résoudre le problème du transport de traceurs de densités différentes - d'avoir accès à ce profil sans pour autant devoir résoudre les équations de Navier-Stokes dans toute leur complexité. Une solution intermédiaire est donc apparue : le système de Saint-Venant à plusieurs couches. Le fluide est arbitrairement divisé en un nombre donné de couches. Chaque couche est régie par les équations de Saint-Venant et liée aux autres par les termes de pression - couplage sur les hauteurs d'eau - et de viscosité - couplage sur les vitesses.

Le modèle a été obtenu en suivant les travaux de J.F. Gerbeau et B. Perthame, son domaine d'application et ses relations avec le système de Saint-Venant d'une part et les équations de Navier-Stokes d'autre part ont été étudiés et la mise en œuvre numérique est en cours.

## 4. Ecoulements 3D à surface libre

Pour compléter l'étude de modèles pour les écoulements à surface libre, après un stage de DEA, une thèse démarre en Octobre 2002 sur les équations de Navier-Stokes 3D avec surface libre. Dans un premier temps on supposera la pression hydrostatique, la pression est alors remplacée par la position de la surface libre. Bien que le système obtenu ait déjà donné lieu à plusieurs travaux, de nombreuses questions restent cependant ouvertes : le problème (même linéarisé et discrétisé en temps) est-il bien posé ? les éléments finis utilisés satisfont-ils une condition inf-sup ? sait-on construire des éléments finis stables et ayant de bonnes propriétés de conservation dans le cas où

on ne néglige pas la viscosité horizontale ? Des questions relatives à l'implémentation efficace de ce type de modèle dans le code Telemac-3D d'EDF seront également abordées.

#### 5. Transport de polluant

Toujours dans le cadre des problèmes en eaux peu profondes, nous nous sommes aussi intéressés au transport d'un traceur (température, concentration de polluant) dans un écoulement. Le schéma cinétique a donc été étendu au nouveau système, composé des équations de Saint-Venant et d'une équation de transport associée, assurant là encore la préservation de plusieurs propriétés théoriques importantes : positivité et principe du maximum pour la concentration du traceur, préservation des équilibres du traceur dans un lac au repos.

Néanmoins il s'est avéré que le pas de temps imposé par la condition de CFL liée à l'hydrodynamique était mal adaptée au problème de transport et entraînait notamment une diffusion importante sur le traceur. En effet la vitesse de propagation de l'information hydrodynamique est liée au nombre  $u + \sqrt{gh}$  où  $u$  représente la vitesse du fluide et  $h$  la hauteur d'eau tandis que la dynamique du transport du traceur est dirigée par la seule vitesse  $u$ . Pour les écoulements à faible nombre de Froude - caractéristiques de la plupart des rivières de plaine - la différence est souvent importante, le rapport pouvant être de l'ordre de cent.

Nous avons donc développé une méthode à deux pas de temps distincts, liés à deux conditions de CFL différentes relatives à ces deux vitesses de propagation, permettant une meilleure prise en compte de la physique du problème tout en conservant toutes les propriétés théoriques du schéma classique. Les expériences numériques ont montré que la précision des résultats est toujours améliorée, notamment sur des maillages réguliers, et ce en une ou deux dimensions. Dans les cas où l'équation de transport du traceur est complexe - interaction de plusieurs traceurs, réactions biologiques ou chimiques... - le temps de calcul peut également être fortement réduit.

Enfin, le schéma numérique a été construit de manière à optimiser le stockage des informations nécessaires à la résolution de plusieurs problèmes de transport sur la même hydrodynamique. En effet la forme découplée du système a été respectée et la résolution du problème hydrodynamique peut être effectuée une seule fois en début de calcul, puis les flux de masse nécessaires à la résolution du problème de transport stockés afin de pouvoir résoudre ensuite différents scénarios en parallèle. Le stockage étant lié au nombre d'itérations en temps du problème de transport - et non à celui bien supérieur du nombre d'itérations hydrodynamiques - et ne concernant qu'une grandeur à chaque interface du maillage, il reste raisonnable, même pour des applications réelles en deux dimensions.

Le code 2D pour les équations de Saint-Venant et le transport d'un polluant a été appliqué à l'étude du rejet d'un polluant dans la Seine à l'aval de la station d'épuration d'Achères.

#### 6. Ecoulements granulaires, avalanches de débris

L'hypothèse d'écoulements peu profonds est en général bien vérifiée par les avalanches de débris, aussi les équations de Saint-Venant sont couramment utilisées pour simuler ces phénomènes. Le système d'équations est alors dérivé dans un référentiel lié à la pente, le comportement du milieu granulaire est pris en compte par un terme de frottement de type Coulomb qui doit permettre de simuler des états d'équilibre sur une surface inclinée. Le schéma cinétique a été appliqué et une distribution de Dirac des particules au niveau microscopique a permis de simuler les positions d'équilibre de la masse granulaire [18]. Ce travail est effectué en collaboration avec le Laboratoire de Modélisation et Tomographie Géophysique (IPGP, Paris 7).

### 6.2.2. Magnétohydrodynamique des métaux liquides

**Participants :** Jean-Frédéric Gerbeau, Claude Le Bris [Projet MicMac et CERMICS], Tony Lelièvre.

La collaboration avec Pechiney sur l'électrolyse de l'aluminium se poursuit en partenariat avec le CERMICS [31][16][24]. Cette étude a été récompensée par le prix CS 2002 (ancien « *prix CISI* ») « Mathématiques appliquées et calcul scientifique » .

### 6.3. Semi-conducteurs

**Participant :** Americo Marrocco.

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

Cette année, les études relatives aux modèles d'énergie-transport (ou hydrodynamique simplifiée) ont été reprises en liaison avec le professeur M. Anile de l'Université de Catania (Italie). Cette étude préliminaire de faisabilité devrait déboucher sur une proposition de contrat européen. Dans cette nouvelle approche, dont les tests numériques sont en cours, la matrice de diffusion reliant l'équation de continuité des électrons à celle de l'énergie n'est plus donnée de manière explicite (analytiquement) comme cela était le cas dans la famille de modèles décrite dans la thèse de Ph. Montarnal (1997) mais construite par étapes successives en partant de données (qui peuvent être discrètes) et évaluées à l'aide de formules ou interviennent la dispersion acoustique, la dispersion des phonons optiques non polaires et celle dues aux impuretés. On se trouve ainsi un peu plus proche de la modélisation physique. Ces données discrètes évaluées pour différentes valeurs de l'énergie (température) sont approchées par des splines pour une intégration dans l'algorithmique de calcul du code de simulation Het\_2d.

Parallèlement à cette démarche, des matériaux à grand gap (du type SiC) ont été introduits dans la base de données physique de Het\_2d afin d'étudier le comportement algorithmique des techniques de résolution vis à vis de ce type de matériau. Avec ce type de matériau, la dynamique des porteurs est encore plus grande qu'avec les matériaux semi-conducteurs de type III-V et donc source potentielle de difficultés numériques supplémentaires. Cependant l'algorithmique de résolution de Het\_2d à l'air de s'être bien comportée, du moins dans les exemples tests traités.

### 6.4. Modèles cinétiques appliqués à la diffusion gazeuse dans les milieux poreux nanométriques

**Participants :** Jean-François Bourgat, Benoit Perthame.

**Mots clés :** *équation de Boltzmann, milieux poreux, mélange de gaz.*

Il s'agit d'aider à la modélisation macroscopique des écoulements gazeux en milieu poreux nanométriques pour lesquels on observe des coefficients de diffusion beaucoup plus petits que ceux attendus. Pour cela nous modifions et enrichissons, à l'aide d'expériences numériques la modélisation des écoulements gazeux issue de l'équation de Boltzmann en introduisant des forces d'attraction au niveau des parois et en déviant la réflexion diffuse dans la direction du gradient de pression. En couplant ces deux effets on obtient une très forte baisse du débit. La diffusion gazeuse dans les milieux poreux nanométriques est beaucoup plus faible que ne le laisse prévoir la loi de Darcy qui modélise classiquement les écoulements en milieu poreux.

L'équation de Boltzmann, résolue par une méthode particulière aléatoire, nous avait permis, en 2001, l'étude d'écoulements gazeux dans des milieux poreux dont les porosités sont de l'ordre du libre parcours moyen du gaz et d'établir une loi de Darcy généralisée prenant en compte le gradient de température en plus du gradient de masse volumique.

Dans le cadre d'une collaboration avec le CEA-CESTA, ayant pour objectif de mettre au point un modèle numérique permettant de simuler la faible diffusion en milieux poreux nanométriques, nous avons utilisé notre logiciel pour calculer un écoulement de gaz parfait entre deux plaques dont la distance est de l'ordre du nanomètre, distance nettement inférieure au libre parcours moyen du gaz. Les résultats ne faisant apparaître aucune superviscosité, nous avons alors introduit dans notre modèle une force d'attraction exercée par la paroi sur les molécules de gaz et censée modéliser les forces de Van der Waals. Le débit obtenu, bien que plus faible, n'a pu être diminué que par un facteur 10, ce qui est insuffisant.

Nous avons ensuite modifié le modèle de réflexion des particules sur les parois. Celui-ci suppose que les particules se réfléchissent selon un modèle de réflexion diffuse qui réémet les molécules dans toutes les directions mais avec une probabilité maximale selon la normale. Nous avons dévié cette réflexion dans

la direction du gradient de pression (direction opposée à l'écoulement). La baisse de débit obtenue est significative mais bute sur une limite inférieure quand l'angle de déviation augmente et correspondant, ici aussi, à une division par un facteur dix.

Nous avons alors couplé ces deux effets, forces d'attraction des parois et faible déviation de la réflexion, et nous avons observé qu'ils s'additionnaient et faisaient chuter fortement le débit. Nous avons obtenu une baisse d'un facteur 100 dans nos essais et il semble que la décroissance s'accélère quand le gradient de pression diminue mais les expériences numériques deviennent peu lisibles et nécessitent beaucoup de pas de temps avant d'arriver à l'écoulement permanent. Il reste à relier cette baisse du débit à des grandeurs macroscopiques et notamment au gradient de pression.

## 7. Contrats industriels

### 7.1. 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).

### 7.2. Action Équations de Saint-Venant et écoulements en eaux peu profondes

**Participants :** Emmanuel Audusse, Marie-Odile Bristeau, Astrid Decoene, Jean-Frédéric Gerbeau, Benoit Perthame.

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

### 7.3. Action Aluminium

**Participants :** Jean-Frédéric Gerbeau, Claude Le Bris [CERMICS, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées].

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

## 8. Actions régionales, nationales et internationales

### 8.1. Actions régionales

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

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 magnétohydrodynamique.

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.

Le projet participe à un groupe de travail sur les avalanches de débris avec le laboratoire de Modélisation et Tomographie Géophysique (IPGP, Paris 7). Participation à l'ATIP « *Jeunes Chercheurs* » du CNRS (J-F. Gerbeau) sur les écoulements granulaires (A. Mangeney, IPGP, responsable national).

## 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).

Coordinateur de la partie française d'un réseau européen RTN « *Haemo* » sur les écoulements sanguins (octobre 2002 à septembre 2006). Participants : INRIA, Université Paris 6, Politecnico de Milan (Italie), Imperial College (Angleterre), Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (Suisse), Instituto Superior Técnico de Lisboa (Portugal), Technische Universität Graz (Autriche)

M3N participe au réseau européen I.H.P. HYKE (Hyperbolic and Kinetic equations) et en particulier une collaboration avec Catania (M.Anile, semi-conducteurs) est établie.

### 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 est bien établie.

### 8.3.3. Amériques

Des relations sont établies avec différents centres : Laval (Fortin), Ottawa (Bourgault), Austin (Weeler, Souganidis).

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

### 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

- - M. Anile, Université de Catania (Italie), (2 semaines).
- - T. Chacon-Rebollo, Université de Séville (Espagne), (1 semaine).
- - A. Ferreiro, Saint Jacques de Compostelle (Espagne) (1 semaine).
- - M. Kelimu, Institute of Mechanical Engineering (Chine) (3 semaines).
- - F. Saleri, Politecnico di Milano (Italie), (1 semaine).
- - J.M. Sellier, Université de Catania (Italie), (2 semaines).

## 9. Diffusion des 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).
- Mécanique cardiaque, cours Ecole Doctorale de Mathématiques, Paris Centre , (M. Thiriet avec Y. Maday et J.P. Françoise).
- 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)
- Méthodes de Volumes Finis, cours de mastère, Ecole Polytechnique de Tunis (B. Perthame)

### 9.3. Autres enseignements

- Organisation de l'école CEA-EDF-INRIA : Ecoulements peu profonds à surface libre, 7-10 octobre 2002 (M-O. Bristeau, B. Perthame)

### 9.4. Participation à des colloques

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

- Séminaire à l'Ecole polytechnique de Tunisie dans le cadre du projet CMCU « *Hydrodynamique des suspensions et effets de parois* », décembre 2001, (J.F. Gerbeau)
- Journées IHP Jeunes Chercheurs « *-Les limites hydrodynamiques-* », Institut Henri Poincaré, Paris, Décembre 2001 (C. Simeoni)
- Séminaire université de Chicago, janvier 2002 (B. Perthame)
- Séminaire université Northwestern, janvier 2002 (B. Perthame)
- Séminaire IAC Roma (Italy), février 2002 (C. Simeoni)
- Conférence université de Freiburg, février 2002 (B. Perthame)
- International Conference on Hyperbolic Problems : Theory, Numerics, Applications, California Institute of Technology, Pasadena (California), Mars 2002 (E. Audusse, B. Perthame, C. Simeoni)
- Séminaire à la Scuola Normala Superiore de Pisa, mars 2002, (B. Perthame)
- Séminaire à l'université de Rome, avril 2002, (B. Perthame)
- Journées Savoisiennes de Mathématiques Appliquées « *Équations de Saint-Venant : Théorie et Applications* », Chambéry, Mai 2002 (E. Audusse, M.O. Bristeau, B. Perthame, C. Simeoni)
- Conference on Advances on Nonlinear Partial Differential Equations, L'Aquila (Italy), Juin 2002 (C. Simeoni)
- Conférence invitée au « <IMPA 50th birthday > », Rio de Janeiro, juin 2002, (B. Perthame)
- Conférence invitée au colloque à la mémoire de J.L. Lions, Paris, juillet 2002 (B. Perthame)
- Séminaire, Austin, août 2002, (B. Perthame)
- Conférence invitée, Heraklion, septembre 2002 (B. Perthame)
- Fifth international Pamir Conference on Fundamental and Applied MHD, France, septembre 2002, (J.F. Gerbeau)
- Telemac Users' Club, Karlsruhe, Octobre 2002 (M.O. Bristeau, A. Decoene)
- Conférence invitée, Milan Journal of Mathematics, Milan, octobre 2002 (B. Perthame)
- Séminaire à l'école Polytechnique de Tunis, octobre 2002, (B. Perthame)

- Organisation du Colloque MS4CMS »02 ». Modélisation et simulation pour la Médecine et la Chirurgie assistée par ordinateur. Rocquencourt, novembre 2002 (M. Thiriet)
- Conférence à MS4CMS »02 », novembre 2002 (J.F. Gerbeau et M. Vidrascu)
- Conférence à l'Institut H. Poincaré, novembre 2002, (B. Perthame)
- Séminaire à l'université de Nice, novembre 2002, (B. Perthame)
- Séminaire à l'université de Bonn, novembre 2002, (B. Perthame)

## 10. Bibliographie

### Bibliographie de référence

- [1] N. BELLOMO, P. LE TALLEC, B. PERTHAME. *The solution of the nonlinear Boltzmann equation : a survey of analytic and computational methods.* in « Computer Math. Applic. », numéro 7, volume 30, 1995, pages 21-30.
- [2] F. HECHT, A. MARROCCO. *Mixed finite element simulation of heterojunction structures including a boundary layer model for the quasi-Fermi levels.* in « NASECODE X Conference », Boole Press, pages 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.* in « C.R. Acad. Sci. Paris », numéro Série I, volume 323, 1996, pages 535-541.
- [5] B. MOHAMMADI, O. PIRONNEAU. *Wall-Laws for Fluids.* volume 2, Wiley, 1998.
- [6] B. PERTHAME. *An introduction to recent developments in theory and numerics for consevation laws.* série Lecture Notes in Comp. Sc. and Eng., numéro 5, Springer, 1999, chapitre An introduction to kinetic schemes for gas dynamics.
- [7] 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..* in « J. Phys. III », volume 6, 1996, pages 529-542.

### Thèses et habilitations à diriger des recherche

- [8] G. BARRENECHEA. *Analyse numérique et lois de paroi pour des problèmes incompressibles instationnaires sur des parois rugueuses.* Thèse de doctorat, Université Paris-Dauphine, juin, 2002.
- [9] C. SIMEONI. *Méthodes Numériques pour des Equations Hyperboliques de type saint-Venant.* Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, novembre, 2002.

### Articles et chapitres de livre

- [10] P. ANDRIÈS, J. F. BOURGAT, P. LE TALLEC, B. PERTHAME. *Numerical comparison between the Boltzmann and ES-BGK models for rarefied gases..* in « Comput. Methods Appl. Mech. Eng. », volume 191, 2002, pages 3369-3390.

- [11] P. ANDRIES, K. AOKI, B. PERTHAME. *BGK models for gas mixtures*. in « J. Stat. Phys. », numéro 516, volume 106, 2002, pages 993-1018.
- [12] J. D. BENAMOU, F. CASTELLA, T. KATSAOUNIS, B. PERTHAME. *High frequency limit of the Helmholtz equation*. in « Rev. Mat. Iberoamericana », numéro 1, volume 18, 2002, pages 187-209.
- [13] J. P. BRACUNIG, J. F. BOURGAT, P. CHARRIER, F. COATENCA, B. DUBROCA, G. DUFFA, P. LE TALLEC, L. MIEUSSENS, B. PERTHAME. *Comparison of discrete velocity and random particle methods for rarefied reentry flows*. in « AIAA Journal », à paraître.
- [14] F. CASTELLA, B. PERTHAME, O. RUNBORG. *High frequency limit of the Helmholtz equation. Source on a general manifold*. in « Comm. P.D.E. », numéro 3-4, volume 27, 2002, pages 607-651.
- [15] L. FORMAGGIA, J.-F. GERBEAU, F. NOBILE, A. QUARTERONI. *Numerical treatment of defective boundary conditions for the Navier-Stokes equations*. in « SIAM J. Numerical Analysis », numéro 1, volume 40, 2002, pages 376-401.
- [16] J.-F. GERBEAU, T. LELIÈVRE, C. LE BRIS, N. LIGONESCHE. *Metal pad roll instabilities*. in « Light Metal », 2002, pages p. 483-487.
- [17] C. MAKRIDAKIS, B. PERTHAME. *Optimal rate of convergence for anisotropic vanishing viscosity limit of a scalar balance law*. in « SIAM J. Math. Anal. », à paraître.
- [18] A. MANGENEY-CASTELNAU, J. P. VILOTTE, M. O. BRISTEAU, B. PERTHAME, C. SIMEONI, S. YERNINI. *Numerical modelling of avalanches based on Saint-Venant equations using kinetic scheme*. in « Journal of Geophysical Research », à paraître.
- [19] S. NAILI, M. THIRIET, C. RIBREAU. *Etude tridimensionnelle des contraintes de cisaillement à la paroi dans un tube de section droite non circulaire*. in « C.R. Acad. Sci. Paris (Mécanique) », volume 330, 2002, pages 483-490.
- [20] S. NAILI, M. THIRIET, C. RIBREAU. *Tridimensional flow in uniformly collapsed tubes : wall shear stress*. in « Eur. Phys. J.AP », volume 17, 2002, pages 139-153.
- [21] B. PERTHAME, C. SIMEONI. *A kinetic scheme for the Saint-Venant system with a source term*. in « Calcolo », numéro 4, volume 38, 2001, pages 201-231.
- [22] M. THIRIET, S. NAILI, C. RIBREAU. *Entry length and wall shear stress in uniformly collapsed veins*. in « Computer Modeling in Engineering and Sciences », à paraître.

### **Communications à des congrès, colloques, etc.**

- [23] J. D. BOISSONNAT, R. CHAINE, P. FREY, G. MALANDAIN, F. NICOUD, S. SALMON, E. SALTEL, M. THIRIET. *From medical images to computational meshes*. in « MS4CMS"02" », novembre, 2002.

- [24] J.-F. GERBEAU, T. LELIÈVRE, C. LE BRIS. *Numerical simulations of two-fluids MHD flows*. in « Fundamental and Applied MHD. », PAMIR, 2002.
- [25] J.-F. GERBEAU, M. VIDRASCU. *An algorithm for fluid-structure interaction problems in blood flow*. in « MS4CMS"02" », novembre, 2002.
- [26] T. KATSAOUNIS, C. SIMEONI. *Second order approximation of the viscous Saint-Venant system and comparison with experiments*. in « Proceedings of Hyp2002 », à paraître.
- [27] B. PERTHAME, C. SIMEONI. *Convergence of the Upwind Interface Source method for hyperbolic conservation laws*. in « Proceedings of Hyp2002 », à paraître.
- [28] S. SALMON, M. THIRIET, J.-F. GERBEAU. *Numerical simulations of blood flows in arteries for interventional medicine*. in « MS4CMS"02" », novembre, 2002.

## Rapports de recherche et publications internes

- [29] E. AUDUSSE, M. O. BRISTEAU. *Transport of Pollutant in Shallow Water : A Two Time Steps Kinetic Method*. Rapport de recherche, numéro RR-4529, Inria, 2002, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-4529.html>.
- [30] M. BELHADJ, J.-F. GERBEAU, B. PERTHAME. *Analysis of a colloid transport model with degenerate diffusion*. Rapport de recherche, numéro RR-4468, INRIA, Mai, 2002, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-4468.html>, à paraître dans *Asymp. Analysis*.
- [31] J.-F. GERBEAU, T. LELIÈVRE, C. LE BRIS. *Simulations of MHD flows with moving interfaces*. Rapport de recherche, numéro RR-4277, INRIA, Octobre, 2001, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-4277.html>, à paraître dans *J. Comp. Phys.*.
- [32] J.-F. GERBEAU, M. VIDRASCU. En préparation.
- [33] L. GIRAUD, A. MARROCCO, J.-C. RIOUAL. *Iterative versus direct parallel substructuring methods in semiconductor device modeling*. Technical Report, numéro TR/PA/02/114, CERFACS, 2002, [http://aton.cerfacs.fr/algor/reports/algo\\_reports\\_2002.html](http://aton.cerfacs.fr/algor/reports/algo_reports_2002.html).
- [34] T. KATSAOUNIS, C. SIMEONI. *First and second order error estimates for the Upwind Interface Source method*. rapport technique, preprint, 2002.
- [35] A. MARROCCO. *2D simulation of chemotactic bacteria aggregation*. Rapport de recherche, numéro RR-4667, Inria, décembre, 2002, <http://www.inria.fr/rrrt/rr-4667.html>.

## Bibliographie générale

- [36] F. BREZZI, M. FORTIN. *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*. série Springer Series in Computational Mathematics, Springer-Verlag, 1991.
- [37] R. GLOWINSKI, P. LE TALLEC. *Augmented Lagrangian and Operator Splitting Methods in Nonlinear Mechanics*. série Studies in Applied Mathematics, SIAM, 1989.