Candidature à poste de Maître de Conférence en Mathématiques, Mathématiques appliquées à l'Université de Nice

Nicolas Barral

Mars 2019

1 Introduction

J'ai obtenu une thèse en mathématiques appliquées de l'Université Pierre et Marie Curie en novembre 2015. Effectuée au sein du projet Gamma3 de P.L. George à l'Inria Rocquencourt, elle a été dirigée par F. Alauzet. Depuis début 2016, j'effectue un séjour post-doctoral à l'Imperial College de Londres, au sein du groupe AMCG du Earth Science and Engineering Department, auprès de M. Piggott et G. Gorman. Depuis mai 2018, mon activité a été ré-orientée vers de l'enseignement pour assurer le lancement d'un Master dédié au calcul scientifique.

Mes recherches sont axées autour de l'adaptation de maillage pour des problèmes instationnaires. Mes contributions notables comprennent l'amélioration d'estimateurs d'erreur et de l'algorithme d'adaptation associé pour des simulations en géométrie mobile 3D, des comparaisons de plusieurs algorithmes de bouger de maillage, l'ajout d'une fonctionnalité d'adaptation anisotrope dans la librairie de calcul scientifique PETSc ouvrant la voie à de nombreuses applications, l'utilisation de l'adaptation anisotrope pour des simulations océaniques côtières dans le cadre de l'étude de structures maréemotrices, et la contribution à la fondation du groupe international UGAWG s'attachant à valider les codes et méthodes d'adaptation de maillage.

Table des matières

1	Introduction	1
2	CV	2
3	Liste des publications	4
4	Résumé des activités de recherche	7
5	Résumé des activités d'enseignement et perspectives	10
6	Programme de recherche	12
7	Rapports de pré-soutenance de thèse	14
8	Lettres de recommandations	21

Nicolas Barral

Research associate à Imperial College London

Expérience professionnelle

- 2016 Research Associate, Imperial College London, Department of Earth Science and Engineering.

 Adaptation de maillage appliquée à la modélisation de l'océan.
- 2012 2015 **Doctorant**, *Inria Projet Gamma3*. Encadrant : F. Alauzet. Adaptation de maillage pour géométries mobiles en 3D.
- Fév. Mai Visiteur, Missippi State University.
 - 2013 Comparaison de techniques de bouger de maillage.
- 2011-2012 Stages de master (2 fois 6 mois), Inria Projet Gamma3. Encadrant: F. Alauzet. Adaptation de maillage instationnaire.

Formation

- 2018 Software Carpentry Foundation, Instructeur certifié.
- 2015 **PhD**, Inria / Université Paris 6 Pierre et Marie Curie.

 Title : Time-accurate anisotropic mesh adaptation for three-dimensional moving mesh problems Directeur : F. Alauzet. Rapporteurs : J.F. Remacle et M. Visonneau.
- 2012 Master, École Centrale Paris, mention TB.
 Master Modélisation et Simulation, co-habilité INSTN, ENSTA, ECP et ENS.
- 2012 **Diplôme d'ingénieur**, École Centrale Paris.

 Option Mathématiques Appliquées (méthodes numériques, calcul stochastique, data mining).

Compétence

- Mathématiques Analyse et méthodes numériques. Adaptation de maillage. Volumes Finis. Elements Finis. Solveurs ALE.
 - Physique CFD: Euler compressible, SWE.
 - Informatique Langages: C, C++, Perl, Python, MatLab, Maple, R; HPC: MPI, threads, OpenCL.

Enseignement

- 2018- Imperial College London, Développement de méthodes pédagogiques innovantes. Intégration du logiciel de notation automatique Okpy à Jupyter Notebook dans le Cloud de Microsoft Azure pour les cours de méthodes numériques du département.
- 2018- Imperial College London, Applying Computational Science.

 ACSE MSc, examinateur (8h) (12HETD + corrections), coordinateur : G. Collins
- 2018- **Imperial College London**, *Modern Programming Techniques*. ACSE MSc, amphis (12h) + TDs (24HETD), coordinateur : G. Gorman.
- 2017- Imperial College London, Numerical Methods 1. L1, amphis + TDs, 30HETD + corrections, coordinateur : G. Gorman.
- 2018 Imperial College London, Shell & git workshop.L2, atelier de 2 jours (12h, 18HETD), Instructeur principal.
- 2016- Imperial College London, Introduction to programming for geoscientists.
 L1, amphis + TDs, 30HETD + corrections, coordinateur : G. Gorman (2016-17) puis N. Barral (2018).
- 2014 École Centrale Paris, Analyse théorique et numérique des EDPs.
 1ère année d'école d'ingénieur (L3), 20HETD + corrections, coordinatrice : P. Lafitte.

Encadrement

 $2017\hbox{--} {\bf Imperial\ College\ London},\ Joe\ Wallwork.$

MRes+PhD, Méthodes adaptatives pour la propagation de tsunamis. Encadrant principal: M. Piggott

Financements et bourses

 $2018 \hbox{-} \ \ \, \textbf{Pedagogy transformation support}, \, 2 \, ans, \, ICL \, \, Teaching \, and \, Learning \, Strategy.$

Automated assessment using OK. (application co-écrite)

2017-2018 eCSE 11 grant, 9 mois, ARCHER Service.

Adaptation de maillage parallele dans PETSc/DMPlex. (application co-écrite)

2017 PRISM project, 6 mois, Platform for Research In Simulation Methods.

Adaptation de maillage anisotrope avec Pragmatic et Firedrake.

 $2016\hbox{-}2017 \quad \textbf{Industrial project}, \textit{Imperial College-Weir Group}.$

Simulation de pompes centriguges.

2013-2015 ANR project MAIDESC.

Maillages adaptatifs pour les interfaces instationnaires avec déformations, étirements, courbures.

Partenaires : Inria, Univ. Montpellier, Univ. Bordeaux, Ecole des Mines de Paris.

2013 Bourse, Fondation Sciences Mathématiques de Paris.

Bourse pour un séjour de 4 mois à Mississippi State University. (application co-écrite)

2012- Financement de thèse, Fondation Airbus Group.

Méthodes Numériques Avancées pour la Simulation de Problèmes à Géométrie Mobile.

Responsaibilités administratives

Reviewer Journal of Computational Physics, AIAA Journal, NUMGRID 2018.

Nicolas Barral

List of publications

Journal articles

- [ART1] Three-dimensional CFD simulations with large displacement of the geometries using a connectivity-change moving mesh approach, N. Barral and F. Alauzet, Engineering with Computers, 2018.
- [ART2] Time-accurate anisotropic mesh adaptation for three-dimensional time-dependent problems with body-fitted moving geometries, N. Barral, G. Olivier and F. Alauzet, Journal of Computational Physics, 2017.
- [ART3] Geometric validity (positive Jacobian) of high-order Lagrange finite elements, theory and practical guidance, P.L. George, H. Borouchaki and N. Barral, Engineering with Computers, 2015.

Preprints

- [PRE1] Anisotropic mesh adaptation in Firedrake with PETSc DMPlex, N. Barral, M.G. Knepley, M. Lange, M.D. Piggott and G.J. Gorman, 25th International Meshing Roundtable, Washington DC, USA, September 2016.
- [PRE2] Construction and geometric validity (positive Jacobian) of serendipity Lagrange finite elements, theory and practical guidance, P.L. George, H. Borouchaki and N. Barral, to be published.

Proceedings with peer review

- [PROC1] Verification of Unstructured Grid Adaptation Components, M. Park, A. Balan, W. Anderson, M. Galbraith, P. Caplan, H. Carson, T. Michal, J. Krakos, D. Kamenetskiy, A. Loseille, F. Alauzet, L. Frazza, and N. Barral, AIAA Scitech 2019 Forum, AIAA Paper 2019-1723, San Diego, CA, USA, Jan 2019.
- [PROC2] Unstructured Grid Adaptation and Solver Technology for Turbulent Flows, M. Park, N. BArral, D. Ibanez, D. Kamenetskiy, J. Krakos, T. Michal and A. Loseille, 56th AIAA Aerospace Sciences Meeting, AIAA Paper 2018-1103, Kissimmee, FL, USA, Jan 2018.
- [PROC3] First Benchmark of the Unstructured Grid Adaptation Working Group, D. Ibanez, N. Barral, J. Krakos, A. Loseille, T. Michal and M. Park, Proc. of the 26th International Meshing Roundtable, Procedia Engineering, vol 203, pp. 154-166, Washington DC, USA, 2017.
- [PROC4] Metric-based anisotropic mesh adaptation for three-dimensional time-dependent problems involving moving geometries, N. Barral, F. Alauzet and A. Loseille, 53th AIAA Aerospace Sciences Meeting, AIAA Paper 2015-2039, Kissimmee, FL, USA, Jan 2015.
- [PROC5] Two mesh deformation methods coupled with a changing-connectivity moving mesh method for CFD Applications, N. Barral, E. Luke and F. Alauzet, Proc. of the 23th International Meshing Roundtable, Procedia Engineering, vol 82, pp. 213-227, London, England, 2014.
- [PROC6] Large displacement body-fitted FSI simulations using a mesh-connectivity-change moving mesh strategy, N. Barral and F. Alauzet, 44th AIAA Fluid Dynamics Conference, AIAA Paper 2014-2773, Atlanta, GA, USA, June 2014.

Communications

- [CONF1] **Tidal power plant modelling using anisotropic mesh adaptation in Thetis**, N. Barral, A. Angeloudis, S. Kramer, G. Gorman and M. Piggott, Firedrake '18: The Firedrake user and developer workshop, London, UK, 2018.
- [CONF2] An anisotropic mesh adaptation approach for regional tidal energy hydrodynamics modelling, N. Barral, A. Angeloudis, S. Kramer, G. Gorman and M. Piggott, EGU, Vienna, Austria, 2018.

- [CONF3] Anisotropic mesh adaptation in Firedrake, N. Barral, M.G. Knepley, M. Lange, M.D. Piggott and G.J. Gorman, Firedrake '17: The Firedrake user and developer workshop, London, UK, 2017.
- [CONF4] Parallel anisotropic mesh adaptation with DMPlex and Pragmatic, N. Barral, M.G. Knepley, M. Lange, M.D. Piggott and G.J. Gorman, ADMOS 2017, Verbania, Italy, June 2017.
- [CONF5] Anisotropic mesh adaptation in DMPlex, N. Barral and M. Knepley, PETSc users meeting, Boulder, CO, USA, 2017.
- [CONF6] Anisotropic mesh adaptation in Firedrake with PETSc DMPlex, N. Barral, M.G. Knepley, M. Lange, M.D. Piggott and G.J. Gorman, 25th IMR, Washington DC, September 2016.
- [CONF7] Anisotropic error estimates for adapted dynamic meshes, N. Barral and F. Alauzet, AD-MOS 2015, Nantes, France, June 2015.
- [CONF8] Large displacement simulations with an efficient mesh-connectivity-change moving mesh strategy, N. Barral and F. Alauzet, WCCM 2014, Barcelona, Spain, July 2014.
- [CONF9] Parallel time-accurate anisotropic mesh adaptation for time-dependent problems, N. Barral and F. Alauzet, WCCM 2014, Barcelona, Spain, July 2014.

Research reports

- [RR1] Moving mesh methods in Fluidity and Firedrake, T. McManus, J. Percival, B. Yeager, N. Barral G. Gorman and M. Piggott, 2017.
- [RR2] Carreaux Bézier-Serendip de degré arbitraire, P.L George, H. Borouchaki and N. Barral, INRIA RR-8624, 2014.
- [RR3] Construction et validation des éléments Serendip associés à un carreau de degré arbitraire, P.L George, H. Borouchaki and N. Barral, INRIA RR-8572, 2014.
- [RR4] Construction et validation des éléments réduits associés à un carreau simplicial de degré arbitraire, P.L George, H. Borouchaki and N. Barral, INRIA RR-8571, 2014.

■ Ph.D. thesis

[PHD] Time-accurate anisotropic mesh adaptation for three-dimensional moving mesh problems, N. Barral, Université Pierre et Marie Curie, 2015.

Talks and seminars

- [SEM1] Framework pour des simulations côtières avec adaptation de maillage anisotrope, Rencontres MathOcéan, Bordeaux, Janvier 2019.
- [SEM2] Adaptation de maillage anisotrope pour simulations instationnaires, Séminaire Calcul Scientifique et Modélisation, Institut Mathématique de Bordeaux, Bordeaux, Octobre 2018.
- [SEM3] Time-accurate anisotropic mesh adaptation for three-dimensional moving mesh problems, N. Barral, AMCG Seminar, Imperial College, London, December 2015.
- [SEM4] Adaptation de maillages non structurés pour des problèmes instationnaires, et maillage en géométrie mobile, N. Barral, Numerical Analysis and PDEs Seminar, Ecole Centrale Paris, November 2014.
- [SEM5] Du réel au numérique : la science des maillages, P.L. George, N. Barral, Pint of Science, 2015.

Awards

— IMR Meshing Contest Award, 23th International Meshing Roundtable, London, October 2014.

Contributions logicielles

- Pragmatic, provides 2D/3D anisotropic mesh adaptivity for meshes of simplexes., https://github.com/meshadaptation/pragmatic
- PETSc/Petsc4Py, a suite of data structures and routines for the scalable (parallel) solution of scientific applications modeled by partial differential equations, https://www.mcs.anl.gov/petsc
- Thetis, an unstructured grid coastal ocean model built using the Firedrake finite element framework, https://thetisproject.org/
- **Firedrake**, an automated system for the solution of partial differential equations using the finite element method (FEM), https://www.firedrakeproject.org/
- Wolf, 2D and 3D Mixed-Element-Volume solvers for compressible Euler and Navier Stokes equations, http://pages.saclay.inria.fr/frederic.alauzet/code_eng.html#Wolf-Nsc

Les travaux précédents sont disponibles sur ma page web :

https://nicolasbarral.fr/publi.html.

Les travaux [ART1], [ART2], [PROC2], [PROC5] et [PHD] pourront être transmis au Comité de Sélection à sa demande.

4 Résumé des activités de recherche

Mes recherches s'articulent autour de l'étude de l'adaptation de maillages non-structurés pour des problèmes instationnaires, la mécanique des fluides numérique ainsi que le calcul haute performance. J'ai commencé à explorer ces thèmes pendant ma thèse et je les approfondis dans un contexte différent à l'Imperial College. J'essaie de me placer au plus près des applications : aéronautique durant ma thèse, et désormais modélisation de l'océan. Je ne considère pas l'adaptation de maillage comme une fin en soi, mais comme un outil au service d'un calcul. Il faut donc étudier tous les aspects d'un calcul adaptatif, de la stratégie d'adaptation aux méthodes numériques adaptées au problème considéré et la génération du maillage proprement dite, tout en prenant en compte la performance du calcul sur l'architecture matérielle considérée.

Adaptation de maillage anisotrope. L'adaptation de maillage anisotrope consiste à optimiser la taille et l'orientation des éléments d'un maillage non structuré afin de minimiser une certaine erreur. L'enjeu est d'une part de proposer une analyse théorique de ce problème, qui conduit à une description mathématique du "meilleur" maillage pour ce type de problèmes et à un algorithme d'adaptation, et d'autre part d'en assurer l'exécution pratique, afin de réaliser des simulations en 3D sur des configurations industrielles.

Durant ma thèse, je me suis intéressé aux méthodes d'adaptation fondées sur des algorithmes dits de point fixe. L'algorithme d'adaptation de point fixe global que j'ai considéré repose sur une analyse espace-temps de l'erreur d'interpolation où l'estimateur d'erreur est moyenné sur des larges sous-intervalles créant des maillages adaptés à l'intégralité de chaque sous-intervalle. Une analyse plus fine de l'erreur m'a permis d'améliorer la façon dont on moyenne l'erreur, et donc la performance de l'algorithme [ART2,PHD]. J'ai étendu cette analyse aux simulations avec des géométries en mouvements grands et aléatoires. L'approche de déformation du maillage conforme est décrite ci-dessous. Pour un déplacement du maillage prescrit sur un sous-intervalle, on modifie l'estimateur d'erreur de telle sorte que le maillage reste adapté à la solution malgré sa déformation (Fig. 1). J'ai étendu et amélioré une analyse initiée en 2D en 3D [ART2,PHD]. L'implémentation pratique de cet algorithme requiert un certain nombre de choix [ART2,PHD]. J'ai appliqué cet algorithme dans le domaine de la CFD, réalisant pour la première fois des simulations adaptatives avec grand déplacement des géométries sur des configurations industrielles 3D (Fig. 2). J'ai montré numériquement l'efficacité de l'approche proposée, qui accroît la précision du calcul tout en réduisant sensiblement le coût CPU [ART2].

A l'Imperial College, j'ai comparé expérimentalement, dans le cadre de la simulation de l'océan, la stratégie d'adaptation de point fixe global avec une stratégie plus simple consistant à remailler tous les x pas de temps. Ces expérimentations seront publiées dans des articles applicatifs en cours de rédaction.







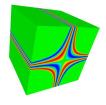


FIGURE 1 – On génère un maillage à t^n (gauche) tel que, déformé avec la déformation imposée (milieu gauche) de t^n à t^{n+1} , le résultat final (milieu droite) soit adapté au senseur à t^{n+1} (droite).

Maillages mobiles. Une autre méthode d'adaptation de maillage consiste à déplacer les sommets du maillages, tout en gardant sa topologie fixe. Durant ma thèse, les maillages mobiles étaient motivés par le grand déplacement des géométries. Un algorithme fondé sur une équation d'élasticité linéaire et de swaps (bascules d'arêtes) a été développé à Gamma3 pour assurer la qualité et validité du maillage. J'ai implémenté

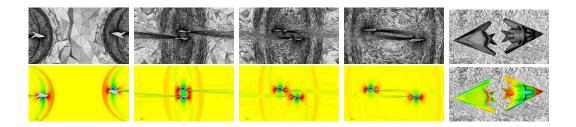


FIGURE 2 – Simulation adaptative 3D du croisement de deux avions F117. En haut le maillage adapté, en base le champs de densité, à droite un zoom sur la géométrie complexe de l'avion.

un autre algorithme fondé sur une interpolation explicite [PROC5], et intégré ces algorithmes dans celui d'adaptation anisotrope, permettant la réalisation de simulations adaptatives en 3D avec des corps en mouvement sur des configurations 3D complexes [ART1,ART2,PHD].

Les solveurs numériques doivent être adaptés pour rester corrects avec de tels maillages mobiles. Une approche classique est l'approche Arbitrary Lagrangian Eulerian (ALE). J'ai conçu et implémenté un solveur ALE en trois-dimension dans le cadre du solveur du projet Gamma3 [ART1,PHD].

A l'Imperial College, j'ai étudié et comparé, avec des collègues, diverses méthodes de *r-adaptation*, le bouger du maillage est motivé par la minimisation d'une certaine fonctionnelle d'erreur. J'ai notamment implémenté et comparé divers *Moving Mesh PDEs* [RR1].

Développement logiciel. Indispensable au calcul scientifique, le développement logiciel a une place importante dans mon travail, toujours en association avec le développement de méthodes numériques innovantes. A l'Inria comme à Londres, j'ai contribué à plusieurs codes de calculs de grande taille. Durant ma thèse, j'ai contribué au développement d'un solveur des équations d'Euler compressibles par Volumes Finis, entre autres par l'ajout d'une méthode de bouger de maillage par interpolation explicite [PROC5], ainsi que l'ajout d'une formulation ALE 3D[ART1,PHD].

A Londres, mes recherches sont centrées sur la dissémination de l'adaptation de maillage et la mise à disposition pour les utilisateurs non experts de solutions "clef en main". Je suis devenu le développeur principal du code de remaillage Pragmatic, menant à bien à la fois des changements stratégiques majeurs, et l'amélioration de détails pour en faciliter l'utilisation. J'ai intégré ce remailleur à la librairie de calcul scientifique PETSc, et dans le solveur "automatique" Firedrake [PRE1]. Cette intégration a facilité l'utilisation de l'adaptation anisotrope pour de multiples applications, de la modélisation de turbines marémotrices à des problèmes de subduction tectonique en passant par la simulation de fluides cérébraux (Fig. 3).

La multiplicité d'architectures de calcul force le chercheur à placer correctement ses méthodes dans cet écosystème. A l'Inria, j'ai porté une partie de notre solveur CFD 3D sur GPU, démontrant un gain réel sans même exploiter toutes les subtilités de ces architectures [PHD]. J'ai aussi étudié la performance parallèle de l'algorithme d'adaptation ci-dessus, avec une stratégie mixte de multi-thread et de pipelining [CONF9]. Dans un groupe fortement impliqué dans le calcul parallèle intensif à l'Imperial College, j'ai initié un projet de refonte de la parallélisation du remailleur Pragmatic, afin de l'utiliser sur des architectures massivement parallèles. J'ai adopté une parallélisation purement en mémoire distribuée, avec des techniques de repartitionnement idoines. Ce travail, interrompu par une mission d'enseignement, est en cours de finalisation.

Validation. La validation des méthodes que j'étudie me tient à cœur. C'est pour cela que j'ai participé à la création et au développement de l'*Unstructured Grid Adaptation Working Group* (UGAWG), regroupant des collègues de l'Inria, de la NASA, de Boeing, du MIT et ayant vocation à s'étendre encore. Initialement consacré à la comparaison de codes de remaillages [PROC3], son activité s'est étendue à la validation d'autres composants de l'adaptation, dont les modèles d'erreur [PROC2,PROC1].

Application à la modélisation de l'océan. Les applications concrètes ont une importance particulière dans mes recherches. Le contexte de ma thèse était aux applications aéronautiques. Afin de développer des méthodes utiles à cette industrie, je me suis appuyé sur une équipe Inria qui collaborait avec des chercheurs de la NASA et Boeing que j'ai pu rencontrer, et sur mes participations aux conférences de l'AIAA.

A l'Imperial College je me suis fortement investi dans la modélisation de l'océan en tant que telle. L'énergie renouvelable maréemotrice présente des enjeux économiques et environnementaux immenses. Les structures maréemotrices entraînent l'érosion des sols impactant l'usure et stabilité des structures et ayant un impact sur la qualité de l'eau, la faune et la flore. La simulation de larges zones géographiques est nécessaire pour simuler correctement les champs de marée complexes accroissant le rendement d'un seul barrage. Nous avons montré qu'un gain substantiel en résolution à temps de calcul constant était obtenu dans des simulations du Bristol Channel, intrinsèquement multi-échelles (Fig. 3). Présentés en conférence [CONF2], ces travaux sont en cours de finalisation pour être publiés.

Dans le cadre du travail de thèse de J. Wallwork, nous nous intéressons à la propagation de tsunamis. Si on étudie l'impact du tsunami sur une zone localisée, l'adaptation de maillage "goal-oriented" permet de ne raffiner le maillage que sur la portion de vague qui impacte la zone d'intérêt, grâce à la prise en compte de l'adjoint de la solution, permettant un gain d'efficacité du calcul. Présentés à plusieurs conférences, ces travaux sont également en cours de validation et publication.

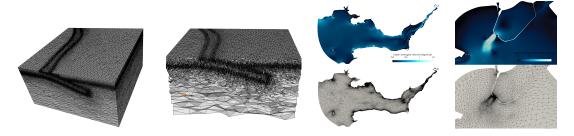


FIGURE 3 – Applications de l'adaptation de maillage. A gauche, cas de subduction, l'adaptation, réalisée dans PETSc, est basée sur la distance aux interfaces. A droite, simulation du Bristol Channel pour l'étude d'un barrage maréemoteur au large de Swansea, réalisée avec Thetis.

Financements

Des divers financements qui ont soutenu ma thèse et mon post-doctorat, il faut en isoler deux, pour lesquels j'ai rédigé les propositions et remporté l'appel à projet.

Le premier est un financement de la Fondation Science Mathématique, dans le cadre de l'ancien *Programme doctorat international*. Le projet était un séjour doctoral de quatre mois à Mississippi State University pour l'*Amélioration de l'efficacité d'algorithmes de bouger de maillage*. Il a donné lieu à un article de conférence avec comité de lecture.

Le second est un financement de mon post-doctorat pour neuf mois dans le cadre des appels à projet eCSE, par le service hébergeant le plus gros supercalculateur britannique ARCHER. Le projet, intitulé Parallel anisotropic mesh adaptation in PETSc/DMPlex, portait sur l'amélioriation du parallélisme du remailleur Pragmatic intégré à PETSc pour le supercalculateur ARCHER (5 000 noeuds de calcul). Interrompu par la mission d'enseignement évoquée plus haut, le projet est en cours de finition et de publication.

Responsabilités administratives

Depuis 2018, je suis reviewer pour les journaux Journal of Computational Physics et AIAA Journal, ainsi que pour la conférence NUMGRID 2018.

5 Résumé des activités d'enseignement et perspectives

Dès mon parcours en école d'ingénieur, où j'animais divers ateliers et formations dans le cadre des associations étudiantes, j'ai attaché une importance particulière à la diffusion du savoir et à l'enseignement. Au total je cumule environ 130 HETD d'enseignement présentiel, donc 110 à l'Imperial College, ce qui est beaucoup pour un Research Associate dans mon département, ainsi qu'un temps incalculable de création de contenu et de correction de copies d'examen.

Enseignement présentiel. Durant ma thèse, j'ai animé des TDs et TPs pour le cours "Analyse théorique et pratique des EDPs" de P. Lafitte en première année à l'École Centrale Paris. Le cours abordait un large spectre de notions, de la théorie des distributions à l'implémentation d'un petit solveur aux différences finies avec SciLab.

A l'Imperial College, j'ai tout de suite pu assister G. Gorman dans son enseignement dans le Département de Géosciences. J'ai commencé en première année, contribuant aux cours d'introduction à la programmation et introduction aux méthodes numériques. Le premier est dédié à l'apprentissage des bases de Python, alors que le deuxième aborde des sujets variés, de l'interpolation polynomiale aux différences finies et à la résolution de systèmes linéaires par des méthodes directes et itératives. Je me suis progressivement investi dans ces cours, d'abord en tant qu'assistant, puis en tant que chargé du cours pour une partie des séances (selon les disponibilités de mes collègues). Enfin cette année j'ai été intégralement responsable du cours de Python.

Au printemps 2018, suite à la création d'un nouveau cours de Master, j'ai endossé un nouveau rôle d'enseignement. Il s'est agi à la fois de préparer une plateforme d'enseignement innovante (voir ci-dessous) et de contribuer à plusieurs modules. Pour le cours de programmation avancée, j'ai conçu plusieurs cours de trois heures, et contribué à d'autres séances. J'ai également collaboré à un cours organisé sous forme de trois mini-projets d'une semaine, en contribuant à l'écriture collective des sujets et à leur évaluation.

Mise en place de méthodes pédagogiques innovantes. Pour les cours d'informatique du département, une approche pédagogique innovante a été mise en place, fondée sur le blended learning. Considérant que les savoirs ne sont vraiment acquis que si les étudiants implémentent eux-mêmes et expérimentent les méthodes enseignées, le cours est centré sur la pratique grâce à l'utilisation de Jupyter Notebook. Ceux-ci fournissent un environnement où du texte du cours est mélangé à des cellules où les étudiants peuvent écrire et exécuter leur propre code Python. L'enseignant anime la séance, intervient pour expliquer certains points, et laisse aux étudiants le soin de réaliser les tâches demandées à leur rythme aidés par une équipe d'assistants.

A partir de mai 2018, j'ai eu en charge l'amélioration de cette approche pédagogique, pour proposer plus d'exercices d'entraînement sans devoir donner de corrigés. Pour cela, nous avons réfléchi à la mise en place d'un outil de notation automatique, qui donne un retour immédiat aux étudiants sur leur travail. Notre choix s'est porté sur le logiciel Okpy, et j'ai supervisé et contribué au développement et à l'intégration de cet outil dans nos cours, aux niveaux Undergraduate et Master. J'ai également réécrit l'intégralité des exercices existants pour les adapter à cette technologie, et élargi la base d'exercices.

Mon intérêt pour les méthodes d'enseignement innovantes est marqué par l'obtention de la certification de la Software Carpentry Foundation, une initiative mondiale pour la rédaction et la dissémination de cours d'introduction à l'informatique dans le monde académique.

Responsabilités administratives. Depuis mi-2018, mon activité d'enseignement a pris une forte coloration administrative. J'ai d'une part pris la responsabilité du cours d'introduction à la programmation de première année, assurant son organisation : gestion de l'emploi du temps, accompagnement des étudiants, organisation et correction de l'examen, etc.. Dans le cadre du nouveau Master, j'ai contribué à l'élaboration du programme pédagogique notamment sur les aspects informatiques, ainsi qu'à l'organisation pratique de

la rentrée. J'ai contribué au choix et à l'harmonisation des logiciels utilisés dans les différents cours, centré sur l'utilisation de Python, Jupyter Notebook et GitHub, et organisé des sessions de formation pour les responsables de cours et assistants d'enseignements. Tout au long de l'année, j'ai contribué au suivi de l'organisation du Master, et à la préparation de l'an prochain.

Perspectives. Les méthodes d'enseignement de blended learning rencontrent un vif succès auprès des étudiants, dans les domaines de l'apprentissage de la programmation et des méthodes numériques, et nous ont permis d'améliorer les résultats dans les cours de licence. Sous des formes adaptées à des contextes différents, je souhaiterais continuer à explorer et développer ce type d'enseignement, à la fois au niveau de débutants de licence que dans des cours plus avancés.

Plus généralement, avec des méthodes innovantes ou classiques, je peux enseigner, outre des cours de mathématiques de base en Licence, des cours de méthodes numériques appliquées (Éléments ou Volumes Finis, méthodes de maillages avancées) en Licence ou Master, ainsi que des cours d'informatique et programmation avancée. Je pourrais donc contribuer aux parcours MPA ou IM du Master Mathématiques et Applications. En cas de besoin, je suis également capable d'enseigner en Anglais.

6 Programme de recherche

J'envisage mes futures recherches dans la continuité de ce que j'ai commencé à faire, en travaillant sur trois axes s'appuyant les uns sur les autres : l'étude des algorithmes d'adaptation de maillage et des estimateurs d'erreur, la dissémination de l'adaptation de maillage pour des applications variées, et la modélisation de l'océan. Outre le renfort de la compétence "maillages non structurés" du laboratoire, toujours utile alors que ces maillages sont sous-jacents à de nombreux calculs, ces thèmes s'intègrent assez naturellement dans les thèmes de recherche de différentes équipes du laboratoire JA Dieudonné, et d'équipes Inria associées.

Plusieurs défis intéressants s'offrent dans le domaine de l'adaptation de maillage anisotrope. L'étude des algorithmes d'adaptation est indissociable de l'étude des estimateurs d'erreur, car ce sont eux qui motivent et dirigent l'adaptation. Ces estimateurs se fondent sur un analyse poussée des schémas numériques. En particulier, l'émergence de discrétisations d'ordre élevé (par Volumes Finis ou Éléments Finis de type Galerkin Discontinus par example), les estimateurs d'erreurs utilisés doivent être repensés. Cette analyse pourrait s'appuyer sur l'expertise de l'équipe NACHOS par exemple, dans le cadre de la propagation d'ondes en régime harmonique, où l'utilisation d'éléments anisotropes permet de capturer des singularités près des surfaces. Les stratégies adaptatives de type "hp" pourraient également être considérées avec F. Rapetti-Gabellini. D'autres pistes de recherches prometteuses concernent les estimateurs d'erreur basés sur l'adjoint pour les simulations instationnaires, ainsi que le couplage des méthodes d'adaptation anisotrope et de radaptation, et l'adaptation anisotrope pour des algorithmes multigrilles. Finalement, l'adaptation anisotrope doit toujours faire ses preuves sur des grandes architectures de calcul, et j'entends poursuivre cet effort. Une collaboration avec les auteurs de calculs massivement parallèles, comme V. Dolean, seront considérées.

Perpendiculairement, ces recherches s'effectueront dans le cadre d'applications variées. Rien de mieux pour confirmer la robustesse des méthodes adaptatives que des les appliquer dans des domaines différents, et de comprendre comment des contraintes différentes influent à la fois sur l'approche et les détails de mise en place. Parmi ces applications, on peut retenir celles déjà engagées à Londres, la dynamique océanique et la subduction tectonique, mais on peut aussi considérer d'autres problèmes intensifs en calcul, comme la modélisation de flots turbulents, des écoulements biologiques, des plasmas... Ainsi, dans le domaine des biomaths, des collaborations avec B. Mauroy sont envisageables, portant sur la simulation de la ventilation du poumon, de l'interaction air/mucus dans les bronches pulmonaires, ou encore du développement du poumon pendant l'embryogenèse. Les activités de l'équipe CASTOR et d'Hervé Guillard notamment sont sources de collaborations à plusieurs niveaux : l'adaptation des maillages serait souhaitable pour l'étude des écoulements de plasmas dans les tokamaks, qui sont des calculs complexes et coûteux, mais celle-ci nécessite des méthodes numériques innovantes, qui influeront sur le modèle d'erreur retenu. Pour certaines applications, l'utilisation de solveurs automatiques, tels que Firedrake ou FreeFm++, facilite l'utilisation de méthodes d'ordre élevé et est indéniablement un plus pour faciliter cette transmission.

Les enjeux liés à la modélisation de l'océan sont énormes, tant d'un point de vue environnemental qu'économique. L'Université de Nice, par sa géographie et sa proximité avec d'autres instituts de recherche dédiés, est idéalement placée pour être un leader dans ce domaine. Outre l'étude des énergies marines, on peut s'intéresser aux transports de polluants (plastiques, rejets en mer, etc.), ainsi qu'à l'impact de la montée des eaux. Dans ce domaine, les challenges sont doubles, d'une part la mise en place de problèmes réalistes, en collaboration avec des experts des phénomènes impliqués, ainsi que la mise au point de méthodes numériques adaptées (maillages, solveurs numériques, architectures de calcul...). Pour le développement de méthodes numériques innovantes, des collaborations avec D. Clamond seraient naturelles pour étudier les écoulements côtiers, ainsi des collaborations avec l'équipe COFFEE pour la dispersion de polluants.

Collaborations extérieures. Dans le domaine de l'adaptation de maillage et des estimateurs d'erreur, je poursuivrai mes échanges avec l'équipe Inria Gamma3, notamment F. Alauzet et Adrien Loseille. D'un point

de vue logiciel, des collaborations avec Gamma3 permettraient de bénéficier de leur expertise remarquable dans les logiciels de maillage, alors que ma collaboration avec M. Knepley facilite le travail avec et dans PETSc pour des applications HPC. Toujours avec M. Knepley, des applications géophysiques initiées seront poursuivies, en collaboration également avec G. Gorman de l'Imperial College. Enfin pour la modélisation de l'océan, je compte m'appuyer sur M. Piggott et son groupe ainsi que A. Angeloudis d'une part pour leur connaissance des applications et leur code de simulation côtière, ainsi que sur la science des schémas de M. Ricchiutto de l'Inria Bordeaux.

7 Rapports de pré-soutenance de thèse



Université catholique de Louvain

EPL: Ecole Polytechnique de Louvain

4-6, Av. G. Lemaître, 1348 Louvain-la-Neuve, Belgium,

Tel: 32-10-47 23 50 Fax: 32-10-47 21 80 E-mail: jean-francois.remacle@uclouvain.be

Jean-François Remacle Professeur Ordinaire, Université catholique de Louvain

Louvain-la-Neuve, le 1er novembre 2015

objet : Rapport de Thèse de Nicolas Barral

Madame, Monsieur,

Ceci constitue mon rapport sur la thèse de Mr. Nicolas Barral de l'Université Paris VI.

Le manuscrit de Thèse de Nicolas Barral se présente sous la forme d'un texte continu de 235 pages rédigé en anglais. Il est divisé en deux grands Chapitres qui délimitent le texte de façon adéquate. De façon générale, j'ai grandement apprécié le travail du candidat, tant au niveau de la forme qu'au niveau du fond. Les contributions du candidat sont clairement établies tout au long du travail. Chaque Chapitre commence par un état de l'art suivi de l'ensemble des contributions du candidat. Le texte est d'une très bonne qualité : l'exposé est clair tout en étant détaillé, il est techniquement rigoureux tout en étant didactique et agréable à lire.

La première partie du manuscrit s'intéresse à l'interaction fluide-structure (FSI). Pour être plus précis, le candidat s'intéresse uniquement à la partie fluide de l'interaction, les déplacements de la structure étant toujours imposés.

Dans un premier temps, une méthode de déformation de maillages est présentée qui diffère de l'approche habituelle élastique par le fait que les déplacements des noeuds internes du fluide sont calculés explicitement en fonction de la distance aux noeuds frontières où le déplacement est fixé. L'auteur montre que les maillages obtenus au travers de cette nouvelle approche sont comparables à ceux obtenus en utilisant l'analogie élastique. L'avantage de l'approche nouvelle proposée par l'auteur est qu'elle permet de contrôler le déplacement des noeuds proche de la frontière de façon plus grande que dans le cas élastique. Par contre, aucune comparaison des temps de calcul n'est effectuée.

Dans un second temps, Nicolas Barral couple sa méthode de déformation de maillages à un solveur fluide en utilisant une approche Arbitraire Lagrangienne Eulerienne (ALE). Cette partie du travail a été publiée dans l'AIAA. Il est admis aujourd'hui par la plupart des spécialistes du FSI qu'un schéma numérique robuste doit vérifier une condition de conservation géométrique (GCL). Les vitesses aux noeuds et les normales aux interfaces doivent être calculées de façon adéquates. L'originalité de l'approche proposée par l'équipe Gamma consiste à tenir compte des modifications topologiques du maillage (essentiellement des retournements d'arêtes). La première partie du manuscrit s'achève sur une série d'exemples/applications. Ces exemples sont réellement impressionnants : ils montrent la très grande maîtrise du candidat dans le domaine du calcul hautes performances. Ils montrent en outre le caractère abouti des recherches menées.

Dans la deuxième partie de sa Thèse, Nicolas Barral étends les résultats obtenus dans la première partie au cas anisotrope.

La section 4 du document détaille de façon rigoureuse les notions fondamentales de l'adaptation de maillages anisotrope. Une interpolation conservative est utilisée pour transférer la solution de maillages en maillages. Les notions d'interpolation et d'intersection de métriques sont présentées en détails. Le calcul de l'erreur d'interpolation et son contrôle adaptatif sont présentés.

La section 5 du travail concerne l'adaptation des maillages en instationnaire, sans considérer à ce stade les déformations de maillages. L'algorithms de points fixe développé par l'équipe Gamma est utilisé pour garantir la précision des calculs. Un grand nombre d'exemples en 2D et en 3D sont présentés en fin de chapitre. Un des exemples (London tower bridge) a permis à Nicolas Barral d'obtenir un prix à l'International Meshing Roundtable. Il n'est pas facile de déterminer ici quelles sont les contributions du candidat par rapport au travail de l'équipe Gamma. L'auteur explique de façon détaillée la parallélisation (mémoire partagée) du solveur adaptatif : je suppose que ce travail constitue une de ses apports au travail de l'équipe. Je pense qu'il aurait été utile de préciser quelles sont les contributions du candidat dans les différents codes utilisés (Wolf, Metrix, Feflo et Interpol). Néanmoins, cette remarque mineure n'enlève rien à la qualité évidente du travail.

La section 6 du travail est l'aboutissement du travail de Nicolas Barral. Il consiste essentiellement au couplage de l'algorithme ALE décrit dans la première partie dans l'algorithme de point fixe décrit dans la section 5. Des exemples de simulations instationnaires adaptatives extrêmement convaincantes sont présentés. Ce chapitre a été publié dans l'AIAA.

L'appendice B du manuscrit présente l'accélération du solveur fluide en utilisant la puissance des processeurs graphiques (GPUs). J'aurais aimé avoir plus de détails et l'avis du candidat sur un certain nombre de points. Cet ajout au texte montre encore une fois la compétence du candidate dans le domaine du calcul intensif.

A la lecture de ce manuscrit, il apparaît clairement que Nicolas Barral montre une très grande maîtrise dans le domaines du calcul scientifique hautes performances. Son travail clairement demandé une phase d'implémentation conséquente et complexe. Pour être impliqué dans le développement de ce genre de méthodes, je peux, je le crois, donner un avis en connaissance de cause sur la qualité du travail du candidat. Je suis franchement impressionné et séduit par ce travail. J'estime que le travail de Nicolas Barral est un travail de thèse excellent et qu'il peut être soutenu en l'état, et cela sans aucune réserve.

Veuillez agréer, Madame, Monsieur, l'expression de mes salutations distinguées.

Jean-François Remacle



LHEEA

Laboratoire de recherche en Hydrodynamique, Energétique et Environnement Atmosphérique UMR 6598 du CNRS ECOLE CENTRALE DE NANTES



Rapport sur le mémoire de thèse de Monsieur Nicolas Barral

Le mémoire de thèse de Monsieur Nicolas Barral, intitulé,

Time-accurate anisotropic mesh adaptation for three-dimensional moving mesh problems

s'inscrit dans la continuité de travaux menés par l'INRIA et l'équipe de Frédéric Alauzet sur l'adaptation de maillages basée sur les métriques riemaniennes. Dans un environnement international parfois dominé par une « course à l'armement numérique » où chacun se doit d'afficher des simulations sur plusieurs milliards de points sans se soucier de l'utilité réelle de ces points de maillage, il n'est pas inutile de rappeler l'importance de la gestion optimale des ressources de calcul dans la simulation numérique, dès lors que l'on sort du cadre des problèmes modèles pour aborder celui des codes de simulation à visée industrielle. Les travaux menés par cette équipe depuis plus de dix ans et les derniers développements réalisés dans cette thèse prouvent, s'il en était besoin, qu'il est toujours préférable de faire preuve d'intelligence en adaptant le maillage à une estimation de l'erreur numérique. Nous verrons dans cette thèse, que cette approche permet non seulement de réduire notablement le coût de calcul des écoulements en raison d'un positionnement optimal des points de maillage mais aussi de traiter des problèmes d'une complexité telle qu'ils seraient hors d'atteinte sans l'adaptation de maillages.

Le mémoire de thèse d'une lecture très agréable est structuré en deux parties principales comportant chacune trois chapitres. Chaque partie est dotée d'une introduction et d'une conclusion, ce qui rend la lecture et l'analyse du document très agréables pour le rapporteur.

La première partie traite des aspects liés aux algorithmes de déplacement/déformation de maillages. Il s'agit ici de mettre en œuvre les outils qui seront utilisés plus tard pour adapter les maillages aux objectifs portés par les senseurs utilisés.

Le premier chapitre fournit une revue assez complète des algorithmes récents utilisés pour déplacer les nœuds d'un maillage. Par déplacer, on entend ici la succession d'une phase de déplacement/déformation d'un volume de contrôle suivie d'une phase de régularisation/optimisation. Il ne s'agit donc pas de remaillage dans la mesure où les calculs ne sont pas arrêtés pour permettre la reconstruction d'un maillage *ex-nihilo* mais plutôt d'une adaptation locale du maillage au cours de la progression du calcul. Je n'ai cependant pas compris si le

raffinement/déraffinement local de maillages était implicitement concerné par cette approche et utilisé dans certaines des applications montrées dans cette thèse. On notera aussi que le cadre choisi par Nicolas Barral se limite aux maillages composés de triangles en 2D et tétraèdres en 3D, ce qui permet d'avoir recours au « swapping » des arêtes. Les algorithmes de déformation de maillage (analogie structurelle ou méthode IDW) sont détaillés et comparés sur un certain nombre d'exemples de grande complexité mais Nicolas Barral semble avoir une préférence pour la méthode IDW effectivement très en vogue en ce moment.

Le chapitre 2 s'attache à décrire l'approche ALE des équations d'Euler. Cette approche est classique mais l'on notera ici le choix d'une discrétisation explicite en temps qui me semble handicapante en termes de taille de pas de temps et, par conséquent, de coût calcul, dans un contexte où tout est fait pour gérer de manière optimale les ressources de calcul. Le chapitre expose un développement intéressant sur le respect de la condition de compatibilité géométrique dès lors que l'on utilise des discrétisations de Runge-Kutta sur un maillage composé de triangles ou de tétraèdres.

Fort logiquement, le troisième et dernier chapitre de cette première partie se consacre à l'analyse de plusieurs exemples de simulations numériques illustrant l'efficacité et le bien fondé des choix exposés aux chapitres précédents. Cette étude est menée de manière rigoureuse et l'on voit, en particulier, que ni les « swaps », ni la formulation ALE ne dégradent notablement la précision nominale du deuxième ordre des schémas de discrétisation. Parmi les illustrations proposées, le cas du croisement des F117 est particulièrement spectaculaire. J'avoue avoir du mal à croire qu'une telle amplitude de mouvement relatif des maillages est obtenue uniquement avec une combinaison de déformations locales et de swap d'un maillage unique, sans avoir recours à du raffinement/déraffinement local du maillage initial. Une animation vidéo serait bienvenue pour convaincre les sceptiques.

La deuxième partie de la thèse représente certainement la partie la plus originale de cette recherche. Nicolas Barral se propose ici d'étendre l'adaptation de maillage basée sur le concept de métrique riemannienne anisotropique à des simulations instationnaires sur des maillages fixes ou mobiles et traités à l'aide de la formulation ALE.

Après une brève introduction rappelant les travaux les plus récents sur cette thématique, le quatrième chapitre expose les concepts théoriques de l'adaptation de maillage contrôlée par une métrique riemannienne. Ces concepts généraux sont uniquement utilisés dans le cadre de maillages à base de tétraèdres, ce qui est présenté par Nicolas Barral comme le cadre le plus adapté aux écoulements industriels en raison de la complexité géométrique sous-jacente. On peut regretter cette vision un peu auto-centrée dans la mesure où des maillages non-structurés à base d'éléments hexaèdriques sont beaucoup plus utilisés que les maillages à base de tétraèdres dans les calculs d'écoulements incompressibles sur des configurations industrielles. La raison principale est la nécessité d'évaluer précisément des opérateurs de diffusion (diffusion laminaire et turbulente, équation de Poisson pour la pression, etc...) dans des zones de l'écoulement qui ne sont pas confinées au voisinage immédiat de la paroi (couche limite épaisse, décollement tridimensionnel sur bord d'attaque arrondi, etc...). C'est la raison pour laquelle je ne connais pratiquement pas d'exemple d'utilisation exclusive d'éléments tétraèdriques pour résoudre les équations de Navier-Stokes en formulation Volumes-Finis. De ce point de vue, les équations de Navier-Stokes ne constituent pas une perturbation proche paroi des équations d'Euler mais peuvent conduire à des remises en question majeures. Cela dit, dans ce chapitre comme dans l'ensemble de la thèse, les concepts mathématiques sur lesquels est construite l'adaptation de maillage à base de métrique riemannienne sont énoncés de manière complète, claire et particulièrement didactique. L'adaptation visant à minimiser l'erreur d'interpolation conduit naturellement à la notion d'Hessien dont l'évaluation précise en volumes finis n'est pas chose aisée. J'aurais apprécié ici une comparaison entre l'approche aux moindres carrés et celle

retenue dans ce travail. En fin de chapitre, la notion particulièrement élégante de maillage continu introduite par Adrien Loseille est expliquée de manière très claire. A cet égard, le tableau de correspondance 4.1 entre les représentations continue et discrète s'avère particulièrement utile et illustre bien la volonté de Nicolas Barral de rendre accessible des concepts mathématiques qui peuvent paraître abstraits au premier abord.

Le chapitre 5 décrit l'extension de la notion d'adaptation de maillage stationnaire aux écoulements instationnaires sur maillage fixe. Afin d'éviter une adaptation du maillage à chaque pas de temps, Nicolas Barral propose de subdiviser le domaine temporel en sous-intervalles sur lesquels un maillage adapté sera construit sur la base d'une métrique « moyenne » unique. Il reste alors à définir ce concept de métrique riemannienne moyenne qui contrôlera l'adaptation temporelle de maillage. A la lecture de ce chapitre, on se demande si cette approche très sophistiquée est vraiment nécessaire. Notre expérience d'adaptation de maillage en instationnaire pour les équations de Navier-Stokes nous indique qu'une adaptation coûte environ un ½ pas de temps, ce qui est très acceptable, compte tenu des économies de temps calcul réalisé avec un maillage qui suit l'évolution instationnaire de la solution. Il est vrai que dans ce cas, le transfert de la solution sur un nouveau maillage à chaque pas de temps peut introduire une pollution numérique par interpolation mais il y a peu de variation dans la solution entre chaque pas de temps. Il serait cependant souhaitable de justifier plus précisément ce choix de découpage en sous-intervalles temporels dans la mesure où la taille adéquate de l'intervalle temporel est une donnée peu générale et difficile à prédire. Cependant, une fois ce choix accepté, les principes de l'adaptation instationnaire par sous-intervalles temporels sont exposés très clairement. De nombreuses illustrations numériques permettent de comparer les différents choix de métriques basées sur des Hessiens moyennés par intervalles. Tous ces exemples conduisent à privilégier un Hessien moyen basé sur une norme L1, ce qui semble assez intuitif.

Le sixième et dernier chapitre décrit l'ultime extension de cette procédure aux calculs instationnaires sur maillage mobile traités avec l'approche ALE décrite dans le deuxième chapitre. Des illustrations nombreuses et bien choisies confortent le lecteur dans la justesse des choix réalisés. On soulignera le caractère particulièrement spectaculaire de certaines simulations qui ne pourraient pas être réalisées sans adaptation. On peut aussi regretter l'absence de validations des calculs par rapport à des bases de données expérimentales. S'il est certes difficile d'imaginer qu'il existe des bases de données instationnaires suffisamment précises pour justifier le choix de l'adaptation de maillages dans des configurations aussi complexes que celles abordées dans cette thèse, N. Barral aurait peut-être pu fournir plus souvent une convergence en maillage régulier et la comparer avec un résultat obtenu sur un maillage adapté afin de quantifier l'intérêt et les enjeux de l'adaptation de maillage.

Le rapport s'achève avec des conclusions qui résument parfaitement les apports personnels de l'auteur et l'exposé de perspectives illustrant la maîtrise intellectuelle de l'auteur.

Rappelons enfin que ce travail a donné lieu à un article accepté dans une revue archivale (Engineering with computers), deux articles soumis à deux autres journaux ainsi que trois communications dans des congrès avec actes et comité de lecture.

Ce travail de thèse se situe dans la lignée des travaux sur l'adaptation de maillages menés au sein de l'INRIA par Frédéric Alauzet et ses collègues. Ces travaux ont acquis une reconnaissance internationale telle que l'équipe se trouve de fait en position de leadership mondial dans ce domaine. Cette position de leadership est indéniablement confortée par le travail de très grande qualité de Nicolas Barral relatif à l'extension instationnaire de l'adaptation de maillage. Ce travail de recherche particulièrement bien rédigé, exposant des travaux de développement de modèles théoriques, de codage de ces modèles, d'optimisation des codes et d'illustration sur des exemples pertinents et pour la plupart très spectaculaires, représente

exactement ce que l'on espère d'un doctorat en modélisation numérique sans avoir souvent l'occasion de découvrir des travaux de thèse aussi complets.

Pour toutes ces raisons, j'émets donc un avis tout à fait favorable à la soutenance orale de la thèse de doctorat de Monsieur Nicolas Barral.

Nantes, le 20 Octobre 2015

Michel Visonneau

Directeur de recherche CNRS

LHEEA – Ecole Centrale de Nantes

8 Lettres de recommandations

Des lettres de recommandation des personnes suivantes seront adressées au Comité de Sélection, et sont jointes au présent dossier dans une forme non nécessairement finale :

- Prof. Matthew Piggott, Imperial College London, https://www.imperial.ac.uk/people/m.d.piggott, m.d.piggott@imperial.ac.uk, co-responsable du séjour postdoctoral (recherche et enseignement),
- Prof. Matthew Knepley, SUNY Buffalo, https://cse.buffalo.edu/~knepley, knepley@buffalo.edu, lead développeur de PETSc, collaboration internationale (recherche),
- Dr. Gerard Gorman, Imperial College London, https://www.imperial.ac.uk/people/g.gorman, g.gorman@imperial.ac.uk, co-responsable du postdoctoral (recherche et enseignement),
- Dr. Frédéric Alauzet, Inria Saclay, http://pages.saclay.inria.fr/frederic.alauzet, frederic.alauzet@inria.fr, directeur de thèse (recherche).

Imperial College London

Department of Earth Science and Engineering Imperial College London South Kensington Campus, London, SW7 2AZ, UK

T: +44 (0)20 759 46396 E: m.d.piggott@imperial.ac.uk

W:www.imperial.ac.uk/earth-science/

research/computational/

28 February 2019

Professor Matthew D. Piggott MMath, PhD Professor of Computational Geoscience & Engineering Head, Computational Geosci. & Eng. Research Section

Letter of reference – Dr Nicolas Barral

To whom it may concern,

I am writing this letter in my capacity as Head of the Computational Geoscience and Engineering Research Section – one of three which make up the Department of Earth Science and Engineering at Imperial College London.

I have had the privilege to supervise Nicolas Barral's research activities in my group since he joined Imperial College London three years ago. Our research group works at the interface of scientific computing and numerical methods development, with applications of our software to a wide range of fluid dynamics, solid mechanics, and environmental/geophysical problems. These include renewable energy systems, natural hazards, coastal oceanography and associated engineering systems, seismic inversion, optimisation and data assimilation.

Nicolas has outstanding expertise in mesh adaptation methods, both in terms of its mathematical underpinning as well as its implementation in high-quality software. He has made invaluable contributions to both the group's knowledge and its software. In particular, he has led the development of mesh adaptation capabilities in our new ocean modelling software, Thetis. This has involved gaining extensive expertise in the underlying finite element code generation framework, Firedrake, as well as developing a mesh optimisation based adaptivity library and integrating it with Thetis. Nicolas is now at the stage where his code is working very robustly and I now expect a number of research publications to follow from this work.

In addition, Nicolas has been providing key supervisory input to a PhD student working on adjoint-based, a-posteriori, goal-based error measure techniques. This is a highly mathematical topic which also requires the implementation of sophisticated concepts in complex code. Nicolas's guidance to the student in all of these areas has been invaluable, and a journal publication on this topic is nearing completion.

Further to this, over the past three years Nicolas has made significant contributions to undergraduate and Masters level teaching. He has contributed to the development and delivery of two undergraduate courses. The first, Programming for Geoscientists, teaches our first year undergraduates Python coding assuming no prior computational knowledge. This is a very challenging task, and Nicolas has both contributed to the lecture material, as well as now delivering the course in its entirety himself. He has additionally contributed significantly to the lecture material and delivery of a follow-up second year course on Numerical Methods which exposes the students to some introductory concepts in Numerical Analysis including Numerical

Imperial College London

Linear Algebra and the Numerical Solutions of PDEs. Most recently he has played a key role in our new MSc in Applied Computational Science and Engineering. This has involved assisting in the design of the overall degree course, and the delivery of the first module on Modern Programming Methods.

In summary, based upon his commitment to teaching excellence and his research potential I am delighted to provide my strong recommendation for Nicolas to be considered for a "Maître de Conférence" position.

Yours faithfully

Matthew Piggott



March 3, 2019

Prof. Olivier Pantz Laboratoire J.A. Dieudonné Université de Nice Sophia Antipolis 28 Avenue Valrose 06100 Nice, France

Dear Prof. Olivier Pantz,

I am writing this letter in full support of Dr. Nicolas Barral for the position of Lecturer in the Laboratoire J.A. Dieudonné at the Université de Nice Sophia Antipolis. I have collaborated with Nicolas, and Prof. Gerard Gorman at Imperial College London, for several years on computational problems associated with adaptive meshing. I believe Nicolas is well prepared for a faculty career, having augmented his solid foundation in numerical analysis and computational mesh generation, with cutting edge computational mechanics and large scale parallel algorithms. He is a focused and creative researcher, quickly mastering new material to push his program forward. He would be an excellent addition to the department, both through his engaging teaching and world-leading research.

Dr. Barral comes from one of the most distinguished groups working in adaptive mesh refinement (AMR), and has done much to continue that reputation. He has obtained very impressive results in anisotropic mesh adaptation in time-dependent problems (Barral, Olivier, and Alauzet 2017). In this regime, simple adaptivity measures often fail. Nicolas developed probably optimal measures which can cope with scales changing in both space and time (Barral, Alauzet, and Loseille 2015). Moreover, he has applied these impressive theoretical results to quite difficult computations in fluid-structure interaction (Barral and Alauzet 2014), and most recently tidal energy modeling (Barral et al. 2018). Dr. Barral is also a leading figure in the AMR community, through his participation in meeting such as the International Meshing Roundtable, as well as benchmarking efforts (Ibanez et al. 2017; Park et al. 2018).

My work with Nicolas has focused on the introduction of AMR into the PETSc libraries (Balay et al. 2018; Balay et al. 2017), of which I am a principal architect. Nicolas and I, working together with Prof. Tobin Isaac of Georgia Institute of Technology and a lead author of the p4est library (Isaac et al. 2015) for structured AMR, developed a clear and concise API for both structured and unstructured AMR inside PETSc (Barral et al. 2016). This now gives the 10s of thousands of users of PETSc unprecendented power to simulate systems which require highly variable resolution across both the domain and time window. In this effort, Nicolas showed his maturity as a researcher, both in the ability to work across disciplinary lines and the ability to design for people across the spectrum of scientific computing. Nicolas and I were able to use this interface to create meshes adapted for crustal deformation simulations using the PyLith package (Aagaard et al. 2014), where the presence of many intersecting faults make it quite challenging. Finally, Nicolas has been the driving force behind recent developments in the Pragmatic libraries from ICL. Researchers like Nicolas who can unify the insights of application scientists, computer scientists, and mathematicians into efficient, scalable software packages benefitting the entire community, represent the bright future of the field. I fully intend to continue our collaboration when Nicolas transitions to his new position.



In addition to his research strength, I found Nicolas' teaching especially impressive. Just prior to his arrival at ICL, Prof. Gorman had proposed a new MS degree in computational science. Nicolas seized the opportunity to not only develop a wealth of material for this lecture series, but also shoulder an incredible teaching load while still carrying on his research program. He mastered the use of cloud platforms, such as Microsoft Azure, in the classroom, while maintaining quite high standards for both theoretical and computational assignments. I have no doubt that he will be a leader in course development in his future faculty position.

Dr. Barral would make an excellent faculty hire, as he is both technically talented and broad enough to make a significant contribution to new areas as they arise. He has successfully leveraged his deep knowledge of adaptive mesh refinement for projects in geophysics and high performance computing, and his ability to work collaboratively among disciplines is impressive. He writes clearly and incisively, admirably getting to the heart of the matter in publications. Nicolas is also a joy to work with, taking the arguments of colleagues seriously while at the same time bringing his own knowledge to bear in attacking problems from a different direction. He would be a tremendous asset to any department, and is a rising star positioned to make a lasting contribution.

Sincerely,

Matthew G. Knepley Associate Professor

Mathen I Kneply

References

Barral, Nicolas, Géraldine Olivier, and Frédéric Alauzet (2017). "Time-accurate anisotropic mesh adaptation for three-dimensional time-dependent problems with body-fitted moving geometries". In: *Journal of Computational Physics* 331, pp. 157–187.

Barral, Nicolas, Frédéric Alauzet, and Adrien Loseille (2015). "Metric-based anisotropic mesh adaptation for three-dimensional time-dependent problems involving moving geometries". In: *53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting*, p. 2039.

Barral, Nicolas and Frédéric Alauzet (2014). "Large displacement body-fitted FSI simulations using a mesh-connectivity-change moving mesh strategy". In: 44th AIAA Fluid Dynamics Conference, p. 2773.

Barral, Nicolas, Athanasios Angeloudis, Stephan C Kramer, Gerard J Gorman, and Matthew D Piggott (2018). "An anisotropic mesh adaptation approach for regional tidal energy hydrodynamics modelling". In: *EGU General Assembly Conference Abstracts*. Vol. 20, p. 19168.

Ibanez, Daniel, Nicolas Barral, Joshua Krakos, Adrien Loseille, Todd Michal, and Mike Park (2017). "First Benchmark of the Unstructured Grid Adaptation Working Group". In: *Procedia engineering* 203, pp. 154–166.



- Park, Michael A, Nicolas Barral, Daniel Ibanez, Dmitry S Kamenetskiy, Joshua A Krakos, Todd R Michal, and Adrien Loseille (2018). "Unstructured Grid Adaptation and Solver Technology for Turbulent Flows". In: 2018 AIAA Aerospace Sciences Meeting, p. 1103.
- Balay, Satish et al. (2018). *PETSc Users Manual: Revision 3.10*. Tech. rep. ANL-95/11 Rev 3.10. Argonne National Laboratory.
- (2017). PETSc Web page. http://www.mcs.anl.gov/petsc. URL: http://www.mcs.anl.gov/petsc.
- Isaac, Tobin, Carsten Burstedde, Lucas C Wilcox, and Omar Ghattas (2015). "Recursive Algorithms for Distributed Forests of Octrees". In: *SIAM Journal on Scientific Computing*. accepted. eprint: 1406.0089.
- Barral, Nicolas, Matthew G. Knepley, Michael Lange, Matthew D. Piggott, and Gerard J. Gorman (2016). "Anisotropic mesh adaptation in Firedrake with PETSc DMPlex". In: *25th International Meshing Roundtable*. Ed. by Steve Owen and Hang Si. Washington, DC, pp. 1–5. URL: http://imr.sandia.gov/papers/imr25/2026_imr25RN_Barral.pdf.
- Aagaard, Brad, Sue Kientz, Matthew G. Knepley, Surendra Somala, Leif Strand, and Charles Williams (2014). *PyLith User Manual Version 2.0.0*. URL:
 - $http://geodynamics.org/cig/software/github/pylith/v2.0.0/pylith-2.0.0_manual.pdf.\\$

Imperial College London

Earth Science and Engineering Imperial College London

Royal School of Mines South Kensington Campus London SW7 2AZ Tel: +44 (0)7872850375

g.gorman@imperial.ac.uk www.imperial.ac.uk/people/g.gorman

27th February 2019

Dr Gerard J. Gorman BSc MSc PhD DIC Reader Computational Science and Engineering

RE: Reference for Dr Nicolas Barral.

To Whom It May Concern:

It is my pleasure to recommend Dr. Nicolas Barral for the position of "Maître de Conference" in your department. Nicolas is one of our finest young researchers and teachers. I recommend him to you highly.

I am a Reader in Computational Science in the Department of Earth Science and Engineering at Imperial College London (ICL), Director of the MSc in Applied Computational Science and Engineering, Associate Director of the ICL Centre for Computational Methods in Science and Engineering (CMSE), and Visiting Professor at the University of São Paulo (USP). I have a BSc(Hons) in Physics and MSc in High Performance Computing from the National University of Ireland, Galway, and a PhD in Computational Physics from ICL. I have a diverse range of experience in interdisciplinary research ranging across data-intensive high performance computing and data science, computer science, geoscience, nuclear engineering, computational fluid dynamics, inverse problems and pedagogy with 80+ peer reviewed publications.

I have known Nicolas since he joined the department three years ago, first as a contributor to open source anisotropic meshing code Pragmatic and PETSc, and subsequently as his line manager. Nicolas held a research position for the first two years, then a teaching position for the last year with less research time. While Nicolas was originally hired as a post-doctoral research associate, he has also contributed substantially to teaching at both undergraduate and masters level.

Nicolas has demonstrated his academic excellence during these three years. Nicolas was hired as an expert in mesh adaptation methods, and met our expectations. His knowledge of both theoretical and practical aspects of this subject were greatly beneficial to our group. His contributions to the Pragmatic code are remarkable. For the last 3 years he has been the main developer of the Pragmatic code, in which he has undertaken major strategic changes as well as a lot of user support. He successfully integrated the code in PETSc, itself a large complex open source code, which resulted in an increase of the user community. His ability to conceive extremely complex algorithms on 3D unstructured meshes and implement them has been demonstrated multiple times. Nicolas has always focused his work towards concrete applications. His groundwork on Pragmatic and PETSc has paved the way for a lot of exciting applications, ranging from ocean modelling to earth dynamics and hydrocarbon exploration.

Since he joined, Nicolas has published two peer-reviewed journal articles, three peer-reviewd conference papers and a peer-reviewed research note. He has presented his work at many international conferences. His undertaking significant teaching responsibilities, including course design and development explains the reduction in his paper publications over the past year. Several articles are being written now, and given Nicolas's past record in publishing research, I have no doubt that they will be published in top-tier journals.

Throughout his time at Imperial College London, Nicolas has demonstrated an excellent understanding of the priorities of computational science, and ability to independently create and carry out successfully his own research programme. Nicolas has also demonstrated his ability to find his own funding when needed. With minimal supervision from me, he successfully wrote a 9-month grant application for the EPSRC ARCHER eCSE programme. He also contributed significantly to a subsequent proposal in pedagogy transformation for teaching computational science resulting in 2 years of funding.

On top of his abilities as a researcher and teacher, Nicolas has proved to be an excellent team player, collaborating with many staff and students in our department. He has also opened or consolidated many collaborations with researchers from outside the College which are very valuable for us, notably the PETSc team and the Unstructured Grid UGAWG initiative. He is a very appreciated colleague in the department.

I have also supervised Nicolas's numerous teaching activities. Nicolas's commitment in teaching has been far higher than most other post-doctoral researchers in the department. He has assisted me with two undergraduate modules: "Introduction to Programming" and "Numerical Methods 1". For both modules, taught in a "blended learning" approach, he has acted as teaching assistant, and has delivered half of the lectures. He has also significantly contributed to the improvement of the course material. At undergraduate level, he organized a two-day workshop to teach Shell and Git languages. In 2018, he took the leadership for the "Introduction to Programming" course for which he did all the lectures on top of administrative duties.

In October, we started a new MSc course in "Applied Computational Science and Engineering", aimed at providing solid numerical bases to students from different horizons, and Nicolas contributed significantly to the material development, e-infrastructure and delivery of the new course from the beginning. He helped organizing the start of the year and devising the software framework that would be taught and used in the course. He then contributed to the module "Modern programming methods" for which he has designed, written and delivered four original 3-hour lectures, on top of assisting with several others. He has also contributed to the "Applying Computational Science" module, by helping to design and assisting to assess 3 week-long group projects.

His teaching was marked by his commitment to deliver high quality lectures with innovative pedagogic approaches, which was manifested by his Software Carpentry certification. Since May 2018, he has held a part-time position focused on developing innovative teaching approaches for computing courses in the department. The project was centred on the use of Jupyter Notebooks and auto-assessment techniques for blended learning approaches. His work was successfully implemented in the "Introduction to Programming" and "Modern Programming Methods" modules. In this position, Nicolas has combined enthusiasm for the development of innovative methods together with care to deliver a well-polished work smoothly usable by the students.

In short, I give Nicolas my strongest recommendation for a "Maître de Conférence" (lecturer) position as both an excellent researcher and teacher. He has demonstrated an uncanny ability to unravel complex scientific computations from the theory to the actual implementation and I expect him to be one of the leading researchers in his field. He would be a good catch for any university and I urge you to consider his candidacy seriously.

Yours sincerely

Dr Gerard J Gorman

Director, MSc Applied Computational Science and Engineering



GAMMA3 Team 1, rue Honoré d'Estienne d'Orves 91126 Palaiseau France

Frédéric ALAUZET Directeur de Recherche

Palaiseau, le 2 mars 2019

Lettre de recommandation pour la candidature de Nicolas Barral au poste de Maître de Conférence dans le laboratoire J.A. Dieudonné à l'Université de Nice

J'ai été le directeur de thèse de Nicolas Barral à l'Inria sur le sujet «Adaptation de maillage anisotrope espace-temps pour les problèmes à géométrie mobile en trois dimensions », après qu'il ait réalisé deux stages de master dans notre équipe. J'ai pu ainsi travailler avec Nicolas pendant 5 années. Nicolas a soutenu sa thèse avec succès le 27 Novembre 2015 et a ensuite facilement obtenu un poste de post-doctorant à Imperial College à Londres. C'est pour moi un grand plaisir d'écrire une telle lettre de recommandation car, dans un tel cas, le travail accompli par le candidat parle de lui-même.

Pendant sa thèse, sur un sujet très difficile, Nicolas a réalisé un énorme travail de grande qualité sur les méthodes de maillage mobile, d'adaptation de maillage anisotrope et sur les schémas numériques arbitraire Lagrange-Euler (ALE); et cela en trois dimensions sur des géométries complexes.

Il a implémenté une méthode de déformation de maillage basée sur l'approche «Inverse Distance Weighted » et il l'a couplé à la stratégie de maillage mobile avec changement de connectivité existante dans l'équipe. Il a validé cette nouvelle méthode sur des problèmes de type industriel avec de grand déplacement des géométries. Il a aussi montré que cette méthode de maillage mobile était très appropriée pour déplacer des couches limites fortement anisotropes sur des géométries déformables.

Il a aussi développé le solveur volume fini ALE associé à cette méthode de maillage mobile. Comme les changements de connectivité sont autorisés (et nécessaires pour déplacer les géométries en conservant des maillages de qualité), cela a nécessité de manipuler avec soin la base de données dynamique du solveur volume fini, en particulier pour maintenir l'efficacité de la parallélisation multi-thread. Nicolas a réalisé avec succès plusieurs applications complexes, telles que deux avions de chasse F117 avec des trajectoires de vol qui se croisent.

La dernière partie de son travail de thèse consistait à étendre l'algorithme d'adaptation de maillage pour les problèmes instationnaires à des problèmes instationnaires avec des géométries mobiles. Pour cela, les estimateurs d'erreur considérés ont été modifiés pour prendre en compte la dynamique du maillage et la prescription de taille du maillage a été prise en compte dans les phases d'optimisation du maillage dans la méthode de maillage mobile. Cette méthode numérique adaptative ALE a également été appliquée avec succès à des simulations 3D de type industriel. Nicolas a été le premier à réaliser de tels calculs adaptatifs.

Ce travail considérable l'a non seulement obligé à étudier le problème de manière théorique, mais également à implémenter des algorithmes numériques complexes. Il lui a également fallu développer de nombreuses compétences en CFD, schémas numériques,

parallélisation multi-thread, estimations d'erreur, adaptation de maillage et également dans l'implémentation efficace d'algorithmes dans des logiciels de grande taille.

Ces travaux ont donné lieu à plusieurs publications et présentations dans des conférences internationales :

- un article de journal à Journal of Computational Physics sur l'application de l'adaptation de maillage anisotrope aux problèmes instationnaires avec des géométries mobiles,
- un article de journal à *Engineering with Computers* sur le solveur volume fini ALE couplé à la méthode de maillage mobile,
- un article de conférence avec comité de lecture à *l'AIAA Aerospace Sciences Meeting* sur le couplage entre l'adaptation de maillage et les simulations ALE,
- un article de conférence avec comité de lecture à l'International Meshing Roundtable comparant deux méthodes de déformation de maillage et leurs applications à la deformation/déplacement de couche limite,
- un article de conférence avec comité de lecture à l'AIAA Fluid Dynamics Conference sur le solveur volume fini ALE couplé à la méthode de maillage mobile avec changement de connectivité,
- deux présentations à la conférence internationale ECCOMAS.

Nicolas a aussi gagné le «meshing contest award »à *l'International Meshing Roundtable* en 2014 à Londres.

Durant son doctorat, Nicolas Barral a démontré qu'il est un travailleur persévérant et un très bon scientifique. Il a du à la fois développer les théories nécessaires à ses travaux mais aussi les mettre en œuvre dans des logiciels de Mécanique des Fluides bien établi. Il a démontré lors de nombreux congrès scientifiques qu'il est un très bon orateur présentant de manière claire et didactique son travail à l'aide de présentations préparées méticuleusement. Il est une personne avec qui il est très agréable de travailler et qui contribue à faire avancer un groupe.

J'ai donc grand plaisir à recommander très fortement Nicolas Barral pour ce poste de Maître de Conférence dans le laboratoire J.A. Dieudonné à l'Université de Nice.

Frédéric ALAUZET Directeur de Recherche Inria

