Mathématiques pour l'Industrie et la Physique

Equations aux Dérivées Partielles, Modélisation, Optimisation et Calcul Scientifique Unité Mixte de Recherches CNRS – Université Paul Sabatier Toulouse 3 – INSA Toulouse – Université Toulouse 1 UMR 5640

UFR MIG, Université Paul Sabatier Toulouse 3, 118 route de Narbonne, 31062 TOULOUSE cedex 4, France Tél : (33) 05 61 55 69 22/83 14 Fax : (33) 05 61 55 83 85 Mail : degond@mip .ups-tlse.fr

LRC M 06 "Mathématiques pour l'Industrie et la Physique"

Rapport d'activité pour l'Année 2004 et Perspectives pour l'Année 2005

1. Présentation générale

La création du Laboratoire de Recherche Correspondant du CEA date de janvier 2002. L'année 2004 correspond donc à la troisième année d'activité du LRC. Le nombre de chercheurs permanents impliqués côté MIP est resté stable (voir noms et grades en annexe 1).

Les thèmes de recherche recensés dans le programme de recherches défini pour l'année 2004 étaient les suivants :

- 1. Electromagnétisme et calculs de SER
- 2. Optique non linéaire : équations de Maxwell-Bloch
- 3. Simulation de plasmas atmosphériques
- 4. Modèles hybrides et équation de Fokker-Planck
- 5. Mécanique de la rupture et matériaux composites
- 6. Claquage de l'air par des micro-ondes

A côté des actions de recherche spécifiques effectuées dans chacun des thèmes listés ci-dessus, le LRC a organisé un certain nombre d'activités générales, en particulier dans le domaine de l'animation scientifique.

Dans le document ci-dessous, nous détaillons le bilan des activités du LRC durant l'année 2004 dans chacun de ces domaines puis nous traçons les perspectives pour l'année 2005.

2. Bilan des activités de l'année 2004

2.1. Activités générales

La liste des actions générales du LRC en 2004 est donnée ci-dessous :

- Organisation du LRC (organisation du secrétariat, mise à disposition d'un ingénieur informatique, de locaux, de postes de travail), gestion et organisation des différentes équipes et projets.
- Organisation de la journée scientifique annuelle du LRC (le 5 Novembre 2004 ; voir le programme en annexe 2).
- Organisation du groupe de travail hebdomadaire de l'équipe MIP du LRC.
- Maintenance du serveur WEB du LRC. Celui-ci est accessible depuis le serveur du Laboratoire MIP : http://mip.ups-tlse.fr, cliquer sur 'LRC'.
- Réalisation d'une série de prépublications du LRC.
- Participation à des journées de synthèse et de bilan relatives aux différentes activités du LRC.

2.2. Activités thématiques

2.2.1. Electromagnétisme, Calculs de SER: participants: X. Antoine, A. Bendali (MIP), M. Darbas (doctorante, financement MENRS), participation: Y. Boubendir (anciennement Doctorant MIP), K. Lemrabet (sur un support de 3 mois comme Professeur invité INSA).

Les activités de ce thème sont orientées principalement sur le développement de méthodes efficaces pour le calcul de SER. Les méthodes utilisées recouvrent

les résolutions par équations intégrales pour tenir compte de la propagation en dehors des obstacles.

le couplage éléments finis équations intégrales s'il y a des parties diélectriques non homogènes pour lesquelles une formulation par équations intégrales n'est pas utilisable,

les méthodes de décomposition de domaines,

l'analyse asymptotique pour le développement de modèles pour la diffraction par des surfaces rugueuses ou des obstacles métalliques recouverts d'une couche mince de matériau diélectrique.

Les résultats ont été les suivants

Construction de préconditionneurs analytiques pour les équations intégrales. Ces techniques permettent de réduire considérablement le nombre d'itérations lors de la résolution du système final. On a été en mesure, en particulier, de donner une explication des propriétés de convergence de l'équation des champs combinée (CFIE) et ainsi d'en effectuer des améliorations. Les travaux autour de ce sujet ont fait l'objet de la soutenance de la thèse d'HDR de X. Antoine (juin 04) [A], de celle de la thèse de Doctorat de M. Darbas (prévue le 24 novembre 04) [D]. Ils ont donné lieu aux articles acceptés ou parus [AD1] [ABD1], [ABD2] et aux articles soumis [AD2], [ADL]. Ces résultats ont été aussi présentés à l'occasion de colloques nationaux et internationaux.

Méthodes de décomposition de domaine. Une solution a été proposée au point « bloquant » constitué par l'utilisation de ces méthodes dans le cadre d'une résolution par éléments finis. Il s'agit du traitement des degrés de liberté partagés par plus de deux sous-domaines. Ces travaux ont fait l'objet d'une note au CRAS [AB1] développée dans un article soumis [AB2].

Analyse asymptotique de la diffraction par un objet métallique recouvert dune couche mince de matériau diélectrique. Des résultats complets sur ce problème ont été obtenus (Bendali-Lemrabet). Il a fallu dégager une structure spéciale sous-jacente aux équations de Maxwell après mise à l'échelle dans la couche mince pour arriver à la détermination des différents termes du développement asymptotique. Ces résultats sont en cours de rédaction.

Modèles pour la diffraction par une surface rugueuse. La technique d'homogénéisation développée a pu être étendue au traitement de l'effet sur la diffraction d'un détail sur un objet métallique sans recours à un surmaillage. Un article [PBB] a été soumis.

2.2.2. Optique non-linéaire, équations de Maxwell-Bloch : participants : C. Besse, P. Degond, O. Saut (MIP), A. Bourgeade (CESTA).

Le programme de recherches démarré en 2000, portant sur la modélisation de la propagation d'une onde laser dans un cristal anisotrope (tel le KDP) et centré autour de la thèse de Olivier Saut (sur financement CEA) a abouti à la soutenance de la thèse en Décembre 2003. Ce programme a permis la réalisation d'un code de simulation des équations de Maxwell-Bloch bidimensionnel. L'onde laser est décrite par les équations de Maxwell et est couplée à la réponse du cristal, lequel est décrit par les équations de Bloch optique. L'anisotropie du cristal est prise en compte au niveau des équations de Bloch grâce à une matrice de moments dipolaires adéquate, respectant les symétries du cristal [BBBDS], [BS], [Saut1], [Saut2], [Saut3]. L'année 2004 a été caractérisée par le développement d'une méthode pseudo-spectrale pour les équations de Maxwell, beaucoup plus efficace que la méthode de différences finies de Yee employée jusqu'alors (travail non encore rédigé).

2.2.3. Simulation de plasmas atmosphériques : participants : C. Besse, P. Degond, F. Deluzet (MIP), J. Claudel, G. Gallice et Ch. Tessieras (CESTA), R. Poncet (doctorant, financement CEA, thèse commencée en septembre 2003).

L'objet de ce thème est l'étude de l'évolution de perturbations du plasma ionosphérique (à des altitudes comprises entre 200 et 1000 km) sous l'action des instabilités de dérive en ExB. Cette instabilité contribue à strier le plasma et à développer des échelles de plus en plus petites, ce qui constitue un problème majeur pour la simulation numérique. Le modèle de base pour étudier ce phénomène est le 'modèle striations'. Il s'agit d'un modèle de transport dans un plan perpendiculaire à la direction du champ magnétique terrestre local. L'établissement de ce modèle à partir de modèles plus fondamentaux a été justifié dans un travail antérieur [BCDDGT1]. Nous avons également proposé en 2000, 2001 et 2002 de modéliser et simuler numériquement l'influence des petites échelles par le biais d'un modèle de turbulence consistant à rajouter un terme de diffusion dans l'équation de transport du plasma [BCDDGT2].

En 2002, nous avons proposé une extension du modèle striations pour un champ magnétique non uniforme, ce qui correspond au cas du champ magnétique terrestre. Ce modèle comprend une équation de transport tridimensionnelle pour la densité de plasma couplée à une équation elliptique bidimensionnelle pour le potentiel électrostatique. Les termes de couplage entre les deux équations font intervenir des intégrales de la densité de plasma le long de la troisième coordonnée, qui est l'abscisse curviligne le long d'une ligne de champ magnétique. L'ensemble du modèle est écrit dans un système de coordonnées curvilignes adapté au champ magnétique. En 2003, la mise en œuvre numérique de ce modèle a été réalisée. A partir du code striations du CESTA, qui était bidimensionnel et traitait d'un champ magnétique uniforme en géométrie cartésienne, des modifications adéquates ont été introduites afin de le passer en trois dimensions et l'adapter à la nouvelle géométrie. Le code ainsi réalisé a été testé, et validé [BCDDGT3].

En 2004, les études sur la simulation des plasmas atmosphériques se sont orientées dans trois directions parallèles. La première concerne l'enrichissement du code striations 3D en champ magnétique non-uniforme. Cet enrichissement a consisté à prendre en compte les effets thermiques (pression, température). Le terme de pression modifie à la fois le transport dans la direction parallèle au champ magnétique (en ajoutant un terme de diffusion) et dans la direction transverse (en ajoutant une composante supplémentaire au courant électrique, due à la dérive diamagnétique des particules). De plus, la pression est fonction, non seulement de la densité, mais aussi de la température des espèces. Pour décrire l'évolution de la température, une équation de bilan d'énergie a été ajoutée au système. La mise en œuvre de ces différents termes supplémentaires a été réalisée [BDD1]. Leur validation est en cours [BDD2].

Une deuxième direction a consisté à développer des outils appropriés pour la visualisation des résultats du code striations 3D. Les résultats ont été replacés dans leur scène physique (le globe terrestre, son ionosphère, son champ magnétique). Une reconstruction des résultats tridimensionnels à l'aide d'une interpolation a été réalisée. Ainsi des vues des différents champs le long de différents plans de coupes sont possibles (sur les surfaces méridiennes d'une part et sur les surfaces orthogonales au champ magnétique d'autre part). Le tout a été intégré à des animations, ce qui a nécessité un gros travail de génie logiciel, compte tenu du volume de données à manipuler. Des films de différents cas tests physiques sont maintenant disponibles [BDD1], [BDD2].

La troisième direction a concerné l'exploration d'un modèle plus riche sur le plan physique que le modèle striations. En effet, lorsque les perturbations du plasma sont de densité suffisamment importante, on ne peut plus négliger la perturbation du champ magnétique induite. Dans ce cas, il a été établi dans [BCDDGT1] que le modèle adéquat est le modèle 'Massless MHD', constitué des équations de la MHD dans lesquels les termes d'inertie dans les équations de conservation de l'impulsion sont négligés. L'étude de ce modèle constitue le sujet de thèse de Raphaël Poncet qui a débuté sa thèse à l'automne 2003 sur un financement CEA. Un premier résultat d'existence pour le modèle Massless MHD bidimensionnel a été établi. Ce cas est plus simple que le cas tridimensionnel car le champ magnétique y devient scalaire. Néanmoins, le modèle reste d'une complexité mathématique redoutable, car il couple très fortement une équation hyperbolique et une équation elliptique dégénérée. D'autre part, la stabilité linéarisée du modèle a été explorée et des premiers éléments de discrétisation numérique en une dimension d'espace ont été réalisés [BDP]. Un résultat d'instabilité non-linéaire pour le modèle striations a d'autre part été rédigé et est en cours d'acceptation à CPDE [BDHP].

2.2.4. Modèles hybrides et équation de Fokker-Planck : participants : P. Degond, M. Lemou (MIP), B. Dubroca, G. Duffa, J. P. Morreuw (CESTA), N. Crouseilles (doctorant, financement CEA, thèse commencée en septembre 2001).

L'objectif de cette collaboration est l'élaboration de modèles hybrides cinétiques-fluides pour résoudre l'équation de Fokker-Planck. L'idée est de traiter simultanément la distribution des particules énergétiques au niveau cinétique et la distribution des particules thermiques au niveau fluide. A cet effet, on procède par décomposition de domaine dans l'espace des vitesses. Une boule centrée sur la vitesse moyenne du fluide et de rayon égal à un multiple de la vitesse thermique est sélectionnée. A l'intérieur de cette boule, qui représente la distribution des particules thermiques, l'équation cinétique est remplacée par un système d'équations aux moments dont les flux sont calculés à l'aide d'un principe de minimisation d'entropie. A l'extérieur de cette boule, le modèle cinétique initial est supposé s'appliquer. Des conditions aux limites (pour le modèle cinétique) et des termes sources (pour le système aux moments) assurent le couplage entre les deux descriptions. Le modèle continu de même que sa discrétisation numérique basée sur une méthode de volumes finis

garantissent la conservation exacte de la masse, quantité de mouvement et énergie de même que la décroissance de l'entropie.

L'étude de cette méthodologie ainsi que sa mise en œuvre numérique ont constitué le sujet de thèse de N. Crouseilles (sur financement CEA), débuté à l'automne 2001 et qui s'achève par la soutenance prévue en Décembre 2004. Ce travail a permis de valider l'approche sur un modèle simplifié où l'opérateur de Fokker-Planck est remplacé par un opérateur de type BGK en dimension 1 d'espace et de vitesse. L'approche a tout d'abord été développée et validée dans un cas sans champ électrique et avec une fréquence de collision constante [CDL1]. Elle a ensuite été poursuivie par l'adjonction du champ électrique et un modèle physiquement plus réaliste de fréquence de collisions [CDL2]. Dans les deux cas, de nombreux tests ont été effectués (chocs stationnaires, chocs non-stationnaires, amortissement Landau, ondes acoustiques ioniques, pénétration d'un faisceau dans un plasma). Tous ces cas tests ont montré un comportement très encourageant de la méthode (voir également [Crou] et [CDL3]).

Par ailleurs, N. Crouseilles, a poursuivi sa collaboration avec F. Filbet (Orléans) sur des simulations numériques d'un modèle totalement cinétique comprenant la prise en compte des collisions électrons-électrons et électrons-ions par des opérateurs de Fokker-Planck-Landau. L'ensemble de ces développements a donné lieu à un article accepté dans J. Comput. Phys. [CF].

2.2.5. Matériaux composites et mécanique de la rupture

2.2.5.1. Matériaux composites : Participants : P. Laborde, M. Odunlami, Y. Renard (MIP), A. Cosculluela, B. Toson (CEA)

Ce volet concerne l'endommagement des matériaux composites carbone-carbone. La première difficulté est liée la modélisation de ce type de comportement mécanique non-linéaire, dont le principal trait concerne l'affaiblissement progressif de la rigidité du matériau au cours de l'histoire des déformations.

Dans le cadre de son mémoire de fin d'étude INSA (février à juillet 2004, au laboratoire MIP/INSA, financement CEA), Marc Odunlami a étudié un modèle simplifié d'endommagement dont les caractéristiques sont les suivantes :

Modèle en contraintes planes, dans le plan des directions 1 et 2 des fibres.

Existence d'un seuil de comportement en contrainte au-delà duquel apparaît l'endommagement en traction.

Présence de deux variables d'endommagement, chacune étant affectée à une direction de fibres pour décrire la diminution du module de Young directionnel correspondant.

Différence de comportement en traction et en compression.

Couplage directionnel à travers un coefficient de couplage liant les deux variables d'endommagement.

Le modèle permet de décrire l'essai dont on disposait concernant l'endommagement en traction/compression uniaxiale d'un matériau céramique-céramique de type Sic-Sic.

De plus, un cadre général de modélisation a été proposé dans la perspective de prendre en compte des diagrammes d'endommagement nouveaux.

La deuxième difficulté concerne les algorithmes de calcul adaptés à l'endommagement. L'objectif étant l'implémentation ultérieure dans ABAQUS, l'algorithme choisi doit être compatible avec la

méthodologie générale de résolution dans ABAQUS en calcul de structure non-linéaire. Le canevas considéré est celui de la résolution par éléments finis d'un problème de plasticité. Dans cette direction, Marc Odunlami a implémenté et validé dans le code de recherche GETFEM du laboratoire MIP un algorithme de résolution implicite pour la plasticité.

Un exposé au Barp à fait un point sur la modélisation de l'endommagement [Lab]. Le bilan du travail de M. Odunlami se trouve dans son rapport de fin de contrat [OLPR].

2.2.5.2. Mécanique de la Rupture : Participants : P. Laborde, J. Pommier, Y. Renard (MIP), A. Cosculluela, B. Toson, J. P. Lambelin, J.J. Pesqué (CEA)

Ce thème (voir précédent rapport du LRC) n'a pas fait l'objet d'une collaboration contractualisée cette année. Mais le travail s'est poursuivi au laboratoire MIP et nous nous sommes intéressés à la précision des calculs dans méthode des éléments finis étendus (XFEM) en mécanique de la rupture. La méthode telle qu'elle est présentée dans la littérature n'est pas optimale en termes de vitesse de convergence (l'optimalité s'entend par rapport aux méthodes d'éléments finis classiques appliquées à un problème régulier).

Nous avons proposés des améliorations de XFEM qui permettent de retrouver numériquement l'optimalité. Ce travail avait été initié dans le cadre du stage de Guillaume Battaia (voir précédent rapport). Cette année, nous avons consolidé le travail entrepris et soumis une publication [LPRS].

2.2.6. Claquage de l'air par des micro-ondes : participants : C. Besse, S. Châble, P. Degond, F. Deluzet (MIP), J. Claudel, G. Gallice et Ch. Tessieras (CESTA).

Ce thème a débuté en janvier 2004. Le problème posé consiste à étudier l'influence du claquage de l'air par un faisceau de micro-ondes sur les caractéristiques d'un écoulement aérodynamique. De manière plus précise, nous nous intéresserons aux effets induits sur la paroi par le plasma ainsi généré.

Le scénario physique est le suivant : Une onde de forte amplitude attaque un écoulement au voisinage d'une paroi et entraîne le claquage de l'air et la formation d'un plasma. L'onde électromagnétique chauffe les électrons qui transfèrent leur énergie aux ions et aux neutres par collisions. Pour de fortes intensités du faisceau micro-ondes, il est probable que le chauffage induit puisse entraîner des effets significatifs sur l'écoulement et par conséquent sur la paroi. L'objectif de cette étude est de parvenir à une première estimation qualitative de cet effet.

Pour décrire ce scénario, nous avons proposé un modèle fluide couplé aux équations de Maxwell. Le modèle fluide consiste en un système d'équations d'Euler pour le fluide global (neutres, ions et électrons), complété par une équation de bilan pour la densité du plasma. Cette dernière équation comporte un terme d'ionisation par le champ micro-ondes. Le plasma est considéré comme quasineutre (les densités ionique et électronique sont égales en tout point). La vitesse et la température des ions sont supposées coïncider avec celles des neutres. La vitesse et la température des électrons sont fonctions du champ électrique local à travers une loi de mobilité pour la vitesse et une loi empirique tirée de la littérature pour la température. La pression totale du fluide est la somme des pressions partielles. Un terme de chauffage par l'onde figure comme terme source de l'équation d'énergie du fluide. Ce terme est lié au courant électrique figurant au second membre de l'équation d'Ampère dans le système de Maxwell.

Le développement numérique s'est articulé autour d'un code fluide multi-espèces sur maillage structuré fourni par le CESTA et d'un code Maxwell sur maillage cartésien fourni par le laboratoire MIP. Il a été effectué par un personnel contractuel, S. Châble, recruté à cette occasion par le laboratoire MIP. Le code a été soigneusement validé sur des cas tests analytiques et ensuite appliqué à un cas test plus réaliste [BCDD1].

Le cas test réaliste ne possédant pas de solutions analytiques, un modèle unidimensionnel qui reprend les caractéristiques principales du cas réaliste en les simplifiant a également été établi. Les comparaisons avec ce modèle simplifié ont permis de vérifier que le code fournit des résultats satisfaisants. Néanmoins, les comparaisons avec ce modèle simplifié ne peuvent être que qualitatives, en raison précisément des hypothèses simplificatrices effectuées.

Pour les cas tests que nous avons considérés, nous nous sommes restreints à une géométrie relativement simple, celle d'un objet cylindrique terminé par une sphère (sphère-cylindre). On suppose que les micro-ondes éclairent une portion latérale de l'objet. Un petit domaine correspondant à la portion éclairée de la paroi et à l'écoulement environnant est sélectionné. Un premier calcul sans couplage avec les équations de Maxwell est effectué à l'aide du code du Cesta. Ce calcul permet de connaître les conditions du fluide en amont du domaine de calcul. Ces conditions sont utilisées comme conditions aux limites amont pour le fluide. Le faisceau de micro-ondes est pris en compte à l'aide d'une condition aux limites de type onde entrante dans les équations de Maxwell. Le calcul couplé fluide-Maxwell à l'aide du modèle et des conditions aux limites décrits ci-dessus est alors lancé et l'on observe comment le fluide et les efforts à la paroi sont modifiés par l'éclairement par les micro-ondes.

Le traitement des équations de Maxwell s'effectue en temporel et en explicite, ce qui nécessite un nombre considérable de pas de temps pour une simulation réaliste. Pour réduire le temps de calcul, le code a été optimisé. En particulier, les lois analytiques complexes pour les fréquences d'ionisation et les lois de température ont été tabulées, ce qui a entraîné un accroissement considérable de la rapidité du code. Egalement, les pas de temps pour les équations de Maxwell et pour les équations fluides sont différents (subcycling). Grâce à cette optimisation le code requiert environ une douzaine d'heures pour une simulation de quelques dizaines de microsecondes.

Les résultats montrent, avec les données utilisées actuellement, que l'écoulement est sensiblement modifié par le plasma mais que la variation relative des efforts à la paroi est faible [BCDD2]. L'étude doit bien sur être poursuivie par une étude paramétrique plus poussée.

3. Perspectives pour l'année 2005

3.1. Activités générales

Les activités 'générales' prévues dans le cadre du LRC en 2005 sont les suivantes :

- Organisation du LRC (organisation du secrétariat, mise à disposition d'un ingénieur informatique, de locaux, de postes de travail), gestion et organisation des différentes équipes et projets,
- Organisation d'une nouvelle journée scientifique MIP-CEA en 2005,
- Organisation d'un groupe de travail hebdomadaire de l'équipe MIP du LRC,
- Maintenance du serveur WEB,
- Continuation de la série de prépublications,
- Participation aux différentes réunions de synthèses et bilans relatives aux différentes activités du LRC,

3.2. Activités thématiques

Les anciens thèmes sont regroupés par grandes thématiques selon le schéma suivant :

- 1. Electromagnétisme et calculs de SER
- 2. Equations de Maxwell : claquage de l'air par micro-ondes et modèle de Maxwell-Bloch
- 3. Plasmas : simulation de plasmas atmosphériques et modèles hybrides
- 4. Mécanique de la rupture et matériaux composites.

Nous développons maintenant les perspectives pour chacune des quatre grandes thématiques.

3.2.1. Electromagnétisme, Calculs de SER : participants : les mêmes qu'en 2004 plus A. Makhlouf, étudiant doctorant et éventuellement K. Mer (CEA-CESTA).

Nous prévoyons de poursuivre les études développées l'an passé avec les orientations particulières suivantes

Recherche de discrétisations efficaces des formulations par équations intégrales combinées du champ (X. Antoine, A. Bendali, M. Darbas).

Utilisation de méthodes de décomposition de domaine dans le cadre d'un couplage éléments finis équations intégrales (A. Bendali, Y. Boubendir, en collaboration avec M. Fares (CERFACS)).

Développement de modèles par condition d'impédance d'ordre élevé pour la diffraction par un objet métallique recouvert d'une couche mince (A. Bendali, K. Lemrabet).

Nous envisageons aussi de prospecter les nouveaux axes d'étude suivants.

Formulations par équations intégrales adaptée pour un obstacle avec une condition d'impédance de surface (A. Bendali, A. Makhlouf). C'est typiquement le problème qui se pose en technologie de la furtivité RADAR. La présence des courants magnétiques et de la relation qui les relie aux courants électriques rend beaucoup plus difficile les formulations par équations intégrales et leur traitement comme dans le cas conducteur parfait. L'effort sera mis dans deux directions : obtenir des formulations faciles à approcher par les éléments de surface, définir comme pour le cas conducteur parfait des formulations bien adaptées à une résolution par méthode itérative.

Préconditonneurs analytiques pour les équations intégrales de Després (X. Antoine, A. Bendali, M. Darbas, A. Makhlouf et éventuellement K. Mer). Ce sujet a émergé lors d'une discussion (K. Mer, A. Bendali) lors de la journée LRC du 5 novembre dernier. Il s'agit d'étendre les techniques utilisées pour accélérer la résolution par les méthodes itératives des formulations par équations intégrales usuelles aux équations intégrales de Després. Rappelons que les équations de Després sont particulièrement adaptées pour la résolution du problème de diffraction relatif à une condition d'impédance ou pour traiter par décomposition de domaine le couplage éléments finis équations intégrales.

Ce thème fera en 2005 l'objet de contacts scientifiques entre MIP et le CESTA, mais actuellement il n'est pas prévu de contrats sur ce thème.

3.2.2. Equations de Maxwell : claquage de l'air par micro-ondes et modèle de Maxwell-Bloch

Ce nouveau thème regroupe les anciens thèmes 'optique non-linéaire' et 'claquage de l'air par des faisceaux de micro-ondes'.

a. Sous-thème 'Claquage de l'air par des faisceaux de micro-ondes' : participants C. Besse, S. Châble, P. Degond, F. Deluzet (MIP), C. Tessieras, G. Gallice, J. Claudel (CESTA)

Dans ce sous-thème, il est prévu de poursuivre le développement du modèle fluide-Maxwell pour la modélisation du claquage de l'air par des faisceaux de micro-ondes. D'une part, une géométrie 'sphère-cone' plus réaliste que la géométrie sphère-cylindre sera étudiée. L'étude paramétrique en cours sera poursuivie. Par ailleurs, le code sera enrichi par la prise en compte des termes visqueux dans les équations fluides. En effet, s'agissant d'un écoulement au voisinage d'une paroi, les effets de viscosité sont importants pour un rendu correct de la couche limite. La prise en compte de ces termes permettra de quantifier de manière beaucoup plus fiable les effets du plasma sur les efforts s'exerçant sur la paroi.

b. Sous-thème 'Equations de Maxwell-Bloch' : participants C. Besse, P. Degond, O. Saut (MIP), A. Bourgeade, J-P. Morreuw (CESTA).

Ce sous-thème est actuellement dans un état de veille scientifique. Une réflexion est engagée sur la manière de prendre en compte les niveaux du continuum atomique dans la modélisation du cristal. Une bourse de thèse CEA a été obtenue en 2004. Malheureusement, l'étudiant pressenti n'a pas été jugé d'un niveau suffisant par la commission de sélection.

3.2.3.Plasmas : simulation de plasmas atmosphériques et modèles hybrides

Ce nouveau thème regroupe les anciens thèmes 'Simulations du plasma atmosphérique' et 'Modèles hybrides et équation de Fokker-Planck'.

a. Sous thème 'Simulations du plasma atmosphérique'. Participants : C. Besse, P. Degond, F. Deluzet, R. Poncet (MIP), C. Tessieras, G. Gallice, J. Claudel (CESTA)

Les études sur la simulation du plasma ionosphérique s'orientent dans trois directions.

La première direction concerne le développement d'un code complètement tridimensionnel. En effet, pour décrire le plasma ionosphérique, une hiérarchie de modèles mathématiques est disponible [BCDDGT1]. Cette hiérarchie repose sur des passages à la limite successifs dans un ensemble de petits paramètres. A l'extrémité de la hiérarchie figure le modèle 'striations multi-couches' dont diverses versions ont été mises en œuvre les années précédentes [BCDDGT3]. Il est constitué d'une équation de transport tridimensionnelle pour le plasma, couplée à une équation elliptique bidimensionnelle pour le champ électrique. En effet, dans ce modèle, la mobilité des espèces dans la direction alignée avec le champ magnétique est considérée comme infinie. Dans cette situation, les champs électrique et magnétique sont orthogonaux. Ainsi, toute ligne de champ magnétique est une équipotentielle du potentiel électrique, lequel ne dépend que des deux coordonnées transverses au champ magnétique non-uniforme comme le champ magnétique terrestre, les coordonnées transverses au champ magnétique sont bien entendu rapportées à un système de coordonnées curvilignes adapté.

Néanmoins, la mobilité alignée des espèces ne peut pas être considérée comme infinie partout. Dans la basse ionosphère, les collisions avec les neutres sont importantes et dans ce cas, la mobilité devient une quantité finie. De ce fait, les champs électrique et magnétique ne sont plus nécessairement orthogonaux et le modèle striations n'est plus valable. Il convient alors de remonter 'd'un cran' dans la

hiérarchie de modèles et de considérer le modèle dynamo. Ce modèle couple une équation de transport tridimensionnelle pour le plasma et une équation elliptique également tridimensionnelle pour le champ électrique.

Les développements prévus dans le courant 2005 auront pour objet la résolution numérique du modèle dynamo, et la comparaison avec le modèle striations multi-couches. L'objet est d'une part de valider le modèle striations multi-couches dans les zones où il est supposé être valable (essentiellement à haute altitude) et de proposer un modèle plus précis lorsqu'il est en défaut (à basse altitude).

L'équation elliptique intervenant dans le modèle dynamo met en jeu une matrice de conductivité fortement anisotrope, liée aux matrices de mobilité des espèces. Ainsi, dans une grande partie du domaine, un des éléments de cette matrice (celui correspondant aux mobilités alignées) est très grand devant les autres. Il s'ensuit alors un système elliptique mal conditionné, difficile à résoudre. De plus, la taille du domaine de résolution (un tube de champ magnétique dont la section est un carré d'environ 100 km de côté) nécessite l'emploi d'un nombre élevé de noeuds (typiquement 300 par 300 dans les directions normales au champ magnétique et 60 dans la direction parallèle). Le nombre d'inconnues du système linéaire sera donc considérable. Une des difficultés de ce projet sera donc de concevoir et mettre en oeuvre des méthodes de résolution rapides, mettant à profit la forte anisotropie de la matrice de conductivité.

A cet effet, on pourra envisager divers types d'approches:

- L'utilisation du modèle striations comme préconditionneur: en effet, le modèle striations reste certainement valide dans une large portion du domaine. Il peut à ce titre constituer un excellent préconditionneur pour le modèle complet.
- L'utilisation de méthodes itératives type Jacobi, Gauss-Seidel ou de relaxation. En effet, l'information se propageant beaucoup plus vite dans la direction du champ magnétique que dans la direction transverse, on peut imaginer qu'une méthode dans laquelle on inverse alternativement le système dans les directions parallèle et transverse soit particulièrement efficace.

Enfin, il peut être intéressant d'explorer la faisabilité d'une méthode de couplage par décomposition de domaine. Le modèle striations, valable aux altitudes élevées peut être couplé à travers une interface ou une zone tampon au modèle dynamo nécessaire quant à lui aux altitudes les plus basses. Une étude exploratoire sur la faisabilité d'une telle méthode sera donc réalisée.

Finalement, il convient de noter que les outils de visualisation et d'animation développés pour le modèle striations sont encore exploitables pour le modèle dynamo. Si le besoin de développer des outils de visualisation spécifiques au modèle dynamo se fait sentir, les outils correspondants seront ou bien effectivement développés, ou bien une étude exploratoire sera menée à cet effet.

Un des objectifs de cette année sera donc de valider le modèle striations et plus particulièrement, l'hypothèse de mobilité alignée infinie inhérente à ce modèle. Ainsi, les différents cas test réalisés antérieurement pour le modèle striations seront repris dans le cadre du modèle dynamo et comparés soigneusement aux résultats correspondants du modèle striations. Un catalogue précis des situations qui mettent le modèle striations en défaut pourra ainsi être établi.

Une deuxième direction pour l'année 2005 concernera la poursuite de l'étude du modèle Massless-MHD. Il est prévu la réalisation d'un article sur l'existence de solutions bidimensionnelles, la poursuite de l'étude de la stabilité du modèle et la réalisation de simulations bidimensionnelles. Ce programme constituera le premier volet de l'activité de R. Poncet durant sa deuxième année de thèse.

Enfin, une dernière direction concernera la modélisation de la turbulence au sein du modèle striations. A cet effet, un modèle striations statistique a été proposé par J. Claudel, G. Gallice et C. Tessieras. Ce modèle décrit l'évolution des deux premiers moments de la distribution statistique de la densité de plasma, et est fermé par une hypothèse adéquate sur cette distribution (hypothèse log-normale). Dans un travail (non encore rédigé), P. Degond a proposé une extension de ce modèle qui permet de décrire l'évolution de l'intégralité de la distribution statistique de la densité, et pas seulement de ses deux premiers moments, et qui ne requiert donc aucune hypothèse de fermeture. La simulation numérique de ce modèle pourrait être réalisable dans un cadre bidimensionnel sans accroissement notable de difficulté par rapport au modèle striations standard. L'étude mathématique et numérique de ce modèle constituera le deuxième volet de la seconde année de thèse de R. Poncet. Pour l'année 2005, il est donc prévu d'explorer les premières propriétés mathématiques de ce modèle.

b. Sous-thème 'Modèles hybrides et équation de Fokker-Planck'. Participants : N. Crouseilles, P. Degond, M. Lemou (MIP), B. Dubroca, J-P. Morreuw, G. Duffa, V. Tikhonchuk (CESTA et/ou CELIA).

Les travaux concernant ce sous-thème s'achèvent avec la soutenance de N. Crouseilles en Décembre 2004.

Des travaux de veille scientifique se poursuivront en 2005 avec notamment une recherche de l'optimisation numérique du modèle hybride : les flux de la partie hydrodynamique du modèle qui auparavant étaient calculés numériquement par quadrature de la fonction de distribution sur le domaine des vitesses peuvent être calculés analytiquement. Cette procédure nécessite de revoir en profondeur l'algorithmique numérique afin de préserver les propriétés de conservativité de la méthode. L'étude et l'analyse de cette approche seront donc poursuivies en 2005.

Ce thème fera en 2005 l'objet de contacts scientifiques entre MIP et le CESTA, mais actuellement il n'est pas prévu de contrats sur ce thème.

3.2.4. Mécanique de la rupture et matériaux composites

3.2.4.1. Matériaux composites : Participants : P. Laborde, M. Odunlami, Y. Renard (MIP), A. Cosculluela, B. Toson (CEA)

De nouvelles données expérimentales sur le comportement des composites sont maintenant disponibles au CESTA qu'il s'agirait, dans une première phase, d'intégrer dans notre modélisation.

La deuxième phase correspondra au portage dans ABAQUS de l'algorithme actuellement à l'étude dans GETFEM et à des développements numériques pour le modèle d'endommagement général. L'approche sera validée par des simulations numériques sur un modèle spécifique intégrant les données expérimentales actuellement disponibles.

L'implémentation dans ABAQUS sera réalisée pour le compte du CESTA par Marc Odunlami en CDD à la CS-SI (début octobre 2004 à fin septembre 2005). Un suivi scientifique sur les aspects modélisation et méthode de résolution est prévu dans le cadre d'une collaboration avec le laboratoire *MIP* et d'une activité de conseil (Patrick Laborde).

Par ailleurs, afin de développer de nouveaux aspects de la modélisations des matériaux composites et d'améliorer la résolution numérique du problème, une étude est prévue au laboratoire MIP au

printemps 2005 sur le thème de l'endommagement, dans le cadre d'un stage de DEA et d'un travail spécifique de l'équipe « Calcul de structures »

3.2.4.2. Mécanique de la Rupture : Participants : P. Laborde, J. Pommier, Y. Renard (MIP), A. Cosculluela, B. Toson, J. P. Lambelin, J.J. Pesqué (CEA)

On se propose d'étudier un cas plus complexe de fissure à l'interface matériau/colle dans le contexte d'une application plus réaliste pour le CEA. Dans un premier temps, il s'agirait de tester dans GETFEM, dans le cadre d'un stage de DEA. Une poursuite en thèse pourrait être ensuite envisagée avec implémentation dans ABAQUS.

4. Conclusion

L'année 2004 a vu se continuer le partenariat étroit entre l'équipe LRC de MIP et le CESTA. Elle a vu en particulier la montée en puissance de deux nouvelles thématiques : la modélisation du claquage de l'air par faisceaux de micro-ondes d'une part et la modélisation en mécanique de la rupture et composites thermostructuraux d'autre part. Parallèlement, plusieurs thèmes auparavant très actifs maintiennent une activité de veille scientifique : il s'agit de l'optique non-linéaire. Enfin, un thème arrive à échéance, celui de la modélisation hybride de l'équation de Fokker-Planck.

Cette évolution a conduit à la restructuration de l'activité du LRC autour de quatre thèmes bien identifiés dont trois font l'objet de collaborations contractuelles : électromagnétisme et calculs de SER, équations de Maxwell, Plasmas, Mécanique de la rupture et composites.

Dans plusieurs thèmes la collaboration a conduit à la réalisation de codes de niveau pré-industriel avec des fonctions de visualisation poussées. Cela n'empêche pas des travaux de recherche plus fondamentale de se poursuivre, avec notamment une thèse en cours sur de nouveaux modèles de la physique des plasmas ionosphériques.

La collaboration implique activement les équipes de part et d'autres, avec, outre l'organisation de la journée LRC annuelle, de nombreuses rencontres et la rédaction de publications communes.

En résume, il s'agit d'un partenariat très actif et dynamique où la complémentarité et l'interdisciplinarité des équipes permettent des avancées significatives sur plusieurs fronts.

ANNEXE 1 : Chercheurs de MIP impliqués dans les activités du LRC :

Nom-prénom	Grade	Thème
BESSE Christophe	M _D C, UPS	Plasmas, Maxwell
CHÂBLE Stéphane	CONTRACTUEL	Maxwell
DEGOND, Pierre	DR, CNRS	Directeur du LRC, Plasmas, Maxwell
DELUZET Fabrice	IR, CNRS	Plasmas, Maxwell
LABORDE Patrick	PR, UPS	Mécanique de la rupture et composites
POMMIER Julien	IE, INSA	Mécanique de la rupture et composites
RENARD Yves	MDC, INSA	Mécanique de la rupture et composites

Légende : MdC = Maître de Conférences, PR = Professeur, CR = Chargé de Recherches, DR = Directeur de Recherches, IR = Ingénieur de Recherches, IE = Ingénieur d'Etudes, UPS = Université Paul Sabatier, INSA = Institut National des Sciences Appliquées, CNRS = Centre National de la Recherche Scientifique

ANNEXE 2 : Programme de la journée annuelle du LRC (le 5 Novembre 2004).

Matin Chairman: P. Degond

10:00-10:10 : P. Degond (MIP) Introduction

10:10-10:50 : C. Besse, F. Deluzet, R. Poncet (MIP) Instabilités dans les plasmas ionosphériques

10:50-11:30 : S. Châble (MIP) Propagation des faisceaux micro-ondes dans les écoulements gazeux

> 11:50-12:30 : O. Saut (MIP) Propagation laser dans les milieux matériels

> > 12:30: déjeuner

Après-midi Chairman: J. Ovadia

14:20-15:00 : P. Laborde (MIP) Mécanique de la rupture

15:00-15:40 : A. Bendali, M. Darbas (MIP) Electromagnétisme

> 15:40 - 15:50 : J. Ovadia Conclusions

16:50: fin de la reunion.

- [A] X. Antoine, Approximations microlocales de l'opérateur Dirichlet-to-Neumann et applications au développement d'algorithmes rapides, thèse d'Habilitation à Diriger les Recherches, UPS (juin 2004).
- [ABD1] X. Antoine, A. Bendali, M. Darbas, *Analytic preconditioners for the electric field integral equation*, International Journal for Numerica Methods in Engineering, 61 (8) (2004), pp 1310-1331.
- [ABD2] X. Antoine, A. Bendali, M. Darbas, *Analytic preconditioners for the boundary integral solution of the scattering of the acoustic waves by open surfaces, numéro special du* Journal of Computational Acoustics, 13 (3) (2005) (à paraître).
- [AD1] X. Antoine, M. Darbas, *Integral equations for the iterative solution of acoustic scattering problems*, Quaterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics, (à paraître).
- [AD2] X. Antoine, M. Darbas, Generalized combined field integral equations for the iterative solution of the three-dimensional Helmholtz equation, soumis.
- [ADL] X. Antoine, M. Darbas, Y. Y. Lu, *An improved surface radiation condition for high-frequency acoustic scattering problems*, soumis.
- [AB1] A. Bendali, Y. Boubendir, Méthode de décomposition de domaine et éléments finis nodaux pour l'équation d'Helmholtz, CRAS série I 339 (2004), pp 229-234.
- [AB2] A. Bendali, Y. Boubendir, Non-overlapping domain decomposition method for a nodal finite element method, SIAM Numerical Analysis (soumis).
- [BBBDS] C. Besse, B. Bidégaray-Fesquet, A. Bourgeade, P. Degond, O. Saut, *A Maxwell-Bloch model with discrete symmetries for wave propagation in nonlinear crystals*: an application to KDP, M2AN 38 (2004), pp. 321-344.
- [BCDDGT1] C. Besse, J. Claudel, P. Degond, F. Deluzet, G. Gallice, C. Tessieras, *A model hierarchy for ionospheric plasma modeling*, Math. Methods and Models in the Applied Sciences, 14 (2004), pp. 393-415.
- [BCDDGT2] C. Besse, J. Claudel, P. Degond, F. Deluzet, G. Gallice, C. Tessieras, *Instability of the ionospheric plasma: modeling and analysis*, soumis
- [BCDDGT3] C. Besse, J. Claudel, P. Degond, F. Deluzet, G. Gallice, C. Tessieras, *Ionospheric plasma: model derivation, stability analysis and numerical simulations*, à paraître dans les comptes rendus du CEMRACS 2003, de Gruyter.
- [BCDD1] C. Besse, S. Châble, P. Degond, F. Deluzet, *Claquage de l'air par un faisceau de micro-ondes et interaction avec un écoulement*, Rapport intermédiaire de contrat Cesta ref. 46000 80778/P6F21, Juillet 2004.
- [BCDD2] C. Besse, S. Châble, P. Degond, F. Deluzet, *Claquage de l'air par un faisceau de micro-ondes et interaction avec un écoulement*, Etat d'avancement, Octobre 2004.
- [BDD1] C. Besse, P. Degond, F. Deluzet, *Irrégularités du plasma ionosphérique terrestre~: prise en compte du gradient de pression et visualisation*, Rapport intermédiaire de contrat CEA-Cesta, ref Cesta, 4600082790/P6F34, Septembre 2004.

- [BDD2] C. Besse, P. Degond, F. Deluzet, *Irrégularités du plasma ionosphérique terrestre~: prise en compte du gradient de pression et visualisation*, Rapport final de contrat, ref. Cesta 4600082790/P6F34, en préparation.
- [BDHP] C. Besse, P. Degond, H-J. Hwang, R. Poncet, *Nonlinear instability of the two-dimensional striation model about smooth steady-states*, à paraître dans Comm. Partial Diff. Equations.
- [BDP] C. Besse, P. Degond, R. Poncet, *Modélisation et simulations numériques du plasma ionosphérique dans des situations de fort déséquilibre. Partie 1: Etude théorique du modèle Massless-MHD et éléments d'approximation numérique,* Rapport final de contrat CEA Cesta, ref. Cesta 4600075590/P6F34
- [BS] A. Bourgeade, O. Saut, Comparison of macroscopic and microscopic models for ultrashort pulses propagation in nonlinear crystals, 2004, soumis
- [Crou] N. Crouseilles, *Modèles cinétiques et hybrids cinétiques-fluides pour les gaz et les plasmas hors équilibre,* thèse, INSA, Décembre 2004.
- [CDL1] N. Crouseilles, P. Degond, M. Lemou, *A hybrid kinetic-fluid model for solving the gas dynamics Boltzmann-BGK equation*, J. Comput. Phys. 199 (2004), pp. 776-808.
- [CDL2] N. Crouseilles, P. Degond, M. Lemou, *A hybrid kinetic-fluid model for solving the Vlasov-BGK equation*, J. Comput. Phys. (à paraître).
- [CDL3] N. Crouseilles, P. Degond, M. Lemou, *Modèles hybrides cinétique-fluide pour les plasmas hors équilibre, Partie 3 : Finalisation et synthèse des résultats,* Rapport final de contrat CEA Cesta, ref. Cesta 4600076803/P6F34.
- [CF] N. Crouseilles, F. Filbet, *Numerical approximation of collisional plasmas by high order methods*, J. Comput. Phys., à paraître.
- [D] M. Darbas, Les préconditionneurs analytiques de type Calderon pour les formulations intégrales des problèmes de diffraction d'onde, thèse de Doctorat en Mathématiques Appliquées, INSA de Toulouse, Novembre 2004.
- [Lab] P. Laborde . Modélisation numérique de problèmes d'endommagement. Exposé au CEA-CESTA, Juin 2004.
- [3] P. Laborde, J. Pommier, Y. Renard, M. Salaün, *High order extended finite element method for cracked domains*, soumis à Int. J. Numer. Meth. Engng, Octobre 2004.
- [PBB] J.-R. Poirier, A. Bendali, P. Borderies, *Impedance boundary condition for the scattering of time-harmonic waves by rapidly varying surfaces*, IEEE Transactions on Antennas and Propagation, (soumis).
- [OLPR] M. Odunlami, P. Laborde, J. Pommier, Y. Renard, *Définition et implémentation d'un algorithme de type « rigidité tangente » pour la plasticité et l'endommagement,* Rapport de fin de contrat, Juillet 2004.
- [Saut1] O. Saut, Computational modeling of ultrashort powerful laser pulses in anistrotropic crystal, J. Comput. Phys. 197 (2004), pp. 624-646
- [Saut2] O. Saut, Etude numérique des nonlinéarités d'un cristal par résolution des équations de Maxwell-Bloch, thèse, INSA Toulouse, 2003.

