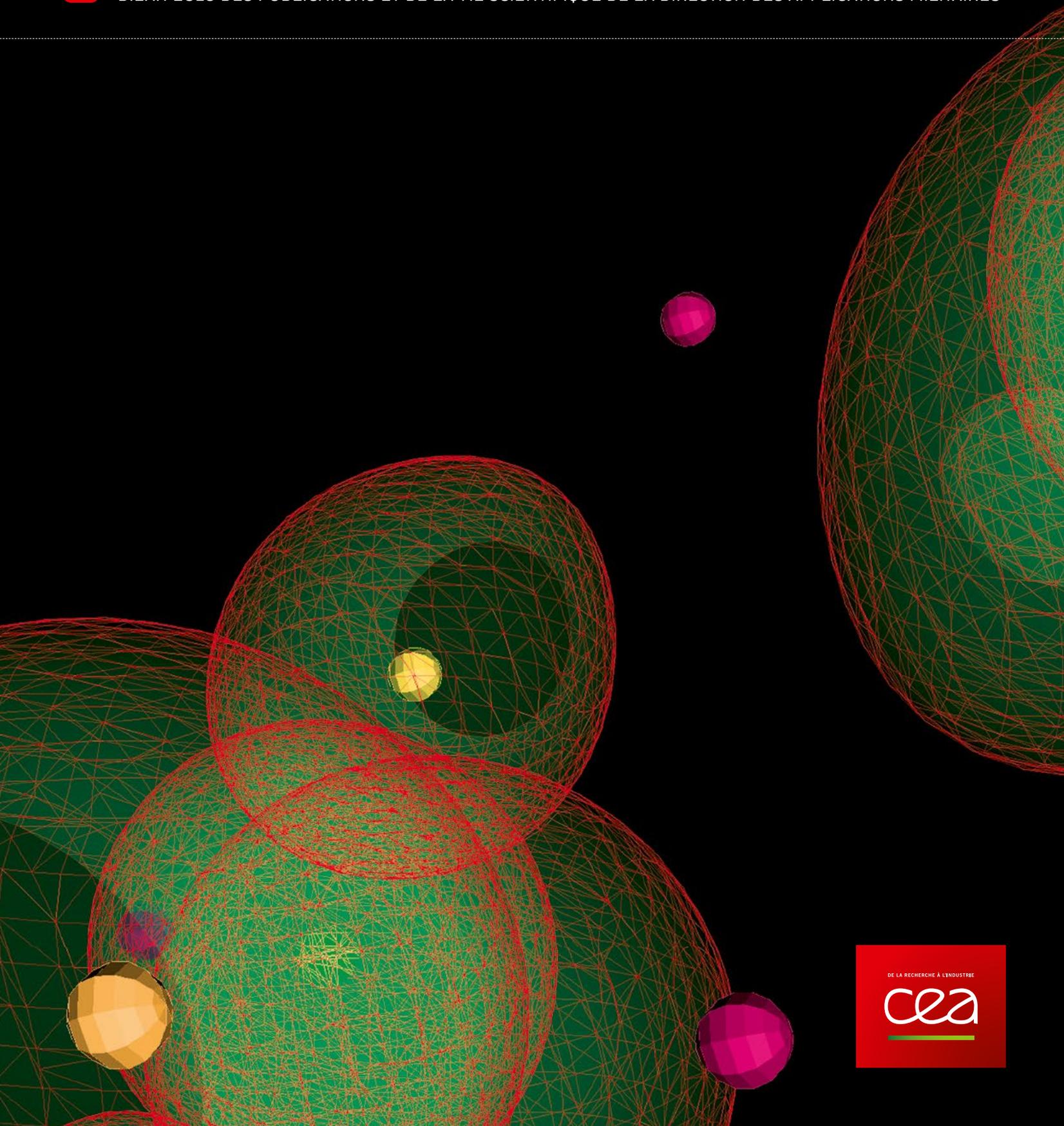


N° 11 / JUIN 2017

CHOCS avancées

BILAN 2016 DES PUBLICATIONS ET DE LA VIE SCIENTIFIQUE DE LA DIRECTION DES APPLICATIONS MILITAIRES



DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

cea

SOMMAIRE

01 ÉDITORIAL L. BONNET

02 VIE SCIENTIFIQUE

INTERACTION LASER-MATIÈRE

06 Modélisation du transfert d'énergie entre faisceaux laser pour la fusion

A. DEBAYLE, S. DEPIERREUX, D. J. Y. MARION, C. NEUVILLE, P.-E. MASSON-LABORDE, P. LOISEAU, M. CASANOVA, C. BACCOU, K. GLIZE, C. LABAUNE, S. HÜLLER

08 Progrès marquants dans la compréhension de la fusion par confinement inertiel en attaque directe

S. LAFFITE, B. CANAUD, V. BRANDON, J.-L. BOURGADE, T. CAILLAUD, F. GIRARD, O. LANDOAS, S. LEMAIRE, L. MASSE, P.-É. MASSON-LABORDE, F. PHILIPPE, C. REVERDIN, V. TASSIN, G. LEGAY, M. TEMPORAL, J. DELETTREZ, V. GLEBOV, T. MICHEL, W. SEKA

10 Mise en évidence d'instabilités de Kelvin-Helmoltz dans les cavités d'ignition laser

M. VANDENBOOMGAERDE, M. BONNEFILLE, A. GRISOLLET, P. GAUTHIER

PHYSIQUE DES PLASMAS

12 La structure des plasmas denses revisitée

J. CLÉROUIN, P. ARNAULT, N. DESBIENS, V. DUBOIS, C. TICKNOR, L. COLLINS, J. KRESS

14 Cinétique chimique et relaxation de plasmas d'air hors équilibre générés par des photons et électrons énergétiques

M. RIBIÈRE, M. MAULOIS, O. EICHWALD, M. YOUSFI

16 Dynamique de formation des chocs non collisionnels induits par l'instabilité de Weibel

C. RUYER, L. GREMILLET, G. BONNAUD, C. RICONDA

MÉCANIQUE DES FLUIDES ET DES STRUCTURES

18 Réponses vibratoires non linéaires d'un assemblage avec des liaisons frottantes

M. CLAEYS, J.-P. LAMBELIN, R. TODESCHINI, J.-J. SINOÛ

PHYSIQUE DE LA MATIÈRE CONDENSÉE

20 Reproductibilité des calculs en théorie de la fonctionnelle de la densité dans les solides

F. JOLLET, M. TORRENT

PHYSIQUE NUCLÉAIRE

22 Émission γ dans les réactions nucléaires: des progrès décisifs

D. DENIS-PÉTIOT, O. ROIG, V. MÉOT, S. PÉRU, S. HILAIRE, M. VERSTEEGEN, M. JANDEL, I. DELONCLE, M. MARTINI, S. GORIELY

24 Première mise en œuvre complète du formalisme MPMH en physique nucléaire

N. PILLET, C. ROBIN, M. DUPUIS, G. HUPIN, J.-F. BERGER, D. PEÑA ARTEAGA

ATMOSPHÈRE, GÉOPHYSIQUE, ENVIRONNEMENT

26 Évaluation et optimisation de réseaux de surveillance infrasons

A. LE PICHON, J. VERGOZ, E. MARCHETTI

ÉLECTROMAGNÉTISME

28 Résolution numérique des équations de Maxwell par décomposition de domaines

M. MOGNOT, B. STUPFEL, M. CHANAUD

INSTRUMENTATION & MÉTROLOGIE

30 Premiers imageurs X pour le Laser Mégajoule

R. ROSCH, C. TROSSEILLE, T. CAILLAUD, J.-L. BOURGADE, J.-P. LE BRETON, R. WROBEL, P. BEAUVAIS, M. PALLET, V. PRÉVOT

32 Caractérisation globale de formulations explosives à l'état de traces

M. C. BRIDOUX, S. SCHRAMM, A. SCHWARZENBERG, R.-B. COLE

CHIMIE ET SCIENCE DES MATÉRIAUX

34 Mesure de contraintes de couches minces par biréfringence

H. PIOMBINI, F. COMPOINT, C. AMBARD, D. PICART, G. DAMAMME, F. BRÉMAND

36 Étude des changements de phases dans un acier inoxydable 316Nb par diffraction de neutrons

W. JOLLY, C. TOFFOLON-MASCLET, B. MARINI, J.-M. JOUBERT, F. PORCHER, G. ANDRÉ, F. CORTIAL, P. PETIT, S. RINGEVAL

38 Cinétique de la transformation martensitique d'un alliage de plutonium en phase δ

B. RAVAT, B. OUDOT, F. LALIRE, A. PERRON, F. DELAUNAY, E. AEBY-GAUTIER, B. APPOLAIRE

40 Recyclage par laser des hublots du Laser Mégajoule

P. CORMONT, C. AMEIL, S. BOUILLET, A. BOURGADE, P. COMBIS, T. DONVAL, D. HÉBERT, L. LAMAIGNÈRE, J.-L. RULLIER, T. DOUALLE, L. GALLAIS

42 Une nouvelle chimie du xénon sous pression

A. DEWAELE, N. WORTH, C. J. PICKARD, R. J. NEEDS, S. PASCARELLI, O. MATHON, M. MEZOUAR, T. IRIFUNE

44 Revêtements colonnaires par projection plasma de suspensions

B. BERNARD, A. QUET, E. HERVE, L. BIANCHI

46 Porosité du TATB par spectrométrie RMN de diffusion et microscopie MEB-FIB

P. PALMAS, T. BOTZANOWSKI, M. GUERAIN, A. FORZY, E. BRUNETON, G. DEL RIO

48 Une stratégie pour éliminer les défauts ponctuels d'un matériau

A. VATTRÉ, T. JOURDAN, M.-C. MARINICA

CALCUL SCIENTIFIQUE

50 Schémas conservatifs pour la dynamique des gaz sur grilles cartésiennes décalées

G. DAKIN, H. JOURDREN

52 Modane : un outil de conception pour les codes de simulation numérique

B. LELANDAIS, M.-P. OUDOT



Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives

Chocs Avancées, Bilan 2016 des publications et de la vie scientifique de la Direction des applications militaires.

Image de couverture: Simulation d'un plasma détendu de silice SiO₂ à 10 000 K (silicium : rose, oxygène : jaune) – ©CEA - DAM

Directeur de la publication: Laurence BONNET. **Coordinateur scientifique**: Jean CLÉROUIN.

Comité scientifique: Daniel BOUCHE, Serge BOUQUET, Gilles BOURGÈS, Pierre BRUGUIÈRE, Jean-François CLOUET, Gilles DAMAMME, Patrick DAVID, Georges GENESTIER, Francis HARDOUIN, Denis JURASZEK, Stéphane LOUBIÈRE, Pierre-Henri MAIRE, Christophe MOULIN, Bruno SCHEURER, Philippe SIMONETTI, Olivier VACUS.

Rédacteur en chef: Jean-Marc LABORIE.

Création et réalisation: EFIL/www.efil.fr. **Impression**: Gibert & Clarey. **Secrétariat, diffusion et abonnement**: Régis VIZET.

Chocs Avancées

CEA/DAM

Institut supérieur des études nucléaires de défense (ISENDé)

Bruyères-le-Châtel, F-91297 Arpajon Cedex

Tél. : 33 (0)1 69 26 76 98 - Fax: 33 (0)1 69 26 70 05

Courriel : chocs@cea.fr

Brochure imprimée sur papier écogéré
ISSN 1961-7399

2016, les 20 ans de la Simulation

Lorsque la France réalisa son ultime campagne d'essais nucléaires, destinée notamment à valider des charges nucléaires spécifiques dites robustes, et s'engagea dans le programme Simulation, le défi était immense. Il s'agissait de pérenniser la capacité de renouveler, en fonction des besoins exprimés par l'État et sans essai nucléaire nouveau, les têtes nucléaires équipant la dissuasion, tout en garantissant leur sûreté et leur fiabilité. Chacun peut mesurer, vingt ans plus tard, les succès majeurs obtenus.

Le CEA – DAM s'était depuis longtemps engagé dans une démarche alliant modélisation physique des phénomènes, développement de codes numériques sur calculateurs puissants et expérimentations. Néanmoins, il lui fallait désormais axer sur ces trois piliers, et en s'appuyant sur les standards de simulation, la stratégie de démonstration de la fiabilité et de la sûreté des objets et, ainsi, apporter aux autorités toutes les garanties préalables à la mise en service d'une tête nucléaire. Il a donc fallu :

- ▶ développer fortement la modélisation physique dans tous les domaines mis en jeu par le fonctionnement d'une charge nucléaire et progresser dans la validation théorique des modèles ;

- ▶ établir les meilleures méthodes de discrétisation des problèmes complexes posés et développer les logiciels permettant de tirer tout le bénéfice de l'accroissement significatif des capacités des calculateurs ;

- ▶ être capable de réaliser les expérimentations discriminantes permettant de valider, en tenant compte des incertitudes de mesure ou de calcul, les modélisations et les codes de simulation développés.

Dédiée initialement aux fonctions énergie et sûreté de la charge nucléaire, la simulation a été étendue aux autres fonctions de la tête nucléaire : ainsi, la rentrée atmosphérique, associée à la précision, la furtivité, le durcissement et la résistance thermomécanique font aussi l'objet de standards de simulation et des études associées. La démarche de simulation est également mise à profit dans de nombreux travaux menés au service des différentes missions de la DAM.

Ce numéro donne un aperçu de travaux menés dans ce cadre et d'avancées significatives publiées en 2016 dans les domaines de la physique de l'ignition en attaque directe ou indirecte, de l'instru-

mentation, de la physique nucléaire, de la matière en conditions extrêmes, que celle-ci soit un solide, un plasma, un explosif ou encore un gaz, de la mécanique non linéaire des structures, de la détection d'infrasons ou de traces d'explosif, etc. La lecture des articles permet d'apprécier les progrès réalisés qui concourent à accroître la maîtrise, à toutes les échelles étudiées, des phénomènes physiques mis en jeu dans le fonctionnement des systèmes complexes développés par le CEA – DAM.

Afin d'accompagner cette démarche, la DAM s'est engagée très tôt dans une politique d'ouverture qui s'est traduite par un accroissement significatif des collaborations académiques : création d'unités mixtes de recherche, de laboratoires de recherche conventionnés, implication dans de nombreux projets et infrastructures de recherche, en France ou à l'international, mise à disposition de grands moyens du programme Simulation (Tera-TGCC, LIL puis LMJ-Petal). Cette politique a été assortie d'une dynamique de publications des résultats scientifiques et techniques, où la vitalité des collaborations est très bien illustrée par la croissance du nombre de publications coécrites avec des chercheurs issus de différents pays. Le nombre et la qualité des publications, mesurée *via* les facteurs d'impact, sont, à côté de la réussite des projets menés dans les délais et avec les performances attendues, une signature de l'excellence et du très haut niveau scientifique et technique des équipes de la DAM. Ils font partie des indicateurs analysés par les comités d'évaluation, mis en place depuis 1997 dans le cadre du Conseil scientifique de la DAM, qui examinent, dans une thématique donnée, la pertinence de la stratégie scientifique mise en place et sa cohérence avec les objectifs poursuivis pour répondre aux besoins des programmes. L'activité inventive, matérialisée par les dépôts de brevet ou de logiciel, témoigne de la vitalité de l'activité de recherche et développement de nos laboratoires qui contribuent ainsi, par la qualité reconnue de leurs travaux, à la crédibilité de la dissuasion.

Je souhaite que le numéro d'*Avancées* que vous tenez entre les mains vous donne l'envie d'aller plus loin dans la découverte de cette formidable aventure au service de la défense de la France. Les plus belles pages restent à écrire pour les hommes et les femmes de la DAM, avec par exemple l'exploitation des grandes installations de classe mondiale comme le Laser Mégajoule et Epure, et l'arrivée prochaine de l'Exaflop.

LAURENCE BONNET

Directrice scientifique du CEA – DAM

LES TRAVAUX DU CEA - DAM SUR LES SYSTÈMES DE STOCKAGE RÉCOMPENSÉS À SUPER COMPUTING 2016

Tera 1000 permet d'offrir de nouvelles capacités de simulation numérique tant par la puissance de calcul que par la capacité à gérer plus rapidement des flux d'informations plus volumineux. Ses performances dépendent fortement de l'architecture des systèmes de stockage. La solution installée pour Tera 1000 permet, dans un encombrement trois fois plus petit que pour le stockage de Tera 100, de doubler la capacité de stockage et le débit. Elle est le fruit des travaux de R&D du CEA - DAM Île-de-France menés avec l'industriel SEAGATE, dans le cadre du projet européen SAGE. Ces travaux ont été récompensés en novembre 2016 à la conférence «*Super Computing 2016*» où le CEA - DAM a reçu de SEAGATE un «*Pioneer award for your leadership in HPC storage*».

UNE PRESTIGIEUSE DISTINCTION : « RADIATION EFFECT AWARD »

M. **Jean-Luc Leray**, du CEA - DAM Île-de-France, a reçu le «*Radiation Effect Award*» de la Nuclear and Plasma Science Society de l'IEEE (Institute of Electronic and Electrical Engineers) pour ses contributions à la compréhension des effets des rayonnements sur les dispositifs microélectroniques, ainsi qu'au développement de la filière durcie SOI (*Silicon On Insulator*) en Europe. Cette prestigieuse distinction, rarement décernée à des non-Nord-Américains, est attribuée à des chercheurs qui ont apporté des contributions innovantes et particulièrement remarquables, avec un impact majeur dans la communauté « rayonnements ionisants ».

NATO SCIENTIFIC ACHIEVEMENT AWARD 2016

Bruno Chevalier, représentant du CEA - Gramat au sein du groupe OTAN SI-250 relatif aux armes à énergie dirigée électromagnétique en situation tactique, a reçu en septembre 2016 la reconnaissance scientifique de la NATO Science and Technology Organization (STO). La distinction décernée (Achievement Award) vient récompenser Bruno Chevalier pour la qualité de ses nombreux travaux au sein de ce groupe qui réunit le Danemark, les États-Unis, la Grande-Bretagne, l'Allemagne, les Pays-Bas, la Norvège, la République tchèque, la Lituanie et la France.

EPS FELLOW

Luc Bergé (CEA - DAM Île-de-France) est promu au rang d'EPS Fellow pour ses contributions théoriques remarquables sur la propagation des ondes dans les milieux non linéaires et pour son implication au sein de l'European Physical Society.

PRIX BULL-JOSEPH-FOURIER

Marc Torrent (CEA - DAM Île-de-France) et **Antoine Levitt** (Inria), dans le cadre de son post-doctorat au CEA - DAM Île-de-France, financé par le programme transversal « Nanoscience » du CEA, ont reçu le 12 avril 2016 le 2^e prix Bull-Joseph-Fourier 2015 pour leurs travaux sur l'adaptation du logiciel Abinit aux futurs supercalculateurs. Ce prix est décerné chaque année par Atos-Bull et GENCI (Grand Équipement National de Calcul Intensif). Le logiciel Abinit permet le calcul des propriétés des matériaux, à partir du comportement des électrons, en utilisant des méthodes issues de la mécanique quantique. En modifiant l'algorithme interne du code pour lui permettre une exécution efficace sur 10 000 processeurs (1 000 auparavant), ce travail ouvre la voie vers l'utilisation d'Abinit sur le supercalculateur Tera 1000.

FAITS MARQUANTS DE L'ANNÉE 2016

PROJET TERA 1000 - MISE EN SERVICE DE TERA 1000-1

Le système complet de Tera 1000-1 a été installé puis mis en service en avril 2016. Ce calculateur a une puissance double de celle de Tera 100 pour une consommation électrique divisée par 5. Destiné en priorité aux codes du futur standard de garantie des armes, il permettra d'arrêter Tera 100 après la mise en exploitation de Tera 1000-2, qui préfigure le supercalculateur programmé à l'horizon 2020.

CÉLÉBRATION DU SUCCÈS DES 20 ANS DU PROGRAMME SIMULATION

Lancé en 1996, le programme Simulation conçu et mené par la DAM pour pérenniser la dissuasion nucléaire française après l'arrêt des essais nucléaires a 20 ans. Pour célébrer la réussite de ce programme, la DAM a notamment édité deux ouvrages retraçant les grands défis qu'elle a su relever depuis sa création (à consulter sur le site web du CEA).

UNE CHAIRE POUR LE DATA SCIENCE

L'ENS Paris-Saclay, Atos et le CEA créent la chaire Industrial Data Analytics & Machine Learning. À la clé, l'émergence d'une filière française *data science*. Cette chaire vise à développer les métiers et technologies de l'analyse des données industrielles et à soutenir les travaux de R&D menés pour les solutions de traitement et analyses de données, dans une dynamique d'innovation et de partage avec les start-up et PME.

LIVRES PARUS EN 2016

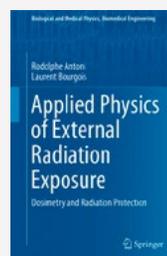


OÙ SERA LE PROCHAIN SÉISME ? DÉFIS DE LA SISMOLOGIE AU XXI^E SIÈCLE

R. Bossu, J. Guilbert † (CEA - DAM Île-de-France), B. Feignier (CEA - DAM)

Cet ouvrage vise à offrir à un large public un panorama simple de la sismologie en ce début de XXI^e siècle, sans aucune formule mathématique, mais sans occulter la complexité des problématiques traitées. Les auteurs sont trois sismologues experts du CEA - DAM.

Éditions EDP Sciences, France.
192 pages, ISBN : 978-2759809424.



APPLIED PHYSICS OF EXTERNAL RADIATION EXPOSURE: DOSIMETRY AND RADIATION PROTECTION

R. Antoni (CEA - Cadarache), L. Bourgois (CEA - DAM Île-de-France)

Consacré à la physique appliquée à l'exposition externe due aux rayonnements ionisants, cet ouvrage fait la synthèse de nombreuses années d'expériences en dosimétrie et techniques de protection contre l'exposition externe, dans les domaines industriel et médical.

Springer International Publishing, Paris.
484 pages, ISBN : 978-3-319-48658-1.

SÉMINAIRE DAM-DEN SUR LA NEUTRONIQUE MONTE-CARLO

Le 11 avril 2016, plus de 80 ingénieurs-chercheurs de la DAM et de la DEN ont tenu un séminaire « Méthodes de Monte-Carlo en neutronique », au CEA – DAM Île-de-France. Les participants étaient principalement issus des équipes en charge des codes de simulation numérique pour la neutronique et la radioprotection. De nombreuses thématiques d'intérêt commun ont émergé de ces discussions, telles que la reproductibilité des simulations, le parallélisme et les modèles de programmation en vue des nouvelles architectures de calculateurs.

ANIMATION DE LA COMMUNAUTÉ INTERNATIONALE DU CALCUL SCIENTIFIQUE

Du 19 au 21 septembre 2016, le CEA – DAM Île-de-France a organisé à Paris deux manifestations internationales rassemblant la communauté du calcul intensif autour de la problématique de la gestion des grands volumes de données. La première rassemblait les utilisateurs ou développeurs du logiciel *Robinhood Policy Engine*. Issu du CEA – DAM Île-de-France pour gérer le cycle de vie des données produites par l'utilisation des supercalculateurs, il est utilisé par plus d'un millier de centres de calcul. La seconde, *Lustre Administrator and Developer Workshop*, créée et organisée par le CEA – DAM Île-de-France, rassemblait les développeurs du logiciel libre de gestion de flux de données Lustre, utilisé sur les calculateurs des centres de calcul Tera et TGCC.

5^E WORKSHOP SUR LE TRITIUM ORGANIQUEMENT LIÉ

Le 5^e workshop concernant le devenir et l'analyse du tritium organiquement lié, regroupant des spécialistes du tritium originaires du Canada, du Japon, de Corée du Sud et d'Europe (Belgique, France, Roumanie, Royaume-Uni), a été organisé par le CEA – DAM Île-de-France du 4 au 7 octobre 2016. Outre la publication du troisième exercice réalisé sur du blé et d'une synthèse des trois premiers exercices, le workshop a acté la mise en place d'une stratégie commune pour, à partir des objets d'intercomparaison, vérifier la faisabilité de l'élaboration d'un matériau de référence certifié (MRC) ou d'un matériau de référence (MR) dédié.

22^E DYMAT

Le 22^e DYMAT Technical Meeting « Experimental testing and modelling of brittle materials at high strain-rates », coorganisé par l'université Grenoble-Alpes et le CEA – Gramat, s'est tenu du 19 au 21 octobre 2016 à Grenoble. Cet événement a rassemblé 97 participants originaires de 20 pays (dont 8 hors UE). Les dernières avancées dans le domaine de la caractérisation dynamique de matériaux fragiles (céramiques, verres, bétons, roches...) ainsi que l'état de l'art en matière de modélisation et de simulation numérique ont été présentées. Les travaux du CEA étaient à l'honneur avec quatre communications de Gramat et deux du Cesta. Les meilleurs travaux présentés à l'occasion de ce Technical Meeting seront rassemblés dans un numéro spécial du journal *Philosophical Transactions A* édité par la Royal Society avec 3 articles du CEA – Gramat.

ACCORDS DE PARTENARIAT

LE CEA – GRAMAT ET LE LAAS ASSOCIÉS POUR LE DÉVELOPPEMENT D'UNE NOUVELLE MÉTROLOGIE EN DÉTONIQUE

Le laboratoire de recherche conventionné (LRC) sur l'instrumentation et les capteurs ultra-rapides (LICUR), fruit de la collaboration entre le CEA – Gramat et le Laboratoire d'analyse et d'architecture des systèmes (LAAS) du CNRS, a été inauguré le 7 avril 2016. Cette cérémonie s'est déroulée à Toulouse en présence de nombreuses personnalités, dont Mme Delga, ancienne ministre, présidente de la Région Languedoc-Roussillon-Midi-Pyrénées, M. Nicu, directeur du LAAS, M. de Labachellerie, délégué scientifique de l'Institut des sciences de l'ingénierie et des systèmes du CNRS, et de M. Pons, responsable scientifique du LICUR. L'objectif principal de ce LRC est d'apporter une meilleure compréhension des phénomènes transitoires observés en environnements extrêmes de pression, température et vitesse, afin d'améliorer les codes de simulation numérique associés.

4^E FORUM DAM « MÉTHODE DE QUANTIFICATION DES INCERTITUDES »

Le 4 octobre 2016, le CEA – DAM Île-de-France a organisé au TGCC le 4^e forum DAM regroupant une soixantaine de personnes. En alternant des interventions d'universitaires invités et de personnels CEA, ce forum a permis d'intéressants échanges sur la thématique des incertitudes, tant au niveau des méthodes que des applications.

JOURNÉES DES PROCÉDÉS DE FABRICATION

Le CEA – Le Ripault a organisé les 7 et 8 juin 2016 un séminaire sur les procédés de fabrication et a montré les stratégies de production développées par le CEA – DAM et par ses partenaires industriels dans l'optique de « l'Usine du futur ». Plus de 150 personnes, issues des cinq centres de la DAM et près d'une vingtaine d'industriels, ont échangé sur les évolutions actuelles et à venir des procédés de production et de contrôle, sur leur garantie de fiabilité ou encore sur la pérennisation des savoir-faire spécifiques. Une nouvelle édition est envisagée prochainement.

FUTURE STRATEGIES IN ELECTROCHEMICAL TECHNOLOGIES FOR EFFICIENT ENERGY UTILISATION

Dans le cadre du projet ARD 2020 LAVOISIER, le STUDIUM – université de Tours a organisé du 7 au 9 septembre 2016, avec le soutien du CEA – Le Ripault, un séminaire *Future strategies in electrochemical technologies for efficient energy utilisation*. Une cinquantaine de participants (industriels et académiques nationaux ou internationaux) ont échangé sur les progrès et perspectives dans le domaine des systèmes de conversion d'hydrogène et du stockage électrochimique.

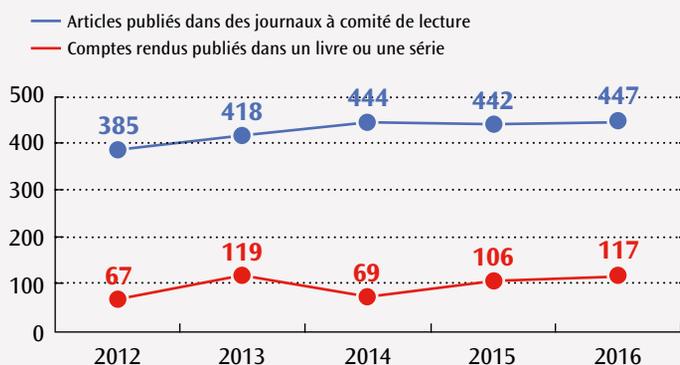
ACCORD DE PARTENARIAT ENTRE BORDEAUX INP ET LE CEA – DAM

Le 18 février 2016, Bordeaux INP et le CEA – DAM ont signé un accord de partenariat afin de poursuivre leur collaboration dans la formation, la recherche, l'innovation technologique et le développement économique régional. Des projets collaboratifs de transfert de technologie ont été identifiés dans différents domaines : modélisation, calcul numérique, électronique, traitement du signal et de l'image, mécanique, matériaux avancés, environnement et géosciences.

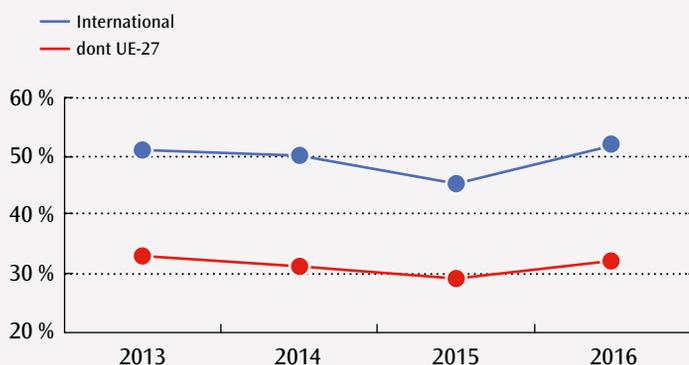
PUBLICATIONS SCIENTIFIQUES ET TECHNIQUES

En 2016, le CEA – DAM a publié 447 articles et comptes rendus de conférence dans des journaux à comité de lecture, ainsi que 117 comptes rendus de conférence dans un livre ou dans une série.

► Nombre de publications 2012-2016



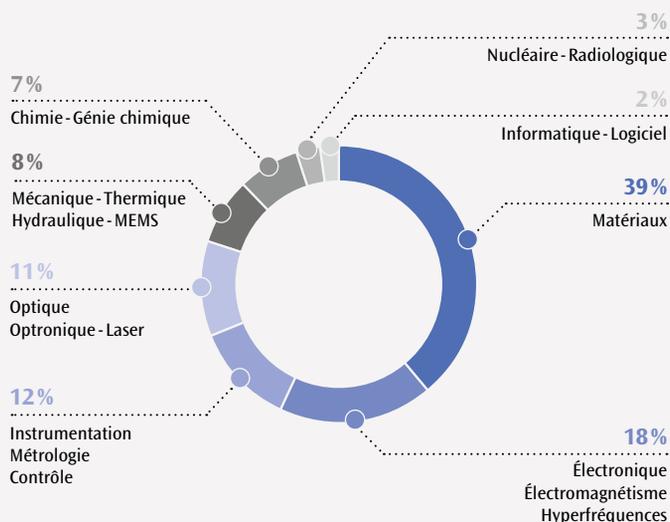
► Proportion de publications en collaboration internationale



BREVETS

Le portefeuille du CEA – DAM comporte 403 brevets dont 20 déposés en 2016 auprès de l'Inpi.

► Répartition des brevets par domaine technique



HABILITATIONS À DIRIGER LES RECHERCHES

BERNARD AMADON

CEA – DAM Île-de-France

Université Paris-Sud, Orsay
– Spécialité : Physique de la matière condensée et des solides.

LAURENT BOLLINGER

CEA – DAM Île-de-France

École normale supérieure de Paris
Spécialité : Géophysique.

RODOLPHE MARION

CEA – DAM Île-de-France

Université Pierre-et-Marie-Curie –
Spécialité : Traitement de l'image.

PHILIPPE PAILLET

CEA – DAM Île-de-France

Université Jean-Monnet de
Saint-Étienne – Spécialité :
Microélectronique.

JÉRÔME BREIL

CEA – Cesta

Université de Bordeaux –
Spécialité : Méthodes numériques.

SÉBASTIEN MONTANT

CEA – Cesta

Université de Bordeaux
– Spécialité : Optique non
linéaire - Laser.

PHILIPPE NICOLAÏ

CEA – Cesta

Université de Bordeaux –
Spécialité : Physique des plasmas.

► Nombre de HDR soutenues 2008-2016



THÈSES SOUTENUES ET EN PRÉPARATION

En 2016, 124 doctorants préparaient une thèse au CEA – DAM. Au cours de l'année, 49 l'ont soutenue et 52 l'ont démarrée.

► Nombre de thèses soutenues 2008-2016



► Nombre de thèses en cours 2008-2016



CEA - DAM Île-de-France

Antoine FRÈRE, Modélisations des tsunamis générés par écoulement gravitaire : application dans le golfe de Gascogne, Institut de physique du globe de Paris.

Dorianne TAILPIED, Évaluation et optimisation de réseaux infrason pour la surveillance volcanique, Institut de physique du globe de Paris.

Claire LABONNE, Analyse de la polarisation de données multi-composantes à partir d'une seule station ou d'une antenne : méthodes et applications à la caractérisation du champ d'ondes sismiques, Institut de physique du globe de Paris.

Thibault GASC, Adaptation des méthodes Lagrange-Projection pour l'hydrodynamique multi-matériaux en vue du portage sur architecture exaflopique, ENS Cachan.

Thibaud VAZQUEZ-GONZALEZ, Modélisation physique, étude d'un schéma numérique et développement d'une maquette 1D pour la simulation des écoulements fluide-particules par un formalisme multicontinu, École centrale Paris.

Clément WALTER, Construction et utilisation de métamodèles pour l'estimation de probabilités d'événements rares et de quantiles faibles, Université Paris-Diderot.

Ahmed Amine HOMANN, Étude des propriétés physico-chimiques de matériaux énergétiques par simulation moléculaire, Université Paris-Est.

François LECHAFTOIS, Description des états excités par la méthode de la QRPA et l'interaction de Gogny, Université Paris-Sud Orsay.

Annaïg CHALEIL, Développement d'une source de rayonnement X par diffusion Compton inverse sur l'accélérateur ELSA et optimisation à l'aide d'un système d'empilement de photons, Université Paris-Saclay.

Pedro GONZALEZ DE ALAIZA MARTINEZ, Generation of intense terahertz sources by ultrashort laser pulses, Université Paris-Saclay.

Julien FERRI, Étude des rayonnements Bétatron et Compton dans l'accélération d'électrons par sillage laser, Université Paris-Saclay.

Sébastien MORAIS, Étude et obtention d'heuristiques et d'algorithmes exacts et approchés pour un problème de partitionnement de maillage sous contrainte mémoire, Université d'Évry.

Camille GALLET, Étude de transformations de code parallèle statique ou dynamique pour architecture manycore, Université Versailles-Saint-Quentin-en-Yvelines.

Fabien POINTURIER, Conception et développement de méthodes et d'instruments d'analyse d'ultratraces de radionucléides pour la détection et la surveillance des activités nucléaires, Université de Pau et des Pays de l'Adour.

Harizo RAJAONA, Inférence bayésienne adaptative pour la reconstruction de source en dispersion atmosphérique, Université Lille 1.

Valérie MIGEON, Utilisation des isotopes du molybdène au traçage de l'origine et des transformations des oxydes d'uranium dans le cycle du combustible, École normale supérieure de Lyon.

Lucie GROUSSET, Incorporation de l'iode dans les silicates fondus, Institut de physique du globe de Paris.

Anaïs CASTAN, Propagation laser en plasma sous-dense et modélisation de déflectométrie protonique, École polytechnique.

Pierre COLIN-LALU, Étude des équations d'état des matériaux ablateurs synthétisés pour les capsules du Laser Mégajoule, École polytechnique.

Félix BALLANGER, Confinement de la détonation d'un objet explosif par mousse aqueuse sèche ; Étude expérimentale et numérique, ENSMA Poitiers.

Thomas LEROY, Modèles réduits et méthodes numériques pour des équations cinétiques appliquées au transport des photons, Université Pierre-et-Marie-Curie.

Raphaël RIQUIER, Champ magnétique dans les plasmas laser : transport électronique non local et reconnexion, Université Paris-Saclay.

Adrien NOUVELLET, Avancées récentes en traitement statistique du signal appliquées à l'estimation et la détection d'ondes infrasonores, Télécom ParisTech.

Sébastien TERRANA, Méthodes Galerkin discontinues hybridables pour la propagation des ondes élastiques et acoustiques dans des milieux géophysiques complexes, Université Paris-Diderot.

Claire BACCOU, « Initiation de réactions nucléaires par des protons accélérés par laser », Université Paris-Saclay.

Jean-Charles PAPIN, Modèle d'ordonnement et de partitionnement pour applications à maillages et calculs réguliers dans le cadre d'accélérateurs de type "ManyCore", Université Paris-Saclay.

Jean-Marc BELLOIR, Spectroscopie du courant d'obscurité par les effets de déplacement atomique des radiations spatiales et nucléaires dans les capteurs d'images CMOS à photodiode pincée, Université Paul-Sabatier Toulouse III.

Émilien WILHELM, Développement d'algorithmes de détection et d'identification gamma : application à la spectrométrie gamma embarquée, Université de Strasbourg.

Alexandre DO, Émission X de plasma : Spectroscopie et imagerie à haute résolution, Université Paris-Saclay.

CEA - Le Ripault

Élodie PONS, Caractérisation expérimentale et modélisation des propriétés d'adhérence de liaisons au sein de structures multicouches, Université de Grenoble.

Thomas RICHARDOT, Développement d'un matériau piézoélectrique sans plomb pour la réalisation de sondes ultrasonores à haute fréquence, Université de Tours.

Amaury WALBRON, Analyse 3D de matériaux hétérogènes pour la détection des orientations des constituants : application à la caractérisation thermique multi-échelle des milieux, Université d'Orléans.

Florent GIRARD, Analyse par la modélisation du comportement de fluides en interaction : application à la projection plasma de nanomatériaux, Université de Bordeaux.

Delphine DRU, Synthèse, optimisation et caractérisation des nouvelles architectures catalytiques pour une application en pile PEMFC, Université de Poitiers.

Cyril UHRY, « Optimisation du procédé de tomographie X appliqué à la détection de défauts dans les matériaux composites », Université de Lyon.

Benjamin BERNARD, « Barrières thermiques par projection plasma de suspensions - Développement et caractérisation de microstructures à faible conductivité thermique », Université de Lorraine.

Thibaud ALAIME, Mise au point de nouvelles méthodologies de synthèse d'hétérocycles fortement azotés. Application à la synthèse de matériaux énergétiques insensibles et performants, Université d'Orléans.

Julien TRANCHIDA, Dynamique moléculaire magnétique des matériaux ferri-magnétiques, Université de Tours.

Yann DAUVOIS, Modélisation du transfert thermique mixte conducteur radiatif dans des matériaux réfractaires faiblement poreux, École centrale Paris.

CEA - Cesta

Marc SERGENT, Passage à l'échelle d'un support d'exécution à base de tâches pour l'algèbre linéaire dense, Université de Bordeaux.

Martin SOZET, Étude de l'endommagement laser de composants réfléchissants en régime sub-picoseconde, Centrale Marseille.

Teddy PICHARD, Mathematical modelling for dose deposition in phototherapy, Université de Bordeaux.

Gabriel GEORGES, Développement d'un schéma aux volumes finis centré lagrangien pour la résolution 3D des équations de l'hydrodynamique et de l'hyperélasticité, Université de Bordeaux.

CEA - Gramat

Mélissa MAULOIS, Étude expérimentale et numérique de la cinétique de plasmas d'air produits par rayonnement X impulsif, Université Paul-Sabatier Toulouse III.

Vincent CHUZEVILLE, Amorçage en détonation des explosifs hétérogènes de type coulé-fondu : établissement de corrélations entre microstructure et réactivité, Université Paris-Saclay.

Hadrien THÉVENEAU, Développement d'un amplificateur de puissance à transistors GaN, Université Lille 1 - Sciences et technologies.

Amélie GRANGEAT, Vulnérabilité, résilience et effets cascade entre réseaux techniques : apports de la modélisation systémique et spatiale pour la planification et la gestion de crise au profit des opérateurs réseau et de la sécurité civile, Université de Lyon.

CEA - Valduc

Alexandre HERMANT, Évolution microstructurale d'un acier inoxydable austénitique (316Nb) au cours de sollicitations thermomécaniques représentatives de différents procédés de forgeage, Mines ParisTech.

Florent CUSENZA, Étude du comportement sous hydrogène d'une soudure homogène en acier inoxydable martensitique (APX4), Université de Bourgogne.

Modélisation du transfert d'énergie entre faisceaux laser pour la fusion

A. DEBAYLE - S. DEPIERREUX - D. J. Y. MARION - C. NEUVILLE - P.-E. MASSON-LABORDE - P. LOISEAU - M. CASANOVA / CEA – DAM Île-de-France
 C. BACCOU - K. GLIZE - C. LABAUNE / Laboratoire pour l'utilisation des lasers intenses (LULI), UMR 7605 CNRS – CEA – École polytechnique – Université Pierre-et-Marie-Curie, Palaiseau
 S. HÜLLER / Centre de physique théorique, UMR 7644 CNRS – École polytechnique, Palaiseau

Les expériences de fusion nucléaire par confinement inertiel mettent en œuvre un grand nombre de faisceaux laser se croisant dans un plasma. Les échanges d'énergie laser susceptibles de s'y produire ont récemment été pris en compte au moyen d'un modèle simplifié. Validé par des simulations particulières de référence, ce modèle a permis avec succès l'interprétation d'une expérience de croisement de faisceaux réalisée au Laboratoire pour l'utilisation des lasers intenses (LULI).

La fusion thermonucléaire par confinement inertiel consiste à comprimer fortement une capsule millimétrique contenant des isotopes de l'hydrogène, jusqu'à atteindre des températures et densités extrêmes permettant la fusion des noyaux atomiques. Dans le schéma dit d'attaque indirecte, la capsule est située au centre d'une cavité en or. La pression initiant la compression est due au rayonnement X produit lors de l'interaction entre les lasers et la paroi de la cavité. La compréhension et la modélisation de la propagation et de l'interaction des lasers avec le plasma sont donc essentielles, afin d'estimer au mieux l'énergie nécessaire pour atteindre la fusion thermonucléaire de la cible. À ce jour, la modélisation précise des lasers dans la cavité, prenant en compte à la fois les effets hydrodynamiques et cinétiques, reste difficilement atteignable malgré les puissances de calcul actuelles. Cependant, le développement de modèles simplifiés permet de pallier ce problème, comme la suite de cet article le montre en ce qui concerne l'échange d'énergie entre faisceaux laser.

Lorsque deux ou plusieurs faisceaux laser se croisent dans un plasma, un réseau d'interférence apparaît, comme illustré sur la [figure 1a](#). La figure d'interférence créée par le battement des lasers imprime alors une modulation des densités ionique et électronique, comme un réseau, *via* la force dite pondéromotrice, qui est proportionnelle au gradient d'intensité. Pour des lasers de fréquences légèrement différentes dans le référentiel du plasma, le réseau de densité se déplace. Lorsque la vitesse de ce déplacement est proche de la vitesse du son, il se crée une résonance avec une onde acoustique qui dévie les photons du laser de haute fréquence dans la direction du laser de basse fréquence : c'est l'échange

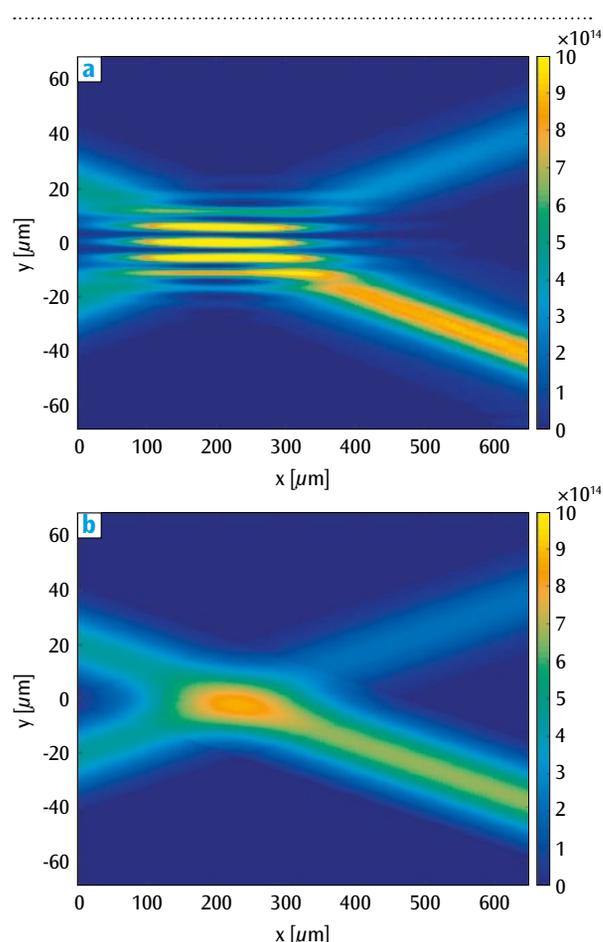


Figure 1. Intensités en W/cm^2 de deux lasers se croisant dans un plasma d'hydrogène calculées avec un code cinétique particulaire (a) et évaluées avec le code Sechel (b). Sur ces figures apparaît le transfert d'énergie d'un laser à l'autre (l'intensité diminue sur l'un, augmente sur l'autre). Le nouveau code Sechel, avec lequel le calcul est 50 000 à 100 000 fois plus rapide qu'avec le code cinétique, permet de reproduire correctement ce transfert.

d'énergie par croisement de faisceaux. Ce phénomène a notamment lieu quand des faisceaux laser de même fréquence se croisent dans un plasma en expansion, dont la vitesse transverse au réseau d'interférence est proche de la vitesse du son (selon l'axe y dans le cas de la **figure 1a**). Le code Sechel [1], pour Simulateur des échanges d'énergie laser, a été développé pour résoudre les équations tridimensionnelles associées au modèle de transfert d'énergie entre un grand nombre de faisceaux laser. Ce code prend en compte la polarisation de chaque faisceau laser ainsi que l'échange non linéaire susceptible de modifier les distributions en intensité des lasers.

Pour valider le code Sechel, les résultats obtenus ont été comparés à ceux d'une simulation cinétique, dans le cas simple du croisement entre deux faisceaux de fréquences légèrement différentes dans un plasma homogène. Les intensités des faisceaux (**figure 1**), qui se propagent de la gauche vers la droite, sont tracées dans le plan de croisement. Le faisceau de plus basse fréquence récupère une partie significative de l'énergie de l'autre faisceau. La comparaison de la simulation cinétique (**a**) à Sechel (**b**) montre un accord plus que raisonnable au regard des approximations faites pour construire le modèle, la simulation cinétique ayant nécessité 2000 cœurs de calcul pendant 24h, contre 32 cœurs pendant moins d'une minute pour Sechel.

Pour comprendre les effets transitoires d'échange d'énergie ainsi que la déformation des intensités laser, une expérience de croisement entre deux faisceaux dans un plasma en expansion a été réalisée au LULI [2]. Un faisceau dit de chauffage est utilisé pour faire exploser une feuille de Mylar (**figure 2**). Dans un second temps, un faisceau nanoseconde (ns) et un picoseconde (ps) de même fréquence sont croisés dans la zone où le plasma se détend vers la

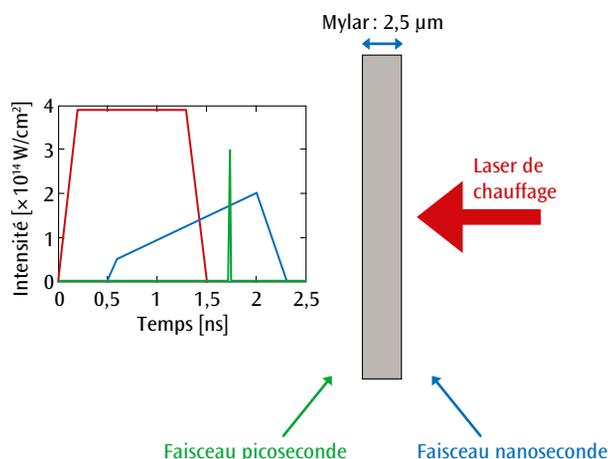


Figure 2. Schéma expérimental du croisement de faisceaux. Le laser de chauffage (en rouge), fait exploser la feuille micrométrique de Mylar, puis deux autres faisceaux, nanoseconde (bleu) et picoseconde (vert), se croisent dans le plasma en expansion. La synchronisation des faisceaux est indiquée dans le graphique.

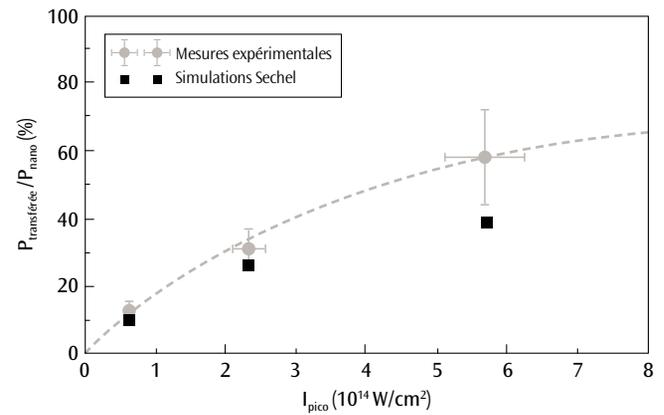


Figure 3. Ratio des puissances laser échangées entre les faisceaux picoseconde et nanoseconde en fonction de l'intensité laser du faisceau picoseconde de durée 12 ps. La courbe en pointillés illustre la tendance des points expérimentaux. La puissance échangée, jusqu'à 60 % ici, croît avec l'intensité laser et est correctement reproduite par le modèle Sechel.

droite à la vitesse du son. Dans ce cas de figure, les faisceaux ps et ns sont respectivement décalés vers le rouge et vers le bleu dans le référentiel du plasma. L'échange d'énergie se produit donc du faisceau ns vers le faisceau ps. Ce résultat est bien illustré sur la **figure 3** par l'évolution de la puissance transférée en fonction de l'intensité du faisceau ps pour une durée d'interaction de 12 ps. La puissance échangée croît avec l'intensité laser et est correctement reproduite par le modèle. De très grands échanges d'énergie peuvent avoir lieu – ici jusqu'à 60 %. L'expérience a par ailleurs démontré pour la première fois que les propriétés spatiales des taches laser sont bien modifiées après échanges – une caractéristique également reproduite par Sechel [2].

En résumé, un nouveau modèle a été développé pour décrire l'échange d'énergie laser lors du croisement de faisceaux. Le code associé a été validé numériquement avec des simulations particulières, lourdes à mettre en œuvre, mais incluant toute la physique en jeu. Le code a ensuite été utilisé avec succès pour interpréter une expérience de croisement de faisceaux de même fréquence dans un plasma en écoulement. Cette dernière a permis d'étudier l'évolution temporelle et spatiale du transfert d'énergie, et de montrer que, outre les échanges d'énergie potentiellement importants (~60 %), l'échange d'énergie induit une déformation de la tache laser.

Références

- [1] D. MARION, A. DEBAYLE, P.-E. MASSON-LABORDE, P. LOISEAU, M. CASANOVA, "Modeling crossed-beam energy transfer for inertial confinement fusion", *Phys. Plasmas*, **23**, 052705 (2016).
- [2] C. NEUVILLE *et al.*, "Spatial and transient effects during the amplification of a picosecond pulse beam by a nanosecond pump", *Phys. Rev. Lett.*, **117**, 145001 (2016).

Progrès marquants dans la compréhension de la fusion par confinement inertiel en attaque directe

S. LAFFITE - B. CANAUD - V. BRANDON - J.-L. BOURGADE - T. CAILLAUD - F. GIRARD - O. LANDOAS - S. LEMAIRE - L. MASSE - P. E. MASSON-LABORDE - F. PHILIPPE - C. REVERDIN - V. TASSIN / CEA – DAM Île-de-France
 G. LEGAY / CEA – Valduc
 M. TEMPORAL / ENS Cachan
 J. DELETTREZ - V. GLEBOV - T. MICHEL - W. SEKA / Laboratory for Laser Energetics, Rochester, États-Unis

Des progrès marquants dans la connaissance de la physique de l'implosion des cibles laser ont été récemment enregistrés grâce à des études complémentaires, expérimentales et numériques. D'une part, une campagne expérimentale dédiée à l'étude de l'implosion, sur le laser Omega à Rochester, a permis de prouver notre capacité à maîtriser une implosion ablative. D'autre part, la recherche systématique de points de fonctionnement à haut gain, par des simulations sur des familles de cibles, a permis de préciser les conditions d'inflammation.

La fusion par confinement inertiel consiste à comprimer fortement une capsule millimétrique en plastique contenant un mélange de deutérium et de tritium (DT). Si la compression est suffisante et si les instabilités ne dégradent pas trop la capsule, les atomes de deutérium et de tritium fusionnent, produisant une énergie importante. Deux voies sont suivies à l'heure actuelle pour mettre en condition le DT. Soit on comprime directement la capsule par des faisceaux laser disposés le plus symétriquement possible : c'est l'attaque directe ; soit on utilise les faisceaux laser pour chauffer une cavité en or qui va produire suffisamment de rayons X pour comprimer la capsule en son centre : c'est l'attaque indirecte.

Des progrès notables en attaque directe ont été réalisés dans l'installation laser Omega à Rochester, aux États-Unis. En particulier une expérience, pilotée par le CEA et intitulée Chronomix, a permis de tester la stabilité de l'implosion vis-à-vis de sa résistance à tous types de défauts, générés soit par l'illumination laser, soit par la cible [1]. La **figure 1** compare le « bang-time » (instant d'émission neutronique) prévu par les modèles théoriques avec celui effectivement mesuré pour différentes conditions. On peut constater le très bon accord et donc le haut niveau de prédictibilité de l'implosion caractéristique de l'attaque directe.

La maîtrise de la chronométrie des implosions étudiées lors de la campagne Chronomix se vérifie quelle que soit la forme de l'impulsion. En revanche,

la stabilité de l'implosion dépend clairement de la forme de l'impulsion.

Une impulsion courte, parce qu'elle dépose plus d'entropie dans la coquille, conduit à des configurations stables. Les performances mesurées de la cible, en premier lieu la production neutronique, sont alors très proches, 80 % environ, de la prévision. À l'inverse, pour une impulsion laser mise

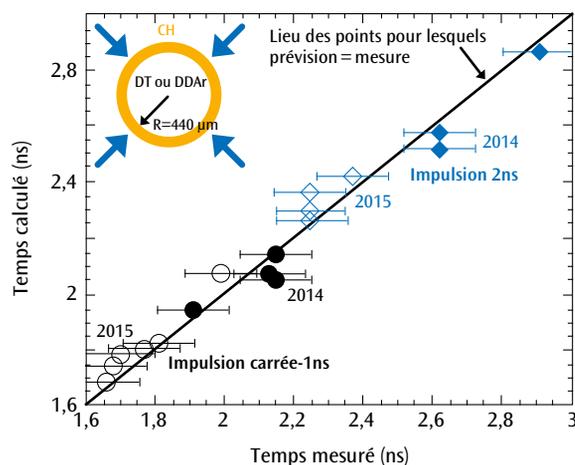


Figure 1. Instants d'émission neutronique, ou « bang-time », calculés en fonction des « bang-time » mesurés, pour des impulsions carrées de 1 ns et 2 ns (11 et 23 kJ) (losanges foncés et clairs). Le « bang-time » est la mesure la plus directe de la vitesse d'implosion. L'excellent accord entre la prédiction et la mesure prouve la bonne maîtrise d'une implosion ablative à cette échelle.

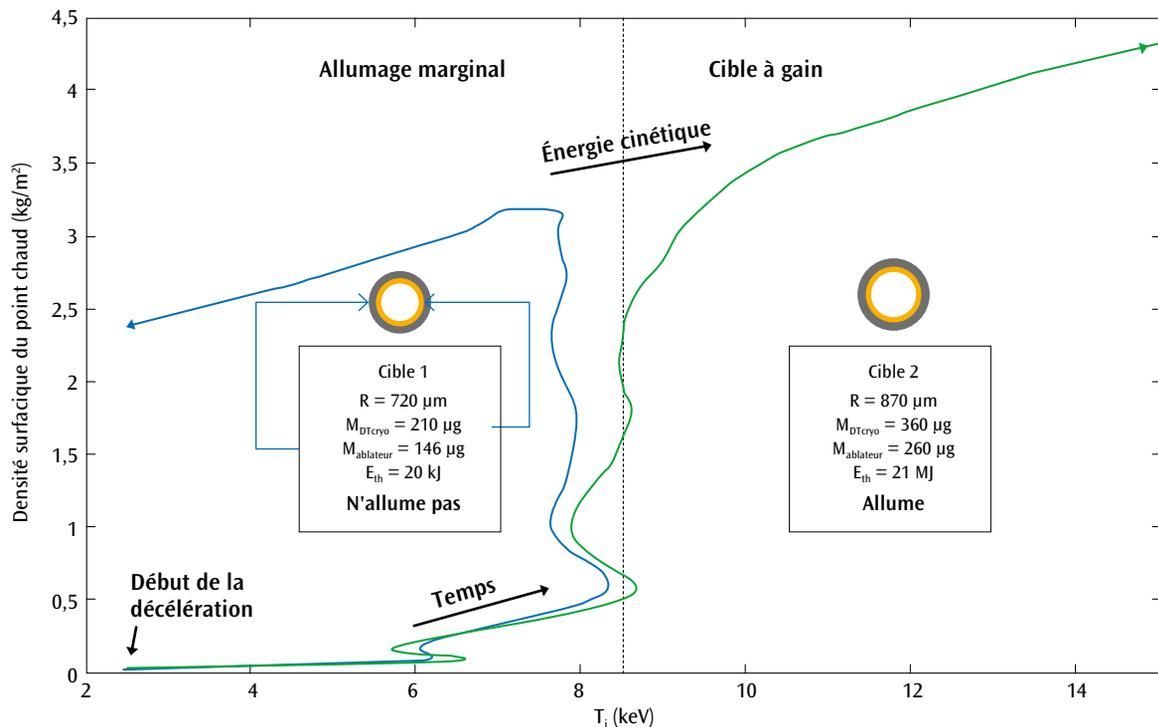


Figure 2. Densité surfacique du point chaud ρ , en fonction de la température du point chaud T_i , montrant les chemins thermodynamiques dans le plan (T_i, ρ) pour deux cibles homothétiques correspondant à un rapport d'aspect initial $A=3$ et une vitesse d'implosion $v=300$ km/s. Une des cibles ne va pas allumer tandis que l'autre, pourtant très voisine au démarrage, va brûler : à gauche, la cible la plus petite (rayon $R=720$ μm) avec 146 μg de matériau ablateur (en gris sur le schéma de la cible) et 210 μg de deutérium-tritium cryogénique (en orange) ne parvient pas à s'allumer, tandis que l'autre, pourtant très voisine au démarrage (respectivement 870 μm , 260 μg et 360 μg), va brûler et donner 21 MJ d'énergie thermonucléaire contre 20 kJ pour celle de gauche.

en forme, plus longue, la configuration devient plus instable et les performances calculées trop optimistes. Le nombre de neutrons mesuré ne représente plus alors que 25 % de la prédiction.

Toute la question est d'arriver à allumer les réactions de fusion, à partir d'un point chaud, de manière à produire plus d'énergie que ce que l'on a investi (notion de gain). Or, l'allumage du point chaud est un mécanisme à seuil qui dépend de l'inverse de la vitesse d'implosion à la puissance dix, du paramètre d'entropie (coefficient adiabatique) au cube, du carré du rapport des pressions dans le combustible froid et le point chaud, et enfin des conditions d'inflammation du point chaud (dépendant elles-mêmes de la température du point chaud et de sa densité surfacique) au cube. Une étude systématique [2], basée sur des calculs à partir de familles de cibles homothétiques et de différents rapports d'aspect, a permis de préciser ces paramètres et de bien distinguer les différentes conditions d'allumage. Le chemin thermodynamique parcouru par le point chaud durant la phase de décélération a été étudié en détail au cours du temps pour toutes ces cibles [3] (figure 2). Il apparaît clairement une séparation entre les cibles allumant marginalement et les cibles à gain, pour une même famille homothétique définie par sa vitesse d'implosion.

En conclusion, ces études complémentaires, expérimentales et numériques ont permis des progrès marquants dans la connaissance de la physique de l'implosion. D'une part, le choix d'une campagne spécifique dédiée à l'étude de l'implosion a permis de prouver notre capacité à maîtriser une implosion ablative à l'échelle Omega. D'autre part, la recherche systématique de points de fonctionnement à haut gain, entreprise depuis plusieurs années, a fourni un éclairage prometteur sur le fonctionnement d'une cible et notamment sur les conditions d'inflammation du point chaud. Ces deux études s'inscrivent dans la stratégie pour l'implosion de cibles sur le LMJ dont elles constituent un des éléments du programme.

Références

- [1] S. LAFFITE *et al.*, "Time history prediction of direct-drive implosions on the Omega facility", *Phys. Plasmas*, **23**, 012706 (2016).
- [2] V. BRANDON, B. CANAUD, M. TEMPORAL, R. RAMIS, "Low initial aspect-ratio direct-drive target designs for shock- or self-ignition in the context of the laser Megajoule", *Nucl. Fusion*, **54**, 083016 (2014).
- [3] V. BRANDON, B. CANAUD, M. TEMPORAL, R. RAMIS, "Thermodynamic properties of thermonuclear fuel in inertial confinement fusion", *Laser & Particle Beams*, **34**, p. 539-544 (2016).

Mise en évidence d'instabilités de Kelvin-Helmholtz dans les cavités d'ignition laser

■ M. VANDENBOOMGAERDE - M. BONNEFILLE - A. GRISOLLET - P. GAUTHIER / CEA – DAM Île-de-France

Les expériences américaines de fusion par confinement inertiel font systématiquement apparaître un déficit de vitesse d'implosion de la capsule par rapport aux simulations numériques. Une des raisons de ce déficit est le rendement insuffisant de la cavité de conversion chargée de transformer l'énergie laser en rayonnement X. Cet article expose en détail la dynamique de la paroi de la cavité. Les simulations réalisées montrent le caractère instable de l'interface entre la paroi de la cavité et le gaz qui remplit cette dernière. Ces instabilités de Kelvin-Helmholtz [1] pourraient contribuer à la dégradation du rendement de conversion X.

La fusion par confinement inertiel (FCI) en attaque indirecte est conditionnée par le chauffage laser de l'intérieur d'une cavité en or. L'énergie laser absorbée par les parois est convertie en rayonnement X. Ce rayonnement inonde la cavité et vaporise la surface d'une petite capsule placée au centre de la cavité. Ce microballon est constitué d'une coquille de plastique qui retient un mélange de deutérium (D) et de tritium (T). Par réaction à l'ablation de sa surface, la coquille en plastique implose, comprimant ainsi le DT fusible. Si le rayonnement X de la cavité est suffisant, la compression résultante doit permettre aux réactions de fusion de s'enclencher au centre du microballon ; l'ignition est ainsi atteinte.

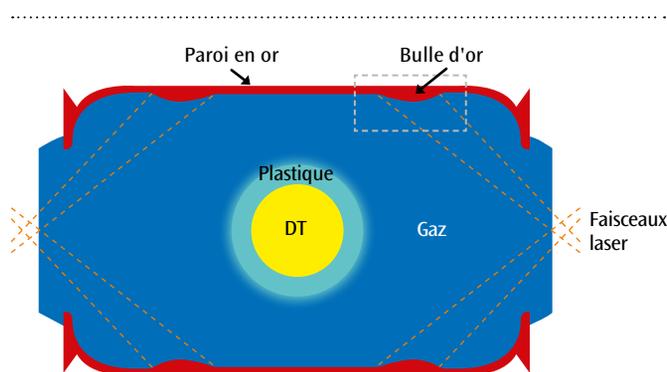


Figure 1. Schéma de principe d'une cavité d'ignition. Le combustible, mélange de deutérium et de tritium, est encapsulé dans une coquille de plastique. La surface de cette dernière est ablatée par le rayonnement X issu de la conversion de l'énergie laser absorbée par les parois d'or de la cavité. À l'endroit des impacts laser, une bulle de plasma d'or se crée. La longueur de la cavité est de l'ordre de 9 mm pour un diamètre de l'ordre de 6 mm. Le rayon extérieur de la coquille est de l'ordre de 1 mm.

Un effet collatéral de l'absorption du laser par les parois en or est la génération, à l'endroit de l'impact laser, d'une bulle de plasma d'or (**figure 1**). Afin de limiter la détente de cette bulle, la cavité est généralement remplie d'un gaz. Ce dernier freine le plasma en expansion et empêche sa concentration sur l'axe de la cavité.

Un résultat récurrent des études d'ignition par laser menées aux États-Unis est que les simulations numériques prévoient des rendements bien supérieurs à ce qui est observé dans les expériences. Pour rapprocher les résultats numériques des observations, il est désormais coutumier de réduire artificiellement la puissance laser dans les calculs sans qu'une justification théorique étayée de cet abattement puisse pour autant être proposée. Cette diminution est de l'ordre de 15 à 20 % pour des tirs laser américains standards. Les mécanismes qui sont envisagés pour expliquer le faible rendement des campagnes d'ignition sont la rétrodiffusion de l'énergie laser, l'apparition d'électrons chauds ou de la turbulence au sein de la cavité.

Cette étude du CEA – DAM s'intègre au sein d'un effort global de la communauté scientifique pour essayer de comprendre la physique manquante ou mal décrite dans les codes de simulation.

Dans l'expérience américaine, l'énergie laser investie dans la cavité est de 957 kJ. La température radiative de la paroi d'or mesurée dans l'expérience par les trous d'entrée du laser est de 270 eV. Les simulations du CEA – DAM donnent une température de 278 eV. Pour réduire cet écart, des simulations avec des maillages beaucoup plus fins, passant de mailles d'une taille de

66 μm à des mailles de 11 μm , ont été réalisées. De plus, un nouveau schéma de remaillage automatique adapté aux détentes de paroi a été utilisé. Ce dernier a la particularité de décrire de façon très précise l'interface entre l'or et le gaz. Si elle n'a pas eu l'effet espéré sur la conversion X de la cavité, cette description plus précise de l'hydrodynamique de la cavité fait émerger des instabilités qui étaient auparavant étouffées par la diffusion numérique. La **figure 2** présente l'interface or/gaz obtenue via ces nouvelles simulations à $t=6$ ns et $t=12$ ns. La durée totale de l'impulsion laser est de l'ordre de 20 ns.

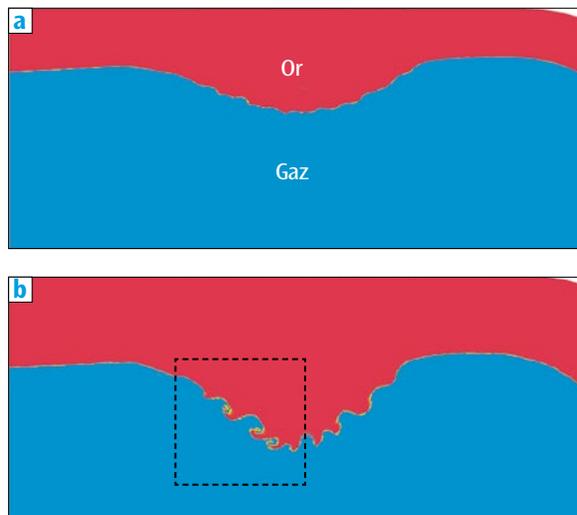


Figure 2. Zoom (rectangle en pointillé de la **figure 1**) sur la bulle d'or générée par l'impact des cônes laser situés au plus près des trous d'entrée laser de la cavité, à $t=6$ ns (**a**) et $t=12$ ns (**b**). Dès $t=6$ ns, des ondulations apparaissent à l'interface or/gaz. Il s'agit ici de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz. Celle-ci continue de se développer jusqu'à former des enroulements conduisant éventuellement à de la turbulence.

Comme le montre la **figure 3** qui détaille les structures de l'interface à 12 ns, des enroulements caractéristiques de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz sont observés. La longueur d'onde typique de ces enroulements est de l'ordre de 170 μm . Sous l'effet combiné de l'expansion de la bulle et de sa rencontre avec le gaz, un écoulement en cisaillement apparaît à l'interface or/gaz : le gaz est expulsé sur les côtés de la bulle alors que le plasma d'or se dirige vers le sommet de la bulle. Par la suite, la bulle est freinée par le gaz et les instabilités d'interface sont de plus soumises à l'instabilité de Rayleigh-Taylor [2]; cette dernière apparaît lorsqu'un matériau léger (ici le gaz) freine un matériau lourd (ici le plasma d'or).

L'instabilité de Kelvin-Helmholtz peut produire des structures turbulentes au niveau des enroulements. Un moyen classique d'estimer

la potentialité d'apparition de la turbulence au sein d'un écoulement est de calculer le nombre de Reynolds de cet écoulement. Si ce dernier est élevé (typiquement supérieur à 10^5 - 10^6), l'écoulement a toutes les chances d'être turbulent. Une estimation issue des simulations donne une valeur du nombre de Reynolds de 5×10^6 au sein des enroulements de Kelvin-Helmholtz.

Ainsi, pour la première fois, de nouvelles simulations numériques, faisant intervenir une discrétisation très fine de la géométrie et une méthode de remaillage originale, ont permis de mettre en évidence le caractère instable de l'hydrodynamique de la paroi d'or dans des cavités d'ignition à gaz [3]. La zone turbulente potentiellement créée par de telles instabilités pourrait expliquer une partie de la dégradation de la conversion X de la paroi de la cavité en modifiant absorption laser et conduction électronique. Les études actuelles se portent donc vers la stabilisation de cette interface or/gaz dans les cavités de FCI.

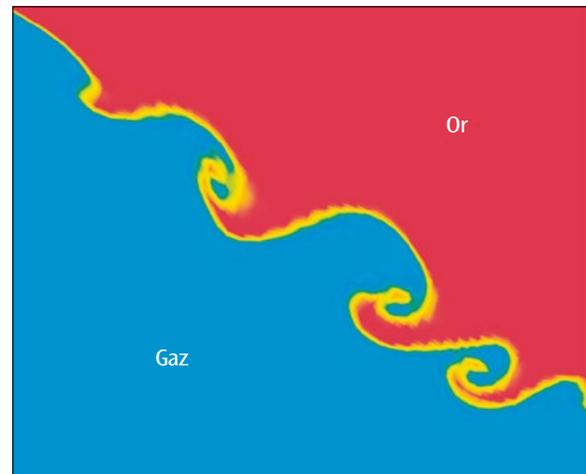


Figure 3. Zoom (rectangle en pointillé de la **figure 2**) sur les enroulements de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz à l'interface or/gaz. La longueur d'onde de ces enroulements est de l'ordre de 170 μm .

Références

- [1] L. KELVIN, *Hydrodynamics and general dynamics*, Cambridge University Press, England (1910).
- [2] G. TAYLOR, "The Instability of Liquid Surfaces when Accelerated in a Direction Perpendicular to their Planes", *Proc. R. Soc. London A*, **201**, p. 192-196 (1950).
- [3] M. VANDENBOOMGAERDE, M. BONNEFILLE, P. GAUTHIER, "The Kelvin-Helmholtz instability in National Ignition Facility hohlraums as a source of gold-gas mixing", *Phys. Plasmas*, **23**, 052704 (2016).

La structure des plasmas denses revisitée

J. CLÉROUIN - P. ARNAULT - N. DESBIENS - V. DUBOIS / CEA – DAM Île-de-France
 C. TICKNOR - L. COLLINS - J. KRESS / Los Alamos National Laboratory, États-Unis

De nouvelles expériences ont permis de mesurer la structure de plasmas denses, comprimés au-delà du solide et chauffés à quelques dizaines de milliers de kelvins. Cet article montre que la structure de ces plasmas est bien reproduite par un modèle simple de répulsion purement coulombienne à courte distance, mais reste en accord, à longue distance, avec les théories d'écrantage classiques.

Les plasmas sont omniprésents dans l'Univers et constituent 99 % de la matière. Ceux que l'on rencontre dans le cœur des étoiles, des planètes géantes ou encore dans les expériences de fusion par confinement inertiel relèvent des plasmas denses, car les interactions entre atomes ionisés y sont prédominantes.

Comme le gaz parfait pour les gaz, il existe un modèle limite pour les plasmas : le plasma à une composante (*one component plasma* en anglais, OCP). Rappelons qu'un plasma est constitué d'atomes de numéro atomique Z qui ont perdu un certain nombre Q d'électrons (ionisation). Les ions sont donc chargés positivement Q fois et sont immergés dans un fond électronique de densité

$n_e = Q \times n_i$, si n_i est la densité ionique en nombre. Si cette densité électronique est très grande, c'est-à-dire si la température de Fermi ($T_F \sim n_e^{2/3}$) est très supérieure à la température électronique T , on parle d'électrons totalement dégénérés et on peut ignorer les interactions électron-ion, car les électrons sont tous bloqués dans leurs cases quantiques (blocage de Pauli). Le plasma se réduit alors à sa seule composante ionique, d'où le modèle OCP à une composante. L'intérêt de ce modèle est de ne dépendre que d'un seul paramètre, le paramètre de couplage sans dimension $\Gamma = Q^2 e^2 / (a \cdot k_B \cdot T)$, où $a = (3/4 \cdot \pi \cdot n_i)^{1/3}$ est la distance moyenne entre particules, k_B la constante de Boltzmann et e la charge élémentaire. Quand ce paramètre varie, le système parcourt toutes les

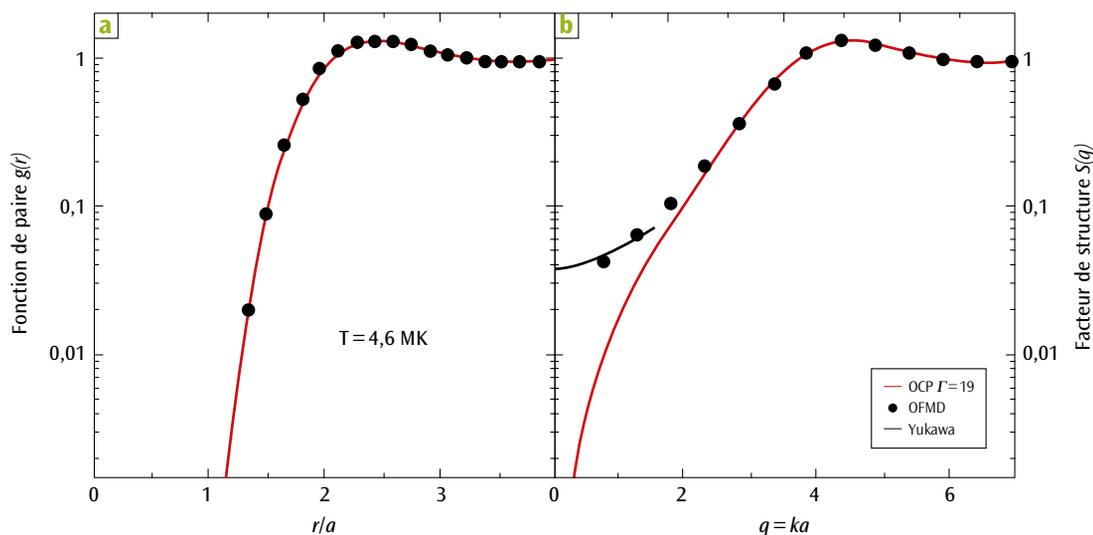


Figure 1. (a) Fonction de distribution de paire $g(r)$ et (b) facteur de structure $S(q)$ d'un plasma de tungstène à 40 g/cm^3 et $4,6 \text{ MK}$, calculé par le code de dynamique moléculaire sans orbitales OFMD (points noirs) et comparé au modèle de plasma à une composante OCP à $\Gamma = 19$ (courbe rouge). La courbe noire représente le comportement aux petits q ($q = k \times a$) pour le potentiel de Yukawa correspondant. La structure obtenue par simulation est très bien reproduite par un OCP analytique, sauf à longue distance (petit q) où l'écrantage réapparaît.

structures, depuis le gaz cinétique ($\Gamma \ll 1$) jusqu'au solide ($\Gamma \geq 178$), en passant par le liquide dense.

Bien sûr, le plasma à une composante OCP est un cas limite et, dès lors que la dégénérescence est partielle, il y a polarisation des électrons autour des ions et écrantage des interactions. Le calcul de cet écrantage se fait dans le cadre de la théorie de Debye, linéarisée autour de la densité électronique moyenne n_e , et aboutit au potentiel de Yukawa $Q^2 e^2 / r \cdot \exp[-r/\lambda_D]$. La longueur λ_D est appelée longueur de Debye.

Voilà donc la représentation des plasmas denses, telle qu'elle est enseignée dans les universités. Deux avancées majeures sont en train de bouleverser cette *doxa*:

- ▶ on sait maintenant simuler, avec les codes de dynamique moléculaire sans orbitales (OFMD), des systèmes denses dans une très large gamme de températures (jusqu'à quelques millions de kelvins) sans faire d'hypothèse sur l'ionisation;

- ▶ de nouvelles expériences ont été réalisées aux États-Unis, sur l'accélérateur de Stanford et sur l'installation laser Omega à Rochester. Ces expériences combinent des lasers pour comprimer la matière et des sources X pour la sonder. On obtient ainsi la structure ionique avec la figure de diffrac-

tion X et les caractéristiques électroniques du plasma (densité et température) avec la diffusion Thomson dans le domaine X.

Que ce soit dans les simulations ou dans les expériences, il apparaît que le plasma est bien plus structuré que ce qu'un potentiel de Yukawa prédit. À tel point que pour interpréter les expériences, certains auteurs ajoutent à ce potentiel une répulsion *ad hoc* en $(1/r)^4$, qui est prépondérante et qui, au final, produit des structures très proches d'un OCP.

Dans l'article [1], nous montrons que les structures obtenues par les simulations peuvent être reproduites par la structure d'un OCP convenablement choisi.

Sur la **figure 1a** est tracée la fonction de paire $g(r)$ qui caractérise la structure dans l'espace réel, calculée par le code OFMD, pour du tungstène comprimé à deux fois la densité normale et chauffé à 4,6 MK (points noirs). Le $g(r)$ est quasiment confondu avec celui généré par un OCP à $\Gamma = 19$ (courbe continue rouge). Par contre, le facteur de structure $S(q)$, qui mesure l'ordre dans l'espace réciproque, est en désaccord à petit q (longues distances) avec l'OCP. La courbe en noir, utilisant le potentiel de Yukawa, corrige ce désaccord.

Autrement dit, si un plasma est beaucoup plus structuré à courte distance que ce que les théories linéaires prédisent, celles-ci redeviennent valables à longue distance [1].

Expérimentalement, cela se vérifie aussi. Le $S(q)$ mesuré dans les expériences peut se modéliser très simplement par un facteur de structure OCP. Cette dernière observation est mise à profit dans un protocole permettant d'analyser les spectres de diffraction X à l'aide d'un générateur de facteur de structure OCP analytique [2] et d'une analyse bayésienne du signal expérimental [3] (**figure 2**), qui permet d'obtenir très rapidement les densité et température du plasma.

Ce travail a été en partie effectué dans le cadre de la collaboration DAM/NNSA Basic Science P184

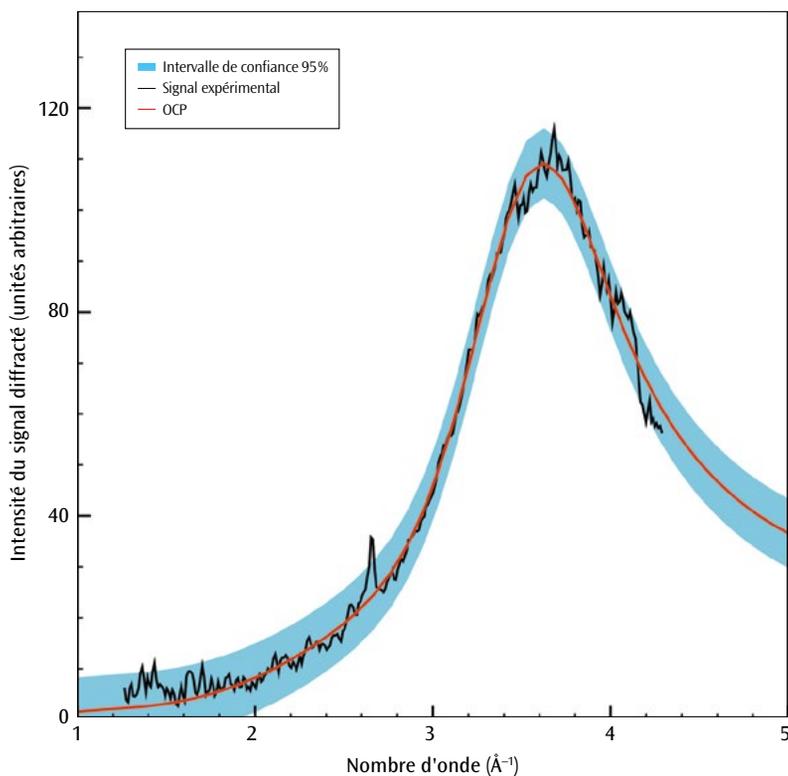


Figure 2. Pic de diffraction X de l'aluminium comprimé à 6 g/cm^3 et à 20 000 K. En noir, signal expérimental et, en rouge, ajustement obtenu avec le modèle OCP de plasma à une composante. L'ajustement bayésien permet d'obtenir la densité et la température du plasma avec un intervalle de confiance donné (ici 95 %, courbe bleue).

Références

- [1] J. CLÉROUIN, P. ARNAULT, C. TICKNOR, J. KRESS, L. COLLINS, "Unified Concept of Effective One Component Plasma for Hot Dense Plasmas", *Phys. Rev. Lett.*, **116**, 115003 (2016).
- [2] N. DESBIENS, P. ARNAULT, J. CLÉROUIN, "Parametrization of pair correlation function and static structure factor of the one component plasma across coupling regimes", *Phys. Plasmas*, **23**, 092120 (2016).
- [3] J. CLÉROUIN, N. DESBIENS, V. DUBOIS, P. ARNAULT, "Bayesian inference of x-ray diffraction spectra from warm dense matter with the one-component-plasma model", *Phys. Rev. E*, **94**, 061202(R) (2016).

Cinétique chimique et relaxation de plasmas d'air hors équilibre générés par des photons et électrons énergétiques

M. RIBIÈRE - M. MAULOIS / CEA – Gramat

O. EICHWALD - M. YOUSFI / Laboratoire plasma et conversion d'énergie (LAPLACE), UMR 5213 CNRS – Université Paul-Sabatier - INP Toulouse

La cinétique chimique d'un plasma d'air produit par un flux de rayonnement X impulsionnel intense a été modélisée selon un schéma prenant en compte 39 espèces intervenant dans 265 réactions. Les évolutions temporelles des espèces sont calculées de façon couplée avec la densité d'énergie des électrons. Les termes sources intervenant dans le calcul de la densité d'énergie des électrons et conduisant à l'activation des réactions chimiques ont été calculés à partir du flux du rayonnement X incident considéré. Les évolutions temporelles des densités obtenues ont été utilisées comme paramètres d'entrée d'un calcul de transport d'une onde électromagnétique dans le plasma d'air. Ces résultats ont été comparés à des mesures d'absorption d'ondes électromagnétiques dans le domaine du gigahertz, effectuées par irradiation d'un volume d'air contenu dans un guide d'onde avec le générateur de rayonnement X impulsionnel ASTERIX du CEA – Gramat.

La physique de l'interaction entre un flux d'électrons énergétiques et un gaz, ainsi que la cinétique chimique du plasma produit constituent une problématique rencontrée dans différents domaines d'application, comme le transport de faisceaux d'électrons [1], les perturbations électromagnétiques induites par rayonnement X impulsionnel intense, ou effets SGEMP (System Generated ElectroMagnetic Pulse) [2], ou encore la radiographie éclair [3]. Le plasma produit peut, si sa conductivité électrique est supérieure à 10^{-4} - 10^{-3} S/m, modifier la propagation des champs électromagnétiques associés au faisceau d'électrons incident, modifiant ainsi les propriétés énergétiques et directionnelles de ce dernier.

De façon à quantifier avec précision la génération et la propagation des champs électromagnétiques dans l'air ionisé, une modélisation de la cinétique chimique induite par l'interaction entre un rayonnement X impulsionnel et l'air ambiant a été mise en œuvre. L'objectif est de quantifier les perturbations électromagnétiques produites par le générateur ASTERIX implanté au CEA – Gramat [4]. Le rayonnement X produit par ASTERIX possède une énergie moyenne de 1 MeV et produit deux populations d'électrons primaires en interagissant avec l'air: une population d'électrons primaires non relativistes et une population relativiste. Cette dernière produira des électrons secondaires de plus faibles énergies

par ionisation collisionnelle avec les molécules constitutives de l'air irradié (N_2 , O_2 , H_2O).

Grâce au modèle, et pour une fluence photonique incidente égale à 10^{13} cm^{-2} , l'évolution temporelle de la densité des électrons ainsi que de leur énergie moyenne a été calculée, et est représentée sur la **figure 1**. L'énergie moyenne des électrons augmente très rapidement (avec un temps caractéristique de l'ordre de 10 ns) et atteint un maximum d'environ 4,5 eV à 60 ns, avant de décroître progressivement.

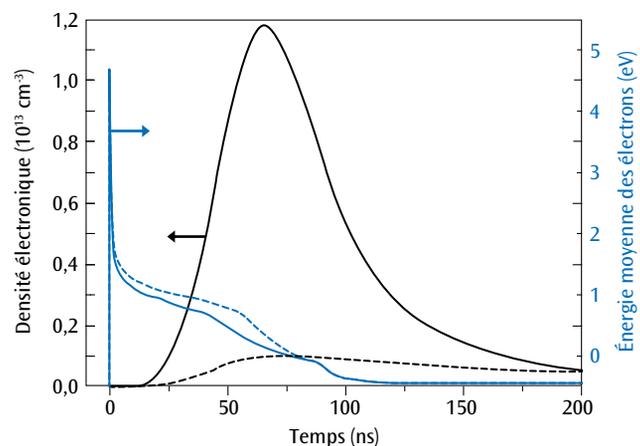


Figure 1. Évolution temporelle calculée de la densité et de l'énergie moyenne des électrons, issue du calcul de cinétique chimique. Les courbes en trait continu représentent les calculs tenant compte des électrons primaires relativistes et non relativistes, les courbes en trait discontinu représentent les calculs tenant compte des électrons primaires non relativistes uniquement.

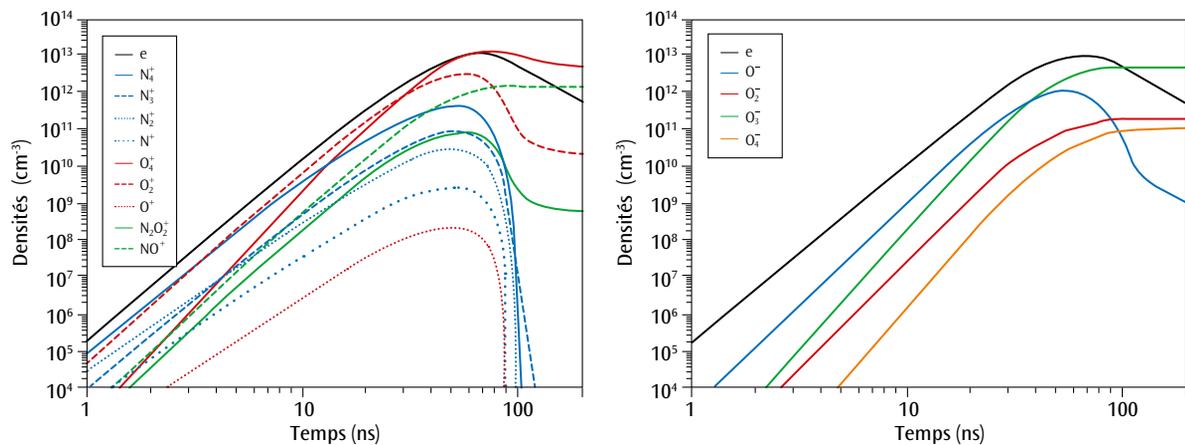


Figure 2. Évolutions temporelles calculées des densités des ions majoritaires positifs (à gauche) et négatifs (à droite). Les ions majoritaires sont : O^- , O_3^- , O_2^+ , NO^+ et O_4^+ .

téristique de l'ordre de la nanoseconde) du fait de la forte densité d'énergie apportée par le flux d'électrons Compton d'une part, et de la faible densité électronique aux premiers instants d'autre part. Puis, l'action conjointe de la rapide augmentation de la densité électronique par ionisation collisionnelle induite par les électrons primaires, et de la diminution de la densité d'énergie des électrons, du fait notamment de l'excitation vibrationnelle de N_2 , conduit à une diminution rapide de l'énergie moyenne en dessous des seuils d'ionisation, situés autour de 1 eV.

La **figure 2** représente les évolutions temporelles des ions majoritaires positifs (à gauche) et négatifs (à droite). Les calculs montrent, d'une part, que le plasma possède un degré d'ionisation très faible ($\sim 10^{-7}$), et d'autre part que les ions majoritaires sont : O^- , O_3^- , O_2^+ , NO^+ et O_4^+ .

Une première validation du modèle a été effectuée grâce à des mesures d'absorption d'ondes électromagnétiques se propageant dans un guide d'onde rempli d'air [5]. La connaissance de l'évolution temporelle de la densité électronique ainsi que celle de l'énergie moyenne permettent de calculer l'évolution temporelle du coefficient d'absorption du plasma en imposant comme paramètres d'entrée : la fréquence de l'onde électromagnétique incidente, la fraction massique de vapeur d'eau et le profil spatial de la fluence photonique selon la direction de propagation de l'onde. Cette première validation du modèle, basée sur la comparaison entre les calculs et les mesures de la densité électronique, présente des écarts attribués à la modélisation de la propagation de l'onde dans le guide contenant le plasma d'air. Une deuxième étape de validation mettant en œuvre des simulations numériques

haute performance avec le code Maxwell-Vlasov SOPHIE du CEA – DAM [6] est en cours et permettra la détermination précise de la conductivité électrique radio-induite de plasmas d'air, pour un flux de rayonnement X et une pression donnés.

Ces données physiques permettront de modéliser la cinétique chimique de l'air dans les codes de calcul électromagnétique haute performance pour l'étude de la vulnérabilité de systèmes électroniques complexes sous irradiation.

Références

- [1] D. R. WELCH *et al.*, "Transport of a relativistic electron beam in gas and plasma-filled focusing cells for X-ray radiography", *Phys. Plasmas*, **11**, p. 751 (2004).
- [2] M. RIBIÈRE *et al.*, "Investigating the electron density of multi-MeV X-ray-induced air plasmas at low pressures based on electromagnetic resonant cavity analysis", *Phys. Plasmas*, **23**, 122106 (2016).
- [3] N. BENNETT *et al.*, "The impact of plasma dynamics on the self-magnetic-pinch diode impedance", *Phys. Plasmas*, **22**, 033113 (2015).
- [4] M. RIBIÈRE *et al.*, "Contribution of electromagnetic perturbation to the transient response of an electronic circuit exposed to a high multi-MeV X-ray flux", *Trans. Nucl. Sci.*, **62**, p. 1383 (2015).
- [5] M. MAULOIS *et al.*, "Experimental and numerical investigations of air plasmas induced by multi-MeV pulsed X-ray from low to atmospheric pressures", *J. Appl. Phys.*, **120**, 123302 (2016).
- [6] O. CESSNAT, "Sophie, un code de calcul haute performance pour la propagation des ondes et particules chargées", *chocs*, **44**, p. 25 (2013).

Dynamique de formation des chocs non collisionnels induits par l'instabilité de Weibel

C. RUYER - L. GREMILLET / CEA – DAM Île-de-France

G. BONNAUD / CEA – Saclay

C. RICONDA / Laboratoire pour l'utilisation des lasers intenses (LULI), UMR 7605 CNRS – CEA – École polytechnique – Université Pierre-et-Marie-Curie, Palaiseau

Les instabilités électromagnétiques induites dans l'interaction de plasmas à grande vitesse peuvent engendrer des chocs dits non collisionnels, dans lesquels les interactions onde-particule se substituent aux collisions coulombiennes usuelles. Ces structures, auxquelles on attribue l'origine des rayons cosmiques dans divers contextes astrophysiques, paraissent désormais à la portée d'expériences laser. Cet article relate l'étude des conditions de formation à l'aide de simulations cinétiques et propose un modèle analytique reproduisant les résultats numériques.

Les micro-instabilités cinétiques induites lors de collisions de plasmas à grande vitesse sont un sujet fondateur de la physique des plasmas. Leur omniprésence dans les plasmas naturels et artificiels a motivé un nombre considérable d'études au cours des dernières décennies. Une classe spécifique d'instabilités, identifiée par Weibel [1] et qui se manifeste par la formation de filaments magnétisés, suscite un intérêt de longue date en raison de son influence sur le transport des particules dans l'interaction laser-plasma ainsi que dans des systèmes astrophysiques de haute énergie (supernovae, vents stellaires ou

de pulsars, etc.), où elle contribue également à la génération de particules de très haute énergie, les rayons cosmiques [2]. Dans ce dernier cas, le scénario envisagé est le suivant : les filaments électromagnétiques induits par l'instabilité de Weibel lors du télescopage de deux plasmas à grande vitesse (>1000 km/s) défléchissent et ralentissent ceux-ci, jusqu'à la création d'une onde de choc si la durée d'interaction est assez longue. On parle alors de choc non collisionnel, car les fluctuations électromagnétiques y assurent la dissipation habituellement causée en hydrodynamique par les collisions coulombiennes. De

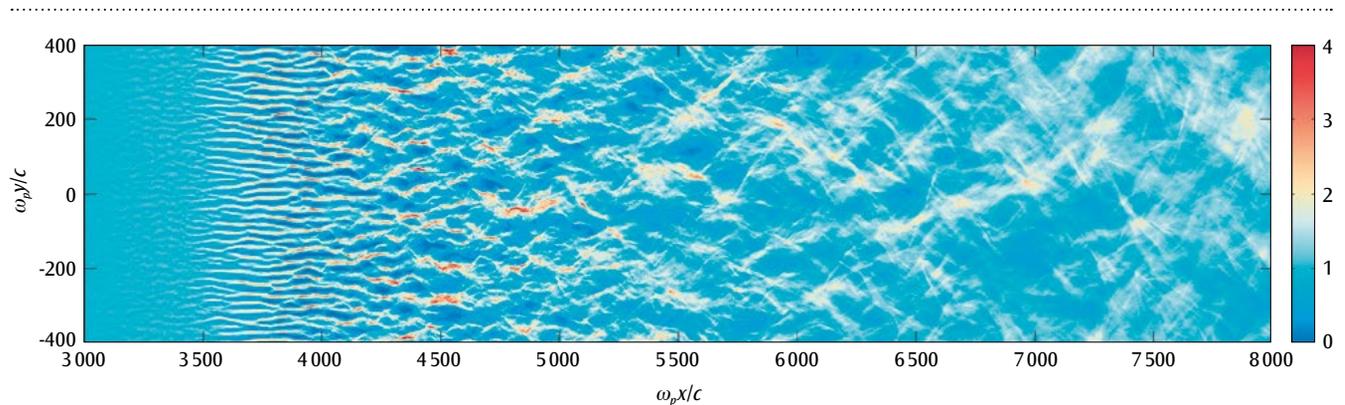


Figure 1. Simulation de type particle-in-cell de la collision entre deux plasmas symétriques de vitesses $\pm 0,4 c$ (où c est la vitesse de la lumière) et pour un rapport des masses électron-ion $m_i/m_e=400$. La figure représente la carte de densité des ions venant de la gauche (n_i , normalisée à sa valeur initiale), et montre leur filamentation et leur diffusion au cours de l'interaction. Les distances sont mesurées en épaisseur de peau électronique $c/\omega_{pe} = 5,3 \times 10^2 n_e^{-1/2}$ cm (où n_e est la densité électronique exprimée en cm^{-3}).

fait, le libre parcours moyen collisionnel dans de tels systèmes est bien plus grand que la zone de transition du choc et, *a fortiori*, que les échelles caractéristiques de la microturbulence. La variation de la vitesse de déplacement des fluctuations magnétiques de part et d'autre du front de choc permet alors, par réflexions successives des particules, une accélération jusqu'à des énergies potentiellement considérables ($<10^{15}$ eV pour les rayons cosmiques d'origine galactique). En outre, en se propageant en amont du choc, les particules accélérées y entretiennent l'instabilité de Weibel, ce qui permet l'autorégulation du choc. Parallèlement, ces particules émettent, par rayonnement synchrotron, un large spectre de photons énergétiques à l'origine des sursauts gamma [2].

Reproduire en laboratoire de tels phénomènes constituerait une formidable avancée pour la validation des modèles astrophysiques, mais aussi pour la compréhension fondamentale des plasmas cinétiques. À cette fin, des collaborations entre physiciens des plasmas et astrophysiciens ont été établies, qui ont donné lieu à plusieurs expériences prometteuses de collisions de plasmas sur des lasers de puissance [3]. Le CEA - DAM a conduit des travaux théoriques, récemment publiés dans *Physical Review Letters* [4], qui s'inscrivent dans le cadre de ces investigations. Il a d'abord été montré qu'un modèle quasi linéaire précédemment développé [5] reproduit correctement l'instabilité de Weibel observée sur l'installation Omega, aux États-Unis, dans des collisions de plasmas de vitesse 2 000 km/s et de densité particulaire avoisinant $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ [3]. Afin de comprendre la dynamique non linéaire de l'instabilité jusqu'à l'isotropisation totale des ions, des simulations cinétiques de type particle-in-cell (PIC) ont été effectuées au moyen du code CALDER [6] (figure 1). Ces calculs ont révélé l'influence auparavant négligée du rapport des masses ion-électron, généralement sous-estimé dans les simulations du fait de fortes contraintes numériques. Cette influence résulte de l'écrantage des microcourants ioniques par les électrons, dont l'efficacité dépend de la taille des filaments relativement à l'épaisseur de peau électronique. Ces résultats ont été interprétés à l'aide d'un modèle analytique prédisant l'évolution spatio-temporelle de la turbulence par coalescences successives des filaments. Une formule de la

longueur de formation du choc a notamment été obtenue; compte tenu du rôle de l'écrantage électronique, elle s'avère plus contraignante que les lois d'échelles utilisées à ce jour.

En dépit de ses approximations, le modèle ainsi développé constitue un outil complémentaire aux simulations cinétiques pour la conception et l'analyse des expériences de collisions de plasmas. En particulier, il impose une énergie laser minimum d'environ 100 kJ par cible ablatée pour la création d'un choc non collisionnel en laboratoire: des conditions accessibles sur la National Ignition Facility, aux États-Unis, où sont menés de premiers tests – infructueux à ce stade, probablement en raison de diagnostics insuffisamment résolvants et de plasmas trop denses, et donc collisionnels.

Références

- [1] E. S. WEIBEL, "Spontaneous growing transverse waves in a plasma due to an anisotropic velocity distribution", *Phys. Rev. Lett.*, **2**, p. 83-84 (1959).
- [2] M. V. MEDVEDEV, A. A. LOEB, "Generation of magnetic fields in the relativistic shock of gamma-ray burst sources", *Astrophys. J.*, **526**, p. 697-706 (1999).
- [3] W. FOX *et al.*, "Filamentation instability of counterstreaming laser-driven plasmas", *Phys. Rev. Lett.*, **111**, 225002 (2013); C. M. HUNTINGTON *et al.*, "Observation of magnetic field generation via the Weibel instability in interpenetrating plasma flows", *Nat. Phys.*, **11**, p. 173-176 (2015).
- [4] C. RUYER, L. GREMILLET, G. BONNAUD, C. RICONDA, "Analytical predictions of field and plasma dynamics during nonlinear Weibel-mediated flow collisions", *Phys. Rev. Lett.*, **117**, 065001 (2016).
- [5] C. RUYER, L. GREMILLET, A. DEBAYLE, G. BONNAUD, "Nonlinear dynamics of the ion Weibel-filamentation instability: An analytical model for the evolution of the plasma and spectral properties", *Phys. Plasmas*, **22**, 032102 (2015).
- [6] E. LEFEBVRE *et al.*, "Electron and photon production from relativistic laser-plasma interactions", *Nucl. Fusion*, **43**, p. 629-633 (2003).

Réponses vibratoires non linéaires d'un assemblage avec des liaisons frottantes

M. CLAEYS - J.-P. LAMBELIN - R. TODESCHINI / CEA – Cesta

J.-J. SINOU / Laboratoire de tribologie et dynamique des systèmes, UMR 5513 CNRS – École centrale de Lyon

Le frottement joue un rôle essentiel dans les réponses vibratoires des assemblages. Il augmente la dissipation d'énergie et entraîne des glissements de fréquence de résonance lorsque la structure est soumise à de fortes excitations. Ce phénomène non linéaire ne peut être simulé que par l'utilisation d'une méthode de simulation vibratoire avancée. Ces travaux montrent comment simuler ce phénomène dans un contexte industriel et comparent les résultats de simulation avec des essais vibratoires. Au cours de cette étude, en plus des effets principaux du frottement, des phénomènes d'échanges d'énergie entre modes ont été identifiés expérimentalement. Ces derniers ont été retrouvés et expliqués au moyen de la simulation numérique.

En dynamique des structures, on parle de réponse vibratoire non linéaire lorsque la réponse de la structure n'est pas proportionnelle au niveau d'excitation. Dans les assemblages, beaucoup de phénomènes non linéaires trouvent leur origine dans le frottement, c'est-à-dire dans l'apparition de glissement entre des composants qui sont en contact. Pour étudier ce phénomène vibratoire, des expériences et des simulations numériques ont été réalisées sur la maquette Harmonie du CEA – Cesta, présentée sur la **figure 1**. La maquette a été étudiée dans la direction axiale [1] puis transverse [2].

Modélisation du frottement

Le colis central de la maquette Harmonie présente quatre lames qui sont en appui simple contre l'enveloppe externe. C'est au niveau de ces interfaces que le frottement peut apparaître. Un modèle éléments finis de la maquette a été réalisé. Le premier mode propre transverse du modèle, situé à 135 Hz, est représenté sur la **figure 1**. Pour observer directement le phénomène de frottement associé à ce mode, des mesures par vibrométrie laser à balayage ont été réalisées. Ces mesures permettent de visualiser la déformation de la structure au cours d'une oscillation vibratoire. Sur la **figure 2**, deux instantanés de ces mesures sont représentés. Les points du maillage correspondent aux points de mesure, le maillage est ensuite déformé et coloré selon la valeur du vecteur vitesse instantané mesuré. La lame de gauche, qui est accrochée à l'enveloppe sur la première image, glisse en rotation sur la seconde image. Au cours de chaque oscillation vibratoire, la



Figure 1. Photographie de l'enveloppe externe et du colis central de la maquette Harmonie (en haut) et représentation en coupe du modèle éléments finis, déformé selon le premier mode transverse à 135 Hz (en bas).

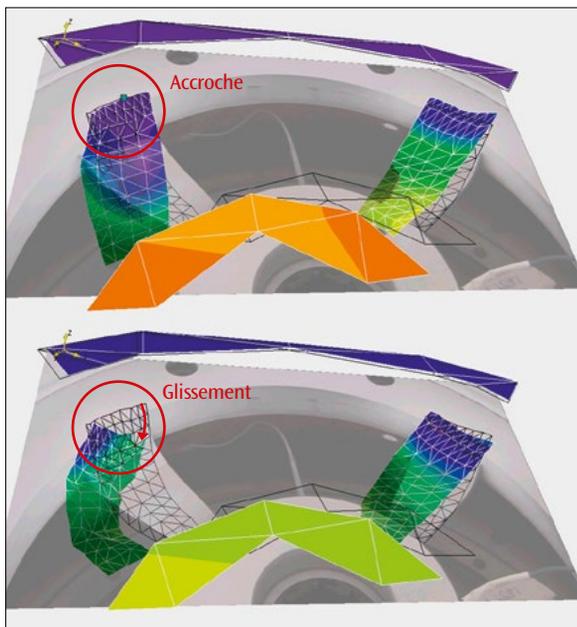


Figure 2. Mesures de champ de vitesse de déplacement obtenues par vibrométrie laser à balayage. Chaque point du maillage est un point de mesure ; le maillage est déformé et coloré en fonction de la vitesse des points. La maquette est excitée dans la direction transverse, à 135 Hz et au niveau 10 m/s^2 . Les deux images correspondent à deux instants séparés de 0,8 ms, entre lesquels le glissement en rotation de la lame de gauche apparaît.

liaison passe ainsi par des phases d'accroche et de glissement. Ce phénomène est modélisé par une loi de Coulomb.

Simulation vibratoire non linéaire

Pour prendre en compte cette loi de comportement non linéaire dans les simulations vibratoires, une méthode de simulation non linéaire, appelée méthode d'équilibrage harmonique (Harmonic Balance Method), déjà étudiée précédemment au CEA – Cesta [3], a été adaptée au contexte industriel de cette étude. Un algorithme de réduction de modèle a été utilisé pour ne conserver qu'une centaine de degrés de liberté dans le modèle avant de prendre en compte l'accroche au bout de chaque lame par un modèle de Coulomb. Les résultats des simulations sont tracés sous forme de fonctions de réponse en fréquence (FRF), qui traduisent le rapport entre les niveaux harmoniques de sortie et d'entrée. Avec un modèle linéaire, les FRF sont indépendantes du niveau d'excitation et seule la courbe bleue de la **figure 3** est obtenue. Elle correspond au comportement expérimental à faible niveau d'excitation. Lorsque le niveau d'excitation augmente, la simulation non linéaire permet de simuler les effets caractéristiques du frottement : la baisse de raideur, qui se traduit par une diminution de la fréquence de résonance ; la dissipation d'énergie, qui se traduit par une diminution de la hauteur du pic de résonance.

En plus de ces effets principaux, des phénomènes d'interactions modales ont été observés et expliqués par la simulation numérique. En particulier, la

vibrométrie laser a révélé que sous l'effet du frottement, une excitation du premier mode transverse à 135 Hz entraînait une interaction avec un mode local de lame situé à $13 \times 135 = 1755 \text{ Hz}$, ce qui ne peut pas s'expliquer avec des phénomènes linéaires.

Conclusion

Ces travaux ont montré une application concrète des outils de simulation vibratoire non linéaire dans le contexte industriel de la DAM. Les effets de dissipation énergétique et de changement de raideur dans la structure ont pu être simulés et comparés à l'expérience, ce qui ouvre la voie à une meilleure simulation de la réponse des structures assemblées à forts niveaux d'excitation. La dissipation d'énergie définit le niveau de résonance maximal qui est utilisé pour dimensionner les structures ; ainsi, la prédiction de cette dissipation permet de maîtriser les marges de dimensionnement.

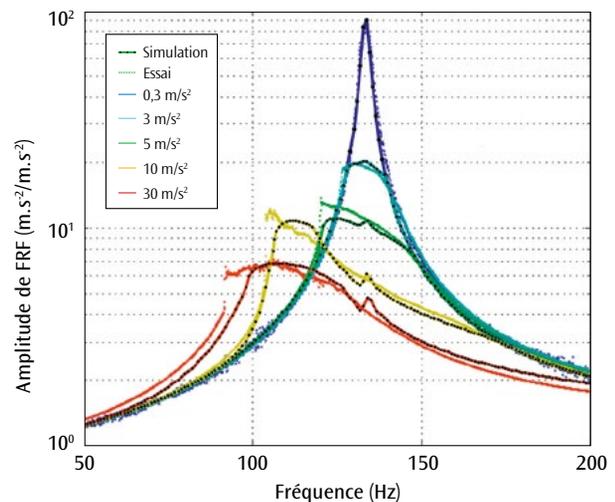


Figure 3. Amplitude de la fonction de réponse en fréquence (FRF) de la maquette Harmonie au sommet de son colis central, pour une excitation transverse de niveau croissant. Les résultats expérimentaux des essais sont représentés avec des croix ; les résultats de simulation sont représentés en traits pleins avec des points noirs ; les couleurs indiquent le niveau d'excitation. La très bonne corrélation essai-calcul démontre la pertinence de la démarche de simulation vibratoire non linéaire.

Références

- [1] M. CLAEYS, J.-P. LAMBELIN, J.-J. SINOÛ, R. TODESCHINI, "Experiments and numerical simulations of nonlinear vibration responses of an assembly with friction joints – Application on a test structure named 'Harmony'", *Mechanical Systems and Signal Processing*, **70-71**, p. 1097-1116 (2016).
- [2] M. CLAEYS, J.-P. LAMBELIN, J.-J. SINOÛ, R. TODESCHINI, "Modal interactions due to friction in the nonlinear vibration response of the 'Harmony' test structure: Experiments and simulations", *Journal of Sound and Vibrations*, **376**, p. 131-148 (2016).
- [3] M. CLAEYS, J.-P. LAMBELIN, J.-J. SINOÛ, B. ALCOVERRO, "Multi-harmonic measurements and numerical simulations of nonlinear vibrations of a beam with non-ideal boundary conditions", *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat.*, **19**, p. 4196-4212 (2014).

Reproductibilité des calculs en théorie de la fonctionnelle de la densité dans les solides

■ F. JOLLET - M. TORRENT / CEA – DAM Île-de-France

La reproductibilité des résultats est un des principes fondateurs du travail scientifique. Le développement de codes de calcul faisant appel à des algorithmes différents pour résoudre le même problème de physique a amené la communauté concernée par les calculs de structure électronique à s'interroger sur la reproductibilité des calculs menés dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Une mesure de la précision d'un code, le facteur Δ , a été proposée et 69 chercheurs ont uni leurs efforts pour comparer 15 codes utilisant 40 sortes de potentiels ou de bases de calcul pour établir la qualité de l'équation d'état de 71 solides élémentaires. La méthodologie mise en place offre un cadre pour évaluer la précision de nouvelles implémentations algorithmiques.

Les codes de structure électronique reposent sur la résolution de l'équation de Schrödinger dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité développée par Kohn et Sham [1]. Pour une fonctionnelle d'échange et de corrélation donnée, de multiples schémas numériques ont été implémentés dans différents codes de calcul : bases d'ondes planes,

de gaussiennes, méthodes prenant en compte tous les électrons dans le calcul (méthodes « tous électrons ») ou seulement les électrons de valence (méthodes avec pseudopotentiels), etc. Comme ces différents codes de structure électronique résolvent la même équation, on peut raisonnablement s'attendre à ce qu'ils produisent des résultats semblables pour une structure cristallographique donnée. Cependant, l'exemple du silicium montre que la dispersion des résultats issus du calcul du paramètre de maille est du même ordre de grandeur que la distance moyenne à la valeur expérimentale. Pour déterminer si les mêmes résultats peuvent être obtenus indépendamment des schémas numériques utilisés dans les codes, 69 chercheurs, dont des chercheurs du CEA – DAM, se sont associés [2] pour effectuer des comparaisons en utilisant le facteur Δ . Ce critère a été introduit [3] pour quantifier les différences entre deux équations d'état du même élément calculées différemment : il s'agit de l'aire de la surface générée par la différence des deux équations d'état (figure 1). La valeur de Δ est moyennée sur 71 cristaux élémentaires, ce qui permet d'évaluer la différence entre deux codes par un seul chiffre. Une partie des résultats est illustrée sur la figure 2. Les codes sont classés en quatre grandes catégories : les codes « tous électrons » (AE), les codes basés sur la méthode PAW (Projector Augmented-Wave), les codes basés sur l'approximation des pseudopotentiels ultrasoft (USPP) et à norme conservée (NCPP).

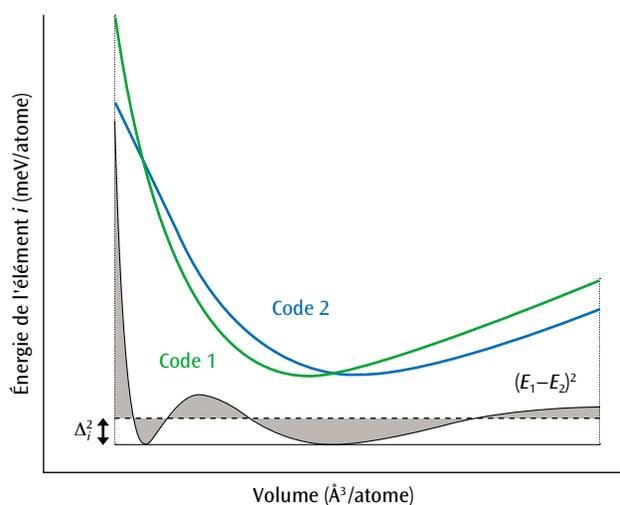


Figure 1. Courbes d'équation d'état en représentation énergie-volume pour deux codes. Le facteur Δ est la différence quadratique des deux équations d'état indicées 1 et 2 qui sert de base de comparaison entre les codes et les pseudopotentiels utilisés.

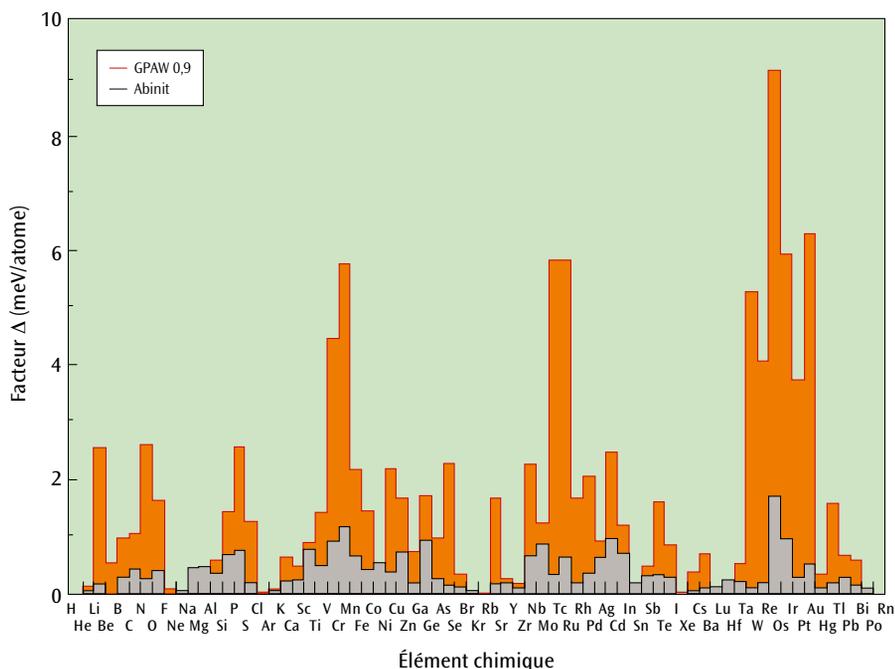


Figure 2. Facteur Δ pour les codes Abinit (gris) et GPAW (orange) par rapport à un calcul « tous électrons » pour un grand nombre d'éléments du tableau périodique. Le code Abinit donne de très bons résultats, avec un facteur Δ très inférieur à celui obtenu pour le code GPAW.

Les résultats de l'étude montrent que :

- ▶ les codes « tous électrons », qui sont en principe les plus précis, s'accordent autour d'une valeur de $\Delta = 0,5$ meV/atome. Les écarts à cette valeur signalent un problème numérique ou une approximation physique qui pose question (par exemple la façon dont les effets relativistes sont pris en compte pour les électrons de cœur);
- ▶ les approches PAW et USPP donnent des résultats quasiment aussi précis que les codes « tous électrons », ce qui met en évidence la qualité des tables de pseudopotentiels;
- ▶ le facteur Δ permet de faire des comparaisons croisées : tester plusieurs tables de pseudopotentiels avec un même code ou tester plusieurs codes avec la même table de pseudopotentiels;
- ▶ le facteur Δ permet d'améliorer les tables de pseudopotentiels d'une version à l'autre, comme le CEA – DAM a pu le faire pour sa table JTH [4].

Il se dégage de cette étude qu'une valeur de Δ inférieure au meV/atome permet de valider une nouvelle implémentation ou un nouveau code par rapport à l'existant. Ainsi, en ne retenant que les versions les plus récentes des implémentations présentées dans [2], la dispersion des valeurs du paramètre de maille du silicium, qui était de 0,05 Å dans la littérature, peut être ramenée à 0,01 Å.

Les données générées pour cette étude sont maintenues à jour sur le site <http://molmod.ugent.be/deltacodesdft>. Cela permet d'avoir des calculs de référence pour tester les nouvelles

implémentations, de nouveaux algorithmes ou de nouvelles données atomiques. Des tests plus complets, impliquant des composés binaires ou ternaires, apparaissent maintenant dans la littérature et contribuent à assurer la reproductibilité des calculs DFT pour l'état solide.

La **figure 2** compare les performances de deux codes, Abinit et GPAW, sur une même implémentation de pseudopotentiels PAW et pour un grand nombre d'éléments du tableau périodique. Le facteur Δ montre tout de suite la meilleure précision du premier pour le jeu d'éléments considérés.

Références

- [1] W. KOHN, L. J. SHAM, "Self-consistent equations including exchange and correlation effects", *Phys. Rev.*, **140**, A1133-A1138 (1965).
- [2] K. LEJAEGERE *et al.*, "Reproducibility in density functional theory calculations of solids", *Science*, **351**, 1415 (2016).
- [3] K. LEJAEGERE *et al.*, "Error estimates for solid-state density-functional theory predictions: An overview by means of the ground-state elemental crystals", *Crit. Rev. Solid State*, **39**, p. 1-24 (2014).
- [4] F. JOLLET, M. TORRENT, N. HOLZWARTH, "Generation of Projector Augmented-Wave atomic data: a 71 element validated table in the XML format", *Comput. Phys. Commun.*, **185**, p. 1246-1254 (2014).

Émission γ dans les réactions nucléaires : des progrès décisifs

D. DENIS-PETIT - O. ROIG - V. MÉOT - S. PÉRU - S. HILAIRE / CEA – DAM Île-de-France

M. VERSTEEGEN / Centre d'études nucléaires de Bordeaux-Gradignan, UMR 5797 CNRS – Université de Bordeaux, Gradignan

M. JANDEL / Los Alamos National Laboratory, États-Unis

I. DELONCLE / Centre de sciences nucléaires et de sciences de la matière (CSNSM), UMR 8609 CNRS – Université Paris-Sud, Orsay

M. MARTINI / Espace de structure nucléaire théorique, CEA – Saclay

S. GORIELY / Institut d'astronomie et d'astrophysique, Université libre de Bruxelles

De nouvelles mesures de sections efficaces de capture radiative de neutrons associées à l'arrivée à maturité de théories de structure nucléaire exploitables grâce à la puissance du calcul à haute performance (HPC) ont permis des progrès décisifs dans la modélisation de réactions nucléaires.

Les réactions de capture radiative jouent un rôle essentiel dans la maîtrise du fonctionnement neutronique de systèmes macroscopiques, en contribuant à la disparition des neutrons. Dans ces réactions (n,γ) , le neutron est capturé par le noyau cible pour former un noyau composé, qui se désexcite par émission de photons γ . Dans le cadre du programme Simulation, une bonne connaissance de ces réactions est indispensable pour l'interprétation des tirs passés. Cependant, leurs taux de réaction sont difficiles à prédire car ils varient fortement d'un isotope à l'autre.

Les sections efficaces (n,γ) , généralement évaluées au moyen de modèles statistiques, dépendent fortement d'une quantité appelée fonction de force γ qui décrit la distribution en énergie des photons émis par les états excités nucléaires. Pour que les modèles reproduisent les mesures des sections efficaces de façon satisfaisante, la fonction de force γ est normalisée sur des données expérimentales : cette limitation des modèles rend les mesures indispensables et

restreint considérablement la fiabilité des prédictions dans des régions éloignées de celles connues expérimentalement.

Afin de valider des évaluations réalisées au CEA – DAM Île-de-France, une mesure de la section efficace de la réaction $^{176}\text{Lu}(n,\gamma)$ a été réalisée à l'aide du détecteur DANCE au Los Alamos Neutron Science Center, aux États-Unis, dans le cadre de la collaboration DAM/NNSA Basic Science. La section efficace a été extraite sur une large gamme d'énergie neutron allant de l'énergie des résonances résolues à la région du continuum [1]. La **figure 1** montre la section efficace de capture radiative mesurée pour le ^{176}Lu dans la région des résonances (à gauche) et dans la région du continuum (à droite). L'analyse des données a permis la détermination des valeurs moyennes des paramètres des résonances qui relient les évaluations effectuées dans les régions de basse et haute énergie. Dans cette dernière, les mesures sont comparées à l'évaluation BRC du CEA – DAM. Au prix d'une normalisation arbitraire de la fonction de force γ , un

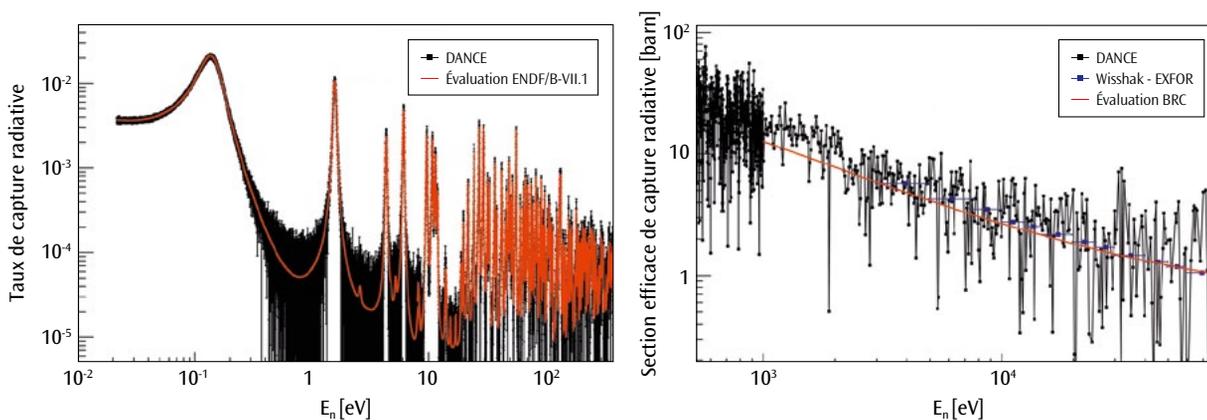


Figure 1. Section efficace de la réaction $^{176}\text{Lu}(n,\gamma)$ mesurée à DANCE au Los Alamos Neutron Science Center : à gauche, dans la région des résonances où elle est comparée à l'évaluation américaine ENDF (en rouge) ; à droite, dans la région du continuum où elle est comparée à l'évaluation BRC du CEA – DAM (en rouge) et aux données expérimentales disponibles dans la bibliothèque de données EXFOR (en bleu). L'excellent accord entre les mesures et les évaluations est ici obtenu au prix d'une normalisation arbitraire de la fonction de force γ .

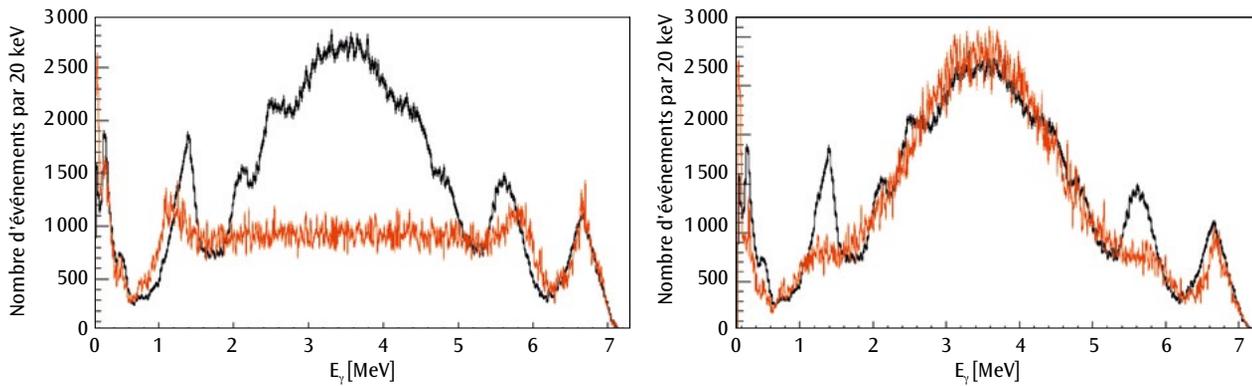


Figure 2. En noir, spectre mesuré pour des cascades γ qui suivent la capture de neutrons de 0,14 eV sur le ^{176}Lu . En rouge : à gauche, spectre évalué sans l'ajout d'une résonance dans la fonction de force γ ; à droite, spectre évalué avec l'introduction d'une résonance de type M1, autour de 4 MeV, qui permet de reproduire la forme du spectre mesuré. L'introduction de cette résonance permet aussi de reproduire la section efficace mesurée et, donc, de s'affranchir d'une normalisation arbitraire de la fonction de force γ .

excellent accord entre les sections efficaces mesurées et les données évaluées est observé.

Si cette normalisation permet de bien reproduire les sections efficaces, une incohérence subsiste lorsque l'on analyse les spectres en énergie des cascades γ . En effet, comme l'illustre la **figure 2**, seul l'ajout d'une nouvelle résonance autour de 4 MeV, dans la fonction de force γ [2], permet de bien reproduire le spectre des cascades γ . De plus, cet ajout permet de s'affranchir du problème de la normalisation, nécessaire pour obtenir un accord avec la section efficace de capture mesurée.

Une telle description cohérente des données de haute et basse énergie constitue une avancée majeure dans la résolution d'un problème vieux de plusieurs décennies. La nature de cette résonance introduite dans la fonction de force γ reste cependant ambiguë dans la mesure où l'on ne peut pas expérimentalement trancher entre un caractère magnétique ou électrique et où elle ne correspond pas aux formes théoriques habituelles.

Sur le plan théorique, la fonction de force γ est traditionnellement modélisée, de façon empirique, par une, voire deux fonctions lorentziennes. Une alternative à de telles formes empiriques est offerte par l'utilisation de modèles microscopiques. Récemment, à partir de l'approche QRPA (Quasi-particle Random Phase Approximation) un ensemble de fonctions de force γ dipolaire électrique (E1) a été évalué pour un très grand nombre d'isotopes [3] grâce à l'allocation de 25 millions d'heures de calcul sur le supercalculateur CURIE, dans le cadre d'un projet européen PRACE. Une description qualitative satisfaisante des résonances géantes, telles que la résonance géante dipolaire électrique qui contribue majoritairement aux sections efficaces d'émission γ , a été obtenue.

La bonne qualité de l'approche QRPA a également été prouvée récemment pour les excitations de type dipolaire magnétique (M1) pour de nombreux noyaux sphériques ou déformés riches en neutrons [4]. La réponse dipolaire magnétique inclut deux composantes majeures : (i) une composante, typiquement autour de quelques MeV, qui dans les noyaux déformés est appelée mode ciseau, et (ii) une composante dite de spin-flip, localisée à plus haute énergie, qui comprend la plus grande fraction de la force M1. Dans

ce contexte, la résonance introduite pour reproduire la réaction $^{176}\text{Lu}(n,\gamma)$ peut alors s'interpréter comme un mode ciseau. Une application de la QRPA à un noyau sphérique, le ^{115}In , a montré que l'origine de l'augmentation de la fonction de force γ observée dans la réaction de photoexcitation $^{115}\text{In}(\gamma,\gamma')^{115\text{m}}\text{In}$, réalisée sur l'installation ELSA du CEA – DAM Île-de-France [5], pouvait s'interpréter comme provenant de la composante soit dipolaire magnétique de spin-flip, soit dipolaire électrique. Les résultats de ces études montrent que la contribution M1 à la section efficace de capture radiative de neutrons peut être importante, particulièrement dans les noyaux légers et déformés.

L'ensemble de ces études illustre l'interaction féconde qui existe entre l'expérience et la théorie. Elles confirment que l'approche QRPA est une méthode pertinente pour calculer les fonctions de force γ . Son utilisation ouvre des perspectives prometteuses pour l'étude des noyaux éloignés de la vallée de stabilité pour lesquels il est impossible, faute de données expérimentales, de normaliser les formes empiriques des fonctions de force utilisées usuellement.

Références

- [1] O. ROIG, M. JANDEL, V. MÉOT *et al.*, "Radiative neutron capture cross sections on Lu 176 at DANCE", *Phys. Rev. C*, **93**, 034602 (2016).
- [2] D. DENIS-PETIT, O. ROIG, V. MÉOT, B. MORILLON, P. ROMAIN *et al.*, "Isomeric ratio measurements for the radiative neutron capture $^{176}\text{Lu}(n,\gamma)$ at the LANL DANCE facility", *Phys. Rev. C*, **94**, 054612 (2016).
- [3] M. MARTINI, S. PÉRU, S. HILAIRE, S. GORIELY, F. LECHAFTOIS, "Large-scale deformed quasiparticle random-phase approximation calculations of the γ -ray strength function using the Gogny force", *Phys. Rev. C*, **94**, 014304 (2016).
- [4] S. GORIELY, S. HILAIRE, S. PÉRU, M. MARTINI, I. DELONCLE, F. LECHAFTOIS, "Gogny-Hartree-Fock-Bogolyubov plus quasiparticle random-phase approximation predictions of the M1 strength function and its impact on radiative neutron capture cross section", *Phys. Rev. C*, **94**, 044306 (2016).
- [5] M. VERSTEEGEN, D. DENIS-PETIT, V. MÉOT, T. BONNET, M. COMET, F. GOBET, F. HANNACHI, M. TARISIEN, P. MOREL, M. MARTINI, S. PÉRU, "Low-energy modification of the γ strength function of the odd-even nucleus ^{115}In ", *Phys. Rev. C*, **94**, 044325 (2016).

Première mise en œuvre complète du formalisme MPMH en physique nucléaire

■ N. PILLET - C. ROBIN - G. HUPIN - M. DUPUIS - D. PEÑA ARTEAGA - J.-F. BERGER / CEA – DAM Île-de-France

La complexité de la physique du noyau de l'atome a amené les physiciens à développer une diversité de modèles permettant de rendre compte de données expérimentales nombreuses. Un des graals de la physique nucléaire est d'arriver à une description universelle des noyaux *via* un modèle unique et unifié. Les méthodes de mélange de configurations se placent dans cet objectif-là.

Le noyau atomique, composé de neutrons et de protons, est un système complexe, siège de nombreux phénomènes tels que la radioactivité, les résonances géantes, la fusion, la fission, etc. Le défi théorique actuel consiste à rendre compte de cette diversité à partir de méthodes microscopiques unifiées dans lesquelles le noyau est décrit comme un ensemble de A nucléons, neutrons et protons, en interaction, A étant compris entre 2 et 300. Ces approches posent deux problématiques : la dérivation de l'interaction qui s'exerce entre les nucléons au sein du noyau et la résolution de l'équation de Schrödinger qui décrit leur dynamique.

Déduire complètement l'interaction entre nucléons à partir de l'interaction forte qui s'exerce entre les constituants du nucléon reste un défi. Par ailleurs, l'utilisation des symétries du système nucléaire permet de déduire une forme générale de l'interaction nucléaire dans le vide (interaction nue), dont les paramètres sont ajustés sur les propriétés du deuton, du triton et de diffusion de deux nucléons dans le vide. Dans le noyau, l'interaction entre nucléons est modifiée par la présence des autres nucléons ; on parle alors d'une interaction effective. Cette renormalisation est souvent prise en compte de façon phénoménologique en partant d'une forme directement paramétrée de l'interaction. L'ajustement des paramètres se fait alors sur des propriétés globales du noyau (énergies de liaison et rayons de charge).

La description théorique des états du noyau est donnée quant à elle par l'équation de Schrödinger, qui met en jeu A nucléons en interaction. Avec la puissance des ordinateurs actuels, la résolution de cette équation basée sur des interactions nues reste limitée à des petits A . L'application à des noyaux de masse plus grande est envisageable de façon limitée

avec l'introduction d'approximations dans la méthode de résolution du problème à A -corps. Afin de décrire l'ensemble de la carte des noyaux, une autre stratégie a été développée depuis des années, qui repose sur l'existence d'un champ moyen dans lequel les nucléons évoluent de manière indépendante. Cette représentation est rendue possible grâce à l'utilisation d'interactions effectives. Les corrélations restantes sont alors introduites par des extensions de la théorie qui génère le champ moyen.

Les méthodes de mélange de configurations sont parmi les plus puissantes, car elles permettent d'unifier la description des systèmes physiques corrélés dans une même approche. De par leur complexité, elles ont été mises en œuvre récemment en physique nucléaire, où la méconnaissance de l'interaction nucléaire effective à considérer et la présence de deux types de nucléons en font un défi à la fois théorique et numérique.

La méthode de mélange de configurations multi-particules-multitrous (MPMH) [1-3] est une méthode au-delà du champ moyen qui permet d'éliminer des approximations couramment faites dans le traitement du problème à A -corps nucléaire. Elle permet de conserver le nombre de particules exactement ainsi que le moment angulaire total. Le principe de Pauli est traité de façon exacte. En outre, elle est applicable à tout type de noyau, qu'il ait un nombre pair ou impair de protons et/ou de neutrons.

Dans l'approximation de champ moyen, les nucléons occupent des états d'énergie discrets, solutions propres du champ moyen appelées orbitales. L'état de référence est le déterminant de Slater (DS) défini en positionnant les nucléons sur les orbitales de plus basse énergie. La méthode de mélange de configurations MPMH consiste à décrire les états du

noyau comme une superposition de DS construits en promouvant M particules sur des orbitales d'énergie supérieure à partir de l'état de référence, créant ainsi M trous (orbitales inoccupées). La fonction d'onde décrivant ainsi le noyau s'approche de la solution exacte et contient *a priori* tout type de corrélations: appariement, excitations collectives rotationnelle et vibrationnelle, couplage particule-vibration. L'expansion en DS ne pouvant être infinie, une sélection pertinente conservant les symétries importantes est appliquée. La base des orbitales doit alors être optimale: elle doit minimiser l'énergie de l'état du noyau.

Un double principe variationnel sur l'énergie permet alors de déterminer les inconnues de la méthode MPMH, à savoir les coefficients du mélange correspondant au poids de chaque configuration et les orbitales. Pour la première fois, un algorithme numérique qui permet de résoudre de façon auto-cohérente les systèmes d'équations couplées et non linéaires associées a été mis en place [2].

Pour les différents noyaux étudiés, la résolution complète de la méthode incluant l'optimisation des orbitales a permis d'améliorer la description des états excités de basse énergie d'environ 30 % ainsi que ses propriétés spatiales. Les énergies d'excitation théoriques du premier état excité 2_1^+ sont représentées sur la **figure 1** en fonction des énergies expérimentales, pour les noyaux pairs-pairs de la couche *sd*. Les calculs ont été effectués avec l'interaction effective phénoménologique de Gogny, en prenant en compte

toutes les configurations possibles de la couche *sd*. Pour la majorité des noyaux, un très bon accord est trouvé avec l'expérience. La différence moyenne à l'expérience est de 235 keV et la déviation standard de 323 keV. Une telle précision est rarement atteinte avec les méthodes traditionnelles. Quant aux propriétés spatiales des orbitales, ces dernières sont poussées vers la surface du noyau. Ce phénomène apparaît clairement dans la densité de transition entre l'état fondamental 0^+ et l'état excité 2_1^+ [3]. L'amplitude à la surface est plus importante avec un léger décalage du pic vers de plus grands rayons r . Ceci témoigne d'une augmentation de la collectivité, visible directement dans le facteur de forme électronique décrivant la diffusion inélastique d'électrons par l'augmentation de l'amplitude et le resserrement aux grands moments transférés q [3]. Les effets de l'optimisation des orbitales vont donc vers une meilleure description des données expérimentales.

Conclusion

La méthode de mélange de configurations MPMH a été mise en œuvre de façon complète pour la première fois en physique nucléaire. Les premiers résultats obtenus pour des noyaux de la couche *sd* montrent que l'optimisation des orbitales permet d'améliorer la description des états du noyau. La prochaine étape de développement consiste à dériver une interaction dans le milieu du noyau de façon cohérente avec le mélange introduit dans la fonction d'onde. Partant d'une interaction nue, la méthode MPMH permet de générer une interaction effective à un ordre donné d'excitation particule-trou. Ce qui permettra d'utiliser un calcul MPMH pour étudier la structure ou des réactions nucléaires en réduisant les incertitudes liées à une interaction phénoménologique.

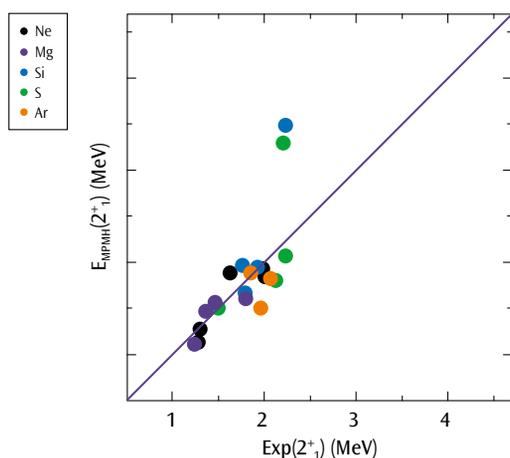


Figure 1. Comparaison des énergies d'excitation expérimentales $Exp(2_1^+)$ et théoriques $E_{MPMH}(2_1^+)$ du premier état excité 2_1^+ dans les isotopes pairs-pairs de la couche *sd*. Les résultats théoriques ont été obtenus avec la résolution complète de la méthode MPMH, qui permet de franchir un pas vers la description universelle des noyaux *via* un modèle unique et unifié. L'inclusion de l'optimisation des orbitales permet d'améliorer d'environ 30 % les énergies d'excitation théoriques.

Références

- [1] N. PILLET, J.-F. BERGER, E. CAURIER, "Variational multiparticle-configuration mixing method applied to pairing correlations in nuclei", *Phys. Rev. C*, **78**, 024305 (2008).
- [2] C. ROBIN, N. PILLET, D. PEÑA ARTEAGA, J.-F. BERGER, "Description of nuclear systems with a self-consistent configuration-mixing approach: Theory, algorithm, and application to the ^{12}C test nucleus", *Phys. Rev. C*, **93**, 024302 (2016).
- [3] C. ROBIN, N. PILLET, M. DUPUIS, J. LE BLOAS, D. PEÑA ARTEAGA, J.-F. BERGER, "Description of nuclear systems with a self-consistent configuration-mixing approach: Application to structure and reactions in even-even *sd*-shell nuclei", *Phys. Rev. C*, **95**, 044315 (2017).

Évaluation et optimisation de réseaux de surveillance infrasons

A. LE PICHON - J. VERGOZ / CEA – DAM Île-de-France

E. MARCHETTI / Dipartimento di Scienze della Terra (UNIFI), Università di Firenze, Italy

Une technique de modélisation numérique basée sur l'application d'une loi d'atténuation d'ondes infrasonores dans une atmosphère réaliste a été développée pour évaluer les performances d'un réseau de surveillance par infrasons. Les éruptions volcaniques sont des sources naturelles de calibration. En particulier, les signaux générés par l'activité quasi permanente de l'Etna en Sicile, enregistrés à plusieurs centaines de kilomètres, sont utilisés pour valider des modèles de propagation des infrasons dans la moyenne atmosphère jusqu'à des altitudes de 50 km. Combinée avec les analyses du modèle météorologique européen et avec des mesures en continu du bruit de fond aux stations de mesure, cette méthode fournit en temps quasi réel un indicateur de confiance des événements détectés et localisés par les réseaux opérationnels de surveillance.

Les ondes infrasonores, ondes acoustiques de fréquence 0,01 à 20 Hz, se propagent sur de grandes distances dans l'atmosphère avec une faible atténuation. Ces ondes peuvent être détectées par des antennes de capteurs de pression très sensibles appelés microbarographes. Dans la bande de fréquence d'intérêt (0,02 à 4 Hz), le système de surveillance international (SSI) de l'Organisation du traité d'interdiction complète des essais nucléaires (OTICE) détecte en permanence des signaux infrasons d'origine naturelle. Les volcans représentent en particulier des sources uniques de calibration des méthodes de surveillance mises en œuvre pour la détection de sources explosives [1]. Les premières cartes estimant les performances du réseau infrason du TICE ont permis de déterminer le nombre optimal et la position des stations pour détecter et localiser des explosions nucléaires avec un seuil de 1 kt. Le calcul de ces cartes reposait sur des lois d'atténuation empiriques et des modèles saisonniers de vents en altitude. Les méthodes numériques actuelles permettent de mieux comprendre le rôle des différents facteurs décrivant la source et l'atmosphère qui contrôlent la propagation. Des lois d'atténuation semi-empiriques, dérivées de simulations numériques explorant des situations réalistes de condition de propagation, sont maintenant proposées [2]. La disponibilité de modèles météorologiques opérationnels de plus haute résolution et la connaissance de leurs incertitudes contribuent à améliorer la précision des simulations.

Simulations et validation expérimentale

Les méthodes de simulation mises en œuvre permettent de quantifier les performances des

réseaux de surveillance du SSI et régionaux quant à leur capacité de détection, en tenant compte de la forte variabilité temporelle du bruit ambiant et des conditions de propagation. La **figure 1** quantifie l'apport de stations supplémentaires en opération dans la région euro-méditerranéenne sur les capacités de détection d'une source explosive du réseau du SSI. L'effet saisonnier, très marqué, s'explique par l'inversion des vents stratosphériques qui favo-

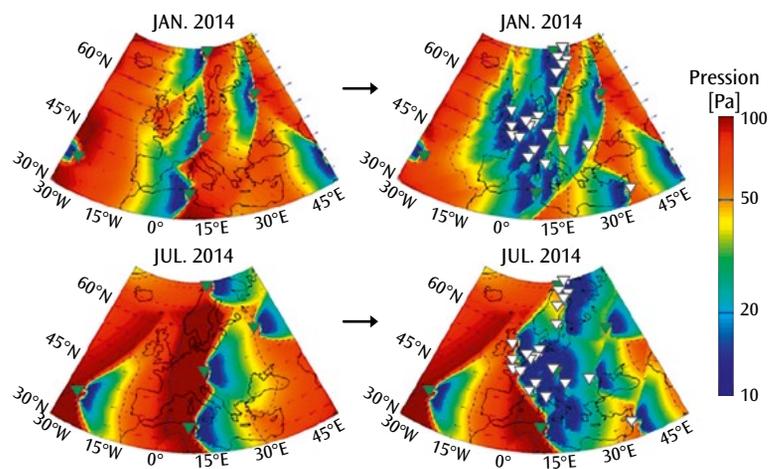


Figure 1. Capacité de détection simulée du réseau du système de surveillance international SSI (à gauche), pour une source explosive dans la région euro-méditerranéenne (carte géographique en arrière-plan), complété par des stations supplémentaires (à droite, les stations supplémentaires sont représentées par des triangles blancs). Les flèches noires indiquent la direction et la force des vents à 50 km d'altitude. La couleur code l'amplitude de pression minimale détectable (en pascal) pour une source explosive à une distance de référence de 1 km, en été et en hiver, pour une fréquence de 1 Hz. Ces simulations montrent un abaissement d'un ordre de grandeur des seuils de détection quand la propagation s'effectue dans la direction des vents. Elles permettent de quantifier l'apport de nouvelles stations sur l'amélioration des performances en détection.

rise la détection de sources à l'ouest et à l'est des stations en hiver et été respectivement. La densification du réseau contribue très nettement à un abaissement des seuils. Intégrés sur une année, les seuils de détection sont diminués d'un facteur deux environ sur plus de la moitié de la zone géographique considérée (figure 2). En Europe, l'Etna est une source naturelle et répétitive pour valider ces résultats [2]. Les signaux produits par les éruptions de l'Etna sont, dans des conditions favorables de propagation, clairement détectés par la station IS48 (Tunisie) appartenant au réseau du SSI. À une distance de 550 km, les observations en champ lointain fournissent des informations sur les conditions atmosphériques le long du trajet de propagation des ondes. La figure 3 compare les atténuations prédites et observées des ondes entre 2008 et 2015. En été, les vents stratosphériques stables orientés vers l'ouest favorisent la propagation avec une atténuation constante d'environ 50 dB. En hiver, les signaux, fortement atténués en raison de l'inversion des vents, ne sont plus détectés – avec une atténuation de l'ordre de 100 dB, l'amplitude des signaux devient inférieure au niveau du bruit de fond – sauf lors de réchauffements stratosphériques soudains qui autorisent des détections durant des périodes de plusieurs jours. Tout au long de l'année, un bon accord est noté entre les capacités de détection prédite et observée de la station IS48.

Discussion et conclusions

Ces travaux sont importants pour améliorer les méthodes mises en œuvre dans le cadre du TICE grâce à une meilleure connaissance des sources détectées, de la dynamique atmosphérique et de ses

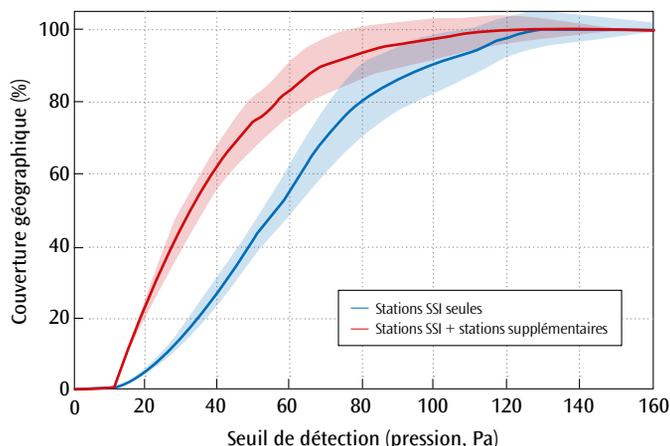


Figure 2. Histogramme cumulé du seuil de détection du réseau du SSI (courbe bleue) complété par des stations supplémentaires (courbe rouge) dans la région euro-méditerranéenne à une fréquence de 1 Hz. Les régions colorées représentent la distribution des seuils de détection avec un intervalle de confiance à 95 %. L'apport des stations supplémentaires permet d'abaisser les seuils de détection d'un facteur deux.

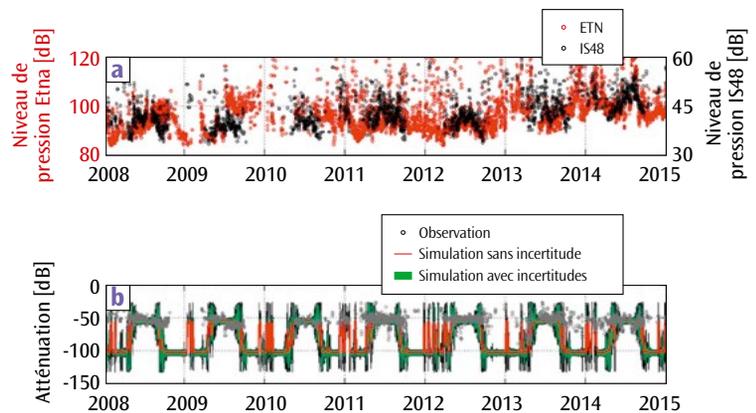


Figure 3. Capacité de détection prédite et observée des signaux de l'Etna à la station IS48. (a) Comparaison entre le niveau de pression sonore (Sound Pressure Level, SPL) mesuré à 1 km de la source par la station supplémentaire ETN (points rouges) et à IS48 (points noirs). (b) Comparaison entre l'atténuation simulée des ondes (courbe rouge) et celle mesurée déduite des mesures en champs proche et lointain (points gris). Les simulations sont effectuées à la fréquence dominante des signaux enregistrés (1 Hz). Les zones vertes délimitent l'intervalle de confiance à 95 % de l'atténuation prédite en incluant des perturbations aléatoires de la vitesse du vent de 10 m/s qui fixe une limite inférieure des incertitudes des modèles actuels d'atmosphère à 50 km d'altitude [3]. Un très bon accord est obtenu entre observations et simulations.

incertitudes. En tenant compte des effets conjugués du bruit de fond aux stations et de propagation des ondes, ces outils de simulation sont intégrés dans la chaîne opérationnelle de traitement et d'analyse du CEA. Ils peuvent aussi être exploités pour rechercher des configurations optimales de réseau (nombre de stations, implantation géographique). Dans le cadre du projet européen ARISE coordonné par le CEA [1], cette infrastructure démontre aussi son efficacité pour surveiller à distance des phénomènes météorologiques extrêmes ou certains risques naturels, comme des volcans dangereux peu instrumentés qui peuvent rejeter des quantités importantes de cendres dans l'atmosphère et perturber fortement le trafic aérien [4].

Références

- [1] E. BLANC, A. LE PICHON, J. ASSINK *et al.*, «Projet ARISE: de la dynamique de l'atmosphère à la surveillance des événements extrêmes», *chocs*, **45**, p. 67-73 (2014).
- [2] D. TAILPIED, A. LE PICHON, E. MARCHETTI *et al.*, «Assessing and optimizing the performance and infrasound monitoring network», *Geophys. J. Int.*, **208**, p. 437-448 (2017).
- [3] A. LE PICHON, J. ASSINK, P. HEINRICH *et al.*, «Comparison of co-located independent ground-based middle atmospheric wind and temperature measurements with numerical weather prediction models», *J. Geophys. Res. Atmos.*, **120**, p. 8318-8331 (2015).
- [4] R. MATOZA, A. LE PICHON, «Surveillance à grande distance des éruptions volcaniques», *chocs avancées 2010*, p. 30-31 (2011).

Résolution numérique des équations de Maxwell par décomposition de domaines

M. MOGNOT - B. STUPFEL / CEA – Cesta
M. CHANAUD / CS, Mérygnac

Cet article s'intéresse au problème de la diffraction, en régime linéaire et harmonique, d'une onde électromagnétique par un objet tridimensionnel comportant des matériaux inhomogènes. Lorsque les dimensions de l'objet sont grandes devant la longueur d'onde incidente, la discrétisation numérique des équations de Maxwell conduit à un système linéaire de très grande taille. Celui-ci peut être résolu à l'aide d'une méthode de décomposition de domaines. Les résultats numériques obtenus avec un code parallèle, porté sur le supercalculateur TERA 1000 du CEA – DAM, montrent que cette méthode peut permettre la résolution précise de problèmes comportant des dizaines de millions d'inconnues.

Dans le cadre de ses activités dans le domaine de la furtivité radar, le CEA – Cesta développe des codes de calcul simulant le comportement électromagnétique d'un objet tridimensionnel situé dans le vide, typiquement un conducteur recouvert de matériaux inhomogènes. En régime harmonique, il est éclairé par une onde incidente plane émise par un radar se trouvant très loin de l'objet. Compte tenu de la faible amplitude de l'onde, les phénomènes physiques mis en jeu sont linéaires. Le calcul du champ diffracté par cet objet nécessite la résolution numérique des équations de Maxwell dans le domaine fréquentiel.

Des méthodes de résolution dites exactes sont aujourd'hui bien maîtrisées [1]. Le domaine de calcul incluant l'objet est borné extérieurement par une surface fermée, sur laquelle est implémentée une équation intégrale garantissant une condition de rayonnement exacte. Le volume intérieur est maillé avec des tétraèdres à l'intérieur desquels les champs électromagnétiques sont représentés par des fonctions de base appropriées (discrétisation par éléments finis volumiques). Pour une fréquence donnée, la résolution des équations de Maxwell est alors ramenée à celle d'un système linéaire $Ax=b$, où la solution x représente les valeurs discrétisées des champs, b étant le champ incident. La matrice A comporte une partie creuse provenant de la formulation éléments finis et une partie dense issue de l'équation intégrale. La dimension du système linéaire est de l'ordre de plusieurs centaines de millions pour les objets 3D intéressant le CEA – DAM. La complexité numérique (temps de calcul et taille mémoire) requise pour la résolution précise du système, que ce soit par une

méthode directe (élimination de Gauss) ou itérative, devient alors rédhibitoire.

Une solution consiste à décomposer le domaine en sous-domaines. Les grandes lignes de la méthode de décomposition de domaines (DDM) proposée dans [2] sont les suivantes: on choisit un découpage du domaine de calcul en sous-domaines dont les interfaces sont, *grosso modo*, conformes à l'objet (figure 1). On obtient ainsi un système linéaire $Ax=b$, semblable à celui mentionné précédemment mais comportant, pour l'essentiel, les particularités suivantes: la DDM introduit des inconnues supplémentaires définies

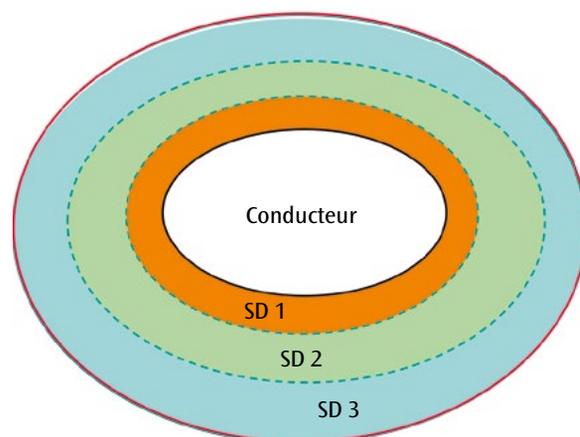


Figure 1. Décomposition du domaine de calcul en trois sous-domaines SD1, SD2 et SD3, pour l'application de la méthode de décomposition de domaines (DDM). Une condition de rayonnement exacte est prescrite sur la frontière extérieure.

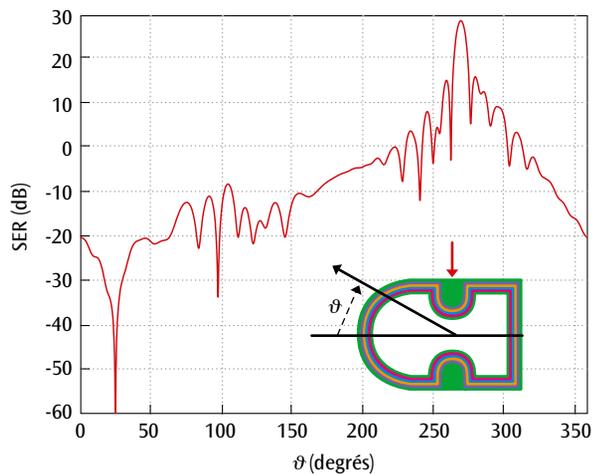


Figure 2. Surface équivalente radar (SER) en fonction de θ , l'angle d'observation de l'onde diffractée, pour un objet axisymétrique de longueur 8λ , λ étant la longueur d'onde de l'onde incidente. Le revêtement de matériaux, en couleur, est divisé en cinq sous-domaines. La flèche rouge indique la direction d'incidence de l'onde, la flèche noire la direction d'observation repérée par l'angle θ . La courbe rouge (noire) est la SER de référence (calculée avec la DDM, respectivement) : les deux courbes sont superposées. Le système comporte 35 millions d'inconnues ; sa résolution sur TERA 1000 avec 256 cœurs de 4 Go de mémoire chacun est réalisée en 4 500 secondes pour les deux polarisations (deux seconds membres b). Une seule polarisation est représentée.

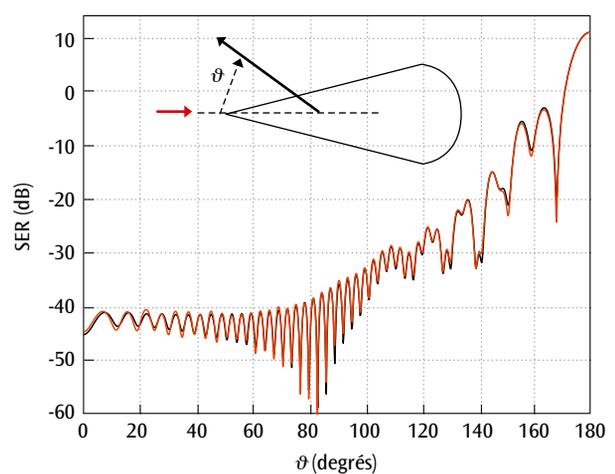


Figure 3. Surface équivalente radar (SER) en fonction de θ , l'angle d'observation de l'onde diffractée, pour un cône axisymétrique de longueur 18λ (voir aussi légende de la figure 2). Le revêtement de matériaux (non représenté) est divisé en huit sous-domaines. Le système comporte 112 millions d'inconnues ; sa résolution sur TERA 1000 avec 384 cœurs est réalisée en 19 600 secondes pour les deux polarisations.

sur les interfaces, et la condition de rayonnement est assurée par une représentation intégrale, au lieu de l'équation intégrale habituellement utilisée dans la littérature. On peut voir cette DDM comme une méthode de préconditionnement du système qui s'écrit alors $M^{-1}Ax = M^{-1}b$. M est une matrice diagonale par blocs (les blocs diagonaux de A), constituée de matrices carrées et creuses. L'unicité de la solution et l'inversibilité de ces matrices sont assurées par des conditions de transmission mixtes [3]. Le système préconditionné est résolu avec l'algorithme itératif GMRES (Generalized Minimal Residual), bien plus performant qu'une méthode itérative stationnaire (Jacobi, Gauss-Seidel, etc.). Au cours des itérations, le GMRES requiert essentiellement l'exécution de deux tâches : produit matrice-vecteur Ax , et résolution de $My = z$ où z est un intermédiaire de calcul de x .

Comme M est diagonale par blocs, la dernière opération est réalisée indépendamment pour chaque matrice. Pour les plus grosses, qui correspondent à un sous-domaine, on utilise le solveur direct PaStiX de l'Inria. Pour les autres, un simple gradient conjugué suffit. Notons que si la condition de rayonnement est décrite par une équation intégrale, alors un des blocs de M est une matrice dense C qui rend très coûteuse la résolution de $Cy = x$.

Les résultats numériques présentés dans [2] ont été obtenus avec un code séquentiel. Celui-ci a été parallélisé sur la machine TERA 1000. Les matrices des sous-domaines sont factorisées avec la version MPI de PaStiX. Les algorithmes de gradient conjugué ainsi que des produits matrice-vecteur ont, avec MPI et Open MP, des performances proportion-

nelles au nombre de cœurs utilisés. Ces produits font intervenir les matrices denses issues de la représentation intégrale dont l'encombrement mémoire peut atteindre plusieurs dizaines de téraoctets. Leur nature autorise toutefois une réduction d'environ 95 % avec l'algorithme de compression ACA (Adaptive Cross Approximation). On constate donc que l'une des difficultés majeures de ce type de résolution, liée à l'implémentation de la condition de rayonnement exacte, a été supprimée. Les figures 2 et 3 montrent la précision obtenue par cette méthode pour le calcul de la surface équivalente radar (SER) de deux objets de dimension 8λ et 18λ , où λ est la longueur d'onde incidente. Ces objets étant axisymétriques, les résultats sont comparés à ceux obtenus avec un code de référence 3D dédié aux corps de révolution. Le temps de calcul est fonction du nombre d'itérations du GMRES qui dépend des conditions de transmission. Celles utilisées sont très simples, même si elles ont été optimisées [2]. Des conditions de transmission plus performantes sont actuellement à l'étude.

Références

- [1] J. GUAN *et al.*, "Accurate and efficient finite element-boundary integral method with GPU acceleration for electromagnetic analysis", *IEEE Trans. Antennas Propag.*, **62**, p. 6325-6336 (2014).
- [2] B. STUPFEL *et al.*, "One-way domain decomposition method with exact radiation condition and fast GMRES solver for the solution of Maxwell's equations", *J. Comput. Phys.*, **322**, p. 882-904 (2016).
- [3] B. DESPRÉS *et al.*, "A domain decomposition method for the harmonic Maxwell equations", in *Iterative Methods in Linear Algebra*, R. Beauwens and P. de Groen (eds.), Elsevier Science Publishers B.V. (North-Holland), p. 475-484 (1992).

Premiers imageurs X pour le Laser Mégajoule

R. ROSCH - C. TROSSEILLE - T. CAILLAUD - J.-L. BOURGADE - J.-P. LE BRETON - R. WROBEL / CEA – DAM Île-de-France
P. BEAUVAIS - S. HUBERT - M. PALLET - V. PRÉVOT / CEA – Cesta

Les premiers diagnostics mis en œuvre sur le Laser Mégajoule (LMJ) sont deux imageurs X, l'imageur GXI-1 installé en 2014 et l'imageur GXI-2 livré en mai 2015 [1]. Ces imageurs X permettent de visualiser, dans l'espace et dans le temps, le plasma formé par l'interaction laser-cible et de réaliser des radiographies de la cible. Ils ont la capacité de résoudre des détails de l'ordre de $30\ \mu\text{m}$ à l'intérieur d'un champ d'observation de quelques millimètres et de pouvoir prendre plusieurs photographies de l'évolution de la cible dans le domaine des rayons X avec des temps de pose d'environ 100 ps. Ces instruments prennent en compte, par conception, les contraintes imposées par l'environnement du LMJ – rayonnements parasites, éclats émis par la cible, maintenance en ambiance nucléaire – et s'intègrent dans le système complexe de pilotage du LMJ. Ils ont été qualifiés au cours de deux campagnes dédiées et sont utilisés en routine dans les campagnes d'expériences du LMJ.

L'imageur X (**figure 1**) est un instrument formé de deux ensembles de haute précision : le bloc optique, qui constitue le système d'imagerie, et le détecteur (ou analyseur optique), qui a pour rôle d'enregistrer des images instantanées de l'émission de la cible. Ces deux ensembles sont intégrés de part et d'autre d'une structure mécanique télescopique qui détermine le grandissement du diagnostic et assure la compatibilité avec les contraintes du système d'insertion de diagnostic. L'instrument est protégé des produits de l'irradiation de la cible par une cassette (sous-ensemble Protection avant sur la **figure 1**) constituée de trois films minces renouvelés après chaque expérience. Un système de filtres, intégrés dans une seconde cassette (sous-ensemble Filtres mesure sur la **figure 1**), permet d'adapter la dynamique d'enregistrement et de sélectionner sur le détecteur le spectre du rayonnement incident émis par la cible. Les équipements sont pilotés par

un commande-contrôle basé sur l'architecture libre Tango, avec des pilotes d'équipements développés en langage Python, permettant de garantir l'évolution et la pérennité des systèmes pendant la durée de vie de l'installation du LMJ.

Le bloc optique intègre un microscope avec des miroirs de forme torique, dont la qualité de polissage doit être exceptionnelle, avec des aspérités de surface inférieures à quelques angströms. Un dépôt métallique en couche mince vient recouvrir les miroirs, afin d'améliorer leur pouvoir réflecteur. L'imageur GXI-1 réalise 12 images de la cible, dont 8 sont formées par des miroirs et 4 sont formées par des sténopés. Sur l'imageur GXI-2, les sténopés sont remplacés par des lentilles réfractives X, constituées de microbulles formées dans un capillaire en époxy [2]. L'alignement du diagnostic sur la cible s'effectue grâce à un dispositif appelé référence commune et est assuré par des crayons laser

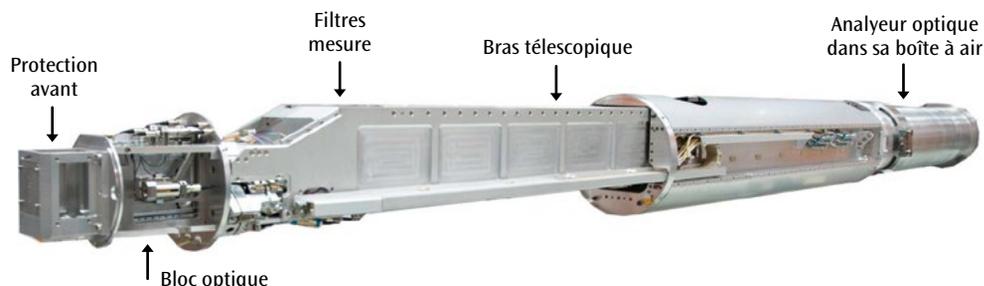


Figure 1. Architecture opto-mécanique des premiers imageurs X, GXI-1 et GXI-2, mis en œuvre sur le Laser Mégajoule (LMJ), montrant le bras télescopique du diagnostic, le bloc optique, l'analyseur optique, ainsi que les sous-ensembles Protection avant et Filtres mesure.

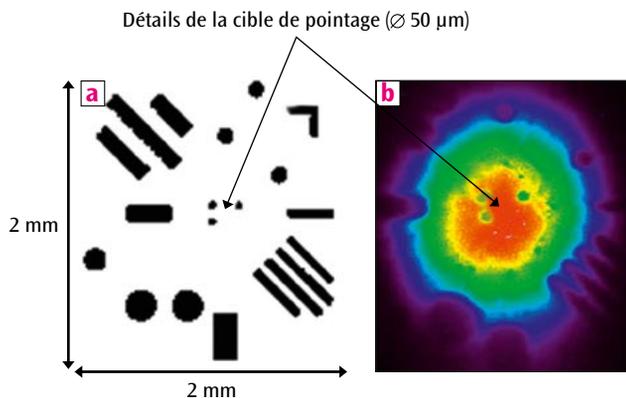


Figure 2. (a) Design des cibles de pointage utilisées sur l'installation LMJ; (b) Image obtenue grâce au diagnostic GXI-1. Les cibles sont des plaques en or comportant de nombreux motifs allant jusqu'à des diamètres de 50 µm. Ces motifs permettent d'évaluer les performances d'alignement et de pointage de l'installation. Les résultats observés montrent une excellente qualité de pointage des faisceaux laser au centre de la cible ainsi qu'une très bonne précision d'alignement du diagnostic sur la cible.

d'alignement assemblés et référencés sur le bloc optique.

L'analyseur optique permet l'enregistrement d'images instantanées de la cible avec un temps de pose de l'ordre de 100 ps. Il utilise une galette de microcanaux à 4 pistes conductrices, fonctionnant sur le principe d'une structure électronique d'impédance adaptée [3]. L'enregistrement est effectué grâce à une caméra CCD refroidie. Des capteurs intégrés contrôlent *in situ* les paramètres environnementaux de l'analyseur optique (température, hygrométrie, débit d'eau), dont l'enveloppe est une « boîte à air » maintenue à la pression atmosphérique et refroidie par une circulation d'eau pour assurer un refroidissement des composants électroniques. La formation par les miroirs du microscope de trois images sur chaque piste permet ainsi d'obtenir douze images de la cible à des instants différents.

Avant l'installation sur le LMJ, les diagnostics ont été intégrés sur la plateforme Equinox de la DIF pour une recette et pour une validation fonctionnelle. Cette plateforme constitue le point de rencontre des sous-ensembles développés par les différents industriels: bloc optique assemblé (société Comat) avec son microscope réglé (L'Optique commerciale), bras télescopique (Thales TED/Sominex), commande contrôle (Thales TED/Nexeya) et analyseur optique (Bertin/Comat). Ils ont ensuite été installés sur le LMJ pour y subir de nouveaux tests fonctionnels réalisés par les équipes de CEA – Cesta et du CEA – DAM Île-de-France.

Ces tests ont été finalisés par la vérification de l'alignement sur cible et la synchronisation avec les chaînes laser lors d'un tir. Les cibles mises en œuvre

au centre de la chambre d'expériences étaient des feuilles d'or présentant des motifs caractéristiques d'épaisseurs différentes. Les résultats observés sur le diagnostic GXI-1 sont présentés sur la **figure 2**. Ils montrent une excellente qualité de pointage des faisceaux laser au centre de la cible ainsi qu'une très bonne précision d'alignement du diagnostic sur la cible. Les performances des diagnostics GXI-1 et GXI-2 ont ensuite été validées sur le LMJ au cours de campagnes de qualification mettant en jeu des cibles équipées de mires de résolution spatiale (**figure 3**). La résolution spatiale obtenue est de 35 µm pour une spécification à 30 µm. Depuis mai 2015, les deux diagnostics, intégrés dans leur inserteur respectif, sont utilisés en routine dans les campagnes d'expériences.

D'autres diagnostics d'imagerie sont en cours de développement et de réalisation pour instrumenter les expériences qui iront en se complexifiant au fur et à mesure de la montée en puissance de l'installation LMJ. La prochaine livraison, un spectro-imageur X, est prévue à l'automne 2017.

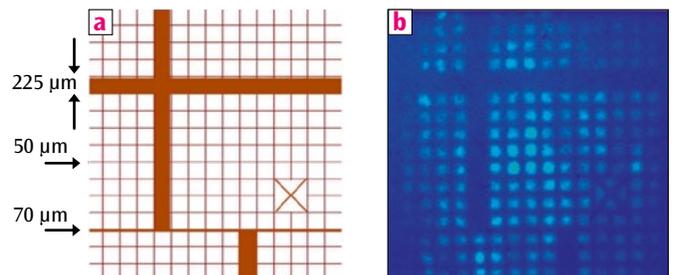


Figure 3. (a) Design des cibles utilisées dans la campagne de qualification du diagnostic GXI-1; (b) Image obtenue grâce au diagnostic. Les cibles sont des feuilles d'or devant lesquelles est placée une mire asymétrique constituée de fils d'or fin de différents diamètres. Le diagnostic observe cette grille éclairée en transmission par la source X issue de l'irradiation du laser sur la cible d'or. La résolution spatiale du diagnostic mesurée à partir de cette image de grille est d'environ 35 µm à mi-hauteur et est en très bon accord avec la prévision.

Références

- [1] R. ROSCH *et al.*, "First set of gated x-ray imaging diagnostics for the LMJ facility", *Rev. Sci. Instrum.*, **87**, 033706 (2016).
- [2] YU. I. DUDCHIK, N. N. KOLCHEVSKY, "A microcapillary lens for X-rays", *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A*, **421**, p.361-364 (1998).
- [3] C. TROSSEILLE *et al.*, "Overview of the ARGOS X-ray framing camera for Laser MegaJoule", in *Proc. 20th Topical Conference on High-Temperature Plasma Diagnostics (HTPD)*, Atlanta, Géorgie, juin 2014, *Rev. Scient. Instrum.*, **85**, 11D620 (2014).

Caractérisation globale de formulations explosives à l'état de traces

M. C. BRIDOUX-S. SCHRAMM / CEA – DAM Île-de-France

A. SCHWARZENBERG-R.-B. COLE / Institut parisien de chimie moléculaire, UMR 8232 CNRS – Université Pierre-et-Marie-Curie, Paris

La plupart des formulations explosives se composent de cristaux d'explosifs dilués dans une matrice de liants polymériques, de composés plastiques, d'huiles, de cires, d'additifs organiques divers et de contaminants ou produits de dégradation. La caractérisation chimique fine de ces substances intergranulaires actives est très utile pour identifier la nature, la source et l'origine des explosifs utilisés, ainsi que les voies de synthèse mises en œuvre [1]. Une approche duale reposant sur la spectrométrie Raman et la spectrométrie de masse haute résolution a été développée pour caractériser la formulation d'explosifs, collectés à l'état de traces sur des frottis [2]. La méthode présentée va au-delà de l'analyse des molécules intrinsèquement énergétiques formant la charge, et inclut l'ensemble des substances intergranulaires, ayant à la fois des propriétés stabilisatrices de la charge explosive et de modification des propriétés mécaniques.

La recherche de traces d'explosif sur des sites post-explosion (lieux d'attentat ou zones militaires) ou encore sur des sites spécifiques surveillés ou soumis à investigations (inspections de l'AIEA) est devenue un outil essentiel dans le domaine de l'expertise criminalistique, de renseignement militaire et, plus généralement, des problématiques de défense. Si les traces de molécules explosives sont systématiquement recherchées par les laboratoires spécialisés, il n'en est pas de même pour les substances connexes (liants, huiles, cires, plastifiants, etc.). Pourtant, leur composition constitue une source d'informations considérable qui peut être exploitée dans le processus d'inférence de l'origine de l'explosif [1]. Il est donc nécessaire de disposer en laboratoire de procédures et de méthodes d'analyse performantes pour l'ensemble de ces indices [3].

Les méthodes d'analyse classiquement utilisées – basées sur la lixiviation des échantillons dans des solvants organiques, l'extraction sur phase solide et leur analyse par détection spectrométrique UV-visible – nécessitent une quantité pondérable d'échantillons et souffrent à la fois d'un manque de sélectivité et de sensibilité. Elles ne sont donc pas adaptées à l'analyse de composés présents à l'état de traces, collectés par frottis. Une méthode permettant d'analyser à la fois la charge explosive et les substances connexes, à partir de quelques grains de matière présents à la surface d'un frottis, a été mise au point. Les particules micrométriques d'explosif sont, dans un premier temps, transférées sur un disque de carbone par l'intermédiaire d'un « impacteur sous vide » (figure 1), puis localisées et

analysées par microscopie Raman. En dépit de la très faible quantité d'échantillon (quelques microgrammes, voire nanogrammes) et de la présence de substances intergranulaires, la nature de la charge explosive a pu être mise en évidence à partir de particules dont la taille n'excède pas quelques dizaines de microns (figure 2). Les spectres typiques obtenus par microscopie Raman sont similaires aux spectres de référence des composés étudiés, comme

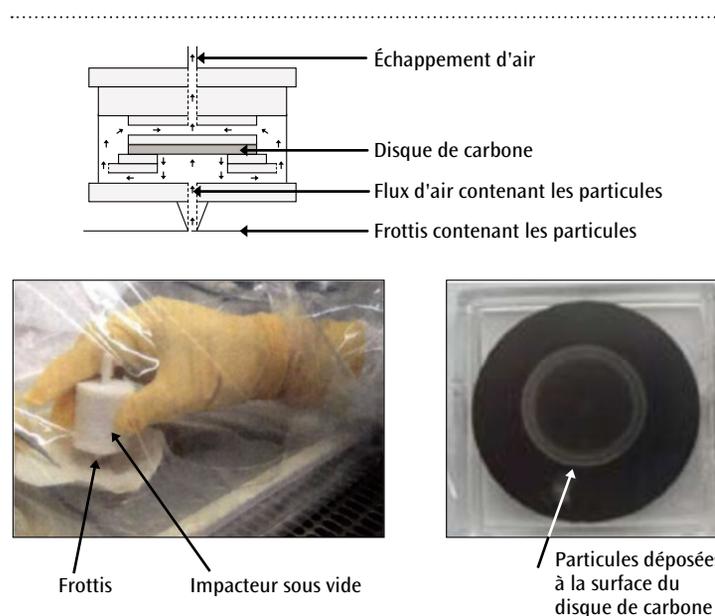


Figure 1. Dispositif de prélèvement des particules énergétiques présentes à la surface d'un frottis, par aspiration à l'aide d'un impacteur sous vide. Les particules extraites de la surface du frottis impactent un disque de carbone qui constitue la surface d'analyse par microscopie Raman et spectrométrie de masse haute résolution.

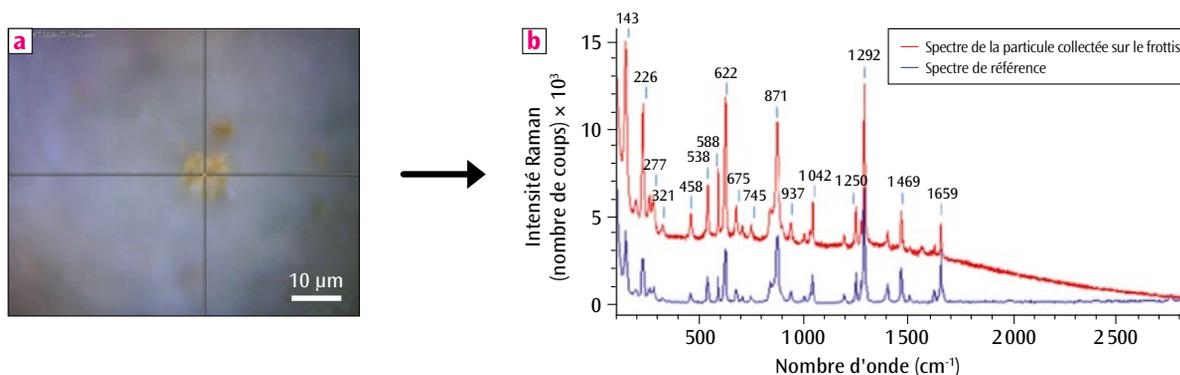


Figure 2. Image (a) et spectre Raman (b) d'une particule énergétique de quelques microns, contenant de la pentrite (PETN). Le spectre Raman expérimental (en rouge) est superposé au spectre de référence de la pentrite (en bleu) ; les deux spectres sont similaires.

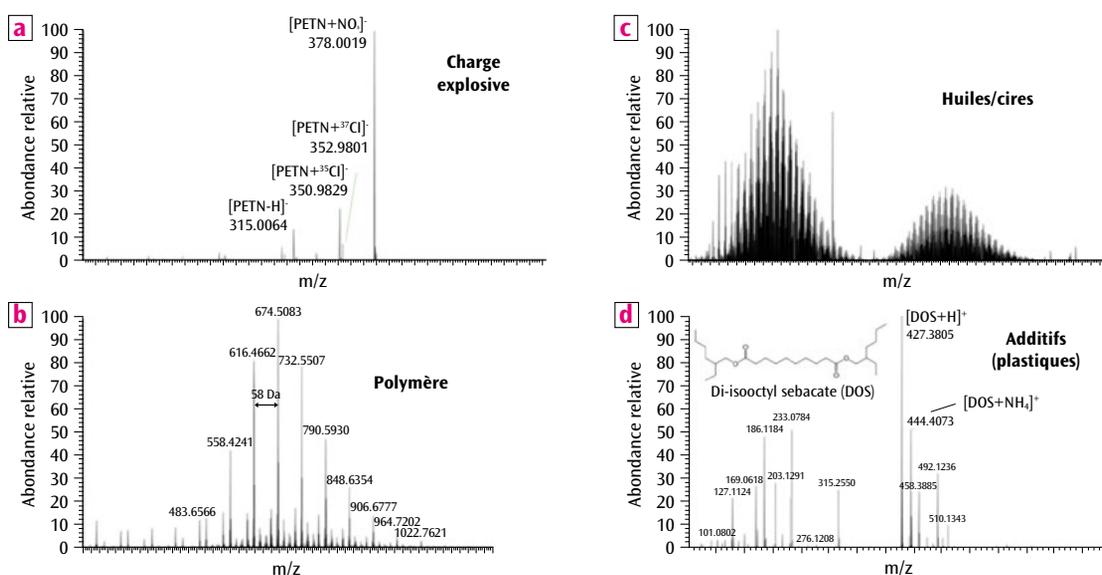


Figure 3. Spectre de masse haute résolution indiquant la présence de (a) la charge explosive, (b) des substances polymériques, (c) des huiles/cires et (d) des additifs (composés plastiques) dans la formulation d'un explosif.

illustré sur la **figure 2**. Une fois la charge explosive caractérisée par microscopie Raman, le disque de carbone est placé dans un flux d'atomes métastables d'hélium chauffé provenant de la source d'ionisation DART (Direct Analysis in Real Time), où l'ensemble des composés intergranulaires, ainsi que les composés intrinsèquement énergétiques se désorbent thermiquement et s'ionisent à pression atmosphérique (**figure 3**). Le spectromètre de masse à très haute résolution génère ainsi une empreinte moléculaire caractéristique de chaque composant et additif constituant la formulation explosive. L'accès à la masse exacte conduit à l'identification univoque de chaque composé.

Cette méthode analytique, qui va au-delà de l'analyse des molécules intrinsèquement énergétiques formant la charge explosive, a pour objectif l'analyse globale des échantillons, incluant les liants polymériques et les composés plastiques. Elle est appliquée à l'analyse d'objets explosifs mili-

itaires réels (mortiers, roquettes, mines, grenades, munitions, etc.), ce qui a permis de valider les performances de cette approche duale, en matière de fiabilité, de sensibilité et de rapidité, dans des cas réels de prélèvement de terrain et d'expertise.

Références

- [1] C. M. MAHONEY *et al.*, "Characterization of composition C4 explosives using Time-of-Flight secondary ion mass spectrometry and X-ray photoelectron spectroscopy", *Anal. Chem.*, **82**, p. 7237-7248 (2010).
- [2] M. C. BRIDOUX *et al.*, "Combined use of direct analysis in real-time/Orbitrap mass spectrometry and micro-Raman spectroscopy for the comprehensive characterization of real explosive samples", *Anal. Bioanal. Chem.*, **408**, p. 5677-5687 (2016).
- [3] J. D. HOWA *et al.*, "Isolation of components of plastic explosives for isotope ratio mass spectrometry", *Forensic Chem.*, **1**, p. 6-12 (2016).

Mesure de contraintes de couches minces par biréfringence

H. PIOMBINI - F. COMPOINT - C. AMBARD - D. PICART / CEA – Le Ripault

G. DAMAMME / CEA – Gramat

F. BRÉMAND / Université de Poitiers

Les dépôts de couches minces sur des composants optiques permettent de réaliser différentes fonctions, dont les plus connues sont l'augmentation de la réflectivité (miroir) et l'antireflet (élimination d'image parasite). Malheureusement, ces couches minces induisent des tensions dues à l'adaptation aux interfaces des différents matériaux employés qui ont des propriétés thermomécaniques et des paramètres de mailles différents. L'équilibre de ces tensions ou contraintes s'effectue en partie par une modification de la forme de l'interface et de la densification du milieu. Dans le domaine des couches optiques, les contraintes sont évaluées généralement à partir d'une mesure de rayon de courbure (« mesure d'une flèche »), en supposant que l'épaisseur du substrat est très supérieure à l'épaisseur de la couche et que les matériaux sont isotropes (théorie de Stoney [1]). Pour des matériaux déposés à température ambiante, les dépôts peuvent être très faiblement contraints et leur déformation trop faible pour être mesurable précisément, même à l'aide d'un profilomètre ou d'un interféromètre. Dans cet article est présentée une méthode de photoélasticité qui mesure les contraintes par effet opto-mécanique induit. Pour remonter aux contraintes, la biréfringence induite par le dépôt d'une couche mince est mesurée. Préalablement, le banc expérimental est étalonné à partir d'un essai sur un disque et de sa modélisation opto-mécanique.

Les contraintes présentes dans les couches optiques sont un paramètre essentiel à minimiser pour limiter la déformation de l'onde optique ou pour éviter le clivage des couches. Traditionnellement en optique, les contraintes sont évaluées en mesurant un rayon de courbure avec un profilomètre ou un interféromètre. Mais ces mesures atteignent leurs limites quand les contraintes sont faibles, ce qui est le cas des couches sol-gel d'ormosil, déposées à froid. Les couches d'ormosil, qui est

un matériau possédant des propriétés élastiques, sont utilisées pour atténuer le choc mécanique dû à l'absorption d'un faisceau laser intense par les composants optiques dans le Laser Mégajoule (LMJ). Pour optimiser l'utilisation de ces couches élastiques, l'évolution de leurs propriétés mécaniques est caractérisée en fonction d'un pourcentage d'un mélange de deux composés sol-gel : la silice, qui donne la raideur à la couche, et le PDMS (PolyDiMéthylSiloxane) [2], qui amène l'élasticité au matériau final. Pour

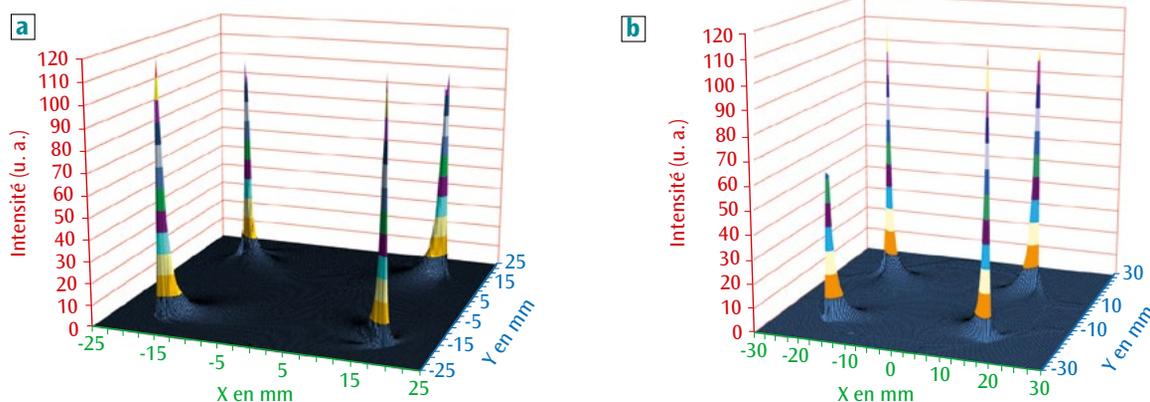


Figure 1. Visualisation 3D aux quatre points de mesure de l'intensité laser (a) théorique et (b) expérimentale indiquant la bonne adéquation entre les calculs et les résultats de mesure.

l'étude de ces contraintes, un banc pour mesurer la biréfringence a été développé [3]. Les premiers résultats obtenus avec des couches hybrides déposées sur silice ont été comparés à ceux des mêmes couches déposées sur silicium et mesurées en utilisant la méthode de Stoney [1].

Expérimentalement, un échantillon, placé entre deux polariseurs croisés, peut modifier, s'il présente une biréfringence induite ou non, la polarisation d'un faisceau laser. Le faisceau de sortie est mesuré par une photodiode et son intensité est enregistrée par l'intermédiaire d'un ordinateur. La réponse de l'échantillon peut être cartographiée grâce à deux platines motorisées. La biréfringence est évaluée grâce à la loi de Malus qui relie l'intensité au déphasage induit par la biréfringence créée. Comme les revêtements sont déposés sur un substrat de silice, la réponse aux contraintes de la silice doit être connue. Pour cela, des cartographies de biréfringence induite dans un substrat de silice soumis à une force connue mesurée par un capteur de charge sont réalisées. Cette force est répartie en quatre points (contacts linéiques) grâce à un support en V, dispositif connu sous le nom d'essai brésilien, ici deux axes. Une modélisation mécanique de l'essai brésilien a été mise en œuvre pour connaître le champ de contraintes

dans le disque de silice. À partir de ce champ de contraintes, les différents déphasages optiques locaux vus par un faisceau sonde et la convolution induite de la taille de ce faisceau laser sont simulés. Ces simulations opto-mécaniques sont comparées à des résultats expérimentaux (figure 1) montrant la bonne adéquation entre l'expérience et la théorie [4].

Les couches sol-gel sont des revêtements déposés sur un substrat de silice ayant un diamètre de 50 mm et une épaisseur de 5 mm à partir d'une solution sol-gel hybride qui s'écoule sur un substrat en rotation dont la vitesse de rotation est fixée par l'épaisseur désirée et la viscosité de la solution. Les couches sont synthétisées à partir d'une solution de silice et d'ormosil (PDMS). Le pourcentage de PDMS varie de 0 à 40 % en masse. Après le dépôt, les couches subissent un traitement thermique à 120 °C durant deux heures afin de finaliser les réactions de polycondensation et donc d'augmenter leur dureté. Les études paramétriques ont porté sur l'influence de l'épaisseur de la couche, du pourcentage de PDMS et du mode de catalyse. On constate que les contraintes augmentent avec l'épaisseur et diminuent avec le taux de PDMS (figure 2). Les mesures de contraintes par biréfringence suivent celles réalisées avec un profilomètre par la méthode de Stoney.

Conclusion

Une mesure de contraintes de couches minces a été mise en place à partir d'une mesure de biréfringence, et les résultats obtenus sur plusieurs couches sol-gel sont comparables aux résultats obtenus par la méthode de Stoney [3]. Cette mesure a l'avantage d'être faite sur le même substrat que celui utilisé pour le LMJ (silice) contrairement à une mesure de profilométrie faite sur un substrat de silicium, l'accroche de la couche sol-gel n'étant pas forcément identique sur la silice et sur le silicium. Ces mesures confirment le faible taux de contraintes dans les couches sol-gel employées pour le LMJ.

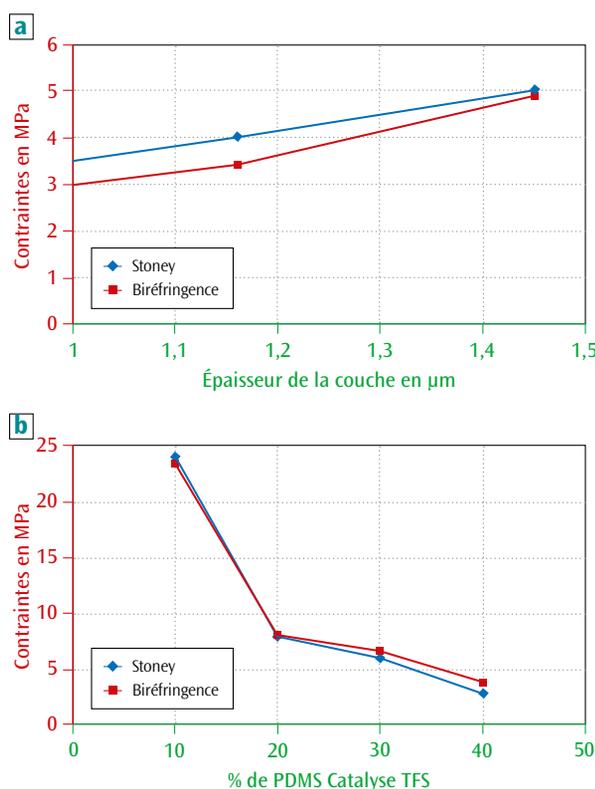


Figure 2. Contraintes (en MPa) en fonction (a) de l'épaisseur de la couche sol-gel, pour un taux de PDMS (PolyDiMéthylSiloxane) de 30 % et une catalyse HCl, et (b) du taux de PDMS, avec une catalyse TFS. Les mesures de contraintes de contraintes par biréfringence (en rouge) suivent celles réalisées avec un profilomètre par la méthode de Stoney (en bleu).

Références

- [1] G. G. STONEY, "The tension of metallic films deposited by electrolysis", *Proc. R. Soc. Lond. A*, **82**, p. 172-175 (1909).
- [2] J. D. MAKENZIE, "Structure and properties of ormosils", *Journal of Sol-Gel Science and Technology*, **2**, p. 81-86 (1994).
- [3] M. POMMIÈS *et al.*, "Impurities detection by optical techniques in KH_2PO_4 crystals", in *Proceedings of the 37th Annual Boulder Damage Symposium: Laser-Induced Damage in Optical Materials*, Boulder, États-Unis, sept. 2006, **6403**, 64031P1-11 (2007).
- [4] H. PIOMBINI *et al.*, "Stress measurement of elastic sol-gel layer by photoelasticity – Comparison with Stoney", *Opt. Mater. Express*, **6**, p. 469-485 (2016).

Étude des changements de phases dans un acier inoxydable 316Nb par diffraction de neutrons

W. JOLLY - C. TOFFOLON-MASCLET - B. MARINI / CEA – Saclay

J.-M. JOUBERT / Institut de chimie et des matériaux Paris-Est (ICMPE), UMR 7182 CNRS – Université Paris-Est Créteil Val-de-Marne, Thiais

F. PORCHER - G. ANDRÉ / Laboratoire Léon-Brillouin, UMR 12 CNRS – CEA, Gif-sur-Yvette

F. CORTIAL / DCNS Research, Centre d'expertise des structures et matériaux navals (CESMAN), La Montagne

P. PETIT / Aubert&Duval, Usine des Ancizes, Les Ancizes

S. RINGEVAL / CEA – Valduc

La technique de diffraction *in situ* de neutrons a été utilisée pour identifier les phases présentes dans un acier inoxydable 316 stabilisé au niobium et pour quantifier l'évolution de leur fraction massique pendant un maintien à 900 °C [1]. Ce type d'analyse, couplé à des simulations ThermoCalc et à des caractérisations métallurgiques, permet d'avoir accès aux cinétiques d'apparition de la phase sigma, phase nocive vis-à-vis des propriétés mécaniques du matériau et de sa résistance à la corrosion, et de contribuer à la validation des gammes de fabrication.

Les aciers inoxydables austénitiques, notamment ceux de la famille des 316, sont très largement utilisés dans les industries chimiques, pétrolières et nucléaires, car ils offrent à la fois une bonne résistance à la corrosion et des propriétés mécaniques intéressantes à haute température. La nuance étudiée ici, 316 stabilisé au niobium ou 316Nb, a été choisie pour la fabrication de pièces forgées. Industriellement, après coulée du métal et obtention d'un cylindre appelé lopin, celui-ci est travaillé longuement à chaud afin d'obtenir les géométries souhaitées.

La microstructure caractéristique de l'acier 316Nb, visible sur la **figure 1a**, est constituée d'une

matrice austénitique (γ) contenant quelques îlots de ferrite delta (δ). Le niobium, en s'associant préférentiellement au carbone, permet d'éviter la formation de carbures de chrome qui amoindriraient la résistance du matériau à la corrosion. L'addition de niobium améliore également la tenue au fluage grâce à la précipitation de fins carbonitrides de niobium Nb(N,C), dont les plus importants sont visibles sur le cliché.

Pendant les opérations de forge, qui peuvent durer plusieurs heures pour certaines d'entre elles, ou au cours de la trempe finale, la microstructure du matériau peut évoluer. En effet, lors de maintiens à certaines températures, les îlots de ferrite se transfor-

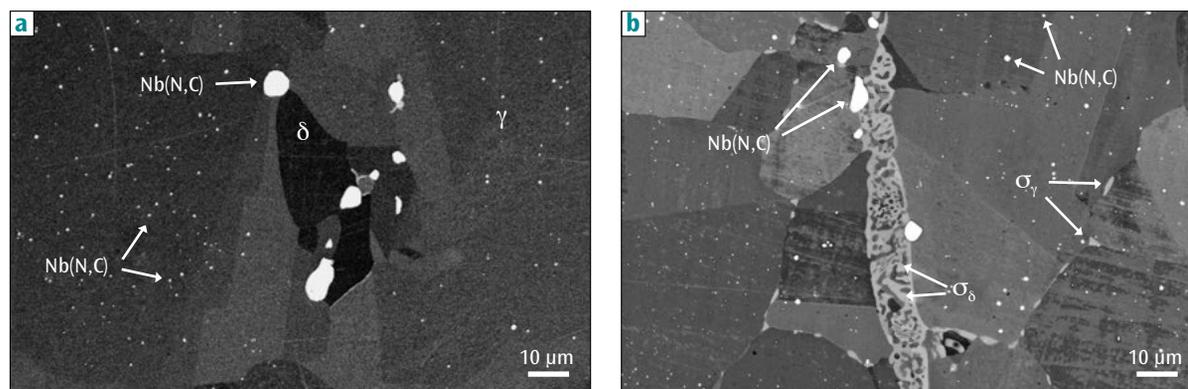


Figure 1. Observation au microscope électronique à balayage de la microstructure de l'alliage, avant (a) et après (b) traitement thermique. Le maintien de 7 h à 900 °C fait apparaître la phase σ qui doit être minimisée, car celle-ci fragilise le matériau et le rend très sensible à la corrosion.

ment progressivement en phase sigma (σ). Cette phase apparaît tout d'abord à la périphérie de la ferrite, puis au sein même de l'îlot selon une transformation dite eutectoïde consistant en la croissance simultanée de la phase σ et d'une autre phase γ [2,3]. Pour des maintiens longs en température, la phase σ précipite également au niveau des joints de grains de la matrice austénitique.

Il est nécessaire de maintenir la phase σ à un faible taux, car celle-ci fragilise le matériau et le rend très sensible à la corrosion. Il est donc important de bien en connaître les conditions et les cinétiques d'apparition afin d'adapter les gammes de fabrication en conséquence. Cet objectif a pu être atteint par un ensemble de caractérisations basées sur la diffraction *in situ* des neutrons. En effet, les différentes phases du matériau ayant pour avantage de présenter des caractéristiques cristallographiques distinctes, cette technique permet de les quantifier même lorsqu'elles sont présentes en très petite quantité.

Pour ces premiers essais, l'échantillon a subi une rampe de montée en température d'environ 30°C/min puis vu un palier de 7 h à 900°C avant d'être refroidi à 30°C/min. La **figure 2** représente l'évolution des phases obtenue pour un échantillon possédant initialement environ 1,25 % de ferrite, 1 % de carbonitrides et ne contenant pas de phase σ .

Alors que la fraction massique des carbonitrides reste constante pendant tout le cycle, les quantités de ferrite et de phase σ évoluent de manière significative. Ainsi, dès la fin de la montée en température

($t=100$ min), la ferrite s'est intégralement transformée en phase σ selon la réaction eutectoïde, comme l'attestent les évolutions opposées des fractions massiques de ces deux phases. Pendant les deux premières heures de palier à 900°C, le taux de phase σ se stabilise, puis augmente de nouveau dans la seconde moitié du traitement pour atteindre environ 2,5 % en fin de palier. La totalité de la ferrite s'étant déjà transformée, cette augmentation ne peut s'expliquer que par une précipitation de la phase σ au sein de l'austénite, ce qui a été confirmé par l'observation de l'échantillon traité au microscope électronique à balayage (**figure 1b**).

L'apparition de la phase σ à cette température est en bon accord avec les simulations effectuées avec le logiciel ThermoCalc à partir de la composition chimique du matériau. Cette approche est basée sur le principe de minimisation de l'énergie de Gibbs totale du système. Ainsi, pour une température et une composition données, le logiciel permet de déterminer les phases qui sont à l'équilibre thermodynamique et de calculer leurs fractions massiques. À 900°C, la simulation indique que la phase σ est effectivement stable et qu'elle représente environ 6 % du matériau. Le fait que la teneur mesurée expérimentalement soit plus faible indiquerait que les 7 h de palier ne sont pas suffisantes pour atteindre l'état d'équilibre.

La diffraction des neutrons permet ainsi d'accéder avec précision à l'évolution à 900°C de phases présentes en faible quantité dans le matériau. Ces essais, réalisés conjointement avec d'autres expériences, ont participé à l'obtention de diagrammes « Temps-Température-Taux de transformation » qui sont des outils précieux industriellement, car ils indiquent les domaines à éviter lors des différentes étapes de mise en forme ou de traitement thermique des pièces.

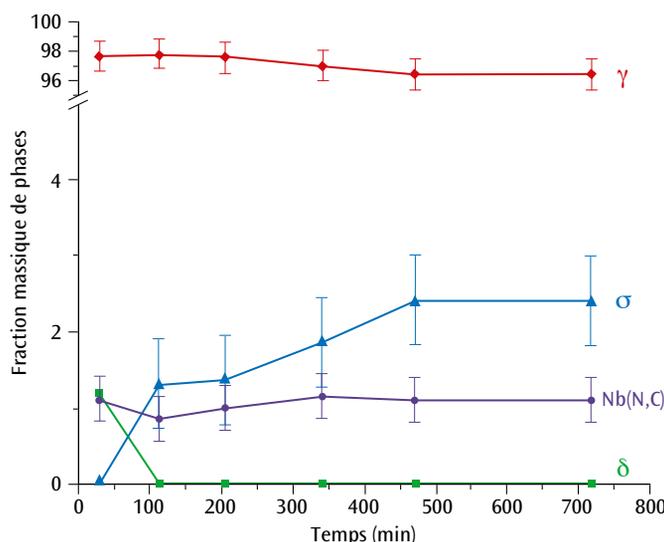


Figure 2. Évolution de la fraction massique des différentes phases au cours du cycle thermique déterminée par diffraction de neutrons. On constate que, dès la fin de la montée en température, la ferrite s'est intégralement transformée en phase σ selon la réaction eutectoïde, et que la teneur en phase σ augmente de nouveau dans la seconde moitié du palier par précipitation dans l'austénite.

Références

- [1] W. JOLLY, C. TOFFOLON-MASCLET, J.-M. JOUBERT, B. MARINI, F. PORCHER, G. ANDRÉ, F. CORTIAL, P. PETIT, S. RINGEVAL, "In situ monitoring of isothermal phase transformation in two Nb stabilized austenitic stainless steels (316Nb) by neutron diffraction", *J. Alloys Compd.*, **688**, p. 695-702 (2016).
- [2] A. PERRON, C. TOFFOLON-MASCLET, X. LEDOUX, F. BUY, T. GUILBERT, S. URVOY, S. BOSONNET, B. MARINI, F. CORTIAL, G. TEXIER, C. HARDER, V. VIGNAL, P. PETIT, J. FARRÉ, E. SUZON, "Understanding sigma-phase precipitation in a stabilized austenitic stainless steel (316Nb) through complementary CALPHAD-based and experimental investigations", *Acta Mater.*, **79**, p. 16-29 (2014).
- [3] A. PERRON, F. BUY, C. TOFFOLON-MASCLET, F. CORTIAL, V. VIGNAL, P. PETIT, E. SUZON, « Étude de la phase σ dans l'acier 316Nb », *chocs avancées 2014*, p. 36-37 (2015).

Cinétique de la transformation martensitique d'un alliage de plutonium en phase δ

B. RAVAT - B. OUDOT - F. LALIRE - A. PERRON - F. DELAUNAY / CEA – Valduc
 E. AEBY-GAUTIER / Institut Jean-Lamour – UMR 7198 CNRS – Université de Lorraine, Nancy
 B. APPOLAIRE / Laboratoire d'étude des microstructures, UMR 104 CNRS – Onera, Châtillon

Au regard du diagramme de phase à l'équilibre thermodynamique, les alliages PuGa en phase δ ne sont que métastables et une concentration proche de 1 % at. en Ga apparaît être expérimentalement comme une extrême limite. Ainsi, lors d'un refroidissement, une transformation martensitique de la phase δ cubique en phase α' monoclinique se produit, provoquant une étonnante contraction en volume de l'alliage de l'ordre de 20 %. Caractériser et comprendre les cinétiques de cette transformation de phase dans cet alliage à basse température ont constitué l'objectif du travail réalisé [1].

Le plutonium a la particularité d'exister sous six variétés allotropiques, ce qui confère à cet élément une des métallurgies les plus complexes de la classification. Alors que la phase δ , de structure monoclinique, est thermodynamiquement stable à température et pression ambiantes, le domaine d'existence de la phase δ de structure cubique à faces centrées se situe entre 315 et 457 °C. Plus ductile et moins oxydable, cette phase δ est donc métallurgiquement plus intéressante. L'adjonction d'éléments dits deltagènes comme le gallium permet de maintenir la phase δ dans un état métastable à température ambiante.

À basse température, l'alliage PuGa 1 % at. en phase δ présente une transformation de phase de type martensitique, c'est-à-dire une transformation displacive mettant en jeu de petits déplacements atomiques parfaitement corrélés inférieurs à la distance interatomique de la phase mère, et donc sans diffusion et sans variation de composition chimique. Cette transformation génère une phase α' (fragile) qui présente la même structure cristalline que la phase monoclinique α du Pu pur avec la présence d'atomes de gallium en sursaturation dans son réseau cristallin.

Afin de comprendre les mécanismes pilotant la cinétique de cette transformation martensitique, une étude consistant en une analyse *in situ* de la transformation par diffraction de rayons X pour différents maintiens isothermes à basses températures [-20 °C; -196 °C] a été réalisée. Les premiers résultats obtenus montrent que cette transformation martensitique est toujours directe $\delta \rightarrow \alpha'$ quelles que soient la température et la durée du maintien isotherme, et systématiquement partielle. À partir de ces données cinétiques, une partie du diagramme TTT (Temps-Température-Transformation) de l'alliage PuGa 1 % at. a été tracée, laissant apparaître deux domaines distincts, dits nez de transformation (figure 1).

L'étude des morphologies de la martensite (figure 2) a montré que ces dernières varient avec la température du maintien isotherme : aux températures de transformation élevées (1^{er} nez du diagramme TTT), une morphologie de type *plume* est observée, alors qu'à plus basses températures (2^e nez du diagramme TTT) une morphologie constituée de *fines lattes parallèles* a été mise en évidence. De plus,

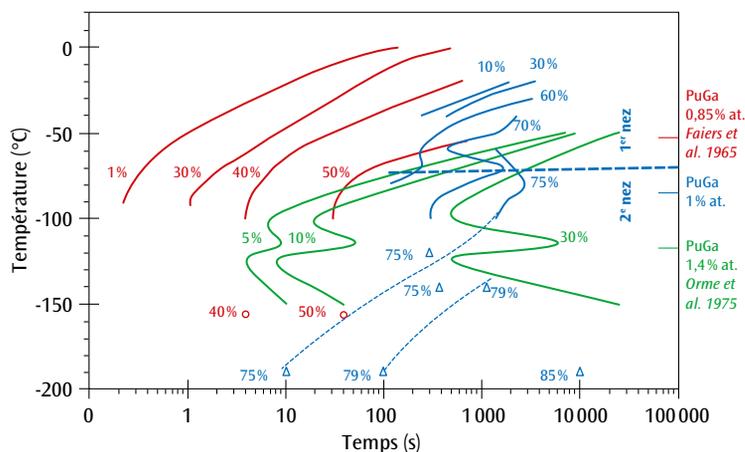
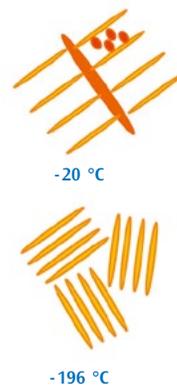


Figure 1. Diagramme TTT (Temps-Température-Transformation) montrant par définition les lignes d'iso-transformation $\delta \rightarrow \alpha'$ (même taux de phase α'), pour différents couples Temps-Température, relatif à la transformation martensitique de l'alliage PuGa 1 % at. en Ga. Ce diagramme montre la présence de deux « nez de transformation », séparés par la ligne pointillée bleue, ainsi que la stabilisation de la phase δ par ajout d'éléments dits deltagènes tel le gallium.



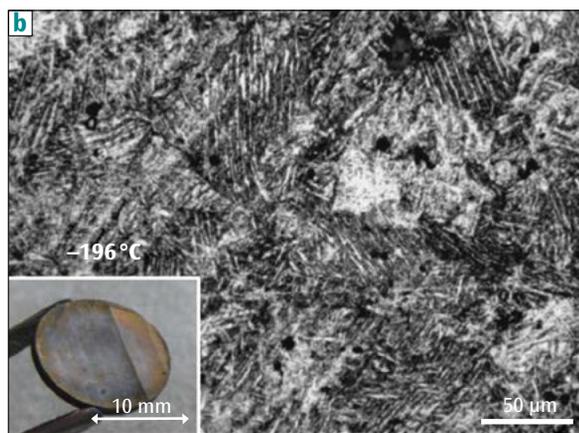
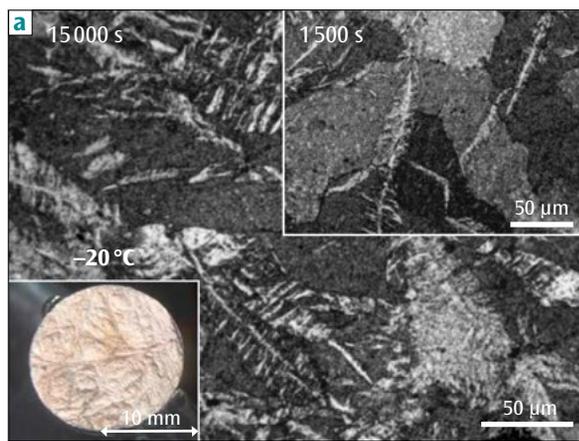


Figure 2. Photos en microscopie à balayage montrant l'existence de 2 morphologies de la phase α' en lien avec la nature de l'accommodation des déformations associées à la transformation martensitique de type élasto-plastique (a) et élastique (b).

une déformation macroscopique de l'échantillon est engendrée aux températures élevées alors qu'aucune déformation n'est induite aux basses températures.

Une analyse phénoménologique des cinétiques expérimentales a été réalisée sur la base du modèle de nucléation hétérogène autocatalytique de Pati et Cohen (**figure 3**). La prise en compte par cette approche de la stimulation de sites de germination supplémentaires, notamment ceux générés par les champs de contraintes locaux avoisinant les plaquettes de martensite formées, a permis de restituer les temps d'incubation mesurés expérimentalement. Néanmoins, la comparaison des cinétiques expérimentales et calculées révèle une surestimation progressive du taux de martensite formée lorsqu'une valeur constante de la barrière énergétique de formation ΔW est considérée. La nécessité d'avoir une augmentation de ΔW pour restituer la saturation de la cinétique expérimentale suggère l'apparition d'interactions et donc de contraintes internes de plus en plus défavorables entre la latte qui se forme et le milieu biphasé dans lequel elle apparaît ; cette augmentation de la barrière énergétique de formation peut ainsi être due à un champ local de contraintes qui défavorise la transformation, ou encore à la présence de défauts qui augmentent

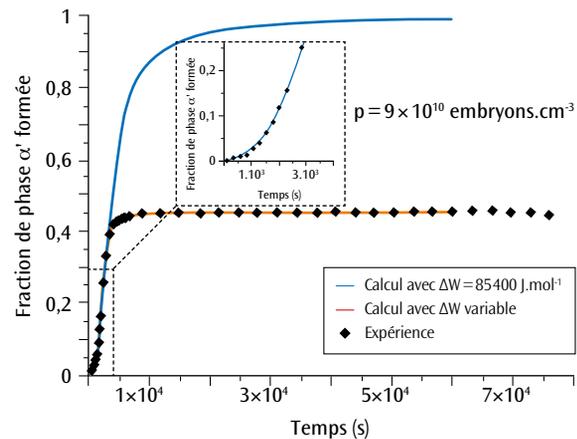


Figure 3. Cinétique expérimentale de la transformation martensitique observée au cours d'une isotherme à -20°C . La restitution de l'expérience (temps d'incubation révélé par l'agrandissement en médaillon et caractère partiel de la transformation) nécessite un facteur autocatalytique de 9×10^{10} embryons $\cdot\text{cm}^{-3}$ et une augmentation de la barrière énergétique de formation ΔW révélant d'une part une stimulation de sites de germination supplémentaires générés par les champs de contraintes locaux avoisinant les plaquettes de martensite formées et l'apparition en fin de transformation d'interactions et donc de contraintes internes s'opposant à la transformation.

la force de friction de l'interface δ/α' au cours de sa croissance. D'un point de vue expérimental, ces interactions se traduisent par le ralentissement progressif de la transformation.

Ces résultats et la comparaison de ces morphologies avec celles formées par transformation martensitique dans les aciers nous conduisent à considérer que ces différences sont dues à un changement de mécanisme d'accommodation des déformations associées à la transformation. En effet, une accommodation de type élasto-plastique pourrait expliquer la morphologie « plume » comparable à la morphologie lenticulaire des aciers présentant une variation du plan d'accolement à l'interface δ/α' . Au contraire, la morphologie en plaquettes « fines et parallèles » pourrait être associée à un mécanisme d'accommodation mettant en jeu un arrangement de variants en relation de macles conduisant à une épaisseur constante de la latte et une contribution bien plus faible de l'accommodation par glissement plastique. D'un point de vue théorique, une modification des mécanismes d'accommodation en fonction de la température de transformation est envisageable, puisque la diminution de température implique une augmentation de la limite d'élasticité dans le matériau limitant ainsi l'activation du mouvement de dislocation à l'origine des glissements plastiques.

Références

- [1] F. LALIRE, B. RAVAT, B. OUDOT, B. APPOLAIRE, A. PERRON, E. AEBY-GAUTIER, F. DELAUNAY, "Phase transformations in PuGa 1 at.% alloy: New valuable insight into the isothermal martensitic δ to α' transformation", *Acta Mater.*, **123**, p. 125-135 (2017).

Recyclage par laser des hublots du Laser Mégajoule

P. CORMONT - C. AMEIL - S. BOUILLET - A. BOURGEADE - P. COMBIS - T. DONVAL - D. HÉBERT -

L. LAMAIGNÈRE - J.-L. RULLIER / CEA – Cesta

T. DOUALLE - L. GALLAIS / Institut Fresnel, UMR 7249 CNRS – Aix-Marseille Université – Centrale Marseille

Après une première vie sur le Laser Mégajoule (LMJ), les composants optiques endommagés peuvent être utilisés à nouveau sur cette installation grâce à un procédé mis au point par le CEA et l'Institut Fresnel à Marseille. L'usinage effectué par laser CO_2 sur chaque zone endommagée donne un cratère propre, sans fracture. Pour garantir la tenue au flux spécifiée pour le LMJ, la technique a néanmoins nécessité quelques perfectionnements dans le choix des paramètres d'usinage, mais aussi par l'ajout d'une étape finale d'attaque chimique.

Sur le Laser Mégajoule, les conditions de fonctionnement ne peuvent empêcher l'apparition de dommages à la surface des hublots d'entrée de la chambre d'expérience. Un exemple de dommage est présenté sur la **figure 1**. Le dommage, généré par l'impulsion du laser, présente une fracturation sous-surfacique importante qui s'étend sous l'effet des impulsions suivantes. Sur le LMJ, un système d'observation permet de suivre l'évolution de la taille de ces dommages. Pour garantir sa résistance mécanique, le hublot doit être remplacé dès qu'une zone fracturée atteint un diamètre de quelques centimètres. Lorsque le hublot est enlevé de la chaîne laser, il n'est pas mis aux déchets, mais est recyclé suivant un procédé mis au point au CEA avec la collaboration de l'Institut Fresnel à Marseille.

Ce procédé utilise un laser CO_2 pour usiner localement le dommage. Le laser CO_2 émettant à $10,6 \mu\text{m}$, longueur d'onde à laquelle la silice est fortement absorbante, il fait fondre et évaporer la zone fracturée pour la remplacer par un cratère sans défaut et dont la forme a été choisie pour ne pas créer des modulations d'intensité importantes sur le faisceau LMJ [1]. La forme conique de ce cratère, visible sur la **figure 1c**, est obtenue en utilisant une tête d'usinage laser qui est composée de miroirs galvanométriques pour dévier rapidement le faisceau laser CO_2 et d'une lentille dite f-thêta qui assure la linéarité du déplacement du faisceau dans le plan focal en fonction de l'angle θ de déviation du faisceau laser. Typiquement, le temps d'usinage du cratère de la **figure 1c** est de quelques dizaines de secondes. L'absence de fracture après usinage laser ne garantit néanmoins pas encore la résistance au flux laser, car celle-ci est limitée par les contraintes dans le matériau et les fines particules éjectées lors de l'usinage.

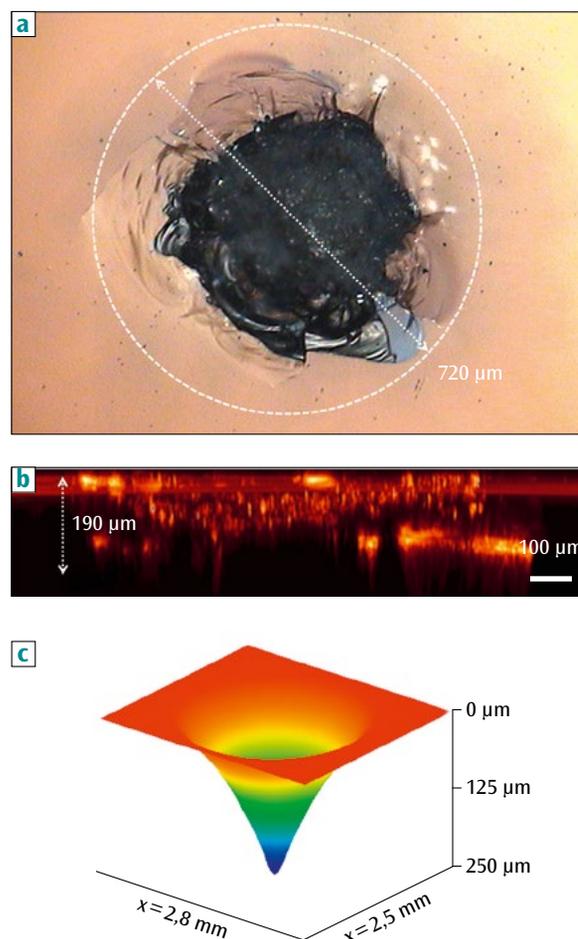


Figure 1. (a) Vue de dessus au microscope d'un dommage de hublot du Laser Mégajoule après plusieurs expériences lasers de puissance. (b) Vue de coupe au microscope confocal du même dommage que (a) : les points rouges indiquent les fractures sous la surface située au-dessus sur cette vue. (c) Image au microscope interférométrique en vue 3D du cratère de forme conique usiné par laser CO_2 , en vue du recyclage du hublot.

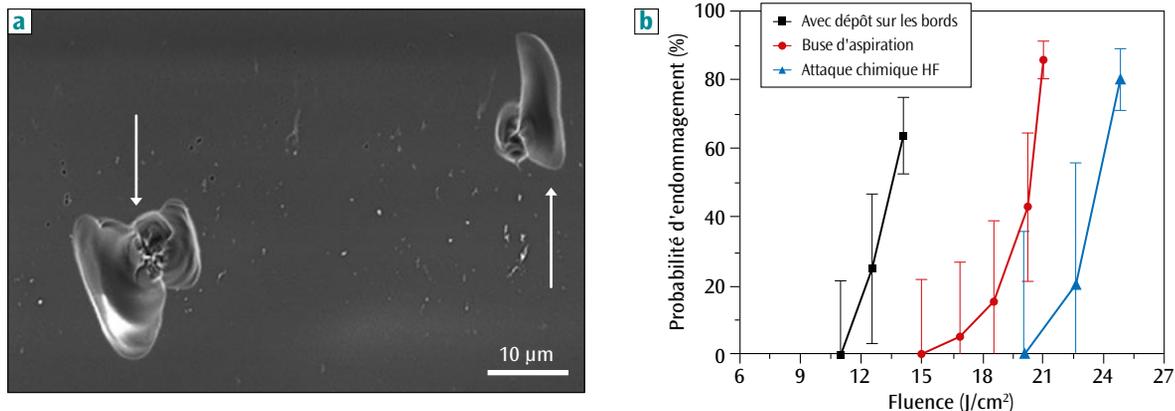


Figure 2. (a) Image au microscope électronique à balayage (MEB) d'une zone en périphérie d'un cratère. Les points blancs de dimensions submicrométriques sont les débris de la matière éjectée lors de l'usinage. Les dommages amorcés lors des tests de tenue au flux sont indiqués par des flèches blanches. (b) Résultats des tests de tenue au flux. Sur l'axe des abscisses est reportée la fluence de l'expérience laser de longueur d'onde 355 nm et de durée d'impulsion 3 ns. L'axe des ordonnées est le pourcentage de tirs laser ayant créé un dommage. La courbe en noir a été obtenue sur un cratère avec un nombre important de débris sur les bords, la courbe en rouge correspond à l'utilisation d'une buse pour aspirer une partie des débris et la courbe bleue a été faite sur des cratères après une attaque chimique à l'acide fluorhydrique (HF) pour enlever les débris. La fluence maximale sur le LMJ étant de 14 J/cm², le micro-usinage laser suivi d'une attaque chimique permet de redonner aux hublots une nouvelle vie.

Les contraintes sont provoquées par le refroidissement rapide de la silice après le passage du laser CO₂. Le recuit thermique dans un four à des températures d'environ 1 050 °C pendant plusieurs heures est une méthode connue pour enlever les contraintes dans le verre. Effectivement, les essais réalisés sur des cratères usinés par laser CO₂ montrent une amélioration de la tenue au flux après recuit [2]. Le relâchement des contraintes entraîne d'ailleurs une légère modification, inférieure au micromètre, de la forme du cratère, ce que les modélisations reproduisent parfaitement [2]. Cependant, cette méthode de recuit thermique n'est pas adaptée aux composants optiques du LMJ, qui doivent garder une très bonne planéité sur toute leur surface de 400 mm de côté. La réduction des contraintes a alors été recherchée, par une bonne interprétation et modélisation des principaux paramètres d'usinage, comme la durée d'irradiation et la puissance du laser. En effet, le modèle thermique permet de calculer la distribution de température dans le matériau pendant l'expérience laser avec ou sans mouvement du faisceau. Combinées avec une approche thermodynamique, ces simulations thermiques permettent de décrire les transformations de la silice lors de l'irradiation afin de prédire la morphologie des cratères formés dans le verre. D'autre part, la partie mécanique du modèle permet de simuler la position et la valeur des contraintes résiduelles [3], générées dans le matériau autour du cratère. Ces travaux ont permis de réduire ces contraintes jusqu'à ce qu'elles ne limitent plus la tenue au flux du cratère usiné.

Les particules éjectées posent aussi un problème sur la tenue au flux. Après éjection, elles se redéposent sur une couronne autour du cratère et sont autant de points d'amorçage de l'endommagement laser comme l'illustre la **figure 2**. Quelques essais avec des buses d'aspiration n'ont donné que des résultats mitigés notamment du fait qu'une distance supérieure à 10 mm est imposée entre la surface

optique et la buse d'aspiration, pour des raisons de mise en œuvre industrielle. L'attaque chimique a alors été envisagée pour éliminer ces particules. L'attaque chimique est en effet utilisée lors de la fabrication des composants optiques du LMJ pour éliminer les défauts absorbants de la couche de polissage. Les procédés mis au point récemment et brevetés par le CEA [4] permettent de limiter la déformation de surface lors de cette opération. Actuellement, de l'acide fluorhydrique est utilisé pour enlever environ un micromètre d'épaisseur sur l'optique. Les résultats des tests de tenue au flux présentés sur la **figure 2** valident le procédé pour une utilisation à pleine puissance sur le LMJ (fluence maximale de 14 J/cm²).

Le procédé de recyclage développé par le CEA combine donc une étape de micro-usinage des dommages pour supprimer les fractures et une étape finale d'attaque chimique pour enlever les résidus précurseurs d'endommagement. Ce procédé permet de redonner aux hublots une résistance proche de leur état initial et souvent suffisante pour qu'ils soient réutilisés sur le LMJ.

Références

- [1] T. DOUALLE *et al.*, "CO₂ laser microprocessing for laser damage growth mitigation of fused silica optics", *Opt. Eng.*, **56**, 011022 (2016).
- [2] T. DOUALLE *et al.*, "Effect of annealing on the laser induced damage of polished and CO₂ laser-processed fused silica surfaces", *J. Appl. Phys.*, **119**, 213106 (2016).
- [3] T. DOUALLE *et al.*, "Thermo-mechanical simulations of CO₂ laser-fused silica interactions", *J. Appl. Phys.*, **119**, 113106 (2016).
- [4] P. BELLEVILLE, P. CORMONT, S. LAMBERT, M. PFIFFER, «Procédé pour améliorer la tenue au flux laser d'un composant optique», demande de brevet français n° 16 58944 déposée le 23 septembre 2016.

Une nouvelle chimie du xénon sous pression

A. DEWAELE / CEA – DAM Île-de-France

N. WORTH - C. J. PICKARD - R. J. NEEDS / Cambridge University, Royaume-Uni

S. PASCARELLI - O. MATHON - M. MEZOUAR / European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble

T. IRIFUNE / Ehime University, Japon

Les gaz nobles (aussi appelés gaz rares), comme le xénon, constituent le groupe d'éléments les plus inertes. Ils peuvent cependant devenir réactifs dans des conditions extrêmes. Plusieurs techniques synchrotron ont été combinées avec la modélisation *ab initio* pour déterminer si le xénon et l'oxygène peuvent réagir ensemble sous haute pression – ce qui est impossible dans les conditions normales. Deux oxydes, de formules chimiques plutôt inhabituelles, Xe_3O_2 et Xe_2O_5 , ont été synthétisés à environ 0,8 million d'atmosphères (80 gigapascals, GPa). Cela montre que le xénon est réactif aux pressions de l'intérieur de la Terre. Cette étude pourrait aider à résoudre le « paradoxe du xénon manquant » dans l'atmosphère terrestre, en suggérant la possibilité d'un stockage dans les profondeurs de la Terre.

Les gaz rares (par ordre de taille : hélium, néon, argon, krypton, xénon, radon) sont très stables chimiquement. On apprend au lycée qu'« un gaz rare ne peut former de liaison chimique avec aucun autre atome ». Cette stabilité est utilisée par la géochimie, qui considère qu'en l'absence de liaison, ils se retrouvent très rapidement sous forme de gaz dans l'atmosphère. Ils sont donc utilisés comme des marqueurs du dégazage des enveloppes terrestres.

Cependant, la chimie du xénon est plus complexe qu'il n'y paraît. En effet, ses atomes, relativement gros, possèdent une couche électronique de valence $5s5p$ polarisable et ayant une faible énergie d'ionisation. Ainsi, depuis les années 1960, des composés contenant du xénon oxydé ont été synthétisés ; mais les oxydes de xénon sont instables. Plus récemment, il a été prédit à l'aide de calculs *ab initio* que plusieurs composés contenant du xénon, en particulier des oxydes de xénon, deviennent stables sous haute pression [1,2]. Mais ces composés n'ont jamais été observés.

Le xénon est une énigme géologique : il est très rare dans notre atmosphère alors qu'il est nettement plus abondant dans des météorites similaires à celles qui ont formé la Terre il y a 4,54 milliards d'années. Plusieurs hypothèses ont été formulées pour expliquer ce « paradoxe du xénon manquant ». L'une des principales serait le stockage du xénon dans les profondeurs de la Terre, et cela explique les études menées sur la réactivité chimique du xénon

sous pressions extrêmes (jusqu'à 3,6 millions d'atmosphères, au centre de la Terre).

Pour savoir si le xénon et l'oxygène, qui est l'élément le plus abondant dans le manteau terrestre, peuvent réagir directement sous haute pression, des mélanges des gaz xénon et oxygène ont été chargés dans des cellules à enclumes de diamant (figure 1), où ils ont été comprimés jusqu'à près de 1 million d'atmosphères et chauffés à l'aide d'un laser infrarouge pour induire les réactions. Des réactions ont effectivement eu lieu ; elles ont été caractérisées par diffraction de rayons X microfocalisés et absorption de rayons X, à l'ESRF (European Synchrotron Radiation Facility), le synchrotron européen à Grenoble. Ces données expérimentales ont permis de démontrer l'existence de réaction(s) ; en particulier, l'absorption de rayons X a permis de mettre en évidence une oxydation du xénon. En revanche, ces mesures n'ont pas permis d'identifier de manière certaine la structure cristalline des produits, car l'oxygène est quasi transparent pour les rayons X, en comparaison du xénon qui est beaucoup plus lourd.

Les données expérimentales ont donc été interprétées à l'aide de calculs de recherche de structure réalisés à l'université de Cambridge. Ces calculs ont déterminé les structures les plus stables compatibles avec les données de diffraction de rayons X collectées, afin d'identifier le(s) produit(s) synthétisé(s) ; ces calculs ont plus généralement servi à chercher l'ensemble des oxydes

de xénon stables sous pression. Cela a permis de montrer que du Xe_2O_5 , une stœchiométrie unique pour un oxyde, s'était formé dans les mélanges riches en oxygène. Par la suite, du Xe_3O_2 , dont la stabilité avait été prédite par des calculs *ab initio* [1], a été synthétisé dans des mélanges riches en xénon (figure 2) [3].

Les calculs ont montré que le xénon est plus réactif chimiquement que ce que l'on pensait. Cela est dû au rôle inattendu de ses électrons 4d dans les liaisons. Le xénon adopte une valence mixte

dans ces oxydes, avec des degrés d'oxydation allant de +4 à +6 et de 0 à +4, ce qui pourrait être une tendance générale dans les composés formés sous pression. La composition chimique complexe de l'intérieur de la Terre ainsi que son histoire ne permettent pas de conclure si de tels oxydes sont effectivement présents dans son sein. Cependant, si cette réactivité chimique accrue est confirmée, sa classification géochimique dans les éléments volatils et atmosphiles serait susceptible d'être révisée.

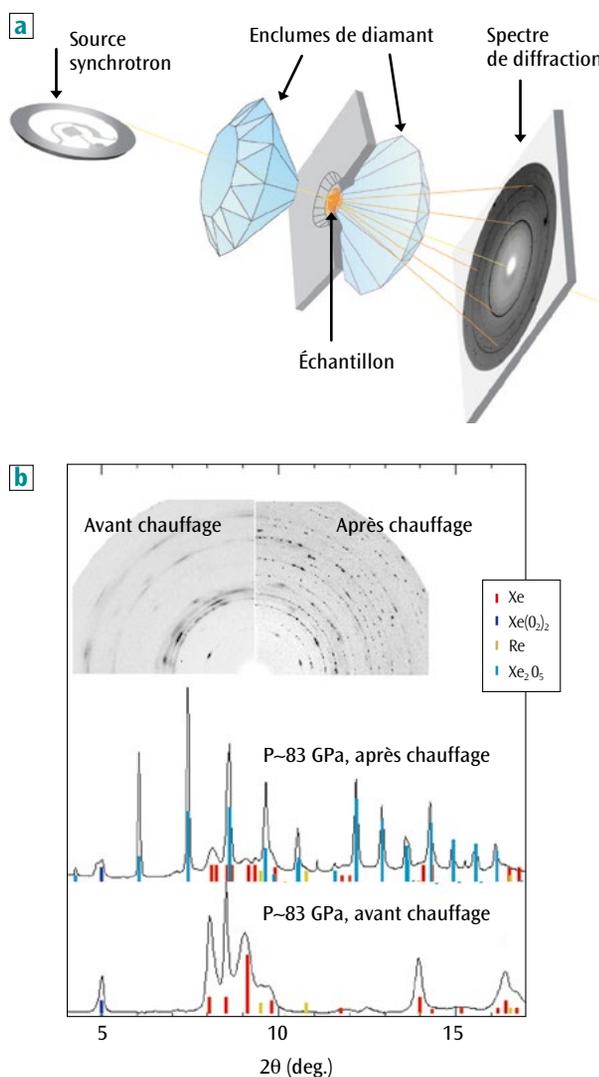


Figure 1. (a) Un faisceau très fin de rayons X est envoyé sur l'échantillon comprimé entre deux enclumes de diamant ; le spectre de diffraction des rayons X déviés par l'échantillon est enregistré sur un détecteur bidimensionnel. Une réaction chimique est repérée par l'apparition d'un nouveau spectre de diffraction, qui permet alors de caractériser les produits. (b) Spectres de diffraction (bidimensionnels et intégrés circulairement) collectés avant et après chauffage laser dans un mélange Xe-O₂, qui a permis la synthèse de Xe₂O₅ caractérisé par les pics de diffraction indiqués par les lignes verticales bleues.

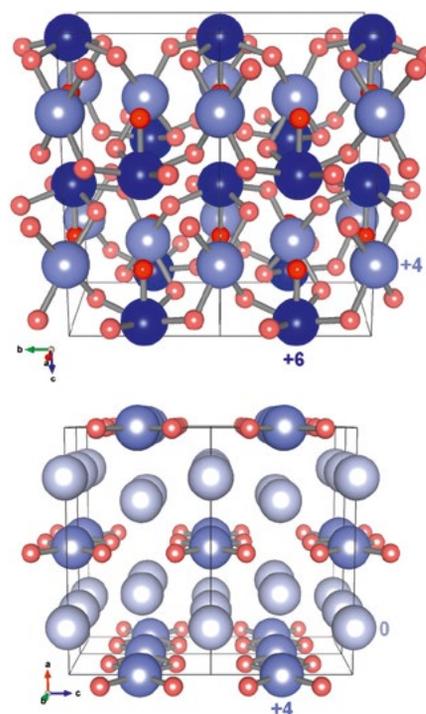


Figure 2. Structure des oxydes stables. (haut) Xe₂O₅ et (bas) Xe₃O₂. Les atomes de xénon sont en bleu, les atomes d'oxygène en rouge. Les atomes d'oxygène, qui ont le degré d'oxydation -2, sont liés soit à un (rouge vif), soit à deux (rouge clair) atomes de xénon. Les nuances de bleu indiquent différents degrés d'oxydation des atomes de xénon.

Références

- [1] A. HERMANN, P. SCHWERTFEGER, "Xenon suboxides stable under pressure", *J. Phys. Chem. Lett.*, **5**, p. 4336-4342 (2014).
- [2] Q. ZHU *et al.*, "Stability of xenon oxides at high pressures", *Nature Chem.*, **5**, p. 61-65 (2013).
- [3] A. DEWAELE *et al.*, "Synthesis and stability of xenon oxides Xe₂O₅ and Xe₃O₂ under pressure", *Nature Chem.*, **8**, p. 784-790 (2016).

Revêtements colonnaires par projection plasma de suspensions

B. BERNARD - A. QUET - E. HERVE / CEA – DAM Le Ripault
L. BIANCHI / Safran Tech, Magny-les-Hameaux

L'augmentation des températures de fonctionnement des turboréacteurs est un axe de développement privilégié dans l'industrie aéronautique. Une solution est l'optimisation des couches isolantes appelées barrières thermiques. Le procédé de projection plasma de suspensions permet d'envisager une amélioration significative des performances pour les prochaines générations de barrières thermiques. Il a en effet montré des capacités à générer des microstructures colonnaires associant faible conductivité thermique et durée de vie élevée. Le procédé a par ailleurs été évalué pour la réalisation des revêtements sur des pièces fonctionnelles.

Les barrières thermiques utilisées au niveau des parties exposées à des températures élevées au sein des turbines à gaz aéronautiques sont des systèmes multicouches multifonctionnels. Elles permettent, tout en protégeant les éléments métalliques, un gain de température de l'ordre de 100 à 150 °C et ainsi une amélioration du rendement du turboréacteur. Plusieurs générations de barrières thermiques se sont succédé, au rythme du développement des procédés de dépôt. Sur le plan industriel, deux technologies sont utilisées pour la mise en œuvre de la couche céramique isolante en zircone yttrée (YSZ). La projection plasma sous air à pression atmosphérique (APS, Atmospheric Plasma Spraying) conduit à des microstructures lamellaires à faible conductivité thermique mais à durée de vie limitée. Pour les pièces fortement sollicitées thermomécaniquement, le procédé de dépôt physique en phase vapeur avec une évaporation sous faisceau d'électrons (EBPVD, Electron Beam Physical Vapor Deposition) est privilégié. En effet, les microstructures colonnaires résultant de ce procédé assurent, notamment *via* l'accommodation des contraintes thermomécaniques, des durées de vie élevées. Néanmoins, une limitation propre à cette structure colonnaire réside dans des valeurs de conductivité thermique relativement élevées. Cet article s'intéresse aux possibilités offertes par le procédé de projection plasma de suspensions pour améliorer les propriétés de la couche en YSZ.

Modulation de la microstructure

Évolution du procédé de projection plasma conventionnel, le procédé de projection plasma de suspensions (SPS, Suspension Plasma Spraying) consiste à injecter, dans un jet de plasma, une suspension de particules

dispersées dans un solvant, voire des précurseurs du matériau à déposer en solution. Ses principaux atouts résident dans sa capacité à générer une large gamme de compositions et de microstructures de revêtements (colonnaires, homogènes, micro-fissurées verticalement, incluant des taux de porosité contrôlés), en modulant les caractéristiques de la suspension et les conditions plasma. La microstructure colonnaire, associée à des durées de vie élevées, présente un intérêt particulier. La formation des colonnes trouve son origine dans la déviation des petites particules au voisinage du substrat [1]. Une étude microstructurale a conduit à l'identification et à la maîtrise des paramètres influant sur la morphologie des revêtements (taille de colonnes, distribution de taille, compacité) [2]. Deux nuances optimisées en zircone yttrée, nommées colonnaire et colonnaire compacte (figure 1), ont été

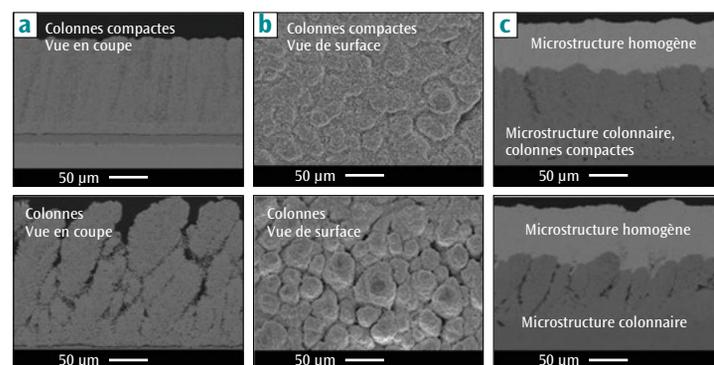


Figure 1. Micrographies de revêtements en zircone yttrée (YSZ), de microstructure colonnaire compacte (en haut) et colonnaire (en bas), réalisés par projection plasma de suspensions : (a) vues en coupe polie et (b) morphologie de surface. (c) Illustration des possibilités de fonctionnalisation de ces dépôts par un revêtement de microstructure homogène.

sélectionnées et mises en œuvre sur des supports en superalliage revêtus d'une sous-couche d'accroche. Des architectures bicouches comprenant un dépôt colonnaire et un dépôt homogène en surface ont également été développées, démontrant la capacité du procédé à apporter une fonctionnalité supplémentaire à l'empilement, telle une résistance aux agressions environnementales de type chimique (infiltrations CMAS $[\text{CaO}-\text{MgO}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2]$) ou mécanique (érosion) (figure 1).

Propriétés thermiques et durées de vie

La conductivité thermique des revêtements a été estimée à partir de mesures de diffusivité réalisées par méthode flash. Elle peut notamment être modulée par l'espacement entre les colonnes. Les deux dépôts SPS optimisés, colonnaire et colonnaire compact, présentent des conductivités thermiques inférieures à $0,8 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, c'est-à-dire des valeurs avantageuses par rapport à celles des revêtements EBPVD évaluées à $1,5 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ (figure 2). Les performances des dépôts colonnaires SPS, en matière d'isolation thermique, apparaissent par ailleurs compétitives par rapport aux dépôts YSZ obtenus par APS, dont la conductivité thermique a été mesurée à $0,9 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$. Ces résultats peuvent s'expliquer par la réduction en taille de la porosité et sa dispersion homogène.

La durée de vie des dépôts colonnaires SPS, évaluée par des essais de cyclage thermique entre 80 et 1100°C, démontre également l'opportunité qu'offre le procédé pour l'amélioration des barrières thermiques. Elle apparaît au moins équivalente à celle d'un dépôt YSZ réalisé par EBPVD, considérant que la sous-couche d'accroche diffère (β NiAlPt pour l'EBPVD et γ/γ' pour le procédé SPS). La microstructure colonnaire présente des durées de vie supérieures à la micro-

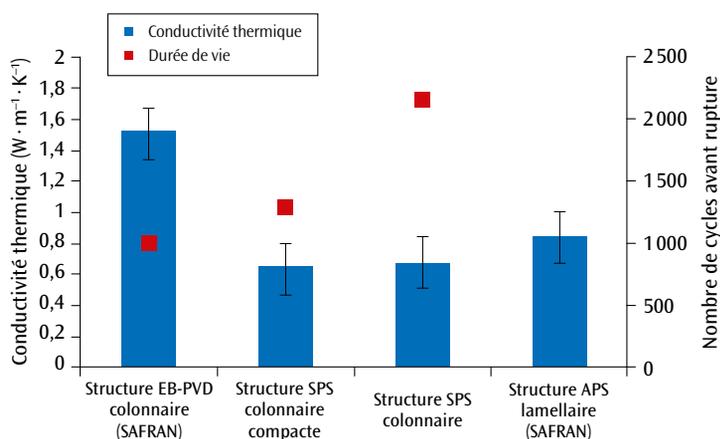


Figure 2. Comparaison des valeurs de conductivité thermique et des durées de vie (résistance au cyclage thermique) de revêtements en YSZ réalisés via les procédés EBPVD (sous-couche β NiAlPt), projection plasma de suspensions (SPS, sous-couche γ/γ') et projection plasma voie sèche (APS). Le procédé de projection plasma de suspensions SPS permet d'obtenir des conductivités thermiques très satisfaisantes, inférieures à $1 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ et des durées de vie comparables, voire supérieures, à celles du procédé EBPVD, dépendamment de la sous-couche d'accroche.

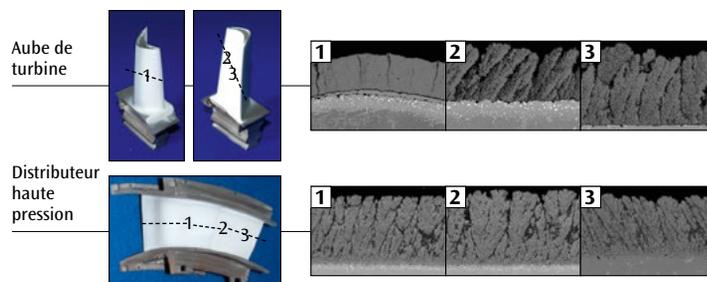


Figure 3. Aube et distributeur de turbine haute pression avec un revêtement réalisé par projection plasma de suspensions et micrographies du revêtement illustrant la variation de la microstructure (orientation des colonnes) en fonction des zones d'observation numérotées de 1 à 3.

structure colonnaire compacte. Le résultat le plus élevé obtenu, supérieur à 2000 cycles, est particulièrement prometteur (figure 2).

Essais de mise en œuvre sur des pièces fonctionnelles

La faisabilité de mise en œuvre des revêtements colonnaires sur des pièces opérationnelles, tels une aube de turbine et un distributeur haute pression, a été considérée (figure 3). L'accroche du dépôt SPS est satisfaisante tout comme la conservation des trous d'évent. La microstructure présente une variabilité inhérente à la réalisation de dépôts sur pièce. L'impact de ces variabilités sur les propriétés reste à évaluer. Le cas échéant, une optimisation de la cinématique de dépôt pourrait être menée.

Conclusion

Les performances, en matière de conductivité thermique et de durée de vie, de revêtements colonnaires obtenus par projection plasma de suspensions sont particulièrement remarquables pour une application au sein des systèmes de barrières thermiques. La diversité des matériaux projetables et la possibilité de générer différentes microstructures pour la réalisation d'empilements multifonctionnels sont également des atouts pour satisfaire les exigences multiples liées à l'environnement de fonctionnement.

Références

- [1] K. VAN EVERY *et al.*, "Column formation in suspension plasma-sprayed coatings and resultant thermal properties", *J. Therm. Spray Tech.*, **20**, p. 817-828 (2011).
- [2] B. BERNARD *et al.*, "Columnar suspension plasma sprayed coating microstructural control for thermal barrier coating application", *J. European Ceramic Society*, **36**, p. 1081-1089 (2016).

Porosité du TATB

par spectrométrie RMN de diffusion et microscopie MEB-FIB

■ P. PALMAS-T. BOTZANOWSKI - M. GUERAIN - A. FORZY - É. BRUNETON - G. DEL RIO / CEA – Le Ripault

Dans une composition énergétique, les performances détoniques et la sensibilité au choc sont des propriétés étroitement liées à la présence de pores au sein du matériau. La porosité du TATB (1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène) a été étudiée par une approche originale en spectrométrie RMN (résonance magnétique nucléaire). Son principe repose sur la mesure du phénomène de diffusion restreinte de l'eau résiduelle piégée dans le matériau. Des cavités de plusieurs microns, fermées et contenant une solution $\text{NH}_4\text{Cl}/\text{H}_2\text{O}$ ont été clairement mises en évidence. Ce résultat a été confirmé à l'échelle d'un grain de matière par nanotomographie MEB (microscope électronique à balayage)-FIB (ou SEM-FIB en anglais, Scanning Electron Microscope-Focused Ion Beam). Les caractéristiques géométriques et les tailles moyennes des porosités déduites des reconstructions d'image 3D sont cohérentes avec celles obtenues par RMN et montrent la bonne complémentarité entre les deux techniques [1].

Les compositions à base de TATB constituent une famille importante d'explosifs qui offrent un bon compromis entre insensibilité et performance. Dans de tels matériaux, ces propriétés peuvent être modulées par la présence de porosités. La modification de pression produite par un choc mécanique peut en effet les transformer en points chauds capables de concentrer l'énergie et de propager une détonation. Les impuretés du TATB ont été caractérisées par RMN. Ces mesures ont montré que des résidus d'eau et de NH_4Cl sont présents sous forme de solutions à l'état liquide contenues dans des macroporosités.

Pour étudier ces porosités, le phénomène d'autodiffusion de l'eau a été mis à profit. Cette approche est plus communément utilisée pour l'étude de composés poreux imprégnés par un fluide [2]. L'autodiffusion caractérise l'aptitude des particules à se mouvoir au sein d'un liquide sous l'effet de l'agitation thermique. Les collisions de nature aléatoire imposent à chaque particule un déplacement quadratique moyen λ à l'origine du mouvement brownien. Ce phénomène est décrit par le coefficient de diffusion libre noté D_0 dont la valeur est constante au cours du temps. Au sein d'un pore, certaines molécules d'eau, dont la proportion dépend directement du rapport surface sur volume S/V du pore, rencontrent les parois. Il en résulte une diminution de λ et donc du coefficient de diffusion apparent D_{app} en fonction du temps.

Le principe de la mesure RMN repose sur un codage spatial au moyen d'un gradient de champ magnétique g . Le déplacement des molécules est codé pendant un intervalle de diffusion Δ choisi. Un spectre RMN des impuretés est acquis pour plusieurs valeurs de g qui est incrémenté. D_{app} s'obtient par ajustement gaussien de l'atténuation du signal RMN en fonction de g (figure 1).

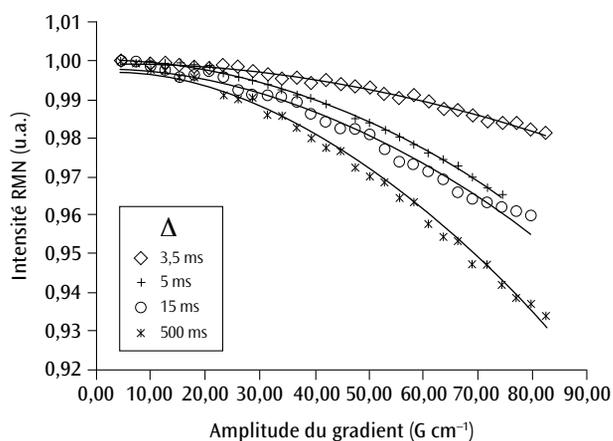


Figure 1. Courbes de diffusion normalisées, obtenues pour différentes valeurs de l'intervalle de diffusion Δ , montrant l'atténuation de l'intensité du spectre d'impuretés en fonction de l'amplitude du gradient. La ligne continue représente le résultat de l'ajustement des points expérimentaux qui permet de déduire les valeurs du coefficient de diffusion apparent D_{app} pour les différentes valeurs de Δ .

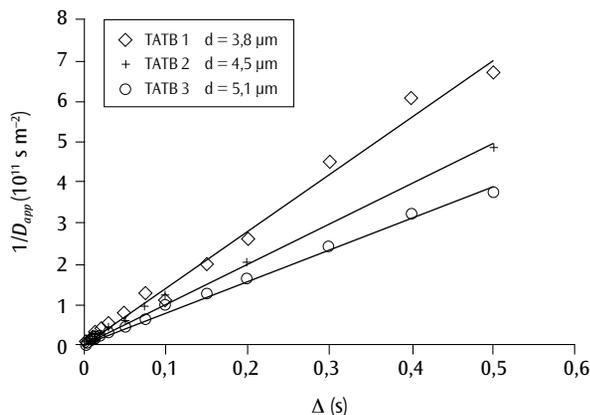


Figure 2. Évolution du paramètre $1/D_{app}$ en fonction de Δ obtenue pour 3 lots de TATB. Les tailles de pores, déduites d'un ajustement linéaire (courbes continues), sont données directement sur la figure (coefficient de détermination R^2 supérieur à 0,99).

C'est dans l'évolution du rapport D_{app}/D_0 en fonction de Δ que réside l'information géométrique. Pour le TATB, on observe une décroissance continue sans valeur limite à temps long. Ce comportement est caractéristique du régime de diffusion restreinte de l'eau dans des pores fermés non connectés et de géométrie relativement simple, c'est-à-dire non tortueux à l'échelle de quelques microns. Dans ce cas de figure, une taille moyenne de pore peut être déterminée par ajustement linéaire de l'évolution de $1/D_{app}$ en fonction de Δ (**figure 2**).

Pour compléter la mesure RMN moyennée à l'échelle de la poudre de TATB, de l'imagerie 3D a été réalisée par MEB-FIB sur des grains individuels. Cette technique consiste à enregistrer une série d'images MEB d'un petit échantillon de quelques dizaines de microns dont la surface est érodée couche après couche par un faisceau d'ions gallium. Une fois traités puis binarisés, les clichés sont assemblés. Une procédure de reconstruction du volume permet ensuite de visualiser directement les pores en trois dimensions (**figure 3**) [3].

Les images obtenues sont en bon accord avec les résultats RMN : de grandes cavités de l'ordre de 2 à 3 μm sont mises en évidence, certaines pouvant atteindre 7 μm ; leurs formes sont relativement simples et légèrement allongées ; elles sont non connectées et pour la plupart fermées.

Un diamètre de sphère équivalente a été calculé à partir du volume de chaque cavité puis utilisé pour construire un diagramme de distribution. La valeur moyenne, déterminée par une

pondération volumique, proche de 4 μm , est conforme à celles déterminées par diffusion.

Conclusion

Des porosités de plusieurs microns dans les grains de poudre de TATB ont été mises en évidence et étudiées en combinant la mesure de diffusion par RMN et des observations microstructurales locales par MEB-FIB. Les informations obtenues par ces deux méthodes, par nature très différentes, sont en bon accord et complémentaires. Appliquée à l'étude de compositions pressées, cette approche fournira des éléments nécessaires à l'élaboration des codes de calculs.

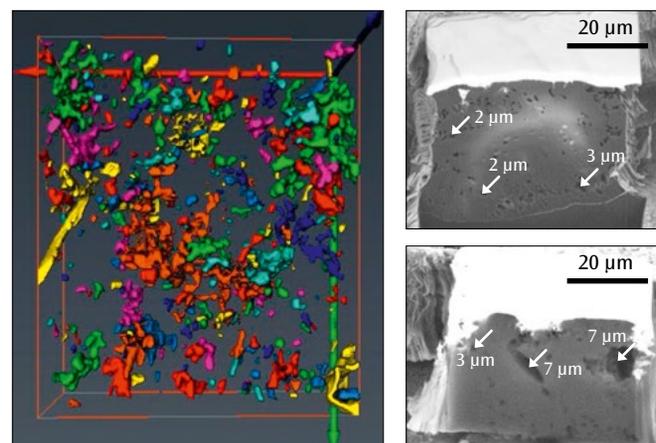


Figure 3. Microscopie MEB-FIB du TATB : à gauche, image 3D binarisée montrant la structure poreuse à l'intérieur du volume (la couleur sert à distinguer les pores voisins); à droite, deux clichés MEB individuels extraits de la série d'images.

Références

- [1] P. PALMAS *et al.*, "Size determination of porosity inclusions in an organic solid material by ^1H NMR diffusion and SEM-FIB experiments: The TATB case", *J. Phys. Chem. B*, **120**, p. 4152-4159 (2016).
- [2] J.-F. KUNTZ *et al.*, "Restricted diffusion and exchange of water in porous media: Average structure determination and size distribution resolved from the effect of local field gradients on the proton NMR spectrum", *J. Magn. Reson.*, **191**, p. 239-247 (2008).
- [3] L. HOLZER *et al.*, "Three-dimensional analysis of porous BaTiO_3 ceramics using FIB nanotomography", *Journal of Microscopy*, **216**, p. 84-95 (2004).

Une stratégie pour éliminer les défauts ponctuels d'un matériau

A. VATTRÉ / CEA – DAM Île-de-France
T. JOURDAN - M.-C. MARINICA / CEA – Saclay

L'irradiation d'un matériau métallique par des neutrons, des ions ou des électrons de forte énergie engendre le déplacement de défauts (atomes individuels ou en amas) qui altèrent les propriétés mécaniques de ces matériaux. Une modélisation multi-échelle conçue par le CEA a démontré que certaines interfaces contribuent à réduire considérablement la concentration de défauts d'irradiation dans les matériaux.

Sous irradiation, la sursaturation en défauts ponctuels provoque l'agglomération de ces défauts en amas, qui dégradent le comportement mécanique d'un matériau cristallin jusqu'à localiser l'endommagement et favoriser l'amorçage des fissures. Une idée simple pour remédier à ces problèmes consiste à élaborer des matériaux possédant une grande densité de « puits » qui éliminent de manière efficace ces défauts. Ces puits peuvent être des interfaces hétérophases ou des joints de grain (interfaces homophases). Il existe une variété infinie d'interfaces qui n'ont pas la même efficacité pour éliminer les défauts créés. Il apparaît donc nécessaire de conduire une approche multi-

échelle permettant d'évaluer les forces de puits de ces interfaces de manière systématique, afin d'être capable de concevoir des matériaux fonctionnels ayant une microstructure optimisée pour la tenue mécanique sous irradiation.

L'étude multi-échelle

Une interface peut être définie comme la surface entre deux matériaux dissemblables. Ces interfaces peuvent différer par leur désorientation, leur composition chimique et leur structure cristallographique, comme c'est le cas pour le joint de grain de torsion dans un plan (001) dans l'argent, et l'interface hétérophase entre l'argent et le

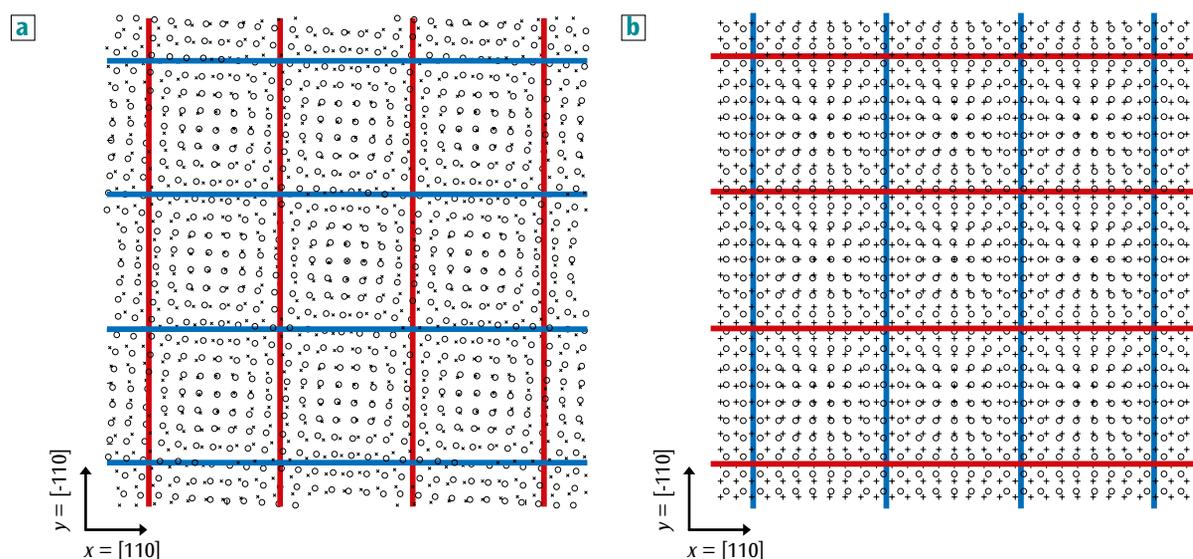


Figure 1. Représentation d'une interface semi-cohérente. Les cercles représentent les atomes du matériau immédiatement situé au-dessus de l'interface et les croix au-dessous. (a) Pour un joint de grain argent/argent, les réseaux cristallins sont pivotés d'un certain angle (de signe opposé). (b) Pour une interface hétérophase cuivre/argent, les atomes sous l'interface n'ont pas le même paramètre de maille. Dans ces deux interfaces, un réseau de dislocations paramétriques est formé afin d'accommoder (a) une désorientation et (b) une différence de paramètres de maille.

civre (**figure 1**). Ces interfaces sont qualifiées de semi-cohérentes, car il n'existe pas de coïncidence parfaite lorsque les atomes des deux matériaux se rencontrent. Un grand nombre de positions sont toutefois préservées et sont séparées par des lignes de mauvais accord cristallographique, appelées réseaux de dislocations paramétriques (en rouge et bleu sur la figure), que l'on peut rapprocher de figures de moiré obtenues soit par rotation (**figure 1a**), soit par homothétie (**figure 1b**). Ces défauts linéaires génèrent des champs de contraintes élastiques à courte distance à proximité des interfaces qui peuvent interagir avec d'autres sources de contraintes internes, comme celles produites par les défauts d'irradiation.

Afin de caractériser ces interactions élastiques, l'approche multi-échelle utilise trois types de méthode : les calculs à l'échelle atomique (*ab initio*) pour les défauts ponctuels (lacunes et interstitiels) créés par irradiation, les calculs en élasticité anisotrope et hétérogène pour les propriétés élastiques des interfaces et enfin les simulations de Monte-Carlo cinétique sur objets pour l'étude du couplage entre les défauts créés et les interfaces. Bien que le champ élastique complet des réseaux de dislocations annule les contraintes de cohérence à longue distance [1], ces deux composantes ne s'annulent pas à courte distance, ce qui génère des champs élastiques très hétérogènes, biaise la diffusion des espèces présentes dans les matériaux et donne lieu à une force de puits significative pour l'absorption des défauts ponctuels [2].

Forces de puits

Pour évaluer les forces de puits, un apport uniforme et constant de défauts ponctuels qui peuvent interagir avec les interfaces considérées a été simulé dans le code Monte-Carlo cinétique sur objets. Sans interaction, la force de puits simulée a parfaitement été confrontée aux résultats analytiques dans le cas de la diffusion lacunaire et interstitielle. Les résultats montrent que les forces de puits, en tenant compte des interactions élastiques, sont largement supérieures près des interfaces à celles obtenues sans interaction et donc aucun interstitiel n'est présent à environ 2 nm de part et d'autre de l'interface hétérophase. Cela reflète la capacité séduisante de l'interface argent/cuivre à éliminer des défauts ponctuels.

Afin de mettre en évidence les paramètres ayant un rôle prépondérant dans l'absorption des défauts, des calculs simplifiés ont été réalisés. Les résultats

indiquent que cette approximation entraîne une diminution très significative de la force de puits. En somme, l'anisotropie des défauts d'irradiation, négligée dans de nombreuses études de la littérature, est en grande partie responsable de la force de puits des interfaces considérées. La **figure 2** montre les trajectoires des interstitiels migrant préférentiellement vers le centre des dislocations. Ce caractère non aléatoire de la trajectoire des défauts dans un champ élastique créé par l'interface constitue un enjeu prometteur dans la conception de matériaux sur mesure afin de garantir une bonne tenue des matériaux sous irradiation.



Figure 2. Trajectoires moyennes de diffusion des interstitiels (courbes grises) vers le centre des dislocations (quadrillage en bleu foncé). La concentration de défauts au niveau de l'interface est représentée par le dégradé de couleur.

Références

- [1] A. VATTRÉ, M. J. DEMKOWICZ, "Determining the Burgers vectors and elastic strain energies of interface dislocation arrays using anisotropic elasticity theory", *Acta Materialia*, **61**, p. 5172-5187 (2013).
- [2] A. VATTRÉ, T. JOURDAN, H. DING, M.-C. MARINICA, M. J. DEMKOWICZ, "Non-random walk diffusion enhances the sink strength of semicoherent interfaces", *Nature Comm.*, **7**, 10424 (2016).

Schémas conservatifs pour la dynamique des gaz sur grilles cartésiennes décalées

■ G. DAKIN - H. JOURDREN / CEA – DAM Île-de-France

Les équations de la dynamique des gaz interviennent dans une grande variété de problèmes physiques. La plupart des méthodes proposées dans la littérature visent à répondre à une classe particulière de ces problèmes. Une nouvelle méthode numérique est proposée pour approcher la solution de ces équations. Cette méthode, ou classe de schémas, permet de simuler un large spectre de problèmes comprenant ondes de choc, propagation acoustique à longue distance et dynamique des tourbillons. L'essentiel, pour une telle méthode, est d'assurer la capture correcte des chocs en vérifiant des critères de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale. En outre, elle est basée sur une formulation en grilles cartésiennes décalées qui permet de monter en ordre, mais aussi d'assurer une meilleure restitution des ondes acoustiques.

La mécanique des fluides est un domaine physique vaste dans lequel se côtoient tout autant des écoulements très réguliers que des écoulements présentant des chocs et des discontinuités. Dans le but de simuler une large variété de problèmes, comme la propagation à longue distance d'ondes acoustiques, la dynamique des tourbillons, la propagation d'ondes de choc ou encore la simulation des grandes échelles, une nouvelle méthode est proposée pour approcher la physique de ces écoulements.

Intérêt de la formulation conservative d'ordre élevé sur maillages décalés

Cette méthode, ou schéma hydrodynamique, repose sur l'écriture des équations de l'écoulement fluide dans le référentiel de la matière, ou lagrangien, formulée en énergie interne. Une des propriétés importantes pour la simulation des écoulements fluides est la conservation, d'un point de vue discret, de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale du fluide. C'est une des conditions requises pour la capture correcte des ondes de choc. Pour cela, on utilise une discrétisation de l'espace basée sur des volumes finis réguliers (des segments de taille égale en 1D, des rectangles identiques en 2D). De plus, le schéma repose sur l'utilisation de grilles cartésiennes décalées. Les vitesses sont disposées au centre des faces d'une maille, tandis que les quantités thermodynamiques sont disposées au centre des mailles. Cette disposition permet à la fois une meilleure restitution des ondes acoustiques et une montée en ordre aisée. Cette montée en ordre

permet d'atteindre une plus grande précision pour des écoulements réguliers. Les propriétés requises de la méthode peuvent être ainsi résumées: (1) l'utilisation de grilles décalées pour une meilleure restitution acoustique, (2) une montée à l'ordre élevé pour davantage de précision sur les écoulements réguliers et (3) une conservation discrète de

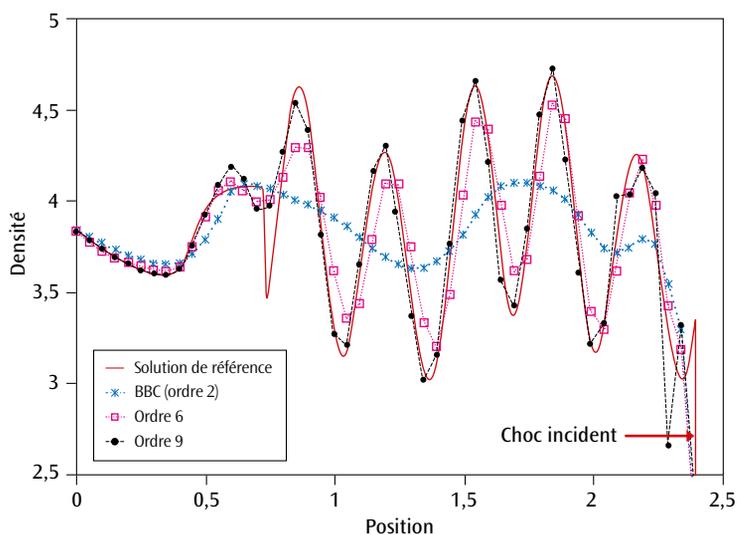


Figure 1. Cas-test de Shu-Osher: représentation du champ de densité, pour la propagation d'un choc à Mach 3 dans un milieu avec un champ de densité sinusoïdal. La solution de référence est calculée par un schéma de type Godunov classique d'ordre 1 avec 50000 mailles et représentée par la courbe rouge. En bleu, magenta et noir sont respectivement représentés les champs de densité obtenus pour les schémas d'ordre 2 (bleu), d'ordre 6 (magenta) et 9 (noir) avec 200 mailles. L'apport des ordres très élevés est visible, permettant avec un faible nombre de mailles de restituer correctement les oscillations derrière le choc incident.

Ordre	2	3	4	5	6	7	8	9
EOC	2,014	2,984	4,013	4,936	6,052	6,933	7,996	8,580

Tableau 1. Ordre expérimental de convergence (EOC) pour les schémas proposés sur les grilles cartésiennes décalées pour l'advection du vortex isentropique. Les ordres relevés correspondent aux ordres attendus, hormis pour le schéma d'ordre 9. Cette particularité est due à l'utilisation d'une séquence de splitting directionnel qui est d'ordre 8 en temps.

la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale pour la capture correcte des chocs.

Maillages décalés, énergie interne et conservation

Historiquement, le premier schéma hydrodynamique a été proposé par von Neumann et Richtmyer [1] à la fin des années quarante. Il s'agit d'un schéma 1D lagrangien d'ordre 2, explicite en temps, formulé en énergie interne, faisant usage de variables décalées en espace comme en temps. En 1961, Trulio et Trigger [2] identifient le défaut de conservation de l'énergie totale pour ce schéma. Le schéma n'est pas en mesure de restituer correctement les chocs. Ils proposent alors une version implicite strictement conservative, décalée en espace mais centrée en temps. En 1984, une version conservative Lagrange-projection centrée en temps et explicite (dite BBC) est publiée [3] pour des maillages 2D cartésiens décalés. Récemment, des schémas Lagrange-projection sur grilles cartésiennes centrées d'ordre très élevé (c'est-à-dire supérieurs à deux) ont été proposés [4]. Enfin, l'extension à l'ordre très élevé de schémas sur grilles cartésiennes décalées de type BBC a été réalisée au CEA – DAM Île-de-France [5].

La montée à l'ordre très élevé en espace se fait par l'utilisation d'interpolation par polynômes d'ordre élevé, tandis que l'ordre très élevé en temps se fait par l'utilisation de séquences de type Runge-Kutta. La conservation de la masse et de la quantité de mouvement s'obtient par simple écriture. *A contrario*, la conservation de l'énergie totale, somme des énergies interne et cinétique, n'est pas évidente. Elle est réalisée grâce à un correcteur en énergie interne qui permet ainsi la capture correcte des ondes de choc. La spécificité du travail exposé dans [5] est de parvenir à regrouper les propriétés (1), (2) et (3).

À la fin de la phase lagrangienne, la densité, la quantité de mouvement et les énergies interne et cinétique sont projetées, de manière conservative, sur leurs grilles initiales respectives. L'extension 2D de la souche de schémas 1D est réalisée comme dans [4] avec des séquences d'ordre adéquat Strang-Yoshida de balayages directionnels. L'idée est de résoudre le problème alternativement dans chaque

direction. Du fait des propriétés de conservation du schéma 1D, le schéma 2D est conservatif avec une disposition naturelle des vitesses et des énergies cinétiques aux faces.

Des résultats numériques sont présentés jusqu'à l'ordre 9. Le cas-test de Shu-Osher (figure 1) traite l'interaction d'un choc à Mach 3 avec un champ sinusoïdal de densité et illustre la robustesse de ces schémas, ainsi que leur capacité à restituer le train d'onde derrière le choc incident. L'erreur numérique en fonction du nombre de mailles est calculée pour l'advection 2D d'un vortex isentropique : les ordres de convergence attendus sont effectivement atteints (tableau 1).

Conclusion

Cette nouvelle souche de schémas fait l'objet d'une introduction dans une plate-forme de simulation, pour comparaison à des schémas centrés [4] sur des problèmes où l'ordre de convergence est essentiel, comme en propagation longue distance d'ondes acoustiques, dynamique des tourbillons ou simulation des grandes échelles.

Références

- [1] J. VON NEUMANN, R.D. RICHTMYER, "A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks", *J. Appl. Phys.*, **21**, p. 232-237 (1950).
- [2] J. TRULIO, K. TRIGGER, "Numerical solution of the one-dimensional Lagrangian hydrodynamics equations", *Lawrence Radiation Laboratory Report*, Technical Report UCRL-6267 (1961).
- [3] P. WOODWARD, P. COLELLA, "The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks", *J. Comput. Phys.*, **54**, p. 115-173 (1984).
- [4] F. DUBOC, C. ENAUX, S. JAOUEN, H. JOURDREN, M. WOLFF, "High-order dimensionally split Lagrange-remap schemes for compressible hydrodynamics", *C. R. Acad. Sci. Paris - Ser. I - Mathematics*, **348**, p. 105-110 (2010).
- [5] G. DAKIN, H. JOURDREN, "High-order accurate Lagrange-remap hydrodynamic schemes on staggered Cartesian grids", *C. R. Acad. Sci. Paris - Ser. I - Mathematics*, **354**, p. 211-217 (2016).

Modane : un outil de conception pour les codes de simulation numérique

■ B. LELANDAIS - M.-P. OUDOT / CEA – DAM Île-de-France

L'augmentation continue de la puissance des supercalculateurs permet la création de codes de simulation numérique de plus en plus aboutis. Par conséquent, les physiciens et mathématiciens en charge du développement sont confrontés à des algorithmes complexes qu'ils doivent intégrer dans de gros simulateurs en utilisant des technologies informatiques pointues. Le CEA – DAM étudie depuis plusieurs années l'apport des technologies d'ingénierie des modèles au cycle de développement de ses simulateurs. Ce travail a notamment donné naissance à l'application Modane [1], présentée dans cet article.

Le processus classique de développement d'un code de simulation numérique consiste à écrire des documents de spécification, généralement au format Latex, et à développer, à partir de ces documents, du code source en C++. Les ingénieurs en charge de ce développement ont, pour la plupart, une formation en mathématiques appliquées. Ils appréhendent de manière naturelle la phase de spécification mais, lorsque la phase de codage débute, ils sont confrontés à une quantité importante de concepts et de technologies informatiques: le paradigme orienté objet, le langage C++, les différents modes de parallélisme, etc. Cette complexité peut entraîner beaucoup d'erreurs de conception: manque d'interface, taille trop importante des classes, couplages trop nombreux, utilisation abusive de l'héritage. De plus, les choix d'architecture sont très dépendants de l'expérience de l'ingénieur et sont rarement documentés. Avec le temps et l'évolution du logiciel, le code source devient la seule véritable base de connaissances dans laquelle il est complexe de retrouver les concepts métier importants tels que les modules physico-numériques, les variables ou encore les principales opérations.

Afin de remédier à ces difficultés, le logiciel Modane a été développé. Il permet aux ingénieurs de développement de décrire graphiquement la partie statique des codes de simulation, c'est-à-dire l'ensemble des composants comme les variables, structures ou modules, et des relations entre ces composants, comme les héritages ou les associations. Modane est composé d'une interface graphique pour capturer la connaissance métier, d'un ensemble de règles pour valider les éléments saisis et de générateurs de code C++. La génération de code garantit que l'architecture du logiciel est en accord avec la connaissance saisie dans l'interface graphique. Le code généré est dédié à la plateforme de simulation

numérique Arcane, conjointement développée par le CEA – DAM et IFP Énergies nouvelles [2].

L'utilisation de Modane se déroule en trois phases. La première s'effectue dans l'interface graphique (figure 1). Une palette permet de créer des diagrammes et des composants représentant les concepts métier clefs identifiés lors des spécifications. Cette palette offre également des outils pour représenter les relations d'héritage et d'association entre ces composants. Il reste alors à renseigner les propriétés de l'ensemble des éléments au sein de fenêtres graphiques dédiées. Toute cette connaissance est stockée dans un modèle arborescent visible dans un explorateur. D'un point de vue technique, cette interface graphique est réalisée par personnalisation du modèleur Magicdraw avec un profil UML et du code Java.

La deuxième étape consiste à déclencher sur le modèle un ensemble de règles de vérification: contraintes de nommage, compatibilité de types, choix de conception, etc. Des alertes classées par niveau (information, avertissement et erreur) sont levées. Les messages d'erreur sont affichés dans l'interface et les éléments en erreur comportent une pastille rouge, dans les diagrammes et dans l'explorateur de modèle, ce qui facilite les corrections.

Enfin, le modèle validé est exporté pour pouvoir être exploité dans Eclipse, l'environnement de développement C++ [3]. La génération de code est déclenchée par un menu contextuel accessible sur le fichier de modèle et elle produit toute la structure du code source C++ pour Arcane de l'application: l'ensemble des descripteurs de composants (fichiers XML), la totalité du code source des classes de base de l'application ainsi que le squelette des classes réservées à l'ingénieur de développement. L'ensemble des classes est compilable par Eclipse et le développement du corps des opérations peut immédiatement

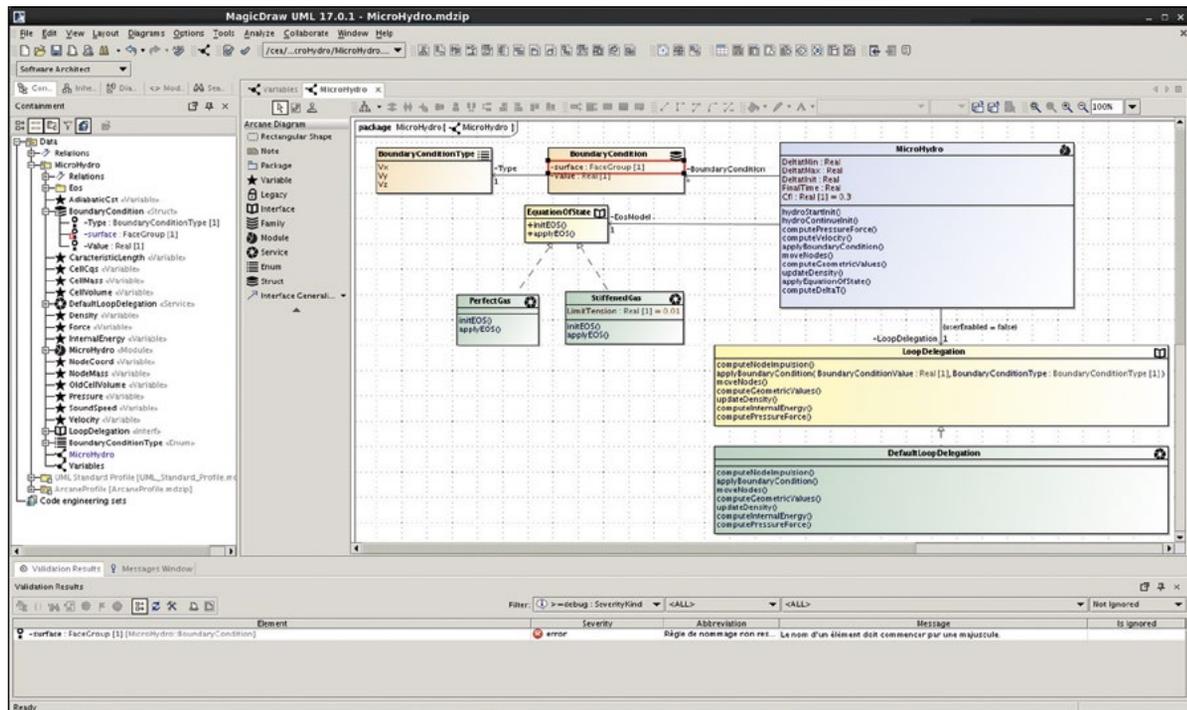


Figure 1. Fenêtre principale de l'interface graphique du logiciel Modane.

commencer. Précisons que le parallélisme n'est pas géré par Modane, qui ne s'intéresse qu'à la partie statique de l'application, mais par Arcane, qui prend en charge le parallélisme MPI et offre des outils et services pour le parallélisme de tâches et la vectorisation.

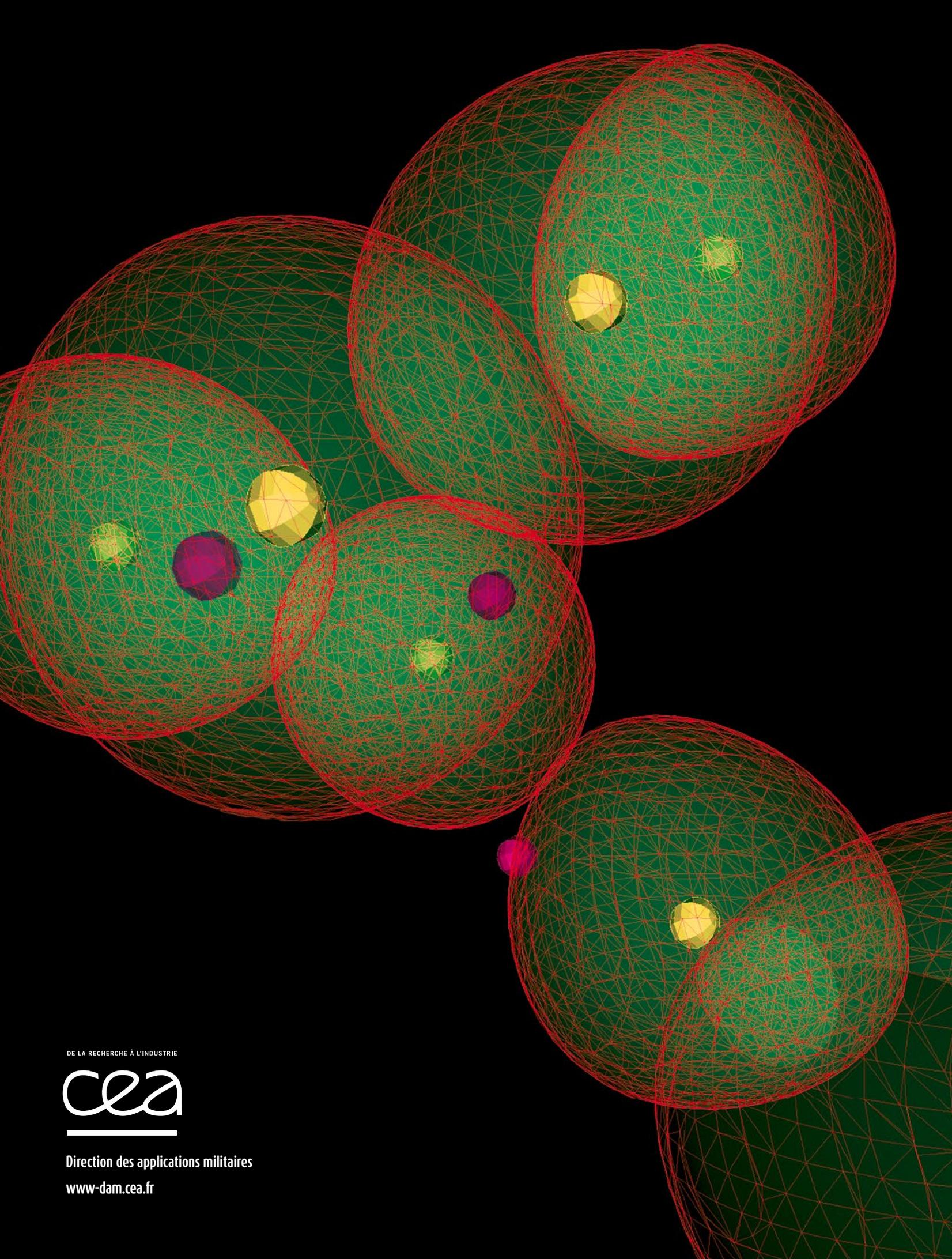
Développée depuis septembre 2011, l'application Modane est opérationnelle depuis avril 2012. Elle est maintenant utilisée par une dizaine d'ingénieurs de développement sur deux projets du CEA - DAM. Ces ingénieurs reconnaissent un réel gain d'efficacité; ils se concentrent sur les concepts métier de l'application durant la phase de conception et sur la partie fonctionnelle des algorithmes durant la phase de développement. Les changements d'architecture (*code refactoring*) sont également grandement facilités, atout important lorsqu'une méthode de développement itérative est utilisée. On remarque également que l'équipe Arcane peut faire évoluer facilement les bibliothèques dont les appels se trouvent dans le code généré. Il suffit alors de modifier les générateurs pour prendre en compte les modifications. Après quatre années d'utilisation, une première analyse du code produit par les équipes de développement relève moins d'erreurs de conception que sur les projets précédents. Du fait des générateurs, le code source est parfaitement homogène. Le niveau de qualité s'est donc amélioré. Néanmoins, le principal apport de Modane reste son mode de développement collaboratif: les ingénieurs façonnent ensemble l'architecture de l'application autour des concepts métier importants, ils échangent autour

des diagrammes, les utilisent comme support pour communiquer et les nouveaux collaborateurs appréhendent plus aisément les codes de simulation grâce à leur représentation graphique. À ce titre, Modane capitalise une partie de la connaissance.

Nous continuons actuellement à peaufiner le modèle et faisons évoluer les générateurs pour utiliser les fonctionnalités des nouvelles normes C++. Afin d'éviter la phase d'export du modèle, nous travaillons également à une version totalement intégrée à Eclipse et étudions l'apport que nous offrirait le langage Nabla [4] sur certaines parties.

Références

- [1] B. LELANDIS, M.-P. OUDOT, "Modane: A Desing Support Tool for Numerical Simulation Codes", *Oil Gas Sci. Technol. – Rev. IFP Énergies nouvelles*, 71, p. 57 (2016).
- [2] G. GROPELLIER, B. LELANDIS, "The Arcane development framework", *Proceedings of the 8th workshop on Parallel/High-Performance Object-Oriented Scientific Computing (POOSC'09)*, Genova, Italy, July 6-10, p. 1-11 (2009).
- [3] D. STEINBERG, F. BUDINSKY, M. PATERNOSTRO, E. MERKS, *EMF Eclipse Modeling Framework*, Addison Wesley, 2008.
- [4] J.-S. CAMIER, "Improving Performance Portability and Exascale Software Productivity with the ∇ Numerical Programming Language", *Proc. of the 3rd International Conference on Exascale Applications and Software (EASC '15)*, Edinburgh, United Kingdom, April 21-23, 2015, p. 126-131 (2015).



DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE



Direction des applications militaires

www-dam.cea.fr