

Compte-rendu d'activité quadriennal du LRC MESO : 2005-2008

**CMLA, ENS de Cachan, CEA DAM
61 Avenue du Pt Wilson 94235 Cachan**

Nous présentons les activités de recherche et les actions de formation réalisées dans le cadre du LRC MESO depuis sa création en 2005.

Présentation du LRC MESO

Le LRC MESO est un lieu de collaboration et d'échanges entre des physiciens concepteurs et utilisateurs de modèles numériques et des mathématiciens développant et analysant des méthodes numériques pour des problèmes réels, conception de codes incluse.

Dirigé par **Daniel Bouche**, ingénieur au CEA, il a été créé en juin 2005 et il concrétise le partenariat entre le Centre de Mathématiques et de leurs applications (CMLA) et deux départements du CEA DAM Ile de France. Ces départements regroupent des équipes de physiciens : physique du solide, des plasmas, des écoulements, électromagnétisme. Le CMLA apporte ses compétences en analyse numérique du calcul scientifique, conception et réalisation de codes de simulation.

Le LRC regroupe dans les locaux du CMLA des membres permanents, mathématiciens du CMLA et physiciens du CEA, et des étudiants en thèse ou des post-doctorants et s'appuie sur les moyens de calcul très importants du CEA DAM Ile de France, acteur majeur de la simulation Hautes Performances. L'ENS et le CNRS apportent d'un côté, un environnement matériel et des mètres carrés, du temps de recherche et de coordination, ainsi que des postes de directeurs de recherche associés. De son côté, le CEA, outre ses problématiques, apportent des financements pour accueillir doctorants ou post-doctorants et affectent aux structures des ingénieurs de recherche.

A Activités de recherche

Lors de la création du LRC en 2005 entre le CMLA et Le DPTA (Département de physique Théorique et Appliquée) du CEA DAM Ile de France, quatre thèmes de recherche avaient été définis :

- modélisation mésoscopique des matériaux (inertes ou énergétiques)
- applications des équations cinétiques,
- mécanique des fluides incompressibles,
- électromagnétisme, faisceaux de particules, et diffraction.

Les activités se sont développées suivant les thèmes initiaux, avec des extensions aux thèmes connexes. Par exemple, sur les matériaux, le thème modélisation mésoscopique a été élargi et des travaux ont été réalisés sur la modélisation microscopique. Nous traiterons donc globalement de modélisation des matériaux (section 1). De même, des besoins sont apparus en mécanique des fluides compressibles, ce qui nous conduit à présenter les activités en mécanique des fluides (section 2). Les études des équations cinétiques, au départ pensées pour des équations de transport réaction, ont trouvé nombre d'applications (section 3). Les études en électromagnétisme et diffraction (section 4) ont porté sur les méthodes numériques, mais surtout sur les méthodes asymptotiques haute fréquence. Un thème «étude des équations aux dérivées partielles non linéaires» a émergé avec l'arrivée au LRC de R. Conte (section 5.1). Enfin, un thème transverse est apparu : l'analyse mathématique du calcul scientifique, qui étudie le comportement «réel» des codes numériques (section 5.2).

1-Modélisation des matériaux

Les travaux ont porté sur différents thèmes listés ci-dessous. Nous les avons classés par échelle. Nous commençons par l'échelle la plus fine en présentant les calculs de structure électronique (1.1). Nous poursuivons par les études de dynamique moléculaire (1.2), et terminons par les études à l'échelle mésoscopique (1.3).

1.1-Calculs de structure électronique

Il s'agit de calculer la densité d'électrons dans des matériaux purs ou composés. On parle également de calcul *ab initio*. Nous utilisons la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT), qui permet de calculer cette densité avec une bonne précision pour la majorité des matériaux. Nous présentons d'abord une application de la DFT au calcul de structure électronique d'un plasma de mélange (1.1.1). Nous présentons ensuite deux voies permettant de rendre plus efficaces les calculs de structure électronique : la parallélisation des méthodes de calcul de structure électronique (1.1.2) et l'étude d'une méthode d'ordre N pour simuler des plasmas denses à haute température (1.1.3).

1.1.1-Etude de l'ionisation d'un plasma de mélange Aluminium-Or en régime « transitoire » (E. Bétranhandy)

La description des propriétés atomiques dans les plasmas fortement couplés et partiellement dégénérés (ou *warm dense matter*, WDM, matière dense et chaude) font actuellement l'objet d'un intérêt croissant, leurs champs d'applications s'étendant de l'astrophysique aux applications industrielles. Dans l'état actuel de la recherche, les données expérimentales restent rares, et il y a peu de théories *ab initio* susceptibles de reproduire ces données de manière auto-cohérente. E. Bétranhandy, pendant un stage post-doctoral de 3 mois, a développé des outils permettant d'analyser finement la structure électronique du plasma. Ces outils permettent de déterminer la présence de molécules, leur durée de vie, et l'ionisation des différentes espèces présentes.

Plus précisément, le travail mené au LRC a porté sur un des points particulièrement importants de la physique des plasmas, à savoir l'étude fine de la couche électronique de plasmas modèles (Au et le mélange Au/Al) pour deux températures différentes. En effet, l'ionisation d'objets chimiques au voisinage de la transition isolant-métal joue un rôle important dans les propriétés macroscopiques (en particulier la conductivité). Il s'est donc agi d'analyser des fichiers de données (produits par le service PMC du CEA DIF) de dynamique quantique calculés par un code utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) dans son approximation de la densité locale (LDA). Les objets chimiques ont été modélisés au moyen d'ondes planes augmentées (données atomiques PAW). Pour obtenir les profils d'ionisations des particules dans les plasmas étudiés, des outils ont été développés en langage Fortran. Les variations observées entre cortèges électroniques sont donc reportées principalement en termes de fonctions de corrélation de paires ions électrons (densités radiales), et permettent de plus d'indiquer la formation d'ensembles (dimères) et d'estimer leur durée de vie. Les observations et conclusions effectuées – surionisation de Au par rapport à son état d'oxydation dans les solides ou en solution, dépendance de l'ionisation en fonction de la température et « indépendance » de l'ionisation de l'espèce lourde dans le mélange Au/Al – ont été utilisées pour un appui théorique aux expériences menées par l'équipe du LPDS au CEA DIF.

1.1.2-Parallélisation des méthodes de calcul de structure électronique (F.Bottin)

Un des problèmes récurrents des calculs de structure électronique est la variation rapide des fonctions d'onde au voisinage du noyau. Pour éviter de représenter explicitement cette variation rapide, les physiciens ont cherché à calculer non pas les fonctions d'onde, mais des pseudo-fonctions d'onde variant suffisamment lentement. Il est alors possible de réaliser à un coût

raisonnable et au niveau de l'échelle atomique des calculs permettant de déterminer l'état fondamental d'un système réel, ainsi que ses réponses à diverses sollicitations. Dans ce but, deux méthodes existent. Dans la première nommée NC (Norme Conservée), l'idée est d'utiliser des «pseudo potentiels» en développant les données sur une base d'ondes planes et en respectant la conservation de la norme. La seconde méthode appelée PAW (Projector Augmented Wave) utilise une stratégie plus complexe, mais plus performante : les données sont à la fois développées sur une base d'ondes planes et d'orbitales localisées.

F. Bottin s'est consacré à la parallélisation de ces méthodes dans le code de calcul de structure électronique (dit *ab initio*) *ABINIT*. Il a en particulier étendu la parallélisation proposée actuellement dans le cas standard à la norme conservée. Ce travail a demandé notamment de traiter tous les calculs d'affectation de densité en transférant la grille sphérique à la grille de Fourier, puis de traiter les problèmes liés à la transformée de Fourier sur une double grille.

Afin de mettre en œuvre cette double parallélisation, il a été nécessaire d'introduire une transformée de Fourier rapide tridimensionnelle (*3dim-FFT*) ainsi que d'implémenter un algorithme de résolution des équations aux valeurs propres fonctionnant par blocs (de bandes). L'originalité de cette double parallélisation repose à la fois sur la distribution des données et sur les communications, nombreuses, mais non globales, qui sont effectuées au cours du calcul.

Au niveau des performances liées à l'introduction de cette parallélisation, il nous faut séparer les deux méthodes. Lors d'un calcul NC, la scalabilité obtenue est excellente. Un comportement surlinéaire est observé jusqu'à 200 processeurs et, en dépit d'une perte de performance au delà, un gain de 300 est tout de même atteint sur 400 processeurs. Notons qu'en particulier l'algorithme de résolution des équations aux valeurs propres présente un comportement linéaire jusqu'à 400 processeurs. Lors d'un calcul PAW, cette scalabilité n'est obtenue que dans certains cas et ne présente de comportement linéaire que jusqu'à 100 processeurs.

En ce qui concerne ces deux méthodes de calcul, différentes sources de pertes ont été identifiées (communications, calculs séquentiels,...). Notons que l'effort à réaliser désormais porte essentiellement sur la méthode PAW pour laquelle un gain important est espéré. En outre, une triple parallélisation est dès à présent mise en œuvre et devrait permettre d'atteindre un comportement linéaire au-delà de 1000 processeurs.

1.1.3-Méthode d'ordre N pour simulations d'un plasma dense à haute température (M. Mancini).

La simulation du plasma dense à haute température demande la résolution des équations classiques pour le mouvement des ions et de l'équation de Schrödinger pour les électrons. A très haute température, les méthodes standards pour résoudre l'équation de Schrödinger, basées sur la résolution du problème aux valeurs propres, deviennent trop coûteuses. En effet, le nombre d'états occupés augmente avec la température.

A haute température, il faut donc prendre en compte un grand nombre d'états propres. Pour surmonter ces problèmes de calcul, on doit utiliser différentes méthodes qui permettent de calculer directement plusieurs quantités (la densité électronique, l'énergie libre des électrons et la force sur les ions notamment) à partir de la matrice densité qui dépend directement de l'opérateur Hamiltonien H . Plus précisément, cette matrice est une fonction de l'opérateur H . L'idée des méthodes d'ordre N (i.e. dont le temps de calcul augmente linéairement avec le nombre d'électrons) est de calculer directement cette fonction de H .

Jusqu'ici la méthode d'ordre N se limite aux cas où l'opérateur de Schrödinger H contient un potentiel local. Ce cas simple est une approche valide pour des éléments légers comme l'hydrogène ou l'hélium mais il se révèle insuffisant dans le cas des éléments plus lourds. Il faut dans ce cas utiliser des potentiels non locaux. Le but principal du stage post-doctoral a été de développer des nouvelles approches pour étendre la méthode d'ordre N. Ces extensions ont permis des études de

plasma à haute température, et le traitement d'opérateurs Hamiltoniens plus généraux, comprenant notamment des potentiels non locaux.

1.2-Calculs de dynamique moléculaire classique

Lorsque le nombre d'atomes à simuler devient trop important, il n'est plus possible de calculer la densité électronique locale. On se contente donc de prédire les positions des atomes ; l'interaction entre ces atomes est engendrée par les électrons, mais il est souvent possible de l'approcher par des potentiels inter atomiques. L'aspect quantique n'apparaît plus explicitement et on parle de dynamique moléculaire classique. Les atomes évoluent sous l'effet des forces inter atomiques. Un des points cruciaux est de déterminer au mieux le potentiel d'interaction. Cela a été fait pour le carbone, dans le but de mieux prédire le comportement des explosifs carbonés. Le potentiel choisi a ensuite été appliqué à l'étude des agrégats de carbone présents dans les produits de détonation (1.2.1). Une approche plus précise, mais plus coûteuse, consiste à calculer le potentiel classique à partir de simulation *ab initio*. Elle est en cours pour simuler la fusion de feuilles d'or (1.2.2).

1.2.1-Potentiels empiriques appliqués aux agrégats de carbone sous haute pression (N. Pineau et G. Chevrot)

Le traitement précis et à coût raisonnable des agrégats de carbone est essentiel pour la compréhension et la prédiction de la détonation d'explosifs. En effet, la détonation d'explosifs riches en carbone engendre la formation d'agrégats de carbone de taille nanométrique

N. Pineau a réalisé, pendant un stage post-doctoral, un bilan des méthodes et potentiels appliqués à l'étude des agrégats de carbone. N. Pineau a ensuite travaillé à l'implantation dans le code CEA *STAMP* du potentiel LCBOP2 (Long Range Carbon Bond Order Potentiel 2) développé pour le carbone par les équipes de S. Los. Ce potentiel permet de restituer, au moins quantitativement, le diagramme de phase du carbone. Des calculs de dynamique moléculaire ont alors permis d'étudier l'influence de la taille des agrégats sur le diagramme de phase et sur les propriétés thermodynamiques des différentes phases du carbone.

Une étude des caractéristiques d'agrégats de carbone de différentes tailles en fonction de la pression et de la température a ensuite été réalisée par G. Chevrot. En effet la présence de ces agrégats influence les équilibres chimiques des produits de détonation. Afin de reproduire ces équilibres chimiques à l'aide de la méthode ReMC (Reaction Ensemble Monte Carlo), il est important de connaître les caractéristiques de ces agrégats dans les conditions de température et de pression caractéristiques des produits de détonations.

Dans un premier temps, les simulations ont été réalisées sur des clusters constitués de 1000 atomes de carbone (environ 2,5 nm de diamètre) dans une gamme de températures et de pressions représentatives. Ces premières simulations montrent la formation successive de couches de surface concentriques et de structure graphitique avec l'augmentation de la température. Des simulations avec des agrégats de même taille, mais pour des pressions plus élevées et pour des agrégats plus gros (environ 5 nm de diamètre) sont en cours d'analyse.

1.2.2-Couplage multi-échelle entre la dynamique quantique et classique pour l'étude de la fusion de l'or par chauffage laser (H. Perron)

Le but de ce projet est de générer un potentiel classique dépendant de la température électronique afin de décrire par dynamique moléculaire (code *STAMP*) la fusion de feuilles nanométriques d'or par chauffage laser. Les données physiques de base, telles que les courbes froides ou les constantes élastiques, sont déterminées *ab initio* (code *ABINIT*) et servent ensuite à optimiser le potentiel classique. Le but final du projet est un couplage direct entre *STAMP* et *ABINIT* pour une mise à jour régulière et automatique du potentiel classique utilisé par *STAMP* à partir du calcul de structure

électronique réalisé par *abinit*. Cette approche fournit la description la plus correcte possible de l'évolution au cours du temps.

1.3-Etudes à l'échelle mésoscopique

Certains phénomènes (irradiation ou déformation plastique par exemple) font intervenir des objets de tailles intermédiaires entre l'échelle atomique et l'échelle macroscopique : on parle alors d'échelle mésoscopique (origine du nom du LRC). Un matériau soumis à un flux d'irradiation constant est un système ouvert du point de vue thermodynamique, recevant en permanence de l'énergie. Cette dernière est essentiellement dissipée en ébranlement de réseau; seule une petite partie est retenue sous forme de défauts ponctuels. Ces derniers en migrant peuvent s'annihiler, se condenser en amas plus ou moins mobiles et provoquer l'apparition, en des points particuliers du système, d'une ségrégation de certains composants de l'alliage. La prédiction précise de la nature et de la densité de défauts demande un suivi des populations soit par méthode de Monte-Carlo, soit par résolution d'équations de réaction diffusion. Cette approche «boîte blanche», fondée sur une description microscopique précise, est poursuivie au LRC par J.-L. Bocquet, en collaboration avec les équipes du DPTA. Une approche plus globale, à base d'agents, a été étudiée (1.3.1). Une autre application des méthodes mésoscopiques à l'étude des transformations de phase «martensitiques» (i.e. non diffusives), a été réalisée (1.3.2). Le problème du comportement des schémas numériques en présence de chocs induisant des changements de phase a été étudié (1.3.3). Enfin, l'interaction d'un choc avec un matériau polycristallin réactif a été simulé (1.3.4).

1.3.1-Etude de la simulation d'irradiation d'alliages à des temps longs (Eurobios, J.L. Bocquet)

L'étude a été réalisée par la société Eurobios. Elle a débuté par un Groupe de Travail entre le CEA DAM, le CMLA et Eurobios qui a donné lieu à trois réunions. Ces réunions ont permis une meilleure définition de la problématique et la confrontation des différentes approches : physique pour le CEA DAM, numérique pour le CMLA et théorie de la complexité pour Eurobios. Cette étude a montré que l'on pouvait envisager un travail effectif de mise au point d'une nouvelle approche intermédiaire entre

- l'approche «boîte blanche» s'appuyant uniquement sur la physique microscopique, précise, mais de mise en œuvre complexe, car détaillant et déterminant tous les processus induits par l'irradiation et leurs paramètres : énergie d'activation, etc.
- l'approche «boîte noire» relevant de la fouille de données (data mining) et identification.

Cette approche «boîte grise» intégrerait de la «connaissance métier» (en l'occurrence physique) dans l'élaboration des modèles, sans aller jusqu'à une description aussi précise que l'approche «boîte blanche». Les paramètres du modèle pourraient par exemple être identifiés à l'aide de techniques de plans d'expérience.

L'approche «boîte blanche» demande notamment d'identifier tous les types de défauts, et de calculer les entropies de formation et de migration de ces défauts. Ce calcul peut être très coûteux. J.-L. Bocquet a montré (M7) que le calcul de l'entropie reposant sur la connaissance de tous les modes de vibration de la boîte de calcul peut être allégé et réduit au seul calcul des modes propres dans un petit morceau de boîte autour du défaut pourvu que l'on y ajoute une contribution d'origine élastique venant du reste de la boîte (dilatation et cisaillements, ces derniers étant importants en position de col).

1.3.2-Modélisation des changements de phases martensitiques : comparaison entre champ de phase multi-échelle et dynamique moléculaire (A.-M. Caucci)

Les changements de phases martensitiques demeurent un remarquable défi pour la simulation, en raison de l'étendue des échelles des principaux mécanismes impliqués.

Il est proposé ici une méthode de Champ de Phase Multi-Échelle (CPME), dont les ingrédients sont intégralement déterminés par des calculs de dynamique moléculaire. Notamment, pour certaines déformations représentatives (les chemins de réaction entre phases), une équivalence énergétique exacte peut être garantie entre CPME et dynamique moléculaire. Une formulation en grandes déformations et la possibilité de modéliser les ondes acoustiques permettent des comparaisons directes entre CPME et dynamique moléculaire, pour des régimes de changements rapides, compatibles avec les simulations de dynamique moléculaire. Le but de l'étude est d'établir une comparaison détaillée entre méthode de champ de phase multi-échelle et modélisation par dynamique moléculaire.

1.3.3-Comportement des schémas numériques en présence de chocs avec changement de phase (C. Jean, encadré par B. Desjardins et O. Heuzé)

La bonne restitution des chocs reste un problème difficile pour les schémas numériques, en particulier dans le cas où le choc produit un changement de phase. C. Jean a comparé des solutions analytiques à des solutions numériques de chocs avec changement de phase, afin de détecter des problèmes de restitution. Cette étude a donné lieu à un rapport de stage du master Modélisation et Simulation (M2S).

1.3.4-Simulation d'un matériau réactif polycristallin (A. Ollagnier, L. Soulard)

Le but de ce travail est d'effectuer des simulations prédictives du comportement d'un matériau réactif polycristallin soumis à une onde de choc, à l'aide du code STAMP. Dans un premier temps, on simule la compression d'un monocristal le long de ses axes cristallographiques. Or, le matériau est composé de grains monocristallins de formes et de tailles variées, ce qui génère des défauts. Une analyse systématique en fonction de l'intensité du choc et de la nature de ces défauts permettra de préciser leurs propriétés thermodynamiques et chimiques.

1.4-Références matériaux

M1 : N. Pineau, *Potentiels empiriques appliqués aux agrégats de carbone sous haute pression*, Rapport interne CEA, 2006.

M2 : J.-B. Maillet and N. Pineau, *Thermodynamic properties of benzene under shock conditions*, Journal of Chemical Physics, Volume 128, Issue 22, 224502, 2008.

M3 : J.-B. Maillet, N. Pineau, E. Bourasseau, *Thermodynamic properties of benzene under shock conditions*, American Physical Society, 15th APS Topical Conference on Shock Compression of Condensed Matter, June 24-29, 2007.

M4 : N. Pineau, L. Soulard, J. Los and A. Fasolino, *Theoretical study of the nucleation/growth process of carbon clusters under pressure*, Journal of Chemical Physics, Volume 129, Issue 2, 024708, 2008.

M5 : E Bétranhandy et al., *Etude par Dynamique Moléculaire Quantique de cérium liquide*, Autrans, 2007.

M6 : *Etude de la simulation d'irradiation d'alliage de Plutonium à des temps longs*, Rapport Eurobios.

M7 : J.L. Bocquet, *Contribution of shear strains to the vibrational entropy of defect configurations*, Phil. Mag. 87, 22, pp 3259-3295, 2007.

M8 : C. Jean, Rapport de stage Master M2S, 08/09/06.

M9 : A.M. Caucci, *Méthodes de modélisation des changements de phases martensitiques. Rapport bibliographique*, rapport interne CEA septembre 2007.

M10 : A.M. Caucci, C. Denoual, L. Soulard, *Modélisation des changements de phases martensitiques par une approche multi-échelle. Premiers résultats de dynamique moléculaire*, poster présenté au Colloque Plasticité 2008, Nancy, 10-12 mars 2008 .

2-Applications des équations cinétiques

Les équations cinétiques permettent une description très précise, mais souvent coûteuse, de processus physiques dans des domaines très divers. Les équipes du LRC ont travaillé principalement sur quatre sujets proposés par les équipes du CEA DAM Ile de France : comparaison des modèles de configurations détaillées et d'ion moyen, étude des modèles gaz-particules, simulation de la dynamique des ceintures de Van Allen, simulation de la conduction électronique dans les plasmas laser. Sur ces problèmes de physique complexes, ces équipes ont établi des résultats rigoureux permettant de bien cerner les limites de validité des approches proposées par les physiciens, conçu et réalisé des codes performants exploitant au mieux la puissance de calcul de la machine TERA 10 du CEA DAM Ile de France. Le LRC a également travaillé, en coopération avec le centre de recherche de Saint-Gobain, à la modélisation d'un magnétron (équipement utilisé pour le dépôt de couches minces). Des améliorations du schéma utilisé dans les simulations ont été proposées.

2.1-Configurations détaillées et ion moyen (G. Cavallaro, A. Decoster, L. Desvilletes, V.Ricci)

La structure électronique des atomes (et des ions) dans un plasma évolue du fait des collisions avec les électrons libres et des absorptions/émissions de photons. L'idéal est de résoudre les équations cinétiques décrivant l'évolution des populations de chaque configuration ionique. Le nombre de configurations possibles, pour des ions lourds, est trop grand pour que l'on puisse simuler l'évolution de chacune d'entre elles. On introduit donc des modèles d'ion moyen dans lesquels la variable devient le nombre d'électrons par couches.

Un post-doctorant financé par la région Ile de France (G. Cavallaro), en collaboration avec A. Decoster, L. Desvilletes, V. Ricci (université de Palerme), a étudié la possibilité de déduire rigoureusement ces modèles moyennés à partir des modèles détaillés (où toutes les configurations sont prises en compte). Des asymptotiques où le modèle ion moyen est valide ont été étudiées : petit nombre d'électrons (ou de trous) dans une couche, voisinage de l'équilibre thermodynamique local. Des simulations numériques comparant les résultats du modèle ion moyen à ceux des modèles détaillés ont permis de préciser la limite de validité des asymptotiques considérées.

2.2-Modèles gaz-particules (C. Baranger, J. Mathiaud, L. Desvilletes, D. Gueyffier)

L'objet de ce travail est la modélisation, l'étude mathématique et numérique de sprays. Les sprays sont composés de particules (ou gouttelettes) en suspension dans un fluide environnant ; ils permettent l'étude de phénomènes physiques complexes et très divers.

Dans les thèses de C. Baranger et J. Mathiaud, les sprays étudiés à partir des données du CEA sont constitués de gouttelettes d'étain se mouvant dans l'air. La particularité de ce type de sprays est d'être constitués de gouttes très denses par rapport au fluide environnant : les gouttelettes vont donc jouer un rôle essentiel dans l'étude du système de par leur inertie.

L'approche adoptée dans les deux thèses consiste à décrire le mouvement des particules par une équation cinétique de type Vlasov-Boltzmann et celui du gaz par des équations issues de la mécanique des milieux continus. Une étude mathématique des sprays modérément épais a été réalisée : l'existence et l'unicité de solutions régulières locales en temps sont prouvées, le travail portant essentiellement sur l'équation cinétique. Un modèle turbulent de spray a été construit à partir d'un modèle de spray non turbulent en utilisant des méthodes usuelles telle qu'une fermeture $k-\epsilon$ pour le gaz. Enfin, l'existence et l'unicité de solutions régulières locales en temps pour les équations incompressibles de Navier-Stokes couplées au modèle $k-\epsilon$ décrivant la phase gazeuse en mode turbulent ont été démontrées. Un développement asymptotique en régime faiblement turbulent de ces équations, reposant sur des propriétés paraboliques du système, a été obtenu.

Enfin, D. Gueyffier, dans le cadre d'un stage post-doctoral, a déterminé la faisabilité de l'utilisation de méthodes de DNS (de type VOF) afin de calculer des paramètres utilisables dans les codes de type «gaz-particules», en particulier pour gérer les phénomènes complexes aux limites du domaine de calcul : conditions aux bords, initialisation.

2.3-Simulation de la dynamique des ceintures de Van Allen (S. Le Bourdieu, F. de Vuyst)

La simulation de la dynamique des ceintures de Van Allen se place dans le cadre de l'étude des flux de particules reçus au cours du temps par des satellites et l'impact de cette irradiation sur leur durée de vie. L'évolution des densités et des flux d'électrons énergétiques piégés dans les ceintures est dominée par les interactions entre ces particules chargées et les ondes électromagnétiques. La modélisation fait intervenir les équations de Vlasov-Maxwell relativistes qui décrivent l'évolution du champ électromagnétique, de la fonction de distribution des particules et leur couplage.

Traditionnellement, la description de l'évolution au cours du temps et de l'espace de la fonction de distribution des électrons énergétiques injectés dans les ceintures, le couplage avec les ondes excitées et la rétroaction de ces ondes sur la distribution de particules ont été abordées par la méthode PIC (Particle in cell). Le bruit numérique inhérent à cette méthode rend très délicat la simulation de phénomènes à très faible taux de croissance.

Une nouvelle approche a été mise en œuvre dans le cadre de la thèse, puis du stage postdoctoral de S. Le Bourdieu, co-encadrée par F. de Vuyst (laboratoire MAS de l'École Centrale Paris). Elle s'est appuyée sur l'utilisation de méthodes déterministes originales pour réaliser la résolution couplée des équations de Vlasov-Maxwell en régime relativiste. Après des études poussées sur les schémas numériques qui ont conduit au choix d'une méthode pseudo-spectrale utilisant des polynômes de Hermite et des points de collocation pour représenter la fonction de distribution des particules, un code Vlasov-Poisson a été écrit et étendu au système complet Vlasov-Maxwell (1D en espace, 3D en vitesse, relativiste). La suite du travail a consisté à valider le code développé sur des cas de plus en plus représentatifs de situations physiques. Un effort important de parallélisation et d'optimisation de la programmation en fonction de l'architecture du calculateur TERA 10 du CEA DAM a été fait.

Le code HELIOS traite des conditions aux limites périodiques et des conditions aux limites ouvertes. Si son utilisation première est la dynamique des ceintures de Van Allen, d'autres exploitations sont envisageables comme l'étude de certains phénomènes de couplage onde-particule dans le cadre de l'allumeur rapide ou de l'interaction laser-plasma.

Cette étude démontre également que, s'il n'était pas envisageable il y a encore quelques années d'utiliser des méthodes déterministes pour la résolution de problèmes complexes couplés, les potentialités bien exploitées des supercalculateurs comme TERA10 rendent désormais cela possible.

2.4-Simulation Fokker-Planck de la conduction électronique dans les plasmas laser (A. Decoster)

Le dépôt d'énergie laser dans le plasma est tellement rapide que le transport de la chaleur par les électrons dépasse les conditions de validité de la théorie classique de la diffusion (libre parcours inférieur à la longueur de gradient). La description fluide des électrons du plasma doit être remplacée par une description cinétique Fokker-Planck. Même sur les machines de puissance du CEA, le temps de calcul d'une méthode explicite est trop important. Nous avons donc mis au point une méthode de calcul implicite qui permet des pas de temps très supérieurs à la période des oscillations de plasma et aux temps de collisions. On peut ainsi simuler des plasmas inhomogènes avec des fortes densités.

2.5-Modélisation et Simulation d'un magnétron (coopération avec le centre de recherche de Saint-Gobain) : A. Decoster (CEA-DAM), L. Desvilletes (CMLA), F. Pascal (CMLA)

En coopération avec les ingénieurs de Saint-Gobain, un problème de plasma froid très magnétisé dans le cadre d'un procédé de dépôt de couches minces a été considéré. Ce plasma est modélisé par le couplage entre des équations hyperboliques pour les ions et des équations paraboliques pour les électrons, à travers des termes sources et le champ électromagnétique.

Un développement de type "approximation de la diffusion" a été écrit de façon à retrouver les équations paraboliques pour les électrons à partir des équations cinétiques (de type BGK) lorsque le libre parcours moyen de ceux-ci tend vers 0. Ceci permet en particulier de préciser les conditions aux limites (de type Robin) au bord du domaine. Il est essentiel dans cette étude de prendre en compte le champ magnétique très fort imposé au plasma.

La simulation numérique des équations a été ensuite abordée, en apportant des propositions d'amélioration du schéma actuellement utilisé (Scharfetter-Gummel) pour la discrétisation des équations.

L'ensemble de ces activités a donné lieu à la tenue d'un groupe de travail régulier et à la remise d'un rapport scientifique.

3-Mécanique des fluides compressibles et incompressibles

Les travaux en mécanique des fluides ont principalement porté sur l'étude des vagues extrêmes (3.1) et sur le développement d'une plate-forme volumes finis (3.2). Deux sujets proposés par le DCSA ont été étudiés : prise en compte de la tension de surface dans les écoulements multi-fluides compressibles (3.3) et transition vers la turbulence des écoulements consécutifs aux instabilités de Rayleigh-Taylor (3.4).

3.1-Etude des vagues extrêmes

Le groupe mécanique des fluides du LRC, animé par F. Dias, a travaillé sur trois types de vagues extrêmes : les tsunamis (3.1.1), les vagues scélérates (3.1.2), et les vagues générées par les tempêtes (3.1.3). Comme dans tous les travaux réalisés au LRC, ces études comportent une part de physique, de l'analyse numérique, et débouchent sur des codes numériques opérationnels. L'équipe composée de F. Dias, D. Dutykh, et C. Fochesato a obtenu le prix «la Recherche», mention environnement, pour l'ensemble de ses travaux.

3.1.1-Génération de Tsunamis (D. Dutykh, F. Dias)

La thèse de Denys Dutykh est consacrée à la modélisation des tsunamis. La vie de ces vagues peut être conditionnellement divisée en trois parties : génération, propagation et inondation. La génération de ces vagues extrêmes a été analysée. Il s'agit notamment de mieux comprendre les premiers instants d'un tsunami, en particulier de traiter précisément la génération du tsunami par le soulèvement du fond (souvent traité de manière très approximative dans les codes). Les différentes

approches existantes pour la modélisation ont été analysées de manière critique. D'autres approches plus précises ont été proposées. La conclusion principale de cette phase du travail est que le couplage entre la sismologie et l'hydrodynamique est actuellement assez mal compris.

Une autre partie du travail est dédiée essentiellement aux équations de Boussinesq, qui sont parfois utilisées pour modéliser la propagation d'un tsunami. Certains auteurs les utilisent même pour modéliser le processus d'inondation (le run-up). Plus précisément, D. Duthyk a étudié l'importance, la nature et l'inclusion des effets dissipatifs dans les modèles d'ondes longues.

La thèse a suscité des développements intéressants sur deux sujets connexes. D'une part, un modèle simple et opérationnel d'écoulements diphasiques pour la modélisation de l'impact d'une vague sur les structures côtières a été établi. Ensuite, la discrétisation de ces équations avec un schéma de type volumes finis sur des maillages non structurés a été proposée.

D'autre part, afin de mieux comprendre le rôle de la dissipation, une étude des écoulements viscopotentiels a été réalisée. Une nouvelle approche simplifiée pour les écoulements faiblement visqueux a été proposée. Elle conserve la simplicité des écoulements potentiels tout en ajoutant la dissipation. Dans le cas de la profondeur finie, un terme correcteur dû à la présence de la couche limite au fond est inclus. Cette correction s'avère être non locale en temps. Donc, la couche limite au fond apporte un certain effet de mémoire à l'écoulement.

3.1.2-Étude numérique du déferlement des vagues (F. Dias, C. Fochesato, K. Melville, R. Poncet)

Un code numérique résolvant les équations d'Euler incompressibles avec surface libre pour un écoulement potentiel a été développé au cours de la thèse de C. Fochesato. L'association de l'Algorithme Rapide des Multipôles avec la Méthode des Éléments aux Frontières permet d'améliorer significativement l'efficacité du modèle. Ce code permet notamment d'étudier le déferlement d'une onde solitaire sur un fond tridimensionnel et la focalisation spatiale générée par un batteur à houle et constitue un canal à houle numérique. Des comparaisons numérique/expériences ont été réalisées. Ces travaux ont permis de restituer la formation de vagues scélérates.

3.1.3-Prévisions des inondations dues aux tempêtes (R. Poncet, F. Dias, D. Duthyk)

Ces travaux sont réalisés dans le cadre du contrat ANR HEXECO (Hydrodynamique extrême du large à la côte), sur la période 01/09/07 au 01/09/08. L'objectif de ce projet ANR est d'améliorer l'état de l'art des prévisions des inondations dues aux tempêtes. L'objectif principal du post-doc de R. Poncet est le développement d'un code volumes finis résolvant les équations de Saint-Venant non-linéaires en domaine réel, afin d'améliorer la paramétrisation des modèles opérationnels de prévision des vagues. Ce code sera ensuite étendu à la résolution des équations de Boussinesq. Ce travail pour l'ANR a eu une retombée : la génération de maillages non structurés pour code opérationnel du *SHOM* (service hydrographique et océanographique de la marine).

3.2-Plate-forme volumes finis multidimensionnels

3.2.1-Une plate-forme générale (J.-M. Rovarch, J.-M. Ghidaglia)

Une nouvelle plate-forme de simulation numérique multidimensionnelle d'écoulements de fluides multiphasique a été développée au sein du LRC-MESO. Elle dispose du solveur *FLUX-3D* dédié à la résolution numérique de systèmes d'équations aux dérivées partielles non linéaires et pouvant contenir des produits non conservatifs de forme très générale.

Le schéma numérique utilisé est basé sur une méthode Volumes Finis de la famille des schémas de flux. Il est connu sous le nom de schéma Volumes Finis à Flux Caractéristiques (VFFC). Il s'applique sur des maillages tridimensionnels qui peuvent être non structurés et non conformes. Les versions implicites proposées ne sont pas limitées par les contraintes de CFL. En pratique, les modèles rencontrés dans le contexte des écoulements diphasiques ne sont pas nécessairement

hyperboliques. Une des caractéristiques de cette méthode est qu'elle ne dépend pas a priori des propriétés d'hyperbolicité de l'opérateur de convection.

Le cœur du solveur est développé dans le cadre général de résolution numérique du système d'équations précédent, indépendamment donc de tout modèle physique. Ces derniers sont écrits à l'aide d'une maquette développée au sein du logiciel de calcul formel Maple, capable de traduire les instructions en langages de programmation tels que le C, le Fortran (les routines générées seront directement assemblées au solveur à l'édition de lien), le TeX ou le HTML (qui permet de garder une trace lisible du modèle étudié).

Ce solveur est intégré dans la plate-forme Salomé, logiciel libre de pré et post traitement dédié à l'intégration et au couplage de codes numériques. L'outil proposé permet ainsi de chaîner : la réalisation de géométries complexes de simulation, la génération de maillages des domaines de calcul, la résolution des équations de modélisation et la visualisation des résultats.

3.2.2-Applications et développement (C. Fochesato, J.-M. Rovarch, F. Dauvergne, J.-M. Ghidaglia, F. Pascal)

La plate-forme a été notamment utilisée par C. Fochesato pour modéliser l'interaction d'un choc avec une bulle. Une étude préliminaire a été initiée au LRC avec la plate-forme développée, et poursuivi au CEA de Bruyères-le-Chatel dans le cadre du post-doc de C. Fochesato, à l'aide d'outils de simulation internes. La configuration étudiée consiste en un tube à choc 1D pour un liquide faiblement compressible dans lequel une bulle d'air est déposée à une extrémité du domaine, contre la paroi. Les équations d'Euler diphasiques sont utilisées pour modéliser les fluides avec des fractions massiques proches de 1 et 0 respectivement pour représenter le liquide et l'air. Le liquide nécessite une équation d'état particulière, qu'il est aisé de spécifier à l'aide de la plate-forme.

La plate-forme a été également appliquée à la simulation de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz dans le cadre des équations d'Euler compressibles à faibles nombres de Mach. Les schémas décentrés comme celui utilisé dans la plate-forme ne permettent pas d'obtenir des solutions physiques lorsque le nombre de Mach tend vers 0. La présence de choc ou d'effets thermiques importants dans certains écoulements nécessitant un code compressible, F. Dauvergne a pendant son stage post-doctoral implanté la renormalisation de la diffusion numérique en utilisant la matrice de Turkel. L'étude numérique de la condition de stabilité est étayée par des développements analytiques.

Une autre partie du travail de F. Dauvergne consiste à monter à l'ordre 2 le schéma VFFC par des techniques à la MUSCL avec limiteurs de pente.

Signalons enfin que le développement de cette plate-forme a été partiellement financé par le contrat ANR SCOS : Systèmes complexes et Open Sources (F. Pascal).

3.3-Prise en compte de la tension de surface dans les écoulements multi-fluides compressibles (X. Pialat)

L'objet de ce post-doc est l'implémentation dans un code préexistant de simulation des écoulements multi-fluides compressibles des effets de tension de surface apparaissant aux interfaces entre fluides non-miscibles. Le cadre de l'étude est dicté par les méthodes employées dans le code de calcul du CEA. Les interfaces entre matériaux sont ainsi reconstruites à l'aide de techniques «Volume Of Fluid» (VOF). Une étude bibliographique des méthodologies développées pour les écoulements incompressibles a permis de trouver une méthode stable et robuste transformant une force surfacique en une force volumique ayant les mêmes effets sur une zone proche de l'interface : la méthode «Continuum Surface Force» (CSF). Il ressort de la littérature que deux points cruciaux doivent faire l'objet d'une attention particulière pour assurer à la qualité de la simulation numérique

des effets capillaires dans une approche VOF. En effet, jusqu'à récemment ces méthodologies souffraient de «courants parasites» découlant d'un mauvais traitement de l'équilibre entre saut de pression à l'interface et courbure de cette dernière. Des algorithmes dits de «forces balancées» ont permis de réduire ces défauts lorsque la courbure moyenne de l'interface est convenablement calculée. Le deuxième défi à relever est ainsi de concevoir un algorithme de calcul de la courbure robuste et précis dans une approche VOF ; approche qui est généralement d'ordre un ou deux. Des algorithmes efficaces ont tout de même été proposés dans la littérature dont certains ne présentent pas de difficulté théorique d'adaptation.

3.4-Transition vers la turbulence des écoulements consécutifs aux instabilités de Rayleigh-Taylor (X. Barthélémy, S. Gauthier)

L'objectif du stage post-doctoral est l'étude de la transition vers la turbulence des écoulements consécutifs aux instabilités de Rayleigh-Taylor. Les couches de mélange issues des instabilités de Rayleigh-Taylor ont été l'objet de nombreux travaux durant les deux ou trois dernières décennies, comme en témoigne les comptes rendus de l'*International Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing*. Des modèles statistiques de turbulence développée ont tout d'abord été utilisés. La simulation numérique est venue compléter notre compréhension des phénomènes. Cependant, beaucoup reste à faire, les problèmes «frontières» se situant aujourd'hui largement dans le domaine des effets de compressibilité. La stabilité linéaire reste largement à explorer. Cela a été l'objet de la première partie du stage post-doctoral de X. Barthélémy. Une configuration d'instabilité de Rayleigh-Taylor, pour des fluides compressibles, dépend typiquement de 9 ou 10 paramètres. Une exploration méthodique dans cet espace a été entreprise. L'utilisation extensive du code de stabilité linéaire, *SPECLMD*, basé sur une méthode de collocation multidomaine autoadaptative de Chebyshev, et précédemment développé (thèses de B. Le Creurer et M.-A. Lafay), a permis d'obtenir de nouveaux modes d'instabilité complexes, et possédant un taux de croissance aux grandes échelles significatif. La méthode numérique donne accès à l'ensemble des modes propres et permet ainsi d'obtenir la structure de l'écoulement aux temps courts. La simulation de ces configurations est en cours, à l'aide du code *AMÉNOPHIS*, dont la méthode numérique est basée sur un développement de type Fourier-Chebyshev.

3.5-Références Mécanique des Fluides

F1 : D. Dutykh, F. Dias, Y. Kervella, *Linear theory of wave generation by a moving bottom*, C. R. Acad. Sci. Paris, 2006, Ser. I 343, 499-504.

F2 : Y. Kervella, D. Dutykh, F. Dias, *Comparison between three-dimensional linear and nonlinear tsunami generation models*, Theor. Comput. Fluid Dyn., 2007, 21, pp245–269.

F3 : C. Fochesato, F. Dias, *A fast method for nonlinear three-dimensional free-surface waves*, Proc. R. Soc. Lond. 2006, A 462, 2715-2735.

F4 : D. Dutykh, F. Dias, *Dissipative Boussinesq equations*, C. R. Mécanique, 335, 2007, , 559–583. Special issue dedicated to J. V. Boussinesq.

F5 : D. Dutykh, F. Dias, *Viscous potential free-surface flows in a fluid layer of finite depth*, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I, 345, 2007, pp 113–118

F6 : D. Dutykh, F. Dias, *Tsunami generation by dynamic displacement of sea bed due to dip-slip faulting*. Math. Comp. Sim., 2008

F7 : D. Dutykh, *Visco-potential free-surface flows and long wave modelling*. Submitted to Eur. J. Mech. B/Fluids, 2008

F8 : D. Dutykh, F. Dias, *Water waves generated by a moving bottom*. In book : "Tsunami and Nonlinear Waves", Kundu, Anjan (Editor), Springer Verlag 2007.

F9 : F. Dias, D. Dutykh, E. Pelinovsky, R. Poncet, *On the validity of approximate solutions of the nonlinear theory of wave runup on a sloping beach*, en préparation.

F10 : R. Poncet, F. Dias, *On the inclusion of arbitrary topography and bathymetry in the non-linear shallow-water equations*, ICTAM 08 (International Congress on Theoretical and Applied Mechanics)

F11 : F. Dauvergne, J.-M. Ghidaglia, F. Pascal, J.-M. Rovarch, *Renormalization of the Numerical Diffusion for an Upwind Finite Volume Method. Application to the Simulation of Kelvin-Helmholtz Instability*, proceedings of the Finite Volumes for Complex Applications V, 2008.

4-Electromagnétisme, faisceaux de particules et diffraction

4.1-Méthodes numériques pour les équations de Maxwell-Vlasov en géométrie complexe (C. Fochesato, D. Bouche)

La simulation de faisceaux de particules en interaction avec leur champ est un problème difficile : un grand nombre de méthodes numériques a été proposé, mais ces méthodes génèrent en général des artefacts, des instabilités, ou/et s'avèrent peu précises. C. Fochesato a réalisé une étude bibliographique et une comparaison des différentes méthodes, afin de déterminer la mieux adaptée à un code PIC. La qualité d'un algorithme numérique pour ces équations peut être estimée selon différents critères :

- Précision du schéma, mesurée par son ordre également quantifiée par la dispersion,
- Bonne modélisation des frontières,
- Absence de solutions parasites,
- Coût calcul,
- Vérification par les opérateurs discrets des relations vérifiées par les opérateurs continus,
- Absence d'effet Cerenkov numérique : génération de rayonnement parasite quand des particules dépassent la vitesse de propagation numérique de la lumière.

Pendant son post-doctorat, C. Fochesato a analysé cinq méthodes :

- Schéma de Yee : le plus utilisé, précis à l'ordre 2, vérifiant (3) et (5), sensible à l'effet Cerenkov numérique.
- Volumes finis d'ordre 2 : généralisant le schéma de Yee sur des maillages Delaunay-Voronoi en 2D.
- Éléments finis nodaux classiques : ne vérifiant pas les critères (3) et (5) .
- Éléments finis d'arêtes (Thomas-Raviart-Nédélec ; Cohen-Monk) : à coût de développement et de calcul élevé.
- Éléments finis discontinus qui permettent de monter en ordre, de bien modéliser les frontières et d'utiliser des maillages non conformes. Ils ne sont pas exempts de modes parasites, mais des solutions simples permettent de les éviter. La conservation de la divergence (5) est assurée. La sensibilité à l'effet Cerenkov numérique est faible, car la courbe de dispersion est bien approchée.

Il ressort de l'analyse que les trois premières méthodes ne sont pas bien adaptées. Les éléments finis d'arêtes sont une solution possible, mais le meilleur compromis est la méthode des éléments finis discontinus. Les développements de code ont été réorientés dans cette direction.

4.2-Diffraction (J.M. Bernard, D. Bouche, I. Andronov, M. Lyalinov)

Les équipes du LRC ont travaillé sur l'obtention de solutions analytiques à des problèmes de diffraction dans le domaine asymptotique haute fréquence, en collaboration avec I. Andronov et M. Lyalinov, de l'université de Saint Petersburg sur les ondes rampantes en zone d'ombre et l'étude de la diffraction par des singularités. Sur le thème singularités, des coefficients de diffraction ont été calculés pour des polygones et des cônes avec condition d'impédance. Les résultats ont été publiés dans les articles [E2]. Un résultat sur le calcul du champ diffracté par une inclusion a été établi [E3]. Sur le thème ondes rampantes, les développements asymptotiques classiques divergent dans certains cas particuliers. L'utilisation de développements asymptotiques spécifiques permet d'éliminer ces divergences [E4]-[E6]. Enfin, un ouvrage de synthèse sur les méthodes asymptotiques a été publié [E7].

4.3-Références Electromagnétisme et Diffraction

E1 : C. Fochesato, D. Bouche, *Evaluation de différents solveurs Maxwell pour la résolution de Maxwell-Vlasov par une méthode PIC*, rapport LRC, 2006.

E2 : J. M. Bernard, *A spectral approach for scattering by impedance polygons*, Quarterly J Appl. Math., Vol. 59, No. 4, 517-549, 2006

E3 : J.M. Bernard, D. Bouche, I. Andronov, F. Guyon, *Expressions du champ diffracté par une inclusion*, Annales des Télécomm, vol.60, n°5-6, pp.630-648, 2005

E5 : I. Andronov, D. Bouche, *Asymptotics of creeping waves in the case of nondiagonalizable surface impedance*, PIER 59, pp 215-230, 2006

E6 : I. Andronov, D. Bouche, *On the degeneration of creeping waves in a vicinity of critical values of the impedance*, Wave Motion 45, pp 400-411, 2008.

E7 : I. Andronov, D. Bouche, *Degeneration of electromagnetic creeping waves in a vicinity of critical values of anisotropic impedance*, IEEE Antennas Propagation, 56, 7, pp 1984-1992, 2008

E8 : I. Andronov, D. Bouche, F. Molinet, *Asymptotic and Hybrid Methods in Electromagnetics*, Publié par IET, 2005, ISBN 0863414478, 9780863414473, 249 pages.

5 Analyse mathématique

5.1-Etude des équations différentielles non linéaires (R. Conte)

Les nombreux problèmes étudiés au LRC conduisent à des équations différentielles non linéaires. Il était donc naturel que R. Conte, auteur d'une monographie, «The Painlevé Handbook» sur les méthodes non-perturbatives pour trouver des solutions explicites d'équations non-linéaires en tous genres (différentielles, aux dérivées partielles, aux différences), rejoigne le LRC. Ces techniques ont été appliquées ces dernières années par R. Conte au modèle de Nernst et Planck des membranes biologiques (décrit par l'électrodifusion d'ions en nombre et type quelconques), au modèle

cosmologique de Bianchi IX dans le vide, aux équations de Painlevé, aux équations de Schrödinger non-linéaire intervenant en optique non-linéaire ou dans la condensation de Bose-Einstein, au modèle de matériau photoréfringent où l'indice de réfraction varie avec l'excitation lumineuse, et avec lesquels il est alors possible de fabriquer des hologrammes variant au cours du temps. Le «mariage», sur lequel travaillent R. Conte et Ng, de Hong Kong University, des méthodes de Painlevé et de celles de Nevanlinna fondées sur la croissance à l'infini permettent d'envisager de trouver de nouvelles solutions (nécessairement particulières et elliptiques) d'équations différentielles non-linéaires issues de la physique.

5.2-Références équations différentielles non linéaires

D1 : R. Conte, C. Rogers and W. Schief, *Painlevé structure of a multi-ion electrodiffusion system*, J. Phys. A Fast track communication 40 F1031—F1040, 2007.

D2 : R. Conte, *A closed-form solution in a dynamical system related to Bianchi IX*, Physics Letters A 372, 2008, 2269--2270.

D3 : R. Conte, *On the Lax pairs of the sixth Painlevé equation*, RIMS Kôkyûroku Bessatsu B2, 2007, 21-27.

D4 : R. Conte, A. M. Grundland, and M. Musette, *Reduction of the three-wave resonant interaction to the sixth Painlevé equation*, 67--78, in Asymptotic methods in nonlinear wave phenomena, eds. T. Ruggeri and M. Sammartino (World scientific, Singapore, 2007).

D5 : R. Conte, *Analytic patterns for chaotic equations*, Int. J. Mod. Phys. B 21, 2007, 3918--3924.

D6 : R. Conte, *Partial integrability of the anharmonic oscillator*, J. Nonl. Math. Phys. 14, 2007, 454-465.

D7 : C. Rogers, K.W. Chow and R. Conte, *On a capillarity model and the Davey-Stewartson I system: quasi-doubly periodic wave patterns*, Il Nuovo Cimento B 122, 2007, 105--111.

5.3-Analyse mathématique du calcul scientifique (D. Bouche, J.-M. Ghidaglia, F. Pascal)

L'analyse mathématique du calcul scientifique étudie et analyse le comportement «réel» des codes numériques.

Dans la plupart des problèmes de résolution d'équations aux dérivées partielles hyperboliques, les maillages utilisés sont non structurés et non uniformes. Les schémas de volumes finis d'ordre 1, comme le schéma amont pour l'équation d'advection linéaire, ne sont plus consistants au sens des différences finies sur ce type de maillage : on parle de phénomène de supra-convergence. En fait cette perte de consistance qui provient du terme de décentrement n'est qu'apparente et constitue un artifice de l'étude classique de convergence à l'aide du théorème de Lax. En pratique et pour des solutions régulières, on observe en général une précision d'ordre un : l'erreur globale a un meilleur comportement que l'erreur locale. Pour mener à bien l'analyse mathématique de convergence dans le cas de l'équation d'advection linéaire avec une vitesse de convection constante, l'introduction d'un correcteur géométrique permet de ramener l'étude à son analyse. Ce correcteur ne dépend que du maillage et de la direction de convection et il est solution d'un système linéaire. Un théorème montre que l'erreur globale du schéma se comporte comme le correcteur.

En dimension 1, on dispose d'une formule explicite du correcteur : les résultats classiques de convergence avec une vitesse constante s'étendent au cas d'une vitesse non constante en espace et par analogie au cas non linéaire, équation et système.

En dimension 2, la situation est bien plus complexe car le système que vérifie le correcteur ne dispose pas de solutions triviales. De plus, le comportement du schéma dépend de la position du vecteur de convection par rapport à une ligne fixe du maillage comme le bord.

Sur maillages raffinés uniformément, le correcteur et donc le schéma, est d'ordre 1 en dimension 2. Une analyse fine de la situation a été effectuée dans le cadre du maillage dit de Peterson où la position de la direction de convection par rapport au bord peut conduire à une diminution de l'ordre de convergence pour la norme infini mais pas la norme L1. Des simulations numériques indiquent que dans le cas de maillages raffinés de façon indépendante le comportement est similaire. Une extension à l'ordre 2 est possible.

Une analyse conduisant à une prédiction des oscillations parasites générées par les schémas numériques discrétisant l'équation de Burgers a également été conduite dans le cadre du LRC.

5.4-Références analyse mathématique du calcul scientifique

A1 : D. Bouche, J.M. Ghidaglia, F. Pascal, *Error estimate and geometrical corrector for the upwind finite volume method applied to the advection equation*, SIAM Journal of Numerical Analysis, vol.43, n 2, pp.578-603, 2005

A2 : D. Bouche, J.-M. Ghidaglia, F. Pascal : *An optimal a priori error analysis of the finite volume method for linear convection problems*. In F. Benkhaldoun, D. Ouazar, S. Raghay, Finite volumes for complex applications IV, Problems and perspectives, pp. 225-236, 2005.

A3 : F. Pascal, *On the supra-convergence of the finite volume method*, ESAIM : Proceedings, 18, pp 38-47, 2007.

A4 : F. Pascal, *Convergence analysis of the cell-centered finite volume method by means of geometric corrector*, Conference on Multi-scale Computational Methods for Solids and Fluids 2007, ENS de Cachan

A5 : F. Pascal, *Supraconvergence of the finite volume method*, Topical Problems of Fluid Mechanics 2007, Prague

A6 : D. Bouche, J.-M. Ghidaglia, F. Pascal : *Error estimate for the upwind finite volume method for nonlinear scalar conservation laws*, Technical report, CMLA, ENS de Cachan, 2007.

A7 : D. Bouche, J.-M. Ghidaglia, F. Pascal : *Etude de convergence du schéma upwind en volumes finis pour l'équation d'advection linéaire sur le contre-exemple de Peterson*, Rapport Technique CEA, 2007.

A8 : A.V. Porubov, D. Bouche and G. Bonnaud, *Description of numerical shock profiles of nonlinear Burgers' equation by asymptotic solution of its differential approximations*. International Journal of Finite Volumes, V. 5, (2008) 1-16.

B Formation et manifestations

1-Cours méthodes asymptotiques

Un cours sur les méthodes asymptotiques en électromagnétisme et leurs applications a eu lieu du 4 au 6 septembre 2006. Ce cours s'appuyait sur le livre «Asymptotic and Hybrid Methods in Electromagnetics», par I. Andronov, D. Bouche et F. Molinet, IEE Press, 2005. Il a réuni une douzaine de participants, en provenance du monde académique ou de l'industrie.

2-Ecole d'été de Cargese

L'école d'été de Cargese a été organisée par D. Dutykh et F. Chardard du 19 au 25 septembre 2006. Cette école, qui regroupe des physiciens du CEA-DAM, des numériciens du CMLA et de l'ECP, a permis de faire le point sur les avancées récentes des méthodes numériques en mécanique des fluides, en transport, et en diffusion. Elle favorise grandement les échanges, collaborations et synergies entre physiciens et numériciens du LRC. Elle offre une formation aux jeunes chercheurs du LRC et leur permet d'exposer leur sujet de travail.

Trois mini-cours ont été organisés sur la turbulence, les mélanges et des méthodes numériques :

- De la physique de la turbulence aux modèles de la turbulence. (O. Poujade),
- Analyse 0D des zones d'instabilités gravitationnelles turbulentes. Nécessité des modélisations bi-fluide.(A. Llor),
- Les méthodes de Galerkin discontinu (F. Pascal).

Les transparents des présentations sont regroupés sur le site

<http://www.cmla.ens-cachan.fr/manifestations/cargese-workshop/atelier-2006.html>

3-Thèses et habilitations à diriger des recherches

Julien MATHIAUD, *Etude de systèmes de type gaz-particules*, 2006

Jean-Philippe BRAEUNIG : *Sur la simulation d'écoulements multi-matériaux par une méthode eulérienne directe avec capture d'interfaces en dimensions 1, 2 et 3*, 2007

Denys DUTYKH, *Modélisation mathématique des tsunamis*, 2007

Gérald SAMBA, *Les schémas de transport asymptotiquement stables dans la limite diffusion*, prévue en 2008

Jean-Michel BERNARD, (HDR Orléans), *Les méthodes asymptotiques*, 2007

4-Manifestations scientifiques

4.1-Inauguration 19/06/06 (ENS de Cachan)

- E. Betranhandy, *Ionisation des plasmas Au et Au/Al en régime transitoire*
- N. Pineau, *Simulation des propriétés thermodynamiques de matériaux*
- F. Bottin, *Parallélisation du code de calcul de structure électronique ABINIT*
- J.-M. Rovarch, *Plate-forme volumes finis multidimensionnels pour les problèmes à convection dominante*
- D. Dutykh, *Génération de tsunamis et écoulements diphasiques*

- Y. Kervella, *Déclenchement d'un tsunami : comparaison entre théorie linéaire et théories non linéaire*
- C. Fochesato, *Evaluation des solveurs Maxwell en vue du couplage avec une méthode PIC*

4.2-Rencontres 17/03/2008 (ENS de Cachan)

- L. Desvilletes, *Passage d'un modèle atomique détaillé à un modèle d'ion moyen: une approche rigoureuse et quelques résultats numériques*
- F. Dias, *Simulation du déferlement*
- J.M. Ghidaglia, *Simulation de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz*
- D. Bouche et F. Pascal, *Convergence de schémas non consistants sur maillages irréguliers*
- J.-L. Bocquet, *Simulation de l'évolution des matériaux sous irradiation*
- A. Decoster, *Simulation Fokker-Planck de la conduction électronique dans les plasmas laser*

C Liste des Doctorants et Post-Doctorants

Nom	Prénom	Arrivée	Départ	Statut	Thématique	Devenir
Barthelemy	Xavier	01/06/07	30/12/07	Post-Doc	Simulation d'instabilités de Rayleigh-Taylor	Cea
Ben Letaief	Khaled	01/05/08	15/09/08	Stagiaire	Parallélisation des calculs de structure électronique	
Betrahandy	Emmanuel	01/02/06	30/04/06	Post-Doc	Ionisation des plasmas de mélange	Cea
Bottin	François	15/06/06	01/07/07	Post-Doc		Cea
Carrié	Michaël	04/10/07	15/02/08	Doctorant	Interaction Laser-plasma	
Caucci	Anna Maria	01/03/07	31/08/07	Post-doc	Matériaux : transformations martensitiques	Cea
Cavallero	Guido	01/04/07	01/04/08	Post-Doc	Physique atomique dans les plasmas	
Charpentier	Nicolas	10/01/07	10/04/07	Post-Doc	Instabilités en astrophysique	
Chevrot	Guillaume	01/01/08	31/08/08	Post-Doc	Dynamique Moléculaire	Cea
Dauvergne	Frédéric	03/09/07	02/09/08	Post-Doc	Mécanique des fluides numérique	
Desbiens	Nicolas	01/09/08		Post-Doc		
Dutykh	Denys	01/01/05	01/09/08	Doctorant	Modélisation mathématique des tsunamis	CR CNRS Chambéry
Elbaz	Deborah	01/09/08		Doctorant		
Fochesato	Christophe	01/11/05	31/08/06	Post-Doc	Solveurs Maxwell couplés à une méthode PIC	Cea
Gueyffier	Denis	01/10/05	10/01/06	Post-Doc	DNS Gaz-particules	Courant Institute
Jean	Cyril	01/03/06	31/03/06	Stagiaire	Solutions numériques de choc	Cap-Gemini
Jean	Cyril	01/09/06	31/08/07	Doctorant	Tsunami	Cap-Gemini
Kervella	Youen	01/03/06	30/06/06	Stagiaire	Tsunami	En thèse
Le Bourdieu	Solène	08/03/07	09/07/07	Post-Doc	Simulation de particules piégées dans un champ magnétique	Ing EDF
Mancini	Marco	01/11/07	20/04/08	Post-Doc	Calcul de structure électronique	

Ollagnier	Antoine	01/01/08	30/06/08	Post-Doc	Matériaux	
Perron	Hadrien	01/09/07	30/12/07	Post-Doc	Calcul de structure électronique	Cea
Pialat	Xaviar	01/01/08	30/06/08	Post-Doc	Simulation d'interfaces	Cea
Pineau	Nicolas	01/11/05	30/04/06	Post-Doc	Potentiels d'interaction pour les matériaux carbonés	Cea
Poncet	Raphaël	01/09/07		Post-Doc	Mécanique des fluides	
Rovarch	Jean-Michel	01/09/07	31/03/08	Post-Doc	Mécanique des fluides numérique	Post-Doc Toulouse
Zorah	Hamouch	01/12/07	01/06/08	Doctorant	Couches de mélange	Cea

D Budget

CREDITS HT	2005	2006	2007
Notification	65 000,00 €	218 767,32 €	60 000,00 €
Report n-1		50 869,40 €	144 103,21 €
TOTAL	65 000,00 €	269 636,72 €	204 103,21 €

DEPENSES HT	2005	2006	2007
Fonctionnement	110,00 €	14 566,78 €	13 795,12 €
Equipement			2 890,00 €
Salaires, Bourses	14 020,60 €	110 966,73 €	101 249,93 €
TOTAL	14 130,60 €	125 533,51 €	117 935,05 €

E Projet Scientifique pour les prochaines années

Les travaux sur les quatre thèmes porteurs définis dans la convention initiale seront poursuivis, en exploitant les acquis de la période précédente. Voici quelques axes de recherche qui seront particulièrement étudiés :

- En simulation des matériaux, la conception de matériaux performants, métalliques, céramiques, ou polymères, et la prédiction de l'évolution de leurs propriétés sous sollicitations thermiques et mécaniques, ou sous irradiation est essentielle pour les futurs réacteurs nucléaires à fission et à fusion, et plus généralement dans l'industrie. Pour traiter efficacement ces problèmes, il faut disposer de méthodes de calcul multi-échelle, du niveau atomique jusqu'au macroscopique. Le LRC contribuera au développement et aux applications de ces méthodes, en particulier dans le domaine des matériaux hétérogènes, la prédiction des changements de phase, et la conception de matériaux nanostructurés.
-
- En mécanique des fluides, la thématique «vagues extrêmes» sera poursuivie, en améliorant notamment la simulation de leurs effets et en travaillant sur la prédiction des impacts de vagues. Le développement et la structure des mélanges générés par les instabilités de Kelvin Helmholtz ou de Rayleigh Taylor en compressible et en incompressible seront étudiés, ainsi que les instabilités MHD. La plate-forme volumes finis «FLUX3D», conçue et réalisée au LRC, sera diffusée notamment au CEA.

- Dans le domaine des équations cinétiques, la prédiction du comportement de systèmes mésoscopiques comme les milieux à gouttelettes et les poussières sera poursuivie et améliorée, en injectant une physique plus précise dans les modèles.
- En électromagnétisme et diffraction, l'effort sur les méthodes asymptotiques sera amplifié et portera sur les études des ondes peu atténuées se propageant sur des corps élancés et des coefficients de diffraction pour des structures imparfaitement conductrices.