

Étude de la réponse d'un milieu poreux sous choc par dynamique moléculaire classique

■ L. SOULARD - N. PINEAU - J. CLÉROUIN - L. COLOMBET / CEA – DAM Île-de-France

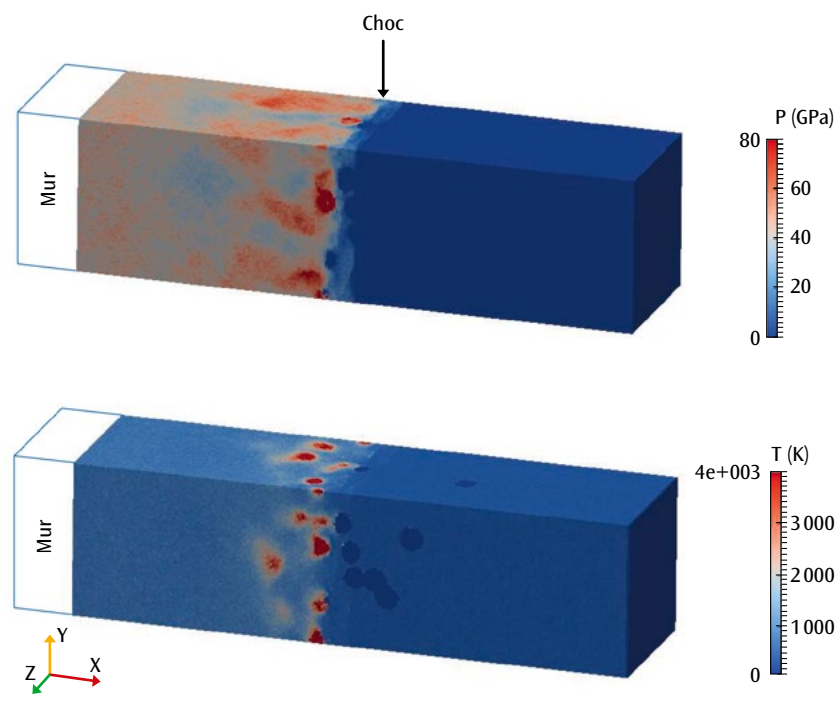
La réponse d'un milieu poreux à une onde de choc intéresse aussi bien les applications que la recherche plus fondamentale. Elle met en œuvre des processus complexes, fortement multi-échelles, qui sont abordés ici par le biais de la dynamique moléculaire classique.

La propagation d'une onde de choc dans un milieu poreux est un phénomène fréquent, tant dans les applications (atténuateurs de chocs, amorçage des explosifs solides [1]) que dans les processus naturels comme l'impact d'une météorite poreuse sur le sol terrestre: dans ce dernier cas, les géophysiciens déduisent de la structure du milieu l'intensité du choc initial, et donc la vitesse d'impact [2,3]. Les mécanismes mis en jeu restent cependant peu connus. L'interaction d'une onde de choc avec les pores du matériau recouvre en effet une physique complexe, faisant intervenir des processus allant de l'échelle atomique jusqu'aux dimensions macroscopiques. Cette physique restant

dans ses détails encore inaccessible à l'expérience, seule la simulation numérique permet de l'explorer.

Pour prendre en compte l'aspect fortement multi-échelles du processus global, la dynamique moléculaire classique (DM) a été choisie comme outil de simulation [4,5]. La DM permet en effet de prendre en compte les effets microscopiques survenant au niveau des pores et le comportement hydrodynamique du système dans le reste du matériau. Cette méthode décrit les mouvements relatifs d'atomes en interaction mutuelle et se résume à la résolution de l'équation fondamentale de la mécanique classique, reliant l'accélération d'un atome à la force qu'il subit. Les forces d'interaction entre

Figure 1. Cartes de pression (en haut) et de température (en bas) au cours de la propagation du choc dans un milieu poreux (matrice de cuivre monocristalline). Les pores sont vides et ont un diamètre de 15 nanomètres. Le choc est situé approximativement au milieu de l'échantillon: les zones de surpression et les points chauds (en rouge) résultent de l'implosion des pores au passage du choc.



les atomes sont connues, et résultent de considérations théoriques et d'un ajustement sur des données judicieusement choisies. La DM se prête très bien à l'utilisation des calculateurs massivement parallèles et, de nos jours, des simulations intégrant quelques dizaines de millions d'atomes sont courantes. Il n'en demeure pas moins que les systèmes simulés restent largement submicrométriques, de sorte que des précautions importantes sont à prendre quant aux effets d'échelle sur l'interprétation des résultats.

L'étude a été centrée sur un système générique simple: une matrice de cuivre monocristalline parsemée, dans sa région centrale (la zone poreuse), de pores sphériques, de diamètre identique mais pouvant s'interpénétrer, de sorte que certains pores auront une forme assez complexe. Les pores sont remplis ou non par un gaz neutre, l'argon. Un échantillon contient environ 250 millions d'atomes, correspondant à un système dont les dimensions sont $0,354 \times 0,088 \times 0,088 \mu\text{m}^3$. Les calculs ont été réalisés avec le code Stamp, développé au CEA – DAM, sur 8 000 cœurs de la machine Curie du Très Grand Centre de calcul (TGCC), dans le cadre d'un projet soutenu par l'infrastructure de recherche européenne PRACE.

Le choc est créé par l'impact de l'échantillon sur un mur incompressible. La **figure 1** représente une vue globale du système au cours de la propagation du choc (pression et température): des zones de surpression et des points chauds sont observés, résultant de l'implosion des pores au passage du choc. La présence d'un gaz dans les pores atténue ces effets. Une analyse plus détaillée, centrée sur un pore isolé (**figure 2**), permet de mieux comprendre la physique de son implosion. La simulation montre que, parmi les différents scénarios envisagés pouvant provoquer la surchauffe de la matrice de cuivre (formation d'un jet hypervélocité, auto-impact de la paroi du pore, travail viscoplastique), la contribution prédominante est le travail viscoplastique. Maximum dans le cas d'un pore vide, ce travail se trouve bloqué dans le cas de la présence d'un gaz quand la pression dans ce dernier devient équivalente à la pression dans le cuivre. Même si le gaz atteint une température très élevée, les échelles de temps impliquées ici ne permettent pas le chauffage du cuivre par effet de conduction. L'échauffement provoqué par l'implosion d'un pore est ici suffisant pour entraîner localement la fusion de la matrice de cuivre dans une zone d'autant plus importante que la quantité de gaz est faible. L'énergie ainsi consommée se traduit par une atténuation locale du choc initial, entraînant la propagation d'ondes sphériques de décompression.

L'histoire du matériau est cependant loin d'être terminée. La zone poreuse traversée, le choc se

réfléchit sur la surface libre bornant l'échantillon, provoquant la propagation à rebours d'ondes de décompression puis de recompression qui vont fortement impacter l'état du matériau. La structure finale est qualitativement proche des observations expérimentales [2], montrant ainsi que les mécanismes physiques sont les mêmes malgré la différence d'échelle entre calcul et expérience.

Cette démarche de simulation offre ainsi une vue réaliste, très détaillée et résolue en temps des transformations que subit un échantillon poreux lors de son impact sur un mur.

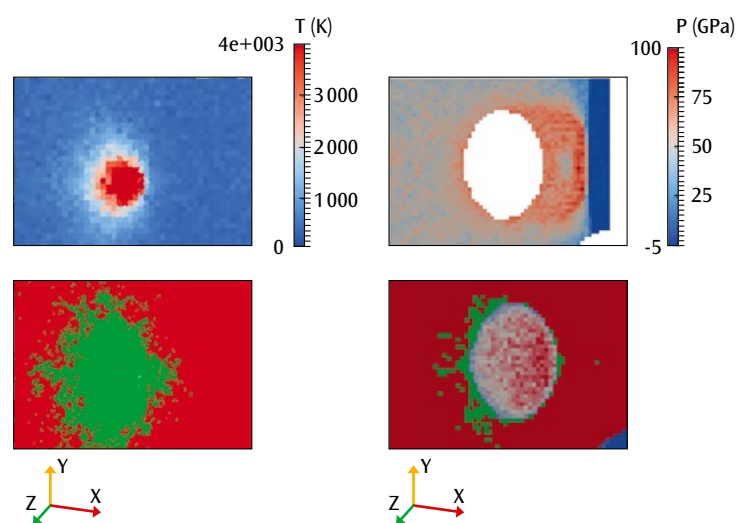


Figure 2.

Carte thermodynamique (en haut, température ou pression) et structure de la matière (en bas) après implosion d'un pore vide (à gauche) ou contenant du gaz (à droite). Dans les figures du bas, les zones en rouge correspondent à la structure cristalline initiale du cuivre et les zones en vert aux régions fondues.

Références

- [1] F. P. BOWDEN, A. D. YOFFE, *Initiation and Growth of Explosion in Liquids and Solids*, Cambridge Science Classics Series, Cambridge University Press (1985).
- [2] P. BECK, T. FERROIR, P. GILLET, "Shock-induced compaction, melting, and entrapment of atmospheric gases in martian meteorites", *Geophys. Research Lett.*, **34**, L01203 (2007).
- [3] P. BECK, P. GILLET, A. EL GORESY, S. MOSTEFAOUI, "Timescales of shock processes in chondritic and Martian meteorites", *Nature*, **435**, p. 1071 (2005).
- [4] L. SOULARD, N. PINEAU, J. CLÉROUIN, L. COLOMBET, "Molecular dynamics simulations of shock compressed heterogeneous materials. I. The porous case", *J. Appl. Phys.*, **117**, 115901 (2015).
- [5] N. PINEAU, L. SOULARD, L. COLOMBET, T. CARRARD, A. PELLÉ, P. GILLET, J. CLÉROUIN, "Molecular dynamics simulations of shock compressed heterogeneous materials. II. The graphite/diamond transition case for astrophysics applications", *J. Appl. Phys.*, **117**, 115902 (2015).