

Synthèse de l'activité de recherche et projet de recherche

Stéphanie SALMON

23 mars 2010

Mon travail porte essentiellement sur l'analyse et le développement de nouvelles méthodes numériques pour résoudre des problèmes physiques soit d'écoulement de fluides (thèse, post-doc INRIA sur les écoulements sanguins), soit d'acoustique et d'ondes (post-doc ONERA et projet DFG-CNRS), soit enfin de physique des plasmas et d'électromagnétisme (projet CALVI depuis 2003).

Mots clés :

Simulation numérique d'écoulements de fluides.
Simulation numérique en acoustique et en électromagnétisme.
Simulation numérique en physique des plasmas.
Éléments finis (mixtes), méthodes intégrales, méthode semi-lagrangienne, méthode particulaire.
Méthodes de décomposition de domaine, calcul parallèle.

A la suite de mon doctorat consacré à une nouvelle méthode numérique pour résoudre les équations de la mécanique des fluides, j'ai réalisé deux post-docs l'un à l'ONERA sur l'acoustique et l'autre à l'INRIA sur les écoulements de bio-fluides. J'ai ensuite été recrutée comme Maître de Conférences à l'Institut de Recherche Mathématique Avancée de l'université de Strasbourg. A mon arrivée, Eric Sonnendrücker m'a proposé de co-encadrer avec lui deux étudiants, dans des domaines sur lesquels j'avais déjà travaillé (Sébastien Jund sur l'acoustique et Vincent Israël-Jost sur l'imagerie médicale). J'ai aussi collaboré à l'encadrement d'une thèse en informatique graphique concernant la mécanique des fluides et ai encadré deux stages de master 2 en calcul scientifique.

Nous avons organisé de nombreuses manifestations, importantes dans la communauté des mathématiques appliquées et de l'analyse numérique (Centre d'Été de Mathématiques et Recherche Avancées en Calcul Scientifique - CEMRACS 2003 -, Congrès national d'Analyse NUMérique - CANUM 2004 - et le CEMRACS 2005). Je suis membre de l'équipe CALVI de l'INRIA Nancy-Grand Est depuis sa création en 2003 et ai obtenu une délégation de 18 mois dans l'équipe entre septembre 2006 et février 2008. J'ai aussi fait partie de deux projets : l'un en collaboration avec une équipe allemande dans le cadre d'un projet DFG-CNRS et un projet ANR en collaboration avec le CEA-CESTA (entre autres) dont les sujets de recherche sont décrits par la suite.

J'enseigne à tous les niveaux de la licence comme du master et ai enseigné à plusieurs reprises dans d'autres composantes de l'université que mathématiques (Mathématiques et Economie,

MPC : Mathématiques-Physique-Chimie, STU : Sciences de la Terre et de l'Univers, PSI : Physique et Sciences de l'Ingénieur).

J'ai aussi, depuis 2008, accepté la responsabilité pédagogique de la 2ème année de Mathématiques et ai à ce titre pris une grande part à la mise en place dans l'UFR de la semestrialisation complète des enseignements (redoublement des enseignements semestriels afin de permettre une meilleure réussite des étudiants). Les premiers bilans de cette opération sont très positifs et rendent envisageables une pérennisation du système.

Dans la suite, je présente une synthèse de mon activité de recherche qui comporte trois parties distinctes, la première concerne mes travaux de thèse et ceux en lien avec celle-ci sur la simulation numérique d'écoulements de fluides. La deuxième partie est le travail de recherche mené depuis mon installation dans l'équipe "Equations aux Dérivées Partielles et Théorie du Contrôle" de l'IRMA. Elle porte sur les équations de l'électromagnétisme et leur couplage avec les équations cinétiques de Vlasov dans le cadre de simulations numériques en physique des plasmas. La dernière partie évoque plus rapidement des travaux qui ont donné lieu à des publications mais qui ne rentrent pas complètement dans un des deux cadres abordés précédemment.

1 Simulation numérique d'écoulements de fluides

Dans une première partie, on s'intéresse au problème de la simulation numérique d'écoulements de fluides incompressibles régis par les équations de Navier-Stokes [LL71]. Plus particulièrement, on va considérer le problème de Stokes qui traduit l'écoulement d'un fluide incompressible à nombre de Reynolds petit, c'est-à-dire un écoulement à basse vitesse ou l'écoulement d'un fluide très visqueux, deux cas qui permettent de négliger les termes non linéaires de convection apparaissant dans les équations de Navier-Stokes (voir [LL71]). Mathématiquement, il est important de savoir résoudre le problème de Stokes car dans certains algorithmes de résolution de l'équation de Navier-Stokes, chaque pas de temps nécessite la résolution de ce problème de Stokes ([GR86]). De plus, la plupart des difficultés pour résoudre numériquement les équations de Navier-Stokes sont en fait déjà présentes dans le problème linéaire de Stokes.

Il existe plusieurs formulations du problème de Stokes qui présentent chacune leurs avantages et leurs inconvénients à la fois pour la théorie et pour la résolution numérique. La première est dite **en variables primales** et fait intervenir le vecteur **vitesse**, noté \mathbf{u} , et la variable scalaire de **pression**, notée p , variables les plus naturelles pour caractériser un fluide. La première équation traduit le mouvement du fluide soumis à un champ de forces appliquées \mathbf{f} :

$$-\nu\Delta\mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f}.$$

Le paramètre (positif) ν est appelé viscosité cinématique et est caractéristique du fluide considéré, \mathbf{f} le champ de forces est souvent réduit à la seule gravité qui s'exerce sur le fluide. La deuxième équation qui traduit le caractère incompressible du fluide s'écrit :

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0.$$

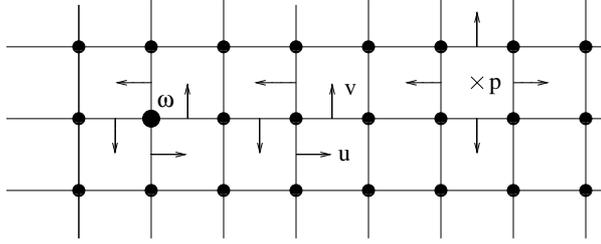


FIGURE 1 – Discretisation HAWAY sur un maillage cartésien.

Cette formulation sera désignée soit par le terme de formulation primale soit par celui de formulation (u, p) .

La deuxième formulation du problème de Stokes fait intervenir le **tourbillon**, défini comme étant le rotationnel de la vitesse et noté ω , et la **fonction courant**, notée ψ , dont le rotationnel est justement la vitesse. Dans toute la suite on y fera référence comme la formulation en fonction courant-tourbillon ou en abrégé formulation (ψ, ω) du problème de Stokes.

La dernière formulation, plus récente car étudiée par François Dubois en 1992 est une formulation mêlant variables primales et tourbillon, donc **tourbillon-vitesse-pression**, on l'appellera formulation (ω, u, p) . Cette nouvelle formulation est le sujet d'étude de la première partie du manuscrit d'habilitation mais il a été nécessaire pour bien la comprendre de revenir sur la formulation classique (ψ, ω) , qui présente de forts liens avec la formulation (ω, u, p) et dont la maîtrise est nécessaire pour appréhender la nouvelle formulation. Nous dressons donc, dans la première partie du manuscrit, un bilan quasi exhaustif de tout ce que l'on sait sur les formulations (ψ, ω) et (ω, \mathbf{u}, p) .

Une méthode éprouvée pour résoudre les équations complètes de Navier-Stokes sur des maillages quadrangulaires quasi réguliers est la méthode que nous avons surnommée HAWAY (connue sous le nom de méthode Marker And Cell -MAC- de Harlow and Welch [HW65] en mécanique des fluides, ou de grille C d'Arakawa en météorologie [Ara66] ou encore de maillages décalés pour les équations de Maxwell [Yee66]). En particulier, cette méthode HAWAY est maintenant une méthode basique pour simuler des mouvements réalistes de fluides dans la communauté d'informatique graphique, voir par exemple [GHD03]. Elle est aussi utilisée dans la plupart des codes industriels (Flow3d de Harper, Hirt et Sicilian [HHS83], Phoenix de Patankar et Spalding [PS72], Fluent [S.A], StarCD [Ltd] *etc*). La composante horizontale de la vitesse est discrétisée à l'aide de ses flux au travers des côtés verticaux de la maille, la composante verticale par ses flux au travers des côtés horizontaux de la maille et la pression est constante par maille (cf fig.1). Le tourbillon est alors naturellement défini aux sommets de la grille à partir des flux de vitesse normale tournant autour de chaque sommet (fig. 3). Pour l'analyse de cette méthode voir [Nic91], [Gir76], [GL96]. L'idée est ici d'étendre cette méthode aux maillages triangulaires non structurés. Pour cela, F. Dubois a introduit en 1992 une formulation à trois champs (tourbillon, vitesse et pression) qui utilise exactement les mêmes degrés de liberté que la méthode HAWAY (voir Fig. 1 et 2).

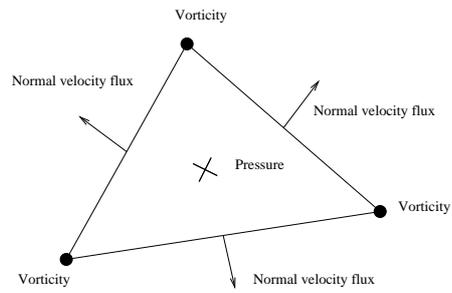


FIGURE 2 – Degrés de liberté sur un maillage triangulaire.

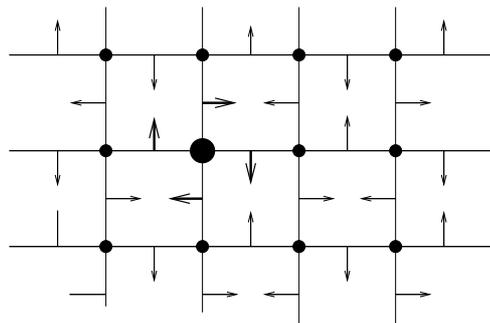


FIGURE 3 – Discrétisation du tourbillon.

L'avantage majeur de la formulation en (u, p) est sa facilité d'implémentation pour des géométries quelconques. Elle demande néanmoins de prendre en compte de façon rigoureuse la condition inf-sup qui pour être vérifiée nécessite que les espaces de discrétisation pour \mathbf{u} et p soient compatibles et donc correctement choisis ([GR86] et références incluses). Par contre l'inconvénient est que la vitesse dans ce cas n'est pas à divergence exactement nulle.

La formulation (ψ, ω) est justement une réponse à cet inconvénient. La vitesse est ici cherchée sous la forme du rotationnel de la fonction courant $\mathbf{u} = \mathbf{rot} \psi$, donc forcément à divergence nulle après discrétisation. La difficulté est ici la prise en compte des conditions limites sur la vitesse qu'il faut transposer sur la fonction courant. De plus la fonction courant n'est pas toujours définie même en deux dimensions, par exemple dans les problèmes de puits et source. Le problème de l'existence de la fonction courant est encore plus difficile en trois dimensions ([DP86], [DD86], [Rou84]). De plus, alors que la formulation (u, p) ne fait intervenir que quatre champs, la formulation (ψ, ω) revient à en calculer six (trois pour le tourbillon et trois pour la fonction courant). Enfin, dans la formulation (ψ, ω) , la pression est obtenue par un post-traitement du tourbillon, ce qui rajoute deux problèmes :

- (i) si le tourbillon est mal calculé, l'erreur se répercutera sur le calcul de la pression,
- (ii) les conditions limites à imposer sur la pression ne sont pas naturelles.

La formulation tourbillon-vitesse-pression est quant à elle un outil mathématique pour généraliser la méthode MAC à des grilles complexes. Elle est valable en trois dimensions et les conditions limites qui en découlent sont naturelles et très générales.

Dans un premier temps, on s'intéresse à la formulation fonction courant-tourbillon. En effet, cette forme du problème de Stokes bidimensionnel pourtant utilisé numériquement depuis longtemps possède un défaut important, à savoir qu'il est mathématiquement mal posé (au sens où il ne possède pas forcément une solution unique et continuellement dépendante des données) lorsque l'on cherche le tourbillon dans l'espace de Sobolev H^1 car son gradient n'est alors pas contrôlé. Ces résultats ont des conséquences importantes : les résultats numériques sont non satisfaisants sur des maillages non structurés. Dans un deuxième temps, on rappelle qu'il existe une formulation bien posée du problème de Stokes en fonction courant-tourbillon et on introduit la méthode numérique associée à cette formulation qui permet d'obtenir enfin des résultats numériques très satisfaisants sur des maillages non structurés [DSS02]. On résout ainsi l'instabilité de la formulation fonction courant-tourbillon et on améliore les précédents résultats de convergence connus de cette formulation. En particulier, on démontre alors que le tourbillon converge en moyenne quadratique avec une erreur d'ordre au moins un (contre un-demi avant) par rapport au pas du maillage [ASS04].

On s'intéresse ensuite à la formulation tourbillon-vitesse-pression du problème de Stokes. On rappelle son obtention et les premiers résultats connus de cette formulation. Par exemple, alors que les résultats numériques obtenus sur des maillages réguliers sont satisfaisants, ceux sur des maillages non structurés ne le sont pas [DSS03a]. Il s'est avéré lors de l'étude théorique que ce problème est un problème de stabilité, équivalent à celui rencontré dans la formulation fonction courant-tourbillon. En fait, le tourbillon n'est pas cherché dans le bon espace, il est cherché plus régulier qu'il ne peut l'être. On montre alors théoriquement et numériquement que la formulation tourbillon-vitesse-pression est une généralisation de la formulation fonction courant-tourbillon permettant la prise en compte de conditions limites plus générales

[DSS03b]. Les résultats obtenus sur la formulation fonction courant-tourbillon sont ensuite exploités pour obtenir des résultats théoriques et numériques très satisfaisants de la formulation tourbillon-vitesse-pression bidimensionnelle sur des maillages non structurés. Finalement, on redéfinit une formulation tourbillon-vitesse-pression tri-dimensionnelle bien posée dans un nouvel espace pour le tourbillon. On démontre aussi théoriquement que ce nouvel espace est bien celui introduit en 2D, ce qui est confirmé par des résultats numériques [SS07a].

Les travaux présentés correspondent à mon travail de thèse (1996-1999) et aux articles connexes suivants (sont signalés ceux qui sont joints au dossier).

S. Salmon,

Développement numérique de la formulation tourbillon-vitesse-pression pour le problème de Stokes, Thèse de l'Université Paris VI, 1999.

- [DSS02] F. Dubois, M. Salaün, S. Salmon,
Discrete harmonics for stream function-vorticity Stokes problem, *Numerische Mathematik*, Volume 92 Issue 4 (2002), pp 711-742.

[DSS03a] F. Dubois, M. Salaün, S. Salmon,
First vorticity-velocity-pressure numerical scheme for the Stokes problem, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Volume 192 (2003), pp 4877-4907.

- [DSS03b] F. Dubois, M. Salaün, S. Salmon,
Vorticity-velocity-pressure and stream function-vorticity formulations for the Stokes problem, *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées*, Volume 82 (2003), pp 1395-1451.

- [ASS04] T. Abboud, M. Salaün, S. Salmon,
Coupling harmonic functions-finite elements for solving stream function-vorticity Stokes problem. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Volume 20 (2004), Issue 5, pp 765 - 788.

[SS07b] M. Salaün, S. Salmon,
Numerical stabilization of the Stokes problem in vorticity-velocity-pressure formulation, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Volume 196 (2007), Issues 9-12, pp 1767-1786.

[SS07a] M. Salaün, S. Salmon,
Numerical analysis of the well-posed vorticity-velocity-pressure formulation of the bidimensional Stokes problem.

2 Simulation numérique en physique des plasmas et faisceaux de particules chargées

Dans une seconde partie, on s'intéresse au problème de la simulation numérique des équations cinétiques, type équation de Vlasov d'une part, des équations de l'électromagnétisme d'autre part et surtout au problème du couplage de ces deux modèles. En effet, dans le cadre du projet INRIA **CALVI** (CALcul scientifique et VISualisation) bilocalisé entre Nancy et Strasbourg et créé par Eric Sonnendrücker en 2003, le travail porte sur le développement et l'analyse de méthodes de simulation numérique de problèmes de physique des plasmas ou de faisceaux de particules chargées, à savoir le modèle de Vlasov-Maxwell et sa version simplifiée le modèle de Vlasov-Poisson.

Une des applications en physique des plasmas est l'étude de la stabilité et de l'équilibre des plasmas, en particulier pour la fusion contrôlée que l'on cherche à réaliser pour fournir de l'énergie dans le cadre de projets civils tel ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor) au CEA-Cadarache ou militaires tel le Laser MégaJoule (LMJ) au CESTA à Bordeaux. On peut aussi s'intéresser, par exemple pour l'endommagement de matériels spatiaux soumis à des faisceaux de particules chargés, à l'étude des plasmas et des faisceaux de particules présents dans l'espace. Un autre application est la construction et l'étude des accélérateurs de particules.

On rappelle qu'un plasma, souvent appelé quatrième état de la matière, est en fait un gaz ionisé globalement neutre, constitué de particules neutres et chargées qui réagissent à la fois entre elles et à la présence d'un champ électromagnétique. Hors équilibre thermodynamique qui est atteint grâce aux collisions entre particules, le comportement d'un plasma ne peut pas toujours être assimilé à celui d'un fluide.

Les plasmas et les faisceaux de particules chargées sont modélisés par une fonction statistique dite fonction de distribution qui représente la probabilité de présence de particules en un point de l'espace des phases. Cette fonction est alors solution de l'équation de Vlasov qui fait intervenir un champ électromagnétique créé par les particules chargées, lui-même solution des équations de Maxwell. Sous certaines hypothèses, le modèle peut être réduit au problème de l'équation de Vlasov couplée à une équation de Poisson. Dans l'étude de méthodes numériques pour résoudre ces problèmes de type Vlasov-Poisson ou Vlasov-Maxwell, deux axes de recherche peuvent être dégagés. D'abord la résolution de l'équation de Vlasov en elle-même est un défi, car elle possède la particularité d'être posée dans l'espace des phases, et donc en 3D posée dans \mathbb{R}^6 . Ensuite son couplage avec les équations de Maxwell oblige alors à privilégier certaines méthodes de résolution pour ces dernières. Nous allons nous consacrer à ces deux grands axes de recherche : la résolution de l'équation de Vlasov et la résolution des équations de Maxwell.

Premièrement, pour résoudre l'équation de Vlasov, on peut dégager deux grandes méthodes que l'on va étudier par la suite : la méthode particulière dite PIC (pour Particle In Cell) et la

résolution directe. Chacune des deux méthodes présentent des avantages et des inconvénients.

La première méthode est la méthode PIC qui consiste à suivre la trajectoire de grands ensembles de particules -des macro-particules- qui décrivent le plasma dans l'espace des phases. Pour cela on se donne une distribution initiale *i.e.* une collection de N macro-particules de position et vitesse aléatoires que l'on fait évoluer de façon déterministe suivant l'équation de Vlasov. L'avantage de cette méthode, qui en fait la méthode encore préférée à l'heure actuelle, est qu'elle est indépendante de la dimension du domaine et donc en particulier très compétitive en dimension 3. Son principal défaut est que la distribution initiale étant aléatoire, la méthode est bruitée et converge donc très lentement en fonction du nombre de macro-particules. Enfin, la plupart des (macro-)particules se regroupent évidemment dans les endroits où la probabilité de trouver des particules est grande, ce qui rend difficile l'obtention du bon comportement dans les régions à faible densité, comme les queues de distribution ou halos, où pourtant des phénomènes physiques importants ont lieu.

La deuxième méthode, introduite très tôt dans les années 70 pour résoudre des problèmes 1D (=2D de l'espace des phases) a vite été abandonnée au profit des méthodes particulières dès que l'on est passé en dimensions supérieures, puisqu'elle demande un maillage de l'espace des phases et donc un nombre de points qui explose lorsque l'on monte en dimension. Mais depuis quelques années, grâce à l'augmentation de la puissance de calcul des ordinateurs, la simulation de l'évolution des plasmas et des faisceaux de particules basée sur une résolution directe de l'équation de Vlasov sur un maillage de l'espace des phases redevient une alternative aux méthodes particulières habituellement employées. De plus, la force de ces simulations directes réside dans le fait qu'elles ne sont pas bruitées (contrairement aux méthodes PIC) et que l'approximation est de même résolution sur tout l'espace des phases, en particulier dans les régions à faible densité de particules. L'inconvénient principal est que beaucoup de ces (déjà très) nombreux points sont inutiles car la fonction de distribution des particules y est nulle, ce qui rend ces méthodes directes coûteuses en temps de calcul et en mémoire. C'est particulièrement vrai pour la simulation des faisceaux de particules où le faisceau bouge rapidement dans l'espace des phases. Pour pallier cet inconvénient, on peut penser à deux méthodes soit un maillage adaptatif, ce qui permet de diminuer le nombre de points en n'en mettant que là où ils sont nécessaires (voir les travaux [GHPS04] par exemple) soit celle dont on va parler ici, à savoir un maillage mobile qui suit la forme de la fonction de distribution et permet de ne mailler que la partie de l'espace des phases sur laquelle celle-ci est *a priori* non nulle.

On étudie alors une méthode directe sur un maillage de l'espace des phases introduite par [CK76] et Sonnendrücker *et al.* [SRBG99], la méthode semi-lagrangienne dont on cherche à diminuer le coût en travaillant sur un maillage mobile. Les premiers résultats en 1D (= 2D dans l'espace des phases) obtenus par E. Sonnendrücker et E. Oudet ont été publiés dans [SFF⁺04]. En 2006, avec N. Crouseilles, nous avons utilisé avec succès cette méthode de maillage mobile en 1D afin de simuler un problème d'interaction laser-plasma. Nous avons travaillé sur un code semi-lagrangien écrit par A. Ghizzo (Laboratoire de Physique des Milieux Ionisés et Applications, Nancy) qui étudie l'interaction entre un laser et un plasma. Pour cette simulation directe sur maillage de l'espace des phases, il est nécessaire de mailler une grille importante

afin de prendre en compte les instabilités qui vont se produire et de la mailler finement sinon les instabilités attendues ne se déclenchent pas. Donc lors d’une grande partie du temps de simulation, tant que les instabilités n’ont pas démarré, beaucoup de points de la grille sont inutiles car la fonction de distribution y est nulle. Nous introduisons donc un maillage mobile de l’espace des phases qui suit parfaitement le développement de ces instabilités et permet de réduire drastiquement le temps de calcul (de 8h30 à 2h30). Ces résultats très prometteurs laissent envisager un passage bénéfique aux dimensions supérieures. Donc, toujours avec N. Crouseilles, nous avons appliqué le même genre d’algorithme au code de calcul LOSS qui résout les équations de Vlasov-Poisson en 2D (= 4D dans l’espace des phases) à l’aide de splines locaux [CLS07]. On aboutit alors aux premiers résultats d’une méthode de maillage mobile en 4D. La méthode a ensuite été optimisée en couplant méthode de parallélisation du domaine des positions et maillage mobile dans le domaine des vitesses, ce qui donne lieu au code de calcul LOSSx.

Par la suite, on se consacre à la résolution numérique des équations de Maxwell par la méthode des éléments finis conformes. En effet, on souhaite avoir des solveurs de Maxwell efficaces et très précis et ce, pour des géométries complexes. Donc nous allons avoir besoin de méthodes d’ordre élevé et de maillages non structurés, d’où le choix des méthodes d’éléments finis, avec lesquelles on peut facilement monter en ordre et gérer les maillages non structurés (par opposition aux méthodes de type différences finis comme le solveur de Yee [Yee66] par exemple). En fait, nous avons d’abord regardé le même type de solveur pour les équations de l’acoustique dans le cadre du projet franco-allemand DFG-CNRS ”Noise Generation in Turbulent Flows” que nous menions en collaboration avec l’équipe de l’IAG de Stuttgart. L’objectif était de coupler les équations de l’acoustique et les équations de fluide afin de trouver la source et d’évaluer le bruit produit par les écoulements de fluides turbulents. Les caractéristiques voulues du solveur d’acoustique dont nous étions chargés sont donc les mêmes, à savoir très précis et en maillages non structurés, d’où le choix de méthodes d’éléments finis. Nous avons ensuite utilisé notre expérience pour les solveurs de Maxwell, cette fois dans le cadre d’un projet ANR (ANR-06-CIS6-013-01) dénommé HOUPIC (High Order finite element Partice-In-Cell solvers on Unstructured grids) dont l’objectif est de coupler un solveur Maxwell 3D éléments finis d’arêtes d’ordre élevé à un code PIC pour résoudre l’équation de Vlasov en trois dimensions d’espace (= 6D de l’espace des phases). Le point commun, et le gros défaut, des solveurs éléments finis de Maxwell et d’acoustique lorsqu’on résout ces équations dans le domaine temporel est d’avoir une matrice de masse à inverser à chaque pas de temps, d’où un coût élevé. Un moyen simple de le diminuer est d’avoir des matrices de masse diagonales, d’où la technique dite de condensation de masse, introduite par G. Cohen et P. Joly [Coh01, EJ97] qui rend ces matrices diagonales en choisissant correctement les degrés de liberté de la méthode [JS07]. Dans le cadre du couplage entre un solveur Maxwell et un solveur PIC, deux points sont importants. Premièrement, les éléments finis utilisés pour le solveur Maxwell ne doivent absolument pas créer de modes numériques (dits “spurious modes”) non physiques car ceux-ci seront grandement amplifiés par le bruit numérique inhérent aux simulations PIC. D’où le choix de méthode conforme et donc le choix d’éléments d’arêtes qui sont les éléments conformes dans l’espace naturel du champ électrique $H(\text{rot})$ et qui ont été introduits par Nédélec [Néd80]. Le problème de condensation de masse de ce genre d’éléments est délicat sur des maillages

triangulaires ou tétraédriques donc non structurés, mais relativement facile sur les maillages structurés. Nous choisissons donc de travailler sur des maillages hybrides où une grosse partie du domaine est maillée de façon structurée, ce qui permet d'utiliser la condensation de masse. Mais cette solution n'est pas applicable aussi facilement en 3D où nous ne considérons que des maillages non structurés, voir la partie programme de recherche.

Evidemment, toutes les contraintes de conformité vont guider notre choix des éléments d'arêtes. Ensuite, nous travaillons non seulement sur des méthodes d'ordre élevé en espace mais aussi en temps et nous introduisons alors des schémas en temps d'ordre élevé. Nous comparons des schémas symplectiques qui par définition conservent l'énergie présente dans le problème et des schémas basés sur un développement de Taylor [DM05b, DM05a], schémas qui doivent dans certains cas être stabilisés. Nous avons mené une importante étude numérique afin d'obtenir les solveurs Maxwell les plus efficaces et les plus précis possibles. Pour cela, nous comparons les erreurs de dissipation et de dispersion des différents schémas en espace et en temps et mesurons leur efficacité, *i.e.* le temps de calcul et la finesse du maillage nécessaires à l'obtention d'une solution avec une erreur donnée [JSS08].

Le deuxième point important à considérer lors du couplage d'un solveur Maxwell et d'un solveur PIC est l'équation de conservation de la charge qui doit être vérifiée au niveau numérique à chaque pas de temps afin de garantir que les solutions sont bien les solutions physiques des équations de Maxwell. Cette équation de conservation de la charge implique les densités de courant et de charge, obtenues à partir de la fonction de distribution solution de l'équation de Vlasov, et qui rentrent comme données du problème de Maxwell. Le courant obtenu à partir de l'évolution de l'équation de Vlasov doit être calculé d'une façon bien particulière. Nous avons alors généralisé la méthode de la "particule virtuelle" d'Eastwood [Eas91] à tous types d'éléments finis et tous schémas en temps pour les équations de Maxwell et à toute fonction de régularisation des particules [CPJSS08].

Les travaux présentés dans cette partie correspondent aux publications suivantes (sont signalées celles qui sont jointes au dossier).

- [CGS07] N. Crouseilles, A. Ghizzo, S. Salmon.

Vlasov laser-plasma interaction simulations in the relativistic regime with a moving grid, 2007. *Rapport de Recherche INRIA 6109*.

- [JS07] S. Jund, S. Salmon,

Arbitrary high order finite element schemes and high order mass-lumping, *Int. J. Appl. Math. Comput. Sci.*, Volume 17, n 3 (2007).

[JSS08] S. Jund, S. Salmon, E. Sonnendrücker

High order conforming finite-element discretisation of the Maxwell equations, *Soumis*, 2010.

[CPJSS08] M. Campos-Pinto, S. Jund, S. Salmon, E. Sonnendrücker

Charge conserving FEM-PIC codes on general grids, *Soumis*, 2009.

[CPS08] M. Campos-Pinto, S. Salmon

3 Annexes

On commente les articles suivants (sont signalés ceux qui sont joints au dossier) :

Lors du **post-doc à l'ONERA**, le travail portait sur une méthode de parallélisation d'un code de calcul. J'ai appliqué une méthode de décomposition de domaine développée par F.-X. Roux et C. Farhat, la méthode FETI à un ou deux champs, à un problème d'acoustique tridimensionnel (méthodes d'éléments finis et d'éléments infinis, calcul distribué par MPI). L'objectif était d'optimiser la convergence de ces méthodes en choisissant au mieux l'opérateur transparent discret qui simule l'absence de frontière entre les différents domaines distribués aux différents processeurs. L'optimisation de cet opérateur se fait généralement dans le continu, mais nous avons travaillé directement sur l'opérateur discret, ce qui présente l'avantage d'être applicable à tous problèmes. Les résultats obtenus avec une méthode complètement algébrique et facile à implémenter sont très satisfaisants pour la méthode à deux champs et sont publiés dans [7].

- [7] F. Magoulès, F-X. Roux, S. Salmon,
Optimal discrete transmission conditions for a non-overlapping domain decomposition method for the Helmholtz equation, *SIAM Journal on Scientific Computing*, Volume 25 (2004), Issue 5, pp 1497–1515.

Lors du **post-doc à l'INRIA**, je devais coordonner les différentes équipes de recherche qui travaillaient dans une Action de Recherche Coopérative (VITESV) pour obtenir un outil de simulation numérique de l'écoulement sanguin, basé sur la reconstruction de la géométrie tridimensionnelle des vaisseaux sanguins à partir de l'imagerie médicale. Ces simulations numériques tri-dimensionnelles étaient conçues comme une aide au diagnostic et à la planification thérapeutique. Nous avons démontré la faisabilité d'une chaîne quasi automatique allant des images médicales aux simulations numériques de l'écoulement sanguin dans les artères maillées du patient considéré. Une importante partie du travail portait sur le passage "images médicales" à "maillage de calcul" éléments finis. Cette partie du travail fait l'objet d'une publication dans le journal *Medical Image Analysis* ([9]). Les résultats d'un écoulement instationnaire (Navier-Stokes incompressible) dans une géométrie tridimensionnelle reconstruite à partir d'images médicales d'anévrismes cérébral et iliaque ont été publiés dans [8].

- [8] J-F. Gerbeau, S. Salmon, M. Thiriet,
Medical image-based computational model of pulsatile flow in saccular aneurisms, *Modélisation Mathématique et Analyse Numérique (M2AN)*, Volume 37 Issue 4 (2003), pp. 663-679.
- [9] J-D. Boissonnat, R. Chaine, P. Frey, G. Malandain, S. Salmon, E. Saltel et M. Thiriet,
From arteriographies to computational flow in saccular aneurisms : the INRIA experience. *Medical Image Analysis*, Volume 9 (2005), Issue 2, pp 133-143.

L'objectif de la thèse de V. Israël-Jost, soutenue en novembre 2006, était l'amélioration de l'imagerie scintigraphique du petit animal. Cette forme d'imagerie est une imagerie fonctionnelle et non anatomique qui permet de juger du bon fonctionnement ou de la bonne perfusion d'un organe. Pour l'homme, la gamma-caméra qui tourne autour du patient et imprime les images sur le récepteur présente un collimateur parallèle. Mais pour le petit animal (rat, souris), la résolution du dispositif est de l'ordre de grandeur des organes étudiés et il est alors impossible de reconstruire des images raisonnables. Pour obtenir des images correctes, il faut utiliser un collimateur conique afin de grossir l'image sur le récepteur. Les méthodes algébriques connues alors pour reconstruire les images en 3D ont été adaptées à ce collimateur conique et optimisées afin de réduire le temps de reconstruction. Les résultats font l'objet de publication dans un journal d'imagerie médicale [10].

[10] V. Israël-Jost, P. Choquet, S. Salmon, C. Blondet, E. Sonnendrücker, A. Constantinesco. Pinhole SPECT imaging : Compact Projection/Backprojection Operator for Efficient Algebraic Reconstruction. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, Volume 25 (2006), Issue 2, pp 158 - 167.

4 Projet de recherche

Concernant la première partie sur la simulation numérique d'écoulements de fluide, la formulation tourbillon-vitesse-pression du problème de Stokes bidimensionnel donne de bons résultats numériques dans certains cas de conditions limites seulement (en particulier quand la vitesse est cherchée nulle sur tout le domaine). Le verrou théorique empêchant une bonne résolution numérique quelles que soient les conditions limites est le problème de décomposition de champs de vecteurs (encore appelée décomposition de Helmholtz) avec conditions limites mêlées et dans des domaines non suffisamment réguliers. Il existe une importante littérature au sujet des domaines non suffisamment réguliers, mais encore assez peu sur la partie conditions limites mêlées. Des résultats théoriques permettraient d'exploiter numériquement un des avantages de la formulation tourbillon-vitesse-pression, à savoir des conditions limites très générales.

Un autre point est l'application de la méthode couplée éléments finis-méthode intégrale pour la formulation (ψ, ω) bidimensionnelle pour le problème non linéaire de Navier-Stokes. Très efficace pour le problème de Stokes, cette méthode devrait permettre d'obtenir de meilleurs résultats en 2D sur des maillages non structurés et ce très rapidement. On rappelle que l'intérêt de cette formulation est qu'elle ne demande en 2D que le calcul de 2 inconnues scalaires, d'où sa rapidité et sa popularité.

Pour ce qui est de la formulation tourbillon-vitesse-pression bien posée en 3D, cette formulation n'est pas exactement le problème de Stokes avec les conditions limites classiques, mais avec une condition limite dont nous ne connaissons pas à l'heure actuelle la signification physique. Pour discrétiser correctement l'espace des tourbillons et envisager le numérique de cette formulation, il faut trouver l'analogue de l'espace des fonctions harmoniques, qui sont en 3D des fonctions qui annulent un rotationnel faible. Là encore, la décomposition de Helmholtz est un point clé qu'il convient de bien comprendre afin d'exhiber ces fonctions à rotationnel faible nul.

Toujours, sur la partie simulation numérique d'écoulements de fluide, j'envisage une collaboration avec Nicolas Passat, informaticien au LSIIT et des neurobiologistes sur la simulation d'écoulement sanguin dans le réseau veineux et artériel cérébral. Nous avons commencé à travailler (stage de M2 de Céline Caldini) : l'objectif est de permettre la génération d'images "de synthèse" d'écoulements sanguins dans des réseaux cérébraux réalistes afin de les utiliser par la suite comme référence pour les méthodes de segmentation d'images de réseaux avec flux sanguin. En effet, il existe deux types d'imagerie médicale : une imagerie dite anatomique où l'on ne reconstruit que la géométrie et une imagerie fonctionnelle où l'on reconstruit non seulement une géométrie mais aussi d'autres informations comme le flux sanguin (débit, vitesse, ...). Pour le premier type d'imagerie (l'anatomique), il existe des images de référence permettant de valider toute nouvelle méthode de segmentation explorée par les chercheurs en segmentation de données médicales (*cf* BrainWeb). Mais pour le deuxième type d'imagerie, de telles images de référence ne sont pas connues. Nos images pourraient donc servir de référentiel de comparaison aux nombreuses méthodes d'analyse d'images vasculaires (réseaux avec flux sanguin) proposées par la communauté. Les écoulements sanguins seront simulés à l'aide d'un modèle mathématique approprié dans des maillages obtenus par segmentation d'images médicales réelles et reconstruction. Les quatre axes de ce projet sont (i) l'obtention

de modèles géométriques vasculaires anatomiquement corrects par segmentation de données médicales, (ii) le passage de ces modèles géométriques à des maillages de calcul adaptés afin de permettre des simulations de fluide cohérentes, (iii) l’obtention d’écoulement fluide dans ces maillages et (iv) la reconstruction d’images références pour la validation de méthodes d’analyse d’images avec flux.

Concernant les problèmes de physique des plasmas et faisceaux de particules chargées, d’autres travaux sur le maillage mobile et la résolution directe sont prévus, les résultats obtenus à l’heure actuelle ne sont que préliminaires. Nous devons tester la robustesse de l’algorithme et en mesurer l’efficacité pour montrer que l’on peut ainsi passer des cas physiquement réalistes, mais encore 2D, qui n’étaient pas envisageables en simulation directe jusqu’ici.

Le projet ANR HOUPIC se termine, le code 3D Vlasov-Maxwell PIC- éléments finis d’arête est développé et parallélisé et nous sommes en phase de test. Une collaboration est en cours avec l’Observatoire de Strasbourg afin d’utiliser le code pour simuler ce qu’il se passe dans les pulsars. Nous envisageons de continuer à travailler avec un de nos partenaires (le CEA-CESTA) qui a, à l’heure actuelle, un code Vlasov-Maxwell PIC - méthode de Galerkin discontinue qui ne conserve pas la charge de façon inhérente. Il faut donc explorer comment notre méthode de conservation de la charge pourrait être modifiée afin d’être applicable avec une méthode Galerkin discontinue.

Le code 3D Vlasov-Maxwell PIC- éléments finis d’arête possède toujours l’inconvénient d’avoir une matrice de masse non diagonale à inverser sur des maillages non structurés, deux axes de recherche pour pallier ce problème. Le premier est, comme prévu au départ, de rajouter une couche de pyramides entre le maillages structuré (en hexaèdres) et le maillage non structuré (en tétraèdres). Il faut pour cela adapter les éléments finis $H(\text{rot})$ - conformes introduits par [BCD10] à notre cadre à savoir obtenir des éléments d’arête vivant dans des espaces vérifiant une suite exacte (ou diagramme de de Rham). On pourra alors, comme en 2D, travailler avec des maillages hybrides sur lesquels la matrice de masse sera diagonale sur la partie structurée, qu’on choisira la plus large possible par rapport au domaine de calcul afin de limiter la taille du bloc de la matrice de masse non diagonal.

Un autre axe de recherche en cours avec M. Campos Pinto est une méthode numérique type éléments finis, s’inspirant des éléments finis de Whitney et permettant d’obtenir des matrices de masse diagonale sur des maillages non structurés aussi bien en 2D qu’en 3D. Nous avons jusqu’ici obtenu des résultats numériques préliminaires encourageants en 2D et avons commencé l’étude d’erreur théorique en 2D et en 3D. L’intérêt de cette méthode réside dans le fait que nous continuons à travailler dans le cadre $H(\text{rot})$ - conforme et donc éliminons tout mode non physique artificiel qui serait amplifié par la méthode PIC et détruirait la solution. De plus, nous gardons les espaces de discrétisation en suite exacte, ce qui permettrait d’assurer que la méthode conserve la charge de façon inhérente. Enfin, l’utilisation de méthodes s’inspirant des éléments finis de Whitney permet d’envisager l’utilisation d’approximations d’opérateur de Hodge complètement diagonaux mais ne faisant à aucun moment intervenir le maillage dual, maillage relativement difficile à construire, surtout en 3D.

Références

- [Ara66] A. Arakawa. Computational design for long-term numerical integration of the equations of fluid motion. *J. of Computational Physics*, 1 :119–143, 1966.
- [ASS04] T. Abboud, M. Salaün, and S. Salmon. Coupling harmonic functions-finite elements for solving the stream function-vorticity Stokes problem. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 20(5) :765–788, 2004.
- [BCD10] M. Bergot, G. Cohen, and M. Duruflé. Higher-order finite elements for hybrid meshes using new nodal pyramidal elements. *J. Sci. Comput.*, 42 :345–381, 2010.
- [CGS07] N. Crouseilles, A. Ghizzo, and S. Salmon. Vlasov laser-plasma interaction simulations in the relativistic regime with a moving grid. Technical Report 6109, INRIA Nancy Grand Est, 2007.
- [CK76] C.Z. Cheng and G. Knorr. The integration of the Vlasov equation in configuration space. *J. Comput. Phys.*, 22 :330–, 1976.
- [CLS07] N. Crouseilles, G. Lattu, and E. Sonnendrücker. Hermite spline interpolation on patches for a parallel solving of the Vlasov-Poisson equation. *Int. J. Math. Comput. Sci.*, 17(3) :335–349, 2007.
- [Coh01] G. Cohen. *Higher-Order Numerical Methods for Transient Wave equation*. Springer-Verlag, 2001.
- [CPJSS08] M. Campos-Pinto, S. Jund, S. Salmon, and E. Sonnendrücker. A general formulation for electromagnetic PIC codes. En préparation, Université Louis Pasteur-Strasbourg, 2008.
- [CPS08] M. Campos-Pinto and S. Salmon. Méthodes numériques en électromagnétisme,. Cours de M2, Université Louis Pasteur-Strasbourg, 2007-2008.
- [DD86] F. Dubois and J.M. Dupuy. A three dimensional vector potential formulation for solving transonic flow with mixed finite elements. In *6th International Symposium on Finite elements methods in flow problems*, Antibes, France, 1986.
- [DM05a] M. Dumbser and C. D. Munz. ADER discontinuous Galerkin schemes for aeroacoustics. *C. R. Mécanique*, 333(9) :683–687, 2005.
- [DM05b] M. Dumbser and C. D. Munz. Arbitrary high order discontinuous Galerkin schemes. In S. Cordier, T. Goudon, M. Gutnic, IRMA series in mathematics E. Sonnendrücker, and theoretical physics, editors, *Numerical Methods for Hyperbolic and Kinetic Problems*. European Mathematical Society, 2005.
- [DP86] F. El Dabaghi and O. Pironneau. Vecteurs de courant et fluides parfaits en aérodynamique numérique tridimensionnelle. *Numerische Mathematik*, 48 :561–589, 1986.
- [DSS02] F. Dubois, M. Salaün, and S. Salmon. Discrete harmonics for stream function-vorticity Stokes problem. *Numer. Math*, 92(4) :711–742, 2002.
- [DSS03a] F. Dubois, M. Salaün, and S. Salmon. First vorticity-velocity-pressure numerical scheme for the Stokes problem. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 192 :4877–4907, 2003.

- [DSS03b] F. Dubois, M. Salaün, and S. Salmon. Vorticity-velocity-pressure and stream function-vorticity formulations for the Stokes problem. *J. Math. Pures Appl.*, 82 :1395–1451, 2003.
- [Eas91] J.W. Eastwood. The virtual particle electromagnetic particle-mesh method. *Comput. Phys. Comm.*, 64 :252–266, 1991.
- [EJ97] A. Elmkins and P. Joly. Edge finite elements and mass lumping for Maxwell’s equations : the 3d case. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 325(11) :1217–1222, 1997.
- [GHD03] O. Génevaux, A. Habibi, and J-M. Dischler. Simulating fluid-solid interaction. In *Graphics Interface*, pages 31–38. CIPS, Canadian Human-Computer Communication Society, A K Peters, June 2003. ISBN 1-56881-207-8, ISSN 0713-5424.
- [GHPS04] M. Gutnic, M. Haefele, I. Paun, and E. Sonnendrücker. Vlasov simulation on an adaptive phase space grid. *Comput. Phys. Comm.*, 164 :214–219, 2004.
- [Gir76] V. Girault. A combined finite element and Marker and Cell method for solving Navier-Stokes equations. *Numerische Mathematik*, 26(183) :39–59, 1976.
- [GL96] V. Girault and H. Lopez. Finite element error estimates for the MAC scheme. *IMA Journal Numer. Anal.*, 16 :347–379, 1996.
- [GR86] V. Girault and P-A. Raviart. *Finite element methods for Navier-Stokes equations*, volume 5 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 1986. Theory and algorithms.
- [HHS83] R.P. Harper, C.W. Hirt, and J.M. Sicilian. Flow2d : a computer program for transient,two-dimensional flow analysis. *Flow Science Inc.*, FSI-83-00-01, 1983.
- [HW65] F. H. Harlow and J. E. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Physics of Fluids*, 8 :2182–2189, 1965.
- [JS07] S. Jund and S. Salmon. Arbitrary high order finite element schemes and high order mass-lumping. *Int. J. Appl. Math. Comput. Sci.*, 17(3) :375–393, 2007.
- [JSS08] S. Jund, S. Salmon, and E. Sonnendrücker. High order conforming finite-element discretisation of the Maxwell equations. En préparation, Université Louis Pasteur-Strasbourg, 2008.
- [LL71] L. Landau and E. Lifchitz. *Mécanique des fluides*, volume VI of *Physique théorique*. Editions Mir, 1971.
- [Ltd] Computational Dynamics Ltd.
- [Néd80] J.C. Nédélec. Mixed finite elements in \mathbb{R}^3 . *Numerische Mathematik*, 35 :315–341, 1980.
- [Nic91] R.A. Nicolaidis. Analysis and convergence of the MAC scheme. 1. The linear problem. ICASE Report 91-28, NASA, 1991.
- [PS72] S.W. Patankar and D.B. Spalding. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 15 :1787–1806, 1972.

- [Rou84] F.X. Roux. Méthode d'éléments finis mixtes et hybrides. Seminar, Paris 6 University, 1984.
- [S.A] Fluent France S.A.
- [SFF⁺04] E. Sonnendrücker, F. Filbet, A. Friedman, E. Oudet, and J.L. Vay. The semi-lagrangian method for the numerical resolution of the Vlasov equations. *Comput. Phys. Comm.*, 164 :390–395, 2004.
- [SRBG99] E. Sonnendrücker, J. Roche, P. Bertrand, and A. Ghizzo. Vlasov simulation of beams on a moving phase space grid. *J. Comput. Phys.*, 149 :201–220, 1999.
- [SS07a] M. Salaün and S. Salmon. Numerical analysis of the well-posed vorticity-velocity-pressure formulation of the bidimensional Stokes problem. *soumis à SINUM*, 2007.
- [SS07b] M. Salaün and S. Salmon. Numerical stabilization of the Stokes problem in vorticity-velocity-pressure formulation. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 196(9-12) :1767–1786, 2007.
- [Yee66] K.S. Yee. Numerical solution of initial boundary value problems in isotropic media. *I.E.E.E. Trans. antennas propagation*, 1966.