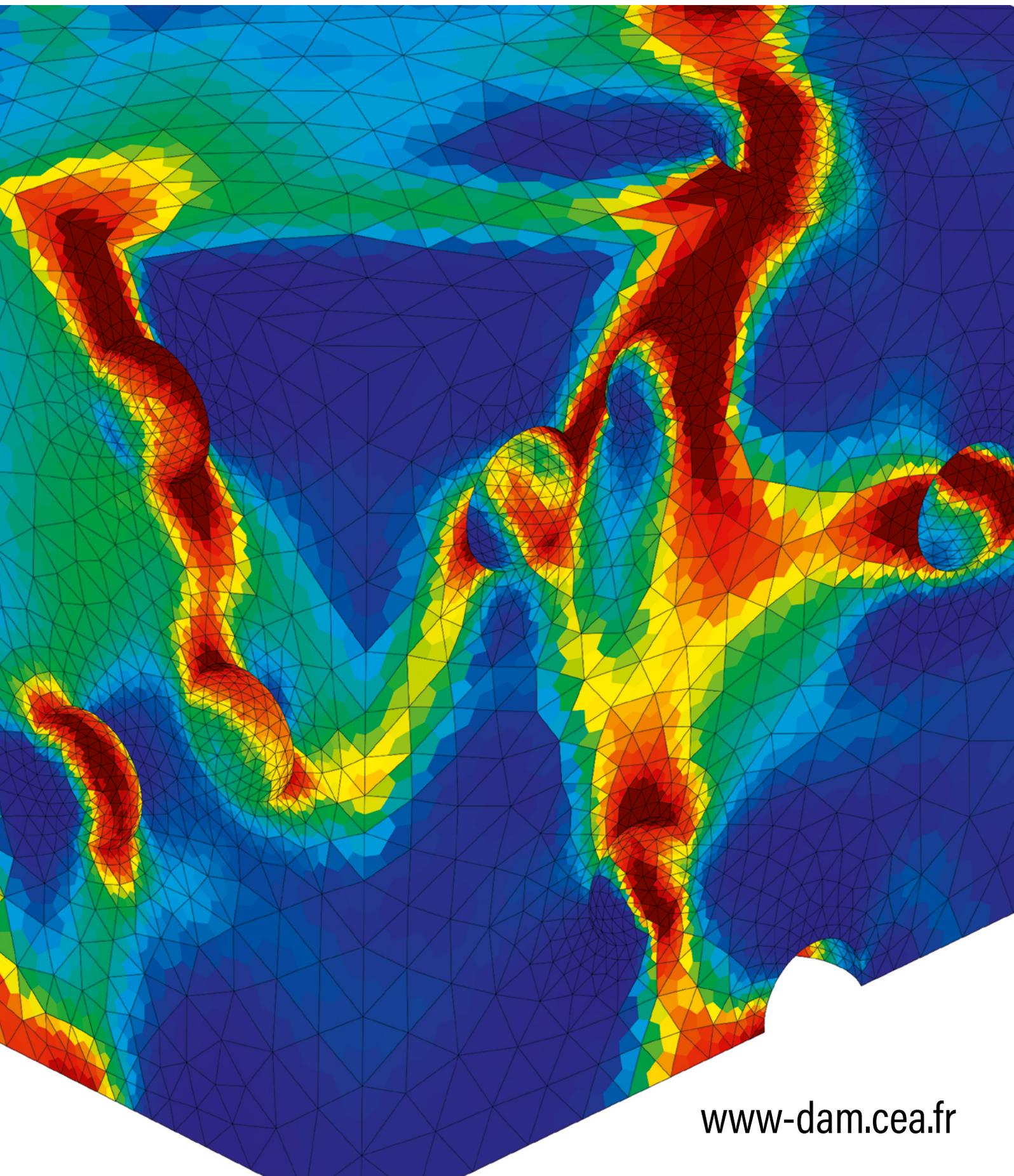


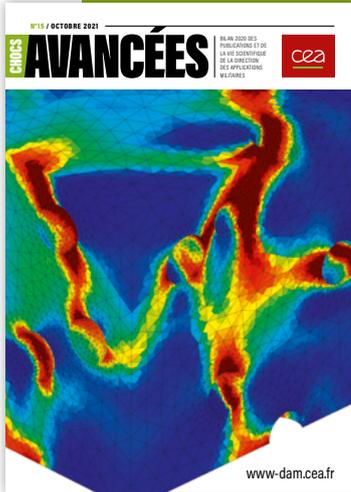
N°15 / OCTOBRE 2021

CHOCS AVANCÉES

BILAN 2020 DES
PUBLICATIONS ET DE
LA VIE SCIENTIFIQUE
DE LA DIRECTION
DES APPLICATIONS
MILITAIRES



www-dam.cea.fr



N°15 / OCTOBRE 2021

AVANCÉES

EN COUVERTURE. Simulation de la rupture ductile d'un volume élémentaire contenant un réseau aléatoire de pores. Image issue des travaux de thèse de Clément Cadet au CEA - Valduc.

Bilan 2020 des publications et de la vie scientifique de la Direction des applications militaires

Commissariat à l'énergie atomique
et aux énergies alternatives

Directeur de la publication
Laurence Bonnet

Coordinateur scientifique
Nicolas Authier

Comité scientifique
Nicolas Authier, Denis Autissier,
Philippe Belleville, Nathalie Blanchot,
Daniel Bouche, Serge Bouquet, Gilles Bourgès,
Michel Bourzeix, Remo Chiappini,
Francis Hardouin, Hélène Hébert,
Hervé Jourden, Pierre-Henri Maire,
Jean-Luc Miquel, Thomas Plisson,
Gilles Roy, Eric Royer, Stéphanie Thiébaud,
Eric Van Renthergem

Rédacteur en chef
Jean-Marc Laborie, avec la participation
de Laurence Lours

Création, réalisation et impression
EFIL / www.efil.fr

Conformité
Régine Regnault

Correction
Stylience / www.stylience.fr

Diffusion et abonnement
Régis Vîzet

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

Email : chocs@cea.fr

Brochure imprimée sur papier écogéré
ISSN 1961-7399
Dépôt légal à parution

*La reproduction totale ou partielle des
informations et illustrations contenues
dans ce numéro doit être soumise à
l'accord préalable du CEA. Le courrier
des lecteurs sera transmis aux auteurs
par le secrétariat de la revue.*

La revue est consultable sur

www-dam.cea.fr

sommaire

ÉDITORIAL 02

VIE SCIENTIFIQUE 04

INTERACTION RAYONNEMENT-MATIÈRE, PHYSIQUE DES PLASMAS 10

Des instabilités plasma induites par laser aux chocs non collisionnels astrophysiques.....10
L. GREMILLET, C. RUYER, J. FUCHS, M. LEMOINE

Première observation expérimentale d'un choc de photoabsorption.....12
C. COURTOIS, O. POUJADE, E. ALOZY, S. BRYGGO, D. DARBON, A. DUVAL, J. FARIAUT, B. MARCHET, I. MASCLLET-GOBIN, P. SEYTOR, G. SOULLIE, L. VIDEAU, B. VILLETTE, R. WROBEL, C. CHICANNE, T. CHIES, M. FERRI, H. GRAILLOT, O. HENRY

L'intelligence artificielle pour accélérer des simulations de fusion par confinement inertiel.....14
G. KLUTH, K. D. HUMBRID, B. K. SPEARS, L. PETERSON, H. A. SCOTT et al.

Progrès dans la modélisation de la dynamique des électrons dans les ceintures de radiation.....16
D. MOURENAS, A. V. ARTEMYEV, X.-J. ZHANG, Q. V. AGAPITOV

PHYSIQUE NUCLÉAIRE 18

L'intelligence artificielle pour prédire la structure des noyaux d'atome.....18
D. REGNIER, J.-P. EBRAN, R. LASSERI, A. PENON

Mesure de très haute précision des neutrons de fission du plutonium 239.....20
J. TAIEB, P. MARINI, B. LAURENT, G. BÉLIER, A. CHATILLON, P. MORFOUACE, D. ÉTASSE, M. DEVLIN, J. A. GOMEZ, R. C. HAIGHT, K. J. KELLY, J. M. O'DONNELL, K. T. SCHMITT

MATÉRIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE 22

Première observation de l'hydrogène métallique.....22
P. LOUBEYRE, F. OCCELLI, P. DUMAS

Nouvelle investigation de la cinétique des transitions de phase en conditions extrêmes.....24
C. DENOUAL, A. DEWAELE, B. AMADON, N. BRUZY, É. BOULARD, V. RIFFET

Étude expérimentale et numérique du micro-jetting : influence des modifications structurales induites par choc.....26
L. SOULARD, O. DURAND, A. SOLLIER, E. LESCOUTE

THERMOHYDRAULIQUE ET MÉCANIQUE DES FLUIDES 28

Progrès dans la simulation des écoulements raréfiés pour la rentrée atmosphérique.....28
C. BARANGER, L. MIEUSSENS

MÉCANIQUE ET THERMIQUE 30

Mise en évidence de l'apparition d'anisotropie mécanique dans des explosifs.....30
G. PLASSART, D. PICART, M. GRATTON, M. CALIEZ, A. FRACHON

Nouvelle méthode de détermination de la sensibilité au choc des explosifs.....32
G. BAUDIN, T. ELIA, V. CHUZEVILLE, M. GENETIER, A. LEFRANÇOIS

Vers une modélisation complète du comportement dynamique des élastomères.....34
D. JALOCHA

Vers une simulation multiéchelle des explosifs solides.....36
M. REYNAUD, R. SORIN, V. DUBOIS, N. DESBIENS

OPTIQUE ET OPTRONIQUE 38

Création d'impulsions laser ultrabrèves par une source à fibre optique.....38
E. HUGONNOT, É. POEYDEBAT, F. SCOL, G. BOUWMANS

INSTRUMENTATION, MÉTROLOGIE ET CONTRÔLE 40

Calorimétrie : une méthode non destructive pour la mesure du tritium et son inventaire.....40
F. BACHELET, S. CLOUARD, A. FABRE, A. LIS, C. MATHONAT

Nouvelle méthode d'étalonnage d'un système de mesure de vitesse de choc et de détonation.....42
Y. BARBARIN, A. LEFRANÇOIS, V. CHUZEVILLE, J. LUC, S. MAGNE

ÉLECTROMAGNÉTISME ET GÉNIE ÉLECTRIQUE 44

Compréhension des effets des interférences électromagnétiques intenses sur des alimentations électroniques.....44
L. CUIROS, F. PUYBARET, G. MEJECAZE, T. DUBOIS, J.-M. VINASSA

CHIMIE 46

Vers une compréhension fine du devenir de l'eau tritiée adsorbée sur zéolithe.....46
C. CHAMBELLAND, D. DUCRET, J. RANDRIANANDRAINA, M. GRIVET, C. RAMSEYER, B. CARDEY, J.-E. GROETZ

Première élaboration d'un matériau composite de type oxyde par caléfaction.....48
A. ALLEMAND, C. BESNARD, L. MAILLÉ, P. DAVID

Potentiel du molybdène pour la lutte contre la prolifération nucléaire.....50
É. PILI, C. FITOUSSI, E. YOBREGAT, B. BOURDON, V. MIGEON

MATHÉMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL 52

Sprite : vers une imagerie radar 3D haute résolution.....52
P. MINVIELLE-LARROUSSE, T. BENOUDIBA-CAMPANINI, J.-F. GIOVANNELLI

Reconstruction d'interface résolue par apprentissage automatique en hydrodynamique.....54
H. JOURDREN, B. DESPRÉS

Un nouveau solveur Monte-Carlo pour la photonique.....56
G. POËTTE, X. VALENTIN

2020, une année singulière

À

la lecture de ce nouveau numéro de la revue *Avancées* qui illustre quelques leviers majeurs de la politique scientifique de la Direction des applications militaires (DAM) du CEA et met en lumière quelques-unes des plus remarquables publications de l'année écoulée, tout semble refléter l'expression *business as usual*. Le nombre de publications, dont certaines dans les plus prestigieuses revues scientifiques, est élevé, équivalent à celui des années antérieures, le nombre d'habilitations à diriger des recherches obtenues par des chercheurs du CEA – DAM est important, fruit de la politique incitative menée par la direction de la DAM et de messages répétés sur l'importance de ce diplôme pour la reconnaissance du leadership scientifique et pour l'attractivité, des accords importants de collaboration avec des laboratoires académiques de premier plan ont été finalisés – dont le laboratoire de recherche conventionné Anabase et plusieurs groupements de recherche – et plusieurs contrats, que ce soit auprès de l'ANR ou de l'Europe, ont été gagnés, renforçant le rôle de premier plan du CEA – DAM dans plusieurs domaines stratégiques comme le calcul haute performance.

Pourtant, au CEA – DAM comme ailleurs, cette année 2020 a été bien singulière. Le premier indice se trouve dans le nombre de doctorants ayant soutenu leur thèse : plutôt de l'ordre de 45 chaque année, il plafonne cette année à 24. L'impossibilité pour les jeunes chercheurs de poursuivre leurs travaux sur les sites durant plusieurs semaines a significativement impacté, pour la plupart d'entre eux, la finalisation des recherches, même si l'impact a été moindre pour certains en dernière année qui étaient en phase de rédaction de leur manuscrit : ils n'ont parfois pas pu soutenir leur thèse par manque de solution pratique dans les premiers mois de la crise. Le CEA, sous la houlette du haut-commissaire à l'énergie atomique et de l'INSTN, a instruit chaque dossier de demande de prolongation en prenant en compte l'avis éclairé des encadrants, CEA et extérieurs, et a su accompagner les doctorants dans cette phase complexe et inédite. Cela a également été le cas des stagiaires attendus début 2020, notamment dans le cadre de leur projet de fin d'études (PFE), où là encore, les équipes du CEA – DAM (et du CEA plus généralement) ont redoublé d'ingéniosité et d'engagement pour adapter les sujets initiaux en fonction des contraintes de travail à distance, voire permettre, par une évolution du sujet,

la réalisation de la totalité du stage à distance tout en maintenant un lien fort avec les jeunes particulièrement désavantagés par ces conditions de travail. Il leur manquera, bien sûr, notamment dans le cas où les conditions ne leur ont même pas permis de venir au laboratoire, le volet relationnel du stage et l'immersion quotidienne au sein d'une équipe qui permet, grâce aux interactions avec les collègues, de prendre toute la mesure de ce que sont le travail collaboratif et l'importance des échanges entre experts. Cette dimension est un apport majeur du PFE, permettant bien souvent aux futurs diplômés de parfaire leur projet professionnel et de mieux définir leurs souhaits en matière d'environnement de travail. Heureusement, ces conditions particulières ont peu impacté les arrivées de nouveaux doctorants et près de 50 jeunes diplômés issus d'écoles d'ingénieurs et de formations universitaires nous ont rejoint en 2020 pour démarrer au sein de nos laboratoires un projet de recherche qui se terminera courant 2023, ou début 2024 pour certains, par l'obtention de leur doctorat. La capacité d'accueil est cependant supérieure, que

« La DAM dans son ensemble a réussi à se réinventer pour faire face aux contraintes imposées par la crise sanitaire et limiter l'impact sur les programmes dont elle a la charge. »

ce soit pour un stage, une thèse, une alternance ou un postdoctorat, et cela motive un accroissement de nos efforts de mise en visibilité auprès des formations en 2021 et au-delà, en nous appuyant notamment sur le réseau des ambassadeurs de la DAM dans les établissements de l'enseignement supérieur et sur nos liens de coopération actuels ou futurs.

Dans ce contexte de crise qui a frappé durement le monde entier, il me semble important de rappeler ici, au-delà de ce qui vient d'être souligné, la façon dont la DAM dans son ensemble, avec les spécificités de ses activités, mais aussi les enjeux majeurs qui y sont associés, a réussi à se réinventer pour faire face aux contraintes imposées par la crise sanitaire et limiter l'impact sur les programmes dont elle a la charge : les missions primordiales dont la réalisation est la pierre angulaire de la permanence de la dissuasion ont notamment été assurées. L'engagement de tous les acteurs mobilisés est à souligner.

Ce contexte de crise, inédit à cette échelle, conduit par ailleurs à l'émergence de questionnements sur le financement de la recherche, notamment suite à l'éclatant succès de biotechs qui ont été soutenues dans la durée afin de développer un socle stratégique de connaissances fondamentales sur lequel elles ont pu s'appuyer et mettre au point en un temps record des vaccins sûrs et efficaces. Cela n'est pas sans rappeler quelques spécificités des recherches et développements menés à la DAM au service des programmes que lui confie l'État, qui bénéficient de financements pérennes et à la hauteur des objectifs scientifiques à atteindre, ce qui permet le développement de programmes de recherche ambitieux ainsi que le développement de connaissances à même de répondre, le moment venu, aux besoins des programmes. Dans l'exemple emblématique des travaux de recherche et développement ayant conduit à la mesure précise de la pression de métallisation de l'hydrogène solide et qui ont été publiés en 2020 dans la prestigieuse revue *Nature*, c'est la conjonction de deux facteurs qui a permis, en soutien à la créativité et à l'ingéniosité des chercheurs, de disposer des ressources tant humaines que matérielles pour mettre au point, brique après brique et avec l'appui de compétences extérieures sous forme de stages, de travaux de doctorants, de postdoctorants et d'experts chevronnés, l'ensemble des techniques nécessaires à cette première mondiale : il y a d'une part la continuité temporelle des financements alloués en interne DAM depuis plus de vingt ans et, d'autre part, leur niveau, cohérent avec l'importance de la thématique « équations d'état » pour le programme Simulation. Le conseil scientifique de la DAM a d'ailleurs souligné, dans l'avis qu'il a rendu à la suite de l'examen du plan d'orientation scientifique préparé par la direction scientifique de la DAM à la demande du haut-commissaire à l'énergie atomique, le caractère fondamental de cette continuité de moyens qui permet le développement d'une expertise de haut niveau, durable et fiable, indispensable à la crédibilité des travaux menés au profit des missions et à l'atteinte des résultats attendus.

En conclusion, je voudrais tout particulièrement rendre hommage aux experts qui sont au cœur de la politique scientifique de la DAM. Ils œuvrent avec passion et détermination à repousser les frontières des connaissances scientifiques et des technologies, conférant ainsi à la DAM la capacité de remplir les objectifs scientifiques et techniques ambitieux des programmes. Maintenir ce très haut niveau d'expertise dans la durée et attirer de nouveaux talents, riches de nouvelles compétences, sont des objectifs majeurs de la politique scientifique : ils permettront à la DAM, aujourd'hui comme demain, de réussir les programmes que lui confie l'État pour la défense et la sécurité de notre pays.



Laurence Bonnet

Directrice scientifique
de la Direction des applications militaires du CEA

vie scientifique

Prix et distinctions reçus en 2020

Prix Landau-Spitzer

X. RIBEYRE et **A. CASNER**, ingénieurs-chercheurs du CEA – DAM mis à disposition au sein du Celia (Centre lasers intenses et applications, UMR CEA – CNRS – Université de Bordeaux), ont reçu avec leurs collègues américains R. Betti et W. Theobald, du Laboratory of Laser Energetics à l'université de Rochester, le prix Landau-Spitzer décerné conjointement par l'American Physical Society et l'European Physical Society. Il récompense une collaboration de long terme notable en physique des plasmas et plus particulièrement des avancées majeures pour le concept de l'ignition par choc en fusion par confinement inertiel. C'est la première fois que ce prix est décerné à des chercheurs travaillant dans le domaine des plasmas denses créés par laser.

Prix de thèse de l'Académie de marine et prix Amiral-Daveluy

La Marine nationale et l'Académie de marine ont choisi de décerner leurs prix de thèse scientifiques à **N. CLICHE** pour ses travaux de métallurgie au profit de la propulsion nucléaire. Ingénieur de l'armement, N. Cliche a soutenu fin 2019 sa thèse réalisée au CEA – Valduc en partenariat avec la DGA, Naval Group et Aubert & Duval et sous la direction de l'École des mines de Paris, sur le thème *Recristallisation et propriétés mécaniques d'un acier inoxydable austénitique stabilisé au niobium*.

Présidence de l'European Physical Society

Le 29 mai, **L. BERGÉ** a été élu président de la Société européenne de physique (EPS). Fondée en 1968, l'EPS est une association à but non lucratif ayant vocation à fédérer les sociétés nationales de physique de 42 États membres européens. L'EPS s'engage dans des activités valorisant les physiciens et conseille les instances européennes sur la politique scientifique, l'éducation et l'impact de la physique dans notre société.

Prix Émilie-du-Châtelet

La Société française de physique a décerné le prix Émilie-du-Châtelet à **P. LOUBEYRE** pour ses travaux sur l'observation de la phase métallique d'hydrogène solide à une pression au-delà d'un million d'atmosphères et plus généralement pour son rôle de pionnier de la mesure de l'équation d'état de nombreux matériaux *in situ* à très haute pression.

Prix de l'école doctorale Ondes et Matière (Edom)

Le prix Edom 2019 a été décerné début 2020 à **A. NGUYEN**. Doctorante au CEA – DAM Île-de-France, sa thèse intitulée *Contrôle de rayonnements térahertz intenses produits par laser femtoseconde et applications à la détection de molécules* a donné lieu à de nombreux résultats et publications sur la faisabilité technique d'une spectroscopie moléculaire à partir de rayonnement térahertz émis par des plasmas d'air.

Prix de thèse Physique des ondes et de la matière

L. TORAILLE a été lauréat du prix de thèse Physique des ondes et de la matière (PhOM) de la Graduate School de physique de l'université Paris-Saclay. Sa thèse portait sur l'utilisation de centres NV (centre azote-lacune en français) comme capteurs de champs magnétiques à haute pression dans des cellules à enclumes de diamant.

Faits marquants de l'année 2020

Mise en service du calculateur initial du projet Exa 1

Dans le cadre du programme Simulation, le CEA – DAM a mis en production en octobre le calculateur initial du projet Exa 1 basé sur une nouvelle gamme de systèmes haute performance BullSequana XH2000 issu du programme de co-conception entre Atos et le CEA – DAM. Utilisant 192 nœuds de calcul AMD Rome, répartis dans deux baies refroidies à l'eau tiède et fédérés par la nouvelle génération du réseau d'interconnexion BXI (*Bull Extreme Interconnect*), sa puissance de calcul atteint 1 Pflops, soit près de la moitié de celle de Tera 1000-1, avec une consommation six fois moindre et un encombrement fortement réduit. Cette première phase permet de porter et valider les codes de calcul destinés à exploiter la première partition d'Exa 1 dont la mise en service est prévue fin 2021.

Réception du Suffren par la DGA et prise en charge par la Marine nationale

La Marine nationale a pris en charge le *Suffren*, premier sous-marin nucléaire d'attaque du programme Barracuda. Ce résultat est l'aboutissement d'un travail d'équipe exceptionnel lancé il y a plus de vingt ans, sous maîtrise d'ouvrage de la DGA pour le programme d'ensemble et du CEA – DAM pour la chaufferie nucléaire de propulsion navale.

Choix de la propulsion nucléaire pour le porte-avions de nouvelle génération

Le 8 décembre, lors de sa visite au Creusot, le président de la République a annoncé le choix de la propulsion nucléaire pour le porte-avions de nouvelle génération qui succédera au porte-avions *Charles-de-Gaulle*. Cette décision marque la qualité des travaux menés autour de la version nucléaire et la confiance de l'État dans la capacité des partenaires à mener à bien la conception et la réalisation du navire et de sa chaufferie pour une première sortie en mer en 2036.

Livres parus en 2020

Techniques de l'ingénieur - Article « Physique des réacteurs – Modélisation et évaluation des sections efficaces »

É. Bauge (CEA – DAM), C. De Saint Jean (CEA – DAM Île-de-France), S. Hilaire (CEA – DAM Île-de-France), A. Nicolas (CEA – DAM),
Rubrique Énergies, référence BN3008 v1.

Sample Introduction Systems in ICPMS and ICPOES - Chapitre 6 : « Capillary electrophoresis »

J. Aupiais (CEA – DAM Île-de-France), F. Chartier
586 p., Elsevier, Amsterdam, D. Beauchemin (éd.), ISBN 978-0-444-59482-2.

Colloques organisés en 2020

Séminaire CEA sur les tsunamis

Le séminaire annuel CEA sur les tsunamis a eu lieu le 24 septembre au CEA – DAM Île-de-France. Il a regroupé une vingtaine de participants du CEA (DAM Île-de-France et Polynésie française en visioconférence) et des partenaires académiques (université de Pau, Inria, BRGM, ESTP). La journée a permis de présenter les travaux et progrès réalisés sur les méthodes de simulation numérique, qui fournissent des estimations de plus en plus intégrées à la gestion de l'alerte dans les centres opérationnels, des expériences en bassin expérimental, ainsi que les bilans opérationnels annuels du Cenalt et du LDG/Pamatai.

Forum Innovations technologiques pour les hautes pressions

Coorganisé par une équipe du CEA – DAM Île-de-France, le forum Innovations technologiques dans le domaine des hautes pressions pour les défis de demain s'est déroulé du 5 au 8 octobre sur l'île d'Oléron. Il a regroupé environ 60 chercheurs venant de différents laboratoires (ESRF, Insu, Soleil, CEA – DAM Île-de-France).

Journée d'échanges sur les composites à matrice céramique

Le 8 janvier, l'École normale supérieure (ENS) de Paris-Saclay et le CEA – Cesta ont organisé, sur le site de l'Institut lasers et plasmas, la journée Dimensionnement et modélisation des assemblages composites, dans le cadre des ateliers thématiques du GDR (CMC)² (groupement de recherches sur les composites à matrice céramique : conception, modélisation, caractérisation). Cette journée a rassemblé 45 participants représentant la DGA, plusieurs centres du CEA – DAM, des industriels du domaine (Ariane Group, Safran Ceramics, MBDA), des PME comme Pyromeral, et des entités académiques (Laboratoire des composites thermostructuraux de Pessac, l'ENS Paris-Saclay, l'Institut Clément-Ader de Toulouse, l'Institut national des sciences appliquées de Lyon, etc.) et a permis d'échanger sur l'état de l'art et les pratiques de modélisation ainsi que de travailler sur des cas concrets.

Les rencontres Arcane

Le 5 mars, la communauté de développeurs et d'utilisateurs d'Arcane, plateforme logicielle lancée en 2000 dans le cadre du programme Simulation du CEA – DAM et développée depuis 2007 en partenariat avec l'Ifpen, s'est rassemblée au sein du Très Grand Centre de calcul (TGCC) à Bruyères-le-Châtel. Les projets de développement basés sur Arcane ont été présentés ainsi que les évolutions envisagées de la plateforme.

Nouveaux accords de partenariat en 2020

Accord franco-américain CEA - Laboratory of Laser Energetics

Initialement centré sur la résistance au flux laser des optiques en régime d'impulsion courte (fabrication et métrologie), l'accord de collaboration entre le Laboratory for Laser Energetics, à l'université de Rochester, aux États-Unis, et le CEA – DAM a été renouvelé, et étendu aux thématiques des matériaux amplificateurs et matériaux optiques pour le lissage par double polarisation.

Création du laboratoire de recherche conventionné (LRC) Anabase

Le LRC Anabase, acronyme d'Analyse Numérique Appliquée de Bordeaux À la Simulation d'Écoulements complexes, créé en mars pour une durée de cinq ans, regroupe des membres de l'Institut de mathématiques de Bordeaux (sous tutelle de l'université de Bordeaux, de l'Institut de Bordeaux et du CNRS) et du CEA – Cesta. Ce laboratoire s'articule autour de six thématiques : modélisation et simulation pour les écoulements raréfiés, modélisation et simulation pour l'aérodynamique compressible, modélisation et simulation pour l'interaction écoulement-paroi, modélisation et simulation pour la dynamique des solides non linéaire, méthodologie pour la vérification et la validation, méthodologie pour l'exploitation des données de la simulation.

Sélection par l'ANR du projet UnRIP : Vers la compréhension des instabilités plasma relativistes - *Uncovering Relativistic Instabilities in Plasmas* (UnRIP)

Les instabilités faisceau-plasma relativistes sont omniprésentes dans l'interaction laser-plasma à haute intensité, où elles affectent la génération et le transport des particules suprathermiques. Elles jouent aussi un rôle majeur en astrophysique, contribuant à la formation de chocs sans collisions, à l'accélération des rayons cosmiques et aux rayonnements afférents. Le projet UnRIP (*Uncovering Relativistic Instabilities in Plasmas*), sélectionné par l'Agence nationale de la recherche (ANR) et réunissant le CEA – DAM Île-de-France, le Laboratoire d'optique appliquée (LOA) et l'Institut d'astrophysique de Paris (IAP), vise à exploiter le meilleur de la technologie laser et des accélérateurs, mais aussi de la simulation numérique pour étudier ces instabilités dans des conditions et avec une résolution inédites.



Revue *Frontiers* - Numéro spécial

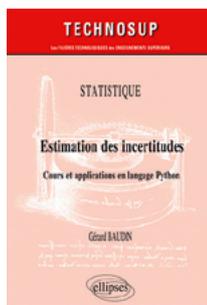
R. Bossu (CEA – DAM Île-de-France),

Coéditeur d'un numéro spécial de la revue internationale *Frontiers*, consacré à la sismologie citoyenne (impacts scientifiques et sociétaux), qui fait le point sur les réseaux sismiques à bas coût (par exemple au Népal) concernant l'apport des témoignages Internet pour de meilleures localisation et caractérisation des séismes ou des tsunamis.

Diagnosics development on the route towards fusion reactors - Chapitre : « Optical time-resolved diagnostics of laser-produced plasmas »

D. Batani, J. Santos, P. Forestier-Colleoni, D. Mancelli (CEA – Cesta), M. Ehret, J. Trela (CEA – Cesta) et al. 246 p., Springer International Publishing, D. Mazon (éd.),

ISBN 978-3-030-30588-8.



Estimation des incertitudes - Cours et applications en langage Python

G. Baudin (CEA – Gramat)

144 p., Ellipses, Paris, ISBN 9782340035959

Cet ouvrage fait le point sur l'ensemble des méthodes pour aider à la compréhension des techniques d'estimation des incertitudes. Il analyse leurs avantages et leurs faiblesses respectifs avec des exemples simples. La première partie de l'ouvrage traite des méthodes basées sur la dérivée et la statistique descriptive. Une deuxième partie décrit les méthodes stochastiques appliquées à la propagation des incertitudes (notamment dans un code de calcul). Des exemples variés sont traités en langage Python. Ils permettent d'appliquer et de comparer les méthodes.



Succès du CEA - DAM dans le cadre des appels à projets du programme H2020

Dans le cadre du programme H2020, six projets impliquant des équipes du CEA - DAM ou portés par le CEA - DAM ont été contractualisés. Ils portent principalement sur le domaine du HPC et plus particulièrement d'EuroHPC ou encore HBP SGA3 dans le cadre du Human Brain Project piloté par le CEA - DRF, mais aussi sur le domaine de la sécurité globale (EMPRI Sub) ou des nouvelles technologies pour l'énergie (Pryde).

Renforcement du partenariat du CEA - DAM Île-de-France avec l'université Paris-Saclay (UPS)

Dans le cadre de la convention signée entre le CEA et l'UPS, deux laboratoires de recherche affiliés à l'UPS ont été créés au CEA - DAM Île-de-France, le LIHPC et le LMCE, afin de développer et renforcer les collaborations de recherche avec les différents laboratoires de l'UPS, et de s'inscrire dans les actions de formation de l'université. Le LIHPC, pour Laboratoire d'Informatique Haute Performance pour le Calcul et la simulation, est un laboratoire de recherche appliquée qui couvre toutes les activités nécessaires à la simulation numérique depuis les langages de programmation parallèle pour calculateurs hétérogènes, jusqu'à la gestion et l'exploitation des données issues des codes et de mesures (visualisation, traitements de données) en passant par les plateformes de développement de codes de simulation, le développement de méthodes numériques et de codes de simulation, l'estimation de la précision et des erreurs numériques. Le LMCE, pour Laboratoire Matière en Conditions Extrêmes, regroupe des activités académiques réalisées au CEA - DAM Île-de-France dans différents domaines de recherche : physique nucléaire, physique de la matière condensée et physique des plasmas. Une spécificité du laboratoire est de combiner pour chaque thème d'étude théorie, expériences et simulations sur calculateurs de puissance.

Convention de collaboration CEA - DAM-Université Gustave-Eiffel

La collaboration du CEA - DAM avec l'université Gustave-Eiffel se renforce et notamment avec le laboratoire de modélisation et de simulation multiéchelle. Les thématiques d'étude portent sur l'interaction de particules liquides avec une surface solide et l'interaction de sprays denses de particules hypervéloces avec une surface solide ou liquide. Une convention de collaboration a été signée pour la simulation et la modélisation de ce dernier type d'écoulements, allant de l'échelle submicrométrique à l'échelle millimétrique, qui nécessitent le développement de méthodes numériques novatrices dans le domaine des écoulements diphasiques et devrait déboucher sur un code de simulation permettant d'étudier un phénomène difficilement accessible par l'expérience.

Le projet Diomede-2 retenu par l'ANR

Le projet Diomede-2, porté par le CEA - Gramat et associant les mêmes partenaires que le projet Diomede initial, a été retenu dans le cadre de l'appel à projets Astrid - Maturation piloté par l'ANR. Ce projet vise à examiner la faisabilité d'un dispositif innovant de protection des émetteurs-récepteurs de communication face aux agressions électromagnétiques, basé sur un couplage entre une protection plasma, pour éliminer la forte amplitude des surtensions générées, et un composant électronique de type diode destiné à éliminer la partie la plus rapide de ces surtensions. L'objectif à terme est de disposer d'une solution technologique industrialisable.

Projet Asturies

Dans le cadre d'un projet global porté par l'université de Pau et des pays de l'Adour au titre des programmes d'investissement (PIA), le projet Asturies (*Agile Simulation of TURbulent IntERnal flowS*) propose des avancées sur la thématique de la CFD (*Computational Fluid Dynamics*) des écoulements de paroi turbulents en utilisant des techniques innovantes permettant de coupler les méthodes RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*) robustes avec les méthodes LES (*Large Eddy Simulation*). Le CEA - Cesta participe à ce projet afin de monter en compétence sur la thématique de la simulation numérique d'écoulements turbulents avec des méthodes plus précises que les modèles RANS, ceci afin d'améliorer la précision des calculs d'écoulements turbulents autour de véhicules de rentrée atmosphérique.

Projet Capric-Dyn

Financé par la Région Nouvelle-Aquitaine et porté par le laboratoire I2M en partenariat avec l'Ircer, le LCTS et le CEA - DAM, le projet Capric-Dyn vise à étudier les procédés d'élaboration de revêtements céramiques et les mécanismes de fracturation associés. Les applications visées dans le projet intéressent directement les centres DAM du Cesta et du Ripault pour la production de céramiques à structuration variable et également l'optimisation des torches à plasma. Ce projet comprend quatre volets : la modélisation du procédé, la production de matériaux écoles, la caractérisation et l'expertise de l'endommagement des matériaux et enfin leur comportement sous sollicitation thermomécanique.

Signature d'un accord de collaboration entre le CEA - DAM et la société Photonis

Le CEA - DAM et la société française Photonis ont signé le 26 mars un accord de collaboration pour la réalisation conjointe, sur quatre ans, d'un projet de recherche relatif aux tubes des caméras à balayage de fente. Les tubes produits par la société Photonis équipent d'ores et déjà certains diagnostics plasma du Laser Mégajoule. Cet accord bénéficie de la synergie entre l'expertise technologique de Photonis et les moyens de simulation et de caractérisation de premier plan maîtrisés par le CEA - DAM. Il permettra d'assurer le maintien en France d'une filière de production unique au monde et de donner à cette filière des perspectives de développement dont les équipes du CEA - DAM tireront parti pour ses applications.

Sociétés savantes et associations professionnelles

Création du GDR ELiOs

Un groupement de recherche (GDR) du CNRS, intitulé Effets non linéaires dans les fibres optiques et en optique intégrée (ELiOs), a été créé en février. Il a pour objectif de fédérer les acteurs français travaillant sur les effets non linéaires dans les fibres optiques et les guides d'onde. Ce domaine connaît un développement du fait de l'intérêt sociétal que représentent certaines thématiques phares du domaine, par exemple les peignes de fréquences optiques, l'optique quantique, les ondes scélérates, les capteurs distribués, les télécommunications optiques du futur ou encore les sources laser. Le CEA - Cesta est membre du comité scientifique et de pilotage.

Création du GDR (CMC)²

Le GDR (CMC)² a été créé sous l'impulsion du laboratoire des composites thermostrostructuraux (LCTS) de Pessac. Regroupant l'ensemble des experts français intéressés par les composites à matrice céramique (CMC) et impliqués dans la R&D associée, qu'ils soient issus d'entités de recherche ou d'industriels, cette structure favorise l'animation scientifique, la naissance de projets collaboratifs et contribue à donner de la visibilité au domaine de recherche et à renforcer son attractivité auprès des jeunes chercheurs par l'organisation d'écoles thématiques. Deux directions du CEA sont membres du GDR, la DAM et la DES.

Adhésion du CEA - DAM au GDR Isis

Le CEA - DAM est devenu partenaire du GDR Isis (Information, Signal, Image et viSion). Cette structure d'animation du CNRS, créée il y a plus de trente ans, regroupe 193 laboratoires académiques représentant plus de 1500 chercheurs. Elle a pour mission de fédérer et coordonner la recherche dans les domaines du signal, des images et de la vision par ordinateur. Elle favorise également les interactions entre recherche universitaire, recherche industrielle et utilisateurs.

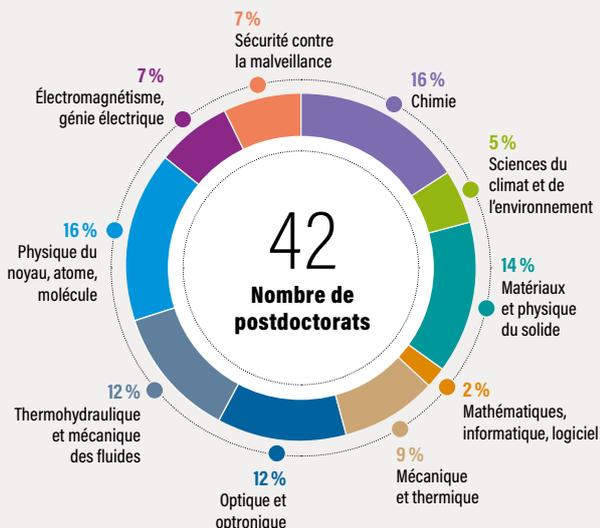
Thèses soutenues et en préparation - Postdoctorats

En 2020, 134 doctorants préparaient une thèse au CEA - DAM, soit dans un laboratoire d'un des cinq centres, soit dans un laboratoire partenaire avec le soutien financier du CEA-DAM ; 24 l'ont soutenue au cours de l'année. Par ailleurs, 42 docteurs étaient en contrat postdoctoral.

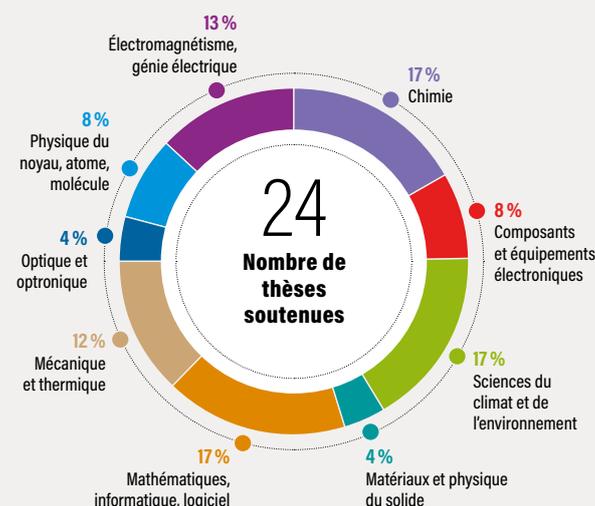
Nombre de thèses en cours 2010-2020



Répartition des postdoctorats par domaine scientifique et technique



Répartition des thèses soutenues par domaine scientifique et technique



Publications scientifiques et techniques

En 2020, le CEA - DAM a publié 443 articles et comptes rendus de conférence dans des journaux à comité de lecture, ainsi que 49 comptes rendus de conférence dans un livre ou dans une série (ISI-Web of Science, 3/6/2021).

443

Articles et comptes rendus de conférence publiés par le CEA - DAM en 2020.

Proportion de publications en collaboration internationale



Thèses de doctorat soutenues en 2020

CHIMIE

Julien CLAQUESIN, *Propriétés des lanthanides et des actinides en sels fondus à base CaF₂ : application au traitement de résidus*, université Paul-Sabatier Toulouse III.

Agathe FRESLON, *Élaboration et caractérisations d'assemblages membrane électrodes nanocomposites hybrides pour PEMFC fonctionnant sous air*, université de Tours.

Anne-Laure NIVASSE, *Spéciation du tritium organiquement lié dans les matrices environnementales*, université de Bretagne-Pays de la Loire.

Benjamin REEVES, *Spéciation des radionucléides (U, Co, Cs) en milieu marin : cas de l'oursin *Paracentrotus lividus**, université Côte d'Azur.

COMPOSANTS ET ÉQUIPEMENTS ÉLECTRONIQUES

Gabriela HERRERO SABOYA, *Les défauts dans le silicium : revisiter les modèles théoriques pour guider les calculs ab initio*, université de Toulouse.

Cyprien MULLER, *Conception optique pour les environnements radiatifs et application à une caméra résistante à des doses élevées (MGy)*, université de Lyon.

SCIENCES DU CLIMAT ET DE L'ENVIRONNEMENT

Clément ALIBERT, *Contrôles physiques, chimiques et biologiques des flux de gaz à l'interface sol-atmosphère*, École normale supérieure de Paris.

Marine DE CARLO, *Caractérisation du bruit ambiant atmosphérique d'origine océanique : modélisation des microbaroms à l'échelle globale et comparaison avec les observations infrasons du Système de surveillance internationale*, université de Bretagne-Occidentale.

Roxanne RUSCH, *Mesures indirectes de rotation estimées à partir de l'antenne sismique du LSBB : quantification et représentation de l'incertitude*, université Côte d'Azur.

Pierre VANDERBECKEN, *Apport des infrasons pour l'assimilation de données dans un modèle global de prévision numérique du temps*, université Paul-Sabatier Toulouse III.

MATÉRIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE

Axel DIERAERT, *Conception et élaboration par fabrication additive de matériaux à porosité contrôlée à base de composites inorganiques pour l'isolation thermique à haute température avec des propriétés renforcées*, université de Tours.

MATHÉMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL

Éloïse BILLA, *Développement d'une méthode de distribution de métadonnées équilibrée pour un flux de requêtes exascale*, université Paris-Saclay.

Cécile HABERSTICH, *Adaptive approximation of high-dimensional functions with tree tensor networks for uncertainty quantification*, École centrale de Nantes.

Samy LABSIR, *Méthodes statistiques fondées sur les groupes de Lie pour le suivi d'un amas de débris spatiaux*, université de Bordeaux.

Frédéric MARAZZATO, *Méthodes d'éléments discrets et d'intégration temporelle pour l'élastoplasticité et la fracturation dynamique*, École des ponts ParisTech.

MÉCANIQUE ET THERMIQUE

Vincent GONNEAU, *Validation et adaptation d'une démarche de modélisation du transfert thermique mixte conducteur-radiatif dans des matériaux réfractaires faiblement poreux*, université Paris-Saclay.

Gaëtane PLASSART, *Comportement mécanique quasi statique de compositions explosives à base d'HMx et de TATB*, Insa Centre-Val de Loire.

Jimmy SUAREZ, *Modélisation diphasique de l'aluminium et application à la postcombustion d'une charge d'explosif condensé dans l'air*, université de Toulouse.

OPTIQUE ET OPTRONIQUE

Alexandre OLLÉ, *Étude de la dépendance temporelle en régime subpicoseconde et picoseconde de l'endommagement laser de matériaux diélectriques à 1054 nm*, École centrale Marseille.

PHYSIQUE DU NOYAU, ATOME, MOLÉCULE, PLASMAS

Pierre-Louis BOURGEOIS, *Modélisation de sources X synchrotron générées par interaction laser-plasma sous-dense en régime relativiste*, Institut polytechnique de Paris.

Alessandro RUOCO, *Modelling of ponderomotive laser self-focusing in a plasma with a hydrodynamics code in the context of direct-drive inertial confinement fusion*, université de Bordeaux.

ÉLECTROMAGNÉTISME, GÉNIE ÉLECTRIQUE

Geoffroy KLOTZ, *Conception et réalisation de tapis d'invisibilité multibandes*, université Aix-Marseille.

Pierre PAYEN, *Modélisation d'un empilement de matériaux dans le domaine fréquentiel par une condition d'impédance d'ordre élevé*, université Paris 13.

Nicolas SZALEK, *Études expérimentales et numériques de l'interaction d'un faisceau d'électrons avec une cible en aluminium*, université de Bordeaux.

Habilitations à diriger les recherches (HDR)

7

Habilitations à diriger les recherches soutenues en 2020.

Brice RAVAT

CEA – Valduc
Université Bourgogne-Franche-Comté
Spécialité : caractérisation des matériaux

Maxime RIBIÈRE

CEA – Gramat
Université Paul-Sabatier Toulouse III
Spécialité : vulnérabilité et durcissement électromagnétique

Corinne MARCEL

CEA – Le Ripault
Université de Tours
Spécialité : élaboration et conception de matériaux

Claude FOURMENT

CEA – Cesta
Université de Bordeaux
Spécialité : physique des plasmas

Laurent VIDEAU

CEA – DAM Île-de-France
Université Paris-Sud
Spécialité : physique des plasmas

Olivier SOULARD

CEA – DAM Île-de-France
Université Claude-Bernard Lyon 1
Spécialité : turbulence

Benoît-Joseph GRÉA

CEA – DAM Île-de-France
Université Claude-Bernard Lyon 1
Spécialité : turbulence

Postdoctorats en cours en 2020

CHIMIE

Guillaume BAILLY, Développement pour l'analyse en ligne de solutions d'actinides, CEA – Valduc.

Clémentine BIDAUD, Développement et optimisation de matériaux fibreux pour l'isolation haute température, CEA – Le Ripault.

Loïck BONNET, Cristallogenèse de cristaux pour l'optique non linéaire, CEA – Le Ripault.

Lorie DAVID, Élaboration de C/Résine, CEA – Le Ripault.

Loïc HABERT, Synthèse de molécules hétérocycliques fortement azotées et détermination expérimentale de l'enthalpie de formation, CEA – Le Ripault.

Brendan HUITOREL, Développement de matériaux composites graphite/polymère injectables à forte conductivité thermique et électrique : application à la mise en œuvre de plaques bipolaires composites pour pile à combustible, CEA – Le Ripault.

Maxime LAGNY, Recherche et développement de procédé de traitement chimique contrôlé pour des optiques laser de grandes dimensions, CEA – Le Ripault.

Béatrice PLUJAT, Élaboration de composites C/SiC, CEA – Le Ripault.

SCIENCES DU CLIMAT ET DE L'ENVIRONNEMENT

Gabriel GAIFFE, Caractérisation non ciblée des produits de dégradation des polluants organonitrés dans les sols et les eaux souterraines par spectrométrie de masse haute résolution : caractérisation et identification des métabolites générés par voie photochimique, hydrolytique et microbiologique, CEA – DAM Île-de-France.

Magali RIESNER, Contrôle structural des paléoséismes et grands séismes historiques sur failles chevauchantes, CEA – DAM Île-de-France.

Viviane SOUTY, Développement d'une approche probabiliste pour les tsunamis d'origine sismique le long des côtes méditerranéennes françaises, CEA – DAM Île-de-France.

MATÉRIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE

Ferdaous BEN ROMDHANE, Nouvelles fibres de carbone, CEA – Le Ripault.

Damien BRAULT, Synthèse, dépôt et caractérisations de revêtements piézoélectriques, CEA – Le Ripault.

Mathéo BRYCKAERT, Étude de réactions gaz-métal par spectroscopie infrarouge, CEA – Valduc.

Régnald CHALAYER, Simulation de la transition choc-détonation dans un explosif faiblement poreux, CEA – Le Ripault.

Guillaume DEFFRENNES, Simulation thermodynamique et cinétique des transformations de phase par la méthode Calphad®, CEA – Valduc.

Cintia HARTMANN, Modélisation multiéchelle des électrodes de piles à combustible et électrolyseurs à oxyde solide, CEA – DAM Île-de-France.

Faoulat MIRADJI, Étude théorique d'explosifs binaires nanostructurés cœur/coquille par dynamique, CEA – DAM Île-de-France.

Loïc TORAILLE, Mesures sous haute pression et haute température de magnétométrie par centre NV et de spectroscopie Raman, CEA – DAM Île-de-France.

MÉCANIQUE ET THERMIQUE

Eileen BOISSIN, Conception et simulation d'une structure métallique auto-amortie issue des techniques de fabrication additive, CEA – Cesta.

David DROUET, Déformation dynamique des matériaux granulaires : influence des hétérogénéités locales sur le champ de température, CEA – Le Ripault.

Clémence FRADET, Endommagement et fragmentation dynamique d'un matériau composite granulaire, CEA – Le Ripault.

Benjamin JODAR, Modélisation des impacts hypervéloces, CEA – Cesta.

OPTIQUE ET OPTRONIQUE

Cyril BERNERD, Étude d'un amplificateur régénératif à 10 Hz, CEA – Cesta.

Manon LAMY, Simulation et expérimentation d'un amplificateur laser 1 J à 10 Hz, CEA – Cesta.

Arthur LE CAMUS, Endommagement des composants optiques sur la chaîne laser Petal, CEA – Cesta.

Lucien LEHMANN, Modélisation du comportement de défauts critiques dans les composants laser, CEA – Cesta.

Jean-François LUPI, Qualification et optimisation d'un amplificateur laser refroidi par liquide, CEA – Cesta.

THERMOHYDRAULIQUE ET MÉCANIQUE DES FLUIDES

Vivien LORIDAN, Modélisation physico-numérique des écoulements hypersoniques 3D hors équilibre chimique, CEA – Cesta.

Edouardo MARTINI, Étude et hiérarchisation des mécanismes de transition laminaire-turbulent sur parois courbes et rugueuses en régime supersonique, CEA – Cesta.

Sylvain MORILHAT, Modélisation et simulation d'écoulements transitionnels en régime hypersonique, CEA – Cesta.

Nicolas PETON, Modélisation et simulation rapide des ondes de souffle, CEA – DAM Île-de-France.

42

Nombre de postdoctorats en cours en 2020.

24

Nombre de thèses de doctorat soutenues en 2020.

Gwen'lach TYMEN, Modélisation et simulation de l'interaction écoulement-particules, CEA – Cesta.

PHYSIQUE DU NOYAU, ATOME, MOLÉCULE, PLASMAS

Adrien FUSARO, Optimisation du lissage optique pour maîtriser la propagation des faisceaux laser dans les plasmas chauds, CEA – DAM Île-de-France.

Jean-François LEMÂÎTRE, Développement avec le code Talys de la décroissance des fragments de fission, CEA – DAM Île-de-France.

Damien MINENNA, Modélisation de l'émission Raman stimulée, CEA – DAM Île-de-France.

Guilhem REVET, Optimisation des sources de rayonnement X dur et de particules chargées produites par le laser Petal. Applications au développement de nouvelles plateformes expérimentales sur LMI-Petal, CEA – Cesta et Centre lasers intenses et applications (Celia).

ÉLECTROMAGNÉTISME, GÉNIE ÉLECTRIQUE

Stéphane COUDERT, Maîtrise de l'impulsion électromagnétique générée par les expériences laser en régime pétawatt, CEA – Cesta.

Justine LABAT, Mise au point de méthodes de décomposition de domaines dans un code d'équations intégrales 3D, CEA – Cesta.

Corentin PRIGENT, Homogénéisation de domaines volumiques de matériaux hétérogènes, CEA – Cesta.

SÉCURITÉ CONTRE LA MALVEILLANCE

Mouhcine MENDIL, Apprentissage profond par réseau de neurones de convolution appliqué à la dispersion de rejets toxiques dans l'air, CEA – DAM Île-de-France.

Victor WATSON, Caractérisation probabiliste bayésienne en temps réel de sources de rejets nocifs en environnement industriel ou urbain, CEA – DAM Île-de-France.

L. Gremillet, C. Ruyer [CEA – DAM Île-de-France

Université Paris-Saclay, CEA, Laboratoire matière en conditions extrêmes (LMCE), Bruyères-le-Châtel]

J. Fuchs [Laboratoire pour l'utilisation des lasers intenses (Luli), UMR 7605 CNRS – CEA – École polytechnique, Institut polytechnique de Paris – Université Pierre-et-Marie-Curie : Sorbonne Université, Palaiseau]

M. Lemoine [Institut d'astrophysique de Paris, UMR 7095 CNRS – Sorbonne Université, Paris]

Des instabilités plasma induites par laser aux chocs non collisionnels astrophysiques

En s'interpénétrant, les plasmas créés par laser peuvent se fragmenter en filaments magnétiques qualitativement analogues à ceux responsables des chocs « sans collisions » astrophysiques et des phénomènes associés. De tels filaments ont été observés, à des échelles insoupçonnées, dans un solide soumis à un laser intense et expliqués par deux mécanismes distincts. Ce travail, conduit par le Luli et le CEA – DAM Île-de-France, a été publié dans *Nature Physics* **1**.

À la différence d'un gaz ordinaire, au sein duquel les atomes n'interagissent que deux à deux lors de collisions brèves et sporadiques, les électrons et les ions d'un plasma évoluent collectivement par l'entremise d'ondes, c'est-à-dire de modulations couplées de champ électromagnétique et de courant. Hors équilibre thermodynamique, certaines ondes peuvent croître spontanément *via* un mécanisme d'autoamplification appelé *instabilité*. Une famille importante d'instabilités concerne les plasmas présentant des distributions *anisotropes* en vitesses; ceux-ci tendent à se fragmenter en filaments de courant entourés de champs magnétiques qui, en défléchissant les particules, ont pour effet de ramener le plasma à son état d'équilibre.

Ce mécanisme, prévu par E. S. Weibel **2**, est activement étudié depuis une vingtaine d'années, car à même d'expliquer deux manifestations astrophysiques parmi les plus intrigantes : les rayons cosmiques, particules les plus énergétiques de l'Univers, et les sursauts gamma, bouffées aussi brèves qu'intenses de photons gamma. De fait, il semble établi que ces phénomènes résultent d'ondes de choc engendrées par des éjections de matière lors de cataclysmes astrophysiques, ondes de choc singulières, dues non à des collisions atomiques comme sur Terre, mais à une turbulence magnétique produite

par l'instabilité de Weibel **3**. Cette même turbulence causerait l'accélération des rayons cosmiques ainsi que l'émission de photons gamma par rayonnement synchrotron.

Mais l'instabilité de Weibel intervient aussi dans les plasmas créés en laboratoire par d'intenses faisceaux laser (d'éclairement supérieur à 10^{18} W·cm⁻²). Ces plasmas s'apparentent, pour beaucoup, à leurs homologues astrophysiques, notamment par la présence de forts courants de particules chargées (des électrons en l'occurrence), accélérées par le laser à des vitesses proches de celle de la lumière, et dont l'interaction instable avec le milieu ambiant peut induire des fluctuations magnétiques de forte amplitude (de quelques dizaines à quelques milliers de teslas). Moyennant des diagnostics adaptés, les expériences laser-plasma permettent ainsi d'explorer, à échelle réduite, des phénomènes astrophysiques que l'on ne pouvait, récemment encore, que déduire indirectement des observations ou tenter de reproduire numériquement.

Prédit par les simulations, le déclenchement de l'instabilité de Weibel par des lasers intenses a été confirmé expérimentalement, mais seulement au voisinage de la zone irradiée, large de quelques dizaines de micromètres, d'où jaillissent les électrons énergétiques causant l'instabilité. Même si leur propagation à des distances de plusieurs centaines de micromètres était attestée, leur dilution semblait interdire qu'ils puissent continuer d'exciter l'instabilité. Pourtant, c'est bien sa survenue à de telles échelles que vient de démontrer une étude pilotée par le Luli et le CEA – DAM Île-de-France **1**.

Dans l'expérience au centre de ce travail, les protons accélérés par un premier faisceau laser ont servi à sonder les champs magnétiques induits dans un solide par un second faisceau. Des formations magnétiques quasi périodiques, et d'une amplitude de plusieurs teslas, ont ainsi été révélées à grande distance de la zone d'impact (**figure 1**). Les supercalculateurs actuels étant encore incapables de décrire en trois dimensions l'intégralité de l'expérience, son

interprétation s'est appuyée sur des simulations de type *particle-in-cell* à deux dimensions, décrivant soit la génération des électrons rapides dans un plan contenant l'axe laser et la normale à la cible, soit leur transport dans un plan perpendiculaire. Un travail de modélisation a permis de comprendre l'origine et les caractéristiques des structures magnétiques prédites par ces calculs, mais aussi de les extrapoler aux échelles expérimentales afin de simuler les radiographies ioniques. La reproduction satisfaisante des mesures a ainsi mis au jour deux variantes de l'instabilité de Weibel, selon la région du plasma – son cœur dense plus ou moins conducteur ou ses surfaces raréfiées se détendant vers le vide – traversée par les électrons rapides, chacune d'elles donnant lieu à des structurations magnétiques distinctes (figure 2). Cette meilleure compréhension du transport des électrons accélérés par laser dans un plasma servira les programmes du CEA – DAM reposant sur cette physique.

La publication de ces résultats coïncide avec l'annonce de la création, sur la National Ignition Facility, l'équivalent américain du Laser Mégajoule, du premier choc non collisionnel dû à l'instabilité de Weibel 4. Une centaine de faisceaux laser ont été nécessaires pour

produire deux jets de plasma se télescopant à 2000 km/s et induire, par filamentation, une turbulence magnétique capable d'arrêter et de thermaliser les ions 3. Il en a résulté deux ondes de choc symétriques, semblables à celles observées dans les rémanents de supernova, diagnostiquées par le taux de compression du plasma central, mais aussi, chose remarquable, par l'accélération

d'électrons à des énergies relativistes. La portée de cette expérience est discutée dans un article introductif 5 signé par L. Gremillet, du CEA – DAM Île-de-France, et M. Lemoine, de l'Institut d'astrophysique de Paris, qui en pointe aussi les limites intrinsèques, tels l'effet incertain des collisions sur le chauffage électronique et les aspects perfectibles de son interprétation numérique.

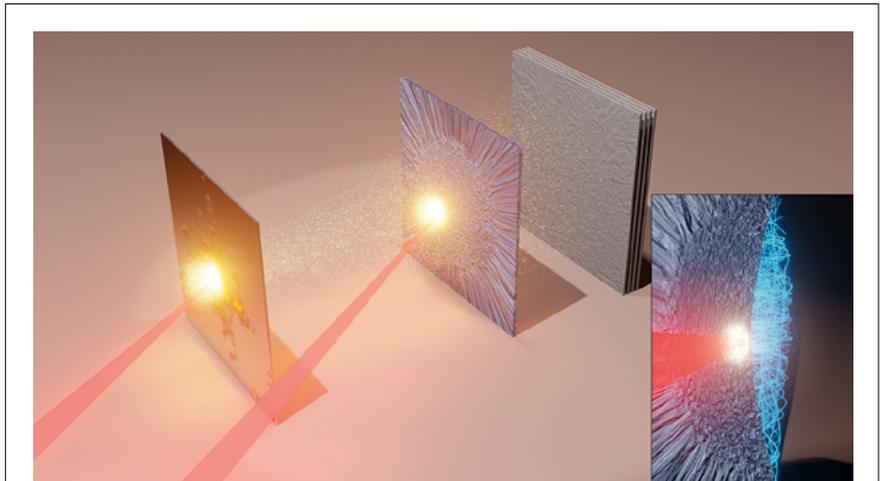


figure 1

Principe de la radiographie ionique des champs magnétiques induits par l'instabilité de Weibel. Des protons accélérés par un faisceau laser dans une première cible (à gauche) traversent une seconde cible irradiée par un autre faisceau (milieu et médaillon), source d'électrons rapides (trajectoires bleues dans le médaillon). Ces électrons sont confinés électrostatiquement dans la cible, mais celle-ci se détend sous l'effet de l'agitation thermique électronique (médaillon). Les instabilités excitées par les électrons rapides engendrent des structures magnétiques qui dévient les protons et que l'on visualise en collectant les protons sur une série de films sensibles (en gris, à droite). © David Tordeux.

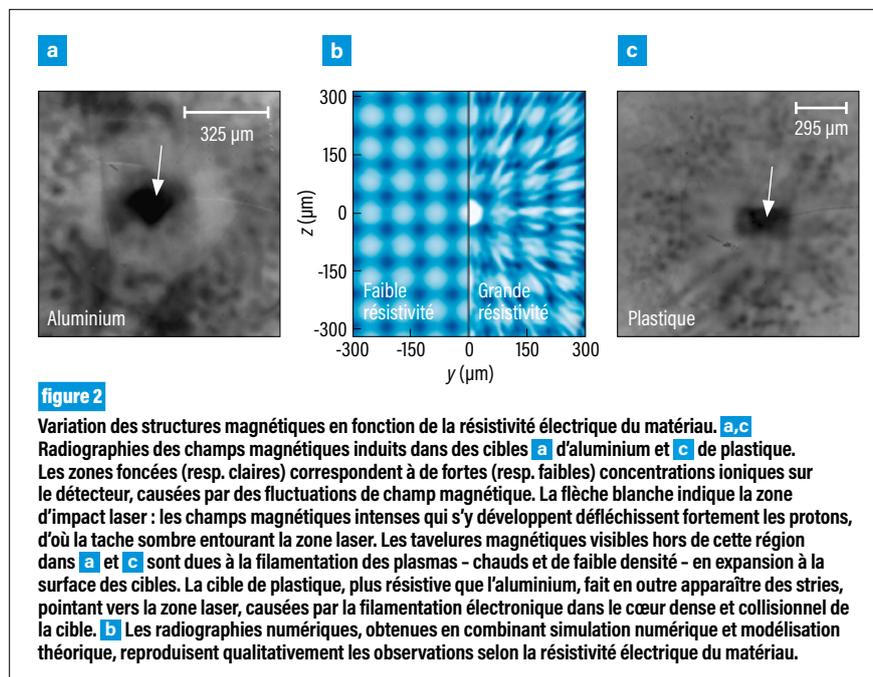


figure 2

Variation des structures magnétiques en fonction de la résistivité électrique du matériau. a,c Radiographies des champs magnétiques induits dans des cibles a d'aluminium et c de plastique. Les zones foncées (resp. claires) correspondent à de fortes (resp. faibles) concentrations ioniques sur le détecteur, causées par des fluctuations de champ magnétique. La flèche blanche indique la zone d'impact laser : les champs magnétiques intenses qui s'y développent défilchissent fortement les protons, d'où la tache sombre entourant la zone laser. Les tavelures magnétiques visibles hors de cette région dans a et c sont dues à la filamentation des plasmas – chauds et de faible densité – en expansion à la surface des cibles. La cible de plastique, plus résistive que l'aluminium, fait en outre apparaître des stries, pointant vers la zone laser, causées par la filamentation électronique dans le cœur dense et collisionnel de la cible. b Les radiographies numériques, obtenues en combinant simulation numérique et modélisation théorique, reproduisent qualitativement les observations selon la résistivité électrique du matériau.

RÉFÉRENCES

- 1 C. Ruyer *et al.*, « Growth of concomitant laser-driven collisionless and resistive electron filamentation instabilities over large spatiotemporal scales », *Nat. Phys.*, **16**, p. 983-988 (2020).
- 2 E. S. Weibel, « Spontaneously growing transverse waves in a plasma due to an anisotropic velocity distribution », *Phys. Rev. Lett.*, **2**, p. 83-84 (1959).
- 3 C. Ruyer, L. Gremillet, G. Bonnaud, C. Riconda, « Dynamique de formation des chocs non collisionnels induits par l'instabilité de Weibel », *chocs avancées*, **11**, p. 16-17 (2017).
- 4 F. Fiuza *et al.*, « Electron acceleration in laboratory-produced turbulent collisionless shocks », *Nat. Phys.*, **16**, p. 916-920 (2020).
- 5 L. Gremillet, M. Lemoine, « Miniature supernova shock waves », *Nat. Phys.*, **16**, p. 901-903 (2020).

C. Courtois, O. Poujade, E. Alozy, S. Brygoo, D. Darbon, A. Duval, J. Fariaut, B. Marchet, I. Masclet-Gobin, P. Seytor, G. Soullie, L. Videau, B. Villette, R. Wrobel
[CEA - DAM Île-de-France]
C. Chicanne [CEA - Valduc]
T. Chies, M. Ferri, H. Graillet, O. Henry [CEA - Cesta]

Première observation expérimentale d'un choc de photoabsorption

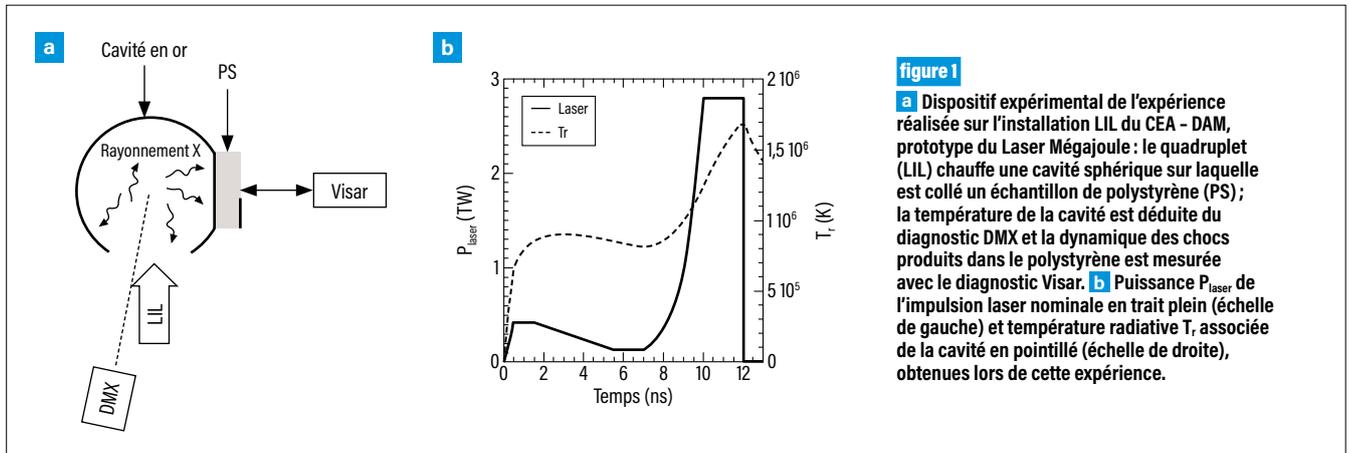
Les expériences de fusion par confinement inertiel réalisées sur le Laser Mégajoule reposent sur l'implosion d'une capsule dont la mise en condition est obtenue par une succession de chocs qui la compriment. Ces chocs doivent se rencontrer à une certaine profondeur de la cible avec une précision de l'ordre de la centaine de picosecondes pour assurer un rendement d'implosion optimal. La présence de carbone dans la capsule est à l'origine d'un choc surnuméraire appelé choc de photoabsorption. Le CEA - DAM a mené une expérience ayant permis pour la première fois de l'observer **1**, après l'avoir prédit numériquement **2**.

Les expériences de fusion par confinement inertiel (FCI), comme celles répondant aux besoins du CEA - DAM, reposent sur l'implosion d'une capsule pour la production d'énergie par fusion thermonucléaire. Dans les expériences de FCI, la capsule est constituée d'un matériau externe généralement en plastique (CH) qui enrobe un mélange fusible. Dans le schéma dit d'attaque indirecte, cette capsule est positionnée au centre d'une cavité en or utilisée pour convertir en un rayonnement X l'énergie laser focalisée sur ses parois intérieures. La puissance X est déposée majoritairement à une certaine profondeur de la couche de plastique de la capsule et conduit à la formation d'un choc se propageant vers son centre. Une optimisation de la compression de la cible, et donc des performances de fusion thermonucléaire, peut être atteinte par une succession de trois à quatre chocs qui doivent tous se rencontrer à une profondeur précise de la cible et dans une fenêtre temporelle de l'ordre de la centaine de picosecondes.

Les simulations numériques de ces expériences reposent sur l'utilisation de données d'entrée, comme les opacités qui décrivent la façon dont le

rayonnement X est absorbé par la matière à l'état de plasma aux température et pression considérées. L'opacité du carbone, constituant majoritaire du plastique (CH), présente un bord franc lié à l'effet photoélectrique à une énergie de 280 eV, correspondant à l'énergie d'ionisation de la couche K. Ainsi, les photons d'énergie inférieure à ce seuil sont moins fortement photoabsorbés dans le plastique que ceux d'énergie supérieure. Lors de la montée progressive en température de la cavité, cette dernière dépasse le million de kelvins lors de la génération du second choc. Les photons, dont l'énergie est inférieure à l'énergie seuil de 280 eV, déposeront leur énergie en un point de la capsule pour y générer le second choc. Les autres, plus énergétiques, sont à l'origine d'une seconde zone de dépôt moins en profondeur, produisant un choc surnuméraire, le choc de photoabsorption, en référence au bord franc de la structure d'opacité du carbone **1**. La maîtrise globale des performances d'implosion suppose une compréhension de tous les phénomènes physiques mis en jeu, dont la production de ce choc surnuméraire.

Si le choc de photoabsorption avait déjà été prédit numériquement par le CEA - DAM **2**, il n'avait en revanche jamais été mis en évidence expérimentalement. Une expérience représentative des deux premiers chocs d'une expérience d'implosion a ainsi été réalisée par le CEA - DAM sur son installation laser LIL (Ligne d'intégration laser), un prototype du Laser Mégajoule. La **figure 1** montre un schéma du dispositif expérimental, dans lequel le quadruplet laser est focalisé dans une cavité. Le profil temporel de l'impulsion laser présente un premier palier de basse puissance suivi d'un pic à près de 3 TW qui permet de produire un profil de température radiative de cavité présentant également un premier palier vers $0,9 \times 10^6$ K, suivi d'un second saut vers $1,7 \times 10^6$ K. Deux chocs, qui se propagent ici dans du polystyrène (PS) et sont caractérisés avec le Visar LIL **3**,



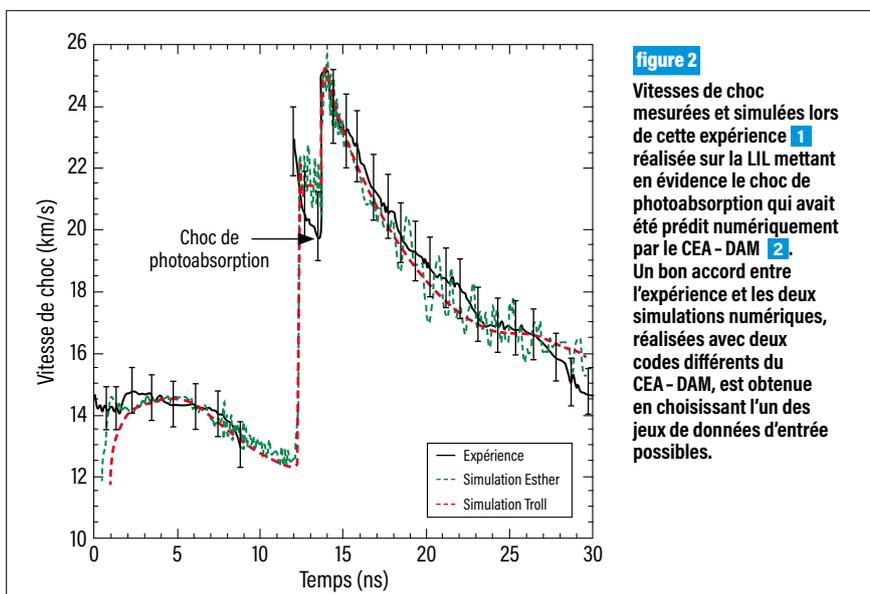
sont ainsi attendus dans cette expérience ; le Visar est un diagnostic permettant de déterminer des vitesses de choc selon un principe basé sur l'effet Doppler. La température de la cavité est déterminée à l'aide du diagnostic thermomètre DMX.

La **figure 2** montre le profil de vitesse des différents chocs obtenu après analyse des résultats du Visar. La vitesse du premier choc produit par le premier palier de température est de l'ordre de 14 km/s. À l'arrivée du second pic laser, les franges Visar disparaissent vers 9 ns du fait d'un phénomène d'opacification (vitesses

alors inaccessibles temporairement). Cependant, deux sauts de vitesse sont ensuite observés alors qu'un seul est attendu si seuls deux chocs coexistent. Le premier pic provient de la rencontre des deux chocs attendus et liés aux deux paliers de température, le second traduit la présence du choc de photoabsorption. Cette dynamique a ensuite été bien reproduite à l'aide de simulations numériques réalisées avec les codes Esther et Troll du CEA - DAM et en considérant un jeu de données d'entrée particulier pour approcher au mieux les mesures. Avec d'autres jeux de données, des écarts de plusieurs centaines de

picosecondes sur la dynamique de ce dernier sont en effet observés, temps relativement longs comparés aux précisions requises lors des expériences de FCI (< 100 ps).

Cette campagne **1** réalisée sur la LIL a permis pour la première fois de mettre en évidence la présence d'un choc surnuméraire, déjà prédit par le CEA - DAM **2**, dans une expérience représentative des premiers instants des expériences de FCI. Ce choc, appelé choc de photoabsorption, est lié à la présence d'un bord franc dans la structure d'opacité du carbone, élément souvent présent dans les cibles de FCI. Les simulations numériques associées permettent de bien restituer la dynamique de ce choc, à condition de choisir leurs données d'entrée. L'étude de ce type de choc permettra d'améliorer les capacités de conception des schémas de FCI développés au CEA - DAM.



RÉFÉRENCES

- 1** C. Courtois *et al.*, « First experimental observation of a photoabsorption-edge induced shock by its coalescence onto a regular ablation-shock », *Phys. Plasmas*, **27**, 042702 (2020).
- 2** O. Poujade *et al.*, « Radiative ablation with two ionizing fronts when opacity displays a sharp absorption edge », *Phys. Rev. E*, **92**, 053105 (2015).
- 3** S. Darbon *et al.*, « VISAR diagnostic at LIL Facility », *Proc. of the Seventh International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications (IFSA 2011)*, Bordeaux, 12-16 septembre 2011, *EPI Web of Conference*, **59**, 13001 (2013).

G. Kluth [CEA – DAM Île-de-France]
K. D. Humbird, B. K. Spears, L. Peterson, H. A. Scott, M. V. Patel, J. Koning,
M. Marinak, L. Divoi, C. Young [Lawrence Livermore National Laboratory]

L'intelligence artificielle pour accélérer des simulations de fusion par confinement inertiel

En fusion par confinement inertiel par laser, la forte compression de la matière fusible conduit à des phénomènes physiques nombreux et imbriqués à différentes échelles d'espace et de temps. Même avec un supercalculateur, une simulation numérique ne peut les prendre en compte simultanément sans grande simplification de certains modèles. Une étude a été menée conjointement par le CEA – DAM Île-de-France et le Lawrence Livermore National Laboratory, aux États-Unis, pour approximer un code de physique atomique, coûteux en temps de calcul (jusqu'à des millions d'heures), par un réseau de neurones profonds. Le résultat est probant et le temps de calcul réduit d'un facteur dix.

Une des voies envisagées pour amorcer une combustion thermonucléaire en laboratoire est de transférer à de la matière fusible l'énergie d'un rayonnement X créé par de nombreux faisceaux d'un laser très énergétique, de l'ordre du mégajoule. L'énergie transférée symétriquement sur une cible sphérique se traduit par une compression qui chauffe et densifie la matière au point que s'amorcent des réactions de fusion. Il s'agit de la fusion par confinement inertiel (FCI), qui est étudiée sur l'installation Laser Mégajoule (LMJ) située au CEA – Cesta et sur la National Ignition Facility aux États-Unis.

Pour préparer, comprendre et interpréter des expériences de FCI, des simulations numériques sont réalisées sur des supercalculateurs Tera 1000 au CEA – DAM Île-de-France. Dans les conditions de température, de pression et de densité créées par la forte compression et le chauffage, la matière est un

plasma (milieu ionisé) qui se comporte comme un fluide. Les phénomènes physiques qui interviennent se produisent à l'échelle macroscopique du fluide aussi bien qu'à l'échelle atomique. Cependant, il est aujourd'hui impossible, même sur un supercalculateur, de prendre en compte et d'imbriquer toutes les échelles spatiales et temporelles pour traiter l'ensemble des phénomènes dans une même simulation, et ce d'autant plus quand la dimension du problème est très grande, comme c'est le cas ici (de l'ordre de 100). Pour pallier cette difficulté, une solution consiste à modéliser les calculs à l'échelle atomique à l'aide d'un réseau de neurones profonds (voir **encadré**) et à mettre en œuvre le modèle ainsi obtenu en ligne dans le code multiphysique avec lequel est faite la simulation à l'échelle du fluide.

Avec le soutien de l'Agence de l'innovation de défense, le CEA – DAM Île-de-France et le Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL), aux États-Unis, ont uni leurs efforts pour tester cette méthode d'intelligence artificielle sur le calcul en ligne des opacités spectrales, c'est-à-dire des coefficients qui quantifient les transferts d'énergie entre le rayonnement et la matière, en absorption et en émission, calcul habituellement réalisé par un code sophistiqué de physique atomique dédié. La collaboration se fixait pour objectif de démontrer la faisabilité de cette approche, puis d'évaluer la précision et le gain en temps de calcul obtenus.

Pour établir un réseau de neurones qui servira de modèle au calcul des opacités radiatives, le code multiphysique est tout d'abord utilisé pour déterminer les caractéristiques globales du plasma (densité, température) et du champ de rayonnement X ambiant. Ensuite, celles-ci sont injectées en entrée du code de physique atomique avec lequel est générée une base de données d'opacités; un spectre type obtenu est donné sur la **figure 1**. Enfin, différents réseaux de neurones profonds « apprennent » sur

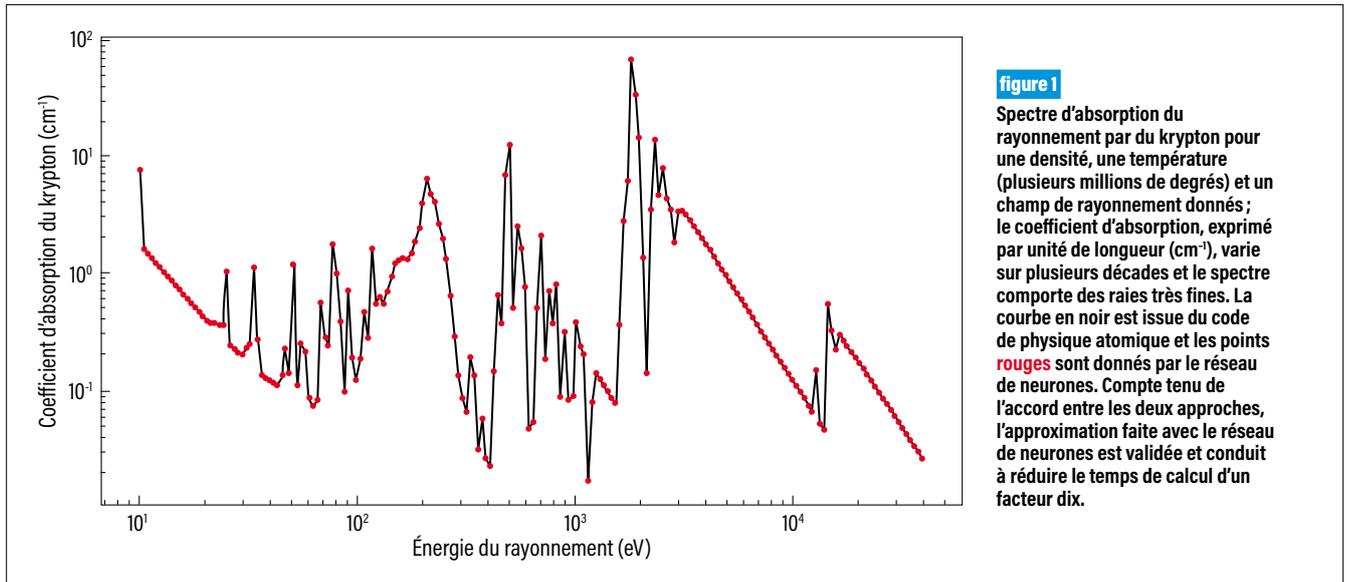


figure 1

Spectre d'absorption du rayonnement par du krypton pour une densité, une température (plusieurs millions de degrés) et un champ de rayonnement donnés ; le coefficient d'absorption, exprimé par unité de longueur (cm^{-1}), varie sur plusieurs décades et le spectre comporte des raies très fines. La courbe en noir est issue du code de physique atomique et les points rouges sont donnés par le réseau de neurones. Compte tenu de l'accord entre les deux approches, l'approximation faite avec le réseau de neurones est validée et conduit à réduire le temps de calcul d'un facteur dix.

ces données (voir encadré). Une phase de validation amène à sélectionner le meilleur réseau pour sa performance et pour la qualité des données qu'il génère. Le réseau qui a été développé dans le cadre de la collaboration CEA – LLNL est hybride : son architecture est faite de trois réseaux mis bout à bout totalisant dix-neuf couches de neurones.

Il apparaît sur la figure 1 que les données produites par le réseau de neurones (points rouges) et celles fournies par le code de physique atomique

(courbe noire) sont très proches : l'écart est de moins de 7 % sur l'ensemble des données et de moins de 1 % sur 95 % des données. En approximant le code de physique atomique par le réseau de neurones dans le code multiphysique, le temps de calcul de celui-ci est divisé par un facteur dix.

Dans le cadre de l'étude de faisabilité, les travaux ont été réalisés pour un calcul simplifié de FCI. L'enjeu est désormais de déterminer le domaine d'application sur lequel le réseau de

neurones peut être utilisé avec confiance et de construire une base de données d'apprentissage adaptée.

RÉFÉRENCE

1 G. Kluth, K. D. Humbird, B. K. Spears, L. Peterson, H. A. Scott, M. V. Patel, J. Koning, M. Marinak, L. Divo, C. Young, « Deep learning for NLTE spectral opacities », *Physics of Plasmas*, 27, 052707 (2020).

encadré

Apprentissage statistique et réseau de neurones profonds

En intelligence artificielle, une méthode d'apprentissage statistique consiste en un algorithme qui cherche à établir une fonction prédictive basée sur des données. L'apprentissage profond (en anglais *deep learning*) vise à modéliser des données avec un haut niveau d'abstraction.

Un réseau de neurones est un algorithme d'apprentissage statistique dont la conception est inspirée du fonctionnement du cerveau humain. Comme dans les neurones du cerveau où des connexions se créent, disparaissent ou se renforcent en fonction de différents stimuli et produisent une action, les réseaux de neurones (appelés parfois artificiels) ajustent des paramètres en fonction de données d'entrée afin de fournir la meilleure réponse possible.

Soit, par exemple, un code de physique coûteux en temps de calcul dont on veut approximer les résultats par un réseau de neurones,

moins coûteux en temps de calcul. Lors d'une première étape, des données d'entrée du code ainsi que les sorties associées sont fournies au réseau de neurones. Par itérations successives, le réseau ajuste ses propres paramètres pour être capable d'associer au mieux les sorties connues aux entrées connues. C'est la phase d'apprentissage ou d'entraînement.

La phase d'apprentissage est construite de manière à ce que le réseau soit capable de faire des prévisions dans un domaine d'application, c'est-à-dire de traiter de manière satisfaisante de nouvelles données d'entrée en fonction de ce qu'il a « appris ». On parle d'architecture de réseau de neurones, car le nombre de neurones par couche, le nombre de couches, etc., peuvent varier d'un réseau à un autre.

D. Mourenas [CEA – DAM Île-de-France
Université Paris-Saclay, CEA, Laboratoire matière en conditions extrêmes (LMCE), Bruyères-le-Châtel]
A. V. Artemyev, X.-J. Zhang [Université de Californie à Los Angeles (UCLA), Los Angeles]
O. V. Agapitov [Université de Californie (UC), Berkeley]

Progrès dans la modélisation de la dynamique des électrons dans les ceintures de radiation

La protection des satellites en orbite exige de développer des modèles de météorologie spatiale prédisant précisément les flux d'électrons relativistes dans les dangereuses ceintures de radiation entourant la Terre. Pour la première fois, les corrélations locales entre les propriétés des ondes naturelles et du plasma ont été prises en compte pour calculer les pertes et accélérations d'électrons en fonction de l'activité solaire, en simplifiant considérablement les calculs numériques grâce à l'emploi de modèles analytiques développés au CEA – DAM [1,2](#). De plus, les ondes mesurées se sont avérées suffisamment intenses et intermittentes pour conduire à un nouveau régime d'interaction ondes-particules [3,4,5](#), qui devra être pris en compte dans les prochains modèles de météorologie spatiale.

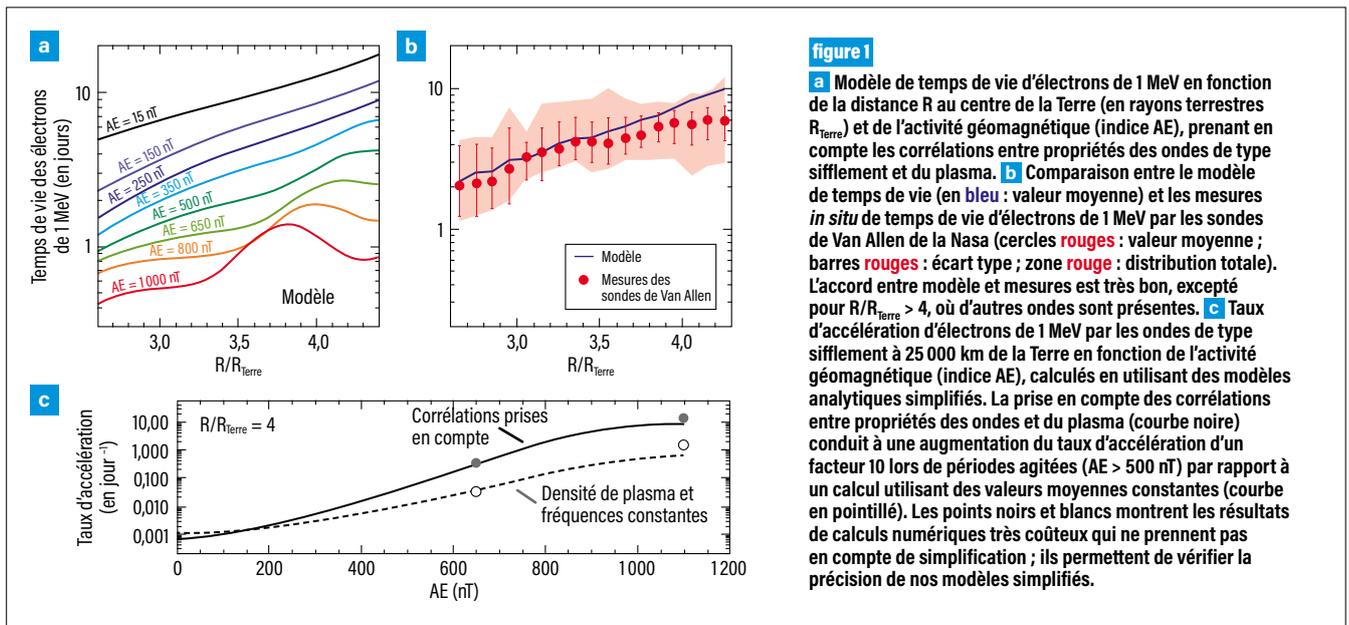
Lorsqu'elles rencontrent la magnétosphère terrestre, les puissantes éjections de plasma en provenance du Soleil perturbent le champ magnétique. Des électrons de faible énergie (10-50 keV) pénètrent alors dans la magnétosphère où ils génèrent des ondes électromagnétiques de type sifflement.

Également injectés dans la magnétosphère, les électrons de 100 à 300 keV sont accélérés par ces ondes et atteignent des énergies relativistes (de l'ordre du MeV) à des distances de 10 000 à 30 000 km de la Terre. Certains électrons sont précipités dans l'atmosphère. Du fait de l'activité solaire, les satellites en orbite sont ainsi soumis à des flux importants et extrêmement

variables d'électrons relativistes. Par le passé, ces électrons ont gravement endommagé l'électronique de nombreux satellites, leur valant le surnom d'électrons tueurs de satellites. De nos jours, l'apport des milliers de satellites en orbite est devenu crucial pour les communications militaires et civiles, le positionnement GPS, la surveillance, Internet. Il est donc vital de développer des modèles de météorologie spatiale permettant de prédire précisément les variations des flux d'électrons relativistes. Cependant, la grande variabilité spatio-temporelle des phénomènes d'interaction onde-électron au sein de la magnétosphère représente une importante difficulté. Négliger cette variabilité par l'emploi de valeurs moyennes (l'intensité moyenne des ondes, la densité moyenne du plasma ambiant, etc.) empêche souvent les modèles numériques actuels de reproduire avec fiabilité et précision les flux d'électrons mesurés, en particulier lors des périodes de forte activité solaire.

Pour pallier ces défauts, le CEA – DAM et les universités de Californie à Los Angeles et à Berkeley ont développé en étroite collaboration de nouveaux modèles prédictifs des taux d'accélération et de perte d'électrons relativistes. Pour la première fois, les corrélations locales, en espace et en temps, entre les propriétés mesurées des ondes naturelles et du plasma ont été prises en compte pour calculer ces taux d'accélération et de perte d'électrons en fonction de l'activité solaire, en utilisant six ans de données des sondes de Van Allen, dans le cadre d'une mission spatiale de la Nasa lancée en 2012. Ces calculs, qui auraient exigé des dizaines de milliers d'heures sur une machine de type Tera, ont été réalisés en dix heures sur un ordinateur de bureau, grâce à l'emploi de modèles analytiques simplifiés, développés et validés au CEA – DAM [1,2](#).

Les temps de vie des électrons de 1 MeV au sein des ceintures de radiation ont été calculés en fonction



de l'activité géomagnétique (figure 1a), puis comparés aux temps de vie indépendamment mesurés par les sondes de Van Allen à 10 000-20 000 km de la Terre : un très bon accord a été obtenu (figure 1b), qui valide ainsi cette approche 1. L'accélération d'électrons de 1 MeV à 25 000 km de la Terre s'avère également possible en moins d'une heure lors de périodes très agitées (figure 1c), en accord avec certaines observations 2.

Une analyse fine des données des sondes de Van Allen a aussi permis de quantifier, pour la première fois statistiquement, la présence d'une petite fraction (10 à 20 %) d'ondes de type sifflement suffisamment intenses pour conduire à

des accélérations ou des pertes d'électrons encore plus rapides par interaction non linéaire 3. Ces ondes intenses apparaissent sous forme de paquets d'ondes courts (quelques périodes d'onde), souvent formés par superposition d'ondes 4. Enfin, de brusques sauts aléatoires de fréquence et de phase ont été mis en évidence entre les paquets d'ondes 4,5. Des simulations numériques réalisées à l'université de Californie à Los Angeles ont permis d'évaluer les effets des paquets d'ondes réalistes sur les électrons relativistes et de les comparer aux effets des paquets d'ondes idéaux d'amplitude constante, considérés jusqu'à présent dans les modèles. Les simulations ont

révélé qu'en présence de paquets d'ondes réalistes, les plus importantes accélérations non linéaires (de $\Delta E = 30$ à 120 keV en une seule interaction) étaient supprimées et que la distribution des accélérations et des décélérations devenait plus symétrique, correspondant à un nouveau régime intermédiaire faiblement non linéaire d'interaction onde-électron (figure 2). Ce nouveau régime 5 devra être pris en compte dans les codes de météorologie spatiale des années à venir, en complément des modèles plus classiques de taux d'accélération et de perte d'électrons 1,2.

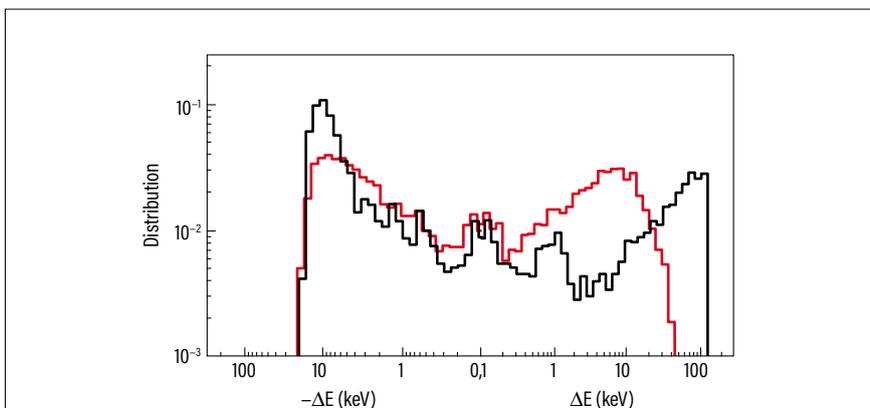


figure 2

Distribution des variations individuelles ΔE d'énergie d'électrons de 800 keV causées par une seule interaction avec des ondes électromagnétiques de type sifflement à une distance de 25 000 km de la Terre. Les résultats sont obtenus par simulation des trajectoires d'un million d'électrons. La courbe noire montre l'effet d'ondes d'amplitude et phase constantes, considéré jusqu'ici dans le modèle. La courbe rouge montre l'effet des paquets d'ondes courts observés par les sondes de Van Allen de la Nasa, entre lesquels la phase varie aléatoirement : on note la disparition salutaire des fortes accélérations de $\Delta E = 30$ à 120 keV et la forme plus symétrique de la distribution.

RÉFÉRENCES

- 1 O. V. Agapitov, D. Mourenas, A. V. Artemyev *et al.*, « Lifetimes of relativistic electrons as determined from plasmaspheric hiss scattering rates statistics: Effects of ω_{pe}/Ω_{ce} and wave frequency dependence on geomagnetic activity », *Geophys. Res. Lett.*, **47**, e2020GL088052 (2020).
- 2 O. V. Agapitov, D. Mourenas, A. V. Artemyev *et al.*, « Time scales for electron quasi-linear diffusion by lower-band chorus waves: The effects of ω_{pe}/Ω_{ce} dependence on geomagnetic activity », *Geophys. Res. Lett.*, **46**, p. 6178-6187 (2019).
- 3 X.-J. Zhang, D. Mourenas, A. V. Artemyev *et al.*, « Nonlinear electron interaction with intense chorus waves: Statistics of occurrence rates », *Geophys. Res. Lett.*, **46**, p. 7182-7190 (2019).
- 4 X.-J. Zhang, D. Mourenas, A. V. Artemyev *et al.*, « Rapid frequency variations within intense chorus wave packets », *Geophys. Res. Lett.*, **47**, e2020GL088853 (2020).
- 5 X.-J. Zhang O. V. Agapitov, D. Mourenas *et al.*, « Phase decoherence within intense chorus wave packets constrains the efficiency of nonlinear resonant electron acceleration », *Geophys. Res. Lett.*, **47**, e2020GL089807 (2020).

D. Regnier, J.-P. Ebran [CEA – DAM Île-de-France
Université Paris-Saclay, CEA, Laboratoire matière en conditions extrêmes (LMCE), Bruyères-le-Châtel]
R. Lasserri [Espace de structure nucléaire théorique (ESNT), CEA – DAM et DRF, Saclay]
A. Penon [Magic LEMP, Orsay]

L'intelligence artificielle pour prédire la structure des noyaux d'atome

Pour expliquer comment sont apparus les éléments qui nous entourent au cours de l'histoire de l'Univers, il est nécessaire de disposer d'approches théoriques capables de prédire les propriétés physiques d'un grand nombre de noyaux d'atome très exotiques. De telles approches sont développées au CEA – DAM Île-de-France, mais les coûts numériques requis pour réaliser des prédictions entravent leur portée. Pour dépasser cette limite, une méthode reposant sur un algorithme d'intelligence artificielle a été développée et permet d'estimer rapidement des caractéristiques de structure des noyaux telles que leurs fréquences propres de vibration et de rotation **1**.

Dans la matière qui forme notre planète, on trouve près de 300 noyaux d'atome stables que l'on peut différencier par leur nombre de protons et de neutrons. Diverses réactions nucléaires, comme la capture neutronique, permettent de former d'autres noyaux, dits instables, qui se désintègrent sur des périodes allant de la nanoseconde à plusieurs milliers d'années. Après un siècle de recherche en physique nucléaire, près de 3 000 noyaux ont ainsi été synthétisés et mesurés. Pourtant, la connaissance d'autres noyaux encore plus exotiques est requise pour mieux comprendre, par exemple, la nucléosynthèse, c'est-à-dire expliquer la naissance des éléments qui nous entourent dans l'histoire de l'Univers (**figure 1**).

Il est ainsi nécessaire de développer des théories et des codes de calcul permettant de prédire les propriétés physiques de plusieurs milliers de noyaux à partir d'une modélisation des interactions entre protons et neutrons. De plus, il importe de pouvoir répéter ce type de calcul de manière systématique avec différents modèles d'interaction entre protons et neutrons afin d'améliorer ces modèles et *in fine* accroître la

précision des calculs de réaction nucléaire réalisés au CEA – DAM Île-de-France. Dans ce contexte, il devient crucial de réduire autant que possible le coût numérique de prédiction des propriétés de milliers de noyaux à partir d'un modèle d'interaction donné.

Un cadre théorique permettant de réaliser des prédictions à grande échelle des propriétés nucléaires est l'approche dite de l'hamiltonien collectif à cinq dimensions (5DCH) **2**. À partir du nombre de protons et de neutrons constituant un noyau et d'un modèle d'interaction entre ces constituants, cette approche prédit non seulement les caractéristiques du noyau dans son état fondamental (énergie de liaison, rayon moyen, etc.), mais aussi la manière dont la matière nucléaire peut vibrer ou tourner lorsqu'elle est excitée. Les résultats obtenus avec cette théorie sont en général cohérents avec les données expérimentales à notre disposition. Par exemple, les énergies de liaison prédites pour des noyaux d'environ 100 nucléons reproduisent typiquement l'expérience à 0,1 % près. Ce succès a néanmoins un coût numérique important, qui freine les études systématiques pour l'astrophysique ainsi que l'amélioration des modèles d'interaction entre nucléons.

Pour dépasser cette limite, une étape des calculs 5DCH a été remplacée par une méthode d'intelligence artificielle, car l'étape en question est la plus coûteuse en temps de calcul. L'idée sous-jacente est que l'intelligence artificielle peut fournir une bonne approximation de cette étape de calcul en un temps de l'ordre de la seconde, là où le calcul aurait pris environ une heure. Ce type de technique est aussi dénommé métamodélisation.

L'étape de calcul que l'on métamodélise prend en entrée le nombre de protons et de neutrons du noyau à étudier et détermine en sortie des propriétés de déformation des systèmes nucléaires. Une de ces propriétés est l'énergie du système déformé que l'on représente sur la **figure 2** en fonction de l'élongation du noyau et d'un angle mesurant son éloignement par rapport à une configuration à symétrie axiale. Cette étape de calcul est remplacée par un comité

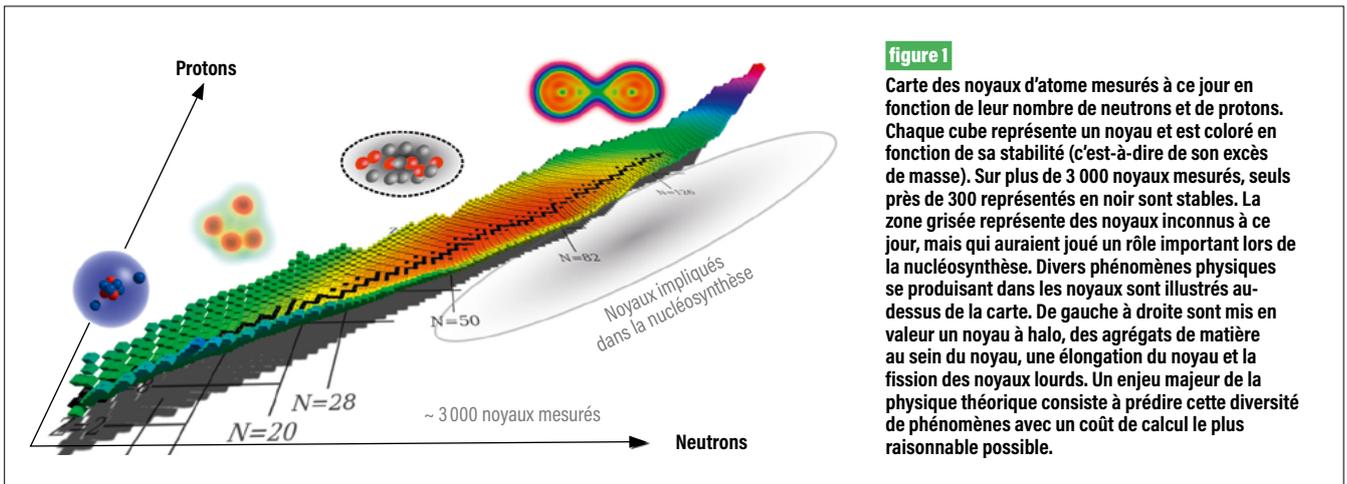


figure 1

Carte des noyaux d'atome mesurés à ce jour en fonction de leur nombre de neutrons et de protons. Chaque cube représente un noyau et est coloré en fonction de sa stabilité (c'est-à-dire de son excès de masse). Sur plus de 3 000 noyaux mesurés, seuls près de 300 représentés en noir sont stables. La zone grisée représente des noyaux inconnus à ce jour, mais qui auraient joué un rôle important lors de la nucléosynthèse. Divers phénomènes physiques se produisant dans les noyaux sont illustrés au-dessus de la carte. De gauche à droite sont mis en valeur un noyau à halo, des agrégats de matière au sein du noyau, une elongation du noyau et la fission des noyaux lourds. Un enjeu majeur de la physique théorique consiste à prédire cette diversité de phénomènes avec un coût de calcul le plus raisonnable possible.

de réseaux de neurones (voir **encadré** p. 15), c'est-à-dire un algorithme d'apprentissage supervisé impliquant un ensemble de réseaux de neurones **3**. Ce type d'algorithme fonctionne en deux temps : une phase d'apprentissage et une phase de prédiction.

Cette étude se fixe pour but de réaliser des prédictions pour près de 2 000 noyaux instables d'intérêt pour l'astrophysique. Cela passe d'abord par la détermination des propriétés de déformation d'un sous-ensemble de 200 noyaux *via* le calcul 5DCH, puis par l'entraînement d'un comité de réseaux de neurones à reproduire correctement ces mêmes propriétés de déformation. Après cette étape d'apprentissage, le comité de réseaux de neurones peut estimer presque instantanément les

propriétés de déformation associées aux 1 800 noyaux restants. Cette estimation permet finalement d'obtenir les observables d'intérêt, telle l'énergie de liaison, pour les 2 000 noyaux ciblés en ayant réalisé les calculs coûteux uniquement pour 200 noyaux, et nécessite ainsi dix fois moins de temps que le calcul complet.

Cette étude illustre un exemple d'intelligence artificielle permettant de métamodéliser un modèle de physique nucléaire théorique numériquement coûteux. Aujourd'hui, cette approche permet une estimation rapide des propriétés nucléaires pour les nombreux noyaux exotiques impliqués dans la nucléosynthèse. Au-delà de cet aspect d'accélération numérique, des efforts sont en cours pour mieux comprendre

la manière dont les réseaux de neurones se représentent les propriétés nucléaires apprises. Cette représentation pourrait en effet inspirer une nouvelle vision des noyaux d'atome.

RÉFÉRENCES

- 1** R. Lasserri, D. Regnier, J.-P. Ebran, A. Penon, « Taming nuclear complexity with a committee of multilayer neural networks », *Phys. Rev. Lett.*, **124**, p. 162502 (2020).
- 2** K. Kumar, M. Baranger, « Complete numerical solution of Bohr's collective Hamiltonian », *Nuclear Physics A*, **92**, p. 608-652 (1967).
- 3** F. Chollet, *Deep learning with Python*, Manning Publications, 1^{re} édition (2017).

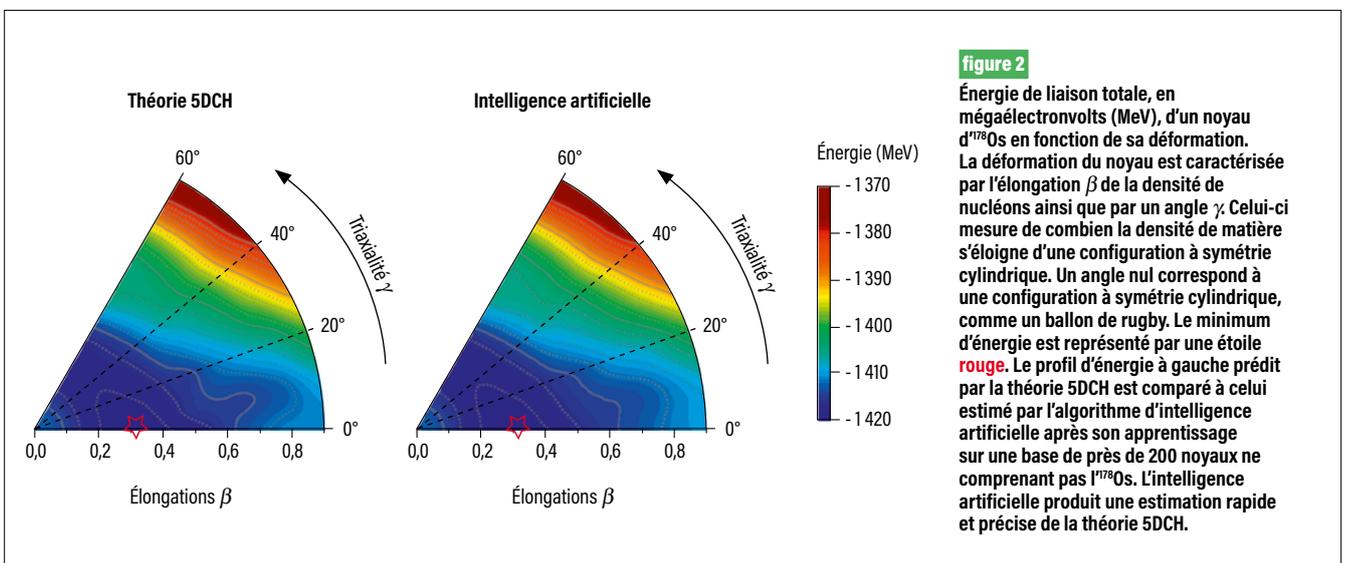


figure 2

Énergie de liaison totale, en mégaelectronvolts (MeV), d'un noyau d'¹⁷⁸O en fonction de sa déformation. La déformation du noyau est caractérisée par l'élongation β de la densité de nucléons ainsi que par un angle γ . Celui-ci mesure de combien la densité de matière s'éloigne d'une configuration à symétrie cylindrique. Un angle nul correspond à une configuration à symétrie cylindrique, comme un ballon de rugby. Le minimum d'énergie est représenté par une étoile rouge. Le profil d'énergie à gauche prédit par la théorie 5DCH est comparé à celui estimé par l'algorithme d'intelligence artificielle après son apprentissage sur une base de près de 200 noyaux ne comprenant pas l'¹⁷⁸O. L'intelligence artificielle produit une estimation rapide et précise de la théorie 5DCH.

J. Taieb, P. Marini, B. Laurent, G. Bélier, A. Chatillon, P. Morfouace [CEA – DAM Île-de-France Université Paris-Saclay, CEA, Laboratoire matière en conditions extrêmes (LMCE), Bruyères-le-Châtel]
D. Étasse [Laboratoire de physique corpusculaire, Caen]
M. Devlin, J. A. Gomez, R. C. Haight, K. J. Kelly, J. M. O'Donnell, K. T. Schmitt [Los Alamos National Laboratory, États-Unis]

Mesure de très haute précision des neutrons de fission du plutonium 239

Les neutrons émis par la réaction de fission jouent un rôle déterminant dans tout système nucléaire, civil ou militaire. Ce sont eux qui provoquent de nouvelles fissions et permettent donc d'entretenir la réaction en chaîne. Une connaissance particulièrement précise des caractéristiques de ces neutrons est ainsi cruciale pour le programme Simulation du CEA – DAM. Dans le cadre de l'accord bilatéral de coopération entre le CEA – DAM et le DOE – NNSA américain, le CEA – DAM Île-de-France a entrepris de mesurer les spectres de neutrons de fission des actinides d'intérêt pour le CEA – DAM, en collaboration avec le Los Alamos National Laboratory aux États-Unis [1](#).

La fission du plutonium 239 revêt une importance particulière au CEA – DAM et les différents aspects de cette réaction doivent être compris et maîtrisés. Parmi les observables d'importance associées à la réaction, la section efficace de fission, ou probabilité d'occurrence de la réaction, peut être citée, tout comme les rendements ou taux de production des produits de fission, les nombres moyens de neutrons et de gamma par fission, ainsi que les spectres en énergie de neutrons et de gamma. Le programme Simulation du CEA – DAM nécessite l'intégration de ces différentes observables au sein de fichiers dits évalués qui intègrent l'ensemble de la connaissance accumulée depuis les années 1940 pour aboutir à des données tabulées. Ces données peuvent être d'origine théorique ou expérimentale ou, et c'est souvent le cas, être issues de calculs validés par l'expérience. Les neutrons de fission sont d'une telle importance que leur nombre moyen ainsi que leur énergie moyenne, obtenus à partir de la mesure de leur spectre en énergie, doivent être connus avec une incertitude de l'ordre ou inférieure au pour cent. En raison de la complexité du mécanisme de fission, un tel niveau de précision est difficilement accessible

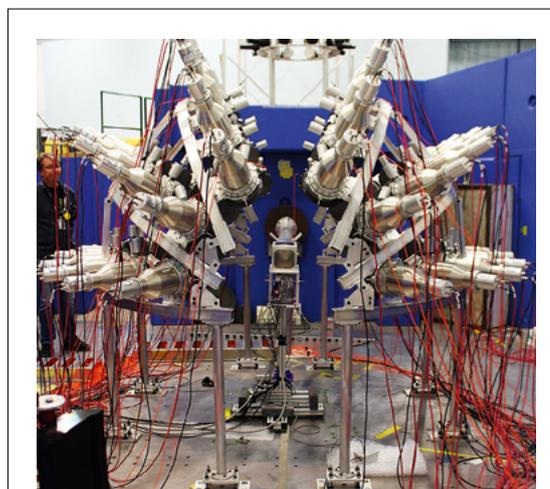


figure 1

Photographie de l'ensemble expérimental Chi-Nu destiné à la mesure des spectres de neutrons de fission du plutonium 239 au Los Alamos National Laboratory aux États-Unis. Un ensemble de 54 détecteurs de neutrons, développés par les Américains, entourent la chambre à fission parallélépipédique, développée au CEA – DAM Île-de-France et située au centre de l'image.

par le calcul et des mesures de très haute précision sont donc indispensables.

Le laboratoire de Los Alamos dispose d'une source très intense de neutrons couvrant une gamme d'intérêt pour les applications de 1 à 200 MeV, faisant de ce laboratoire un partenaire incontournable pour ces études de spectres de neutrons prompts de fission (PFNS pour *prompt fission neutron spectrum*). La collaboration a débuté dès le début des années 2000 et a conduit à plusieurs publications en commun [2](#), dont une première mesure des PFNS du plutonium 239 [3](#). Ces mesures ont contribué à l'extension des connaissances dans ce domaine, mais n'ont pas permis d'atteindre les niveaux de précision requis.

Au début des années 2010, le CEA – DAM Île-de-France a engagé la conception d'une nouvelle génération de chambre à fission et de son électronique

associée. Ce détecteur est chargé d'identifier de manière non ambiguë et de signer en temps, très précisément, l'occurrence d'un événement de fission du plutonium. Dans le même temps, les collègues américains ont conçu un nouvel ensemble de 54 détecteurs de neutrons, appelé Chi-Nu (figure 1), dédié à la mesure des PFNS du plutonium 239. La mesure du temps entre la détection d'une fission dans la chambre à fission et d'un neutron dans un des détecteurs de l'ensemble Chi-Nu renseigne sur l'énergie cinétique du neutron émis. L'accumulation d'une statistique importante et la soustraction du bruit de fond permettent ensuite de reconstruire la distribution en énergie cinétique des neutrons de fission.

Le spectre énergétique peut être mesuré en fonction de l'énergie du neutron provoquant la réaction de fission sur l'ensemble de la gamme d'intérêt pour les applications. La figure 2 illustre le spectre extrait pour une énergie de neutron incident de 1,5 MeV et compare les données obtenues aux données les plus précises obtenues auparavant. Le gain en précision est très sensible, avec une réduction typique de l'incertitude d'un facteur 2 à 10.

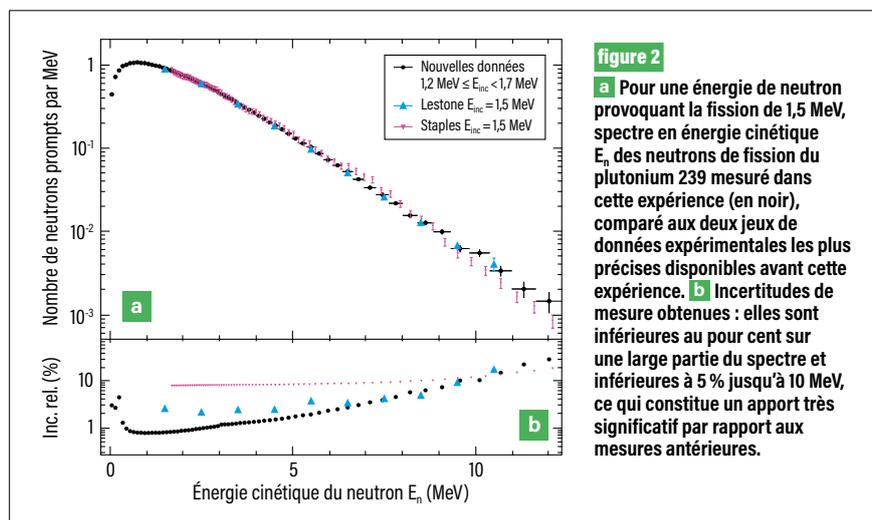


figure 2
a Pour une énergie de neutron provoquant la fission de 1,5 MeV, spectre en énergie cinétique E_n des neutrons de fission du plutonium 239 mesuré dans cette expérience (en noir), comparé aux deux jeux de données expérimentales les plus précises disponibles avant cette expérience. **b** Incertitudes de mesure obtenues : elles sont inférieures au pour cent sur une large partie du spectre et inférieures à 5% jusqu'à 10 MeV, ce qui constitue un apport très significatif par rapport aux mesures antérieures.

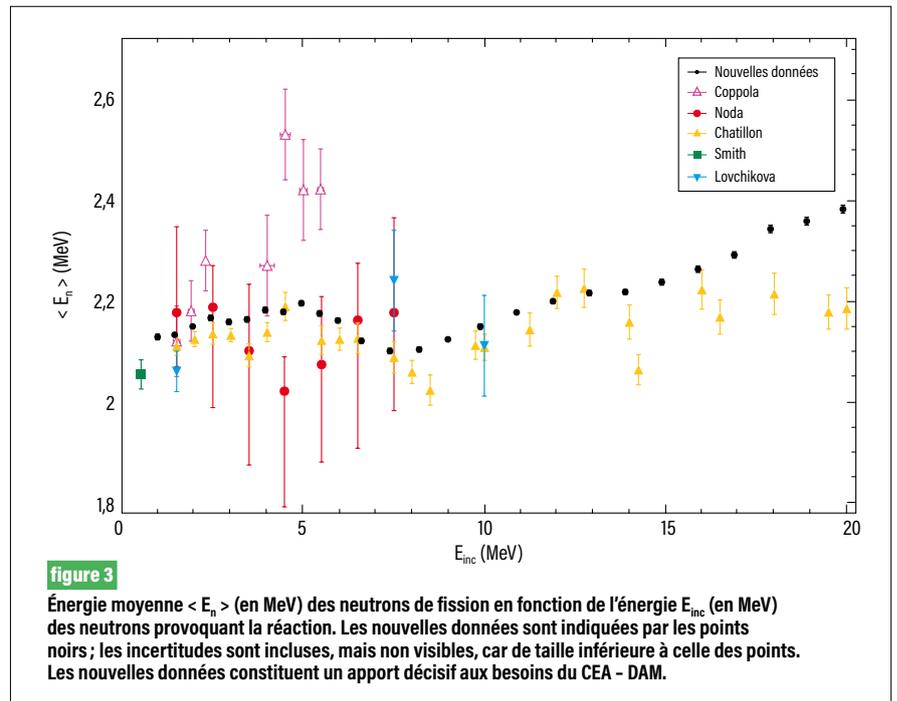


figure 3
 Énergie moyenne $\langle E_n \rangle$ (en MeV) des neutrons de fission en fonction de l'énergie E_{inc} (en MeV) des neutrons provoquant la réaction. Les nouvelles données sont indiquées par les points noirs ; les incertitudes sont incluses, mais non visibles, car de taille inférieure à celle des points. Les nouvelles données constituent un apport décisif aux besoins du CEA - DAM.

La source neutronique de Los Alamos fournit des neutrons sur une gamme très large en énergie, qui permet de produire les PFNS en fonction de l'énergie des neutrons provoquant la réaction de fission. Ces spectres peuvent être traités afin d'en extraire une valeur moyenne de l'énergie cinétique des neutrons de fission du plutonium 239 en fonction de l'énergie des neutrons provoquant la fission. Ce résultat est illustré sur la figure 3 où les énergies moyennes des PFNS sont comparées

à des mesures antérieures. Les incertitudes sur les données ne sont pas visibles sur la figure, car de taille inférieure à la taille du point. Le gain en précision est là encore évident, avec une réduction de l'incertitude d'un facteur 5 au moins par rapport aux meilleures données obtenues précédemment.

L'expérience menée à Los Alamos a permis de mesurer les spectres de neutron de fission du plutonium 239 avec une précision sans équivalent et de répondre aux besoins du programme Simulation du CEA - DAM. Les expériences prévues dans les années à venir devraient amener à mesurer ces spectres pour la fission d'autres actinides et avec une précision similaire.

RÉFÉRENCES

- 1 P. Marini, J. Taieb, B. Laurent, G. Bélier, A. Chatillon *et al.*, « Prompt fission neutron spectra in the $^{239}\text{Pu}(n,f)$ reaction », *Phys. Rev. C.*, **101**, 044614 (2020).
- 2 T. Ethvignot *et al.*, « Neutron multiplicity in the fission of ^{238}U and ^{235}U with neutrons up to 200 MeV », *Phys. Rev. Lett.*, **94**, 052701 (2005).
- 3 A. Chatillon *et al.*, « Mesure des spectres de neutrons prompts émis lors de la fission du ^{239}Pu », revue *chocs avancées* 2014, p. 18-19 (2015).

P. Loubeyre, F. Occelli [CEA – DAM Île-de-France
Université Paris-Saclay, CEA, Laboratoire matière en conditions extrêmes (LMCE), Bruyères-le-Châtel]
P. Dumas [Synchrotron Soleil, Saint-Aubin]

Première observation de l'hydrogène métallique

La possible existence de l'hydrogène métallique intrigue les physiciens depuis 85 ans. À quelle pression et sous quelle forme l'hydrogène devient-il métal sont encore des questions ouvertes. L'hydrogène métallique est le problème phare de la physique des hautes pressions qui, malgré une formulation très simple, cache une grande complexité dans sa résolution expérimentale ou théorique. De nombreuses tentatives d'observation ont été faites depuis les années 1970, mais aucune n'a été validée. En associant une nouvelle technique de génération de pressions statiques extrêmes en cellule à enclumes de diamant et une mesure des propriétés électroniques par spectroscopie infrarouge synchrotron, l'hydrogène métallique a pu être observé au-dessus de 425 GPa [1](#). La recherche de l'hydrogène métallique permet aussi de progresser dans notre connaissance de l'hydrogène très dense et ainsi de répondre aux besoins du programme Simulation du CEA – DAM.

Deux atomes d'hydrogène forment une molécule, H_2 , très stable. Un ensemble d'atomes d'hydrogène à pression ambiante forme un système de molécules H_2 qui, en abaissant la température, passe de l'état gazeux à l'état fluide et solide. Le solide (non métallique) de molécules H_2 est aussi obtenu en comprimant l'hydrogène gazeux au-dessus de 50 000 fois la pression atmosphérique. Ce que la mécanique quantique a conduit à prédire il y a 85 ans est que l'augmentation de densité dans le solide devait casser les molécules sous une pression suffisamment élevée. Le volume disponible dans le réseau cristallin pour la molécule H_2 devenant de plus en plus réduit avec la pression, l'énergie de localisation électronique augmente fortement à cause du principe d'incertitude. Il devient alors plus favorable pour le système d'atomes d'hydrogène d'adopter une forme métal avec des électrons libres dans un réseau de protons. Avec

le développement de nouvelles approches théoriques, des arrangements surprenants de protons ont été proposés, faits de filaments ou gardant une mémoire de l'appariement des protons dans la molécule. En fait, les calculs des propriétés de l'hydrogène sont plus exigeants que pour les autres matériaux, car les protons et les électrons y sont fortement couplés et leur comportement est très quantique. Des mesures détaillées et validées sont nécessaires pour tester et valider les approximations des différents calculs.

La stratégie expérimentale suivante a été mise en place : 1) montrer que l'on pouvait générer des pressions au-dessus de 500 GPa alors que la limite reconnue de la compression statique dans une presse à enclumes de diamant est de 400 GPa ; 2) avoir une signature fiable du caractère métallique de l'hydrogène, non intrusive dans l'échantillon pour éviter les effets parasites d'impuretés ou de réactions chimiques ; 3) faire des mesures liées aux changements des propriétés structurales et électroniques de l'hydrogène à l'approche de sa métallisation. Deux développements expérimentaux ont pour cela été effectués : l'usinage de nouvelles formes d'enclumes de diamant par faisceau d'ions et la construction d'un banc de spectroscopie infrarouge dédié aux mesures sous très haute pression et utilisant la grande brillance du synchrotron Soleil, sur le plateau de Saclay, comme schématisé sur la [figure 1](#).

La presse à enclumes de diamant permet des mesures très fines des matériaux sous des pressions de plusieurs millions de fois la pression atmosphérique. Le diamant est le matériau le plus dur et sa transparence optique parfaitement adaptée pour effectuer des mesures de spectroscopie sous très forte pression. Mais les pointes de diamant qui se déforment sous très haute pression limitent le maximum de pression en dessous de 400 GPa. Une nouvelle forme de pointe des diamants a été mise au point et permet de repousser cette limite au-delà de 600 GPa [2,3](#). Cela a été rendu possible grâce à la maîtrise au sein du CEA – DAM de la technique d'usinage par faisceau d'ions focalisés. Des mesures d'équation d'état par diffraction X devant le synchrotron ESRF à Grenoble, sur des métaux et sur l'argon jusqu'à 600 GPa, ont

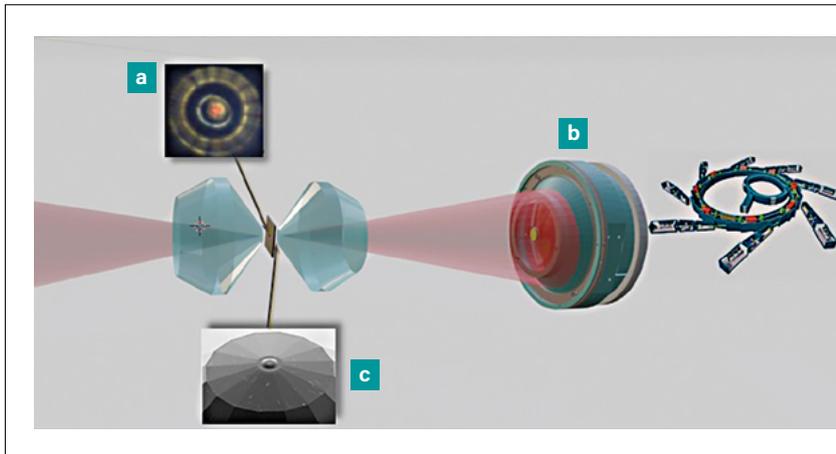


figure 1

Schéma de principe de l'expérience : un échantillon d'hydrogène est comprimé entre deux pointes de diamant usinées dans une forme torique. Un trou dans une feuille de rhénium forme la cavité expérimentale. **a** Une photographie montre un échantillon d'hydrogène vers 300 GPa éclairé en transmission par le rayonnement synchrotron. Les dimensions du solide d'hydrogène sont de 6 μm de diamètre et 2 μm d'épaisseur.

b Un microscope avec optiques réfléchives de type Cassegrain a été spécialement construit pour focaliser le rayonnement synchrotron dans le petit volume expérimental et collecter le signal transmis. **c** Une photographie montre la pointe torique d'une enclume (réalisation O. Marie, CEA - DAM Île-de-France).

permis de montrer que des mesures fiables pouvaient ainsi être faites bien au-delà de la pression limite de la cellule à enclumes de diamant classique.

Le microscope horizontal infrarouge dédié aux mesures sous très haute pression a été construit et couplé à la sortie d'un interféromètre à transformée de Fourier alimenté par le rayonnement infrarouge très brillant du synchrotron Soleil, à Saint-Aubin. Au-dessus de 340 GPa, l'absorbance de l'échantillon est modifiée par deux effets : la décroissance du gap électronique dans le domaine de l'infrarouge

et l'absorption due au vibron de l'hydrogène. Le premier renseigne sur l'état électronique et quantifie l'énergie qu'il faut donner aux électrons pour les rendre libres, c'est-à-dire les faire passer du niveau de valence au niveau de conduction. Le second reflète les changements d'environnement de la molécule H_2 , soit par réduction de volume, soit par changement de structure. Le gap électronique est tracé en fonction de la pression sur la **figure 2**. Une décroissance quasi linéaire avec la pression est observée. Mais le gap électronique ne décroît pas continûment jusqu'à l'état

métallique où le gap est fermé ; il devient nul de manière discontinue à 425 GPa : c'est la transition métallique.

La mesure du gap électronique est un test très contraignant des calculs des propriétés électroniques de l'hydrogène. Un calcul très récent **4** est en bon accord avec les mesures, car il prend en compte les effets quantiques des protons.

La qualité de l'échantillon obtenu à 430 GPa permet maintenant d'envisager une caractérisation des propriétés de l'hydrogène métallique par des mesures de réflectivité visible et infrarouge et de spectroscopie Raman, ce qui pourrait permettre de remonter à sa température de supraconductivité. En suivant le même protocole expérimental, le métal de deutérium vient d'être observé avec un déplacement isotopique significatif sur la pression de transition. C'est une première indication que l'hydrogène métallique est vraiment un solide très quantique.

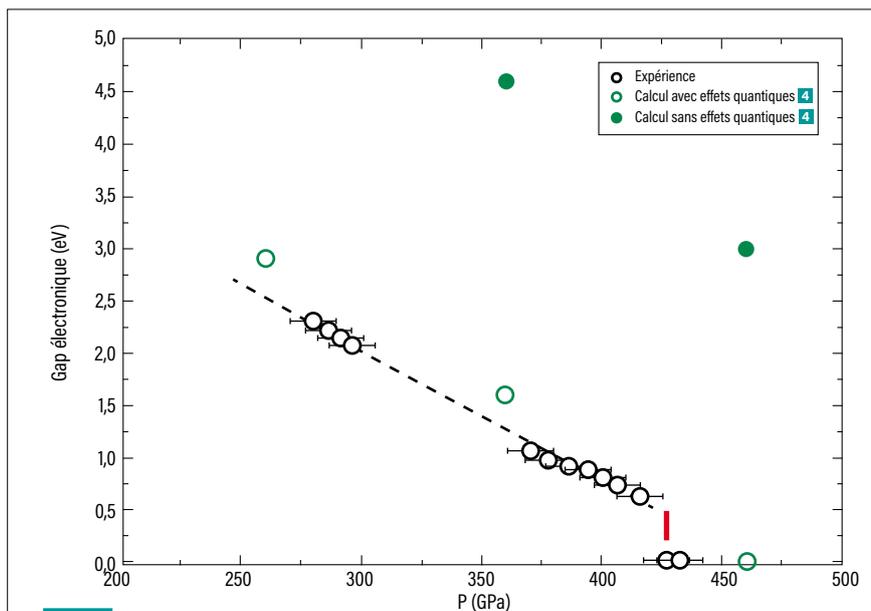


figure 2

Évolution du gap électronique avec la pression P en gigapascals (GPa). Le solide d'hydrogène n'atteint pas son état métallique continûment, mais par une transition discontinue autour de 425 GPa. Le point à 425 GPa montre la fermeture du gap et prouve ainsi la formation d'hydrogène métallique. Pour reproduire la valeur expérimentale du gap électronique, les calculs les plus avancés **4** ont pris en compte les fluctuations quantiques des protons.

RÉFÉRENCES

- 1** P. Loubeyre, F. Occelli, P. Dumas, « Synchrotron infrared spectroscopic evidence of the probable transition to metal hydrogen », *Nature*, **577**, p. 631 (2020).
- 2** A. Dewaele, P. Loubeyre, F. Occelli, O. Marie, M. Mezouar, « Toroidal diamond anvil cell for detailed measurements under extreme static pressures: data on Al, Ar and Au up to 600 GPa », *Nat. Comm.*, **9**, p. 2913 (2018).
- 3** P. Loubeyre, A. Dewaele, G. Weck, F. Occelli, O. Marie, « De nouvelles formes d'enclume de diamant pour étudier la matière très comprimée », *revue chocs avancées*, **13**, p. 18-19 (2019).
- 4** L. Monacelli *et al.*, « Black metal hydrogen above 360 GPa driven by proton quantum fluctuations », *Nature Physics*, **17**, p. 63 (2020).

C. Denoual, A. Dewaele, B. Amadon, N. Bruzy [CEA – DAM Île-de-France
Université Paris-Saclay, CEA, Laboratoire matière en conditions extrêmes (LMCE), Bruyères-le-Châtel]
É. Boulard, V. Riffet [CEA – DAM Île-de-France]

Nouvelle investigation de la cinétique des transitions de phase en conditions extrêmes

Le comportement des métaux, régi par la relation entre déformation et contrainte, dépend fortement de leur structure cristalline, appelée phase. Lorsque pression et température évoluent, celle-ci peut changer, entraînant une variation brusque de la densité, de la déformation et du comportement plastique du métal. Lorsqu'une telle transition est obtenue lors d'un choc intense, un cas qui intéresse particulièrement le CEA – DAM, la question de leur cinétique, et donc également du comportement du métal, revêt une importance cruciale. Des mesures réalisées par le CEA – DAM Île-de-France ont permis de montrer, pour la première fois, que les mécanismes de transition pouvaient changer au cours d'un même chargement **1** ; des calculs de structure électronique suggèrent aussi que la plasticité est fortement couplée avec les mécanismes de transition **2**.

Le comportement des métaux sous sollicitation extrême, par exemple au cœur des planètes telluriques ou lors de chocs intenses, reste mal connu. La mise en place récente au synchrotron Soleil du suivi simultané de la structure cristalline (par diffraction X) et de la microstructure (par tomographie X) d'échantillons de fer sous conditions extrêmes est une avancée importante pour l'analyse *in situ* des transitions de phase.

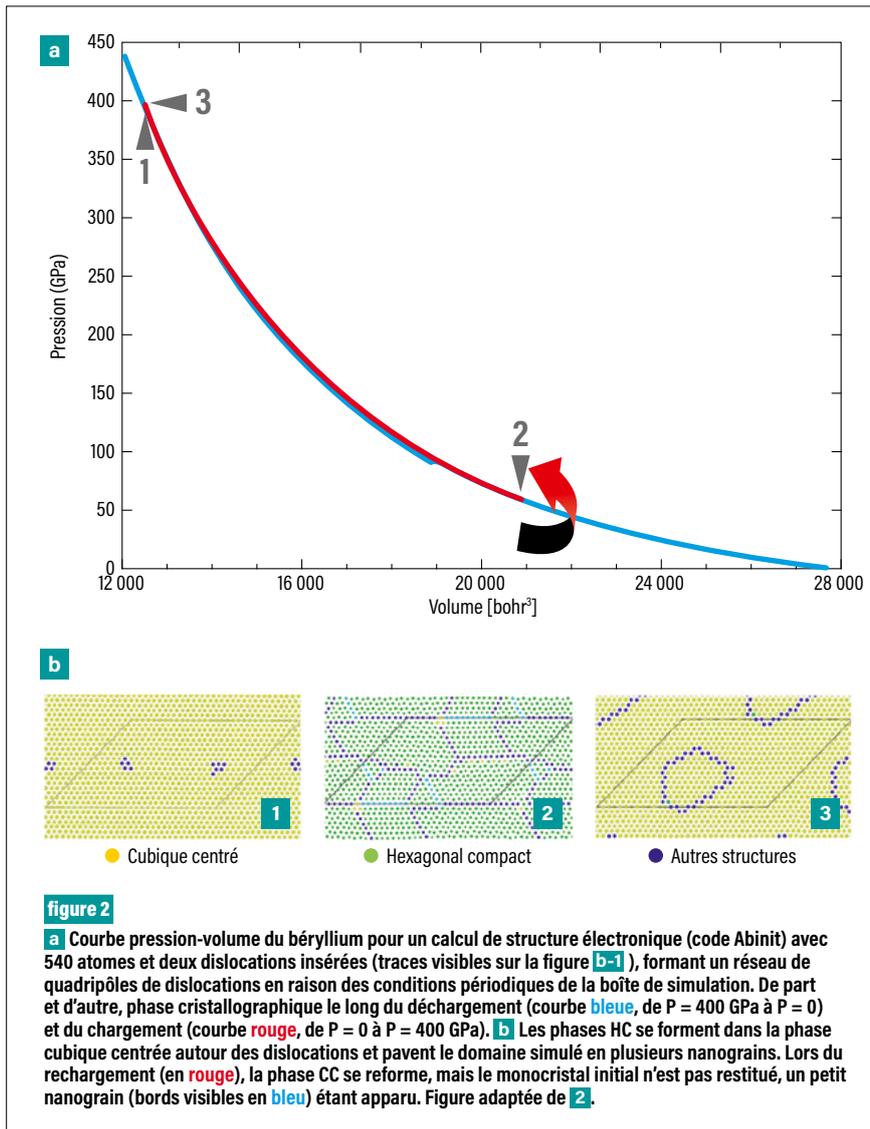
Le CEA – DAM Île-de-France a réalisé des mesures jusqu'à 800 K et 10 GPa avec la presse dite Paris-Édimbourg. Obtenues lors d'une transition d'une phase cubique centrée (notée CC) vers une phase hexagonale compacte (notée HC) dans le fer, ces mesures ont permis d'observer une modification inattendue du mécanisme de cette transformation, dont on distingue deux étapes principales.

Lors d'une première étape (**figure 1a**), de grandes plaquettes de phase HC apparaissent très rapidement dans l'ensemble de l'échantillon. Cette microstructure est typique des transformations *displacives* lors desquelles l'essentiel des changements de la position des atomes (et donc de la structure cristalline) est provoqué par une déformation homogène. Ces transformations, impliquant le mouvement coordonné de millions d'atomes, sont compatibles avec des vitesses de transformation très élevées : elles peuvent apparaître lors de chocs intenses. Comme l'échantillon initial ne possède qu'une seule orientation cristalline – il est monocristallin –, l'orientation relative des plaquettes extraite des analyses tomographiques *in situ* apporte de précieuses informations, jusqu'ici jamais obtenues pour une transformation sous haute pression. Ces données et une analyse des conditions de compatibilité entre les différentes phases **1** permettent d'affirmer que la transformation dans cette première phase était bien *displacive* et ne nécessitait pas (ou peu) de déformation irréversible de type plastique.



figure 1

Tomographie de la transformation CC-HC dans le fer, à 800 K et 10 GPa : vue de la reconstruction tomographique de l'échantillon recueillie à 10,6 GPa et 800 K **a** en 3D et **b** en coupe. Les zones sombres (resp. claires) correspondent à la phase CC (resp. HC). La zone ovoïde au centre, visible sur la figure **b**, est apparue en fin de transformation avec une cinétique beaucoup plus lente.



Lors d'une deuxième étape de la transformation, la morphologie en plaquettes laisse place à une croissance « bourgeonnante », moins structurée (figure 1b). L'analyse en diffraction X réalisée sur ces nouvelles zones transformées montre que les orientations cristallines n'évoluent pas : les mêmes orientations cristallines sont créées, mais avec une morphologie différente. Cette fois-ci, la transition n'est plus *displacive* et implique une activité plastique. Celle-ci intervient par le mouvement de ligne de défauts du cristal appelés dislocations, pouvant interagir avec la création des phases. Pour étudier ces interactions impossibles à observer *in situ*, des calculs *ab initio* ont été réalisés à l'aide d'un code de calcul de structure électronique (Abinit) pour cette même transition HC-CC, mais pour le

béryllium, métal léger permettant de considérer 540 atomes et qui possède cette transition vers 400 GPa. Des dislocations initiales ont été insérées dans le cristal **2** et la transition HC-CC a été provoquée en modifiant le volume (et donc la pression) de la cellule de calcul.

La transition est fortement influencée par la présence de dislocations, les phases apparaissant autour de celles-ci, que l'on peut donc considérer comme des germes. Cela s'explique par la distorsion entourant les dislocations qui comprime le cristal suivant les directions proches de celles de la transformation CC-HC. Sans surprise, l'énergie d'excès (énergie à fournir au système pour entraîner la transformation) s'en trouve très abaissée : les phases ainsi aidées apparaissent plus facilement et plus progressivement. Les dislocations

favorisent donc le mélange des phases, information importante pour la définition de modèle de cinétique de transition. Plus surprenant, lors d'un cycle complet restaurant la pression initiale, le cristal s'est fragmenté (inclusion CC visible en figure 2b-3 pour P = 400 GPa), faisant donc apparaître une irréversibilité de la transformation.

Ainsi, les mécanismes de transformation et de plasticité sont probablement couplés pour la transition CC-HC. L'observation *in situ* des zones transformées dans le fer indique un changement de la cinétique lors d'une même transformation, jamais observé jusqu'à présent. Cette cinétique n'est donc pas une fonction des phases seules ; d'autres mécanismes (comme la plasticité) interviennent. Les simulations *ab initio* détaillent certains modes de couplage entre plasticité et transitions, et démontrent que ces dernières peuvent apparaître plus tôt, de façon plus progressive, en accord avec de précédentes mesures expérimentales.

RÉFÉRENCES

- 1** É. Boulard, C. Denoual, A. Dewaele *et al.*, « Following the phase transitions of iron in 3D with X-ray tomography and diffraction under extreme conditions », *Acta Materialia*, **192**, p. 30-39 (2020).
- 2** V. Riffet, B. Amadon, N. Bruzy, C. Denoual, « Role of dislocations in the bcc-hcp transition under high pressure: A first-principles approach in beryllium », *Phys. Rev. Materials*, **4**, 063609 (2020).

L. Soulard, A. Sollier, É. Lescoute [CEA – DAM Île-de-France
Université Paris-Saclay, CEA, Laboratoire matière en conditions extrêmes (LMCE), Bruyères-le-Châtel]
O. Durand [CEA – DAM Île-de-France]

Étude expérimentale et numérique du micro-jetting : influence des modifications structurales induites par choc

Le micro-jetting est un processus d'éjection de microparticules consécutif à l'émergence d'une onde de choc sur une surface présentant des défauts géométriques tels que des rainures. Des simulations à l'échelle atomique associées à des expériences d'imagerie ultrarapide ont permis de mieux comprendre ce phénomène complexe, en particulier le rôle des changements structuraux induits par le choc [1,3](#).

Une onde de choc émergeant à la surface du matériau dans lequel elle se propage peut provoquer la dispersion, dans le milieu environnant, de microparticules animées d'une vitesse pouvant atteindre plusieurs kilomètres par seconde. Ce phénomène a diverses origines, dont l'une est la présence de défauts de surface, tels que des rainures : l'interaction du choc avec une rainure peut alors provoquer la formation d'un jet de très petite dimension, qui

s'allonge puis se fragmente en de multiples débris. Ce phénomène est appelé le micro-jetting.

Prédire la taille et la vitesse des débris nécessite une connaissance approfondie des divers phénomènes qui conduisent à la formation et à la fragmentation du jet. Il s'agit d'une physique mettant en jeu de nombreuses propriétés du matériau, comme son comportement sous choc, sa viscosité, sa tension de surface ou les mécanismes de fragmentation, propriétés parfois peu connues et difficiles à mettre en œuvre dans un code de calcul de type éléments finis. Une approche associant théorie, expérience et simulation numérique a cependant permis d'apporter des informations inédites sur le micro-jetting.

Les expériences [1](#) ont été réalisées sur l'installation GCLT, ou générateur de choc laser transportable, un laser impulsif du CEA – DAM Île-de-France dédié à la physique des chocs. Ces expériences avaient pour objet l'observation de l'élongation et de la fragmentation d'un jet issu d'une rainure unique

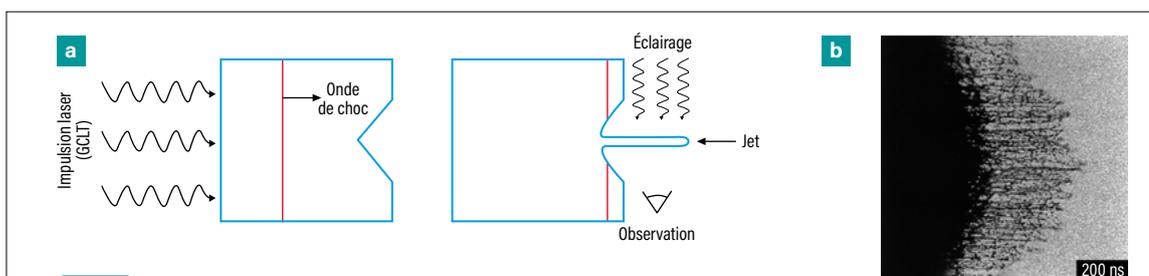


figure 1

a Principe du micro-jetting et de l'observation par ombroscopie : une impulsion laser délivrée par le GCLT provoque la formation d'une onde de choc dans la cible, dont l'interaction avec le défaut de surface conduit à la formation d'un jet. L'image est obtenue en éclairant la scène avec une impulsion laser ultracourte. **b** Image de la fragmentation d'un jet d'étain issu d'une rainure en V de 40 µm de profondeur et de 90 degrés d'angle d'ouverture [1](#). La zone observée est un carré de 532 µm de côté. L'observation est réalisée 200 ns après l'application de l'impulsion laser. La pression du choc du jet est de 19 GPa. Le jet est éclairé pendant 100 picosecondes. La résolution spatiale est de 210 nm/pixel.

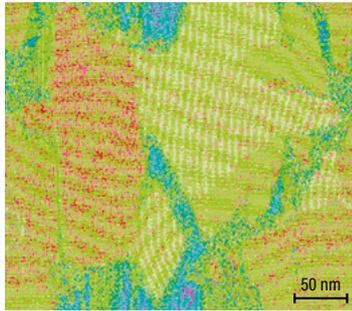


figure 2

Structure granulaire de l'étain derrière une onde de choc de 15 GPa **2** qui montre une évolution progressive de l'état cristallographique initial (en vert) vers la structure finale (en bleu), en passant par un état intermédiaire (en rouge). Devant le choc, l'échantillon est uniformément vert.

et parfaitement caractérisée. Le matériau est une feuille d'étain polycristallin ultrapur de 100 μm d'épaisseur à la surface de laquelle est imprimée une rainure de 40 μm de profondeur ayant une forme de U ou une forme de V. La face opposée est éclairée sur une zone circulaire de 430 μm de diamètre par une impulsion laser d'une durée de 10 ns et d'une énergie comprise entre 15 et 19 J, vaporisant le matériau et créant par réaction une onde de choc atteignant une pression comprise entre 15 et 21 GPa au fond de la rainure. L'observation du jet, qui adopte la forme d'une nappe, est obtenue en éclairant ce dernier par le dessus avec une impulsion laser de 100 ps et en enregistrant l'ombre du jet sur un capteur adapté. L'image obtenue (**figure 1**) montre que le jet se fragmente en une structure filamentaire dont les caractéristiques dépendent fortement de la forme en U ou en V de la rainure.

Une interprétation possible de ces observations a été proposée à l'aide de simulations de dynamique moléculaire classique, méthode consistant à décrire le mouvement des atomes en résolvant l'équation fondamentale de la dynamique de Newton. L'étain subissant des changements structuraux importants dans la gamme de pression de choc considérée, une étude préliminaire **2** a été nécessaire pour caractériser son état derrière le choc. Les simulations effectuées sur un monocristal et réalisées avec le code ExaStamp développé au CEA – DAM montrent que le

cristal initial se fragmente en de multiples grains adoptant des structures cristallographiques variées (**figure 2**).

La dernière étape consiste alors à simuler l'expérience décrite précédemment en tenant compte de l'évolution de la structure de l'étain sous choc, mais en simplifiant la structure polycristalline initiale qui est supposée monocristalline. Compte tenu de la capacité des moyens de calcul actuels et des limitations inhérentes à la dynamique moléculaire, le système simulé est beaucoup plus petit que l'échantillon expérimental (d'un facteur 1 000 environ). Des travaux antérieurs ont cependant démontré que les processus mis en jeu dans la fragmentation présentent des propriétés d'invariance d'échelle justifiant la réduction des dimensions de l'échantillon. La présence de la structure granulaire en aval du choc requiert néanmoins des échantillons suffisamment volumineux (avec un nombre d'atomes compris entre quelques centaines de millions et jusqu'à plus d'un milliard), ce qui a conduit à réaliser des simulations de dynamique moléculaire hors normes au vu des travaux de la littérature. Chaque simulation a été effectuée sur la machine Tera 1000-2 du CEA – DAM, en mobilisant

jusqu'à 32 000 cœurs de calcul; la durée de chaque simulation est de l'ordre de la semaine.

Un exemple de résultat **3** (**figure 3**) montre que le jet adopte, comme dans l'expérience, une structure filamentaire dont l'origine peut être attribuée à l'état granulaire de l'étain choqué: quand le choc émerge à la surface du défaut, l'étain se détend brutalement et fond. La fusion demande cependant un certain temps qui dépend de l'état local de la matière. À sa formation, le jet a donc une structure hétérogène, mélange de zones fondues ou solides, qui perturbe son développement ultérieur. Cette structure est en effet amplifiée lors de l'élongation du jet et produit de fortes ondulations qui sont à l'origine de la structure filamentaire lors de la fragmentation de ce dernier.

Ce travail illustre l'importance de la microstructure d'un matériau sur la fragmentation d'un jet. Dans les simulations, seule la microstructure créée par le choc sur un monocristal est prise en compte. Dans les expériences, effectuées sur des feuilles polycristallines, une structure granulaire préexiste et joue son propre rôle. Les contributions finales de chacune de ces structures doivent cependant être qualitativement semblables.



figure 3

Structure filamentaire d'une nappe d'étain en cours de fragmentation **3**, analogue à celle observée lors des expériences (**figure 1**), obtenue par dynamique moléculaire classique sur un échantillon comportant 1,2 milliard d'atomes. Le temps d'observation est 1160 ps après le début de l'interaction du choc et du défaut.

RÉFÉRENCES

- 1 A. Sollier, É. Lescoute**, « Characterization of the ballistic properties of ejecta for laser shock-loaded samples using high-resolution picosecond laser imaging », *International Journal of Impact Engineering*, **136**, 103429 (2020).
- 2 L. Soulard, O. Durand**, « Observation of phase transitions in shocked tin by molecular dynamics », *J. Appl. Phys.*, **127**, 165901 (2020).
- 3 O. Durand et al.**, « Influence of the phase transitions of shock-loaded tin on microjetting and ejecta production using molecular dynamics simulations », *J. Appl. Phys.*, **127**, 175901 (2020).

Progrès dans la simulation des écoulements raréfiés pour la rentrée atmosphérique

Dans le cadre de ses missions, le CEA - DAM développe des modèles physiques et des méthodes numériques pour la simulation numérique de la rentrée de véhicules hypersoniques dans l'atmosphère. Le dimensionnement des protections thermiques de ces véhicules requiert une connaissance précise des flux thermiques de paroi et donc de l'écoulement entourant le véhicule. Le code développé au CEA - Cesta, dédié à la simulation de l'écoulement en régime dit raréfié, a bénéficié d'avancées à la fois dans les domaines de la simulation numérique et de la modélisation physique. Dans les travaux publiés récemment dans **1**, la prise en compte des effets liés aux hautes températures de l'écoulement entourant le véhicule constitue une avancée majeure dans la modélisation de ces écoulements.

Lors de sa rentrée dans l'atmosphère, un véhicule hypersonique rencontre différents types d'écoulement d'air. L'écoulement autour du véhicule est peu dense à haute altitude, plus dense dans les basses couches de l'atmosphère (**figure 1**).

Pour ses besoins, le CEA - Cesta développe des modèles permettant de simuler les écoulements autour du véhicule à toutes les altitudes. Les modèles à haute et basse altitude sont représentatifs de la réalité, mais le sont moins aux altitudes intermédiaires, entre 70 et 120 km, c'est-à-dire dans le régime raréfié, où la vitesse du véhicule est de l'ordre de Mach 20. Dans ce régime, la description des écoulements repose sur la théorie cinétique des gaz **2**; la position et la vitesse des particules d'air constituant l'écoulement sont décrites par une fonction de distribution des particules, laquelle est solution d'une équation aux dérivées partielles régissant le

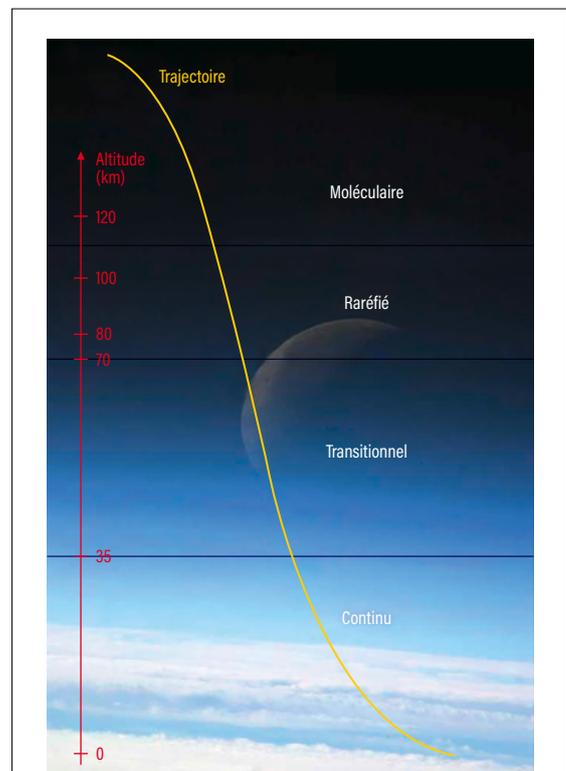


figure 1

Régimes d'écoulement rencontrés au cours de la rentrée atmosphérique par un véhicule hypersonique : régime dit moléculaire au-dessus de 120 km, raréfié entre 70 et 120 km, transitionnel entre 35 et 70 km et continu en dessous de 35 km. L'écoulement est très peu dense au-dessus de 120 km ; en dessous, il se densifie de plus en plus au fur et à mesure que le véhicule descend jusqu'au sol. L'écoulement est modélisé différemment selon le régime considéré ; le CEA - Cesta souhaite améliorer la description du régime raréfié.

devenir de ces particules - transport, collisions entre elles et avec le véhicule - : l'équation de Boltzmann. Cette équation reste aujourd'hui complexe à résoudre numériquement du fait de la grande dimensionnalité du problème et de la non-linéarité de l'opérateur

de collision. Dans le régime considéré, elle peut être approchée par l'équation dite de BGK (Bathnagar-Gross-Krook), plus simple à résoudre : les particules ont tendance à suivre un état d'équilibre maxwellien avec un temps de relaxation lié aux caractéristiques de l'écoulement.

Lors de la rentrée atmosphérique, un choc se produit dans l'air autour du véhicule. L'écoulement de l'air autour du véhicule est alors porté à de très hautes températures et des phénomènes complexes apparaissent : déséquilibre rotationnel et vibrationnel des molécules d'air, réaction chimique ; ces phénomènes n'étaient pas pris en compte jusqu'à présent. Effectué en collaboration avec l'Institut de mathématiques de Bordeaux, le travail publié dans **1** a consisté à les prendre en compte dans le modèle BGK.

Les molécules de l'écoulement d'air, N_2 et O_2 , sont des molécules diatomiques. C'est cette structure

diatomique qui réagit lorsque les molécules sont portées à haute température. Les phénomènes de rotation et de vibration entre atomes d'azote ou d'oxygène consomment de l'énergie **3** et abaissent la température de l'écoulement. Pour modéliser ces phénomènes, la fonction de distribution doit prendre en compte, en plus de la position et de la vitesse des molécules, l'énergie interne du gaz, qui dépend de la température de celui-ci. Dans le nouveau modèle, les rotations entre les atomes des molécules diatomiques et les vibrations de ces molécules sont ainsi prises en compte, avec pour conséquence un abaissement de l'énergie interne de l'écoulement et donc de la température. Le modèle a été implémenté dans le code du CEA - Cesta, un résultat significatif est présenté sur la **figure 2 1**.

À la frontière des régimes raréfié et transitionnel, le modèle utilisé pour l'un, basé sur l'équation de BGK, et celui

utilisé pour l'autre, basé sur les équations de Navier-Stokes, peuvent être comparés : les observables macroscopiques, comme la vitesse, se trouvent être solution aussi bien de l'équation de BGK que des équations de Navier-Stokes. En utilisant les codes qui résolvent ces équations, les effets des vibrations ont pu être observés : les résultats des deux codes sont très proches, ce qui est très satisfaisant et valide le modèle dans le régime raréfié pour les écoulements les plus denses.

À ces travaux de modélisation est adossée une démarche de validation par comparaison avec des résultats obtenus dans la soufflerie MARHy du laboratoire Icare du CNRS à Orléans, unique soufflerie raréfiée en France. De premières comparaisons ont pu être menées à Mach 4. Les pressions simulées et mesurées dans l'écoulement ont été observées à des valeurs très proches, permettant de valider la précision du code. Cette campagne de validation se poursuivra pour des nombres de Mach plus élevés.

Pour conclure, le modèle présenté dans **1** permet de décrire de manière plus précise et réaliste les écoulements autour de véhicules hypersoniques dans les gammes d'altitudes élevées correspondant au début de la rentrée atmosphérique. Il permet d'assurer la qualité de résolution des quantités de flux de chaleur et de coefficients aérodynamiques autour du véhicule. Une campagne de validation à Mach 20 est d'ores et déjà programmée.

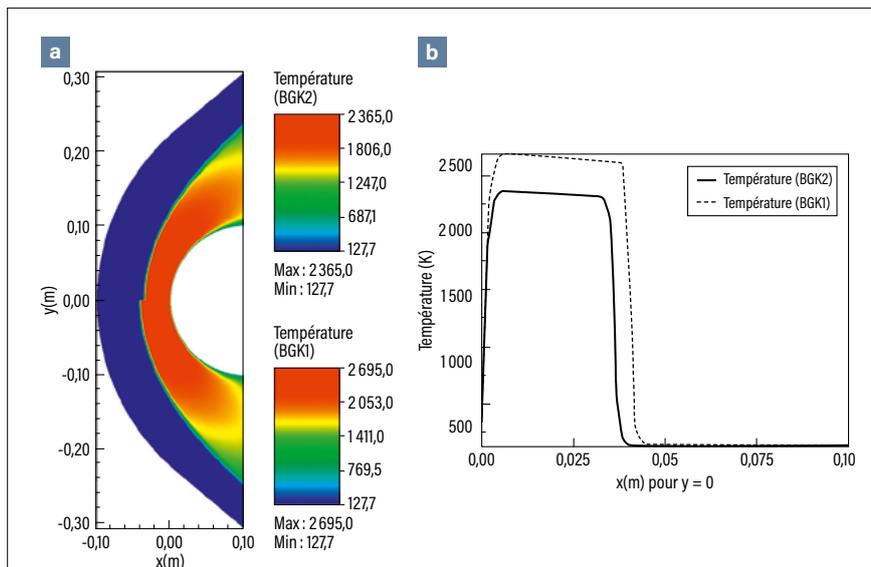


figure 2

Simulation de l'écoulement d'air autour d'un cylindre de rayon 10 cm, de vitesse $2267 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, soit Mach 10, avec une température de paroi de 293 K ; la température de l'air devant le cylindre, avant le choc, est de 127 K. **a** Température en kelvins devant le cylindre en fonction des coordonnées spatiales x et y : en bas, simulation BGK avec un modèle décrivant les translations et rotations (BGK1) et, en haut, modèle BGK décrivant en plus les vibrations (BGK2). **b** Température extraite de la figure **a** pour $y = 0$, c'est-à-dire le long de la ligne de symétrie. Dans le cas où les vibrations sont prises en compte (trait plein, BGK2), le choc est positionné au bon endroit et la température maximale atteinte est plus représentative de ce qui se passe dans l'écoulement : l'énergie consommée par les vibrations ne se retrouve pas dans l'énergie interne de l'écoulement et la température est bien abaissée dans la zone située entre le choc et la paroi.

RÉFÉRENCES

- 1** C. Baranger *et al.*, « A BGK model for high temperature rarefied gas flows », *European Journal of Mechanics B: Fluids*, **80**, p. 1-12 (2020).
- 2** G. A. Bird, *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*, Oxford Engineering Science Series (2003).
- 3** J. Anderson, *Hypersonic and high-temperature gas dynamics*, second edition. AIAA Education Series. American Institute of Aeronautics and Astronautics (2006).

Mise en évidence de l'apparition d'anisotropie mécanique dans des explosifs

Les explosifs à base de HMX et de TATB, employés dans les systèmes pyrotechniques du CEA – DAM, sont soumis à des sollicitations mécaniques variées lors des phases de fabrication, d'assemblage, de transport et de démontage. L'enjeu pour le CEA – DAM est d'assurer la tenue mécanique et la sécurité pyrotechnique des édifices qu'il fabrique, quel que soit leur cycle de vie. L'intégrité des systèmes est garantie à la DAM par la simulation numérique des environnements thermiques, vibratoires et des accélérations. Pour réaliser ces calculs avec précision, il faut disposer d'une description la plus fine possible du comportement mécanique des explosifs. Pour la première fois, le CEA – Le Ripault, en collaboration avec le Laboratoire de mécanique Gabriel-Lamé, dans le cadre du laboratoire de recherche conventionné CoSMA, a mis en évidence expérimentalement et a modélisé l'anisotropie du comportement mécanique qui se développe au cours des sollicitations .

Le comportement des explosifs est extrêmement complexe. Ils réagissent différemment en fonction de la direction de sollicitation (par exemple une traction ou une compression), de la pression, de la température et de la vitesse de déformation. Soit un échantillon cubique d'explosif à base de HMX (*High Melting Explosive*) ou de TATB (triaminotrinitrobenzène). Quelles que soient les deux faces choisies pour tirer sur ce cube, la réponse est identique. À l'état initial, ces matériaux ont les mêmes propriétés mécaniques (par exemple la même raideur), quelle que soit la direction de la sollicitation : ils sont isotropes. Les modèles proposés depuis les années 1970 à la DAM ou dans la littérature internationale s'appuient sur cette propriété et la réponse mécanique de ces matériaux est supposée isotrope, y

compris au cours de sollicitations complexes. Or, les avancées scientifiques de ces dernières décennies ont montré que certains matériaux (bétons, matériaux composites, etc.) pouvaient perdre cette isotropie à la suite d'un premier chargement mécanique. L'essai original, développé pour mettre en évidence et étudier ce phénomène, est décrit ci-dessous. C'est la première fois que ce phénomène est observé sur une composition explosive .

Soit deux cubes d'un même explosif à base de TATB soumis à une première compression intense sur deux faces opposées. On approche de la rupture puisque la contrainte est égale à 95 % de la contrainte maximale supportable par le matériau. La contrainte appliquée et la déformation mesurée conduisent à la courbe épaisse rouge de la **figure 1**. La réponse des deux cubes est identique puisque le matériau est initialement isotrope. Dans un second temps, l'un des cubes est soumis à une seconde compression dans la même direction (**figure 1**, courbe épaisse bleue) quand l'autre est soumis à une rotation de 90° avant de subir la seconde compression (**figure 1**, courbe épaisse verte). Les courbes épaisses bleue et verte diffèrent et démontrent ainsi l'effet de la première compression. La raideur mesurée lors de la seconde compression est différente en fonction de la direction de compression. Le matériau est devenu anisotrope.

La comparaison des courbes épaisses rouge et bleue (compression selon la même direction) montre des pieds de courbes identiques, ce qui démontre l'absence d'endommagement (microfissuration) significatif du matériau lors de ces essais, malgré une contrainte appliquée proche de la contrainte maximale admissible. Donc, la cause de l'anisotropie n'est pas l'endommagement. Cette conclusion diffère du mécanisme identifié par le passé sur un explosif à base de HMX et pour lequel l'anisotropie induite provenait principalement d'une orientation de la microfissuration lors des sollicitations.

Les phénomènes observés sur la **figure 1** sont interprétés ici par un mécanisme de plasticité relié

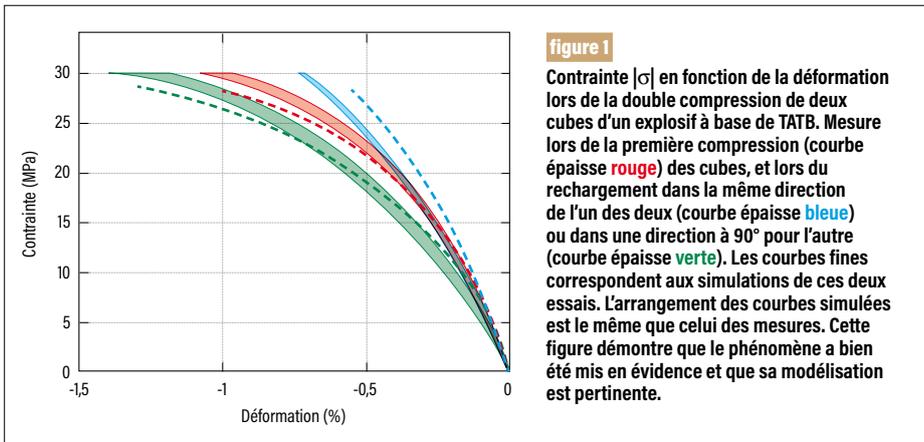


figure 1
 Contrainte $|\sigma|$ en fonction de la déformation lors de la double compression de deux cubes d'un explosif à base de TATB. Mesure lors de la première compression (courbe épaisse rouge) des cubes, et lors du rechargement dans la même direction de l'un des deux (courbe épaisse bleue) ou dans une direction à 90° pour l'autre (courbe épaisse verte). Les courbes fines correspondent aux simulations de ces deux essais. L'arrangement des courbes simulées est le même que celui des mesures. Cette figure démontre que le phénomène a bien été mis en évidence et que sa modélisation est pertinente.

à la nature particulière des cristaux de TATB. Les molécules de TATB sont relativement planes et elles s'organisent sous la forme de plans pour former des cristaux se déformant facilement dans certaines directions. Ce mécanisme masque ou retarde l'effet de l'endommagement.

À partir des observations précédentes, l'équipe du laboratoire de recherche conventionné CoSMA, pour Comportement des structures et des matériaux, rassemblant des chercheurs du CEA – Le Ripault, du laboratoire Gabriel-Lamé des universités de Tours et d'Orléans et de l'Insa Centre-Val de Loire, a développé une loi de comportement mécanique pour les explosifs. Cette loi est universelle au sens où elle décrit notamment les deux causes d'anisotropie (endommagement et

plasticité) mises en évidence pour cette classe d'explosifs. La **figure 1** (courbes fines de couleur) montre que le modèle reproduit bien les phénomènes observés lors de la double compression des deux cubes, avec ou sans rotation.

La **figure 2** est obtenue en comparant les mesures et la simulation d'un essai de torsion cyclée. Expérimentalement, l'éprouvette est un cylindre creux. L'essai de torsion consiste à tordre le haut et le bas du cylindre d'explosif tout en conservant le parallélisme des sections perpendiculaires à l'axe du cylindre. Dans l'essai de torsion cyclée, le cylindre est tordu dans un sens jusqu'à obtenir une contrainte de cisaillement de 6 MPa (trajet 0-A), puis le cisaillement est relâché (trajet A-B). On tord ensuite le cylindre dans l'autre sens jusqu'à -6 MPa (trajet B-C)

avant de relâcher l'effort une nouvelle fois (trajet C-D). Lors de l'essai reporté sur la **figure 2**, plusieurs cycles ont été effectués. La simulation reportée sur la **figure 2** reproduit parfaitement les mesures. Les niveaux de contrainte et de déformation de cisaillement correspondent à ceux observés, à la dispersion près des essais, et chaque cycle calculé se superpose au précédent, comme le montre l'essai.

Depuis que la communauté scientifique étudie cette classe d'explosifs, le comportement a été supposé isotrope, quelle que soit l'histoire mécanique subie par ces matériaux. Si cette hypothèse est justifiée pour nombre d'autres matériaux, l'apparition d'une anisotropie des propriétés mécaniques en fonction de la sollicitation appliquée est mise en évidence pour certains explosifs. La cause a été identifiée. L'anisotropie mise en évidence ici pour le TATB n'est pas due à un endommagement par microfissuration. Elle provient de la déformation plastique particulière des grains de TATB. Le modèle de comportement mis au point permet de reproduire précisément la réponse de ce matériau à des sollicitations variées, et, au CEA – Le Ripault, de simuler plus finement les édifices pyrotechniques d'intérêt.

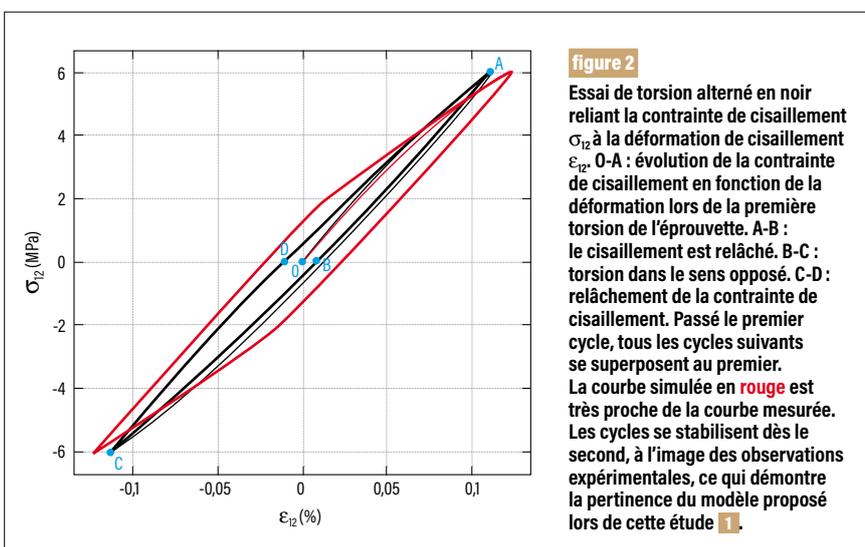


figure 2
 Essai de torsion alterné en noir reliant la contrainte de cisaillement σ_{12} à la déformation de cisaillement ϵ_{12} . 0-A : évolution de la contrainte de cisaillement en fonction de la déformation lors de la première torsion de l'éprouvette. A-B : le cisaillement est relâché. B-C : torsion dans le sens opposé. C-D : relâchement de la contrainte de cisaillement. Passé le premier cycle, tous les cycles suivants se superposent au premier. La courbe simulée en rouge est très proche de la courbe mesurée. Les cycles se stabilisent dès le second, à l'image des observations expérimentales, ce qui démontre la pertinence du modèle proposé lors de cette étude 1.

RÉFÉRENCES

1 G. Plassart, D. Picart, M. Gratton, M. Caliez, A. Frachon, « Quasistatic mechanical behavior of HMX- and TATB-based plastic-bonded explosives », *Mech. Materials*, **150**, 103561, DOI 10.1016/j.mechmat.2020.103561 (2020).

Nouvelle méthode de détermination de la sensibilité au choc des explosifs

La sensibilité au choc est une propriété importante d'un explosif. Pour remplir sa mission d'assistance à maîtrise d'ouvrage au profit de la DGA et d'expert sur la vulnérabilité de l'armement conventionnel aux agressions, le CEA – Gramat souhaite connaître cette propriété pour chaque explosif envisagé et pour une gamme donnée de pression de choc, c'est-à-dire de déterminer la courbe d'amorçage et la vitesse de réaction de chacun. Pour s'affranchir des limitations de la méthode traditionnelle, le CEA – Gramat a récemment développé une nouvelle méthode [1,2](#), originale et efficace, appliquée ici aux explosifs pourvus d'aluminium.

Les armements de la défense conventionnelle utilisent aujourd'hui des explosifs contenant des particules d'aluminium. L'intérêt premier de l'aluminium est double : il permet une mise en mouvement graduelle des éclats, sans endommagement de ces éclats, et une augmentation importante des effets du souffle aérien de l'explosion. Le déclenchement non accidentel d'un

explosif est toujours adapté à sa sensibilité ; un autre intérêt de l'aluminium est de réduire sa sensibilité afin de le rendre plus sûr vis-à-vis de risques tels qu'un choc accidentel.

L'objectif des travaux menés au CEA – Gramat est de disposer de modèles pour la simulation numérique des systèmes d'amorçage par choc employés dans les munitions et d'apporter une assistance à la DGA dans le choix d'une combinaison explosif-armement. Pour cela, il est indispensable de disposer de la courbe d'amorçage et de la vitesse de réaction chimique pour chaque explosif, indiquant la sensibilité au choc de l'explosif. Or, la méthode traditionnelle ne permet de mesurer que quelques points de cette courbe, ce qui est aujourd'hui très insuffisant. Une méthode originale a été développée pour la première fois au CEA – Gramat [1,2](#).

Cette activité est menée en coopération avec les partenaires industriels Eurenco, Nexter et Thales, qui commercialisent les explosifs de la défense conventionnelle et des armements. Les explosifs sont constitués de grains d'explosif et de particules métalliques

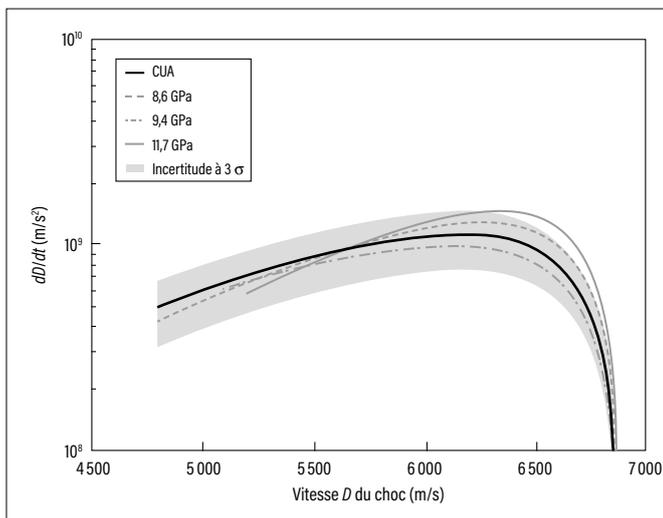
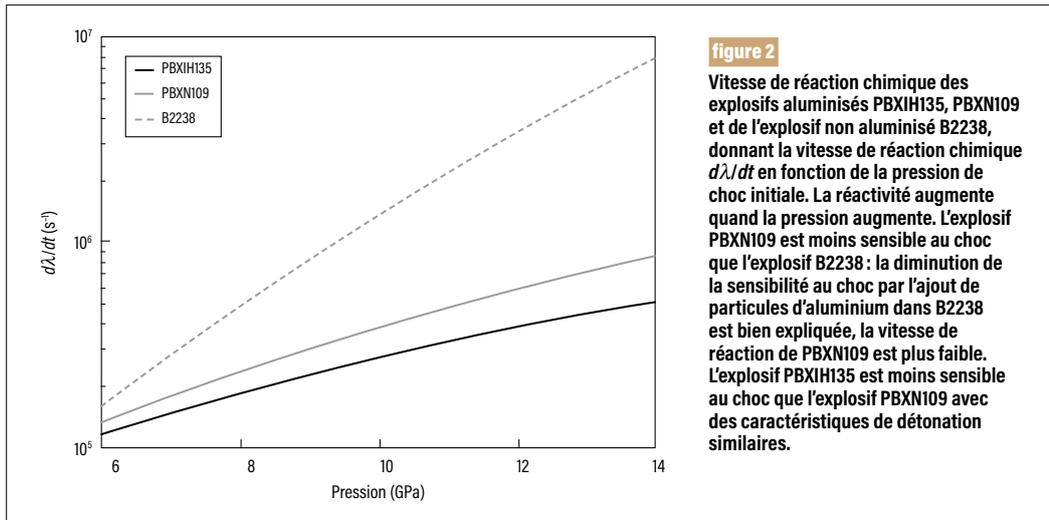


figure 1

Courbes d'amorçage donnant l'accélération du choc réactif dD/dt en fonction de sa célérité D pour l'explosif PBXIH135. La courbe unique d'amorçage (CUA) est la courbe moyenne correspondant à une minimisation de la relation théorique de la référence [3](#) sur l'ensemble des données expérimentales acquises pour les trois pressions de choc 8,6, 9,4 et 11,7 GPa imposées en entrée de l'explosif, en considérant une dépendance unique de l'accélération à la célérité du choc. Les trois autres courbes sont obtenues par minimisation de la relation sur les diagrammes temps-position mesurés pour chacune des trois pressions de choc. La bande de couleur gris clair représente l'incertitude estimée à trois fois l'écart type σ . Cette représentation de l'accélération du choc en fonction de sa célérité permet d'apprécier sans ambiguïté la validité d'une courbe unique d'amorçage pour chaque explosif, grâce à laquelle il est possible d'en déduire la vitesse de réaction chimique ([figure 2](#)).



assemblés dans un liant. Dans des travaux récents, le CEA – Gramat s'est focalisé sur deux explosifs différents pourvus d'aluminium, notés PBXIH135 et PBXN109, et sur un explosif sans aluminium, noté B2238, de composition similaire au PBXN109.

L'étude expérimentale de l'amorçage d'un explosif est réalisée en provoquant un choc à une dimension d'espace, par impact d'une plaque plane métallique. La gamme de pression appliquée pour obtenir le choc, ici entre 5 et 12 GPa, est ajustée en faisant varier la vitesse et la nature de la plaque. L'explosif s'amorce à partir des points chauds créés par l'échauffement local provoqué par interaction de l'onde de choc avec les défauts de la microstructure. Si la taille des points chauds est suffisante, les explosions thermiques locales qui en résultent génèrent des ondes de combustion qui se propagent dans les grains d'explosif et transitent vers la propagation d'une onde de détonation. L'amorçage correspond précisément à la transition du choc à la détonation, c'est-à-dire au moment où les réactions chimiques s'emballent et conduisent aux effets attendus de l'explosif.

En physique des explosifs, ou détonique, l'équation d'évolution du choc réactif relie l'accélération du choc dans le matériau à la célérité du choc et à la vitesse des réactions chimiques qui se développent juste derrière le choc ; d'autre part, la célérité du choc est reliée à la pression de choc *via* les équations du choc (relations de Rankine-Hugoniot). La vitesse de réaction chimique peut donc être déterminée à condition de connaître, pour une pression de choc

initiale donnée, l'accélération et la célérité du choc. Ces deux grandeurs peuvent être déduites de la mesure du diagramme temps-position, qui donne, à chaque instant, la position du choc au cours de sa propagation dans l'épaisseur de l'explosif. En effet, des équipes américaines ont établi une relation **3** qui permet, pour un matériau donné, de déduire de ce diagramme la relation entre l'accélération et la célérité du choc.

La mesure du diagramme temps-position est réalisée grâce à des aiguilles de chronométrie insérées dans le matériau **2**, une méthode adaptée pour en déduire l'accélération et la célérité du choc avec ladite relation. La **figure 1** montre qu'en raison de l'accroissement du nombre de réactions chimiques, l'accélération du choc croît exponentiellement avec la célérité du choc. À partir d'une certaine célérité, l'accélération s'effondre, car les réactions chimiques s'emballent pour donner lieu à une combustion explosive : c'est la transition du choc à la détonation. Aux incertitudes près, estimées à trois écarts types autour de la moyenne de l'accélération, les trois courbes accélération-célérité du choc réactif, obtenues pour trois pressions de choc initiales différentes, sont confondues et peuvent être représentées par une courbe moyenne, appelée courbe unique d'amorçage sur la **figure 1**.

En introduisant cette courbe unique d'amorçage dans l'équation d'évolution du choc, la vitesse de réaction chimique, traduisant la sensibilité de l'explosif, peut alors être déduite pour chaque matériau considéré. La **figure 2** fournit ainsi la vitesse de réaction chimique

pour les trois explosifs étudiés, obtenue grâce à cette méthode originale développée pour la première fois au CEA – Gramat **2**.

À pression de choc donnée, plus la vitesse de réaction est élevée, plus l'explosif est sensible au choc. Les résultats de la **figure 2** expliquent bien la diminution habituellement observée de la sensibilité au choc occasionnée par l'ajout de particules d'aluminium : c'est la différence entre l'explosif B2238 (sans aluminium) et l'explosif PBXN109 (avec aluminium). L'explosif PBXIH135 est moins sensible au choc que l'explosif PBXN109 et possède des caractéristiques de détonation similaires ; son usage sera donc à privilégier, car il est plus sûr.

La méthode originale de détermination d'une courbe d'amorçage développée au CEA – Gramat a ainsi permis de doter le CEA – DAM d'un outil fiable et précis pour comparer la sensibilité de différents explosifs et remplir sa mission d'assistance à maîtrise d'ouvrage au profit de la DGA.

RÉFÉRENCES

- 1** T. Elia *et al.*, « Shock to detonation transition of plastic bonded aluminized explosives », *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, **45**, p. 554-567 (2020).
- 2** T. Elia *et al.*, « Review of the wedge test and single curve initiation principle applied to aluminized high explosives », *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, **45**, p. 1541-1553 (2020).
- 3** L. G. Hill *et al.*, « On the characterization and mechanisms of shock initiation in heterogeneous explosives », *Proc. of the 12th International Detonation Symposium*, 11-15 août 2002, San Diego, Californie, États-Unis, p. 975 (2002).

Vers une modélisation complète du comportement dynamique des élastomères

L'intégration de composants sensibles dans les objets du CEA - DAM nécessite l'utilisation de filtres mécaniques. Leur rôle est de protéger les organes contre des sollicitations dynamiques sévères. Par analogie avec le monde automobile, la définition d'un tel filtre repose sur l'utilisation d'élastomère. La maîtrise de la conception de ces filtres impose une bonne connaissance de ces matériaux. Ils présentent un comportement viscoélastique, c'est-à-dire que les propriétés mécaniques dépendent de la fréquence de sollicitation. Dans certaines applications, ce comportement peut être également impacté par les effets du vieillissement **1** (vieillesse naturelle, sous radiation, etc.) ou encore par l'influence de l'intensité des sollicitations dynamiques, c'est l'effet Payne **2**. Les travaux présentés ici s'attachent au développement d'une méthode de caractérisation rigoureuse de ces effets ainsi qu'à la construction d'une loi de comportement robuste.

Au CEA - DAM, les élastomères sont utilisés, entre autres, dans la conception de filtres mécaniques permettant d'isoler des organes sensibles aux chocs dynamiques. La maîtrise du comportement de tels matériaux est indispensable pour optimiser la conception de ces filtres. En quasi-statique, le module de Young, constante qui relie la déformation (déplacement relatif par rapport à la longueur initiale) et la contrainte, caractérise l'élasticité d'un matériau. En dynamique vibratoire, le comportement mécanique d'un élastomère est caractérisé par son module dynamique, noté E^* , et se détermine au moyen d'un essai d'analyse mécanique dynamique (*Dynamical Mechanical Analysis*, DMA) **3** : il s'agit d'imposer une déformation sinusoïdale ϵ sur un échantillon de matériau et de relever la contrainte résultante

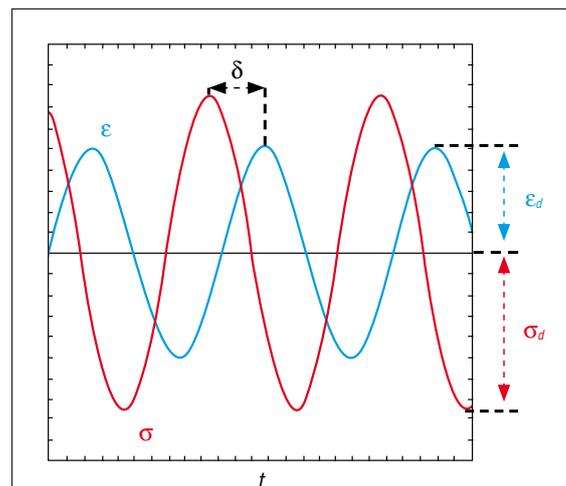


figure 1
Principe d'un essai d'analyse mécanique dynamique. La déformation ϵ (courbe en bleu) est imposée à l'échantillon, la contrainte σ (en rouge) et le déphasage δ sont enregistrés, afin de déduire le module dynamique E^* qui les relie.

σ , comme illustré sur la **figure 1**. Le module dynamique est déduit des amplitudes ϵ_d et σ_d , ainsi que du déphasage δ entre les signaux. En répétant l'opération pour plusieurs fréquences, il est possible d'obtenir la courbe maîtresse du module dynamique en fonction de la fréquence. Ce dernier est qualifié de linéaire s'il respecte le principe de superposition, c'est-à-dire que, pour une déformation x fois plus importante, la contrainte est x fois plus élevée.

La viscoélasticité d'un élastomère procède du mouvement moléculaire des chaînes de polymères. Ces chaînes peuvent bouger les unes par rapport aux autres. L'ensemble des mouvements possibles est décrit par ce qui est appelé le spectre du

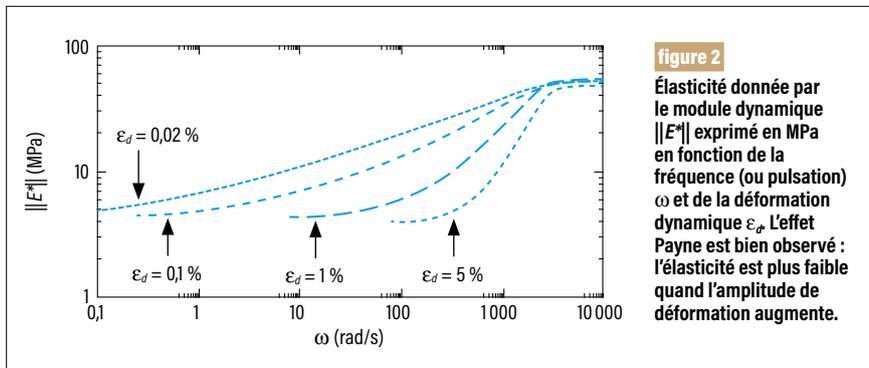


figure 2
Élasticité donnée par le module dynamique $\|E^*\|$ exprimé en MPa en fonction de la fréquence (ou pulsation) ω et de la déformation dynamique ε_d . L'effet Payne est bien observé : l'élasticité est plus faible quand l'amplitude de déformation augmente.

matériau noté H ; ce spectre est intrinsèque au matériau [4]. Il se modélise par une fonction mathématique, de forme gaussienne, présentant trois paramètres propres au matériau. Le module dynamique E^* décrit ci-avant se déduit du spectre, qui permet de faire le lien entre la chimie et la mécanique. La plupart des travaux de la littérature qui cherchent à modéliser le comportement d'un élastomère se limitent à la caractérisation du module dynamique. L'étude proposée par le CEA – Cesta embrasse le problème de manière plus fondamentale et plus complète en s'intéressant au spectre du matériau.

Suivant les applications industrielles, plusieurs effets peuvent influencer le comportement dynamique d'un élastomère. Ainsi, le vieillissement, noté v , a tendance à rigidifier le matériau, comme discuté dans [1]. À l'inverse, dans certaines conditions, l'élasticité du matériau présente en plus une dépendance à l'amplitude de déformation dynamique. Ce phénomène, appelé effet Payne [2], traduit le fait que l'élasticité est plus faible sur toute la gamme de fréquences lorsque l'amplitude de déformation ε_d augmente, comme illustré par la courbe sur la figure 2. L'objectif des travaux présentés ici est de développer un modèle qui tienne compte de ces différents effets.

Une autre nouveauté introduite par le CEA – Cesta consiste à passer d'une modélisation du comportement par un spectre linéaire H à un spectre non linéaire incluant la dépendance à l'effet Payne ε_d et au vieillissement v de manière

à avoir $H = H(v, \varepsilon_d)$. Différentes méthodes d'identification du spectre à partir de mesures expérimentales du module sont recensées dans [4]. Celle retenue ici consiste à convertir les données dans le domaine temporel (évolution du module en fonction du temps et non plus en fonction de la fréquence) et de modéliser cette évolution par une combinaison de plusieurs fonctions de puissance. Il résulte de la phase d'identification un modèle de comportement défini par un spectre non linéaire présentant cinq paramètres seulement [1,2], contre trois pour le spectre linéaire.

La loi de comportement ainsi développée est implémentée numériquement afin de simuler le comportement de l'élastomère. La figure 3 présente la comparaison entre les résultats expérimentaux d'essais DMA pour deux fréquences et pour différentes amplitudes dynamiques, et les prédictions du modèle. L'écart observé est inférieur à 3%. Les modèles linéaires de la littérature ne permettent pas de prendre en compte cette évolution, car l'élasticité reste constante en fonction de

la déformation dynamique. Le modèle développé permet une bonne prédiction du comportement de l'élastomère.

En conclusion, ces travaux proposent une méthode pour la caractérisation complète du comportement dynamique d'un élastomère, dépendant de la fréquence, mais aussi du vieillissement et de la déformation dynamique. À partir des courbes d'élasticité obtenues expérimentalement, le comportement mécanique a été modélisé par le spectre du matériau et ses cinq paramètres. La comparaison entre mesures et prédictions donne des écarts tout à fait satisfaisants. Cette loi de comportement peut ainsi permettre, à l'échelle industrielle, de concevoir avec précision des filtres mécaniques répondant aux besoins des programmes de la DAM.

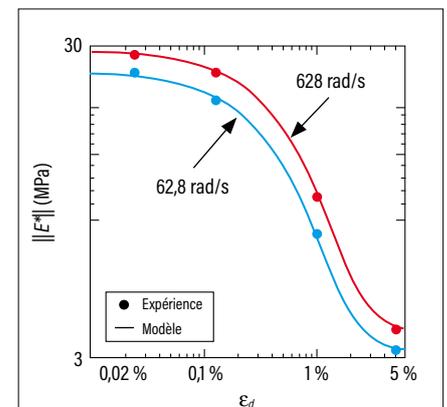


figure 3
Comparaison entre essais d'analyse mécanique dynamique, pour deux fréquences et différents niveaux de déformation dynamique et les prédictions du modèle de comportement.

RÉFÉRENCES

- 1 D. Jaloča, « A nonlinear viscoelastic constitutive model taking into account of physical aging », *Mechanics of Time-Dependent Materials*, **182**, p. 399-405 (2020).
- 2 D. Jaloča, « Payne effect: a constitutive model based on a dynamic strain amplitude dependent spectrum of relaxation time », *Mechanics of Materials*, **148**, 103526 (2020).
- 3 W. Knauss et al., *Handbook of experimental solid mechanics*, Springer (2006).
- 4 M. Baumgaertel, H. Winter, « Determination of discrete relaxation and retardation time spectra from dynamic mechanical data », *Rheologica Acta*, **28**, p. 511-519 (1989).

Vers une simulation multiéchelle des explosifs solides

Les explosifs solides permettent la libération en un temps court d'une quantité importante d'énergie sous forme de gaz à haute pression et haute température. La connaissance des conditions dans lesquelles une détonation est susceptible de se former dans ces matériaux est nécessaire afin d'en garantir l'emploi, aussi bien du point de vue de la sécurité que des performances. La simulation numérique constitue à ce titre un outil privilégié pour prédire le comportement des explosifs. Le modèle réactif **1** présenté ici vise à reproduire dans un formalisme simplifié la phénoménologie complexe et multiéchelle propre à ces matériaux.

Une détonation est une onde de choc supersonique soutenue par des réactions chimiques exothermiques. Du fait de la rapidité avec laquelle le matériau énergétique se transforme en produits de détonation, les explosifs ont des applications dans de nombreux domaines et figurent au cœur des missions du CEA – DAM. L'usage de ces matériaux nécessite d'en connaître le comportement afin de se prémunir

contre les accidents et d'en assurer les performances. Si les campagnes expérimentales demeurent indispensables à la caractérisation des explosifs, leur fabrication et leur manipulation présentent à la fois des contraintes opérationnelles fortes et un coût élevé. L'usage des simulations numériques pour prédire le comportement des explosifs permet, dans une certaine mesure, de lever ces difficultés. La pertinence de ces prédictions dépend en grande partie des modèles théoriques utilisés dans les simulations. Ces modèles ont pour objectif de représenter, par l'intermédiaire d'équations, le comportement du matériau énergétique et sa transformation depuis la phase solide (l'explosif non réagi) vers la phase gazeuse (les produits de détonation).

Les travaux du CEA – DAM présentés ici concernent une famille particulière d'explosifs : les *polymer-bonded explosives*, ou PBX. Dans ces derniers, une petite quantité de liant plastique est ajoutée afin de donner à l'explosif ses propriétés mécaniques et de permettre son usinage. Ce procédé de fabrication a une conséquence importante sur la microstructure de l'explosif et lui confère son caractère hétérogène (**figure 1**). Loin d'être anecdotique, cette particularité joue même un rôle majeur dans

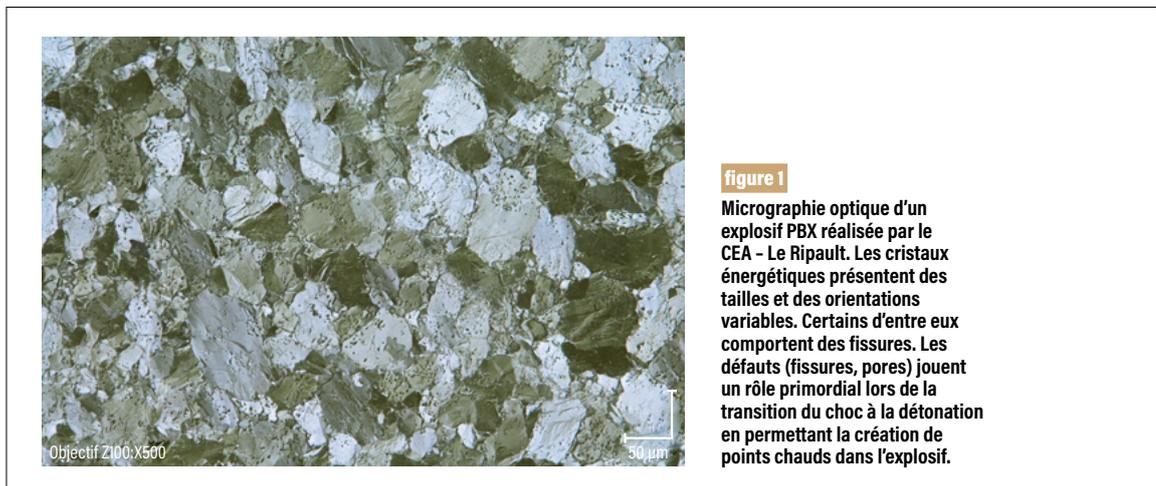


figure 1

Micrographie optique d'un explosif PBX réalisée par le CEA – Le Ripault. Les cristaux énergétiques présentent des tailles et des orientations variables. Certains d'entre eux comportent des fissures. Les défauts (fissures, pores) jouent un rôle primordial lors de la transition du choc à la détonation en permettant la création de points chauds dans l'explosif.

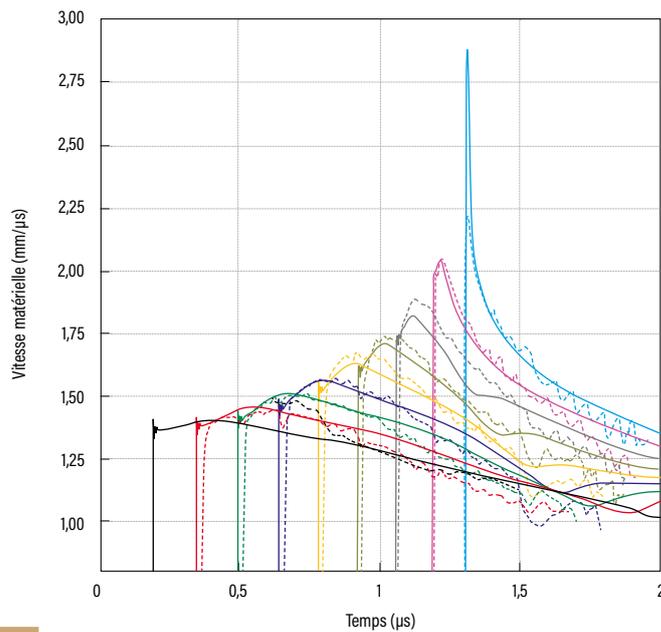


figure 2

Évolution de la vitesse matérielle mesurée dans un explosif durant la transition du choc à la détonation **4** (traits pointillés) et comparaison avec la simulation numérique (traits pleins). L'expérience, réalisée par le Los Alamos National Laboratory aux États-Unis, est simulée en s'appuyant sur les données publiées dans **4**. Les différentes couleurs correspondent à des profondeurs variables dans l'échantillon. La libération d'énergie chimique conduit au renforcement progressif du choc, jusqu'au développement d'une onde de détonation (en cyan). L'accord du modèle avec l'expérience est très satisfaisant.

la transition du choc à la détonation, phase durant laquelle une onde de choc peut, si les conditions le permettent, amorcer la détonation. L'interaction du choc avec les défauts présents dans la microstructure (pores, fissures) génère une élévation locale de la température : les points chauds. Les réactions chimiques exothermiques autour des points chauds sont alors amorcées et peuvent renforcer le choc jusqu'à la transition vers une onde de détonation autonome **2**.

La représentation de cette phénoménologie extrêmement complexe au moyen de la simulation numérique n'est pas sans présenter des difficultés, au premier rang desquelles figure la problématique d'échelle. En effet, la modélisation adéquate de la microstructure requerrait pour les applications du CEA – DAM une discrétisation spatiale prohibitive vis-à-vis de la puissance actuelle des supercalculateurs. Ces simulations se doivent donc d'adopter un certain nombre d'hypothèses simplificatrices. Ainsi, l'explosif est modélisé comme un milieu uniforme, lui ôtant de fait ses caractéristiques hétérogènes, pourtant

primordiales dans le processus de la transition du choc à la détonation. Une question se pose alors : comment représenter la genèse des points chauds dans le matériau simulé ?

Le mécanisme des points chauds peut s'apparenter à l'apparition de germes dans le matériau à partir desquels vont se propager les transformations. C'est ce que l'on appelle le processus de nucléation et croissance. Le modèle GEM (*Grain Explicit Model*) **3**, développé au CEA – DAM Île-de-France, a été spécifiquement conçu pour les matériaux concernés par cette phénoménologie. Les variables d'entrée du modèle GEM

sont adaptées à l'explosif considéré en tenant compte de sa microstructure réelle et en imposant une dépendance à la température. Ce modèle de nucléation et croissance constitue la première brique du modèle réactif utilisé dans les simulations numériques **1**. Les deux briques restantes s'attachent à représenter les phases suivantes de la transformation de l'explosif : une phase de réaction intense, durant laquelle la quasi-totalité du matériau est consommée, puis une phase correspondant à la complétion lente des réactions chimiques. La vitesse à laquelle se déroulent ces deux phases dépend de la température dans le matériau, qui pilote les réactions. Les paramètres du modèle réactif sont ajustés par confrontation avec des expériences pertinentes pour les applications du CEA – DAM, comme des impacts de projectiles lancés à grande vitesse sur un explosif **4**. Le modèle simule correctement l'évolution de la vitesse à différentes profondeurs dans la cible, démontrant sa faculté à restituer la physique propre à la transition du choc à la détonation (**figure 2**).

Cette modélisation novatrice, qui se démarque des modèles empiriques généralement utilisés, constitue un premier pas vers la prise en compte des propriétés de la microstructure dans la simulation des explosifs condensés. Les progrès envisagés visent à accroître la complexité des expériences reproductibles par la simulation, en s'appuyant sur une connaissance de plus en plus fine de la phénoménologie à l'œuvre aux petites échelles.

RÉFÉRENCES

- 1** M. Reynaud, R. Sorin, V. Dubois, N. Desbiens, « WGT: a mesoscale-informed reactive burn model », *J. Appl. Phys.*, **127**, 065901 (2020).
- 2** C. Handley *et al.*, « Understanding the shock and detonation response of high explosives at the continuum and meso scale », *Appl. Phys. Rev.*, **5**, 011303 (2018).
- 3** B. Rouet-Leduc, J.-B. Maillet, C. Denoual, « The kinetics of heterogeneous nucleation and growth: an approach based on a grain explicit model », *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, **22**, 035018 (2014).
- 4** F. Svingala *et al.*, *FY18 J23X PSDT final report: shock initiation of PBX 9502 Lot HOL88H891-008*, LA-UR-18-30863 technical report, Los Alamos National Lab., États-Unis (2018).

E. Hugonnot, É. Poeydebat, F. Scol [CEA – Cesta, Laboratoire de recherche conventionné SyLFE (Systèmes lasers fibrés énergétiques)]

G. Bouwmans [Laboratoire de physique des lasers, atomes et molécules (PhLAM), UMR 8523 CNRS – Université de Lille, Laboratoire de recherche conventionné SyLFE (Systèmes lasers fibrés énergétiques)]

Création d'impulsions laser ultrabrèves par une source à fibre optique

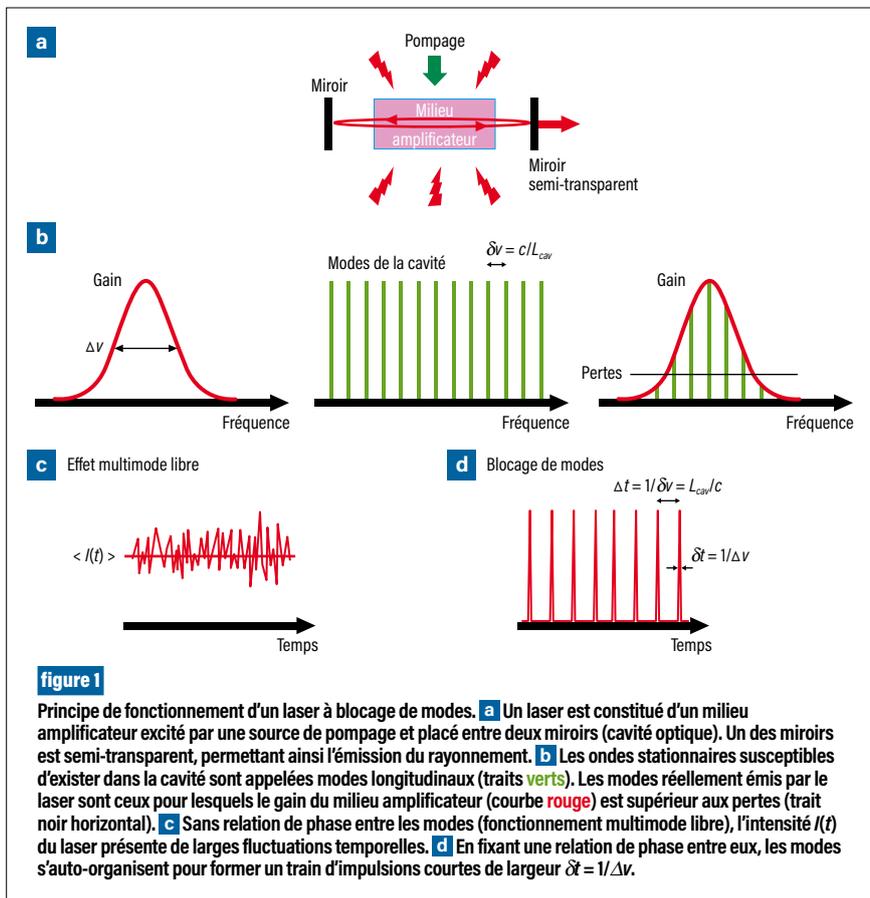
Le premier élément d'un laser de puissance à ultra-haute intensité tel que Petal, conçu et réalisé par le CEA – DAM pour le compte de la Région Nouvelle-Aquitaine, est une source de lumière capable de délivrer des impulsions d'une durée 10 000 fois plus brève que celles du Laser Mégajoule (LMJ). Développer une nouvelle génération de source à impulsion courte, à la fois compacte, robuste et simple d'utilisation, est un enjeu important pour l'exploitation et les performances futures de Petal. Jusqu'ici, les sources utilisées étaient à l'air libre, donc complexes, encombrantes et sensibles à l'environnement. En collaboration avec le laboratoire PhLAM dans le cadre du laboratoire de recherche conventionné SyLFE, le CEA – Cesta a apporté la démonstration expérimentale **1** qu'il était possible de réaliser une telle source avec une architecture entièrement fibrée, donc compacte et peu sensible aux perturbations extérieures, sans réduire le niveau d'énergie des impulsions.

La manière la plus simple de réaliser un laser est de placer un milieu amplificateur optique entre deux miroirs formant une cavité (**figure 1a**). Lorsque le gain apporté par le milieu amplificateur est supérieur aux pertes de la cavité, il y a émission d'un faisceau laser. Bien qu'étant la source de lumière la plus pure qui soit, un laser émet rarement une longueur d'onde unique. En effet, toutes les longueurs d'onde qui après un aller-retour interfèrent constructivement peuvent être émises. Elles forment un jeu discret de fréquences, que l'on appelle *modes longitudinaux* (**figure 1b**). En général, ces modes oscillent indépendamment les uns des autres. L'intensité émise est alors à peu près constante en temps, mais présente de grandes fluctuations (**figure 1c**). Du simple pointeur laser aux systèmes utilisés pour la découpe de

métaux, de tels lasers multimodes longitudinaux sont largement utilisés dans l'industrie et la vie courante. En revanche, les applications plus exigeantes comme la détection des ondes gravitationnelles ou le refroidissement d'atomes par laser requièrent un signal de sortie réellement constant temporellement. La solution est de contraindre la cavité à émettre son rayonnement selon un seul mode en filtrant soigneusement les autres modes. Une alternative à un tel fonctionnement monomode est le *blocage de modes*. Sous certaines conditions, les modes longitudinaux (jusqu'à plusieurs milliers) s'organisent de manière à osciller entre eux de manière synchrone, formant ainsi un train d'impulsions de largeur δt d'autant plus courte que la largeur spectrale $\Delta\nu$ du gain est grande (**figure 1d**).

En pratique, le blocage de modes s'obtient en ajoutant dans la cavité un élément appelé *absorbant saturable*, qui favorise le régime impulsionnel par rapport au régime d'émission continu. Le processus démarre à partir des fluctuations d'intensité aléatoires. Lorsqu'un pic excède le seuil de saturation de l'absorbant, il est transmis préférentiellement. Se répétant à chaque aller-retour, le processus mène ainsi à une amplification sélective par rapport à la lumière de basse intensité. Après plusieurs oscillations, un train d'impulsions apparaît et le blocage de modes du laser est obtenu. Pendant longtemps, le marché des lasers ultracourts a été dominé par des sources entièrement réalisées à l'air libre, donc encombrantes, complexes et onéreuses. Elles sont maintenant sérieusement concurrencées par des lasers à fibres, plus pratiques d'utilisation car compacts, fiables et robustes, tout en présentant des coûts réduits. Néanmoins, ces lasers fibrés présentaient encore récemment un inconvénient : les niveaux d'énergie par impulsion étaient bien inférieurs à ceux des lasers à l'air libre. En collaboration avec le PhLAM dans le cadre du laboratoire de recherche conventionné SyLFE, le CEA – Cesta a récemment pu résoudre ce problème en utilisant une technique de blocage de modes mise en œuvre dans une nouvelle génération de lasers fibrés appelés *oscillateurs Mamyshev* **1**.

Ces oscillateurs sont basés sur un principe physique que l'on appelle *automodulation de phase* et qui provoque l'élargissement du spectre optique d'une



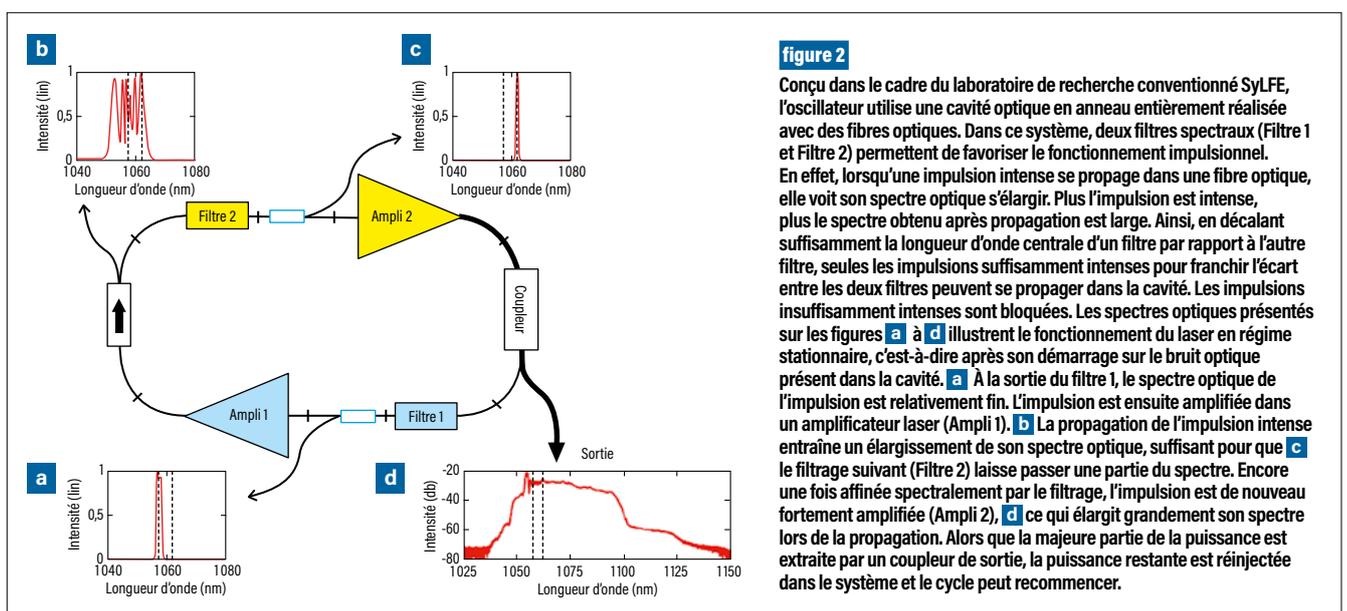
impulsion intense se propageant dans une fibre optique. Plus l'impulsion est intense, plus le spectre obtenu après propagation est large. Placé en sortie de fibre optique, un filtre spectral de longueur d'onde centrale décalée par rapport à la longueur d'onde de l'impulsion initiale ne laissera ainsi passer une partie de l'impulsion qu'à la condition que celle-ci soit suffisamment intense. Les impulsions insuffisamment intenses pour produire l'élargissement spectral nécessaire sont bloquées. Ainsi, lorsque deux

filtres spectraux décalés spectralement entre eux sont placés dans une cavité (figure 2), le fonctionnement continu du laser (peu intense) est impossible. Seules des impulsions suffisamment intenses pour franchir l'écart entre les deux filtres peuvent se propager dans la cavité. Le mécanisme agit ainsi comme un absorbant saturable ultrarapide, donnant naissance à des impulsions ultrabrèves, de l'ordre de 50 femtosecondes. Ces impulsions peuvent être ensuite injectées dans un système d'amplification laser dit à

dérive de fréquence [2]. Le système que le CEA – Cesta a réalisé avec l'aide de simulations numériques effectuées par le laboratoire SyLFE, n'utilisant pourtant que des fibres optiques, permet de délivrer des impulsions présentant une énergie très élevée, au-delà même de ce que l'on obtient généralement en sortie d'oscillateur à l'air libre. Toutefois, à un certain seuil en énergie, l'intensité dans la cavité devient tellement importante que les impulsions se scindent en deux. De manière surprenante, les nouvelles impulsions générées subissent des forces répulsives qui les stabilisent parfaitement et rigoureusement entre les impulsions initiales. La cadence du laser se trouve alors multipliée par un facteur entier. Il s'agit du phénomène appelé *blocage de modes harmonique*. Ce phénomène, observé pour la première fois dans un oscillateur Mamyshev, a pu être répété jusqu'à la quatorzième harmonique de la cadence fondamentale. La puissance moyenne obtenue alors, plus de 1,3 W, correspond à un record pour un système laser fibré délivrant des impulsions courtes.

RÉFÉRENCES

1. É. Poeydebat, F. Scol, O. Vanvincq, G. Bouwmans, E. Hugonnot, « All-fiber Mamyshev oscillator with high average power and harmonic mode-locking », *Opt. Lett.*, 45, p. 1395-1398 (2020).
2. E. Hugonnot, « Amplification d'impulsions laser à dérive de fréquence », *Techniques de l'Ingénieur*, E6515, p. 1-28 (2019).



F. Bachelet, S. Clouard, A. Fabre [CEA - Valduc]
A. Lis [CEA - Marcoule]
C. Mathonat [KEP Technologies, Caluire]

Calorimétrie : une méthode non destructive pour la mesure du tritium et son inventaire

La détermination des inventaires de matières nucléaires est une obligation permanente et réglementaire pour l'exploitation d'une installation nucléaire. Pour le cas des installations tritium du CEA - Valduc, la calorimétrie est une technique de mesure thermodynamique parmi les plus utilisées depuis de nombreuses années. Simple d'utilisation, cette technique de contrôle non destructif présente de nombreux avantages. Les limites sont imposées par le volume et la masse des objets à mesurer en adéquation avec la sensibilité et les dimensions de la cellule de mesure du calorimètre. C'est dans ce but qu'un nouveau calorimètre **1**, dédié aux objets de gros volume - jusqu'à 385 litres et 400 kg - et plus spécifiquement à la mesure de déchets nucléaires contaminés au tritium, a été développé et breveté par le CEA et la société KEP Technologies.

Le tritium est l'isotope radioactif de l'hydrogène. Il est exploité dans les installations nucléaires du CEA - DAM sous sa forme gazeuse et on peut le retrouver sous toutes les formes physico-chimiques comportant des liaisons hydrogénées, les plus courantes étant ses formes oxydée (vapeur d'eau) ou organique (liée au carbone). Le tritium se désintègre en hélium 3, stable, avec l'émission d'un électron de faible énergie. Hormis la scintillation liquide dédiée aux faibles concentrations **2**, les moyens conventionnels de mesure nucléaire ne sont pas pleinement adaptés à la mesure du tritium et seules les techniques d'analyse chimique répondent à ce besoin **3**. Indépendamment de sa forme physico-chimique, la décroissance radioactive du tritium s'accompagne d'un dégagement de chaleur qui est mesurable par une technique calorimétrique. La grandeur physique qui relie ce dégagement de chaleur à une quantité de matière est appelée la

puissance spécifique et est égale à 324 mW/g pour le tritium. En l'absence de toute autre source de chaleur, la puissance thermique dégagée par un objet est ainsi directement proportionnelle à la quantité de matière qu'il contient. De manière générale, l'intérêt de la calorimétrie est multiple : non intrusive, non destructive, elle ne dépend pas de la géométrie de l'objet ni de la forme chimique du radioélément et ne nécessite aucun prélèvement de matière ni aucune préparation d'échantillon, ce qui la rend particulièrement attractive pour la quantification des inventaires de matières nucléaires. La période radioactive du tritium (12,3 ans) étant grande devant les temps de mesure (quelques jours), la calorimétrie est une technique parfaitement adaptée à la quantification du tritium.

Sur la base du calorimètre dit Calvet, les calorimètres développés pour les besoins du tritium exploitent le principe de la mesure différentielle de flux de chaleur selon un design de cellules jumelles parfaitement identiques (**figure 1**). Ce concept permet ainsi une meilleure stabilisation des signaux calorimétriques et améliore les performances de la mesure. La taille de ces calorimètres constitue cependant l'un des inconvénients de cette technologie, liée en grande partie à la présence d'une cellule de référence jumelle à la cellule de mesure. C'est dans le but de réduire ces contraintes dimensionnelles et dans le cadre d'un programme de gestion de déchets tritiés que le calorimètre gros volume LVC1380 (*Large Volume Calorimeter* 1380) a été développé.

Les enjeux de ce développement sont multiples : conserver le principe de la calorimétrie différentielle, adapter la taille de la cellule de mesure et optimiser l'encombrement du calorimètre aux objets volumineux à mesurer (fûts de 100 ou 200 litres, conteneurs spécifiques), mais également faciliter les conditions d'exploitation et les opérations de chargement des colis. L'ensemble de ces critères a été respecté par un travail de conception breveté en France et à l'international **4** et porté par le CEA - Valduc et la société KEP Technologies. Dans cette configuration innovante (**figure 2**), la cellule de référence est

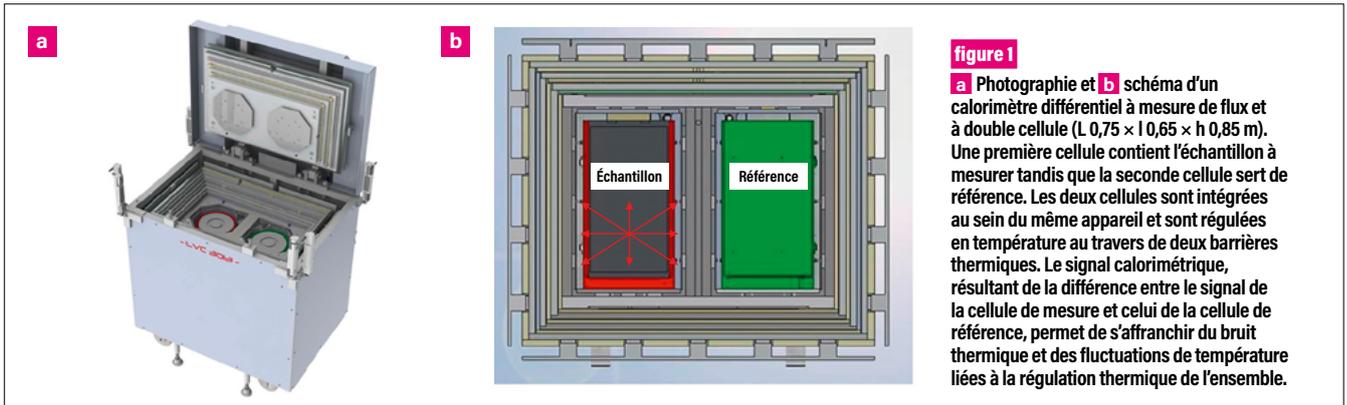


figure 1

a Photographie et **b** schéma d'un calorimètre différentiel à mesure de flux et à double cellule (L 0,75 × l 0,65 × h 0,85 m). Une première cellule contient l'échantillon à mesurer tandis que la seconde cellule sert de référence. Les deux cellules sont intégrées au sein du même appareil et sont régulées en température au travers de deux barrières thermiques. Le signal calorimétrique, résultant de la différence entre le signal de la cellule de mesure et celui de la cellule de référence, permet de s'affranchir du bruit thermique et des fluctuations de température liées à la régulation thermique de l'ensemble.

imbriquée dans la cellule de mesure, permettant de supprimer physiquement la cellule de référence et ainsi de réduire significativement les dimensions du calorimètre. On parle de cellule de référence fantôme. Pratiquement, les plaques de mesure qui entourent la cellule et collectent la puissance émise par l'échantillon sont combinées avec des plaques de référence qui simulent le comportement thermique des plaques de mesure, tout en étant isolées thermiquement de celles-ci. La stabilité thermique est assurée par une double isolation thermique et une régulation très fine du bloc thermique au millième de degré (typiquement $30,000 \pm 0,001$ °C). La forme hexagonale de la cellule de mesure du calorimètre s'adapte aux formes cylindriques des

conteneurs, et le système d'ouverture en deux demi-coquilles facilite son ouverture et son chargement. Contrairement aux calorimètres à cellules jumelles qui sont exploités pour le tritium en boîtes à gants et dans des locaux climatisés, le calorimètre LVC1380 est dimensionné pour pouvoir être utilisé sur des chantiers de démantèlement d'installations nucléaires tritium sans enceinte de confinement et sans système de refroidissement à eau. Après étalonnage, la sensibilité de l'instrument a été calculée à $\pm 0,25$ % dans la gamme de puissance de 0 à 3,5 W (soit de 0 à 10 g de tritium), avec une précision de mesure de ± 2 % pour une quantité de tritium mesurée en milieu de gamme.

La réalisation de ce calorimètre s'inscrit dans une démarche innovante

de développement d'un équipement de quantification de matière nucléaire, le tritium, et dans le cadre d'une application spécifique, la mesure de déchets tritiés. Les premières mesures en configuration réelle ont été réalisées avec succès dans les ateliers de tritium de Marcoule, dépendant du CEA – DAM et dont les installations sont en cours de démantèlement. La calorimétrie se positionne ainsi en complément des techniques conventionnelles de contrôle non destructif en mesure nucléaire, que ce soit pour l'exploitation d'une installation nucléaire ou pour son démantèlement. L'application au tritium décrite dans cet article n'est pas limitative, la calorimétrie étant par ailleurs utilisée pour la quantification d'autres radioéléments tels que le strontium ou le plutonium.

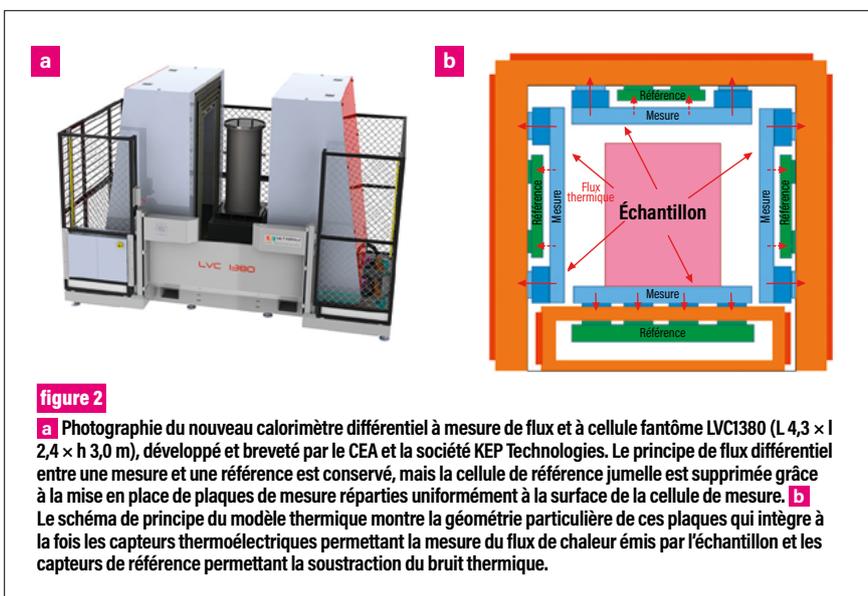


figure 2

a Photographie du nouveau calorimètre différentiel à mesure de flux et à cellule fantôme LVC1380 (L 4,3 × l 2,4 × h 3,0 m), développé et breveté par le CEA et la société KEP Technologies. Le principe de flux différentiel entre une mesure et une référence est conservé, mais la cellule de référence jumelle est supprimée grâce à la mise en place de plaques de mesure réparties uniformément à la surface de la cellule de mesure. **b** Le schéma de principe du modèle thermique montre la géométrie particulière de ces plaques qui intègre à la fois les capteurs thermoélectriques permettant la mesure du flux de chaleur émis par l'échantillon et les capteurs de référence permettant la soustraction du bruit thermique.

RÉFÉRENCES

- 1** F. Bachelet, S. Clouard, A. Lis, R. André, C. Mathonat, « Calorimetry: An NDA method for tritium measurement and accountability », *Fusion Science and Technology*, **76**, p. 699-702 (2020). <https://doi.org/10.1080/15361055.2020.1766273>
- 2** N. Baglan, P. Cassette, E. Ansoborlo, V. Belin, *Mesure du rayonnement bêta – DROP Bêta*, EDP Sciences (2020).
- 3** H. Pialot, H. Guidon, P. Marty, D. Demange, « Analyse du tritium et de ses composés », revue *chocs*, **25**, p. 47-58 (2001).
- 4** G. Jossens, C. Mathonat, J.-C. Hubinois, A. Godot, F. Bachelet, « Calorimètre différentiel à mesure de flux », Brevet XD138971M, FR 13 50360 (2013), EP 14 700408.9 (2015), JP 6377636 (2018), US 10 078 061 B2 (2018).

Nouvelle méthode d'étalonnage d'un système de mesure de vitesse de choc et de détonation

Le CEA – Gramat a développé il y a quelques années un système novateur de mesure en continu de vitesses de choc et de détonation, basé sur une fibre optique à réseau de Bragg dite à pas variable. Cette fine sonde peut être insérée au cœur des matériaux explosifs à étudier, avec un impact minimal sur l'expérimentation. Grâce à une nouvelle méthode d'étalonnage, la qualité de ces mesures et leur précision sont augmentées d'un facteur dix **1**. Cette avancée permet de mieux décrire les phénomènes physiques en jeu, d'améliorer les codes de simulation numérique du CEA – DAM et d'augmenter leur prédictibilité.

Pour ses activités de défense conventionnelle, le CEA – Gramat mène des travaux ayant pour objectif de maîtriser toujours davantage la physique des explosifs. Par exemple, dans un édifice pyrotechnique, le front de détonation traversant le matériau énergétique dure de quelques microsecondes à une dizaine de microsecondes ; les phénomènes transitoires, comme lorsqu'un matériau choqué commence à entrer en détonation, sont plus rapides et peuvent difficilement être mesurés. Dans ce contexte, il est devenu nécessaire d'accéder, dans le matériau énergétique, à la vitesse de choc ou de détonation avec une précision augmentée d'un facteur dix. De plus, la méthode classique, utilisant des aiguilles de chronométrie, conduit à n'accéder qu'à quelques points de mesure, et surtout à la surface du matériau énergétique, et ne permet pas une mesure en continu, c'est-à-dire à tout instant dans l'épaisseur du matériau où le front de détonation se propage.

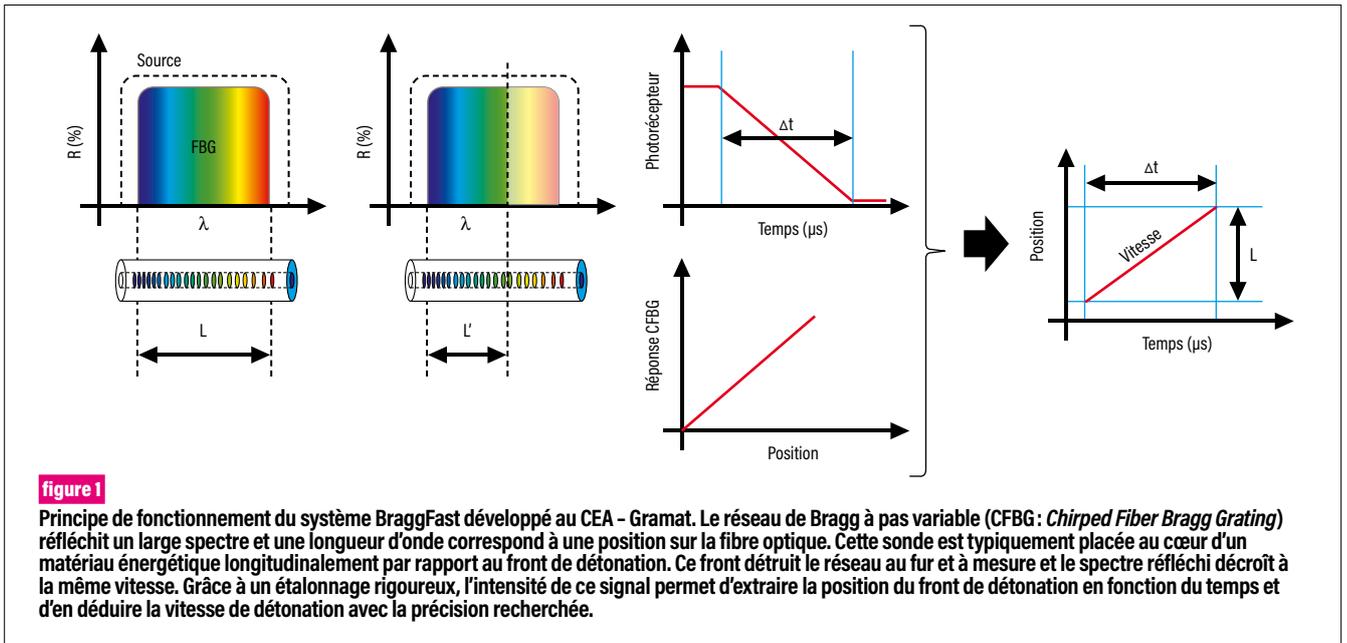
La vitesse de choc ou de détonation se déduit du diagramme donnant la position de l'onde en fonction du temps. Le but du CEA – Gramat était de disposer d'un système de mesure en continu de ce diagramme qui conduise, grâce à un étalonnage rigoureux, à une vitesse dix fois plus précise, soit une incertitude

de 0,1 %, que celle obtenue par la méthode classique, laquelle ne peut fournir que quelques points.

Une fibre optique à réseau de Bragg (FBG pour *Fiber Bragg Grating*) est un miroir sélectif en longueur d'onde sur une fibre optique. L'intérêt des capteurs FBG n'est plus à démontrer dans le suivi de grandes infrastructures, comme les ponts ou les gratte-ciel. L'utilisation de ce type de sonde en dynamique pour mesurer des phénomènes physiques très brefs est beaucoup moins éprouvée. Faiblement intrusives, ces fibres, de diamètre de l'ordre de 125 μm , peuvent être placées à la périphérie ou insérées au cœur d'un matériau énergétique ou inerte. Les fibres optiques ont également l'avantage d'être immunes aux radiations électromagnétiques, notamment celles émises par les détonateurs. En collaboration avec le CEA – Paris-Saclay, le CEA – Gramat a ainsi développé un système appelé BraggFast, qui conduit à des mesures très rapides et continues spatialement et temporellement.

Les réseaux de Bragg utilisés sont à pas variable (*Chirped-FBG*, CFBG). Ce type de réseau réfléchit une fenêtre de longueurs d'onde, et non une seule. Une longueur d'onde correspond à une position dans ce réseau qui peut faire plusieurs dizaines de millimètres. Concrètement, la fibre optique CFBG est typiquement positionnée longitudinalement par rapport au sens de propagation de l'onde de détonation au sein du matériau à étudier. Quelle que soit la géométrie étudiée, la fibre est détruite sous la pression intense du front de détonation, qui réduit progressivement la longueur du réseau et diminue graduellement la largeur du spectre réfléchi (**figure 1**). Connaissant les positions le long du réseau et les longueurs d'onde associées, l'évolution de l'intensité du signal mesurée est alors directement liée à la position du front de l'onde de détonation en fonction du temps. Le diagramme temps-position est ainsi mesuré et la vitesse déduite. Cependant, un calibrage rigoureux est indispensable pour atteindre l'incertitude recherchée.

Dans les premiers essais, l'étalonnage de la fibre optique CFBG était effectué en mesurant l'amplitude



réfléchi d'une fibre CFBG issue du même lot de fabrication. Cette dernière était sacrifiée, car elle était sectionnée petit à petit. De plus, dans un même lot, deux fibres optiques CFBG peuvent avoir des caractéristiques légèrement différentes. L'étalonnage n'était donc pas satisfaisant et la précision recherchée pour les vitesses de choc ou de détonation n'était pas atteinte. Le CEA - Gramat est toutefois parvenu à développer, mettre en œuvre, tester et

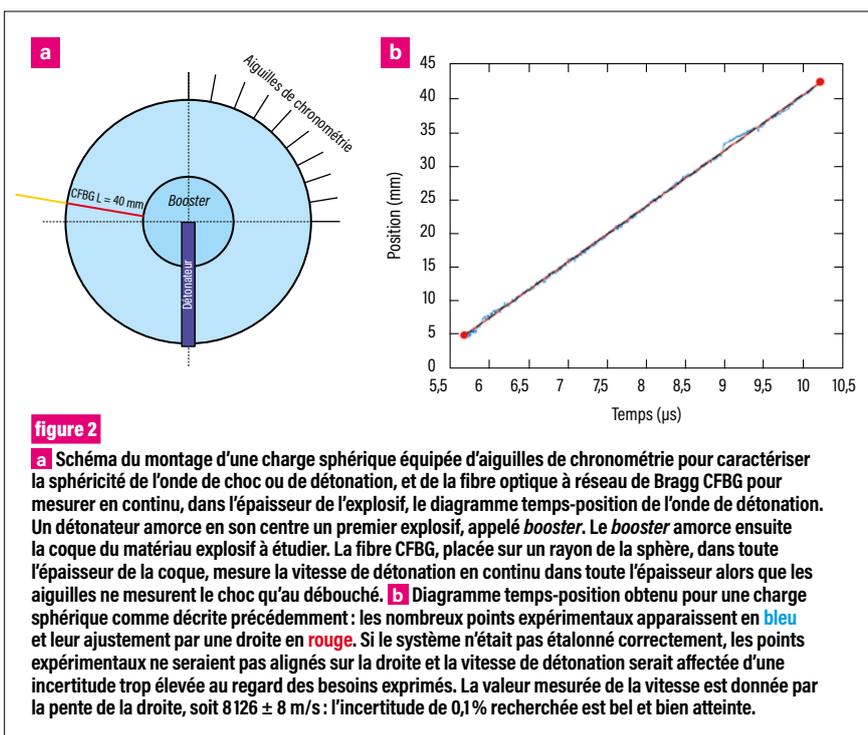
valider une nouvelle et rigoureuse technique d'étalonnage **1**, non destructive, rapide et précise, basée sur la méthode dite de réflectométrie optique dans le domaine fréquentiel.

Depuis lors, le système de mesure BraggFast a été utilisé dans un grand nombre d'essais pour différentes géométries **1**, dont des cartouches cylindriques, des géométries coniques, qui permettent d'étudier la transition d'une onde de choc en une onde de

détonation **2**, des cartouches coulées autour de la fibre et une géométrie qui permet de mesurer la courbure de l'onde de détonation.

La **figure 2a** illustre une expérimentation récente sur un matériau énergétique usiné sous une forme sphérique. Au centre de la sphère, un premier explosif appelé *booster*, également sphérique, est amorcé en son centre par un détonateur. La sphéricité de l'onde est mesurée avec des aiguilles de chronométrie et le diagramme temps-distance est mesuré grâce à la sonde optique CFBG à réseau de Bragg. Dans cette expérience, la longueur du réseau était de 40 mm, soit l'épaisseur de la coque. La **figure 2b** montre le diagramme temps-position mesuré : la nouvelle méthode d'étalonnage conduit à l'incertitude recherchée de 0,1 % sur la vitesse de détonation.

Les perspectives de développement du système BraggFast visent à le rendre plus sensible à bas niveau de pression, c'est-à-dire pour des chocs moins forts. Pour cela, de nouvelles fibres plus sensibles sont en cours de développement.



RÉFÉRENCES

1 Y. Barbarin et al., « Development of a shock and detonation velocity measurement system using chirped fiber Bragg gratings », *Sensors*, **20**, p. 1026 (2020).
2 V. Chuzeville et al., « Study of the shock-to-detonation transition using continuous measurements », *revue chocs focus*, **5**, p. 42-43 (2017).

Compréhension des effets des interférences électromagnétiques intenses sur des alimentations électroniques

Les interférences électromagnétiques intentionnelles intenses sont capables de générer des perturbations électriques transitoires, analogues à celles produites par la foudre, se propageant sur les réseaux de distribution en électricité jusqu'aux alimentations des équipements électroniques. Comprendre ces phénomènes s'avère important pour le CEA - DAM, notamment pour les modéliser dans le but de prédire leurs effets sur l'électronique. Les travaux réalisés au CEA - Gramat ont permis des avancées significatives sur l'identification des défaillances des principaux composants électroniques constituant les alimentations, ainsi que sur la simulation numérique de leur comportement vis-à-vis d'interférences électromagnétiques intenses [1,4].

Depuis le début des années 1980, le fonctionnement des infrastructures modernes (médicales, financières, industrielles, etc.) dépend fortement du réseau de distribution électrique et des systèmes électroniques. Avec l'extension grandissante de l'usage des sources générant des ondes électromagnétiques impulsionnelles et l'accès de plus en plus aisé à leur technologie, la menace d'attaques électromagnétiques intentionnelles est bien réelle. Lors d'un tel scénario d'attaque, les champs électromagnétiques générés sont susceptibles de se coupler de manière privilégiée sur les lignes aériennes du réseau de distribution en électricité, causant des impulsions de courant de forte intensité sur les dispositifs électriques et électroniques connectés à ce dernier. Le premier élément impacté par l'impulsion de courant générée est l'alimentation du système électronique. Plusieurs études

existent déjà qui ont montré les effets destructeurs de ces impulsions de courant sur les équipements électroniques, mais très peu de ces études se sont intéressées à la compréhension fine des phénomènes à l'origine de ces destructions. Pourtant, la compréhension poussée des mécanismes de destruction des alimentations est indispensable pour prédire les défaillances et concevoir des moyens de protection efficaces. Dans cette démarche, le CEA - Gramat met en œuvre des travaux de recherche aussi bien expérimentaux que théoriques dont le but est de prédire, en utilisant la simulation numérique, les effets des interférences électromagnétiques intenses sur des alimentations électroniques.

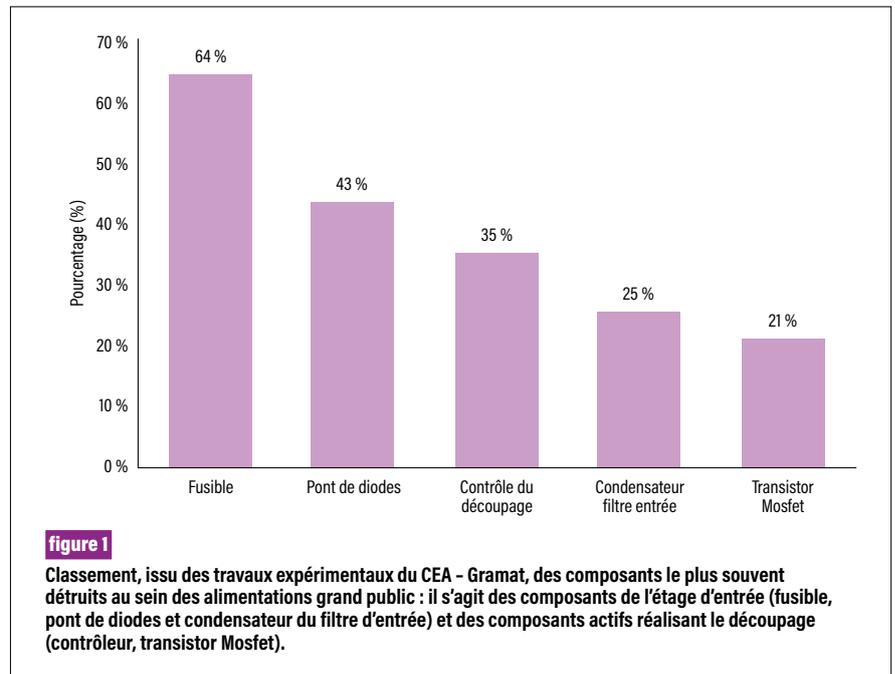
Pour mener ces recherches, un moyen expérimental dédié, reproduisant l'impulsion de courant résultant du couplage d'une agression électromagnétique intentionnelle sur une ligne aérienne de distribution en électricité [1], est utilisé pour réaliser des essais de destruction sur des alimentations grand public de moyenne puissance (environ 60 W). Afin de modéliser le comportement électromagnétique de ces dernières, un premier travail a consisté à élaborer un modèle représentatif de ce moyen expérimental [1] pour pouvoir comparer directement calculs et mesures. Un deuxième travail a conduit à développer des modèles de sous-ensembles de l'alimentation (composants électroniques du filtre d'entrée, transformateur, etc.) afin de rendre compte des effets d'un courant de forte intensité [2].

Les expérimentations ont permis de mettre en évidence les composants le plus souvent détruits. La figure 1 montre que l'étage de redressement d'entrée de l'alimentation, ainsi que le circuit intégré dit de contrôle du découpage et le transistor de puissance associé (transistor Mosfet) sont généralement détruits. Le fusible est, quant à lui, détruit dans la majorité des cas à la suite de la destruction en court-circuit d'un ou plusieurs autres composants.

Afin de comprendre la nature des défaillances engendrées par l'interférence électromagnétique,

les composants détruits ont fait l'objet d'une analyse physique approfondie **3**. Différentes techniques spécifiques ont été mises en œuvre, telles que l'analyse par microscope optique ou électronique à balayage des puces extraites de leur boîtier, ou encore l'analyse par microscopie aux rayons X des composants encapsulés. Les observations réalisées sur le transistor Mosfet, le contrôleur et le pont de diodes sont caractéristiques de destructions dues à une élévation importante de température, engendrée par le passage d'un fort courant impulsif.

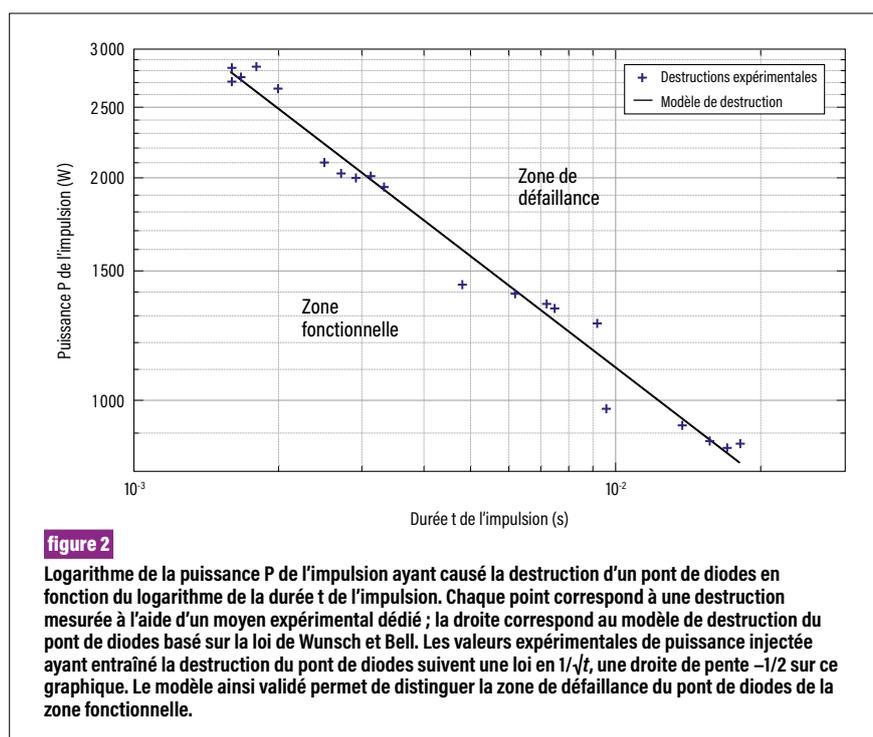
Pour identifier les mécanismes conduisant à la défaillance de chaque composant et déterminer avec exactitude leur seuil de destruction, chacun d'entre eux a été étudié unitairement **4**. Pour cela, une impulsion de courant de forte intensité et de largeur variable a été injectée dans les composants. Ce mode opératoire expérimental a été mis en œuvre sur plusieurs lots de composants afin de confirmer le seuil de destruction du composant. Pour le pont de diodes, par exemple, les résultats ont montré un phénomène de destruction thermique dont le seuil en puissance dépend de la largeur de l'impulsion d'agression. Ce type de destruction peut être modélisé



par la loi de Wunsch et Bell, comme l'illustre la **figure 2** qui compare les points de mesure et cette loi dans le plan défini par la puissance d'impulsion et la durée d'impulsion.

L'ensemble de ces résultats a permis d'élaborer l'enchaînement des destructions d'une alimentation électronique au travers d'un scénario complet **3** et de déterminer les seuils conduisant à la défaillance de chacun de ses composants

sensibles. L'association des modèles du moyen expérimental **1** et des sous-ensembles de l'alimentation **2**, d'une part, avec les modèles de destruction des différents composants (pont de diodes **4**, transistor, contrôleur), d'autre part, permet désormais de réaliser la simulation numérique du scénario proposé. Ces résultats constituent une étape importante dans la compréhension des mécanismes responsables de la destruction des alimentations électroniques. Un premier jalon vers la prédiction du comportement des alimentations soumises à des interférences électromagnétiques intenses est ainsi franchi.



RÉFÉRENCES

- 1** G. Mejezace et al., « Modeling of a current injection system for susceptibility study », *IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility*, **62**, p. 2737-2746, <https://doi.org/10.1109/TEM.2020.2986512> (2020).
- 2** L. Curoso et al., « Susceptibility modelling of SMPS input stage under high current pulse injection », *Proceedings of the IEEE International Conference on Industrial Technology (ICIT 2020)*, 26-28 février 2020, Buenos Aires, Argentine, <https://doi.org/10.1109/ICIT45562.2020.9067183>, p. 511-516 (2020).
- 3** G. Mejezace et al., « Destruction analyses of power supplies due to electric pulse », *Microelectronics Reliability*, **100-101**, <https://doi.org/10.1016/j.microrel.2019.113470> (2019).
- 4** L. Curoso et al., « Investigation of critical parameters in power supplies components failure due to electric pulse », *Microelectronics Reliability*, **114**, <https://doi.org/10.1016/j.microrel.2020.113936> (2020).

Vers une compréhension fine du devenir de l'eau tritiée adsorbée sur zéolithe

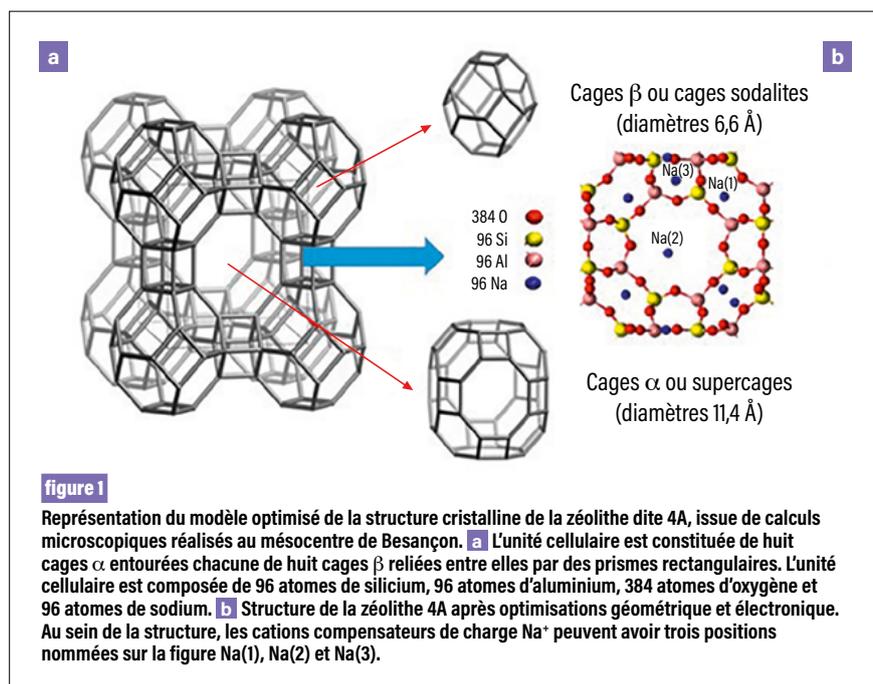
La réduction de l'impact environnemental lié à l'exploitation des installations nucléaires mettant en œuvre du tritium, comme le CEA – Valduc ou Iter à Cadarache, nécessite des opérations d'épuration de l'atmosphère des enceintes de confinement par des systèmes de détritiation, qui conduisent à la formation d'eau faiblement tritiée. Afin d'optimiser la sûreté liée à la manipulation de l'eau tritiée liquide, celle-ci peut être entreposée par adsorption sur des matrices solides de zéolithe dites 4A (matériau aluminosilicate microporeux). La radiolyse de l'eau tritiée se caractérise par une décomposition de l'eau sous l'action des rayonnements émis par la décroissance radioactive du tritium. Après une approche expérimentale, le CEA – Valduc a engagé, en collaboration avec l'université de Bourgogne Franche-Comté, une étude par simulation numérique du devenir des espèces H_2 et O_2 issues de cette décomposition **1**. Les résultats de cette étude permettront à terme d'améliorer les connaissances de la radiolyse de l'eau adsorbée et, *in fine*, d'optimiser les conditions d'entreposage.

Au cours de l'entreposage d'eau tritiée adsorbée sur zéolithe, les rayonnements émis *in situ* par la décroissance radioactive du tritium entraînent des phénomènes de radiolyse et, en conséquence, la formation d'espèces réactives. Les différentes réactions chimiques peuvent alors conduire à une production de molécules d'hydrogène (H_2) et d'oxygène (O_2) en phase gazeuse. Pour améliorer la description des phénomènes et des mécanismes à l'œuvre dans ces systèmes, une stratégie a été déployée, couplant

des études expérimentales sous atmosphère tritium au CEA – Valduc et sous irradiations externes au CEA – Paris-Saclay et à Marcoule, à des simulations microscopiques (atomistiques) en collaboration avec l'université de Bourgogne Franche-Comté.

Les études expérimentales **2** ont mis en évidence deux principaux résultats liés aux interactions avec la zéolithe. D'une part, dans le cas de la radiolyse d'une eau adsorbée, le dégagement initial de H_2 est supérieur à celui mesuré dans l'eau à l'état liquide. D'autre part, la diminution des quantités de matière de H_2 et O_2 en phase gazeuse est constatée dans le cas d'une zéolithe faiblement hydratée. Elle est attribuée à un phénomène de recombinaison de H_2 avec O_2 pour former de l'eau H_2O . D'après les résultats cumulés depuis un certain nombre d'années, la production apparente de H_2 et O_2 ne se poursuit pas après recombinaison, assurant ainsi un entreposage pérenne.

L'étude microscopique par simulation numérique a été mise en place pour mieux comprendre les mécanismes conduisant à ce phénomène de recombinaison de molécules stables dans la zéolithe. Dans un premier temps et avant d'envisager l'étude de l'adsorption des molécules H_2 et O_2 dans la zéolithe, leur position dans la structure et leur réactivité, les travaux ont porté sur la détermination d'un modèle optimisé de structure cristalline de la zéolithe et sur l'étude du système à l'état d'équilibre. Pour cela, les méthodes de modélisation statique telles que la DFT (*Density Functional Theory*) et la méthode de Monte-Carlo ont été mises en œuvre. La DFT permet de déterminer l'ensemble des propriétés structurales et électroniques du système et de déterminer son énergie totale. En prenant en compte les interactions intra et intermoléculaires, la méthode de Monte-Carlo conduit à déterminer un minimum global d'énergie totale du système et à fournir le modèle optimisé de structure cristalline de l'unité cellulaire de zéolithe avec ses différents paramètres géométriques.



Reprenant des données issues de la littérature pour les longueurs des liaisons interatomiques par exemple, les simulations ont été réalisées au mésocentre de Besançon. Elles ont conduit au modèle optimisé illustré sur la **figure 1**, où apparaissent les cages, dans lesquelles peuvent se positionner les molécules H_2 et O_2 adsorbées. Afin de valider ce modèle, des isothermes d'adsorption d'eau ont été calculées par la méthode de Monte-Carlo et comparées à des données expérimentales. Comme le montre la **figure 2**, la

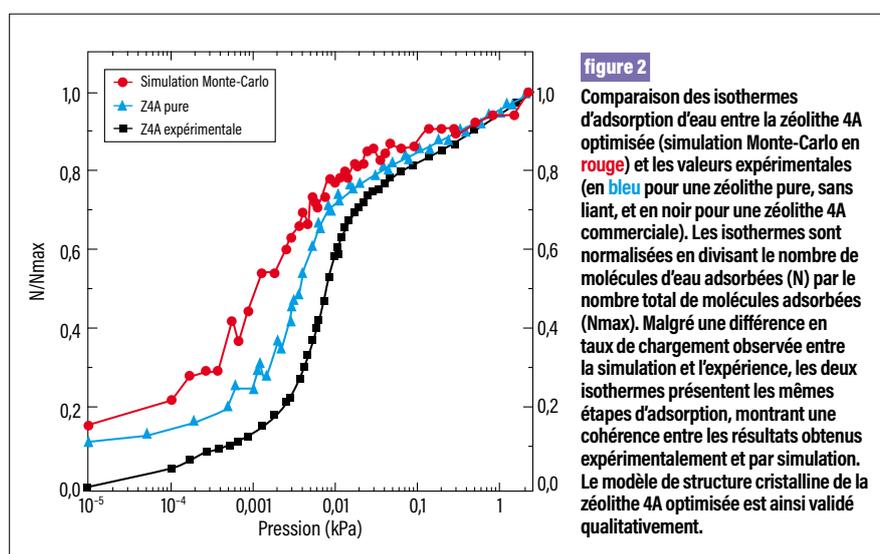
simulation numérique reproduit correctement les différents régimes d'adsorption : le modèle de structure est ainsi validé qualitativement **3**.

Dans un second temps, les travaux ont porté sur l'étude microscopique de l'adsorption et de la coadsorption dans la zéolithe des molécules de H_2O , H_2 et O_2 , afin de déterminer leur position dans les cages α et β (**figure 1**) : H_2O se stabilise sur quatre sites d'adsorption en interaction avec les cations Na^+ et les atomes d'oxygène constitutifs de la structure zéolithique ; H_2 montre de

faibles interactions avec la zéolithe et peut diffuser quasi librement au sein de la structure ; en fonction du taux d'hydratation, O_2 se trouve stabilisé plus ou moins fortement par les cations Na^+ vacants. Cette stabilisation pourrait être une étape initiale essentielle conduisant à la réaction de recombinaison. Par la méthode *ab initio* de dynamique moléculaire, des calculs ont été menés sur le supercalculateur Joliot-Curie hébergé au Très Grand Centre de calcul (TGCC), situé au CEA – DAM Île-de-France, et ont confirmé ces résultats.

Enfin, des calculs de dynamique moléculaire et de chimie quantique sont aujourd'hui conduits afin d'établir des points de départ dans l'étude de la réactivité entre H_2 et O_2 . L'objectif est de déterminer les barrières d'énergie à franchir pour que la réaction de recombinaison se produise entre les molécules préconfigurées dans les différents sites d'adsorption.

Les premiers résultats constituent une base solide et engagent à poursuivre l'étude de la dynamique des mélanges gazeux dans la zéolithe et dans son environnement proche, en fonction de son hydratation. Dans ce but, des simulations seront menées en utilisant des méthodes de cinétique par Monte-Carlo, grâce à un programme de calcul prometteur développé à l'université de Bourgogne Franche-Comté, en partenariat avec le CEA – Valduc. L'enjeu reste de comprendre finement le mécanisme conduisant à la recombinaison entre H_2 et O_2 dans la zéolithe.



RÉFÉRENCES

- 1 J. Randrianandraina et al.**, « Adsorption study of main gas products from water radiolysis on 4A zeolite by numerical simulations », *Fusion Science and Technology*, **77**, p. 19-25 (2021).
- 2 L. Frances et al.**, « Self-radiolysis of tritiated water stored in zeolites 4A: production and behavior of H_2 and O_2 », *J. Phys. Chem. C*, **119**, p. 28462-28469 (2015).
- 3 C. Chambelland et al.**, « L'eau tritiée fait sa propre radiolyse », *L'actualité chimique*, journal de la Société française chimique de France, **460-461**, p. 101-105 (2021).

Première élaboration d'un matériau composite de type oxyde par caléfaction

Pour ses programmes futurs, le CEA - DAM a besoin de matériaux qui possèdent de bonnes propriétés électromagnétiques et qui soient résistants à haute température. Les matériaux céramiques de type oxyde, c'est-à-dire contenant l'élément oxygène, et plus particulièrement ceux composés d'aluminosilicate de baryum de formule chimique $BaAl_2Si_2O_8$ (BAS), présentent des propriétés physiques intéressantes qui permettent d'envisager leur utilisation pour des applications à très haute température. Sensibles aux chocs thermiques, ces céramiques oxydes doivent être armées par une structure fibreuse composée aussi d'oxydes afin d'améliorer leur comportement thermomécanique ; ce sont alors des composites oxyde/oxyde. Leur élaboration est un défi majeur, à la limite des savoir-faire actuels. Appliquée pour la première fois à la fabrication d'un composite oxyde/oxyde complexe, le procédé d'élaboration par caléfaction a permis l'obtention de matériaux de géométrie tubulaire en aluminosilicate de baryum renforcés par des fibres oxydes [1,2](#) .

Les composites oxydes ont fait l'objet de développements récents et sont employés par exemple comme éléments de réacteur pour des applications aéronautiques civiles. Les céramiques de type oxyde, si elles sont comparées aux non-oxydes (carbures, nitrures ou borures), sont plus résistantes à haute température dans une atmosphère oxydante. En plus de leur stabilité chimique à haute température, certaines céramiques oxydes présentent des propriétés électromagnétiques très intéressantes. La silice est le matériau de référence pour des applications électromagnétiques, mais son usage est limité par sa température de fusion et son fluage précoce. La céramique oxyde composée d'aluminosilicate de baryum, ou BAS, possède non seulement une

température de fusion élevée (1760 °C), mais également une faible permittivité relative, ce qui en fait un bon candidat pour remplacer la silice. Grâce à ses propriétés, le BAS est intéressant pour la fabrication de matériaux utilisés dans des conditions d'emploi et de tenue thermique proches de sa température de fusion. Le BAS existe sous plusieurs formes cristallines, principalement la forme hexagonale stable à haute température et la forme monoclinique.

À l'instar de l'ensemble des céramiques, le BAS résiste mal aux chocs thermiques et à la fissuration : il est fragile. C'est donc pour améliorer ces deux propriétés qu'il est nécessaire de l'élaborer sous la forme d'un composite. Ce dernier est constitué d'une matrice en BAS et d'une structure fibreuse de renfort. L'alliance des fibres et de la matrice permet ainsi de rendre la céramique non fragile. Dans la littérature sur le sujet, quelques travaux ont été consacrés à l'élaboration de BAS renforcé par des fibres de carbone ou des fibres de carbure de silicium. Cependant, ces types de fibre ne sont pas compatibles avec une application électromagnétique du fait de leur forte permittivité relative. Par ailleurs, il existe dans le commerce des fibres oxydes qui constituent le renfort idéal. Un seul brevet porte sur l'élaboration de BAS renforcé par des fibres oxydes [3](#), il s'agit d'un brevet du CEA - DAM concernant l'utilisation de fibres courtes. Néanmoins, il existe un défi majeur à élaborer des composites BAS renforcés par des tissus, donc à base de fibres longues d'oxyde.

La technique choisie pour relever ce défi est une technique dite de caléfaction développée au CEA - DAM. Elle consiste à immerger dans un bain de précurseur liquide une préforme fibreuse. Cette dernière est ensuite chauffée, ce qui entraîne une décomposition du précurseur liquide et un dépôt de matériau au sein de la préforme. Le procédé d'élaboration de caléfaction appartient à la vaste famille des procédés d'infiltration chimique en phase vapeur (CVI). Un gradient thermique très important est généré entre la surface chaude de la préforme et le précurseur liquide en ébullition. L'intérêt du procédé de caléfaction provient précisément de la présence

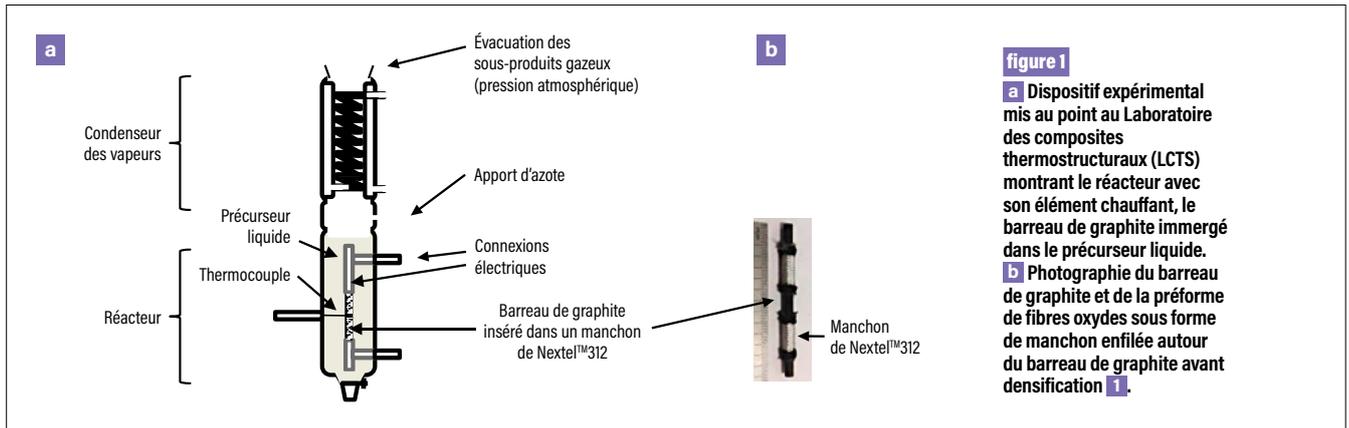


figure 1

a Dispositif expérimental mis au point au Laboratoire des composites thermostrostructuraux (LCTS) montrant le réacteur avec son élément chauffant, le barreau de graphite immergé dans le précurseur liquide. **b** Photographie du barreau de graphite et de la préforme de fibres oxydes sous forme de manchon enfilée autour du barreau de graphite avant densification **1**.

de ce gradient qui permet de densifier le matériau du cœur de la préforme vers la périphérie. De plus, c'est un procédé extrêmement rapide par rapport à la CVI classique qui n'utilise que des gaz. Développée à l'origine pour réaliser des dépôts de carbone à partir d'hydrocarbures liquides, cette technique a été étendue à des précurseurs organiques pour déposer du carbure de silicium. Et c'est en poursuivant cette idée que des alkoxydes ont été utilisés pour réaliser le dépôt de céramiques oxydes **1,2,4**.

Le dispositif expérimental mis au point au Laboratoire des composites thermostrostructuraux (LCTS) est présenté sur la **figure 1**. Il se compose d'un réacteur et d'un condenseur des gaz en sortie. Le système chauffant est résistif et comprend un barreau de graphite ($\varnothing = 3 \text{ mm}$, $L = 70 \text{ mm}$). Sur ce dernier est enfilé un manchon constitué de fibres oxydes tissées fabriquées par la société Nextel. Le précurseur liquide utilisé est un mélange de trois alkoxydes : le tétraéthyl orthosilicate (TEOS), comme source d'oxyde de silicium, l'aluminium tri-sec-butoxyde (ATSB), comme source d'oxyde d'aluminium, et l'isopropoxyde de baryum dissous dans l'isopropanol à hauteur de 20 % massique, comme source d'oxyde de baryum (BIP). Le mélange est réalisé dans les proportions molaires suivantes : 65 TEOS, 30 ATSB, 5 BIP. L'intensité du courant est portée progressivement de 50 à 66 A avec une vitesse de 0,3 A/min, ce qui entraîne une élévation de température du barreau de graphite de 300 à 1 250 °C.

Comme le montre la **figure 2**, la préforme est partiellement densifiée. L'analyse au microscope électronique à balayage complétée par une spectroscopie à dispersion d'énergie (EDS, pour *Energy Dispersive Spectroscopy*)

montre une composition atomique de la matrice de 58 % d'oxygène, de 16 % d'aluminium, de 17 % de silicium et de 8 % de baryum, proche de la composition du BAS ($\text{BaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$). L'analyse par diffraction de rayons X indique la présence de la phase hexagonale du BAS cristallisé et de mullite ($3\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$). Un dépôt épais est présent en périphérie de l'échantillon. Sa composition est hétérogène, avec différentes stoechiométries de Ba, Al, Si et O. La présence de la phase hexagonale haute température, alors que le procédé ne dépasse pas les 1 250 °C, s'explique par le fait que la phase hexagonale est la plus

rapide à se former, même si elle n'est pas stable thermodynamiquement.

En conclusion, cette étude a permis de synthétiser une matrice de BAS cristallisée à l'intérieur d'une préforme de fibres oxydes grâce au procédé de caléfaction. Il s'agit de la première élaboration d'un matériau composite oxyde/oxyde par cette technique, qui a débouché sur le dépôt d'un brevet du CEA – DAM **2**. Cette étude représente une étape importante pour l'obtention d'un matériau de géométrie tubulaire disposant de bonnes propriétés électromagnétiques et d'une bonne tenue à haute température.

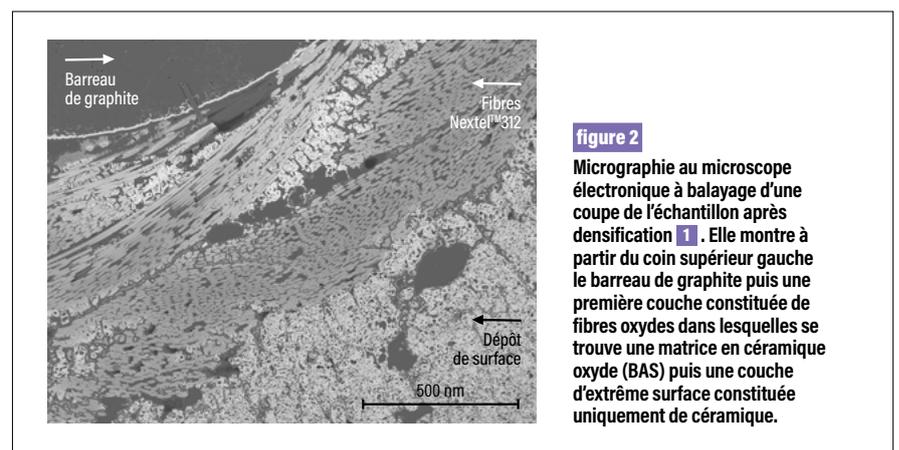


figure 2

Micrographie au microscope électronique à balayage d'une coupe de l'échantillon après densification **1**. Elle montre à partir du coin supérieur gauche le barreau de graphite puis une première couche constituée de fibres oxydes dans lesquelles se trouve une matrice en céramique oxyde (BAS) puis une couche d'extrême surface constituée uniquement de céramique.

RÉFÉRENCES

- 1** C. Besnard, A. Allemand, P. David, L. Maillé, « Synthesis of hexacelsian barium aluminosilicate by film boiling chemical vapour process », *Journal of the European Ceramic Society*, **40**, p. 3494-3497 (2020).
- 2** A. Allemand, P. Broisson, L. Maillé, C. Besnard, P. David, « Mise au point de composites par procédé de caléfaction », brevet CEA N° WO2018154232 du 23/02/2017.
- 3** A. Allemand, Y. Le Petitcorps, R. Billard, « Matériau composite à matrice en aluminosilicate de baryum BAS renforcée par des renforts en oxyde de métal, et son procédé de préparation », brevet CEA N° US2015299052 du 20/11/2012.
- 4** C. Besnard, A. Allemand, P. David, J.-F. Léon, L. Maillé, « An original concept for the synthesis of an oxide coating: the film boiling process », *Journal of the European Ceramic Society*, **41**, p. 3013-3018 (2021).

Potentiel du molybdène pour la lutte contre la prolifération nucléaire

Naturellement présent dans les minerais, le molybdène est associé à l'uranium dans les différentes étapes de fabrication du combustible nucléaire et de multiples procédés sont utilisés pour en abaisser la teneur. Des mesures sur des échantillons issus d'installations industrielles ou produits au laboratoire, ainsi que des modélisations, indiquent que ces procédés affectent l'abondance relative des isotopes du molybdène. Ces fractionnements isotopiques ouvrent la voie à un nouveau type de traçage des origines et des transformations de l'uranium exploitable au profit de la lutte contre la prolifération nucléaire, à laquelle le CEA - DAM contribue en exerçant son expertise scientifique et technique dans le domaine des analyses physico-chimiques **1**.

Les transformations nécessaires pour pouvoir exploiter l'uranium laissent des traces physico-chimiques, dont l'analyse contribue à identifier l'origine de la matière et à caractériser les étapes et procédés qui ont permis sa production.

Le CEA - DAM dispose ainsi d'un large éventail d'outils et de méthodes d'analyse permettant de caractériser les échantillons collectés sur des sites d'intérêt, contribuant à l'identification d'une éventuelle utilisation détournée de matière nucléaire ou permettant de remonter à l'origine de cette matière. Il est dans ce cadre important d'employer les traceurs chimiques et isotopiques les plus adaptés au cas traité. Le molybdène (Mo) est un de ces traceurs potentiels. L'uranium et le molybdène ont en effet des propriétés chimiques similaires, si bien que les deux éléments sont étroitement associés dans les minerais et le long de la chaîne de traitement. Ainsi, le molybdène perturbe la purification et l'enrichissement de l'uranium. Le molybdène a

également la particularité de modifier les réactions nucléaires attendues pour l'uranium. Divers procédés sont alors utilisés pour abaisser sa teneur au cours du cycle du combustible.

Le molybdène possède sept isotopes stables, qui ne diffèrent que par leur nombre de neutrons, c'est-à-dire par leur masse atomique. Ces différences de masse des isotopes affectent leur abondance relative entre composés impliqués dans des réactions chimiques. Cette variation des abondances relatives des isotopes entre différents composés s'appelle le fractionnement isotopique. Il s'est avéré que la plupart des opérations employées dans le cycle du combustible pour préparer l'uranium fractionnent les isotopes du molybdène. C'est également le cas de nombreux processus naturels qui conduisent aux différents gisements d'uranium. Le potentiel des isotopes du molybdène pour tracer l'origine et les transformations de l'uranium a ainsi été étudié dans le cadre d'une collaboration entre le CEA - DAM et l'École normale supérieure de Lyon. Les étapes qui mènent d'un minerai d'uranium à un concentré minier d'uranium, premier produit transportable vers des installations et des utilisateurs qui pourraient en détourner l'usage, ont d'abord concentré l'intérêt.

Parce que les fractionnements recherchés varient linéairement avec la masse des isotopes, seules les abondances de deux isotopes, ^{98}Mo et ^{95}Mo , exprimées sous la forme de leur rapport isotopique ($^{98}\text{Mo}/^{95}\text{Mo}$), sont mesurées. Les variations d'abondances isotopiques sont si petites que l'on s'intéresse aux troisième, quatrième et cinquième chiffres après la virgule de ce rapport. Calculer l'écart relatif de ce rapport isotopique par rapport à celui d'une référence permet de mieux appréhender ces variations, en utilisant la quantité notée $\delta^{98}\text{Mo}$, exprimée non pas en pour cent mais en pour mille (‰) du fait des très faibles écarts mesurés.

Une méthode a tout d'abord été mise au point pour mesurer les rapports isotopiques du molybdène dans les composés uranifères. Après mise en solution

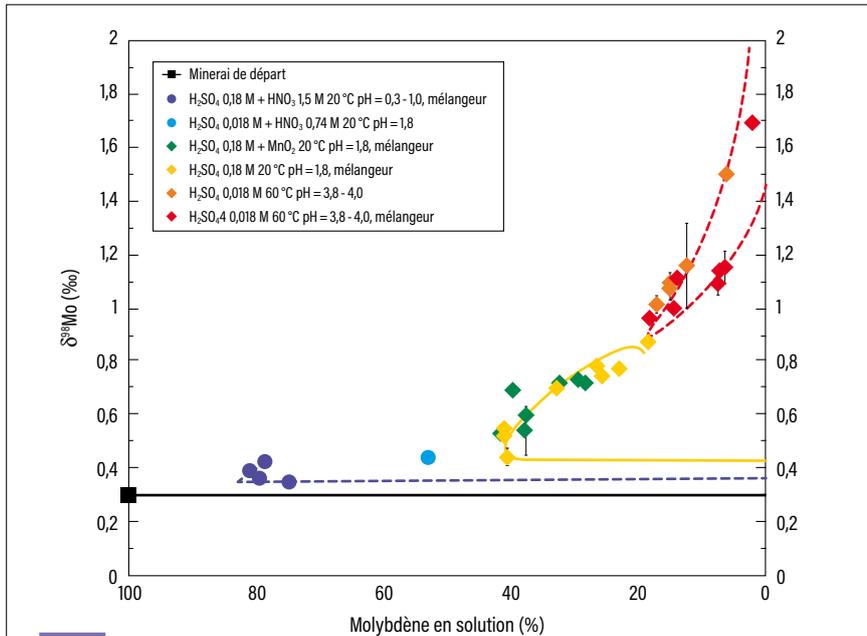


figure 1

Fractionnement des isotopes du molybdène (axe vertical) en fonction de la quantité de cet élément qui passe en solution (axe horizontal) lors de la lixiviation acide d'un minerai d'uranium pour différentes conditions expérimentales proches de celles employées dans l'industrie (acide sulfurique plus ou moins concentré, ajout d'acide nitrique ou d'oxydant MnO_2 , températures de 20 °C ou 60 °C, utilisation d'un mélangeur ou non). Ces différentes conditions, représentées par différentes couleurs, cherchent à libérer l'uranium tout en minimisant la libération de molybdène. Les différents points d'une même couleur représentent l'avancement de la réaction de lixiviation. La composition isotopique du molybdène dans le minerai de départ est indiquée par le carré noir et la droite horizontale. Quelles que soient les conditions, un fractionnement isotopique positif est observé, indiquant que la solution obtenue après lixiviation est enrichie en isotope lourd du molybdène (^{38}Mo par rapport à ^{95}Mo). Plus les conditions de lixiviation favorisent l'extraction de l'uranium en laissant une plus grande fraction de molybdène dans le minerai, plus cette petite fraction de molybdène qui passe en solution présente un fractionnement isotopique important, signant ainsi les efforts déployés. Pour la première fois, un modèle d'échange isotopique recalé sur l'expérience (courbes rouge, jaune et violette) a pu être développé par l'ENS Lyon et le CEA - DAM Île-de-France pour rendre compte de ces fractionnements et les simuler en fonction des conditions propres à chaque contexte. Ces résultats novateurs ouvrent la voie à l'utilisation de la simulation pour accéder à des informations sur l'origine de l'uranium et les transformations subies pour former les concentrés miniers d'uranium.

des échantillons suivie d'une succession de séparations chimiques sur résines échangeuses d'ions, les rapports isotopiques sont mesurés par spectrométrie de masse dite à multicollection couplée à une source plasma (MC-ICP-MS). Les séparations chimiques doivent être très poussées afin d'éliminer toute interférence, source d'artéfacts analytiques lors de la mesure des isotopes du molybdène. Ces préparations chimiques et les analyses conduites permettent ainsi d'accéder à des mesures isotopiques précises et justes [2].

Les mesures isotopiques réalisées sur des minerais et divers concentrés miniers d'uranium issus du traitement de minerais attestent l'existence de fractionnements des isotopes du molybdène [1-3]. Relier ces fractionnements à des procédés employés dans l'industrie permet de les caractériser. Les principales étapes initiales du cycle du combustible ont ainsi été recréées en laboratoire. Le procédé dit de lixiviation

acide, qui permet de mettre l'uranium en solution à partir du minerai, s'est ainsi révélé associé à un fractionnement isotopique du molybdène dépendant des méthodes utilisées [3]. Plus des efforts sont déployés pour minimiser le molybdène dans le concentré (figure 1), plus les fractionnements isotopiques sont importants. Un modèle a pu être développé pour expliquer ces fractionnements et les simuler. C'est une première dans l'histoire des recherches

de provenance des concentrés miniers d'uranium, car ce modèle permet de remonter à la signature isotopique d'un minerai à partir de concentrés miniers ou de déterminer la nature des opérations chimiques utilisées, ou encore d'envisager quelles signatures il serait possible d'obtenir dans des concentrés miniers à partir d'un minerai. D'autres étapes du cycle ont également été étudiées, expérimentalement et par simulation, telles que l'extraction par solvant et la précipitation. Là aussi, des modèles ont été créés pour les simuler.

Ces résultats confirment la généralité du fractionnement des isotopes stables du molybdène dans l'uranium au cours du cycle du combustible et son potentiel pour en caractériser les principales étapes afin de lutter contre la prolifération nucléaire. Des étapes ultérieures dans le cycle doivent encore être étudiées, notamment la calcination et la conversion. La méthode est toutefois sensible à la variation de composition isotopique initiale des minerais. Pour s'en affranchir, il est nécessaire de s'intéresser maintenant aux abondances des sept isotopes stables du molybdène corrigées des fractionnements attendus du fait de leur variation de masse. Cela est rendu possible grâce à la maîtrise récente de mesures isotopiques à très haute précision, ouvrant la voie à l'utilisation des fractionnements isotopiques indépendants de la masse comme traceur de l'origine des minerais dans la matière issue du cycle du combustible.

RÉFÉRENCES

- 1 V. Migeon, C. Fitoussi, É. Pili, B. Bourdon, « Molybdenum isotope fractionation in uranium oxides and during key processes of the nuclear fuel cycle: Towards a new nuclear forensic tool », *Geochim. Cosmochim. Acta*, **279**, p. 238-257 (2020).
- 2 V. Migeon, B. Bourdon, É. Pili, C. Fitoussi, « An enhanced method for molybdenum separation and isotopic determination in uranium-rich materials and geological samples », *J. Anal. At. Spectrom.*, **30**, p. 1988-1996 (2015).
- 3 V. Migeon, B. Bourdon, É. Pili, C. Fitoussi, « Molybdenum isotope fractionation during acid leaching of a granitic uranium ore », *Geochim. Cosmochim. Acta*, **231**, p. 30-49 (2018).

Sprite : vers une imagerie radar 3D haute résolution

L'imagerie radar est un outil précieux pour l'analyse de la signature radar d'un objet furtif. Elle consiste à déterminer une carte des réflecteurs. En imagerie 3D, l'acquisition des mesures est néanmoins longue et les méthodes conventionnelles aboutissent à des cartes de qualité et de résolution médiocres. Le CEA – Cesta et le Laboratoire de l'intégration du matériau au système ont proposé une nouvelle approche **1**. Les résultats obtenus montrent une amélioration considérable de la résolution, avec en plus la possibilité de réduire le nombre de données requises.

L'imagerie radar est souvent exploitée à des fins d'analyse pour identifier et caractériser les réflecteurs électromagnétiques d'objets complexes. Il s'agit notamment de contrôler ou de réduire la signature radar de cibles furtives. Comme l'illustre la **figure 1**, l'imagerie radar consiste à émettre au moyen d'une antenne une onde électromagnétique qui se réfléchit sur un objet ou une scène. La même antenne sert à mesurer l'atténuation et le déphasage de l'onde rétrodiffusée. Cette action est répétée à diverses fréquences de l'onde et pour différentes orientations du radar, jusqu'à obtenir un hologramme de mesures. Les méthodes d'imagerie ont pour objet de déterminer, à partir de cet hologramme, une carte de la distribution spatiale de réflectivité qui, appelée image radar, est propre à l'objet imagé. Jusqu'à récemment, l'utilisateur se limitait le plus souvent à de l'imagerie 1D ou 2D. L'imagerie 3D serait utile pour mieux analyser la signature radar et résoudre certaines ambiguïtés, mais elle est plus complexe à mettre en œuvre, exigeant l'acquisition d'un nombre élevé de mesures. De plus, les méthodes conventionnelles d'imagerie 3D sont connues pour fournir des cartes de qualité et résolution modérées, voire pauvres.

Le CEA – Cesta et le groupe signal-image du Laboratoire de l'intégration du matériau au système de Talence ont proposé et développé une approche

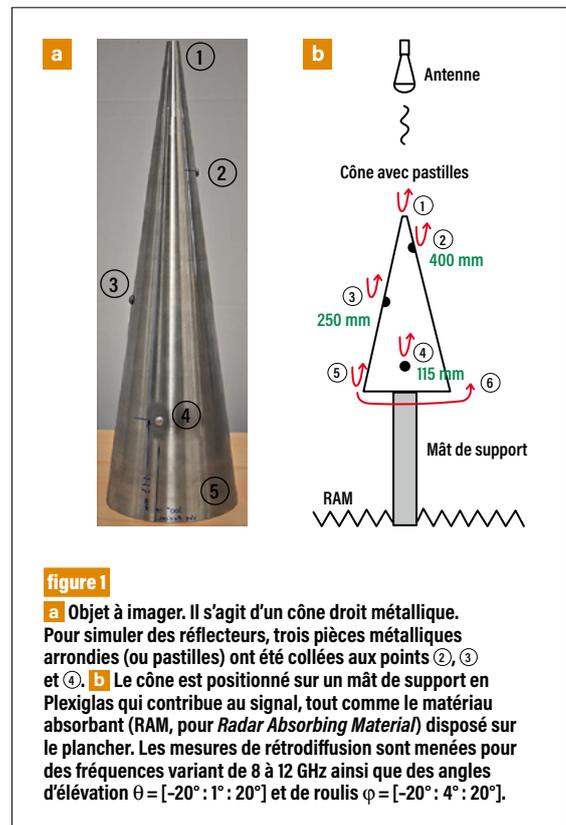


figure 1

a Objet à imager. Il s'agit d'un cône droit métallique. Pour simuler des réflecteurs, trois pièces métalliques arrondies (ou pastilles) ont été collées aux points **2**, **3** et **4**. **b** Le cône est positionné sur un mât de support en Plexiglas qui contribue au signal, tout comme le matériau absorbant (RAM, pour Radar Absorbing Material) disposé sur le plancher. Les mesures de rétrodiffusion sont menées pour des fréquences variant de 8 à 12 GHz ainsi que des angles d'élévation $\theta = [-20^\circ : 1^\circ : 20^\circ]$ et de roulis $\varphi = [-20^\circ : 4^\circ : 20^\circ]$.

originale **1**, dénommée Sprite pour *Sparse Radar Imaging Technique*, *sparse* signifiant parcimonieux. Pour une carte donnée de réflecteurs, l'hologramme à collecter peut être calculé par un modèle. On s'intéresse au problème inverse : déterminer la carte au vu de l'hologramme mesuré. Malheureusement, le problème est grandement sous-déterminé : il y a beaucoup plus d'inconnues que d'observations. Pour surmonter cette difficulté, une information *a priori* de parcimonie a été introduite sur les réflecteurs, signifiant qu'un nombre plutôt faible de facettes brillantes, possiblement ponctuelles, est attendu.

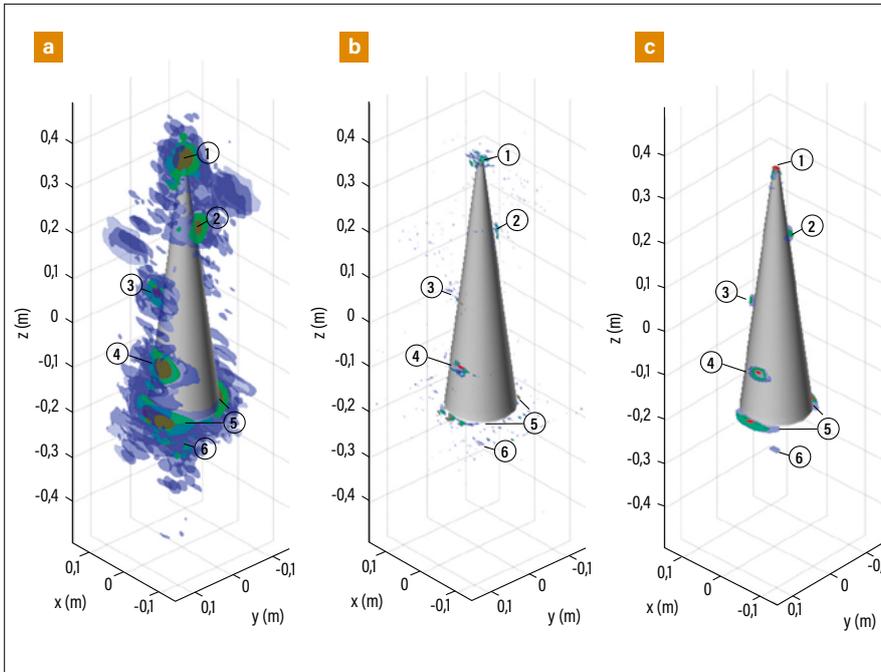


figure 2

Images radar 3D du cône, formées avec **a** la méthode conventionnelle, **b** la méthode récente **2** et **c** la méthode Sprite développée **1**. Les images sont calculées sur une grille d'environ vingt millions de voxels (l'équivalent à trois dimensions des pixels). Des isosurfaces sont représentées pour différentes amplitudes. Sur les représentations, l'objet a été ajouté pour guider l'œil. Avec Sprite, la résolution est considérablement augmentée, comparée à la méthode conventionnelle. Les principaux réflecteurs sont parfaitement localisés. Ils proviennent de la diffraction sur la pointe **1**, sur chaque pastille métallique **2**, **3** et **4** ainsi que sur le bord arrière **5**. Sous l'objet, Sprite met en évidence le rétrodiffuseur **6** situé sur le mât de supports. Quant à l'image obtenue avec la méthode récente, elle est seulement composée de points réflecteurs. Au contraire, l'image obtenue avec Sprite est non seulement composée de réflecteurs ponctuels, mais aussi de facettes spéculaires. Elle représente d'une meilleure façon la réalité physique des phénomènes de réflexion et de rétrodiffusion.

La carte recherchée est solution de l'optimisation d'un critère non différentiable, fondé sur un terme d'adéquation aux données qui, pour une carte, quantifie la cohérence des données prédites par le modèle aux données réelles, ainsi que sur un terme de pénalité qui favorise les cartes parcimonieuses. L'optimisation en grande dimension est assurée par une adaptation de l'algorithme ADMM (*Alternating Direction Method of Multipliers*), largement employé en apprentissage automatique ou *machine learning*. Cette méthode itérative s'appuie sur des calculs efficaces et particulièrement simples à l'aide de TFR (transformée de Fourier rapide). Elle génère d'abord une carte grossière puis, progressivement, affine la carte en optimisant le critère. Après convergence, une carte parcimonieuse cohérente de l'hologramme mesuré est obtenue.

Les résultats obtenus sur des données synthétisées par un code d'électromagnétisme et sur des données réelles (**figures 1** et **2**) **1** montrent qu'il est ainsi possible d'accroître drastiquement la

résolution des cartes estimées tout en conservant des temps de calcul limités. Les réflecteurs principaux sont identifiés avec une précision accrue. Au contraire de récentes méthodes **2**, la nouvelle approche Sprite reconstruit des facettes spéculaires qui peuvent être non ponctuelles. Les images 3D produites s'avèrent être un outil particulièrement adapté à l'analyse et au contrôle de la surface équivalente radar (SER), qui quantifie le niveau de détectabilité d'un objet face à une onde radar. Il en résulte une compréhension plus profonde des mécanismes de rétrodiffusion onde-cible.

Tout l'intérêt de l'approche d'imagerie parcimonieuse Sprite est ainsi démontré. Elle prend en compte de manière originale la connaissance *a priori* sur l'interaction onde-objet, étendant les classiques points brillants à des facettes. Des améliorations sont envisageables, telles que le réglage automatique des paramètres de l'algorithme. Une autre perspective est de tirer avantage de l'information *a priori* parcimonieuse dans un but d'acquisition comprimée ou *compressive sensing* **3**. Le nombre requis de mesures est alors fortement réduit et la qualité d'image est préservée.

RÉFÉRENCES

- 1** T. Benoudiba-Campanani *et al.*, «SPRITE: 3-D SParse Radar Imaging TEchnique», *IEEE Trans. Computational Imaging*, **6**, p. 1059-1069 (2020).
- 2** C. Austin *et al.*, «Sparse signal methods for 3-D radar imaging», *IEEE J. Sel. Topics Signal Process.*, **5**, p. 408-423 (2011).
- 3** D. Donoho, «Compressed sensing», *IEEE Trans. Information Theory*, **52**, p. 1289-1306 (2006).

H. Jourden

[CEA - DAM Île-de-France
Université Paris-Saclay, CEA, Laboratoire en informatique haute performance pour le calcul
et la simulation (LiHPC), Bruyères-le-Châtel]

B. Després [Laboratoire Jacques-Louis-Lions (LJLL), UMR 7598 CNRS - Sorbonne Université,
Université de Paris]

Reconstruction d'interface résolue par apprentissage automatique en hydrodynamique

Les méthodes de résolution des équations de l'hydrodynamique pour des fluides compressibles non miscibles font souvent appel pour chaque maille dite mixte à un algorithme de reconstruction d'interface pour la discrétisation des termes convectifs. Cette classe de méthodes numériques se prête naturellement à l'usage de réseaux de neurones convolutifs (ou CNN, pour *Convolutional Neural Networks*) en utilisant lors de la phase d'apprentissage un très grand nombre de configurations possibles d'interfaces. Les résultats 2D sur maillage cartésien sont prometteurs **1** pour les besoins du CEA - DAM, une telle approche étant coûteuse, mais susceptible de bénéficier d'une accélération matérielle sur différents types d'unités de calcul.

Les méthodes numériques utilisées pour simuler des écoulements hydrodynamiques compressibles et multifluides se doivent – par la nature des équations – de traiter efficacement deux types de discontinuité : les ondes de choc et les discontinuités de contact.

Les ondes de choc ont longtemps constitué une difficulté : celles-ci sont maintenant raisonnablement bien traitées par capture de choc, le CEA - DAM disposant d'une grande variété de méthodes numériques développées ces dernières années, conservatives en masse, quantité de mouvement et énergie totale, avec inconnues centrées aux mailles ou sur maillage décalé.

Le traitement des interfaces ou discontinuités de contact reste une réelle difficulté, que le code hydrodynamique soit lagrangien – le maillage bouge avec la matière – ou eulérien – le maillage reste fixe, avec nécessité de traiter alors les mailles dites mixtes, c'est-à-dire comportant plusieurs fluides. Aux interfaces,

les codes lagrangiens doivent disposer d'algorithmes de glissement intrinsèquement complexes et difficilement extensibles sur un grand nombre de cœurs de calcul. Les codes eulériens sur grille cartésienne sont eux extensibles, mais nécessitent, à précision équivalente, plus de mailles tout en présentant, selon l'algorithme utilisé aux interfaces, des pathologies bien répertoriées avec d'éventuels soucis de précision ou de robustesse (éclats, chute de pas de temps, etc.).

Le travail prospectif présenté ici concerne l'algorithme de reconstruction d'interface qui intervient au cœur des méthodes eulériennes d'advection dans l'hypothèse de fluides non miscibles. Dès les années 1970, de tels algorithmes ont fait l'objet de multiples variantes et implémentations pour lutter contre la diffusion numérique des codes multifluides eulériens **2,3,4,5**. Une trentaine d'années et de nombreux travaux académiques ont conduit à l'algorithme Elvira **6**, qui permet de retrouver analytiquement, par construction, les interfaces rectilignes.

Avec le développement **1** de la méthode VOF-ML (pour *Volume of fluid-machine learning*), l'objectif est de prendre en compte des configurations bien plus variées en amont, non plus par des formules analytiques exactes correspondant à certains cas limites, mais par apprentissage automatique, en fournissant lors de la phase d'apprentissage un très grand nombre de configurations possibles d'interface. Des modélisations d'interfaces lors de la phase d'apprentissage sont données (**figure 1**), avec des résultats numériques particulièrement probants sur un cas-test connu (**figure 2**) en échantillonnant les paramètres sur plusieurs centaines de milliers de configurations.

Pour une large part, ce travail reprend l'approche et les outils d'apprentissage automatique utilisés avec succès en reconnaissance de caractères, avec une analogie évidente pixel/maille cartésienne. Point important toutefois en hydrodynamique : pour forcer certaines propriétés essentielles d'invariance sur grille cartésienne de la reconstruction

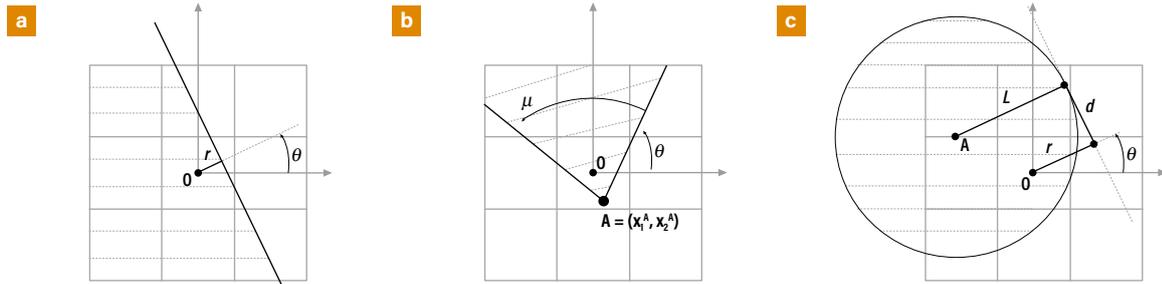


figure 1

Sur grille cartésienne, les algorithmes de reconstruction d'interface entre deux fluides ont longtemps visé des précisions élevées dans certains cas limites d'interfaces rectilignes. Par des formules analytiques qui s'avèrent alors exactes, l'algorithme Elvira proposé en 2004 par Pilliod et Puckett permet de retrouver toutes les interfaces rectilignes possibles à partir des seules fractions de présence d'un des fluides sur un bloc de mailles 3×3 . L'approche VOF-ML par apprentissage automatique et réseau de neurones qui a été proposée est différente, en balayant un nombre discret, mais très élevé de configurations possibles d'interfaces (phase d'apprentissage) et en opérant par interpolation (phase d'inférence). Dans la base d'apprentissage construite par échantillonnage, des interfaces rectilignes peuvent être introduites parmi de nombreuses autres **a** avec les paramètres (r, θ) de droites, ou **b** les paramètres $(\theta, \mu, x_1^A, x_2^A)$ de points anguleux avec $\mu = \pi$, ou encore **c** avec les paramètres (r, θ, d, L) d'interfaces circulaires en limite de rayons de courbure L élevés. Les reconstructions VOF-ML ne sont pas strictement exactes, mais peuvent bénéficier en amont de modélisations extrêmement riches et variées d'interfaces (par additivité) sur des blocs de mailles de tailles arbitraires.

d'interface (rotations, symétries, numérotations des fluides), le flux VOF-ML présente une forme très particulière qui requiert plusieurs appels au réseau de neurones CNN (pour *Convolutional Neural Networks*) par face et par pas de temps. Avec typiquement plusieurs milliers de neurones distribués sur cinq couches pour chaque appel, l'approche VOF-ML est donc coûteuse par rapport aux méthodes VOF traditionnelles. Ces

surcoûts devraient s'atténuer avec l'essor et la généralisation de ces technologies (intelligence artificielle, réseaux de neurones convolutifs) qui structurent actuellement une part croissante de l'industrie des processeurs et des accélérateurs.

Parmi les perspectives, l'évaluation de l'approche VOF-ML dans des configurations identifiées comme problématiques avec trois fluides reste à mener

finement en 2D ainsi que les (très) nombreuses possibilités d'hybridation (ex. : Elvira). À plus long terme, l'évaluation 3D sur grille cartésienne pourrait être envisagée. En revanche, l'extension de la méthode à des maillages quelconques non structurés semble délicate.

En conclusion, ce travail apparaît comme un résultat important dans l'évaluation de l'apport des technologies d'apprentissage automatique à l'analyse numérique et à la construction de solveurs numériques. Compte tenu de l'évolution actuelle des processeurs, des travaux de ce type contribuent aussi à revisiter des algorithmes de précision réduite au sein de certains solveurs, utilisés au CEA – DAM.

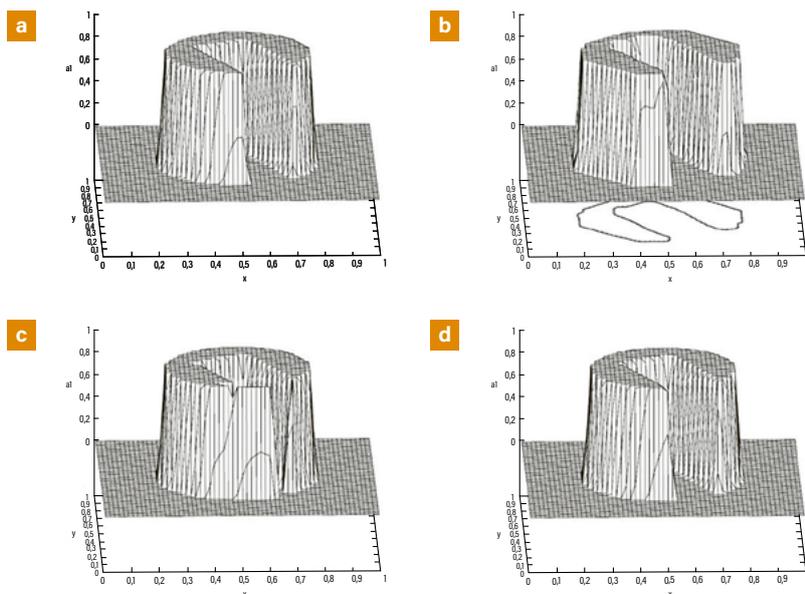


figure 2

Cas-test d'advection uniforme à 45 degrés (deux fluides, isovaleur de la fraction de présence). **a** La solution de référence avec condition limite périodique après un tour correspond à la condition initiale. **b** L'algorithme Slic déforme l'interface de manière importante, avec apparition de méplats. **c** Le résultat presque satisfaisant VOF-ML est issu d'une base d'apprentissage constituée exclusivement d'arcs de cercle sur bloc de mailles 5×5 . **d** L'excellent résultat est obtenu avec la même base d'apprentissage (arcs de cercle), enrichie de configurations $(\theta, \mu, x_1^A, x_2^A)$ avec points anguleux.

RÉFÉRENCES

- 1 B. Després, H. Jourden**, « Machine learning design of volume of fluid schemes for compressible flows », *J. Comput. Phys.*, **408**, 109275 (2020).
- 2 D. L. Youngs**, « Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion », dans Morton, Baines (Eds.), *Numerical Methods for Fluid Dynamics*, p. 273-285 (1982).
- 3 W. F. Noh, P. Woodward**, « Slic (Simple Line Interface Calculation) », *Lect. Notes Phys.*, **59**, p. 330-340 (1976).
- 4 W. G. Sutcliffe**, « BBC hydrodynamics », California Univ., Lawrence Livermore Lab, UCID-17013 (1974).
- 5 R. B. Debar**, « Fundamentals of the KRAKEN code », California Univ., Lawrence Livermore Lab, UCID-17366 (1974).
- 6 J. E. Pilliod Jr., E. G. Puckett**, « Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces », *J. Comput. Phys.*, **199**, p. 465-502 (2004).

Un nouveau solveur Monte-Carlo pour la photonique

Le transport de photons est soumis à des régimes différents : en milieu transparent, le photon parcourt de longues distances en ligne droite avant de subir une collision (régime dit de transport). En milieu opaque, il subit de nombreuses collisions et échange de l'énergie avec la matière (régime dit de diffusion). Ces deux régimes sont d'importance capitale pour les applications du CEA - DAM. Les méthodes numériques pour la photonique doivent permettre de les restituer avec précision. Les méthodes de Monte-Carlo sont efficaces en régime de transport, mais peinent pour la limite de diffusion en photonique : de petits pas d'espace sont nécessaires pour éviter l'erreur dite de téléportation. De nombreux solveurs dédiés à atténuer ce phénomène ont été conçus depuis 1960. Dans [1](#), un solveur éradiquant par construction l'erreur de téléportation est présenté. Il diminue considérablement le temps de restitution des simulations.

Des régimes différents tout aussi importants

Maîtriser la simulation numérique du transport de photons est un enjeu majeur au CEA - DAM. Le modèle physique met en jeu une équation dite de transport, couplée, non linéaire, décrivant les trajectoires des photons depuis leur émission jusqu'à leur absorption. Lors d'une collision, de l'énergie est échangée entre le rayonnement et la matière. Lorsque la fréquence des échanges est soutenue, le régime est dit de diffusion. Lorsqu'elle l'est moins, il est dit de transport. Ces deux régimes sont tout aussi importants : des matériaux transparents côtoient des matériaux opaques. Les méthodes numériques implémentées dans les codes du CEA - DAM se doivent de restituer précisément ces deux limites.

Solveurs déterministes et solveurs Monte-Carlo

Il existe deux grands types de méthodes numériques pour un problème de photonique. Les méthodes déterministes sont efficaces en régime de diffusion,

mais peinent en régime de transport. À l'inverse, le régime de diffusion est le point faible des méthodes de Monte-Carlo (MC), efficaces en régime de transport. Pour les applications du CEA - DAM, il est capital de pouvoir résoudre précisément ces deux régimes [2](#). La référence [1](#) s'intéresse à pallier les difficultés des méthodes MC en régime de diffusion. Les solveurs MC sont des méthodes particulières. Des particules informatiques sont utilisées pour résoudre une équation. Ces méthodes sont efficaces en grande dimension d'espace des phases, permettent d'être au plus près de la physique et ne nécessitent pas d'hypothèses de modélisation. Le nombre N_{MC} de particules MC de la simulation est un paramètre de discrétisation : plus N_{MC} est grand, plus la simulation est précise. L'erreur commise se matérialise, lorsque N_{MC} est faible, sous forme de bruit : en effet, ces méthodes sont basées sur des jeux de tirages aléatoires. Elles font référence dans bien des domaines (neutronique, gaz raréfiés, finance, etc.). Ce n'était toutefois pas le cas en photonique du fait d'un phénomène étudié depuis plusieurs décennies [2](#) et appelé erreur de téléportation, exacerbé en régime de diffusion.

L'erreur de téléportation et sa matérialisation dans une simulation

Pour comprendre l'erreur de téléportation, considérons une onde dite de Marshak en régime de diffusion : un corps noir de température 1 (unités adimensionnées) rayonne sur le bord gauche d'un domaine 1D froid. Une onde de température se propage dans le matériau, qui se réchauffe. Une référence est obtenue en régime de diffusion en résolvant l'équation de la chaleur avec un solveur déterministe (qui restitue cette limite mais pas le régime de transport). Cette solution est donnée ($t = 500$) en rouge sur la [figure 1](#) : l'enjeu est d'approcher un fort gradient de température au pied de l'onde ($x = 1,75$) avec un solveur MC. Sur la [figure 1](#) sont représentées plusieurs solutions obtenues avec le solveur historique IMC (*Implicit Monte-Carlo*) de Fleck & Cummings [3](#).

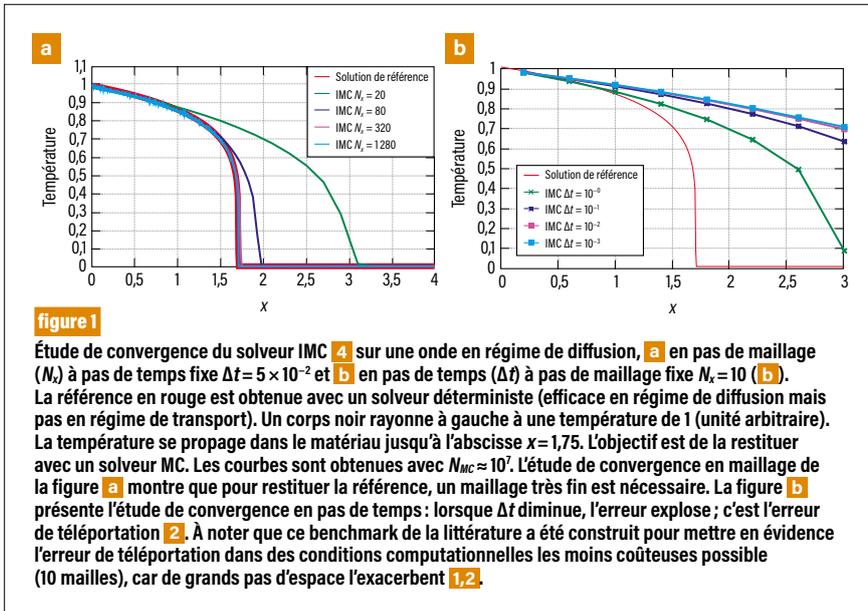


figure 1

Étude de convergence du solveur IMC [4] sur une onde en régime de diffusion, **a** en pas de maillage (N_x) à pas de temps fixe $\Delta t = 5 \times 10^{-2}$ et **b** en pas de temps (Δt) à pas de maillage fixe $N_x = 10$ (**b**). La référence en rouge est obtenue avec un solveur déterministe (efficace en régime de diffusion mais pas en régime de transport). Un corps noir rayonne à gauche à une température de 1 (unité arbitraire). La température se propage dans le matériau jusqu'à l'abscisse $x = 1,75$. L'objectif est de restituer avec un solveur MC. Les courbes sont obtenues avec $N_{MC} \approx 10^7$. L'étude de convergence en maillage de la figure **a** montre que pour restituer la référence, un maillage très fin est nécessaire. La figure **b** présente l'étude de convergence en pas de temps: lorsque Δt diminue, l'erreur explose; c'est l'erreur de téléportation [2]. À noter que ce benchmark de la littérature a été construit pour mettre en évidence l'erreur de téléportation dans des conditions computationnelles les moins coûteuses possible (10 mailles), car de grands pas d'espace l'exacerbent [1,2].

Celles-ci sont obtenues avec $N_{MC} \approx 10^7$ et plusieurs couples formés du pas de temps (Δt) et du nombre de mailles (N_x). La figure 1a présente une étude de convergence en maillage: la restitution précise du pied de l'onde nécessite un maillage très fin. Raffiner le maillage s'accompagne de l'apparition de bruit: plus le maillage est fin, plus il faut augmenter N_{MC} afin d'obtenir des résultats précis. Toutefois, les résultats sont stables et Δt peut être choisi grand: le solveur IMC est reconnu pour sa capacité à restituer des résultats stables avec des Δt raisonnables. Il est aussi connu pour présenter une

erreur de téléportation illustrée dans la figure 1b: pour un maillage donné ($N_x = 10$), diminuer le pas de temps (et donc faire plus d'opérations!) tend à faire exploser l'erreur. La position du pied de l'onde s'éloigne de la référence lorsque $\Delta t \rightarrow 0$: c'est l'erreur de téléportation. Ainsi, pour Δt donné assurant la stabilité, N_x assurant la précision est d'autant plus important que Δt est petit. Le nombre N_{MC} assurant des résultats peu bruités est d'autant plus important que N_x est grand. Le coût d'une simulation précise est donc très grand (surtout si la photonique est couplée à une physique imposant un Δt petit).

Des méthodes numériques (dites *tilts* [2]) permettent d'atténuer ce phénomène mais aucune ne permet de l'éradiquer [1,2,5].

Un nouveau schéma Monte-Carlo sans erreur de téléportation

Dans [1], l'analyse de l'erreur de téléportation est effectuée. Elle permet de classer les solveurs MC éligibles à une meilleure restitution du régime de diffusion et de les améliorer. Les résultats de la figure 2 présentent les mêmes études que celles de la figure 1, mais avec un nouveau solveur, ISMC (*Implicit Semi-analog MC*) [1], qui combine les astuces numériques de [4] pour la limite de diffusion et de [3] pour assurer des Δt raisonnables. Les calculs sont stables, précis sur maillage grossier et peu bruités (figure 2a). Diminuer Δt , c'est-à-dire faire plus d'efforts computationnels, ne nuit plus à la qualité de la solution: l'erreur de téléportation a été éradiquée. Une meilleure compréhension mathématique du phénomène a permis de l'éviter en amont et de proposer de nouvelles solutions originales et efficaces [1,5].

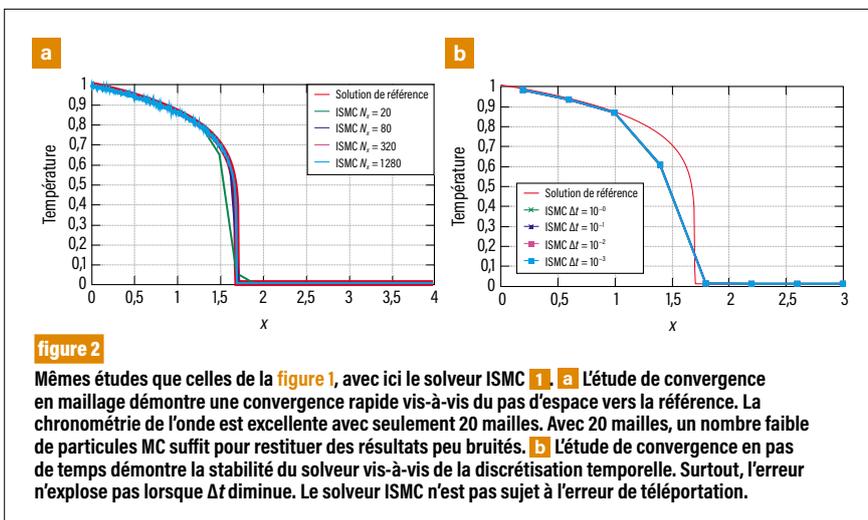


figure 2

Mêmes études que celles de la figure 1, avec ici le solveur ISMC [1]. **a** L'étude de convergence en maillage démontre une convergence rapide vis-à-vis du pas d'espace vers la référence. La chronométrie de l'onde est excellente avec seulement 20 mailles, un nombre faible de particules MC suffit pour restituer des résultats peu bruités. **b** L'étude de convergence en pas de temps démontre la stabilité du solveur vis-à-vis de la discrétisation temporelle. Surtout, l'erreur n'explose pas lorsque Δt diminue. Le solveur ISMC n'est pas sujet à l'erreur de téléportation.

RÉFÉRENCES

- 1 G. Poëtte et al., « A new implicit Monte-Carlo scheme for photonics (without teleportation error and without tilts) », *J. Comp. Phys.*, **412**, 109405 (2020).
- 2 A. B. Wollaber, « Four decades of implicit Monte Carlo », *J. Comp. Theor. Transp.*, **45**, p. 1-70 (2016).
- 3 J. A. Fleck et al., « An implicit Monte Carlo scheme for calculating time and frequency dependent nonlinear radiation transport », *J. Comp. Phys.*, **8**, p. 313-342 (1971).
- 4 C. Ahrens et al., « A semi-analog Monte Carlo method for grey radiative transfer problem », *Proc. ANS Topical Meeting, International Topical Meeting on Mathematics and Computation, Salt Lake City, Utah, 9-13 septembre, American Nuclear Society (ANS) (2001).*
- 5 G. Poëtte et al., « Canceling teleportation error in legacy IMC code for photonics (without tilts, with simple minimal modifications) », *J. Comp. Theor. Transp.*, **49**, p. 162-194 (2020).

Bilan 2020 des publications et de la vie scientifique de la Direction des applications militaires

N°15 / OCTOBRE 2021

CHOC **AVANCÉES**

BILAN 2020 DES PUBLICATIONS ET DE LA VIE SCIENTIFIQUE
DE LA DIRECTION DES APPLICATIONS MILITAIRES



www-dam.cea.fr