

SIMULATION DE L'ÉJECTION DE MATIÈRE SOUS CHOC PAR APPROCHES CONTINUE ET ATOMISTIQUE

L'éjection de matière produite par l'interaction d'une onde de choc avec les défauts de surface d'un métal est un phénomène difficile à simuler pour les codes hydrodynamiques (approche continue), car les effets mis en jeu (tension de surface, viscosité, mécanisme de fragmentation, etc.) sont rarement tous pris en compte dans la modélisation. Le défi a été relevé par le CEA – DAM, qui a réalisé très récemment un développement majeur du code hydrodynamique Hera. Cet outil a été testé et validé en comparant, à la même échelle, des simulations d'éjection issues de Hera à des simulations par dynamique moléculaire effectuées avec le code ExaStamp (approche atomistique). Ces dernières, qui décrivent les mouvements relatifs d'atomes en interaction mutuelle, fournissent des solutions de référence. Les simulations issues des deux approches sont en très bon accord; elles bénéficient pleinement des capacités des supercalculateurs du CEA – DAM.

Lorsqu'une onde de choc traverse un matériau métallique et interagit avec les défauts géométriques de sa surface, des instabilités de matière, dites de Richtmyer-Meshkov, peuvent se développer. Dans le cas particulier où le matériau fond directement sous choc ou en détente, les instabilités finissent par se fragmenter pour former un nuage de particules de différentes tailles, éjectées à très grandes vitesses. Ce phénomène peut être une source d'inhibition pour des applications comme la fusion par confinement inertiel.

La fragmentation des instabilités de Richtmyer-Meshkov est un processus difficile à simuler pour les codes hydrodynamiques traitant la physique des chocs (fluides compressibles), car il fait intervenir la tension de surface qui a une grande influence sur la courbure des fluides, et donc sur le calcul du positionnement relatif des interfaces. Récemment, un modèle de calcul de tension de surface basé sur la méthode dite CSF **1**, pour *Continuum surface force*, a été implanté dans le code d'hydrodynamique eulérienne multimatériaux Hera développé au CEA – DAM. Ce code repose sur une plateforme basée sur un raffinement adaptatif de maillage adapté aux supercalculateurs de la DAM **2**.

Afin de tester ce code, des simulations d'éjection de matière réalisées avec Hera ont été comparées à des simulations par dynamique moléculaire **3**. L'étude de l'éjection de matière sous choc par dynamique molé-

culaire est une approche originale, également développée depuis quelques années au CEA – DAM et qui a montré sa capacité à capter à la fois les aspects continus et les mécanismes de fragmentation des instabilités de Richtmyer-Meshkov **4**. Son principal avantage réside dans le fait que les effets de tension de surface et de viscosité sont pris en compte de manière intrinsèque par le potentiel utilisé pour décrire les interactions entre atomes; elle permet aussi de s'affranchir de tout effet de maillage. Ainsi, la dynamique moléculaire contient toute la physique nécessaire à la

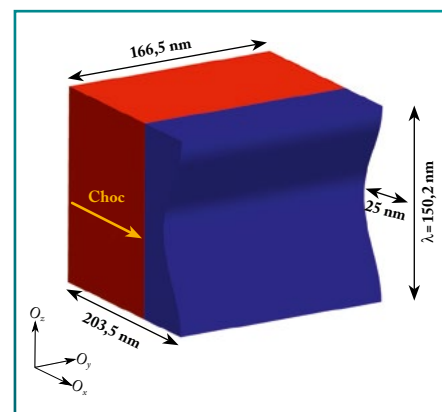


Figure 1

Exemple de géométrie testée pour simuler l'éjection de matière avec les codes hydrodynamique Hera et de dynamique moléculaire ExaStamp. L'étain sous choc est représenté en rouge et l'étain non choqué en bleu. Le choc, d'environ 65 GPa, se propage de la gauche vers la droite selon l'axe O_x , et l'étain est au contact du vide.

description de l'éjection, et les simulations fournissent des solutions de référence pour un code hydrodynamique. L'inconvénient majeur provient du fait que les simulations sont limitées à des tailles d'échantillon de dimensions nanométriques. Un code tel que Hera est donc nécessaire pour passer à plus grande échelle.

Les simulations par dynamique moléculaire sont réalisées au moyen du code ExaStamp, développé au CEA – DAM, qui répond aux exigences des nouveaux supercalculateurs de la DAM. Il est capable d'effectuer des simulations avec des potentiels coûteux sur des systèmes contenant plusieurs centaines de millions d'atomes. Il bénéficie d'une programmation orientée objet lui permettant de masquer la complexité introduite par de multiples niveaux de parallélisme.

Afin de rendre cohérentes les comparaisons entre codes, l'équation d'état du métal considéré ainsi que les valeurs de tension de surface et de viscosité utilisées dans Hera ont été obtenues à partir du potentiel interatomique utilisé dans ExaStamp. Ce dernier a lui-même été calé sur des données thermodynamiques expérimentales pertinentes. Par ailleurs, les simulations ont été réalisées sur des échantillons de mêmes dimensions.

Un exemple d'échantillon testé est décrit sur la **figure 1**. Un cristal d'étain, de dimensions 203,5 nm × 166,5 nm × 150,2 nm est mis au contact du vide. Il présente une rugosité de surface sinusoidale de longueur d'onde $\lambda = 150,2$ nm et de profondeur 25 nm. Il est soumis à un choc d'environ 65 GPa se propageant selon la direction O_x et faisant passer l'étain directement d'un état solide à un état liquide sous choc. Pour les simulations par dynamique moléculaire, ce cristal contient environ 200 millions d'atomes, et pour les simulations avec Hera, l'étain est discrétisé au niveau le plus fin avec 160 mailles par longueur d'onde λ , le vide étant plus grossièrement maillé (20 mailles/ λ).

La **figure 2a** compare, sur des vues obliques, environ 900 ps après le début de l'éjection, les instabilités de Richtmyer-Meshkov, ici sous forme de nappes de métal bidimensionnelles, simulées avec Hera et ExaStamp. Ces vues sont ensuite superposées en coupe sur la **figure 2b**. La tête de nappe de forme cylindrique, simulée par Hera, coïncide parfaitement avec celle de la référence calculée en dynamique moléculaire, ce qui est très satisfaisant, car cette forme dépend très fortement de la tension de surface du métal.

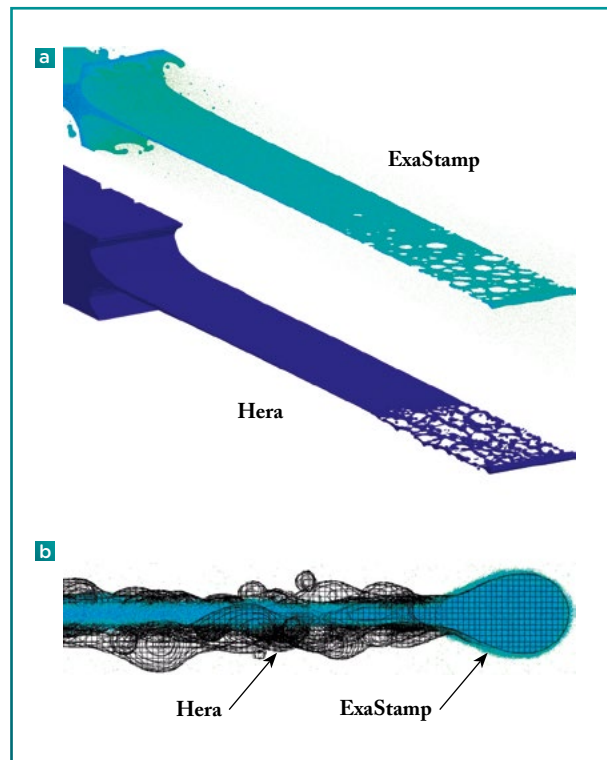


Figure 2

→ (a) Comparaison et (b) superposition des nappes de métal liquide éjectées issues des simulations numériques, réalisées avec le code de dynamique moléculaire ExaStamp et avec le code hydrodynamique Hera, 900 ps après le début de l'éjection. Sur la **figure 2b**, la simulation obtenue avec Hera est représentée avec le maillage visible (en noir) afin de la distinguer des simulations par dynamique moléculaire (en bleu). Les formes de la tête de nappe calculées avec Hera et ExaStamp coïncident parfaitement. L'évolution des nappes à des instants ultérieurs montre une phénoménologie de fragmentation similaire dans les deux cas : nucléation aléatoire puis croissance et coalescence de trous dans les nappes. Cependant, les germes de fragmentation sont différents : avec Hera, la fragmentation est d'origine numérique, alors qu'avec ExaStamp elle a une origine physique (agitation thermique des atomes), ce qui explique la différence visible à cet instant à l'arrière de la tête de nappe.

faisant, car cette forme dépend très fortement de la tension de surface du métal.

Une étude détaillée du processus de fragmentation des nappes **3** montre également que les deux codes décrivent une phénoménologie de fragmentation similaire bien que les germes de fragmentation soient différents : nucléation aléatoire puis croissance et coalescence de trous dans les nappes. Avec Hera, la fragmentation est d'origine numérique, alors qu'avec ExaStamp, elle a une origine

physique (agitation thermique des atomes). Cette phénoménologie est identique à celle observée dans les expériences **5** malgré les différences d'échelles mises en jeu.

Le CEA – DAM dispose désormais d'outils de simulation performants basés sur une description continue et atomistique de la matière et permettant de traiter les effets de tension de surface dans la physique des chocs. Peu de laboratoires dans le monde peuvent les maîtriser.

RÉFÉRENCES

- 1** J. U. BRACKBILL, D. B. KOTHE, C. ZEMACH, "A Continuum Method for Modeling Surface Tension", *J. Comput. Phys.*, **100**, p. 335-354 (1992).
- 2** P. BALLEREAU, P. CARRIBAUT, F. DUBOC, D. DUREAU, C. ENAUX, H. JOURDREN, M. PÉRACHE, « Méthodes de raffinement adaptatif de maillage et modèles avancés de programmation pour le calcul haute performance », *Revue chocs*, **41**, p. 81-87 (2012).
- 3** O. DURAND, S. JAOUEN, L. SOULARD, O. HEUZÉ, L. COLOMBET, "Comparative simulations of microjetting using atomistic and continuous approaches in the presence of viscosity and surface tension", *J. Appl. Phys.*, **122**, 135107 (2017).
- 4** O. DURAND, L. SOULARD, "Mass-velocity and size-velocity distributions of ejecta cloud from shock-loaded tin surface using atomistic simulations", *J. Appl. Phys.*, **117**, 165903 (2015).
- 5** D. S. SORENSON *et al.*, "Ejecta Particle-Size Measurements from the Break-Up of Micro-Jets in Vacuum and Helium Gas Using Ultraviolet In-Line Fraunhofer Holography", Los Alamos National Laboratory, Technical Report No. LA-UR-15-25993 (2015).