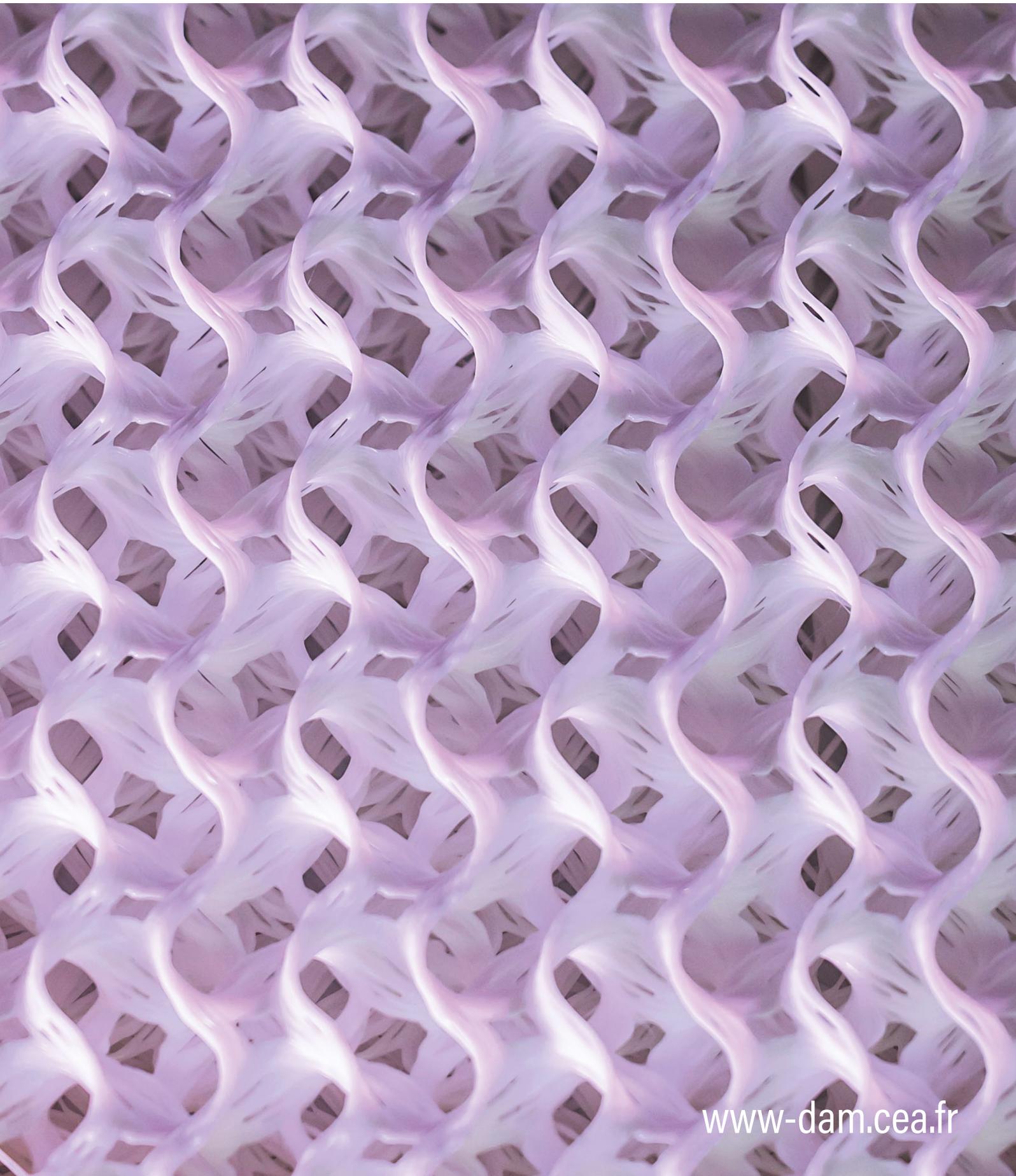


N°17 / JUILLET 2023

CHOCES AVANCÉES

BILAN 2022 DES
PUBLICATIONS ET DE
LA VIE SCIENTIFIQUE
DE LA DIRECTION
DES APPLICATIONS
MILITAIRES



www-dam.cea.fr



N°17 / JUILLET 2023

AVANCÉES

EN COUVERTURE. Photographie d'un matériau de type dépôt de fil fondu réalisé par fabrication additive. Ce procédé ouvre de nouvelles perspectives pour l'impression en continu de matériaux alvéolaires, dont la géométrie complexe est irréalisable avec des technologies traditionnelles. La structure gyroïde imprimée ici permet d'obtenir de bonnes propriétés mécaniques, tout en réduisant la masse de l'objet. La distance entre les parois en forme de vague est de 7 millimètres.

Bilan 2022 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
Olivier Vacus

Coordinateur scientifique
Christelle Barthet

Comité scientifique
Nicolas Authier, Denis Autissier,
Christelle Barthet, Philippe Belleville,
Nathalie Blanchot, Daniel Bouche,
Serge Bouquet, Gilles Bourges,
Corinne Canton-Desmeuzes, Xavier Carlotti,
Hélène Hébert, Jean-Christophe Joly,
Hervé Jourden, Pierre-Henri Maire,
Jean-Luc Miquel, David Riz, Éric Royer,
Virginie Silvert, Stéphanie Thiébaud,
Éric Van Renterghem

Rédacteur en chef
Jean-Marc Laborie

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

Conformité
Régine Regnault

Correction
Stylience / www.stylience.fr

Diffusion et abonnement
Régis Vîzet

Photo de couverture
© CADAM

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 : choces@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

L'intelligence artificielle en zone de turbulence 10

S. THÉVENIN, N. VALADE, B.-J. GRÉA, G. KLUTH, O. SOULARD

Les protons pénètrent plus loin que prévu
dans les plasmas denses et tièdes 12

W. CAYZAC, V. OSPINA-BOHORQUEZ, X. VAISSEAU, G. FAUSSURIER, S. MALKO, L. VOLPE et al.

Vers un modèle plus fiable d'absorption laser pour les plasmas 14

O. POUJADE, R. DEVRIENT

Briser le mur des orbitales : vers une description universelle
de la matière 16

A. BLANCHET, J. CLÉROUIN, M. TORRENT, F. SOUBIRAN

Laser Mégajoule : réalisation de la source de rayons X
la plus énergétique en Europe 18

*M. PRIMOUT, L. JACQUET, L. LECHERBOURG, L. VIDEAU, P.-É. MASSON-LABORDE, B. VILLETTE,
G. LEGAY, L. LE-DEROFF*

PHYSIQUE NUCLÉAIRE 20

Des modèles pour décrire la fission nucléaire 20

D. REGNIER, N. SCHUNCK

PHYSIQUE DES ACCÉLÉRATEURS 22

Du velours pour la radiographie éclair bi-impulsionnelle 22

*R. DELAUNAY, C.-M. ALVINERIE, T. D'ALMEIDA, M. RIBIÈRE, R. MAISONNY, B. CADILHON, L. COURTOIS,
I. MOUSSEAU, B. CASSANY, C. VERMARE, J.-M. PLEWA*

MATÉRIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE 24

Vers une meilleure évaluation de la résistance d'une soudure 24

C. CADET, S. FLOURIOT, V. DE RANCOURT, J. BESSON, S. FOREST, P. KERFRIDEN, L. LACOURT

Des éclairs aux mousses métalliques pour le Laser Mégajoule 26

F. DURUT, R. BOTREL, J. PINOT, V. VIGNAL

La projection à froid pour fabriquer des pièces complexes 28

S. LETT, A. QUET, E. MEILLOT, S. HÉMERY, J. CORMIER, P. VILLECHAISE

Impact d'une bille sur un solide : rebond, adhésion
ou désintégration ? 30

L. SOULARD, O. DURAND, T. CARRARD

COMPOSANTS ET ÉQUIPEMENTS ÉLECTRONIQUES 32

Matériaux sous irradiation :
prise en compte des dépôts de surface 32

D. LAMBERT, M. RAINE, Q. GIBARU, C. INGUIMBERT

OPTIQUE ET OPTRONIQUE 34

Un refroidissement liquide pour améliorer la cadence
des lasers de puissance 34

*P.-M. DALBIÉS, N. BLANCHOT, E. BORDENAVE, S. CAVARO, F. LE PALUD, J.-F. LUPI, J. NEAUPOURT,
G. PAQUIGNON*

SCIENCE DU CLIMAT ET DE L'ENVIRONNEMENT 36

Détection des essais nucléaires : vers une meilleure
prise en compte des émissions industrielles 36

S. GENEROSO, P. ACHIM

Simulation numérique de la dispersion de la Covid-19
dans un train 38

P. ARMAND, J. TÂCHE

Quand un volcan fait vibrer l'atmosphère tout entière 40

*C. LISTOWSKI, J. VERGOZ, A. LE PICHON, H. HÉBERT, P. HEINRICH, A. GAILLER, A. DUPONT,
A. PODGLAJEN, V. REY*

À la recherche de l'étincelle initiale des éclairs 42

T. FARGES, I. KOLMASOVÁ, O. SANTOLÍK, S. SOULA, O. BOUSQUET, G. DIENDORFER

CHIMIE 44

Réduction de la toxicité des matériaux de protection thermique 44

D. BRANDT, N. CHAUSSOY, J.-F. GÉRARD

MATHÉMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL 46

Les polycubes, un nouvel outil pour aider
à la simulation numérique 46

F. LEDOUX, D. SOKOLOV, C. BOURCIER

Mieux simuler la dégradation d'un bouclier thermique 48

S. PELUCHON, L. TALLOIS, P. VILLEDIEU

Transport en milieu aléatoire 50

J. DURAND, S. LEMAIRE, M. A. KOWALSKI, C. LARMIER, F. MADIOT, A. ZOIA

2022, le retour à la normale des collaborations nationales et internationales

On croit parfois que la Direction des applications militaires (DAM) du CEA est une entité autonome, qui poursuit des activités confidentielles dans un relatif isolement. Cette méprise tient sans doute au rôle exceptionnel qu'elle occupe au service de la défense et de la sécurité de la France. En se limitant à ses seules responsabilités de maîtrise d'ouvrage, la DAM conçoit, fabrique, met en service puis démantèle les têtes nucléaires françaises ; elle pilote la conception, le développement et la réalisation des chaufferies nucléaires des bâtiments de la Marine nationale ; elle est enfin chargée de l'approvisionnement des matières nucléaires stratégiques pour les besoins de la dissuasion. Comme l'ensemble de ces missions est réalisé dans un respect strict de la protection du secret de la défense nationale, et plus généralement de la protection des données potentiellement proliférantes, on pourrait en conclure que ses interactions avec les communautés nationales et internationales de recherche sont limitées. En réalité, il n'en est rien, l'expérience montre au contraire que ces interactions sont nombreuses et actives.

Cet éditorial ne se prêtant pas à un inventaire exhaustif, je me contenterai ici de rappeler quelques collaborations emblématiques dans lesquelles la DAM s'est engagée ou a récemment encore renforcé son investissement. Ces explications compléteront les nombreux exemples qu'offrent cette année encore les articles de la présente revue *Avancées*.

Dans le domaine du calcul haute performance (HPC), il est connu que la DAM développe et met en œuvre pour ses besoins propres des supercalculateurs en collaboration avec Atos-Bull, et qu'elle partage ensuite l'expérience acquise avec les organismes de recherche et les industriels tant français qu'europeens au sein du Très Grand Centre de calcul (TGCC). Peu de gens savent en revanche que la DAM prend aussi part à des actions de recherche, comme le projet Human Brain. Ce projet vise à simuler le fonctionnement du cerveau humain par la modélisation informatique.

Membre du Specific Grant Agreement avec des organismes allemand, suisse, italien et espagnol, elle participe dans un cadre européen à Fenix, une infrastructure européenne fédérée pour le stockage et le traitement des données installée au TGCC depuis octobre 2020.

Pour ce qui concerne le domaine des lasers de forte énergie, rappelons que le Laser Mégajoule (LMJ) couplé avec le laser à impulsion ultracourte Petal (pour Petawatt Aquitaine Laser) est une installation partiellement ouverte, mise à disposition de la recherche académique à hauteur de 25 % du temps dédié aux expériences. L'association lasers et plasmas (ALP), dont le CEA mais aussi la Région Nouvelle-Aquitaine, l'université de Bordeaux et l'École polytechnique sont membres fondateurs, est chargée d'organiser l'accès de la communauté académique à l'installation LMJ-Petal. Cette ouverture profite bien sûr aux unités mixtes de recherche (UMR) de la DAM que sont le Centre d'études des lasers intenses d'Aquitaine (Celia) et le Laboratoire d'utilisation des lasers intenses (Luli), mais s'étend bien au-delà à des équipes du monde entier. Cet accès est d'autant plus précieux après le





← Délégation de la National Nuclear Security Administration (NNSA) reçue fin 2022 par le Directeur des applications militaires, Vincenzo Salvetti, à l'occasion des 20 ans de l'accord de coopération dans le domaine des sciences fondamentales.

succès retentissant obtenu en décembre 2022 par nos collègues américains sur l'installation NIF (National Ignition Facility) : au sein d'une cible millimétrique, une réaction de fusion nucléaire a dégagé plus d'énergie que celle contenue dans les faisceaux laser qui l'avaient éclairée. Cette étape majeure attendait d'être franchie depuis plus de dix ans.

Les échanges entre les équipes de la DAM et celles de la National Nuclear Security Administration (NNSA) américaine sont portés par trois accords de collaboration internationale. Les deux premiers portent justement sur les thématiques du HPC et des lasers de haute énergie. Le troisième est dévolu aux sciences dites fondamentales : science des matériaux, physique nucléaire, physique des plasmas et physique atomique. Le 20^e anniversaire de cet accord a donné lieu en décembre 2022 à une cérémonie de célébration au centre DAM Île-de-France, en présence d'une délégation de responsables américains des laboratoires de Livermore, de Los Alamos et de la Sandia (voir photographie ci-dessus). Fortes de ces liens étroits, la DAM et la NNSA ont à cette occasion créé le programme Éric-Bauge d'échanges d'étudiants. Il consiste à offrir à des thésards soigneusement sélectionnés des opportunités de stages postdoctoraux dans leurs propres laboratoires ou chez leurs partenaires académiques. Ce programme offre une raison supplémentaire, si besoin était, d'effectuer sa thèse à la DAM.

Pour finir, je tiens à dire un mot du projet Arise qui a regroupé 24 instituts de recherche et universités originaires de dix pays européens. Ce projet a permis de développer une nouvelle plateforme d'observation des processus dynamiques de la moyenne atmosphère avec une résolution spatio-temporelle sans précédent, ce qui sera précieux à la DAM dans le cadre de ses missions de surveillance de l'environnement. Arise a ainsi fédéré la communauté infrason à l'échelle de l'Europe, mais aussi renforcé les liens avec d'autres communautés scientifiques qui, jusqu'à présent, interagissaient très peu. Il a contribué à une production scientifique abondante, avec la publication de plus d'une centaine d'articles et la parution en 2018 d'un ouvrage de synthèse. Il n'est donc pas surprenant qu'en 2022, les travaux d'Élisabeth Blanc, l'experte de la DAM qui a conçu et coordonné ce projet, aient été récompensés par le prix Lamb de l'Académie des sciences. Je lui renouvelle ici toutes mes félicitations.

Ces quelques illustrations montrent bien qu'à la DAM comme ailleurs, il n'est possible de se maintenir au meilleur niveau de la recherche mondiale qu'en s'engageant pleinement dans des collaborations scientifiques aussi exigeantes que passionnantes. Bonne lecture.

Olivier VACUS

Directeur scientifique du CEA - DAM

vie scientifique

Prix et distinctions reçus en 2022

Prix Lamb de l'Académie des sciences

Élisabeth BLANC, conseillère scientifique au CEA – DAM, membre associée de l'université de Versailles-Saint-Quentin, a reçu le 18 octobre le prix Lamb de l'Académie des sciences pour sa contribution à la conception et à l'exploitation du Système de surveillance international de l'Otice, dans le domaine des infrasons, et pour sa conception de l'infrastructure de recherche européenne Arise.

Nomination à l'Editorial Board du Journal of Computational Physics

Pierre-Henri MAIRE a été nommé Associate Editor du *Journal of Computational Physics* (JCP). Cette revue scientifique internationale à comité de lecture est publiée par Elsevier et a été fondée en 1966. Elle couvre tous les domaines des mathématiques appliquées à la physique et, notamment, l'étude et la mise au point des méthodes numériques sous-jacentes aux codes de simulation.

Prix de la meilleure thèse lors de la conférence Optical Interference Coatings

Lors de la conférence *Optical Interference Coatings* qui a eu lieu à Whistler au Canada du 19 au 23 juin, **Saaxewer DIOP**, doctorant au Cesta, a été récompensé par le prix Angus-Macleod de la meilleure présentation d'étudiant. Ses travaux, conduits dans le cadre d'une collaboration avec l'Institut Fresnel de l'université Aix-Marseille,

concernent l'optimisation de la tenue au flux laser des réseaux de compression du laser Petal.

Prix Étudiant à l'Aeroballistic Range Association

Théo BUSIER a reçu le prix Étudiant de l'ARA (Aeroballistic Range Association) pour les travaux rapportés dans sa publication « Study and design of a heating/cooling system devoted to particle velocity measurement using emv gauges ».

Poster primé

Thomas BOURDEAU, doctorant au Laboratoire des composites thermostructuraux (LCTS) de Bordeaux sur la thématique « Étude de matériaux ultraréfractaires pour la réalisation de composites UHTC », a reçu l'Outstanding Student Poster Award lors de sa participation au congrès Ultra-High Temperature Ceramics: Materials For Extreme Environment Applications V, qui s'est déroulé du 5 au 8 juin à Snowbird dans l'Utah.

Colloques organisés en 2022

Workshop Abinit

La seconde partie du 10^e workshop des développeurs du code Abinit, engagé virtuellement en 2021, s'est déroulée du 16 au 19 mai dans le Morbihan. Le code Abinit est un logiciel développé dans le cadre d'un projet collaboratif international, dont le centre DAM Île-de-France est l'un des leaders. Il permet de calculer les propriétés des matériaux à l'échelle microscopique à l'aide de théories dites premiers principes (sans apport explicite de l'expérience). Au CEA – DAM, Abinit sert à obtenir des données de base utilisées dans les équations d'états et à mieux comprendre les phénomènes microscopiques, dans la matière de l'état solide à l'état plasma.

Colloque pour les 10 ans du Cenalt

Un colloque international a été organisé les 29 et 30 septembre au centre DAM Île-de-France à l'occasion des 10 ans d'exploitation du Centre national d'alerte aux tsunamis (Cenalt), opérationnel depuis le 01/07/2012. Une quarantaine de participants ont présenté les bilans de fonctionnement des centres d'alerte de la région de l'Atlantique Nord-Est et Méditerranée, ainsi que du centre d'alerte

de Tahiti. Des sessions thématiques ont abordé les outils de simulation numérique, l'estimation de l'aléa, et le tsunami déclenché suite à l'explosion du volcan des Tonga.

Workshop AeroThermoDynamics & Design for Demise (ATD3)

Le workshop ATD3 s'est déroulé à l'université de Bordeaux du 27 au 28 octobre. Cette manifestation organisée par l'association HyFAR-ARA* sous l'égide de l'Esa (Agence spatiale européenne) et du Cnes a rassemblé une soixantaine de scientifiques travaillant sur la retombée des débris satellitaires. Les participants sont issus aussi bien du monde universitaire que des agences étatiques telles que le Cnes, le Cira (Centre italien de recherche aérospatiale) et le DLR (Deutsches Zentrum für Luft und Raumfahrt) ainsi que de l'industrie (ArianeGroup). Le Cesta a contribué de manière significative en présentant ses travaux dans le domaine de la rentrée atmosphérique pour les écoulements raréfiés et l'ablation.

* HyFAR-ARA est une association créée en 2019, présidée par le CEA (Cesta) et dont la vocation est de promouvoir les activités de R&D dans le domaine de la rentrée atmosphérique. Outre le CEA, les adhérents actuels sont ArianeGroup, le CNRS, l'Inria, les universités de Bordeaux et de Limoges. L'Onera doit rejoindre cette association prochainement.

Journée thématique sur la décomposition de domaine pour la résolution des équations de Maxwell

Lors de cette journée, organisée par le centre du Cesta à l'Institut laser et plasmas avec le soutien du Club des Partenaires du GDR ondes, neuf exposés ont été présentés à des participants académiques et industriels. Les discussions lors d'une table ronde ont porté sur l'opportunité de créer un

groupe de réflexion sur ce sujet intéressant une communauté française qui aura ainsi l'occasion de se réunir. Ce groupe de réflexion portera sur l'échange de méthodes et de développements en décomposition de domaines pour résoudre des problèmes en électromagnétisme.

Science au musée

Émeric FALIZE (DAM Île-de-France) a mis en valeur les travaux du CEA – DAM auprès du grand public. D'une part, suite à ses travaux d'épistémologie sur le lien entre Georges Louis Leclerc de Buffon (savant du siècle des Lumières) et l'astrophysique de laboratoire, il a collaboré à l'exposition *Penser la nature* accessible depuis juillet 2022 au musée et parc Buffon de Montbard. Une présentation du Laser Mégajoule (LMJ) et les cibles du jalon Fusion tiré sur le LMJ en 2019 et du projet Polar, réalisées par le laboratoire des cibles du centre de Valduc, font partie de la scénographie du musée. D'autre part, à l'occasion des Journées du patrimoine, il a reproduit l'expérience de l'Âge de la Terre réalisée au XVIII^e siècle par Georges Louis Leclerc de Buffon. Toute première expérience d'astrophysique de laboratoire, elle consistait à étudier le refroidissement de boulets de différentes tailles. Fruit d'une collaboration avec le musée et parc Buffon de Montbard, cet événement a été sélectionné par *Le Monde* et *Le Parisien* comme une manifestation à ne pas manquer.

2^e journée technique du génie parasismique

Après le succès de la première édition de 2018, la manifestation est reconduite pour rassembler l'ensemble des acteurs (constructeurs, maîtres d'ouvrage, maîtres d'œuvre, chercheurs, etc.) impliqués sur le plan national et échanger sur le thème de la constructibilité des structures du génie

civil nucléaire : innovation et nouveaux challenges. Garantir la sûreté des installations nucléaires, répondre à des niveaux d'exigence associés toujours plus élevés est un défi technologique et économique. C'est pourquoi l'optimisation de ces structures complexes est un enjeu majeur plaçant en son centre l'innovation et le développement des matériaux et des procédés constructifs. Cette deuxième journée technique, organisée par le centre DAM Île-de-France, s'est déroulée le 24 novembre, au Très Grand Centre de calcul (TGCC).

7^{es} journées Vélocimétrie hétérodyne - Expérimentations matériaux sous choc

Le centre de Gramat a organisé la 7^e édition des journées Vélocimétrie hétérodyne - Expérimentations matériaux sous choc. Cet événement, organisé conjointement par le CEA - DAM et le groupe de recherche CNRS ACO-Chocolas, a rassemblé près de quatre-vingts personnes, industriels, académiques et CEA - DAM. Originellement dédiées à la technologie de vélocimétrie hétérodyne, ces journées se sont élargies au fil des années à toutes les thématiques couvertes par la communauté française de physique des chocs (chocs laser, impacts, détonique, plasmas, etc.) et aux moyens de mesure associés (VH, Visar, capteurs, caméras rapides, imagerie X).

Journées Matériaux numériques

La 5^e édition des journées Matériaux numériques, organisée par le centre du Ripault, s'est déroulée à Tours du 27 au 29 septembre. Elle a accueilli une cinquantaine de membres de la communauté nationale œuvrant dans tous les domaines concernés par la représentation numérique 3D de la microstructure des matériaux dans le but de comprendre et prévoir leur comportement. Cette année, une attention particulière a été portée aux avancées dans le cadre du dialogue essai-calcul, de la modélisation basée image et de l'apport de l'intelligence artificielle dans le traitement de gros volumes de données et le monitoring de procédés de fabrication additive. Le CEA - DAM a fortement contribué à la réussite de ces journées au travers de sept présentations (centres du Cesta, DAM Île-de-France, du Ripault et de Valduc). Cette démarche innovante doit aller en s'amplifiant pour accélérer les développements de nouveaux matériaux pour les besoins des programmes de la DAM.

Journée thématique sur la projection thermique

Une journée thématique sur l'alliance des procédés de projection thermique et des céramiques a été organisée par le centre du Ripault à Tours les 21 et 22 septembre, sous l'égide du Groupe français des céramiques et de la fédération de recherche MatV2L. Cette manifestation, réunissant des acteurs académiques et industriels de la communauté de projection thermique en France, a été l'occasion de poser un regard croisé sur les développements et applications actuels. Elle a notamment souligné

l'importance de l'intégration d'outils de diagnostic au sein du procédé de projection thermique, virage d'ores et déjà amorcé au centre du Ripault pour la réalisation des revêtements identifiés pour les programmes futurs.

Journées 24h de l'impression 3D

La première édition des journées 24H3D a été accueillie les 29 et 30 avril par Polytech Tours, avec l'ambition de fédérer les acteurs régionaux autour des technologies de fabrication additive. Le centre du Ripault, qui participait à l'organisation, y a animé un stand sur les matériaux organiques et céramiques obtenus par les technologies de stéréolithographie ou de dépôt de fil fondu (FDM, pour *Fused Deposition Modeling*) et réalisé des structures composites alvéolaires. Une originalité de la manifestation : un concours d'impression 3D sur 24 heures mettant en compétition des lycéens et étudiants dans deux épreuves réalisables sur une imprimante 3D de technologie fil fondu. Le sujet, élaboré par le centre du Ripault sur le principe de tenségrité (faculté d'une structure à se stabiliser par le jeu des forces de tension et de compression qui s'y répartissent), a permis aux 15 équipes inscrites au concours de rivaliser en créativité.

Workshop DAM-DES : calcul haute performance pour les matériaux

Après deux années d'interruption en raison de la situation sanitaire, la série de workshops DAM-DES sur le calcul haute performance (HPC) a repris cette année avec comme thème les matériaux. Le workshop s'est tenu en résidentiel au château de Cadarache du 19 au 22 septembre. Les méthodes de simulation couvertes allaient des calculs de structure électronique à la mécanique des milieux continus en passant par les modèles de cinétique, la méthode Calphad et l'apport de l'apprentissage automatique. Différentes thématiques avaient été identifiées pour construire le programme : l'endomagement, la plasticité, la thermochimie et la cinétique, et concernaient des matériaux variés (alliages métalliques et oxydes d'actinides, matériaux de structure).

6^e forum Métrologie DAM

Le 6^e forum Métrologie de la DAM s'est tenu au Très Grand Centre de calcul au centre DAM Île-de-France les 4 et 5 octobre avec pour thème « La métrologie au service de la garantie ». Ce forum, qui regroupait des contributions des cinq centres DAM, avait pour enjeu de favoriser les échanges sur la thématique de la maîtrise des incertitudes de mesure, dans un objectif de garantie des performances, de la sûreté, du fonctionnement des installations, de la surveillance, etc. Le forum s'est articulé autour de six sessions thématiques, d'un atelier posters et de visites d'installations proposées par plusieurs départements du centre DAM Île-de-France.

Faits marquants de l'année

Millième tir de puissance au Laser Mégajoule !

Le 21 novembre a eu lieu le millième tir de puissance au Laser Mégajoule (LMJ) sur le centre du Cesta. Il est le résultat de huit années d'exploitation de l'installation, destinées à la réalisation des expériences portées par les programmes de simulation de la DAM et ceux d'ouverture académique, ainsi qu'aux tests à pleine puissance nécessaires à la mise en service des faisceaux laser LMJ et Petal. Depuis sa mise en exploitation en 2014, le LMJ poursuit sa montée en puissance progressive. Fin 2022, 16 des 22 chaînes laser étaient montées, dont 11 sont en service.

Inauguration du supercalculateur Exa 1

Monsieur Sébastien Lecornu, ministre des Armées, a inauguré le 13 septembre le supercalculateur Exa 1 sur le centre DAM Île-de-France. Codéveloppé avec Atos, il répond aux besoins de simulation des programmes nucléaires de défense pilotés par la DAM, qui nécessitent des calculateurs relevant de multiples défis technologiques : traiter et gérer les flux massifs de données, accroître la performance, l'efficacité, la modularité et la disponibilité des architectures informatiques tout en réduisant significativement la consommation énergétique. Exa 1 est ainsi un concentré d'innovations au meilleur niveau mondial.

Aux origines de la luminosité extrême des grands cataclysmes cosmiques

Les sursauts gamma résultent de phénomènes cataclysmiques liés à l'implosion d'une étoile supermassive ou à la collision d'astres compacts (étoiles à neutrons ou trous noirs). Selon le paradigme actuel, une onde de choc, déclenchée par l'explosion, balaie le milieu extérieur à une vitesse proche de celle de la lumière, chauffe et accélère les électrons présents, qui produisent alors le rayonnement observé. L'extrême luminosité de ces événements tient aux énergies considérables que les électrons atteignent lors de leur traversée de l'onde de choc, par un mécanisme longtemps resté mystérieux. Une équipe de chercheurs de l'université de Princeton, de l'Institut d'astrophysique de Paris et du centre DAM Île-de-France vient de lever le voile sur les processus d'accélération électronique dans ces ondes de choc, expliquant et confirmant leur grande efficacité radiative. Cette description théorique a été corroborée par des simulations *ab initio* qui recréent les conditions extrêmes de ces milieux astrophysiques. Ces derniers s'apparentent aux plasmas produits par des lasers à ultra-haute intensité, comme le laser Petal du CEA - DAM.

Livre paru en 2022

« The interferometric phase: unwrapping and closure phase » - Chapitre 1

B. Pinel-Puysségur (CEA - DAM), F. De Zan,

J. Champenois (CEA - DAM) dans O. Cavalié and E. Trouvè (éd.)

Surface displacement measurement from remote sensing images, ISTE-Wiley, <https://doi.org/10.1002/9781119986843.ch6>.

Nouveaux accords de partenariat en 2022

Nouvelle méthode Monte-Carlo pour la résolution d'une équation de transport

Une collaboration entre le CEA – DAM et l'université Paris-Dauphine a été mise en place autour des méthodes Monte-Carlo pour la résolution d'une équation de transport. Largement employées dans les codes de simulation du CEA – DAM, ces méthodes peuvent s'avérer coûteuses, en particulier dans les milieux optiquement épais. Pour ces milieux, une analyse asymptotique montre qu'on peut utiliser une équation de diffusion, accélérant ainsi sensiblement la résolution. Une difficulté est alors de traiter, au sein d'une même simulation, des milieux épais dans l'approximation de la diffusion et d'autres milieux sans approximation. Les différentes approches existantes conduisent généralement à une perte de précision. L'objectif de cette collaboration est de proposer des axes d'amélioration.

Création du groupement d'intérêt scientifique Lartisste

Le groupement d'intérêt scientifique (GIS) Lartisste, acronyme de Laboratoire de Recherche en Traitement des Incertitudes par apprentissage statistique, pour la Sécurité, la conception et la Transition Énergétique, a été créé en octobre pour une durée de quatre ans. Il vise à structurer des actions dans le domaine de la quantification des incertitudes, à l'interface des mathématiques, des statistiques, de la science des données, de l'intelligence artificielle, de l'algorithmique et de la modélisation. Le GIS rassemble l'université Paris-Saclay, l'ENS Paris-Saclay, CentraleSupélec, AgroParisTech, l'institut DataIA, et de nombreux acteurs industriels et de la recherche tels que, EDF R&D, Inria, Safran, etc. Le CEA y est représenté par quatre entités, dont une est le centre DAM Île-de-France.

Projet ANR FemTraXS

Les lasers à impulsion ultrabrève permettent de créer et d'étudier la matière dans un régime appelé dense et tiède. Ils permettent également de créer des sources ultra-intenses de rayonnement X d'une durée inférieure à la picoseconde, offrant ainsi la possibilité de réaliser des expériences inédites de type pompe-sonde. Le projet FemTraXS, pour Femtosecond phase TRAnsitions with X-ray absorption

Spectroscopy, financé par l'Agence nationale de la recherche (ANR) et réunissant le centre DAM Île-de-France, le Laboratoire d'optique appliquée (LOA) et l'unité mixte de recherche Celia, vise à utiliser ce principe pour étudier la dynamique des changements d'état de différents matériaux dans le régime dense et tiède grâce à la spectroscopie d'absorption du rayonnement X.

Projet ANR Pacte-Espace

Piloté par le centre DAM Île-de-France, en collaboration avec le Laboratoire de physique des plasmas (LPP), l'Institut de recherche en astrophysique et planétologie (Irap) et Airbus Defense and Space (Airbus-DS), le projet Pacte-Espace, pour Physique ACTiVe des particules énergétiques, des ondes, et de leurs interactions dans l'ESPACE proche Terre, a été sélectionné par l'Agence nationale de la recherche (ANR) dans le cadre d'un Accompagnement spécifique des travaux de recherches et d'innovation défense (Astrid). Visant à étudier la dynamique d'électrons énergétiques et d'ondes dans l'espace proche Terre lors d'événements naturels et d'activités humaines, ce projet permettra de suivre et de progresser dans le domaine des activités électroniques dans l'espace en utilisant la synergie entre les observations physiques par satellites, la théorie et la simulation numérique.

Projet ANR LiLi

Dans le cadre du prolongement du projet Structure et dynamique des fluides moléculaires simples sous conditions extrêmes de pression et de température (Moflex), financé par l'Agence nationale de la recherche (ANR), le projet LiLi, pour *Liquid-Liquid transition, polymorphism and second critical point in dense liquids*, bénéficie également d'un financement de l'ANR. Ce projet ayant pour partenaires le centre DAM Île-de-France, l'European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) et l'Institut de minéralogie, de physique des matériaux et de cosmochimie (IMPMC) a pour objectif d'étudier le polymorphisme dans les fluides moléculaires denses. Un but important est de mettre en évidence des transitions de phase fluide-fluide sous conditions extrêmes de pression et de température. Il s'appuie sur la spectroscopie Raman, la spectroscopie Brillouin et la diffraction de rayonnement X par un échantillon de matière comprimé dans une cellule à enclumes de diamant et chauffé par un faisceau laser.

Projet ANR Photonastic

En subissant des déformations prédéterminées et répétées sous irradiation, les matériaux photonastiques convertissent l'énergie lumineuse en énergie mécanique. Le projet Photonastic, pour la modélisation des matériaux photonastiques de l'échelle

moléculaire à l'échelle mésoscopique, est financé par l'Agence nationale de la recherche (ANR) et réunit le centre DAM Île-de-France et l'Institut Chemistry for Life and Health Sciences (i-CLeHS) de Chimie ParisTech. Il vise à identifier les paramètres, de l'échelle moléculaire à supramoléculaire, impliqués dans la réponse mécanique de tels matériaux (ici un film constitué de molécules photochromes dispersées dans une matrice polymère). Il s'agit d'étudier les mécanismes multiéchelles impliqués : la photoréaction ultrarapide au niveau moléculaire, puis le transfert de quantité de mouvement vers la matrice environnante et, enfin, la relaxation à long terme du polymère à l'origine de déformations macroscopiques.

Lancement du LRC Xeres

Lancé en avril pour une durée de cinq ans, le laboratoire de recherche conventionné (LRC) Xeres, pour eXpérimentations à Échelle Réduite pour la Modélisation des Effets de Souffle, rassemble les centres de Gramat, DAM Île-de-France et le laboratoire Prisme de l'Insa Val de Loire. Ce LRC a pour vocation de favoriser les travaux de recherche sur l'interaction souffle-structure, suivant les thèmes de la modélisation numérique, du phénomène de combustion ou encore de l'influence de l'environnement. À ce titre, le laboratoire Prisme met en œuvre sa plateforme d'expérimentation à échelle réduite assurant une propagation de l'onde de souffle, suivant des besoins partagés avec le CEA. Les six thématiques du LRC Xeres sont : incertitudes et évaluation des capteurs et de la chaîne de mesure ; validation et extension des abaques de similitude ; influence des conditions d'environnement ; interaction souffle-structure ; modélisation numérique ; phénomène de combustion.

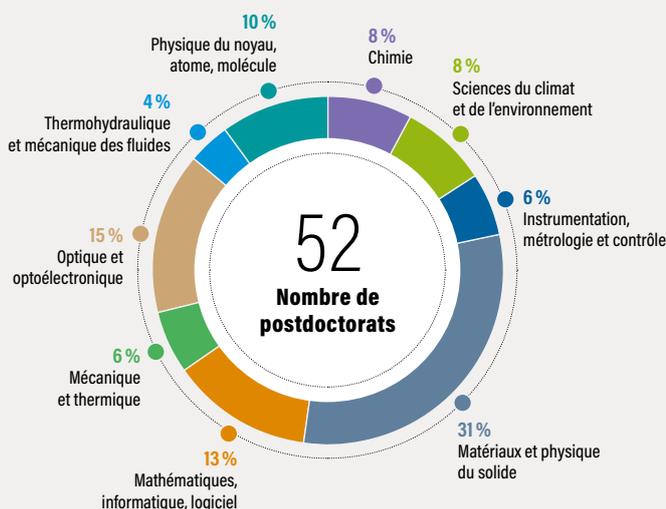
Gradients induits par le vieillissement thermique hétérogène d'un joint élastomère sous transfert de chaleur et des contraintes mécaniques par deux interfaces distinctes

Sujet de thèse Labex : Institut PPrime – LaMé – Université de Poitiers. Ce projet se focalise sur les joints élastomères de type RTV, vulcanisés à froid, chargés et quasi incompressibles, utilisés à la DAM pour combler les jeux entre des matériaux polymères et leurs enveloppes métalliques, sujets à des variations de contraintes thermomécaniques. Ces variations provoquent des transformations physico-chimiques de la matière, l'apparition de gradients et potentiellement la création d'une interphase. La caractérisation de cette hétérogénéité nécessite de travailler *in situ* sur le système « sandwich » vieillissant dans des conditions expérimentales réalistes et de prendre en compte les couplages thermomécaniques.

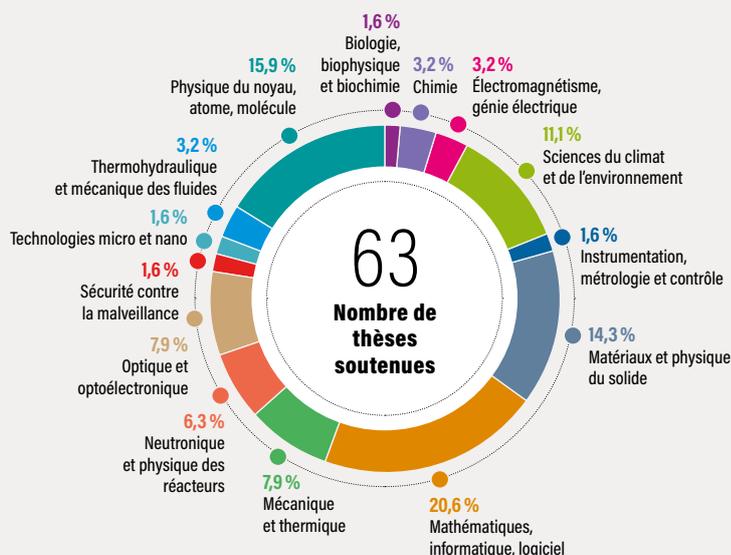
Thèses soutenues et en préparation - Postdoctorats

En 2022, 172 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 ; 63 l'ont soutenue au cours de l'année. Par ailleurs, 52 docteurs étaient en contrat postdoctoral (voir listes des thèses soutenues et des postdoctorats).

Répartition des postdoctorats par domaine scientifique et technique



Répartition des thèses soutenues par domaine scientifique et technique



Publications scientifiques et techniques

En 2022, le CEA - DAM a publié 403 articles et comptes rendus de conférence dans des journaux à comité de lecture, ainsi que 29 comptes rendus de conférence dans un livre ou dans une série (ISI-Web of Science, 08/06/2023).

Habilitations à diriger les recherches (HDR)

6

Habilitations à diriger les recherches soutenues en 2022.

Christophe DENOUAL

Centre DAM Île-de-France
Université Paris-Saclay
Spécialité : matériaux modélisation simulation

Jean-Bernard MAILLET

Centre DAM Île-de-France
Université Paris-Saclay
Spécialité : matériaux modélisation simulation

Alexandre ALLEMAND

Centre du Cesta
Université de Bordeaux
Spécialité : matériaux céramiques

Jean-Paul EBRAN

Centre DAM Île-de-France
Université Paris-Saclay
Spécialité : physique nucléaire théorique

Sébastien FAURE

Centre de Valduc
Université Bourgogne-Franche-Comté
Spécialité : chimie des actinides

Laurent COLOMBET

Centre DAM Île-de-France
Université Paris-Saclay
Spécialité : développement codes et calculs

Thèses de doctorat soutenues en 2022

BIOLOGIE, BIOPHYSIQUE ET BIOCHIMIE

Nicolas CLAVERIE, *Olfaction active bioinspirée de vapeurs pour la détection de substances spécifiques*, université de Tours.

CHIMIE

Mathilda MAURY, *Procédure d'estimation rapide des propriétés d'inflammabilité des liquides*, université de Tours.

Romain CLAVEAU, *Modélisation de la décomposition des matériaux énergétiques et de leurs sensibilités*, université de Tours.

ÉLECTROMAGNÉTISME, GÉNIE ÉLECTRIQUE

Laurine CUIROS, *Modélisation comportementale des effets de destruction d'alimentations d'équipements électroniques soumises à des impulsions électriques conduites forts niveaux*, université de Bordeaux.

Adrien LAFFONT, *Contribution à l'étude théorique, numérique et expérimentale d'une antenne VHF miniature exploitant une décharge plasma*, université de Toulouse.

SCIENCES DU CLIMAT ET DE L'ENVIRONNEMENT

Quentin CAUVET, *Étude non linéaire d'instabilité d'interchange, de type Rayleigh-Taylor, dans le milieu ionosphérique*, université Paris-Saclay.

Simon BAYLE, *Étude de la spéciation de l'uranium d'origine anthropique dans un sol naturel par approche multitechnique*, université de Nice.

Aurélien DIACRE, *Développement de méthodes d'identification et de caractérisation des particules contenant des actinides émis par une installation nucléaire à partir d'échantillons de sols et de sédiments; application au cas de l'accident de la centrale de Fukushima et étude des implications en termes de migration et du devenir des radionucléides*, université Paris-Saclay.

Annie ZELIAS, *Méthode des rayons complexes pour la propagation infrasonore. Application au bang sonique d'un météoroïde*, Sorbonne Université.

Marine LAPORTE, *Contribution à l'amélioration de la détermination de la profondeur hypocentrale à distance télévisuelle*, université de Toulouse.

Aurore CAUQUIS, *Développement d'un modèle numérique de propagation des tsunamis et de déferlement des vagues sur les récifs coralliens de Polynésie*, université de Bordeaux.

Antoine RIMBOUD, *Modélisation de la diffusion de la lumière des éclairs par les nuages et applications aux observations spatiales photométriques*, université de Lille.

INSTRUMENTATION, MÉTROLOGIE ET CONTRÔLE

Kélian THIS, *Extraction non paramétrique de l'information issue de spectres : application à la spectrométrie gamma*, université Paris-Saclay-Centrale Supélec.

MATÉRIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE

Quentin GIBARU, *Modèle de transport d'électrons basse énergie pour les diélectriques en application spatiale*, université de Toulouse.

Alois CASTELLANO, *Étude des effets de température sur les combustibles nucléaires par une approche ab initio*, Sorbonne Université.

Robinson OUTEROVITCH, *Calcul des interactions électroniques pour des systèmes fortement corrélés*, université Paris-Saclay.

S. SELVA*, *Corrosion généralisée, corrosion sous contrainte et fragilisation par l'hydrogène des alliages de titane en milieu primaire de réacteur à eau pressurisée*, université Montpellier.

Jérémy VICH, *Intégration d'un système de préchauffage sur générateurs de hautes puissances pulsées et optimisation des capacités de diagnostic pour l'étude du comportement dynamique des matériaux*, université de Reims Champagne-Ardenne.

Nicolas FAVART, *Étude des mécanismes d'oxydation du plutonium*, université Bourgogne-Franche-Comté.

Samuel LETT, *Projection de Ti-6Al-4V par Cold Spray pour un objectif de fabrication additive : contraintes résiduelles, microstructures et propriétés mécaniques*, université de Poitiers.

Clément GUÉRIN, *Élaboration d'une matrice aluminosilicate de baryum pour la réalisation d'un composite de type oxyde/oxyde*, université de Bordeaux.

Arthur RACOT, *Tenue à la corrosion et à la corrosion sous contrainte d'aciers inoxydables élaborés par fabrication additive*, université de Bordeaux.

MATHÉMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL

Théo JEANNEAU, *Étude et validation d'une approche cinétique couplée pour la modélisation du transfert multimodal et multiéchelle de chaleur en milieu hétérogène*, université de Bordeaux.

Corisandre LAMY, *Étude de l'utilisation de réseaux de neurones artificiels pour des calculs de haute performance dédiés à la modélisation du transport de sources énergétiques*, université de Bordeaux.

Paul NOVELLO, *Contributions à la combinaison entre apprentissage profond supervisé et calcul scientifique, application à la simulation de dynamique des fluides*, École polytechnique.

Julien BOISSY, *Cartographie micro-onde et quantification d'incertitudes par inversion-segmentation bayésienne et échantillonnage de Gibbs*, université de Bordeaux.

Samuel GAUCHER, *Modélisation de la SER d'un objet recouvert d'un métamatériau*, université de Limoges.

Agnès CHAN, *Méthodes numériques innovantes pour l'aérodynamique supersonique sur maillages non structurés*, université de Bordeaux.

François PROTAIS, *Maillage à dominante polycube*, université de Lorraine.

Simo CALDERAN, *Génération interactive de maillages hexaédriques structurés par blocs*, université Paris-Saclay.

Florian REYNIER, *A study on progression of MPI communications using dedicated resources*, université de Bordeaux.

Théo SAILLANT, *Méthodes d'apprentissage statistique en analyse des signaux issus de calculateurs HPC*, université Paris-Saclay.

Van-Man NGUYEN, *Compile-time validation and optimization of MPI nonblocking communications*, université de Bordeaux.

Olivier MICHEL, *Analyse mathématique et numérique d'un modèle quasi cinétique pour la fermeture des équations de la MHD résistive en régime non local*, université Paris-Saclay.

Baptiste KERLEGUER, *Métamodèles multifidélité à sorties fonctionnelles pour l'analyse et la quantification des incertitudes de modèles complexes*, École polytechnique.

MÉCANIQUE ET THERMIQUE

Thibault RODRIGUEZ, *Modélisation géométrique pour l'optimisation et la simulation basée sur un modèle CAO*, université de Bordeaux.

Alexandre RIOT, *Étude du comportement dynamique de matériaux architecturés issus de fabrication additive*, université de Bordeaux ENSAM.

Marie PIROTAIS, *Étude du comportement en fatigue à grand nombre de cycles de structures lattice réalisées par fabrication additive*, université de Bordeaux ENSAM.

Sarah MILHOMME, *Influence du procédé sur les propriétés mécaniques et microstructurales de pièces en Ti-6Al-4V issues de fabrication additive (LMD et SLM)*, université de Bordeaux ENSAM.

Clément CADET, *Rupture ductile d'un milieu poreux aléatoire : Approche numérique et application aux défauts de soudure*, Mines ParisTech.

NEUTRONIQUE ET PHYSIQUE DES RÉACTEURS

Corentin HOUPERT, *Problèmes inverses pour la neutronique aléatoire*, Institut polytechnique de Paris.

Louis BERRY*, *Analyse des mesures locales de flux de neutrons pour la validation des nappes de puissances*

finies dans les petits cœurs de réacteur à eau, université de Toulouse.

Paul FERNEY*, *Développement de la modélisation neutronique de transitoires pour des cœurs de petite taille fortement hétérogènes*, université Aix-Marseille.

T. VITAL*, *Modélisation du comportement physico-chimique des pollutions dans le circuit secondaire des réacteurs*, université Paris Saclay.

OPTIQUE ET OPTOÉLECTRONIQUE

Charles BOUYER, *Impact du profil temporel sur l'endommagement laser des composants de fin de chaîne en silice du LMI*, université Aix-Marseille.

Étienne POEYDEBAT, *Conception et réalisation d'un oscillateur Mamyshev fibré pour la nouvelle génération de pilote de l'installation PETAL*, université de Lille.

Saaxewer DIOP, *Tenue au flux laser en régime sub-picoseconde de composants multicouches pour la compression et le transport des installations pétawatts*, université Aix-Marseille.

Mikael TACU, *Théorie cinétique non linéaire des ondes plasma électroniques et application à la diffusion Raman stimulée*, université Paris-Saclay.

Amira GUEDICHE, *Caractérisation de matériaux utilisés pour atténuer la densité de dommages lasers induits par les lasers de puissance*, université de Tours.

PHYSIQUE DU NOYAU, ATOME, MOLÉCULE, PLASMAS

Thibault GOUDAL, *Modélisation et caractérisation expérimentales des instabilités hydrodynamiques au front d'ablation dans les premiers instants d'irradiation laser en attaque directe*, université de Bordeaux.

Adrian GROLLEAU, *Étude expérimentale et numérique des propriétés hors-équilibre de métaux dans le régime dense et tiède à l'échelle femtoseconde*, université de Bordeaux.

Jeoffroy VIDALOT, *Dosimétrie par fibre optique d'installations d'irradiation expérimentales*, université de Lyon.

David TORDEUX, *Modélisation de la physique atomique et du transport radiatif dans un code particle-in-cell*, université Paris-Saclay.

Valeria OSPINA-BOHORQUEZ, *Experimental and numerical investigations on ion acceleration from near-critical gas targets*, université de Bordeaux.

Florian MERCIER, *Description globale de la radioactivité nucléaire et des états clusters dans le cadre des approches relativistes de l'énergie fonctionnelle de la densité*, université Paris-Saclay.

Virginia BRESCI, *Physique de la dissipation dans les nébuleuses de pulsar et accélération de particules dans les écoulements relativistes*, Paris Sciences et lettres Université.

Victor TRANCHANT, *Nouvelle classe d'expériences d'astrophysique de laboratoire : application aux processus d'accrétion autour des étoiles à neutrons*, Paris VI Sorbonne Université.

Ronan DEVRIENDT, *Étude numérique et expérimentale de l'absorption laser dans un plasma par Bremsstrahlung inverse*, École polytechnique.

Augustin BLANCHET, *De la surface au cœur des étoiles : vers une modélisation unifiée de la matière condensée aux plasmas*, université Paris-Saclay.

SÉCURITÉ CONTRE LA MALVEILLANCE

Mehdi SLIMANI, *Validation numérique et expérimentale d'une approche de modélisation lagrangienne à réponse rapide pour des rejets de substances dangereuses en milieu industriel ou urbain*, INSA Lyon (membre université de Lyon).

TECHNOLOGIES MICRO ET NANO

Hugo DEWITTE, *Effets des hautes doses de radiation et étude des fuites de jonction dans les technologies CMOS pour applications analogiques*, université de Toulouse.

THERMOHYDRAULIQUE ET MÉCANIQUE DES FLUIDES

Clément CAILLAUD, *Étude des effets de rugosité et de courbure de paroi sur la transition en couche limite supersonique*, université de Poitiers.

Mathilde CAVELIER, *Étude expérimentale et numérique des zones de mélanges turbulentes soumises à des effets de flottaison*, École centrale de Lyon.

* Thèse préparée à la Direction de la recherche fondamentale du CEA.

Postdoctorats en cours en 2022

CHIMIE

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

Martin LEVIER, Couplage EC-ICPMS pour la datation directe par mesure quasi simultanée du père et du descendant : applications aux couples Pa-U et Pu-U et pour la mesure isotopique d'échantillons de Mox, DAM Île-de-France.

Gabriel GAIFFE, Caractérisation de polluants organonitrés dans les sols et les aquifères, DAM Île-de-France.

Lavinia STANCAMPIANO, BIOMIM'HUMIQUE : Une approche biomimétique écordable pour la remédiation raisonnée de sites pyrotechniques pollués, DAM Île-de-France.

SCIENCES DU CLIMAT ET DE L'ENVIRONNEMENT

Martin COLVEZ, Effet des hétérogénéités et de la gravité sur les ondes sismiques : approche Galerkin discontinu, DAM Île-de-France.

Benjamin JEANNOT, Modélisation hydrogéologique d'un aquifère calcaire fissuré : double porosité et transport, DAM Île-de-France.

Jérôme AUBRY, Réponse d'instabilité gravitaire à des sollicitations statistiques et dynamiques. Application à l'atoll de Mururoa (Polynésie française), DAM Île-de-France.

Samuel KRISTOFFERSEN, Amélioration des stratégies de déploiement de capteurs infrasonores par étalonnage sur site, DAM Île-de-France.

MATÉRIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE

Clémentine BIDAUD, Développement et optimisation de matériaux fibreux pour une isolation haute température, Le Ripault.

Julien DRIEU LA ROCHELLE, Caractérisations microstructurales de composites à renfort carbone, Le Ripault.

Félix BUNEL, Élaboration par impression 3D et étude de composites à matrice céramique, Le Ripault.

Johann COLAS, Étude du comportement thermomécanique des composites C/SiC, Le Ripault.

Louise SEVIN, Élaboration et étude de céramiques monolithiques multiphasées, Le Ripault.

Benjamin WASILEWSKI, Développement et validation d'une technique d'analyse par spectrométrie de masse (GD-MS) sur échantillons céramiques, Le Ripault.

Camille MEHAULT, Comportement en entreposage de produits contenant des actinides : étude des dégagements gazeux, Valduc.

Julien MONNIER, Études expérimentale et numérique du vieillissement thermique de l'alliage inoxydable austénitique 316B, Valduc.

Benjamin DUFOUR, Phénoménologie des interactions de plasmas en milieu liquide : application à la fabrication de matériaux pour les cibles laser, Valduc.

Adrien FOURMONT, Mesures expérimentales de capacités calorifiques, de coefficients de diffusion sur plutonium pur et alliages et modélisation de la diffusion dans ces alliages, Valduc.

Corentin PERDERISET, Étude in situ des mécanismes d'adsorption de molécules gazeuses et d'apparition de produits de corrosion sur matériaux métalliques par PM-IRRAS (spectroscopie infrarouge de réflexion-absorption par modulation de polarisation), Valduc.

Alexis FORESTIER, Construction d'un banc de diffusion Brillouin sous chauffage laser pour la mesure de l'équation d'état des prodets : Mesure de la vitesse du son dans quelques fluides moléculaires simples H₂O, N₂ et CO₂ constitutifs des prodets, DAM Île-de-France.

Dorota GOTFRYD, Les forces atomiques pour PAW+DMFT, DAM Île-de-France.

Oliviero BISTONI, Couplage électron-phonon en utilisant la dynamique moléculaire basée sur la DFT, DAM Île-de-France.

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

Cintia HARTMAN, Modélisation multiéchelle des électrodes de piles à combustibles et électrolyseurs à oxyde solide, DAM Île-de-France.

MATHÉMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL

Thibault CHARLET, Analyse numérique de l'extension d'une méthode de contrôle non destructif à la prise en compte de matériaux complexes, Cesta.

Camille PALMIER, Traitement SLAM pour la navigation aidée par le terrain, Cesta.

Sixtine MICHEL, Développement de méthodes numériques innovantes dédiées à la simulation du comportement dynamique de matériaux sous sollicitations intenses, Cesta.

Camille GOUIN, Modélisation d'écoulements hypersoniques instationnaires, Cesta.

Alessandra DEL GROSSO, Propriétés et extension d'une méthode volume fini multidimensionnelle pour l'aérodynamique hypersonique sur maillages 3D non structurés – Sensibilité à l'instabilité numérique dite du Carbuncle, Cesta.

Roman LECONTE, Apprentissage automatique pour le calcul rapide des effets mécaniques des ondes de souffle, DAM Île-de-France.

Anthony LAYBROS, Étude par imagerie satellitaire des panaches d'eau émis par les aéroréfrigérants des centrales nucléaires, DAM Île-de-France.

MÉCANIQUE ET THERMIQUE

Corentin LEBRAS, Étude du transfert de quantité de mouvement lors de l'interaction laser sur matériaux fragiles, Cesta.

Joane MEYNARD, Modélisation et simulation du comportement mécanique de céramiques poreuses renforcées sous sollicitations sévères, Cesta.

Laura HENRY, Microstructure sous conditions extrêmes révélées par la microtomographie par diffraction, DAM Île-de-France.

OPTIQUE ET OPTRONIQUE

Hugo CHESNEAU, Effet thermique dans l'air dans un module de pompage diode multidisques, Cesta.

Gilles DALA BARBA, Étude et amélioration du contraste temporel, Cesta.

Thomas HAMOUDI, Étude amplificateur laser 1 J 10 Hz, Cesta.

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

Arthur LE CAMUS, Endommagement des composants optiques sur chaîne Petal, Cesta.

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

Luis ALONSO VAZQUEZ ZUNIGA, Modélisation et expérimentation pour la réparation de dommages laser, Cesta.

Rodolphe COLLIN, Études numériques et analytiques pour l'optimisation des performances du lissage optique sur le Laser Mégajoule, DAM Île-de-France.

INSTRUMENTATION, MÉTROLOGIE ET CONTRÔLE

Maxime BOUVIER, Étude de faisabilité de la radiographie par contraste de phase à haute énergie, DAM Île-de-France.

Romain KARCHER, Développement d'un étalon de type réfractomètre laser pour réaliser la métrologie de la pression dynamique infrasonore dans la bande de fréquence 10¹ à 10⁴ Hz, DAM Île-de-France.

Anthony DER MESROBIAN-KABAKIAN, Optimisation d'un système de mesure ultracompact à coïncidence électron-photon pour la détection et la caractérisation de radioisotopes du xénon, DAM Île-de-France.

THERMOHYDRAULIQUE ET MÉCANIQUE DES FLUIDES

Clément CAILLAUD, Calculs de simulations numériques directs en régime hypersonique, Cesta.

Julien AMOROSSETTI, Phénomène et modélisation d'écoulements diphasiques gaz-particules en aérodynamique, Cesta.

PHYSIQUE DU NOYAU, ATOME, MOLÉCULE, PLASMAS

Stylios PASSALIDIS, Investigating relativistic beam-plasma instabilities in laser and accelerator experiments, DAM Île-de-France.

Damien MINENNA, Modèles de diffusion Raman stimulée, DAM Île-de-France.

Mouad RAMIL, Caractérisation des cinétiques de transition de phase par dynamique moléculaire, DAM Île-de-France.

Cyril LENAIN, Mesures de spectres et de multiplicités des neutrons prompts de fission avec le détecteur VENDETA, DAM Île-de-France.

Étienne JAUPART, Des atomes aux planètes : simulation ab initio des transitions de phase dans les intérieurs planétaires, DAM Île-de-France.

L'intelligence artificielle en zone de turbulence

Que se passe-t-il exactement quand des noyaux fusionnent au cours d'expériences avec des lasers de puissance ? L'intelligence artificielle (IA) pourrait offrir des voies d'investigation nouvelles. Malheureusement, beaucoup de modèles d'IA livrent des résultats sans expliquer les raisons de leurs choix, ce qui n'est alors d'aucun secours. Une équipe du CEA – DAM vient de développer un modèle dit « interprétable », c'est-à-dire dont on comprend chaque terme, dans le but de modéliser la turbulence dans un plasma que l'on comprime **1**. Ce modèle reproduit bien l'évolution de la turbulence lorsque la viscosité passe très rapidement de celle d'un gaz à celle du miel (**figure 1**), comme cela pourrait être le cas sur le Laser Mégajoule.

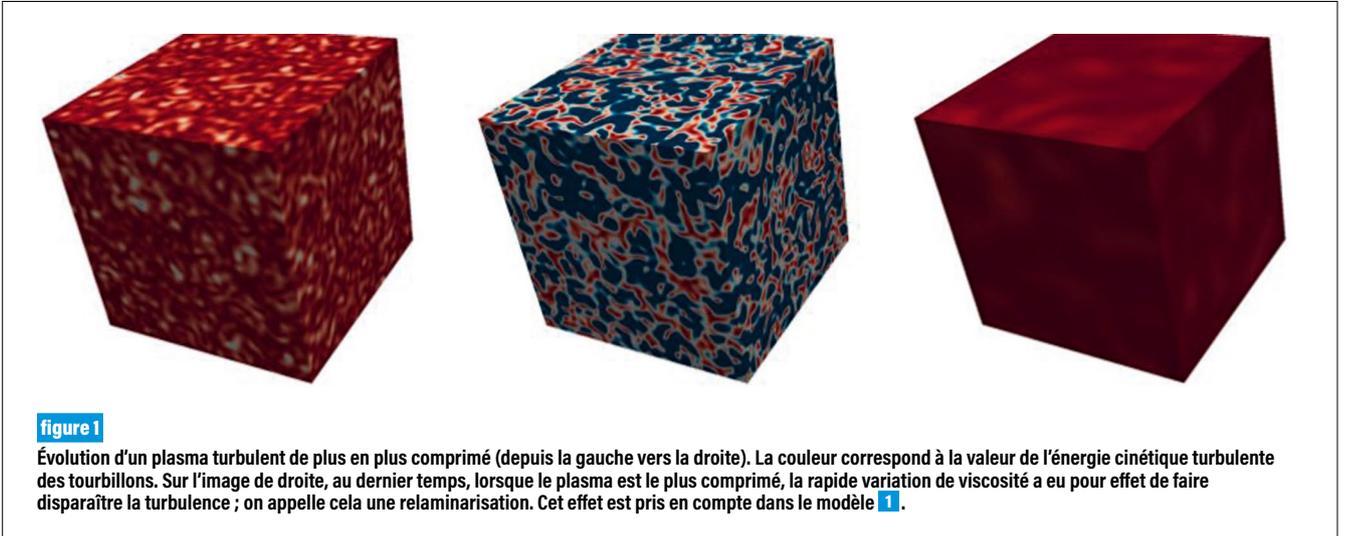
Lors des expériences de fusion sur des lasers de puissance comme le Laser Mégajoule, une cible contenant des isotopes de l'hydrogène est portée dans des conditions de pression et de température telles qu'elle implose. La réussite de l'expérience dépend entièrement de la maîtrise de cette implosion, maîtrise délicate à obtenir car elle se produit dans un plasma turbulent : les mouvements du fluide sont irréguliers et forment des tourbillons. Mieux comprendre la turbulence est ainsi un passage obligé sur la route qui mène à la fusion. À quel moment se forme-t-elle ? Comment le mélange se fait-il ? Comment la viscosité du fluide varie-t-elle ?

Pour répondre à ces questions, les chercheurs peuvent recourir à des simulations numériques, aucune n'étant cependant totalement satisfaisante. D'un côté, une analyse fine de la turbulence est possible par résolution des célèbres équations de Navier-Stokes, mais le coût du calcul contraint alors à se limiter à des fractions d'expérience. D'un autre côté, l'expérience peut être prise en compte dans sa globalité en exploitant des modèles approchés

et rapides, mais ce gain de performance se fait au prix d'une précision dégradée, incompatible avec l'interprétation physique.

Une façon d'établir un pont entre ces deux approches est d'utiliser des modèles basés sur l'intelligence artificielle, ou plus précisément sur l'apprentissage statistique. Le premier défi à relever pour cela était celui de la base de données. Il est connu que plus on nourrit ces modèles avec des données nombreuses et pertinentes, plus ils « apprennent » vite et bien. Grâce à des outils d'évaluation rapide développés à la DAM, nous avons pu produire un nombre suffisant de données et alimenter correctement notre modèle d'IA. Ces outils d'évaluation rapide sont certes moins généraux que les simulations basées sur les équations de Navier-Stokes, mais bien plus rapides à calculer **2**.

Mais la base de données ne suffit pas. Pour obtenir un modèle interprétable, il faut aussi contrôler sa forme : quelles sont les variables d'état à utiliser pour décrire le plasma comprimé, et quel type d'équations voulons-nous écrire ? En effet, le langage du physicien est celui des mathématiques ; un modèle interprétable est un modèle mathématique simple. C'est actuellement un sujet de recherche que de trouver automatiquement, par apprentissage, la forme du modèle à construire. Nous avons choisi de partir d'un modèle déjà connu des physiciens de la turbulence : celui de Perot & de Bruyn Kops (PBK) **3**, qui s'exprime sous la forme d'un système dynamique, où les variables évoluent en fonction du temps. Les variables choisies sont l'énergie cinétique et la taille des gros tourbillons. Ainsi, on ne connaît pas en détail les structures de notre plasma, mais nous connaissons l'énergie qu'elles contiennent.



Afin d'étendre le modèle historique PBK **3** aux cas où la viscosité est variable, nous construisons un catalogue de fonctions, grâce à l'analyse dimensionnelle, qui permet de réduire le nombre de variables à prendre en compte. L'apprentissage consiste alors à trouver l'importance de chacune de ces fonctions : c'est l'étape d'apprentissage du modèle. Mais pour être interprétable, notre modèle doit être simple, c'est-à-dire qu'il doit utiliser le moins de fonctions possible : on parle de méthode parcimonieuse. Finalement, nous obtenons le système dynamique décrivant les données d'apprentissage au mieux (**figure 2**), c'est-à-dire en étant à la fois précis et simple.

Le modèle **1** reproduit correctement les données décrivant un plasma comprimé à viscosité variable, ce que ne font pas les modèles de turbulence usuels. Il peut être utilisé facilement dans un code, ou étudié mathématiquement. Par exemple, un critère sur la variation de la viscosité a été obtenu pour indiquer lorsque celle-ci aura un effet sur l'écoulement. Même dans les cas où la variation de viscosité n'a pas d'effet, le modèle **1** est plus précis que PBK, et surtout il est plus interprétable puisqu'une des variables de PBK qui n'était qu'une variable intermédiaire de calcul devient maintenant une longueur caractéristique des écoulements turbulents. Nous avons donné plus de sens

physique au modèle : ce qui n'était qu'une variable de calcul correspond désormais à une vraie variable physique, la taille des gros tourbillons.

Remarquons que le modèle PBK était lui aussi en partie basé sur les données puisqu'un paramètre du modèle était resté libre et calibré afin de retrouver certains régimes limites. Le travail **1** en est donc une extension naturelle, mais permet avec les méthodes d'IA plus récentes de retrouver ces mêmes régimes limites, ainsi que toutes les phases de l'évolution du plasma turbulent.

$$\dot{K} = -\alpha_1 v \lambda^2 K - \alpha_2 \lambda K^{3/2} + \alpha_3 \dot{v}^{1/4} v^{1/2} \lambda^{3/2} K + \alpha_4 \dot{v}^{1/4} \lambda K^{5/4} - \alpha_5 \dot{v}^{1/2} \lambda K,$$

$$\dot{\lambda} = -\beta_1 v \lambda^3 - \beta_2 v^{1/2} \lambda^{5/2} K^{1/4} - \beta_3 \lambda^2 K^{1/2} + \beta_4 \dot{v}^{1/4} v^{1/2} \lambda^{5/2} + \beta_5 \dot{v}^{1/4} \lambda^2 K^{1/4} - \beta_6 \dot{v}^{1/2} \lambda^2.$$

figure 2
Ce jeu d'équations (**1**) exprime les dérivées en temps de l'énergie cinétique turbulente K et de la taille des gros tourbillons λ , en fonction de K , de λ , de la viscosité cinématique v et de sa dérivée. Les autres lettres grecques α et β désignent des constantes. Ce modèle reproduit les données décrivant un plasma turbulent comprimé et peut être considéré comme simple : chaque terme peut être interprété par les physiciens. L'équation peut paraître complexe aux néophytes, mais si nous n'avions pas effectué un travail de sélection grâce à l'intelligence artificielle parcimonieuse, elle comprendrait plus de cent fonctions différentes.

RÉFÉRENCES

- 1** S. Thévenin, N. Valade, B.-J. Gréa, G. Kluth, O. Soulard, « Modeling compressed turbulent plasma with rapid viscosity variations », *Physics of Plasmas*, **29**, (11), 112310 (2022).
- 2** G. Viviconte, B.-J. Gréa, F. S. Godefert, « Self-similar regimes of turbulence in weakly coupled plasmas under compression », *Phys. Rev. E*, **97**, 023201 (2018).
- 3** J. B. Perot, S. M. de Bruyn Kops, « Modeling turbulent dissipation at low and moderate Reynolds numbers », *Journal of Turbulence*, **7**, N69 (2009).

W. Cayzac, V. Ospina-Bohórquez, X. Vaisseau, G. Faussurier

[CEA - DAM, centre DAM Île-de-France]

S. Malko, L. Volpe [Centro de laseres pulsados (CLPU), Salamanca, Espagne]

avec 22 collaborateurs [affiliés à 15 institutions en France, Espagne, Italie, Allemagne, États-Unis et Canada]

Les protons pénètrent plus loin que prévu dans les plasmas denses et tièdes

Une équipe internationale codirigée par le CEA - DAM a réalisé les premières mesures mondiales de ralentissement de protons à basse énergie dans un plasma dense et tiède **1**.

La pénétration des ions dans cet état de la matière est particulièrement difficile à décrire et les modèles théoriques présentent des écarts significatifs. Les données expérimentales montrent que les protons sont moins freinés et, donc, pénètrent plus loin que ce qui était prédit dans ce type de matière. Ce résultat a de fortes implications en physique des plasmas fondamentale et dans la fusion par laser où le ralentissement des ions joue un rôle crucial.

La matière dense et tiède est un état intermédiaire du plasma. On le dit dense car sa densité est proche de celle du solide, et tiède car sa température est de « seulement » 10 000 à 100 000 kelvins (K), en comparaison des plasmas dits chauds qui atteignent plusieurs millions de kelvins ou davantage. Cette phase du plasma, qui reste mal connue, occupe une place centrale dans de nombreuses expériences de physique des plasmas et notamment dans la fusion par laser.

Lors d'une réaction de fusion, des particules alpha, qui sont des ions hélium, sont émises, puis ralenties par le plasma. Pour comprendre ce phénomène, on étudie le ralentissement de protons (ions H^+), plus faciles à produire en laboratoire, qui informe sur le ralentissement de tout type d'ions. Ces recherches sont aussi utiles pour étudier la faisabilité de certaines expériences de fusion qui utilisent des faisceaux de protons pour comprimer et chauffer la cible.

La théorie du ralentissement des ions dans ce type de plasma est complexe et les écarts entre les

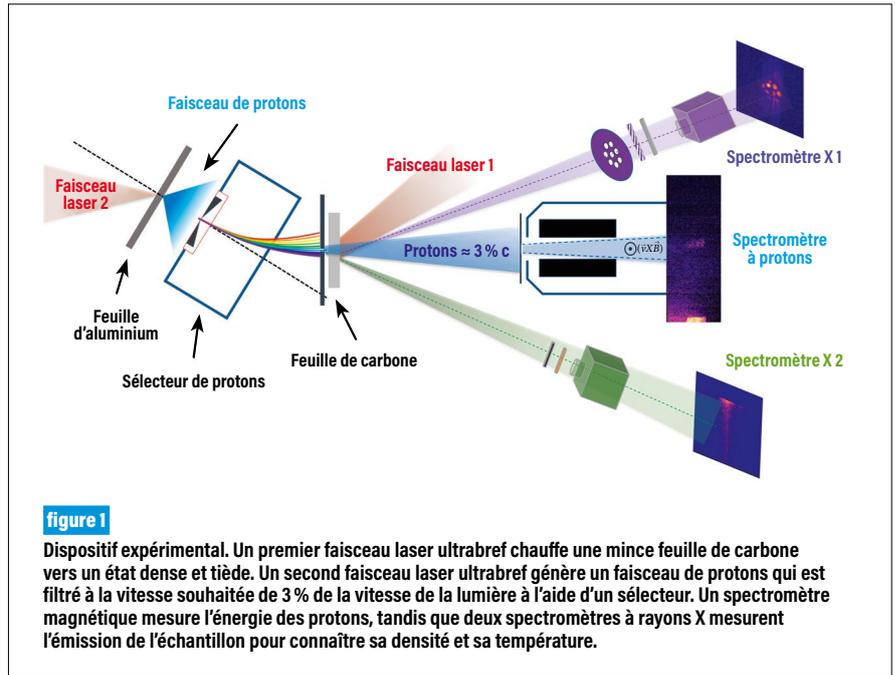
prévisions des modèles sont importants. Ces écarts augmentent à mesure que la vitesse des ions diminue et ils atteignent près de 30 % lorsque la vitesse des ions est égale à quelques fois la vitesse des particules du plasma. Or, si un modèle prévoit mal la distance d'arrêt des ions, il ne peut pas dire où se produit le dépôt d'énergie dans la matière et restitue donc mal le déroulement d'une expérience de fusion par laser.

Pour améliorer les modèles, il faut les confronter à l'expérience. Celle décrite ici, pour laquelle le CEA - DAM a joué un rôle moteur, était une première mondiale. Elle consistait à mesurer la perte d'énergie de protons dans un échantillon mince de matière dense et tiède créé par laser. La vitesse des protons a été ajustée à environ 10^7 mètres par seconde, soit 3 % de la vitesse de la lumière (3 % c). Ce régime de vitesses de projectiles relativement basses, de l'ordre de 3 à 10 fois celle des particules du plasma, n'avait jamais été atteint dans la matière dense et tiède.

L'expérience a été réalisée au Centro de Laseres Pulsados (CLPU) à Salamanca en Espagne et a mobilisé une large collaboration internationale. Le dispositif expérimental est représenté sur la **figure 1**. L'échantillon de matière dense et tiède a été généré par l'irradiation au moyen d'un faisceau laser ultrabref d'une durée d'un dixième de picoseconde (10^{-13} s) d'une feuille de carbone d'une épaisseur de 1 micromètre, soit moins d'un dixième de l'épaisseur d'un cheveu. Deux spectromètres ont mesuré l'émission de rayons X de l'échantillon chauffé pour en déduire sa densité et sa température. Ces données ont été combinées avec des simulations pour une compréhension précise de l'évolution temporelle du carbone dense et tiède sur une durée de quelques fractions de nanoseconde (10^{-9} s). Un autre faisceau laser d'une

durée d'un dixième de picoseconde a irradié une feuille d'aluminium pour générer un faisceau de protons avec des vitesses multiples. Un sélecteur magnétique spécialement conçu pour cette application **2** a permis de ne conserver que les protons à la vitesse d'intérêt d'environ 3 % de la vitesse de la lumière avant leur interaction avec l'échantillon de carbone. Un spectromètre magnétique a mesuré l'énergie initiale des protons et leur énergie après traversée de l'échantillon, donnant accès à l'énergie perdue.

Connaissant la densité et la température de l'échantillon, l'équipe codirigée par le CEA – DAM a comparé la perte d'énergie des protons mesurée avec plusieurs modèles théoriques du ralentissement (**figure 2**). Les courbes montrent que tous les modèles, à commencer par les modèles « classiques » généralement utilisés dans les calculs, surestiment l'énergie perdue. Ce sont les prévisions des modèles plus avancés, basés sur la théorie de la



fonctionnelle de la densité (DFT), qui sont les plus proches des points expérimentaux. Ce résultat implique que les particules alpha émises dans des cibles de fusion, dans des conditions d'interaction ions plasma en partie analogues, ont une distance d'arrêt plus longue que prévu.

L'équipe qui a réalisé ce travail prévoit de nouvelles expériences, toujours avec la participation active du CEA – DAM. Les objectifs sont d'améliorer la précision et le nombre de mesures (chaque mesure correspond à un tir laser), et de faire varier la température de l'échantillon et l'énergie des protons. Les données produites permettront aux théoriciens des plasmas d'affiner les modèles de ralentissement existants et d'optimiser les expériences de fusion par laser. Ces progrès apporteront aussi un éclairage nouveau sur la physique fondamentale de l'interaction entre les particules chargées et la matière dense et tiède.

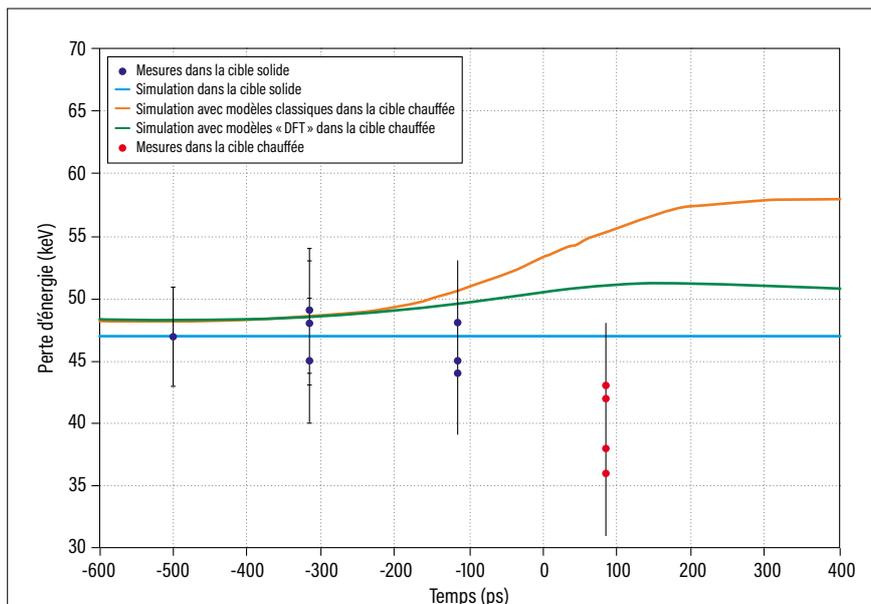


figure 2

Mesures de perte d'énergie des protons en unité de kiloélectronvolt (keV) en fonction du temps, acquises à différents instants. L'instant zéro marque le début du chauffage laser de l'échantillon, donc de la génération de la matière dense et tiède. Les mesures réalisées aux instants « négatifs », c'est-à-dire dans l'échantillon solide, sont conformes aux prévisions (courbe bleue). Les points acquis aux instants « positifs », dans la matière dense et tiède, sont largement en dessous des prévisions théoriques (courbes orange et verte). Les prédictions des modèles « DFT » sont les plus proches des mesures.

RÉFÉRENCES

1 S. Malko, W. Cayzac, V. Ospina-Bohórquez *et al.*, « Proton stopping measurements at low velocity in warm dense carbon », *Nature Communications*, **13**, 2893 (2022).
2 J. I. Apiñaniz *et al.*, « A quasi-monoenergetic short time duration compact proton source for probing high energy density states of matter », *Scientific Reports*, **11**, 6881 (2021).
3 A. J. White *et al.*, « Mixed stochastic-deterministic time-dependent density functional theory: application to stopping power of warm dense carbon », *Journal of Physics: Condensed Matter*, **34**, 174001 (2022).

O. Poujade [CEA – DAM, centre DAM Île-de-France
Université Paris-Saclay, CEA, Laboratoire matière en conditions extrêmes (LMCE), Bruyères-le-Châtel]
R. Devriendt [CEA – DAM, centre DAM Île-de-France]

Vers un modèle plus fiable d'absorption laser pour les plasmas

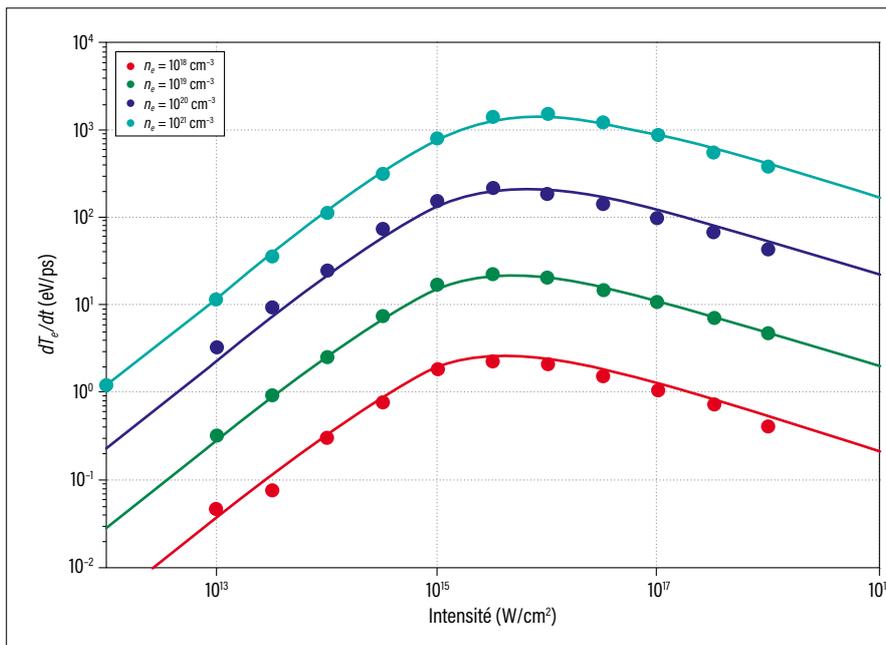
Le 4 décembre 2022, une collaboration de chercheurs américains a réussi à réaliser en laboratoire, à l'aide de lasers très puissants, une boule de matière extrêmement chaude qui fonctionne comme une mini-étoile. C'est un succès qui cache le fait que certains phénomènes physiques, comme l'absorption des lasers dans cette matière extrêmement chaude, nécessitent d'être mieux quantifiés pour créer ces étoiles de façon routinière. Nous présentons ici des simulations numériques dédiées à ce phénomène d'absorption. Elles nous ont permis d'améliorer significativement notre modèle d'absorption et d'écartier d'autres modèles utilisés jusque-là **1**.

Le maintien de la dissuasion nucléaire nécessite la maîtrise du phénomène de fusion, en œuvre dans l'arme thermonucléaire. Pour cela, le CEA – DAM mène en parallèle des expériences de fusion au Laser Mégajoule à Bordeaux et des simulations numériques. La fusion par laser, ou fusion par confinement inertiel (FCI) **2**, consiste à comprimer une capsule millimétrique contenant des gaz semblables à ceux présents dans le Soleil. Cette compression se fait à l'aide de lasers de puissance permettant d'atteindre les 100 000 millions de degrés nécessaires pour fusionner deux noyaux et dégager de l'énergie. Deux méthodes d'irradiation par les lasers de puissance sont possibles. En attaque directe, les lasers sont absorbés par la surface externe de la capsule. En attaque indirecte, la capsule, positionnée au centre d'une cavité en or, est irradiée par un rayonnement X intense issu de l'absorption des lasers par les parois de la cavité.

Dès les premières campagnes de tirs sur le NIF (National Ignition Facility, en Californie) en 2009, les chercheurs se sont rendu compte que, pour reproduire une expérience en attaque indirecte à l'aide de simulations numériques, il fallait abaisser la quantité d'énergie laser à injecter dans l'expérience par rapport à ce qu'indiquaient les simulations, à l'aide d'un facteur que l'on fixe de manière empirique. Les chercheurs avaient conscience que derrière cette réduction se cachait une multitude d'effets physiques qui étaient sans doute mal modélisés.

Nous nous sommes concentrés sur l'un de ces effets : l'absorption de l'énergie laser par le plasma (matière ionisée extrêmement chaude). Lors de l'attaque indirecte, les photons du laser sont absorbés par les électrons du plasma issu de la cavité en or. Ces électrons évoluent parmi toutes les autres particules chargées du plasma. Or, il est impossible de modéliser chaque interaction entre les particules chargées. Il faut donc faire l'approximation qu'un électron se déplace dans un champ moyen créé par toutes les autres particules. C'est cette approximation et les différentes manières de la traiter théoriquement qui expliquent la grande variété des modèles.

Ces modèles donnent des résultats quantitatifs du bon ordre de grandeur, mais surestiment deux à trois fois l'énergie absorbée par les électrons. En 2016, nous avons réalisé une série de simulations numériques avec le modèle d'absorption de l'époque **3** auquel a été adjoint un multiplicateur **4** afin de quantifier l'effet de cette variabilité. Nous avons montré que, en faisant varier ce multiplicateur,


figure 1

Taux de chauffage d'un plasma par une onde électromagnétique, en fonction de l'intensité du champ électrique à l'origine du rayonnement laser. Les différentes couleurs correspondent à différentes densités d'électrons (n_e). La température est de 10 eV (approximativement 100 000 kelvins). Les points de couleur correspondent à nos résultats de simulations classiques de dynamique moléculaire et les courbes en traits pleins correspondent au modèle paramétré à six coefficients réglés dans **1** (même jeu de coefficients quelles que soient la densité d'électrons et leur température).

on pouvait induire des variations très significatives, susceptibles de rendre compte de l'abaissement d'énergie laser à faire entrer dans la cavité.

Afin de modéliser l'absorption avec plus de précision, nous avons réalisé des simulations classiques de dynamique moléculaire (SCDM) **1**. Ces simulations consistant à déterminer la trajectoire de chaque atome, elles ne peuvent être réalisées que pour de très petits volumes, typiquement un cube de 100 atomes de côté, soit un million d'atomes. L'objectif est de mieux comprendre la physique sous-jacente, et ainsi de corriger les modèles macroscopiques. Nous avons généré différentes variétés de plasmas pour mesurer leur absorption lorsqu'ils sont soumis à un rayonnement laser. Nous avons exploré une large gamme de densités et de températures (**figure 1**). Ces calculs impliquaient deux millions de particules, qui étaient simulées

sur des pas de temps de l'ordre de 10^{-19} seconde.

Grâce à ces calculs de dynamique moléculaire, nous avons élaboré un modèle, avec six constantes ajustables. Il permet, avec différentes valeurs de ces constantes, de reproduire les modèles théoriques proposés dans le passé pour quantifier l'absorption laser. Les six constantes du modèle paramétré ont été ajustées, grâce aux résultats de la dynamique moléculaire, et le modèle résultant permet non seulement de restituer toutes nos SCDM, mais aussi celles de la littérature ouverte, ce qui n'était pas le cas avec les anciens modèles. Les résultats de nos simulations ont de plus été suffisamment précis pour écarter certains modèles de la littérature.

Cette démarche, par l'utilisation de SCDM, nous permet désormais d'avoir une confiance accrue dans les choix de modèles d'absorption laser à

implémenter dans les codes de simulation utilisés pour dimensionner les futures expériences de fusion par confinement inertiel.

RÉFÉRENCES

- 1** R. Devriendt, O. Poujade, « Classical molecular dynamic simulations and modeling of inverse bremsstrahlung heating in low Z weakly coupled plasmas », *Physics of Plasmas*, **29**, 073301 (2022).
- 2** H. Abu-Shawareb *et al.*, « Lawson criterion for ignition exceeded in an inertial fusion experiment », *Physical Review Letters*, **129**, 075001 (2022).
- 3** S. Skupsky, « "Coulomb logarithm" for inverse-bremsstrahlung laser absorption », *Physical Review A*, **36**, 5701 (1987).
- 4** O. Poujade *et al.*, « Rayleigh-Taylor mixing may account for the position anomaly in NIF microdot spectroscopy experiments », *Physics of Plasmas*, **28**, 042704 (2021).

Briser le mur des orbitales : vers une description universelle de la matière

Une équipe du CEA – DAM a mis en œuvre avec succès une méthode numérique pour prévoir, dans des temps de calcul maîtrisés, les propriétés de la matière dans tous ses états, du solide aux plasmas denses **1**. Le recours à la simulation numérique est nécessaire, parce que l'expérience n'est pas envisageable dans les états extrêmes (milliards de kelvins et milliards de fois la pression atmosphérique). Cette méthode permettra à terme de prévoir des propriétés électroniques de matériaux, comme la réflectivité ou la conductivité.

Un des défis relevés par le CEA – DAM à travers son programme Simulation consiste à décrire aussi précisément que possible la matière, tant à pression atmosphérique et température ambiante (état standard), que dans des états très comprimés et très chauds, on parle ici de milliards de fois la pression atmosphérique (domaine du gigabar, $1 \text{ Gbar} = 10^5 \text{ GPa}$) et de milliards de kelvins (K). Ces conditions extrêmes sont aussi représentatives de situations rencontrées en astrophysique dans les naines blanches ou les intérieurs stellaires, ou en physique de l'interaction laser-plasma dans les expériences sur le Laser Mégajoule près de Bordeaux. L'un des enjeux est aussi de parvenir à opérer cette transition de l'état standard vers les états extrêmes, ou du solide aux plasmas denses, avec un seul outil, c'est-à-dire de réussir une description universelle.

Pour décrire la matière dans les conditions standard, les simulations basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT, pour *Density Functional Theory*) se sont imposées par leur précision. Cette approche consiste à résoudre par le calcul quantique la structure d'un nombre restreint d'atomes (de la

centaine au millier) confinés dans une boîte. À chaque atome est associé un certain nombre d'électrons (on préfère parler d'orbitales) pour lesquels l'équation de la mécanique quantique, dite de Schrödinger, est résolue. C'est ce qui est fait dans un code comme Abinit, codéveloppé au CEA – DAM et constamment adapté aux spécifications des nouveaux supercalculateurs. Dans les conditions standard, chaque orbitale est occupée par deux électrons. Par exemple, pour simuler 108 atomes d'hydrogène, 54 orbitales doublement occupées suffisent. Cette approche a été étendue aux systèmes chauds en considérant maintenant des orbitales partiellement occupées. En effet, plus le système est chaud et plus il faut introduire des orbitales partiellement occupées dans le calcul afin de conserver le nombre total d'électrons. En reprenant l'exemple précédent, pour un même niveau de précision, il faut maintenant 3 500 orbitales à 1 MK et 16 000 orbitales, à 10 MK. Du fait que le temps de calcul varie comme le cube du nombre d'orbitales, le calcul devient vite impossible au-delà de 100 000 K. On fait face au *mur des orbitales* **2**.

Une première manière de contourner ce mur des orbitales a été de s'en débarrasser (méthodes sans orbitale) en utilisant une approximation pour calculer l'énergie des électrons (approximation de Thomas-Fermi). Cette approche a permis de décrire avec succès des milieux très chauds et très denses et des mélanges complexes (voir p. 24-25 dans **3**). Comme cette approche est réservée aux températures au-delà du million de degrés, il est tentant de la faire cohabiter avec une description avec orbitales à basse température. Cette combinaison est cependant problématique, car elle introduit des discontinuités.

Dans la limite des hautes énergies, les électrons n'interagissent plus que marginalement avec leur environnement. Calculer en DFT toutes les orbitales électroniques constitue donc beaucoup de travail pour rien. En partant de ce constat, S. Zhang *et al.* **4**

ont proposé le modèle dit de la DFT étendue (*Extended DFT*) qui consiste à simplifier le calcul DFT en remplaçant les orbitales de haute énergie par une solution analytique déduite des propriétés bien connues du gaz d'électrons homogène. La difficulté de la résolution est donc concentrée sur un nombre restreint d'orbitales de faible énergie, contribuant le plus aux interactions.

Cette idée a été implémentée dans le code Abinit au CEA – DAM au cours d'une thèse et a permis de décrire, dans des temps de calcul raisonnables, les propriétés de la matière dans le domaine du gigabar 1.5. Par exemple, l'équipe a tracé sur la **figure 1** la courbe dite d'Hugoniot de l'aluminium. Cette courbe représente l'ensemble des pressions, obtenues en choquant la matière à des

vitesse croissantes, en fonction de la compression ρ/ρ_0 , où ρ_0 est la densité dans l'état standard. Tout d'abord, par rapport à une méthode sans orbitale (en pointillés verts) il est satisfaisant de constater que la solution *Extended DFT* (trait rouge) présente deux oscillations. En effet, ces oscillations, autour de 1 Gbar, correspondent physiquement à l'ionisation des deux derniers niveaux électroniques, qui sont très profonds. Ces orbitales profondes, qui vont progressivement se dépeupler quand la température va encore augmenter, sont fondamentales pour décrire correctement certaines propriétés comme la réflectivité. Il est donc nécessaire de garder un certain nombre d'orbitales, même à de telles pressions et c'est ce qu'autorise la méthode *Extended DFT*.

Enfin, les résultats obtenus par cette méthode sont en bon accord avec des méthodes sophistiquées et considérablement plus coûteuses comme la méthode dite « Monte-Carlo par intégrale de chemin » (PIMC, courbe continue bleue sur la **figure 1**).

Avec ce nouveau modèle, disponible dans le code Abinit, les physiciens passent, sans discontinuité et avec un seul outil, de la physique du solide aux plasmas denses, en un temps accessible aux supercalculateurs. En plus de la réduction drastique du temps de calcul permise par la méthode *Extended DFT*, celle-ci permet également d'accéder aux éléments lourds (au-delà de la troisième ligne du tableau périodique), jusqu'alors inaccessibles avec la méthode PIMC. Les propriétés électroniques (conductivité, réflectivité) de la matière en conditions extrêmes devraient pouvoir être calculées par la méthode *Extended DFT* dans un futur proche.

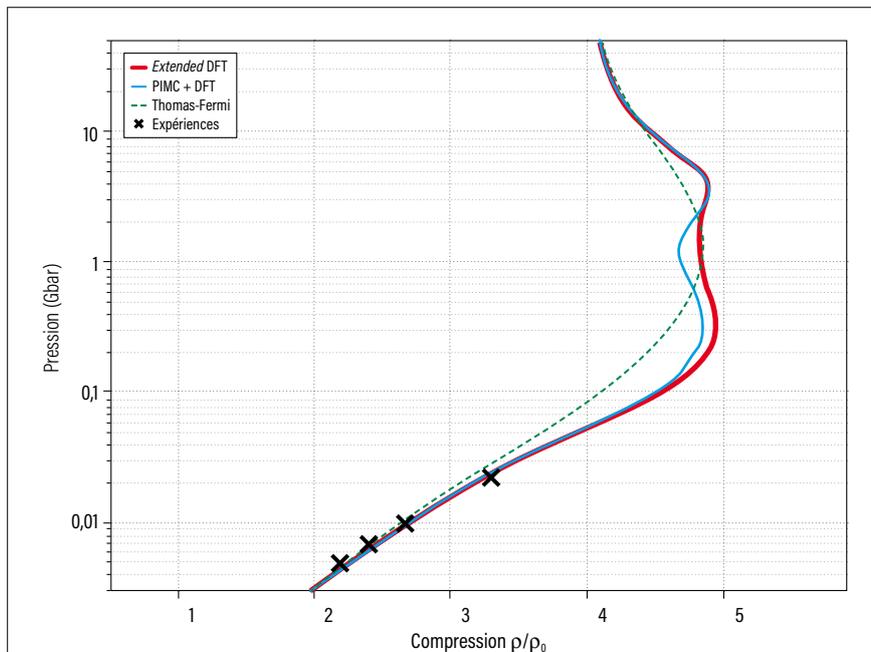


figure 1

Courbe d'Hugoniot principale de l'aluminium : la pression, en échelle logarithmique, est représentée en ordonnées et la compression en abscisses. En rouge, la DFT étendue (*Extended DFT*) montre une courbe plus détaillée que le modèle Thomas-Fermi (courbe verte en pointillé), car la présence des oscillations indique une bonne prise en compte de la structure en couche des électrons, indispensable pour prévoir correctement des propriétés comme la réflectivité ou la conductivité d'un matériau. La courbe bleue représente un calcul par intégrale de chemin (PIMC), beaucoup plus coûteux.

RÉFÉRENCES

- 1 A. Blanchet, J. Clérouin, M. Torrent, F. Soubiran, « Extended first-principles molecular dynamics model for high temperature simulations in the ABINIT code: Application to warm dense aluminum », *Computer Physics Communications*, **271**, 108215 (2022).
- 2 A. Blanchet, M. Torrent, J. Clérouin, « Requirements for very high temperature Kohn-Sham DFT simulations and how to bypass them », *Physics of Plasmas*, **27**, 122706 (2020).
- 3 J. Clérouin *et al.*, dans J. T. Harke, D. Riz, T. Mattsson, J. Colgan, O. Vacus, M. Kreisler, C. de Saint-Jean, *20 years of the CEA/DAM NNSA/DP Agreement*, LLNL-TR-843073, p. 24-25, <https://www.osti.gov/biblio/1959664> (2022).
- 4 S. Zhang, H. Wang, W. Kang, P. Zhang, X. T. He, « Extended application of Kohn-Sham first-principles molecular dynamics method with plane wave approximation at high energy - From cold materials to hot dense plasmas », *Physics of Plasmas*, **23**, 042707 (2016).
- 5 A. Blanchet, *De la surface au cœur des étoiles : vers une modélisation unifiée de la matière condensée aux plasmas*, thèse de doctorat soutenue le 22 février 2022 et délivrée par l'université Paris-Saclay.

M. Primout, L. Jacquet, L. Lecherbourg, L. Videau, P.-É. Masson-Laborde, B. Villette
[CEA – DAM, centre DAM Île-de-France]
G. Legay [CEA – DAM, centre de Valduc]
L. Le-Deroff [CEA – DAM, centre du Cesta]

Laser Mégajoule : réalisation de la source de rayons X la plus énergétique en Europe

Lors d'une expérience menée récemment sur le Laser Mégajoule près de Bordeaux, une équipe du CEA – DAM a réalisé la source de rayons X la plus énergétique obtenue sur une installation laser européenne **1**. Le taux de conversion entre l'énergie laser et l'énergie X est remarquable et les simulations tridimensionnelles, inaccessibles jusqu'à récemment, rendent bien compte des mesures. Une telle source revêt une grande importance pour radiographier des objets ou tester leur comportement sous irradiation.

Dans l'espace, des objets comme les satellites sont soumis à un flux continu de radiations. Cette contrainte doit être prise en compte lors des phases de conception et nécessite alors des expériences dédiées avec des sources de rayonnement représentatives des environnements considérés. Ce type de sources peut aussi être utilisé pour « sonder » la matière, c'est-à-dire l'éclairer par un flux intense de rayons X qui en donneront une image par radiographie ou par diffraction.

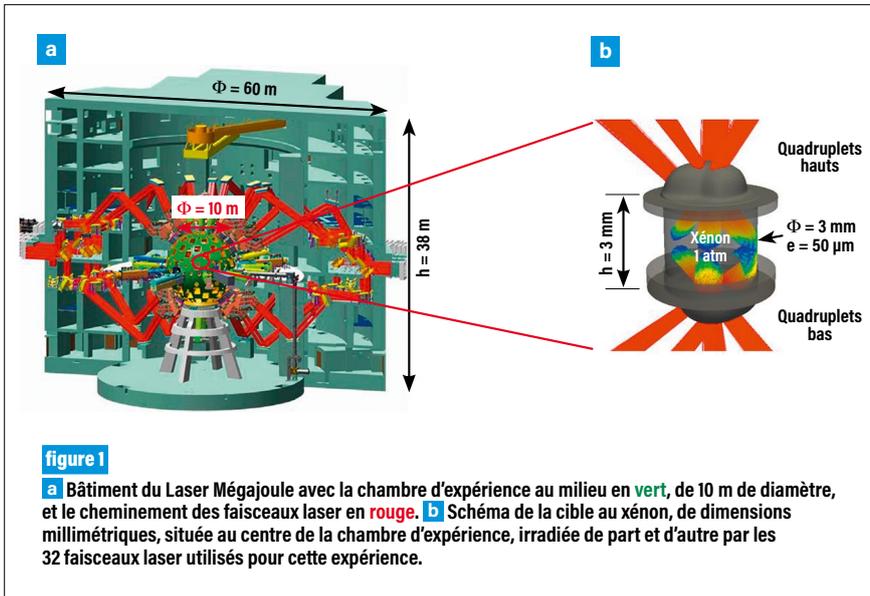
Ces sources peuvent être obtenues avec un laser de haute énergie. En effet, quand un faisceau laser suffisamment intense interagit avec la matière, les photons du laser ionisent une partie des atomes qui la constituent, ce qui entraîne un réarrangement atomique, et en conséquence l'émission de rayons X recherchée. Situé au centre CEA – DAM du Cesta, le Laser Mégajoule est le deuxième laser le plus énergétique au monde. Il est constitué de dizaines de faisceaux laser qui convergent tous vers un même point. En plaçant à cet endroit un échantillon de matière convenablement choisi, appelé cible, on peut obtenir l'effet recherché. Cela est pourtant loin d'être

immédiat. Comprendre et maîtriser la production de rayons X énergétiques à partir de plasmas, c'est-à-dire de gaz ionisés, créés par des lasers énergétiques fait en effet appel à des processus d'interaction rayonnement-matière multiples et complexes : chauffage d'un gaz par un rayonnement laser, émission de rayons X par le plasma chaud, etc. Aussi, pour comprendre et mettre au point ces sources, les physiciens doivent avoir recours à des simulations numériques qui mettent en œuvre la modélisation de ces processus.

Une équipe du CEA – DAM a récemment mené une campagne expérimentale sur le Laser Mégajoule avec un double objectif : mesurer la quantité d'énergie X rayonnée par la source et valider les simulations. 32 faisceaux laser délivrant une énergie totale voisine de 100 kJ ont été mis en œuvre. La cible irradiée par le laser était constituée d'un cylindre de plastique (polymère), de dimensions millimétriques, rempli de xénon à la pression de 1 atmosphère (voir **figure 1**).

Lorsque le Laser Mégajoule disposera de tous les faisceaux laser, la cible sera éclairée de façon quasi isotrope. Ici, le nombre limité de faisceaux s'est traduit par une importante anisotropie d'éclairage de la cible qui a rendu incontournable le recours à des simulations 3D avec le code Troll du CEA – DAM **2**. Ces simulations tridimensionnelles sont complexes à mettre en œuvre, avec plusieurs centaines de milliers de mailles pour décrire la géométrie et des dizaines de milliers d'heures de calcul sur plusieurs centaines de processeurs. Impossibles à réaliser il y a encore quelques années, elles sont maintenant accessibles grâce à la dernière génération de supercalculateurs au Très Grand Centre de calcul situé sur le site DAM Île-de-France du CEA.

La **figure 2a** met en lumière l'excellent accord obtenu entre la puissance des rayons X mesurée par unité d'angle solide (courbe noire) et celle évaluée avec la simulation 3D (courbe rouge). La **figure 2b** montre le point expérimental (carré noir) qui correspond à l'énergie mesurée par un spectromètre situé dans le plan équatorial, superposé à un calcul 3D



dans sa capacité à réaliser, avec la montée en puissance du Laser Mégajoule, des sources X de plus en plus énergétiques. Ces sources lui offriront une gamme d'opportunités expérimentales élargies, à même de répondre dans les années à venir aux besoins spécifiques de ses programmes. Enfin, la validation des simulations dans un cas où les effets 3D sont exacerbés apporte une nouvelle preuve du potentiel des démarches de type simulation, y compris pour des configurations expérimentales exigeantes.

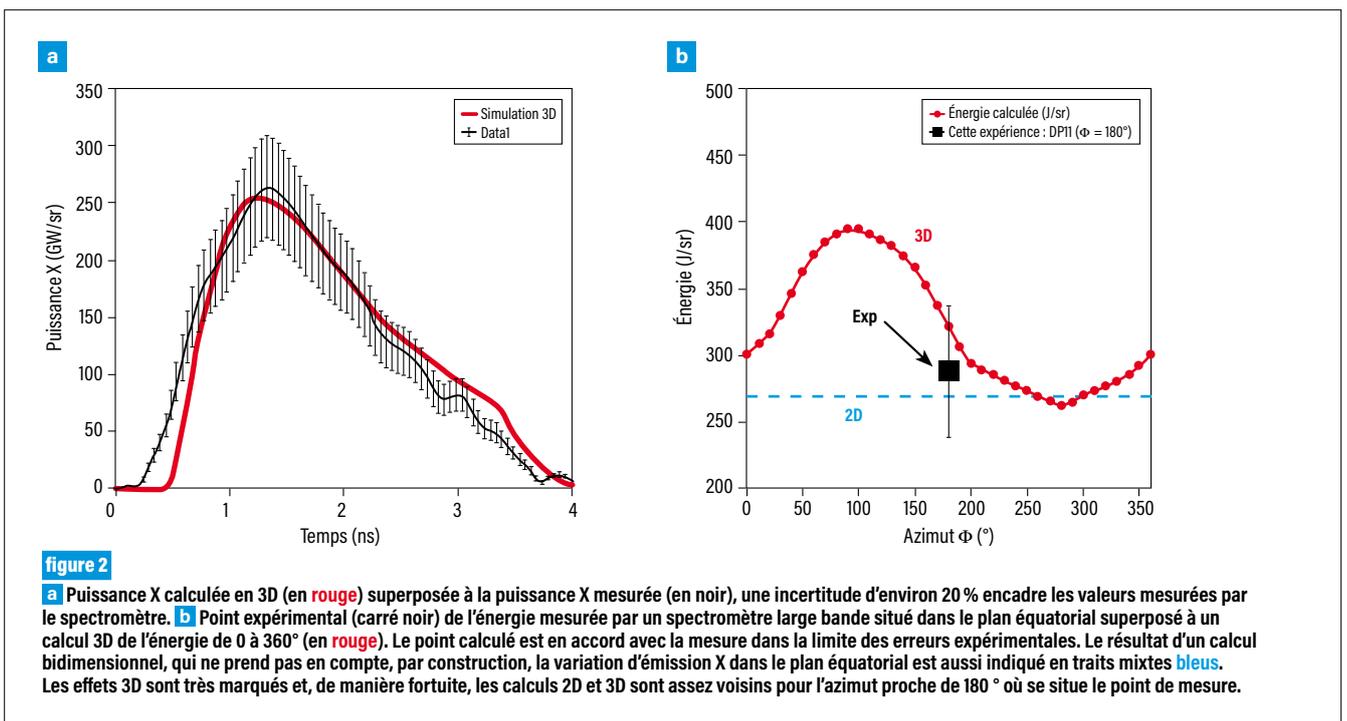
de l'énergie de 0 à 360° d'azimut (en rouge). La simulation 3D est en bon accord avec la mesure dans la limite de l'incertitude expérimentale. Un calcul bidimensionnel qui, par construction, ne prend pas en compte la variation d'émission X avec l'azimut est indiqué en traits mixtes bleus: les effets 3D sont

très marqués et les calculs 2D et 3D sont voisins de manière fortuite pour l'azimut proche de 180° où se situe le point de mesure. Enfin, le rendement de conversion, supérieur à 50 %, est très satisfaisant.

Les résultats prometteurs de cette campagne confortent le CEA - DAM

RÉFÉRENCES

1 M. Primout, L. Jacquet, L. Lecherbourg, L. Videau, P.-É. Masson-Laborde, B. Villette, G. Legay, L. Le Deroff, « First high radiant energy xenon-pipe-based x-ray source on LMJ », *Phys. Plasmas*, **29**, 073302 (2022).
2 É. Lefebvre, S. Bernard, C. Esnault, P. Gauthier, A. Grisolle, P. Hoch, L. Jacquet, G. Kluth, S. Laffite, S. Liberatore, I. Marmajou, P.-É. Masson-Laborde, O. Morice, J.-L. Willien, « Development and validation of the TROLL radiation-hydrodynamics code for 3D hohlraum calculations », *Nuclear Fusion*, **59**, 032010 (2019).



Des modèles pour décrire la fission nucléaire

La fission nucléaire est indispensable à la dissuasion nucléaire : elle fournit l'énergie de nos sous-marins et porte-avions à propulsion nucléaire, et sert de déclencheur à l'arme thermonucléaire. Paradoxalement, comprendre, décrire et simuler en détail la fission d'un seul noyau d'atome reste un défi ouvert depuis près d'un siècle. Les équipes du CEA – DAM et du Lawrence Livermore National Laboratory portent cette thématique de recherche et en dépeignent l'état de l'art dans [1](#).

Le CEA continue de mener des recherches pour mieux comprendre la fission nucléaire. Cela lui permet de garder une compétence forte, indispensable pour notre dissuasion, mais aussi de montrer au monde, via les publications, que les chercheurs de la DAM sont au meilleur niveau dans la compétition internationale.

Comprendre la chronologie d'une fission est essentiel pour répondre à certaines questions fondamentales : Dans quelles conditions un noyau fissionne-t-il ? Quelles sont les caractéristiques des fragments produits (leurs vitesses, leurs masses, leurs énergies, etc.) ? Résoudre ces énigmes nécessite d'imaginer des modèles décrivant le cœur du processus de la fission nucléaire.

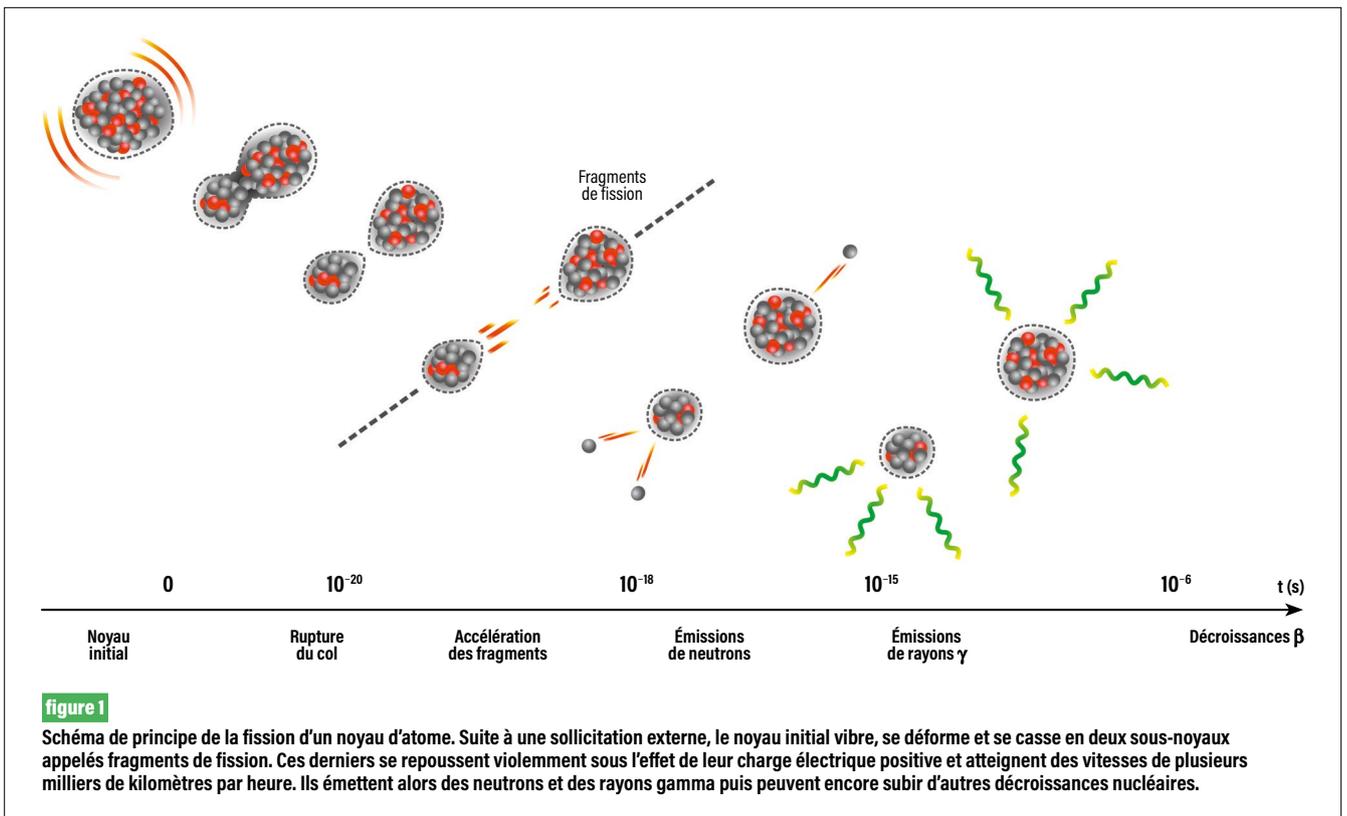
Après près d'un siècle de recherche, notre vision de la fission nucléaire peut être schématisée par la [figure 1](#). Un noyau d'atome vibre et se déforme jusqu'à se casser en deux fragments séparés. Ces fragments se repoussent alors puissamment, comme deux aimants opposés, et s'éloignent en atteignant des vitesses de plusieurs milliers de kilomètres par heure. Dans une centrale nucléaire, c'est essentiellement leur énergie cinétique qui est transformée pour produire de l'électricité. Les fragments peuvent ensuite émettre des neutrons et des rayons gamma jusqu'à finalement subir d'autres types de décroissances nucléaires.

Simuler une telle réaction revient à décrire le mouvement des plus de 200 neutrons et protons impliqués. Or, ces particules sont soumises aux lois de la mécanique quantique. Simuler l'évolution exacte du noyau au cours de la fission dépasse largement les capacités des ordinateurs les plus puissants. Pour se faire une idée de ce qui se passe au cœur du processus de fission, la communauté des physiciens nucléaires recourt à des modèles approchés du phénomène.

La première modélisation de la fission fut proposée par Lise Meitner et Otto Frisch [3](#) juste après sa découverte en 1938. Les deux physiciens assimilaient le noyau des atomes d'uranium à une goutte d'un liquide extrêmement dense qui se déforme jusqu'à se séparer en deux gouttes plus petites. Cette idée est à l'origine d'une famille de modèles encore utilisés à ce jour qui s'ingénient à décrire la forme géométrique de la surface du noyau. Ils sont qualifiés de modèles macroscopiques.

Aujourd'hui, la recherche théorique autour de la fission nucléaire s'apparente à un patchwork de modèles. Chacun d'eux tend à décrire correctement une facette du processus de fission, mais peine à prédire ses autres aspects. Par exemple, les modèles macroscopiques prédisent fidèlement la masse des fragments générés suite à un bombardement de neutrons. En revanche, ils ne décrivent pas convenablement la fission spontanée, une fission qui s'enclenche sans bombardement de neutrons. L'objectif consiste à unir ces modèles pour réussir à simuler de manière cohérente l'ensemble du processus.

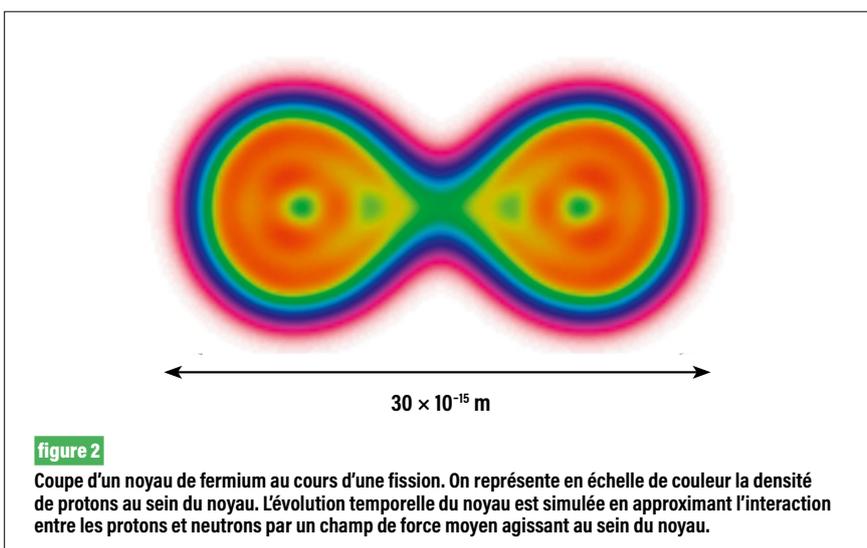
Pour relever ce défi, la communauté de chercheurs redouble d'efforts et d'ingéniosité. Cela se traduit notamment par le développement de nouvelles approximations décrivant la fission de manière plus réaliste. Cela passe aussi par l'amélioration des codes



de calcul et leur optimisation sur des supercalculateurs de plus en plus puissants. Les modèles modernes décrivent ainsi les protons et les neutrons de manière quantique et non plus classique. Pour simplifier les calculs, on prend en compte la moyenne des interactions des particules avec un neutron donné : ce sont des modèles dits de champ moyen, qui permettent notamment de décrire

l'évolution des particules au cours du temps. Des simulations récentes basées sur cette idée ont par exemple permis de prédire la manière dont les fragments de fission tournent sur eux-mêmes juste après leur création **3**. Les chercheurs sont aussi capables de prédire avec ce type d'approches les probabilités qu'une fission produise deux fragments égaux ou différents.

Enfin, les équipes du CEA – DAM et du Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) explorent de nouvelles méthodes à la lumière de l'intelligence artificielle. L'intelligence artificielle permet tout d'abord d'accélérer les calculs. Mais les chercheurs du CEA – DAM et du LLNL l'utilisent pour générer des fonctions d'onde, l'outil théorique décrivant de manière quantique l'état du noyau à un instant donné. De la même manière qu'une intelligence artificielle peut générer des images au plus proche de la réalité, elle crée ici des fonctions d'onde parmi les plus pertinentes pour décrire un noyau qui se casse en deux (**figure 2**).



RÉFÉRENCES

- 1** N. Schunck, D. Regnier, « Theory of nuclear fission », *Progress in Particle and Nuclear Physics*, **125**, 103963 (2022).
- 2** L. Meitner, O. R. Frisch, « Disintegration of uranium by neutrons: a new type of nuclear reaction », *Nature*, **143**, 239 (1939).
- 3** A. Bulgac, I. Abdurrahman, S. Jin, K. Godbey, N. Schunck, I. Stetcu, « Fission fragment intrinsic spins and their correlations », *Physical Review Letters*, **126**, 142502 (2021).

R. Delaunay, C.-M. Alvinerie, T. D'Almeida, M. Ribière, R. Maisonnny [CEA - DAM, centre de Gramat]
B. Cadilhon, L. Courtois, I. Mousseau, B. Cassany, C. Vermare [CEA - DAM, centre du Cesta]
J.-M. Plewa [Trad Tests and Radiations, Labège]

Du velours pour la radiographie éclair bi-impulsionnelle

Des chercheurs du CEA - DAM ont mis au point et étudié la production de deux faisceaux d'électrons successifs à partir d'une cathode en velours pour une application de radiographie éclair **1**. De tels faisceaux d'électrons permettraient d'obtenir deux radiographies d'un objet à deux instants de son évolution et ainsi de mieux appréhender des phénomènes intéressant le CEA - DAM.

Depuis que la France s'est engagée à ne plus recourir aux essais nucléaires, la fiabilité et la sûreté des armes nucléaires françaises sont garanties par le programme Simulation du CEA - DAM. Ce programme dispose sur le site de Valduc de l'installation Epure qui permet de radiographier un objet dense soumis à des conditions représentatives des premiers instants de fonctionnement d'une arme nucléaire. Ici,

la radiographie est dite éclair, car elle vise à observer l'état d'un objet en mouvement rapide : l'objet se déplace à une vitesse de l'ordre de plusieurs kilomètres par seconde, soit plus de cinquante fois la vitesse d'un TGV. À l'image d'un photographe sportif qui chercherait à photographier un sprinteur et ajusterait le temps de pose de son appareil pour réduire le flou de bougé, il est nécessaire d'utiliser un temps de pose ultrabref pour radiographier l'objet. Pour le sprinteur, la lumière réfléchie donne la photographie ; pour l'objet dense, une source de rayons X, créée par l'interaction d'un faisceau d'électrons avec une cible en métal, irradie l'objet et produit la radiographie.

Les expériences de radiographie éclair permettent d'obtenir une image de l'objet à un temps donné. Le CEA - DAM souhaite réaliser des radiographies éclair dites multitemps, qui permettent d'obtenir des images successives du même objet et ainsi d'améliorer la connaissance du comportement des matériaux au cours du temps. Cela est possible en utilisant plusieurs sources, à l'instar de l'installation

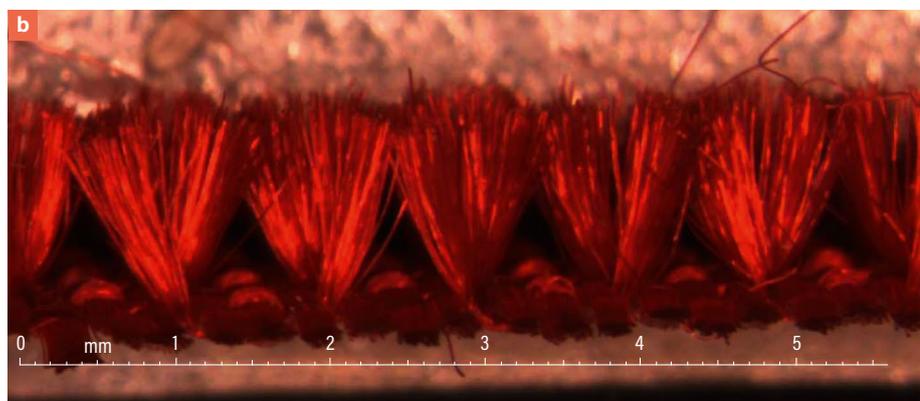
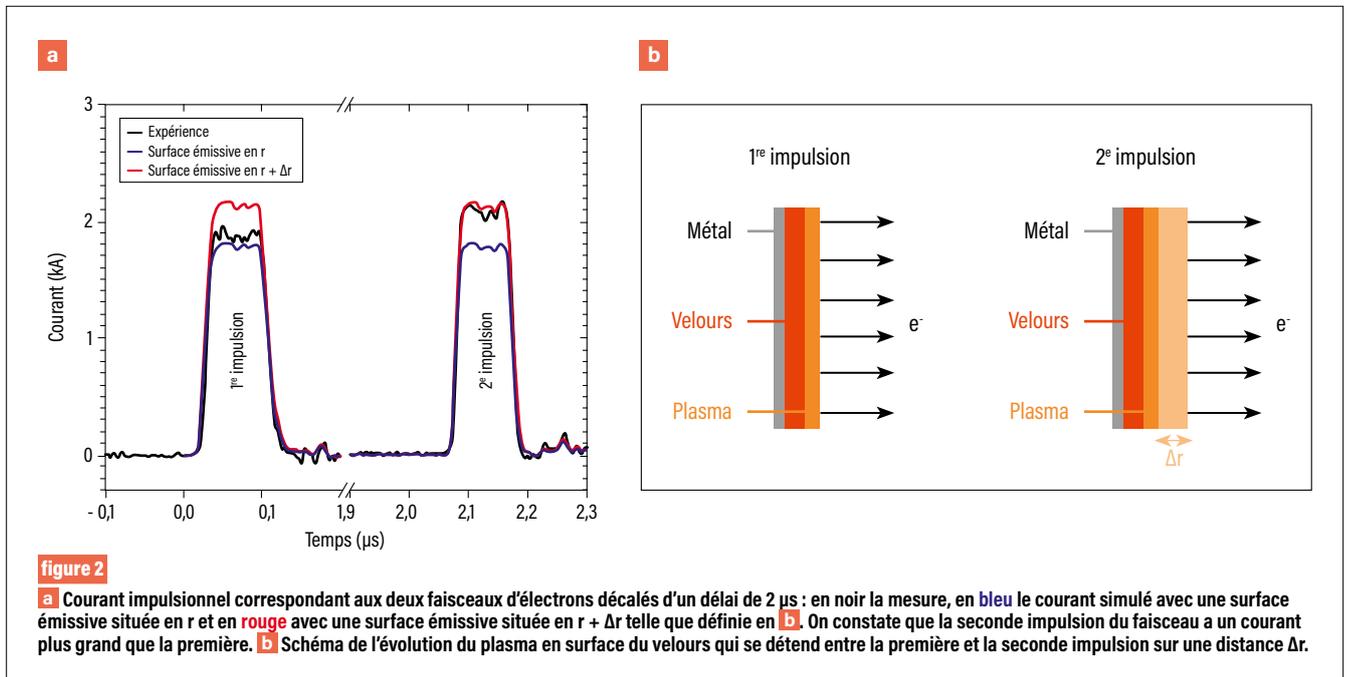


figure 1

a Velours (en rouge) utilisé comme cathode pour la production du faisceau d'électrons sur les machines de radiographie éclair du CEA - DAM.
b Photographie en vue de profil des fils de velours.



Epure. Une amélioration possible est de disposer d'une source multitemps afin de suivre l'évolution selon un axe. Des machines radiographiques multitemps existent déjà en Chine et aux États-Unis, mais utilisent des cathodes dites thermoioniques, nécessitant un vide poussé, lequel n'est pas envisageable sur les accélérateurs d'Epure. En revanche, le velours permet de générer des faisceaux d'électrons de bonne qualité sans vide poussé (figure 1).

Le faisceau d'électrons est produit par l'application d'un champ électrique intense qui arrache les électrons à la cathode de velours. Plus précisément, l'application d'un champ électrique intense provoque un claquage qui conduit à la formation d'un plasma (gaz ionisé) à la surface du velours, et c'est l'émission électronique à la surface du plasma qui crée le faisceau d'électrons [2]. Pour la radiographie éclair multitemps, au moins deux faisceaux d'électrons doivent être produits avec un décalage temporel maîtrisé. Des chercheurs du CEA – DAM ont développé sur le site du Cesta une machine appelée mini-injecteur à induction (Mi2), capable de délivrer deux impulsions successives haute tension de 700 kV, de 2 kA et d'une largeur à mi-hauteur de 80 ns, qui

permettent d'extraire deux faisceaux d'électrons de la cathode de velours [1].

Les premières expérimentations sur Mi2 ont montré que les deux faisceaux émis ne sont pas identiques : le courant du second est supérieur à celui du premier (figure 2a). Le courant d'un faisceau d'électrons est proportionnel à la tension interélectrodes et à la distance anode-cathode. Pour une tension donnée, c'est donc la distance anode-cathode qui n'est pas la même dans les deux cas. Or, comme la cathode est à une position fixe, l'écart pourrait provenir d'un déplacement de la surface émissive lié à l'expansion du plasma sur une distance Δr (figure 2b).

La modélisation de l'expérience a été réalisée avec le code de calcul électromagnétique Large Scale Plasma développé par Voss Scientific, aux États-Unis. Les simulations prennent en compte la géométrie de l'injecteur Mi2 et la tension mesurée expérimentalement aux bornes de la diode. Elles ont été faites pour différentes positions de surface émissive et ont permis de reproduire la mesure de courant expérimentale. La comparaison avec l'expérience (figure 2a) confirme que la variation de courant entre les deux impulsions est due à l'expansion du

plasma qui engendre un déplacement Δr de la surface émissive.

Cette étude sur le mini-injecteur Mi2 a montré que le modèle numérique utilisé permet de reproduire avec précision la dynamique des faisceaux d'électrons intenses issus d'une cathode en velours dans un régime multitemps et pour des délais inter-impulsions variables. Lors des expérimentations sur Mi2, une variation de la densité de courant des deux faisceaux a également été observée. Des travaux sont en cours afin de modéliser les phénomènes physiques à l'origine de ces variations. Ces modèles serviront à terme à étudier d'autres configurations d'injecteur et permettront d'optimiser le point de fonctionnement des accélérateurs de l'installation Epure.

RÉFÉRENCES

- 1 R. Delaunay et al., « Dual-pulse generation from a velvet cathode with a new inductive voltage adder for x-ray flash radiography applications », *Phys. Rev. Accel. Beams*, **25**, 060401 (2022).
- 2 R. B. Miller, « Mechanism of explosive electron emission for dielectric fiber (velvet) cathodes », *Journal of Applied Physics*, **84**, 3880 (1998).

Vers une meilleure évaluation de la résistance d'une soudure

Lors de l'assemblage de pièces métalliques par soudage, des pores apparaissent au sein de la soudure et réduisent la résistance mécanique de l'assemblage. Afin de mieux prévoir cet effet et de comprendre les mécanismes de rupture, le CEA - DAM conduit des travaux de simulation numérique du comportement local du matériau. En collaboration avec Mines Paris-PSL, une équipe de chercheurs a réalisé des simulations novatrices qui montrent l'importance de l'interaction entre les pores **1**.

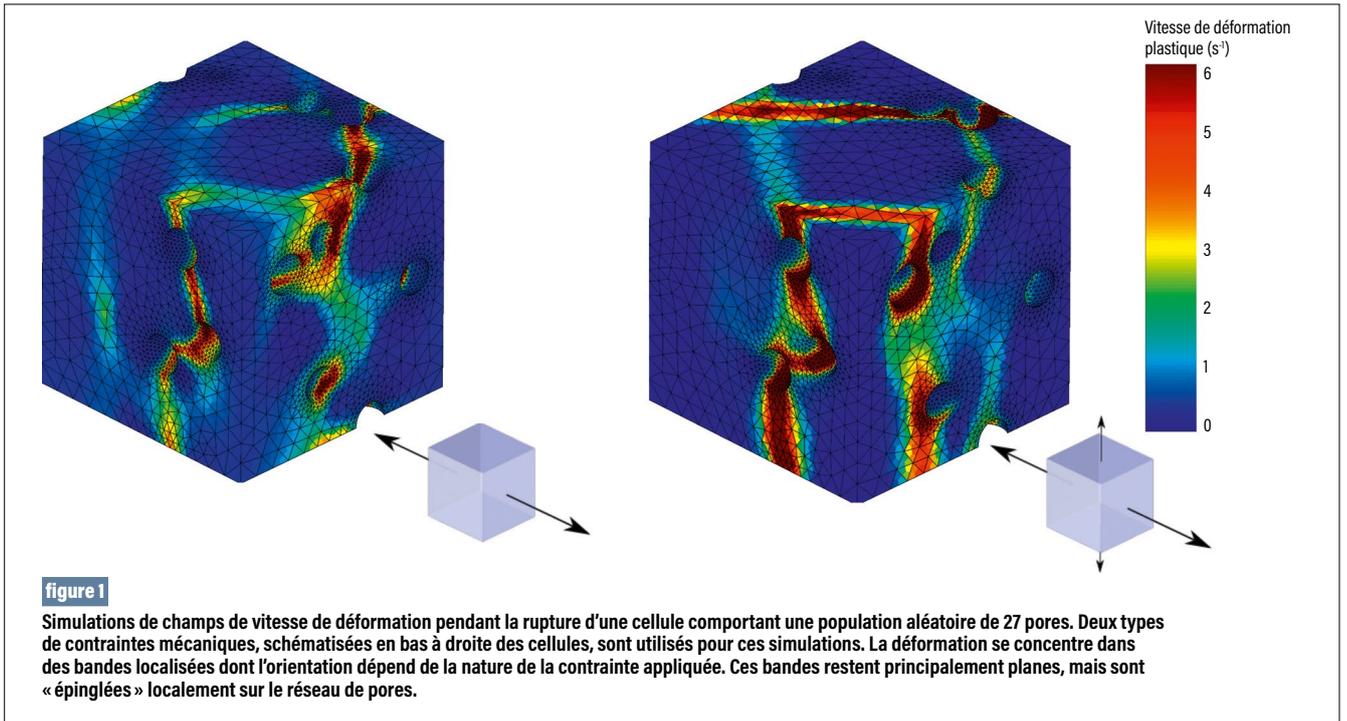
Dans l'emmental, il y a des trous ; dans une soudure aussi. En effet, lorsque deux pièces métalliques sont assemblées par soudage, quelques bulles de gaz sont piégées lors de la solidification du métal fondu. Même si ces pores sont plus petits que l'épaisseur d'un cheveu, ils peuvent affecter la tenue mécanique de pièces nécessaires au CEA - DAM pour ses besoins propres. La rupture dite ductile s'observe dans un matériau après une déformation plastique substantielle. Elle peut se produire lorsqu'un matériau est soumis à un chargement de traction : des pores apparaissent dans les zones les plus déformées, croissent et finalement s'unissent, ce qui mène à la rupture mécanique. Pour mieux prévoir la résistance mécanique de ses pièces, et après avoir caractérisé expérimentalement les soudures et la répartition des pores créés durant le soudage **2**, le CEA - DAM cherche maintenant à comprendre et à modéliser l'effet de ces pores sur la rupture ductile.

Jusqu'à récemment dans la littérature, l'approche dominante pour simuler numériquement un matériau poreux était de considérer un volume

élémentaire microscopique, de géométrie simplifiée : une cellule cubique comportant un pore sphérique isolé, entouré de matériau sain. Les calculs consistaient à appliquer une variété de types de contraintes sur la cellule et à résoudre les équations de la mécanique de façon discrétisée grâce à un maillage. Cette approche permet effectivement d'observer la croissance et convient à des matériaux à faible porosité. Cependant, elle ne permet pas d'étudier l'interaction entre pores voisins, en particulier dans le cas des soudures avec des porosités localement plus élevées.

Pour mieux représenter cette interaction, une équipe du CEA - DAM, en collaboration avec Mines Paris-PSL, a simulé des cellules contenant non plus un pore isolé, mais une population de pores sphériques identiques aléatoirement répartis dans la cellule **1,3**. La rupture de la cellule est atteinte lorsque la déformation forme des bandes localisées. En analysant les résultats de simulation à l'échelle de la cellule, l'équipe a caractérisé mathématiquement ces bandes et est maintenant en mesure de détecter leur apparition et leur orientation. Même si les bandes restent globalement planes, la **figure 1** montre qu'elles peuvent aussi zigzaguer localement afin de relier différents pores. Contrairement au cas de la cellule comportant un pore isolé, des modes plus nombreux de localisation de la déformation, et donc de rupture, sont alors possibles.

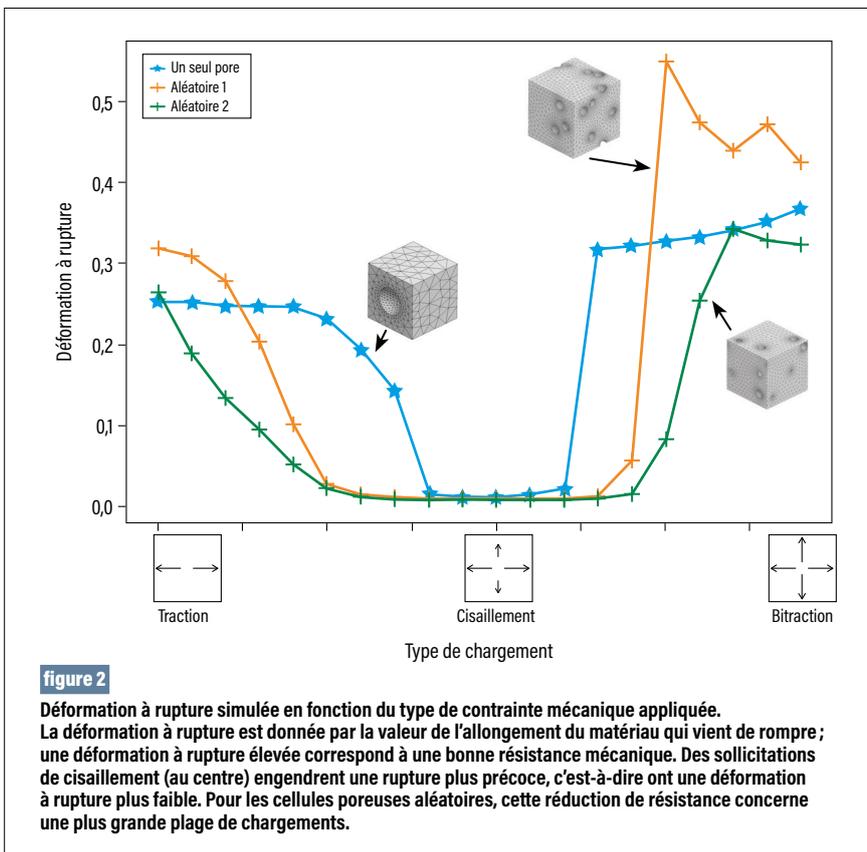
Des modes de rupture différents impliquent des comportements mécaniques différents. Cela concerne en particulier l'intensité de la déformation que peut supporter le matériau sans rompre, paramètre clé pour évaluer la résistance mécanique. Sur la **figure 2**, l'équipe a comparé deux exemples de populations aléatoires de pores à une cellule à un seul pore, et ce pour différents types de sollicitation. Ces études mettent en évidence des similitudes et des différences. Dans tous les cas, les cellules rompent plus aisément en cisaillement qu'en traction. Cependant, les cellules comportant des populations aléatoires de pores ont une plus faible résistance dans une plus



grande plage de contraintes mécaniques. La comparaison entre les deux cellules aléatoires montre aussi que deux distributions spatiales différentes des pores se traduisent par des différences

dans la résistance à rupture de la cellule. Plus généralement, les simulations avec des populations aléatoires sont plus représentatives des mécanismes physiques de la rupture.

Cette étude illustre l'intérêt des simulations à l'échelle de quelques pores pour mieux comprendre les mécanismes de rupture et l'importance de la prise en compte de l'interaction entre défauts. La méthode de simulation doit être ensuite étendue à des populations de pores : plus grand nombre de pores, tailles différentes, etc. Les simulations présentées ici servent déjà de base de données pour un modèle de rupture ductile tenant compte de l'interaction entre pores [4](#).



RÉFÉRENCES

- 1 C. Cadet, J. Besson, S. Flourirot, S. Forest, P. Kerfriden, L. Lacourt, V. De Rancourt, « Strain localization analysis in materials containing randomly distributed voids: Competition between extension and shear failure modes », *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **166**, 104933 (2022).
- 2 L. Lacourt, *Étude numérique de la nocivité des défauts dans les soudures*, thèse de doctorat soutenue le 14 octobre 2019 et délivrée par l'université Paris Sciences et Lettres.
- 3 C. Cadet, J. Besson, S. Flourirot, S. Forest, P. Kerfriden, V. De Rancourt, « Ductile fracture of materials with randomly distributed voids », *International Journal of Fracture*, **230**, p. 193-223 (2021).
- 4 C. Cadet, *Rupture ductile d'un milieu poreux aléatoire : Approche numérique et application aux défauts de soudure*, thèse de doctorat soutenue le 19 septembre 2022 et délivrée par l'université Paris Sciences et Lettres.

Des éclairs aux mousses métalliques pour le Laser Mégajoule

Un procédé unique au monde permettant d'élaborer des mousses métalliques a été conçu au CEA – DAM. Ces mousses sont composées de filaments très fins issus de la cristallisation d'un métal sous l'effet d'éclairs produits lors de claquages **1**. De masse volumique si faible qu'elles flottent sur l'eau, elles ont été conçues pour être utilisées comme cibles dans les expériences menées avec le Laser Mégajoule.

Le Laser Mégajoule est un outil qui permet de réaliser la fusion thermonucléaire en laboratoire. Pour chaque expérience, une cible spécifique est requise. Le besoin exprimé par les physiciens est de disposer d'une cible sous forme de mousse métallique de densité cent fois plus faible que le métal massif. En effet, disposer de structures métalliques de très faible densité permet d'optimiser les conditions d'interaction du laser avec la cible. Outre les expériences réalisées sur le Laser Mégajoule, les applications d'une mousse métallique très légère sont

nombreuses : stockage d'hydrogène, valorisation du CO₂ ou encore support de catalyse.

Une mousse métallique peut être définie comme un métal comportant des pores, comparable à une structure naturelle de type nid d'abeilles. Les premières mousses métalliques ont été synthétisées dans les années cinquante afin d'obtenir des matériaux légers dont les propriétés mécaniques, thermiques, etc., diffèrent du matériau massif. Ces matériaux sont inutilisables pour la fabrication de cibles laser, car les pores ont une dimension supérieure à la taille recherchée de la cible, de l'ordre du millimètre. Pour obtenir des structures aux pores beaucoup plus petits, des procédés spécifiques existent, mais sont peu adaptés à l'objectif, qui est d'atteindre 1 % de la masse volumique du métal massif. Une équipe du CEA – DAM a donc entrepris un programme de recherche qui a conduit à la mise au point d'un procédé de synthèse ayant fait l'objet d'un dépôt de brevet par le CEA – DAM **2**.

Ce procédé permet d'obtenir la mousse de cuivre présentée sur la **figure 1**. Sous binoculaire, on constate qu'elle est constituée de filaments entremêlés dont on ne peut mesurer la taille qu'au microscope

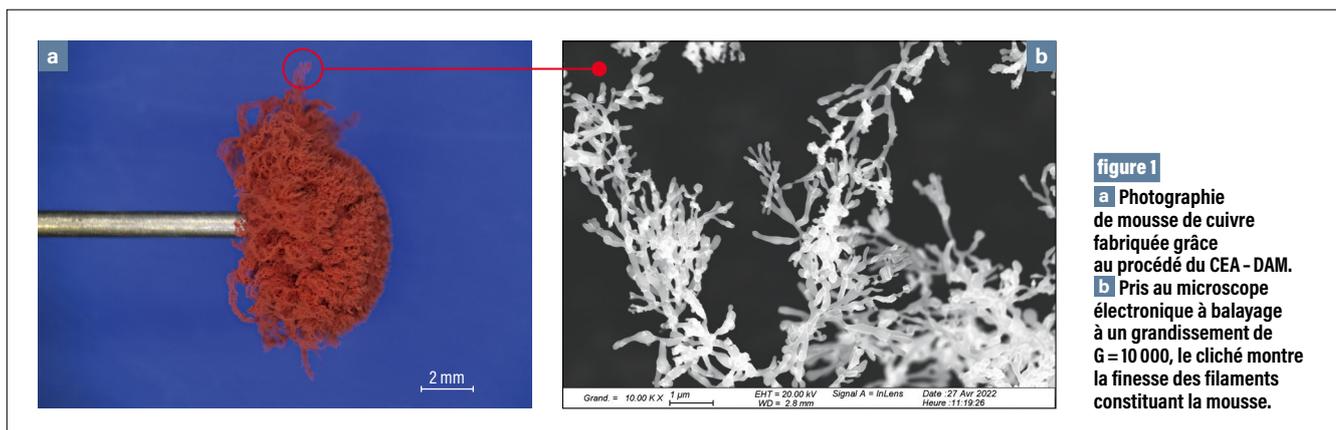


figure 1
a Photographie de mousse de cuivre fabriquée grâce au procédé du CEA – DAM.
b Pris au microscope électronique à balayage à un grandissement de G = 10 000, le cliché montre la finesse des filaments constituant la mousse.

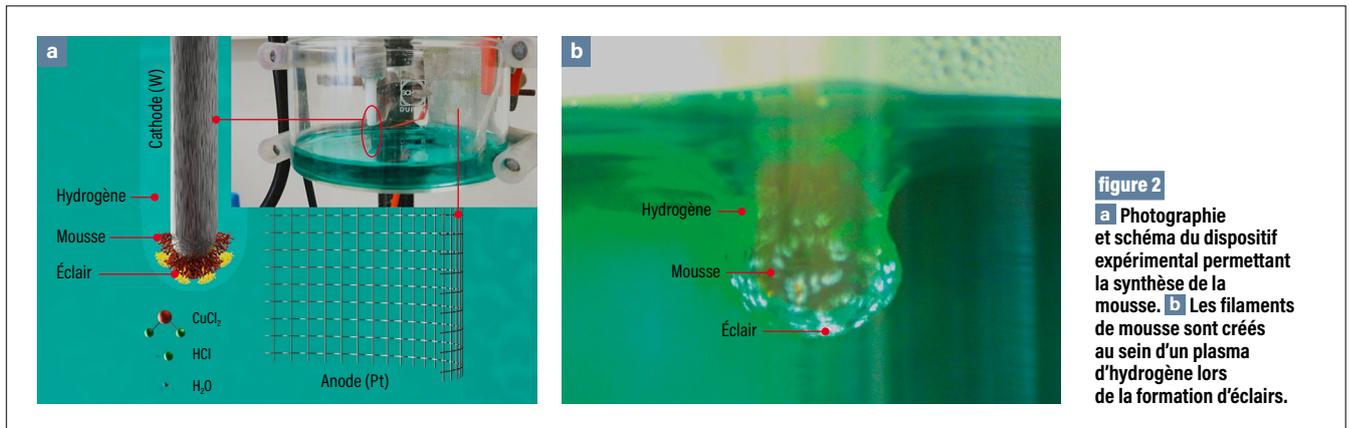


figure 2

a Photographie et schéma du dispositif expérimental permettant la synthèse de la mousse. **b** Les filaments de mousse sont créés au sein d'un plasma d'hydrogène lors de la formation d'éclairs.

électronique à balayage: leur diamètre est de l'ordre de 100 nm. La masse volumique de la mousse de cuivre est de $0,02 \text{ g/cm}^3$, à comparer à celle du cuivre massif qui est de $8,96 \text{ g/cm}^3$.

Le procédé mis au point consiste à créer un plasma (gaz ionisé) entre une électrode en platine (anode) et une pointe en tungstène (cathode) immergées dans une solution aqueuse dans laquelle le métal à déposer se trouve sous forme d'ions (figure 2). Pour créer une poche d'hydrogène par électrolyse de l'eau, puis établir un plasma d'hydrogène, une tension est appliquée entre ces deux électrodes, qui doit être supérieure

à une valeur minimale, dite tension de claquage, dépendant de la composition de la solution [3]. L'éclair produit lors du claquage cristallise le métal en solution sous forme de filaments dont la croissance conduit à la mousse.

La croissance des filaments a été filmée avec une caméra rapide à haute résolution et observée au microscope électronique à balayage. Cette étude a montré l'existence de trois types de morphologie de croissance des filaments de mousse (figure 3). Ces morphologies correspondent aux trois régimes différents de propagation de l'avalanche électronique responsable

de la formation des éclairs [4]. Le métal cristallise en suivant le chemin de propagation de ces derniers. Ainsi, en faisant varier la tension, il est possible de modifier la taille des filaments et donc la masse volumique des mousses obtenues [1].

Ce procédé permet de fabriquer des mousses de métaux purs (cuivre, or, platine, palladium, argent), tout comme des alliages binaires (or-cuivre, or-fer, cuivre-zinc), ternaires (or-cuivre-platine), voire des alliages comportant beaucoup plus d'éléments (fer-cuivre-niobium-argent-tantale-tungstène-platine). De plus, la vitesse de croissance est telle qu'il serait possible de répondre à un besoin de production industrielle de mousses métalliques de morphologie adaptée à l'application envisagée.

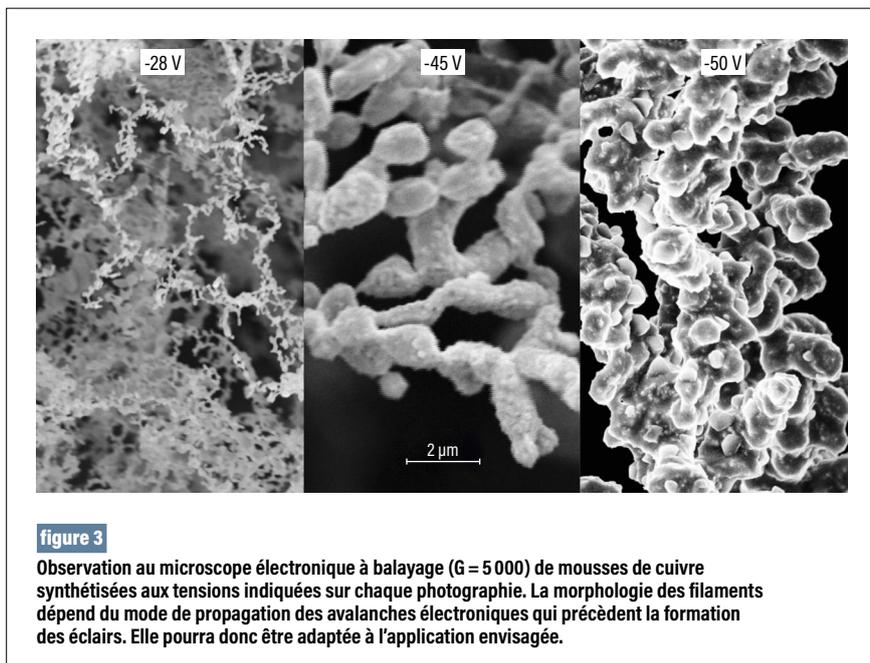


figure 3

Observation au microscope électronique à balayage ($G = 5000$) de mousses de cuivre synthétisées aux tensions indiquées sur chaque photographie. La morphologie des filaments dépend du mode de propagation des avalanches électroniques qui précèdent la formation des éclairs. Elle pourra donc être adaptée à l'application envisagée.

RÉFÉRENCES

1. J. Pinot, R. Botrel, F. Durut, L. Reverdy, L. Pescayre, V. Vignal, « Morphology of metallic foams synthesized by plasma electrolysis deposition », *European Physical Journal Applied Physics*, **97**, 2 (2022).
2. R. Botrel, Brevet N° US 9,512,528 B2 (2016).
3. S. Rocher, R. Botrel, F. Durut, C. Chicanne, M. Theobald, V. Vignal, « Ultra-low density metallic foams synthesized by contact glow discharge electrolysis (CGDE) for laser experiments », *European Physical Journal Applied Physics*, **81**, 10803 (2018).
4. O. Lesaint, « Prebreakdown phenomena in liquids: propagation 'modes' and basic physical properties », *Journal of Physics D: Applied Physics*, **49**, 144001 (2016).

S. Lett, A. Quet, E. Meillot [CEA - DAM, centre du Ripault]

S. Hémary, J. Cormier, P. Villechaise [Institut Pprime, UPR 3346 CNRS - École nationale supérieure de mécanique et d'aérotechnique (ISAE-ENSMA) - Université de Poitiers, Futuroscope-Chasseneuil]

La projection à froid pour fabriquer des pièces complexes

Une équipe du CEA - DAM vient de démontrer qu'il est possible de réparer ou fabriquer un objet en alliage de titane par la technique dite de projection à froid [1](#). Non seulement l'alliage projeté atteint la densité recherchée et ne présente pas de fissures mais, en plus, il possède une bonne résistance mécanique après traitement thermique. Le CEA - DAM et le secteur aérospace, qui sont demandeurs de matériaux résistant toujours mieux aux agressions thermomécaniques, se frottent les mains.

Le Ti-6Al-4V est l'alliage de titane le plus employé dans le domaine aérospace. Contrairement aux méthodes conventionnelles qui portent le matériau à son point de fusion, le procédé dit de projection à froid permet de conserver les propriétés initiales de l'alliage, qui reste à l'état solide, et d'en limiter l'oxydation. Néanmoins, l'adaptation de ce procédé à l'alliage de titane restait un défi technologique qu'a relevé une équipe du CEA - DAM en collaboration avec l'Institut Pprime.

Le principe de fonctionnement de la projection à froid, explicité sur la [figure 1](#), est de chauffer et de mettre sous pression un gaz porteur dans lequel une poudre métallique microscopique est introduite. Ces particules de poudre sont acheminées vers une tuyère dite tuyère de Laval, qui les accélère à une vitesse pouvant atteindre 4 000 kilomètres par heure, une vitesse dix fois plus élevée qu'un TGV lancé à pleine vitesse. Cette vitesse atteinte au moment de l'impact sur le substrat contribue à l'adhérence des particules sur celui-ci et entre elles. La projection des particules sur tout le substrat permet la formation d'une couche. À chaque passage du pistolet, une épaisseur de matière de 0,1 à 1 mm est déposée. Couche après couche, ce procédé permet ainsi la réparation de pièces endommagées ou la fabrication de pièces complexes. Les temps de fabrication sont courts, avec des rendements proches de 100 %, c'est-à-dire que la quasi-totalité de la poudre injectée s'accroche à la pièce. À l'heure de la sobriété énergétique, ces caractéristiques sont à l'avantage du procédé.

La projection à froid est bien adaptée lorsque les particules du matériau projeté se déforment facilement, car elles s'assemblent ainsi au mieux entre

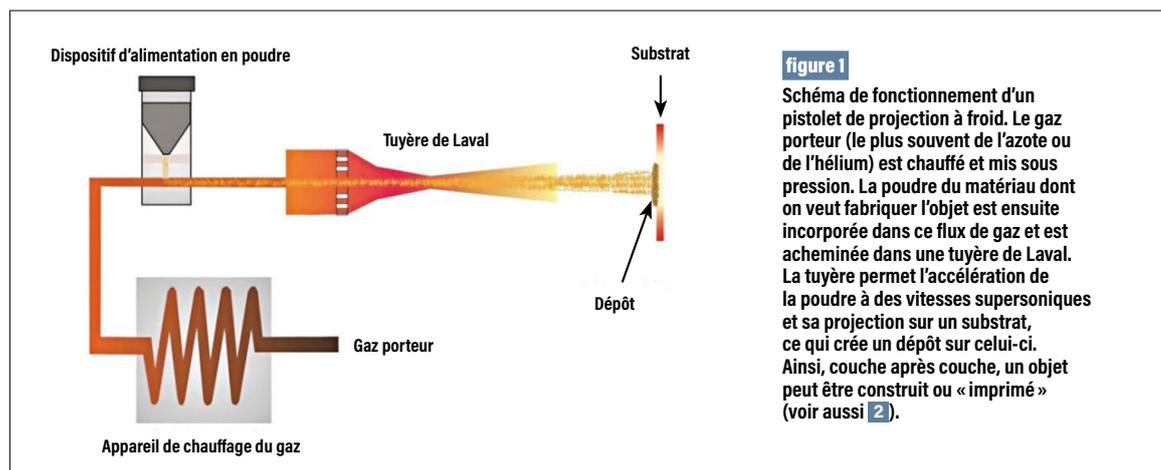


figure 1

Schéma de fonctionnement d'un pistolet de projection à froid. Le gaz porteur (le plus souvent de l'azote ou de l'hélium) est chauffé et mis sous pression. La poudre du matériau dont on veut fabriquer l'objet est ensuite incorporée dans ce flux de gaz et est acheminée dans une tuyère de Laval. La tuyère permet l'accélération de la poudre à des vitesses supersoniques et sa projection sur un substrat, ce qui crée un dépôt sur celui-ci. Ainsi, couche après couche, un objet peut être construit ou « imprimé » (voir aussi [2](#)).

elles et sur le substrat. Mais l'alliage de titane Ti-6Al-4V ne se déforme pas facilement et reste poreux après projection, ce qui limite ses propriétés mécaniques. De plus, au moment de l'impact, la température et la vitesse des particules projetées engendrent ce que l'on appelle des contraintes : il s'agit de forces présentes au sein du matériau pouvant causer des fissures, voire entraîner la rupture de la pièce en cours de production, comme présenté sur la **figure 2a**.

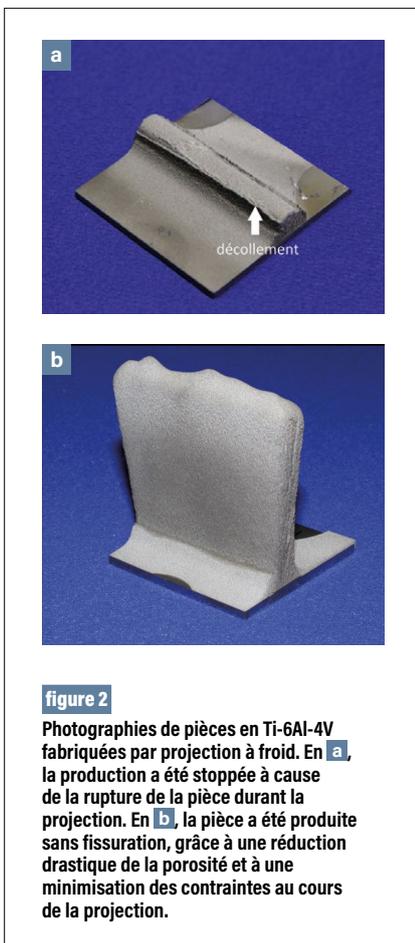


figure 2

Photographies de pièces en Ti-6Al-4V fabriquées par projection à froid. En **a**, la production a été stoppée à cause de la rupture de la pièce durant la projection. En **b**, la pièce a été produite sans fissuration, grâce à une réduction drastique de la porosité et à une minimisation des contraintes au cours de la projection.

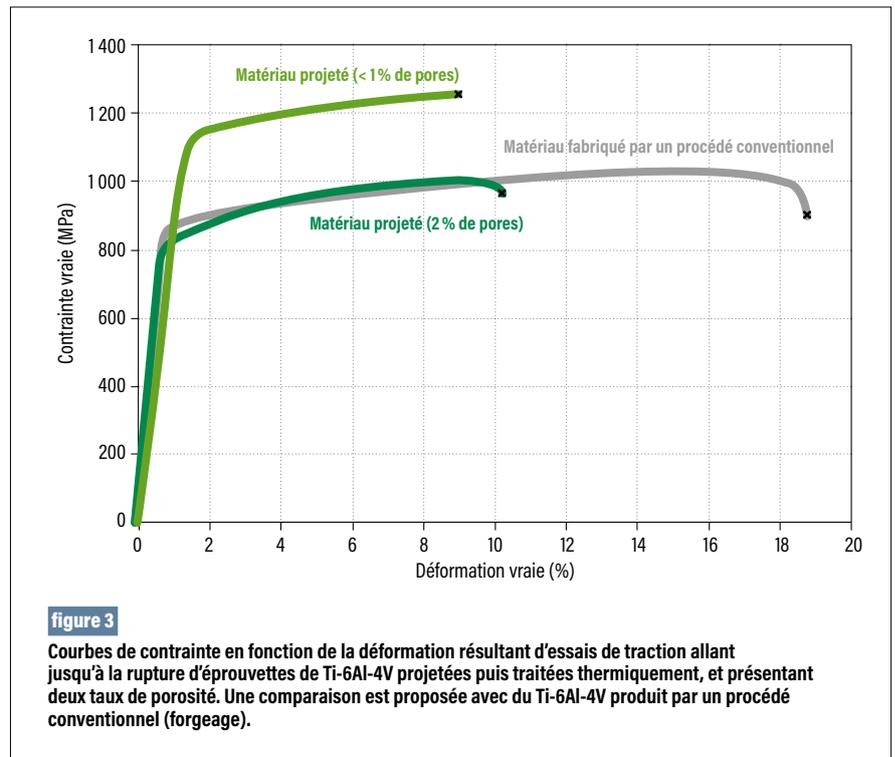


figure 3

Courbes de contrainte en fonction de la déformation résultant d'essais de traction allant jusqu'à la rupture d'éprouvettes de Ti-6Al-4V projetées puis traitées thermiquement, et présentant deux taux de porosité. Une comparaison est proposée avec du Ti-6Al-4V produit par un procédé conventionnel (forgeage).

La collaboration du CEA – DAM avec l'Institut Pprime **1,3** a permis de réduire drastiquement la porosité présente au sein du matériau : en augmentant la vitesse des particules à l'impact, le taux de porosité est passé de 20 % à 1 %. Si ce procédé permet une bonne densification, il restait néanmoins à s'assurer qu'il est possible d'obtenir une résistance mécanique suffisante. La **figure 3** le prouve puisque la résistance mécanique du matériau obtenu après traitement thermique se trouve même être supérieure à celle du Ti-6Al-4V fabriqué par un procédé conventionnel **3**. De plus, l'évaluation des contraintes créées au cours de la projection à froid a mis en exergue une compétition entre des contraintes en tension, dues à la température des particules en vol, et des contraintes en compression, reliées à leur vitesse de projection. La maîtrise de ces contraintes, associée à un taux de porosité extrêmement faible, permet de produire des pièces 3D sans risque de rupture, à l'exemple de celle illustrée sur la **figure 2b**.

Ces travaux ouvrent la voie à la fabrication de pièces 3D avec un niveau de contraintes choisi en fonction

de l'application visée. Par exemple, des contraintes en compression, qui améliorent la résistance en fatigue des matériaux, s'avèrent bénéfiques pour des applications telles que la fabrication d'aubes de turbine pour l'aéronautique **4**.

RÉFÉRENCES

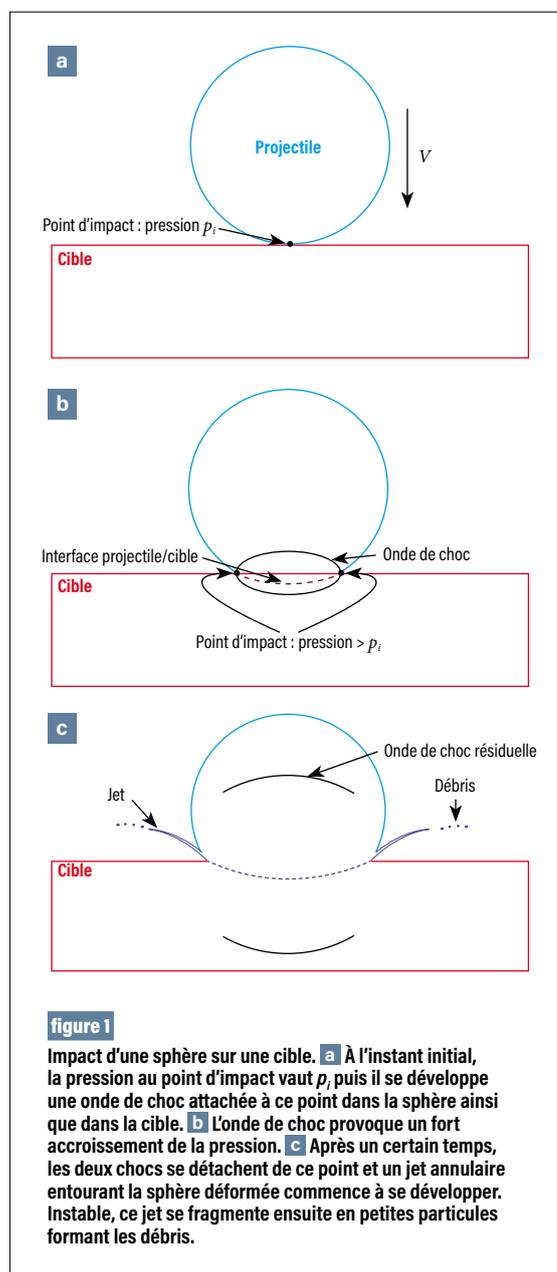
- 1** S. Lett, A. Quet, S. Hémerly, J. Cormier, E. Meillot, P. Villechaise, « Residual stresses development during cold spraying of Ti-6Al-4V combined with in situ shot peening », *Journal of Thermal Spray Technology*, <https://doi.org/10.1007/s11666-022-01514-w> (2022).
- 2** Collectif du CEA – DAM, *Matériaux et procédés : un savoir-faire spécifique*, « partie III : Vers une ingénierie numérique des matériaux », revue *chocs*, **51**, p. 69-93 (2020).
- 3** S. Lett, *Projection de Ti-6Al-4V par cold spray pour un objectif de fabrication additive : contraintes résiduelles, microstructures et propriétés mécaniques*, thèse de doctorat soutenue le 27 octobre 2022 et délivrée par l'université de Poitiers.
- 4** M. E. Launey, R. Busch, J. J. Kruzic, « Effects of free volume changes and residual stresses on the fatigue and fracture behavior of Zr-Ti-Ni-Cu-Be bulk metallic glass », *Acta Materialia*, **56**(3), p. 500-511 (2008).

Impact d'une bille sur un solide : rebond, adhésion ou désintégration ?

L'impact entre deux objets est un phénomène qui recèle encore bien des mystères. Le cas d'une sphère percutant une surface est un événement que l'on rencontre souvent dans la nature (pluie, chute d'une météorite) et dans de nombreuses expériences du quotidien (arrosage, imprimantes à jet d'encre). Selon la vitesse d'impact et les caractéristiques de la surface (nature du matériau, orientation, état de surface, etc.), la sphère peut rebondir, adhérer à la surface ou se désintégrer. Le CEA – DAM a récemment combiné une approche théorique avec des simulations numériques et propose une compréhension des mécanismes à l'œuvre **1**.

Si l'impact d'une bille sur une cible a fait l'objet de nombreux travaux, certains aspects sont encore largement incompris. Selon la vitesse d'impact, la bille peut rebondir, adhérer ou se désintégrer, sans qu'il existe d'explications véritables à ces trois régimes. Quels sont les mécanismes d'adhésion et de désintégration ? Comment passe-t-on d'un régime à l'autre ? Autant de questions sans réponse claire qui limitent fortement la capacité à prendre en compte ces processus dans les applications. Pour aborder cette physique, une équipe du CEA – DAM a choisi d'associer une approche théorique à des simulations à l'échelle atomique. Le nombre d'atomes pouvant être grand (plusieurs milliards), leur comportement à grande échelle tend vers celui décrit par la mécanique des milieux continus. En revanche, il apparaît localement des mécanismes propres à l'échelle atomique pouvant fortement contribuer à l'adhésion et à la rupture de la sphère.

Le système étudié est une bille d'étain solide impactant une cible plane du même matériau **1**. L'équipe a choisi cet élément chimique, car c'est



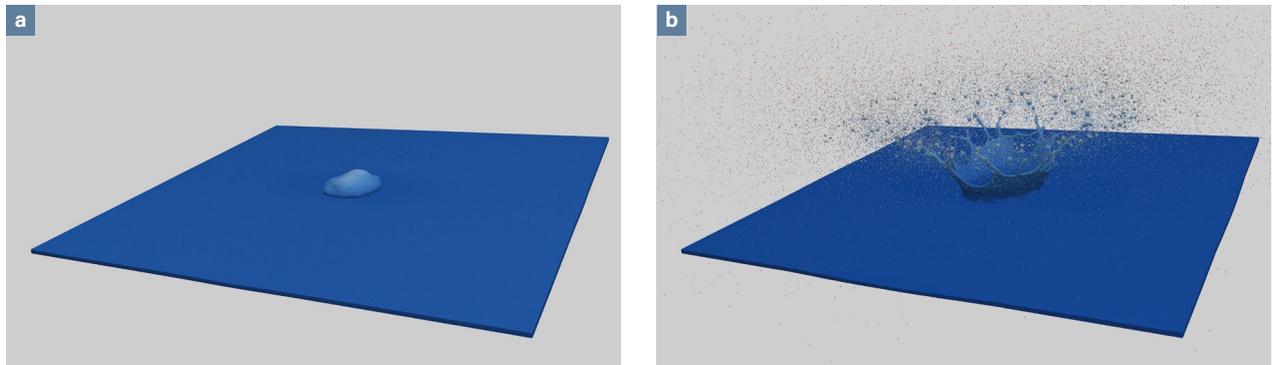


figure 2

Résultats de simulations de dynamique moléculaire effectuées avec le code ExaStamp. **a** Impact à 750 m/s : la sphère reste collée à la surface de la cible (régime d'adhésion). **b** Impact à 2 000 m/s : il se forme un jet circulaire (régime d'érosion) ayant pour origine l'interface entre la sphère et la cible qui se fragmente rapidement en gouttelettes.

un métal d'intérêt pour les besoins du programme Simulation du CEA – DAM et parce qu'il existe dans la littérature une observation expérimentale précise **2**. Le modèle théorique proposé prévoit un processus en deux étapes : d'abord le développement d'ondes de choc dans la sphère et dans la cible au point d'impact, puis le détachement des chocs de ce point et la formation d'un jet circulaire à la frontière entre la bille et la cible (**figure 1**). La première étape s'accompagne d'une forte augmentation de la pression au point d'impact. Le jet formé au cours de la seconde étape croît, puis se fragmente en petites particules (débris). Le modèle proposé permet de calculer leur vitesse ainsi que l'orientation de leur trajectoire.

Les simulations numériques s'appuyant sur ce modèle permettent d'évaluer et de compléter cette approche théorique. La force interatomique retenue est choisie de façon à décrire correctement les propriétés de l'étain utiles à ce travail **3**, comme l'évolution du point de fusion avec la pression. Le code de calcul utilisé est le code ExaStamp **4**, développé au CEA – DAM et parfaitement adapté à l'architecture des supercalculateurs actuels. Les simulations ont été menées sur le supercalculateur Joliot-Curie du Très Grand Centre de calcul (TGCC), situé sur le site DAM

Île-de-France du CEA. La bille a un diamètre de 50 nanomètres (nm) ; la cible est un parallépipède rectangle d'une profondeur de 100 nm et de dimensions latérales 600×600 nm. L'ensemble comporte 1,32 milliard d'atomes.

L'analyse des résultats de simulation conforte le scénario théorique présenté sur la **figure 1**. En effet, on observe un doublement de la pression entre l'instant initial et le détachement des chocs, dont les conséquences sont importantes : le milieu est solide au centre de la cible, puis, la température due au choc dépassant la température de fusion, liquide en périphérie. Cet état liquide a effectivement été observé expérimentalement **2**.

Aux vitesses d'impact inférieures à 1 000 m/s, la sphère reste collée à la cible sans qu'il se forme de jet (**figure 2**). Puis, au-delà de 1 000 m/s, le régime d'érosion se met en place : un jet apparaît et se fragmente en de multiples gouttelettes. La vitesse et l'orientation de la trajectoire du jet et des gouttelettes obtenues par simulation numérique sont conformes aux prévisions théoriques, ainsi qu'aux observations expérimentales.

Enfin, une analyse approfondie des résultats de simulation montre que l'adhésion résulte d'une fusion partielle de la matière aux environs de l'interface

entre la cible et la sphère, imputable à l'accroissement de la pression de choc, mais aussi à une forte déformation locale des matériaux.

La combinaison des travaux théoriques, de simulations numériques à grandes échelles et d'observations expérimentales permet ainsi de progresser significativement dans cet entrelacs de mécanismes physiques. Ce type d'approche permettra à terme d'améliorer des procédés industriels, comme la projection à froid (pour ce procédé, voir pages 28-29).

RÉFÉRENCES

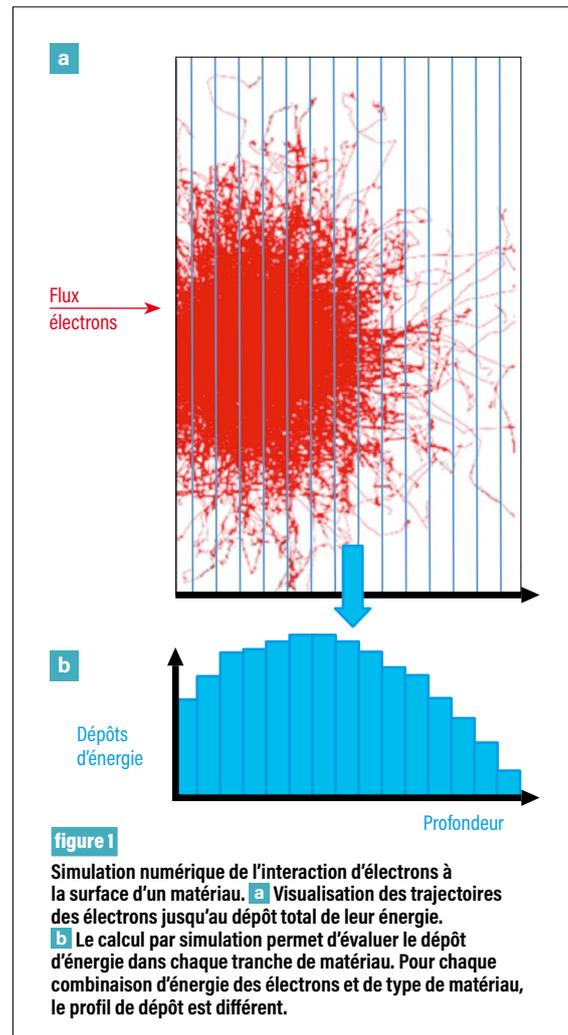
- 1** L. Soulard, T. Carrard, O. Durand, « Molecular dynamics study of the impact of a solid drop on a solid target », *J. Appl. Phys.*, **131**, 135901 (2022).
- 2** M. Hassani-Gangaraj, D. Veysset, K. A. Nelson, C. A. Schuh, « Melt-driven erosion in microparticle impact », *Nat. Commun.*, **9**, 5077 (2018).
- 3** R. Ravelo, M. Baskes, « Equilibrium and thermodynamic properties of grey, white, and liquid tin », *Phys. Rev. Lett.*, **79**, 2482 (1997).
- 4** R. Prat, T. Carrard, L. Soulard, O. Durand, R. Namyst, L. Colombet, « AMR-based molecular dynamics for non-uniform, highly dynamic particle simulations », *Computer Physics Communications*, **253**, 107177 (2020).

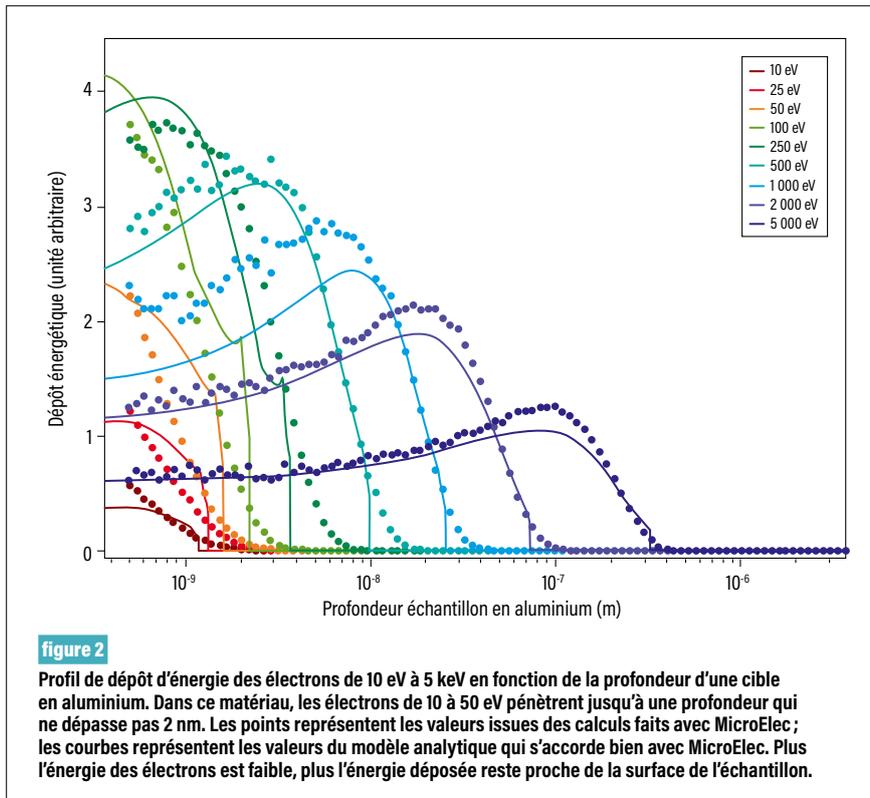
D. Lambert, M. Raine [CEA – DAM, centre DAM Île-de-France]
Q. Gibaru [Onera, Toulouse, CEA – DAM, centre DAM Île-de-France et Cnes, Toulouse]
C. Inguibert [Onera, Toulouse]

Matériaux sous irradiation : prise en compte des dépôts de surface

Une équipe rassemblant le CEA – DAM et l’Onera a rendu possible la simulation numérique du transport d’électrons de basse énergie (10 eV-5 keV) dans onze matériaux différents **1**. Dans l’espace, ces électrons causent des dommages à la surface des matériaux constitutifs de satellites et dégradent leurs performances. Une meilleure estimation de leur transport permettra une conception optimisée de ces matériaux.

L’étude du transport d’électrons de faible énergie (10 eV-5 keV) dans la matière présente un grand intérêt dans de nombreux domaines tels que des applications de la physique nucléaire, la médecine, le spatial, la spectroscopie électronique. Elle intéresse aussi les programmes de microélectronique du CEA – DAM **2**. Dans le domaine des technologies spatiales, l’estimation du dépôt d’énergie dans les premières couches atomiques de la surface des satellites, jusqu’à une profondeur de l’ordre de 10 nm, est une préoccupation majeure pour les missions spatiales, car les particules de faible énergie cinétique peuvent y provoquer des dégradations dans les matériaux (aluminium, argent, cuivre, silice, verres, revêtements polymères...) et perturber les systèmes. L’ampleur des dégradations, comme la détérioration des propriétés optiques de revêtements polymères, dépend des caractéristiques du dépôt d’énergie des radiations de l’environnement spatial, des électrons en particulier. C’est pourquoi le CEA – DAM, l’Onera et le Cnes ont financé des travaux de modélisation du dépôt d’énergie de ces électrons dans différents matériaux d’intérêt. Afin d’optimiser *in fine* la conception des objets concernés, un enjeu était de connaître la localisation de ces dépôts à une résolution spatiale de quelques nanomètres.





Le passage d'un électron de basse énergie dans la matière met en mouvement des particules, des électrons en particulier qui, à leur tour, peuvent mettre en mouvement d'autres électrons. La population globale des particules issue d'un flux d'électrons devient rapidement importante, comme une simulation numérique l'illustre sur la **figure 1a**. Les trajectoires individuelles des particules sont globalement aléatoires. Pour une approche à une dimension géométrique, le matériau cible est découpé suivant la profondeur en tranches de faible épaisseur (quelques nanomètres). L'estimation du dépôt d'énergie de ces particules est réalisée par simulation numérique, au moyen d'une approche statistique, et le dépôt local de chacune d'elles est associé à la tranche de matériau correspondante. La somme des événements statistiques dans une tranche donnée permet de construire le profil de dépôt d'énergie en fonction de la profondeur (**figure 1b**).

Avec des modèles physiques standard, les calculs des dépôts sont maîtrisés pour des épaisseurs de matériau de l'ordre de 10 μm . Il y a une dizaine d'années **3**, le CEA – DAM a développé

un module de physique qui permet de calculer les dépôts d'énergie des électrons dans le silicium. Appelé MicroElec en référence à son domaine de prédilection, la microélectronique, ce module a été intégré au code de transport de particules open source Geant4. Celui-ci transportait les électrons jusqu'à une limite basse en énergie de 250 eV. MicroElec traite les énergies inférieures et la précision des dépôts atteint 10 nm pour le matériau pris en compte, le silicium.

Dans les travaux rapportés dans **1.4**, le module MicroElec a été enrichi de modèles de processus d'interaction adaptés aux plus basses énergies et aux principaux matériaux d'intérêt. Le calcul des dépôts d'énergie est désormais possible et permet d'obtenir une résolution spatiale inférieure à quelques nanomètres pour onze matériaux différents, à savoir le silicium, le béryllium, le carbone, le titane, le fer, le nickel, le cuivre, le germanium, l'argent, le tungstène et l'or.

Les profils de dépôts d'énergie ont été estimés avec MicroElec pour différentes énergies d'électrons et les onze matériaux désormais disponibles. La

précision des résultats a été comparée avec celle obtenue avec d'autres modèles numériques : dans l'ensemble, les profils de profondeur sont fidèlement reproduits avec des erreurs inférieures à 30 %. Cette erreur est de l'ordre de grandeur des écarts classiques entre les différentes simulations de ce domaine.

Comme les calculs reposant sur une approche statistique sont coûteux en mise en œuvre et temps de calcul, une solution analytique a été construite en complément. Des formules des profils de dépôt des électrons suivant la profondeur, basées sur les expressions analytiques des probabilités de transmission de nos travaux précédents **5**, ont été proposées. La **figure 2** illustre les résultats obtenus avec MicroElec et avec les solutions analytiques pour différentes énergies d'électron dans l'aluminium. Les résultats de cette étude permettent ainsi d'estimer le dépôt surfacique des électrons dans onze matériaux de la microélectronique et d'améliorer la résolution spatiale jusqu'à quelques nanomètres.

RÉFÉRENCES

- 1** Q. Gibaru, C. Inguibert, P. Caron, M. Belhaj, M. Raine, D. Lambert, « Surface ionizing dose deposited by low energy electrons (10 eV-10 keV) in eleven monoatomic materials: Monte Carlo calculations and analytical expressions », *Applied Surface Science*, **576**, 151813 (2022).
- 2** Collectif du CEA – DAM, *Électronique, revue chocs*, **53**, à paraître à l'automne 2023.
- 3** A. Valentin, M. Raine, J.-É. Sauvestre, M. Gaillardin, P. Paillet, « Geant4 physics processes for microdosimetry simulation: Very low energy electromagnetic models for electrons in silicon », *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, **288**, p. 66-73 (2012).
- 4** Q. Gibaru, *Modèle de transport d'électrons basse énergie pour les diélectriques en application spatiale*, thèse de doctorat soutenue le 22 novembre 2022 et délivrée par l'université de Toulouse.
- 5** Q. Gibaru, C. Inguibert, M. Belhaj, M. Raine, D. Lambert, « Monte-Carlo simulation and analytical expressions for the extrapolated range and transmission rate of low energy electrons [10 eV-10 keV] in 11 monoatomic materials », *Applied Surface Science*, **570**, 151154 (2021).

Un refroidissement liquide pour améliorer la cadence des lasers de puissance

Une grande installation laser de puissance comme le Laser Mégajoule (LMJ), situé au centre CEA - DAM du Cesta, est limitée à une cadence de quelques tirs par jour seulement. Une équipe du CEA - DAM a réussi à mettre au point un module amplificateur qui permettrait de travailler jusqu'à une cadence d'un tir par minute 1.

Les lasers de puissance comme le Laser Mégajoule sont des installations exceptionnelles, capables de recréer en laboratoire des conditions de pression et de température similaires à celles rencontrées au centre du Soleil. Ils sont constitués de centaines de faisceaux laser de grandes dimensions (métriques), focalisés au même instant sur une cible de la taille d'une tête d'épingle. L'augmentation de leur cadence de tir constitue un enjeu important en physique des plasmas, pour la génération de faisceaux de particules ou encore dans le cadre d'études pour la production d'énergie.

Une cadence de tir limitée

Sur un laser de puissance, le milieu amplificateur est constitué de plaques de verre contenant des ions néodyme. Ces ions sont excités grâce à la lumière émise par des lampes flash. Lorsque le faisceau laser traverse le verre, l'énergie des ions excités est transférée au faisceau dont l'énergie est ainsi amplifiée. Néanmoins, la lumière émise par les lampes flash génère aussi un dépôt de chaleur dans le verre, qui se déforme et dont les propriétés optiques sont modifiées. Ces effets néfastes conduisent à une déformation de la surface d'onde du faisceau. Pour conserver d'un tir à l'autre un faisceau de qualité optique suffisante, la déformation de la surface d'onde doit être

inférieure à 200 nm environ et il est nécessaire pour cela d'attendre la relaxation thermique du verre, ce qui prend plusieurs heures, car sa conductivité thermique (aptitude à transférer la chaleur) est faible. Aussi, pour améliorer la cadence de tir, forcer le refroidissement du verre est indispensable.

Vers un refroidissement maîtrisé

L'obtention d'une qualité de faisceau élevée, maîtrisée et stable d'un tir à l'autre est conditionnée à la maîtrise et à la stabilité du refroidissement des plaques de verre. Les plaques de verre contenant du néodyme et les lampes flash constituent ce qu'on appelle un démonstrateur de module amplificateur refroidi par un liquide caloporteur, de taille adaptée à l'amplification d'un faisceau laser représentant 1/4 de la section d'un faisceau du LMJ. Dans le cadre du projet Lasers énergétiques en Aquitaine pour les plasmas à haute puissance moyenne (Leap), cofinancé par la Commission européenne et la Région Nouvelle-Aquitaine, une équipe du CEA - DAM a mis au point un démonstrateur de module amplificateur refroidi par un liquide caloporteur, de taille adaptée à l'amplification d'un faisceau laser, représentant un quart de la section d'un faisceau du LMJ (figure 1). De plus, elle a construit une chaîne de modélisation numérique, comprenant un code développé au CEA - DAM et des logiciels du commerce (Fluent®, Comsol®), pour simuler les phénomènes mis en jeu dans son fonctionnement 2. Le premier traite l'émission lumineuse des lampes flash et le dépôt de chaleur dans les plaques; les seconds prennent en compte l'écoulement du liquide, l'évacuation de cette chaleur et la déformation de la surface d'onde du faisceau engendrée par les phénomènes précédents.

Les plaques de verre sont immergées dans le liquide caloporteur qui est donc traversé par le faisceau laser. Aussi, la maîtrise du refroidissement nécessite-t-elle la sélection d'un liquide caloporteur performant vis-à-vis de critères thermohydrauliques,

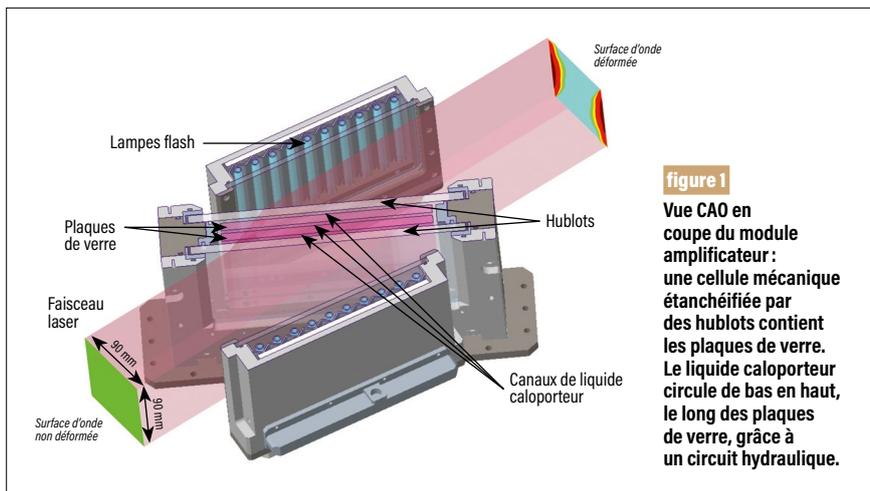


figure 1

Vue CAO en coupe du module amplificateur : une cellule mécanique étanchéifiée par des hublots contient les plaques de verre. Le liquide caloporteur circule de bas en haut, le long des plaques de verre, grâce à un circuit hydraulique.

optiques (transparence, indice de réfraction, etc.) et de compatibilité avec le verre. Plusieurs fluides ont été caractérisés expérimentalement et le respect des deux derniers critères a permis d'identifier le meilleur candidat : un liquide perfluoré de référence Galden®HT135.

En ce qui concerne la stabilité du refroidissement, elle a été obtenue grâce à la maîtrise des paramètres thermohydrauliques de l'écoulement : débit, pression, température. Une boucle hydraulique de refroidissement appropriée a été développée. Elle met en œuvre des régulations en débit et pression qui ont été doublement brevetées 3,4. Ces régulations permettent de minimiser les dégradations de qualité optique induites par la pression du liquide sur les optiques, mais également d'assurer un écoulement laminaire très stable, qui a été validé par

des expériences menées conjointement avec l'institut Pprime à Poitiers et par la simulation numérique (figure 2a). De plus, une double régulation thermique assure une stabilité de température du liquide à $\pm 0,01$ K au passage du liquide au contact des plaques.

Des performances remarquables

Le module amplificateur mis au point a été testé dans un laboratoire dédié au moyen d'un laser de longueur d'onde identique à celle du Laser Mégajoule : ses performances optiques ont été caractérisées grâce à des mesures par photodiode et analyseurs optiques. Une cadence de 1 tir par minute a été atteinte. À cette cadence, le module amplificateur permet de générer des niveaux d'amplification laser stables et une déformation de surface d'onde

faible (< 200 nm) et stable d'un tir à l'autre (figure 2b), validant ainsi le fonctionnement requis. Les performances obtenues sont bien restituées par la simulation, ce qui confirme la maîtrise de l'ensemble des phénomènes physiques mis en jeu. Enfin, il est confirmé expérimentalement qu'en cas d'instabilité des paramètres thermohydrauliques de l'écoulement, la surface d'onde du faisceau se dégrade significativement, ce qui valide les précautions prises sur le refroidissement. Ces résultats ouvrent des perspectives quant à un possible développement industriel.

RÉFÉRENCES

- 1 J.-F. Lupi, P.-M. Dalbiès, S. Cavaro, P. Manac'h, É. Bordenave, J.-M. Sajer, J. G. Moreau, N. Blanchot, J. Neauport, « Liquid-cooled Nd:phosphate split-slab large aperture amplifier pumped by flash-lamps », *Optics and Laser Technology*, **152**, 108101 (2022).
- 2 R. Chonion, J.-M. Sajer, E. Bordenave, F. Le Palud, P.-M. Dalbiès, J. Neauport, « Multiphysics model of liquid-cooled Nd:phosphate split-slabs in large aperture optical amplifiers », *Optics Express*, **28**, p. 20162-20176 (2020).
- 3 P.-M. Dalbiès *et al.*, « Système à débit ajustable pour refroidir un milieu amplificateur », brevet français FR3095555 A1 (2020).
- 4 P.-M. Dalbiès *et al.*, « Système à pression ajustable pour refroidir un milieu amplificateur », brevet français FR3095556 A1 (2020).

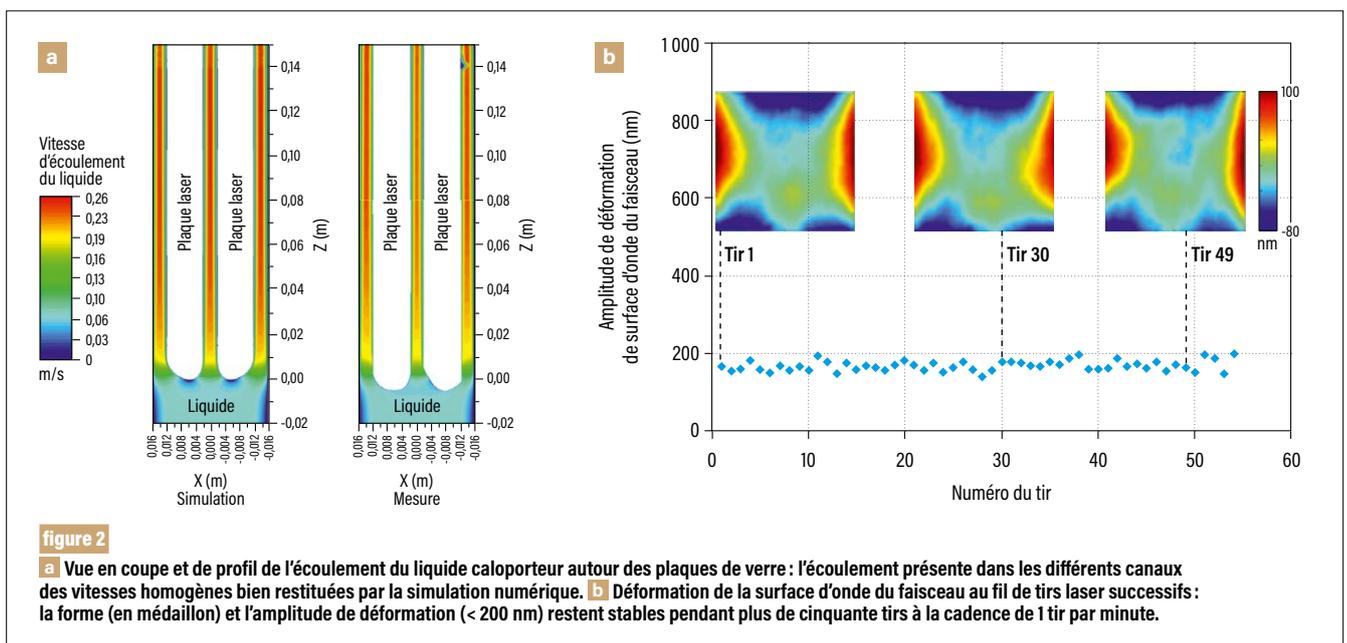


figure 2

a Vue en coupe et de profil de l'écoulement du liquide caloporteur autour des plaques de verre : l'écoulement présente dans les différents canaux des vitesses homogènes bien restituées par la simulation numérique. **b** Déformation de la surface d'onde du faisceau au fil de tirs laser successifs : la forme (en médaillon) et l'amplitude de déformation (< 200 nm) restent stables pendant plus de cinquante tirs à la cadence de 1 tir par minute.

S. Generoso, P. Achim [CEA – DAM, centre DAM Île-de-France]

Détection des essais nucléaires : vers une meilleure prise en compte des émissions industrielles

Le réseau de surveillance international dédié à la détection des essais nucléaires mesure quotidiennement la radioactivité dans l'atmosphère. Celle-ci peut être d'origine naturelle, industrielle ou émise à la suite d'un essai nucléaire clandestin. Une équipe du CEA – DAM a montré l'importance de prendre en compte les émissions réelles des industriels dans les simulations numériques utilisées pour identifier l'origine de ces détections **1**.

Un réseau international de capteurs sonde en continu l'atmosphère pour détecter des traces d'éléments radioactifs signant une explosion nucléaire. C'est le Système de surveillance international (SSI) dédié au contrôle du Traité d'interdiction complète des essais nucléaires (Tice), qui comprend également une surveillance sismique, hydroacoustique et infrasonore. Parmi les éléments radioactifs créés lors d'une explosion nucléaire souterraine, certains gaz rares sont susceptibles de migrer à la surface et de s'échapper dans l'atmosphère. Ils sont alors transportés par les vents jusqu'à atteindre éventuellement un des capteurs du Tice, qui pourra en mesurer la concentration de manière précise. C'est le cas notamment du xénon 133 (^{133}Xe), qui peut être détecté à plusieurs centaines, voire milliers de kilomètres du lieu d'émission.

Les experts du CEA – DAM ont pour mission de collecter, analyser et interpréter les détections du SSI. Une difficulté concerne l'abondance des détections de radio-isotopes d'origine naturelle ou industrielle. Comprendre leur origine est essentiel, car certains d'entre eux peuvent interférer avec le signal d'une explosion nucléaire. Par exemple, les rejets quotidiens de ^{133}Xe dus à la production mondiale d'isotopes à

usage médical génèrent des détections quasi quotidiennes, très variables dans l'espace et dans le temps. La simulation numérique de ce bruit de fond mondial est devenue l'un des outils clés pour identifier les détections des stations du Tice qui en résultent. Elle consiste à calculer le transport atmosphérique des rejets industriels de ^{133}Xe afin de prévoir les activités volumiques attendues sur les stations de mesure. Validé par confrontation à plus de 6000 détections enregistrées dans le monde sur une période de deux ans **2,3**, cet outil est opérationnel depuis dix ans et permet en grande partie de discriminer les détections d'origine industrielle. Cependant, des incertitudes existent, notamment sur les rejets et les conditions météorologiques, et l'origine des détections observées peut être incertaine.

Pour répondre à cette problématique, le projet Source Term Analysis of Xenon (Stax), coordonné et financé par un laboratoire américain, vise à mesurer en continu le xénon radioactif émis par les activités industrielles. Les rejets de l'Institut national des radioéléments (IRE), une usine de production d'isotopes à usage médical, située à Fleurus en Belgique, sont mesurés directement sur site depuis 2018 et les données transmises en temps réel de manière automatique. Les experts du CEA – DAM utilisent ces données réelles pour réduire les incertitudes dans les simulations du transport atmosphérique.

En effet, l'importance d'utiliser ces données réelles a été mise en lumière lors d'une étude mettant en œuvre deux simulations différentes. Chacune d'elles permet de calculer le bruit de fond généré par les rejets quotidiens de l'IRE sur une période d'une année. Les rejets sont représentés dans la première par une concentration constante (telle que décrite dans l'outil opérationnel avant cette étude), dans la deuxième par les rejets réellement mesurés.

Les résultats des deux approches ont été comparés à l'emplacement de huit stations de mesure (**figure 1**).

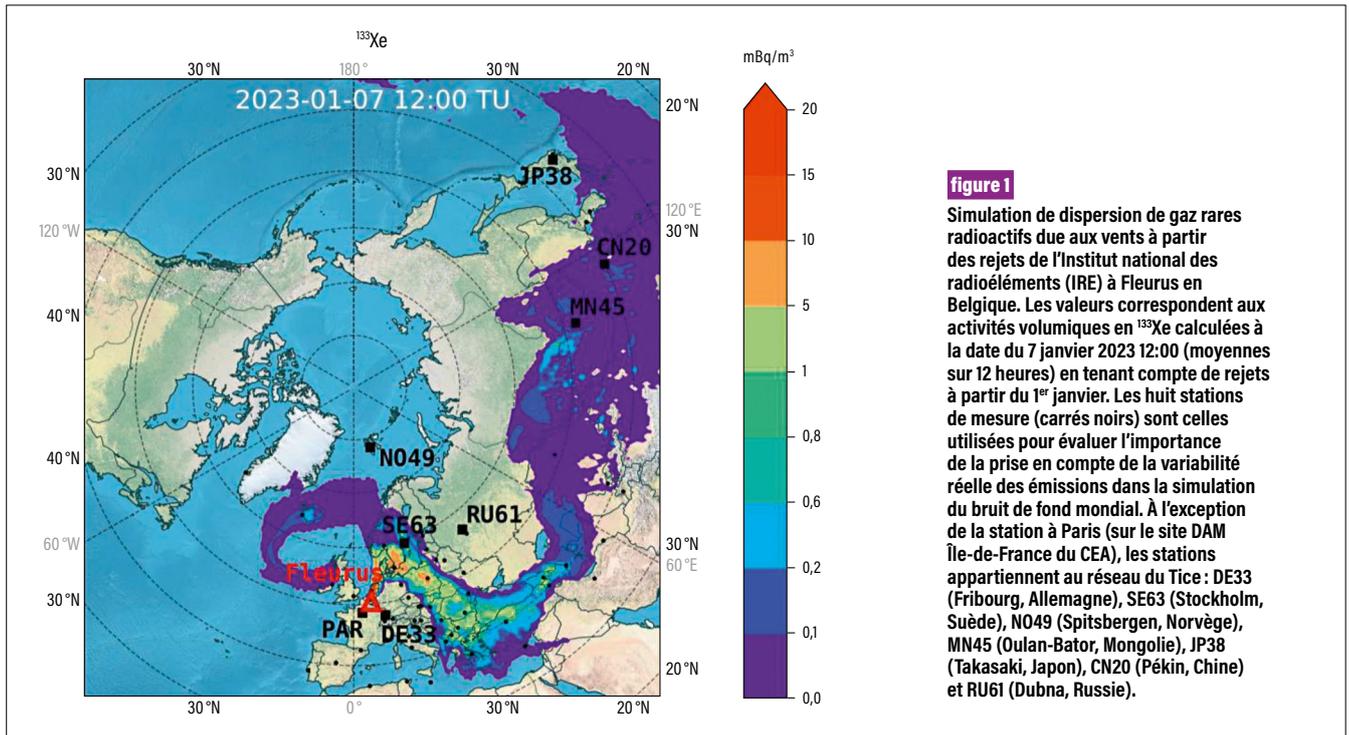


figure 1

Simulation de dispersion de gaz rares radioactifs due aux vents à partir des rejets de l'Institut national des radioéléments (IRE) à Fleurus en Belgique. Les valeurs correspondent aux activités volumiques en ^{133}Xe calculées à la date du 7 janvier 2023 12:00 (moyennes sur 12 heures) en tenant compte de rejets à partir du 1^{er} janvier. Les huit stations de mesure (carrés noirs) sont celles utilisées pour évaluer l'importance de la prise en compte de la variabilité réelle des émissions dans la simulation du bruit de fond mondial. À l'exception de la station à Paris (sur le site DAM Île-de-France du CEA), les stations appartiennent au réseau du Tice : DE33 (Fribourg, Allemagne), SE63 (Stockholm, Suède), N049 (Spitsbergen, Norvège), MN45 (Oulan-Bator, Mongolie), JP38 (Takasaki, Japon), CN20 (Pékin, Chine) et RU61 (Dubna, Russie).

Un effet de la distance entre le lieu de rejet et la station a été mis en évidence **1**. En effet, à quelques centaines de kilomètres de Fleurus, c'est-à-dire à Paris (station PAR) et à Fribourg (station DE33), les simulations prévoient des concentrations qui peuvent s'écarter de plus d'un facteur cinq l'une de l'autre. En

revanche, aux stations plus lointaines, les écarts d'une simulation à l'autre se réduisent lorsque la distance augmente, jusqu'à devenir négligeables à plusieurs milliers de kilomètres du lieu de rejet.

Les simulations ont aussi été comparées aux détections des stations de mesure. L'utilisation des rejets

réels a conduit à une amélioration de la synchronisation des pics simulés et mesurés (figure 2), ce qui améliore les capacités de discrimination **1**. Cependant, des écarts en amplitude parfois significatifs subsistent. Ils témoignent d'autres sources d'incertitudes; des données météorologiques dites probabilistes seront prises en compte prochainement pour quantifier les incertitudes dues à la météorologie. Dans l'immédiat, les données de l'IRE ont d'ores et déjà été intégrées aux simulations opérationnelles et quotidiennes des experts du CEA – DAM.

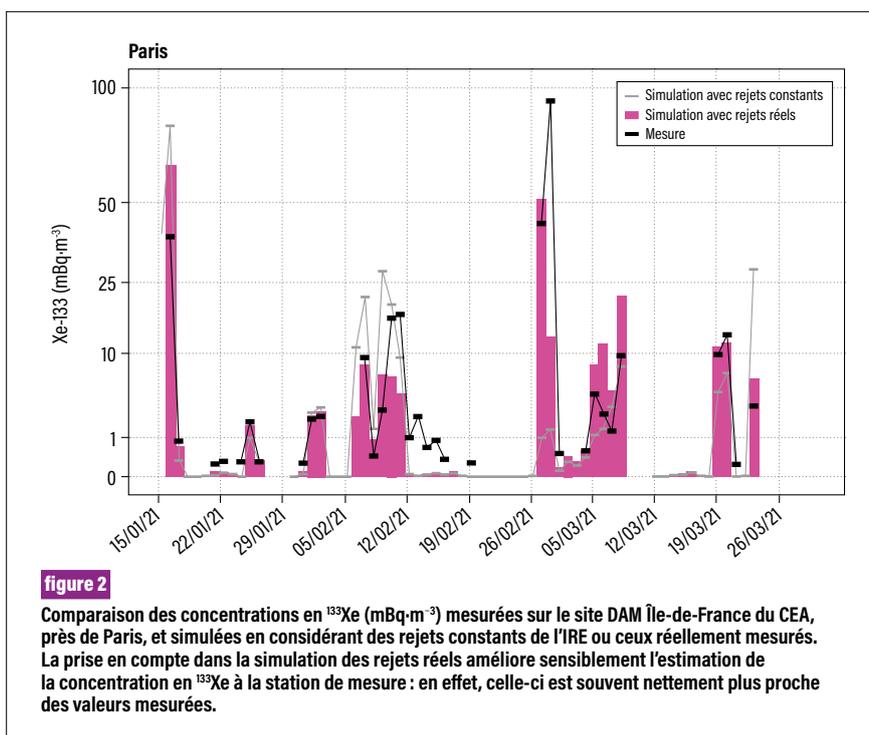


figure 2

Comparaison des concentrations en ^{133}Xe ($\text{mBq}\cdot\text{m}^{-3}$) mesurées sur le site DAM Île-de-France du CEA, près de Paris, et simulées en considérant des rejets constants de l'IRE ou ceux réellement mesurés. La prise en compte dans la simulation des rejets réels améliore sensiblement l'estimation de la concentration en ^{133}Xe à la station de mesure : en effet, celle-ci est souvent nettement plus proche des valeurs mesurées.

RÉFÉRENCES

- 1** S. Generoso, P. Achim, M. Morin, P. Gross, G. Douysset, « Use of STAX data in global-scale simulation of ^{133}Xe atmospheric background », *J. Environ. Radioact.*, **251-252**, 106980 (2022).
- 2** P. Achim, S. Generoso, M. Morin, P. Gross, G. Le Petit, C. Moulin, « Characterization of Xe-133 global atmospheric background: Implications for the international monitoring system of the Comprehensive Nuclear-Test-Ban Treaty », *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, **121**, p. 4951-4966 (2016).
- 3** S. Generoso, P. Achim, M. Morin, P. Gross, G. Le Petit, C. Moulin, « Seasonal variability of Xe-133 global atmospheric background: characterization and implications for the international monitoring system of the Comprehensive Nuclear-Test-Ban Treaty », *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, **123**, p. 1865-1882 (2018).

P. Armand [CEA – DAM, centre DAM Île-de-France]
J. Tâche [Fluidian, Cergy]

Simulation numérique de la dispersion de la Covid-19 dans un train

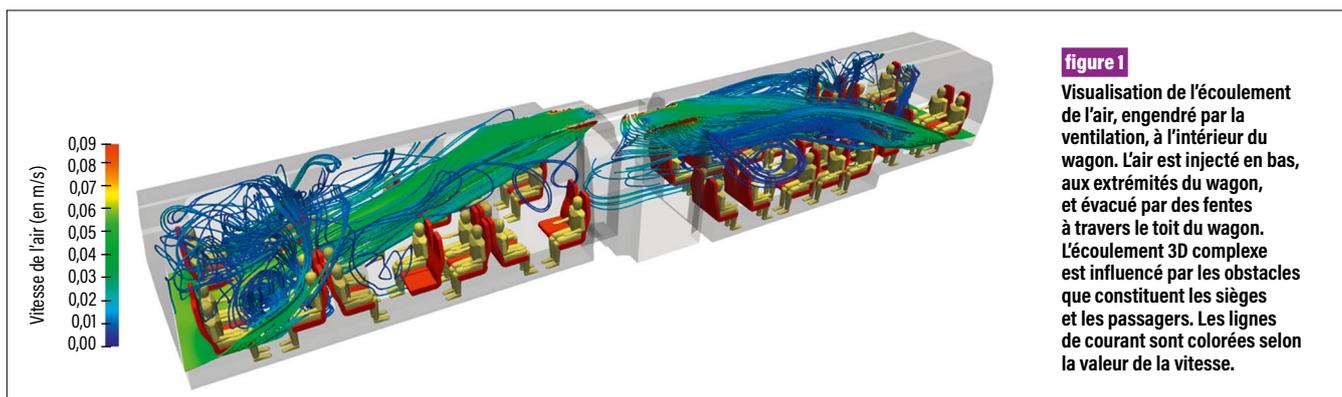
Au pic de la pandémie au printemps 2020, le ministère chargé des Transports a interrogé le CEA – DAM sur le risque de transmission de la Covid-19 dans les transports en commun. Celui-ci a alors créé une maquette 3D, modèle numérique d'un train et de ses passagers, et a simulé la dispersion de gouttelettes contenant le virus, produites par la respiration ou la toux d'un passager infecté. Ces calculs renseignent sur la répartition spatiale et temporelle du virus dans le train et quantifient l'intérêt du masque pour réduire le risque de contamination. De plus, ils pourraient être utiles pour concevoir une ventilation efficace ou réorganiser un local afin de limiter l'exposition aux agents infectieux aéroportés **1**.

La pandémie de Covid-19 a engendré une crise sanitaire, économique et sociale, d'ampleur planétaire. Si l'Organisation mondiale de la santé (OMS) annonça officiellement dès le 9 janvier 2020 la découverte du nouveau coronavirus SARS-CoV-2 à l'origine de la maladie, ses voies de transmission firent l'objet de vifs débats. Une partie de la communauté médicale émit

l'hypothèse de la dissémination aérienne du virus au sein de gouttelettes produites par les personnes infectées. Lors de la conférence de presse du 7 juillet 2020 **2**, l'OMS confirma détenir les preuves de ce mode de contamination, reconnu depuis comme prévalent.

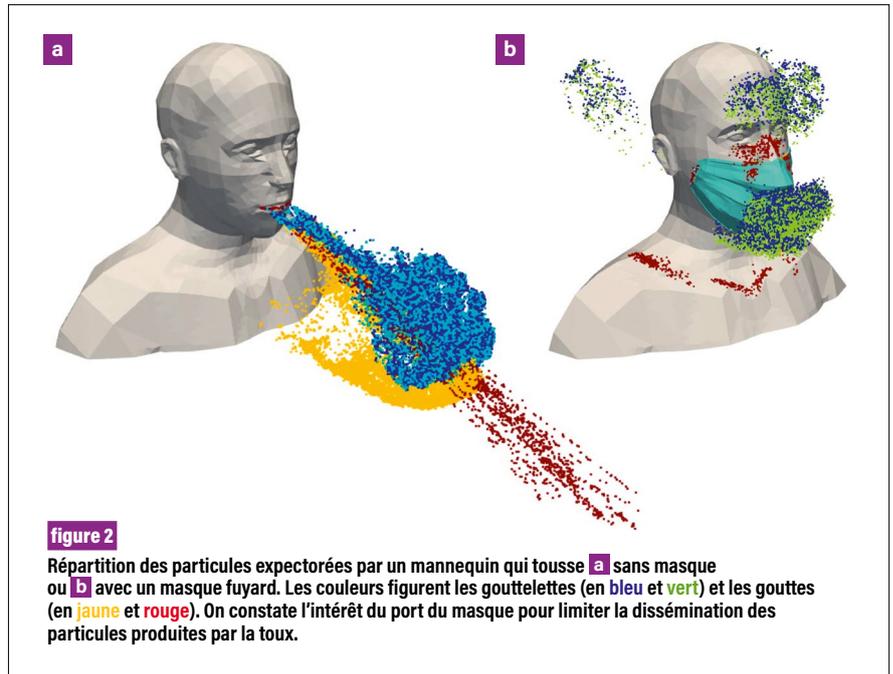
Caractériser la transmission d'une maladie est essentiel pour en ralentir l'évolution. Comme le virus se disperse dans les particules liquides expectorées lors de la respiration et d'autres événements tels que la parole, le chant, la toux ou les éternuements, il est possible d'utiliser des logiciels qui permettent de simuler l'écoulement de l'air transportant les particules et leur répartition spatio-temporelle dans des espaces ventilés.

Ces logiciels étant employés par le CEA – DAM dans ses travaux de R&D pour la lutte contre le terrorisme NRBC-E (nucléaire, radiologique, biologique, chimique et explosif), ils ont été mis en œuvre pour interroger et quantifier le risque de transmission de la Covid-19 dans les transports en commun. Une équipe du CEA – DAM a élaboré une maquette numérique d'un train de banlieue en intégrant ses éléments internes, tels que les sièges, et des mannequins humains figurant les passagers dont certains supposés infectés par le virus de la Covid-19. Elle a utilisé le logiciel Saturne **3** pour



étudier la propagation à l'intérieur du train de gouttelettes de diamètres 1 à 10 micromètres et de gouttes de diamètres 100 à 1 000 micromètres émises lors de la respiration ou de la toux de mannequins contaminés. Les simulations 3D ont pris en compte la géométrie et la ventilation réelles d'un wagon, comme le montre la **figure 1**, ainsi qu'une maquette numérique de masques chirurgicaux en distinguant le port parfaitement ajusté au visage d'un port lâche accompagné de fuites de gouttelettes autour du visage.

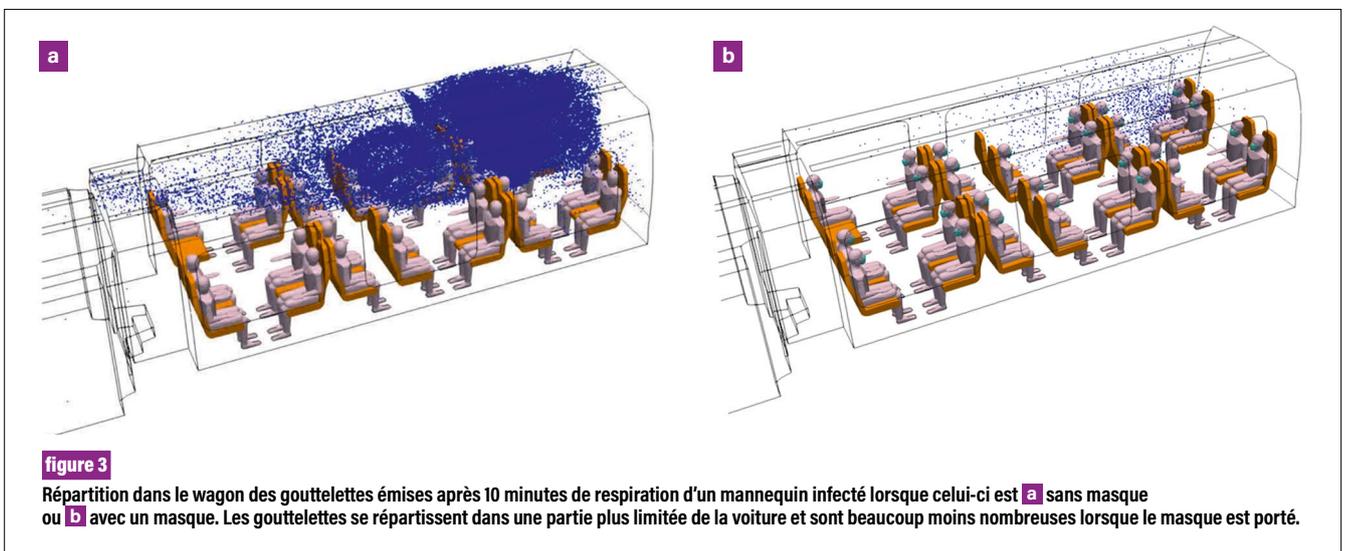
Les résultats montrent tout l'intérêt du masque à travers une comparaison du nombre et de la répartition des particules dans le wagon selon que les mannequins disséminateurs portent ou non des masques plus ou moins plaqués au visage, comme l'illustrent la **figure 2** pour la toux et la **figure 3** pour la respiration. Ils mettent en évidence le comportement aérodynamique très différent des gouttelettes qui suivent le parcours de l'air ventilé de celui des gouttes qui s'en écartent en raison de leur inertie. Ils montrent aussi que les effets thermiques dus à l'écart des températures entre les passagers et l'air ambiant du wagon favorisent l'évacuation des gouttelettes à travers la ventilation si celle-ci a lieu en partie haute du wagon.



Des simulations suivant la même démarche sont envisageables pour tout autre espace ventilé, en particulier d'usage collectif, comme une entreprise, un hôpital, une école, un restaurant, une salle de spectacles, etc. Elles permettraient d'estimer l'efficacité de la ventilation vis-à-vis du risque de transmission aérienne d'agents infectieux, d'évaluer le caractère critique à rassembler des personnes dans ces locaux et d'envisager de remanier leur configuration interne pour limiter la dissémination des agents.

RÉFÉRENCES

- 1 P. Armand et al.**, « 3D modelling and simulation of the dispersion of droplets and drops carrying the SARS-CoV-2 virus in a railway transport coach », *Scientific Reports*, **12**, 4025 (2022).
- 2 WHO** Coronavirus disease (Covid-19) press briefings <https://www.who.int/emergencies/diseases/novel-coronavirus-2019/media-resources/press-briefings/previous/3#>.
- 3 F. Archambeau et al.**, « Code SATURNE: a finite volume code for the computation of turbulent incompressible flows – industrial applications », *Int. J. on Finite Volumes*, **1**, p. 1-62 (2004).



C. Listowski, J. Vergoz, A. Le Pichon, H. Hébert, P. Heinrich, A. Gailler, A. Dupont

[CEA – DAM, centre DAM Île-de-France]

A. Podglajen [Laboratoire de météorologie dynamique, UMR 8539 CNRS – École polytechnique, Institut polytechnique de Paris – Sorbonne Université – École normale supérieure, PSL Research University, Paris]

V. Rey [Institut méditerranéen d'océanologie, UMR 7294 CNRS – Université d'Aix-Marseille – Université de Toulon (UTLN) – Institut de recherche pour le développement (IRD), Toulon]

Quand un volcan fait vibrer l'atmosphère tout entière

L'éruption explosive du volcan Hunga Tonga-Hunga Ha'apai le 15 janvier 2022 dans l'archipel des Tonga a produit la plus puissante explosion enregistrée depuis celle du volcan Krakatoa en 1883 en Indonésie. Une collaboration internationale coordonnée par le CEA – DAM est parvenue à caractériser l'événement au moyen de technologies infrasonore, hydroacoustique et sismique et à estimer l'énergie libérée à plusieurs milliers de fois celle de l'explosion nucléaire d'Hiroshima **1**. L'éruption a été l'occasion pour le CEA – DAM d'enrichir et affiner son expertise en détection géophysique.

Le 15 janvier 2022, vers 19 h 00 et pendant près d'une heure, les baromètres du nord de la France enregistraient le passage d'une onde étonnante. Environ une heure plus tard, le niveau des eaux dans des ports de la Méditerranée se mettait à osciller d'une dizaine de centimètres.

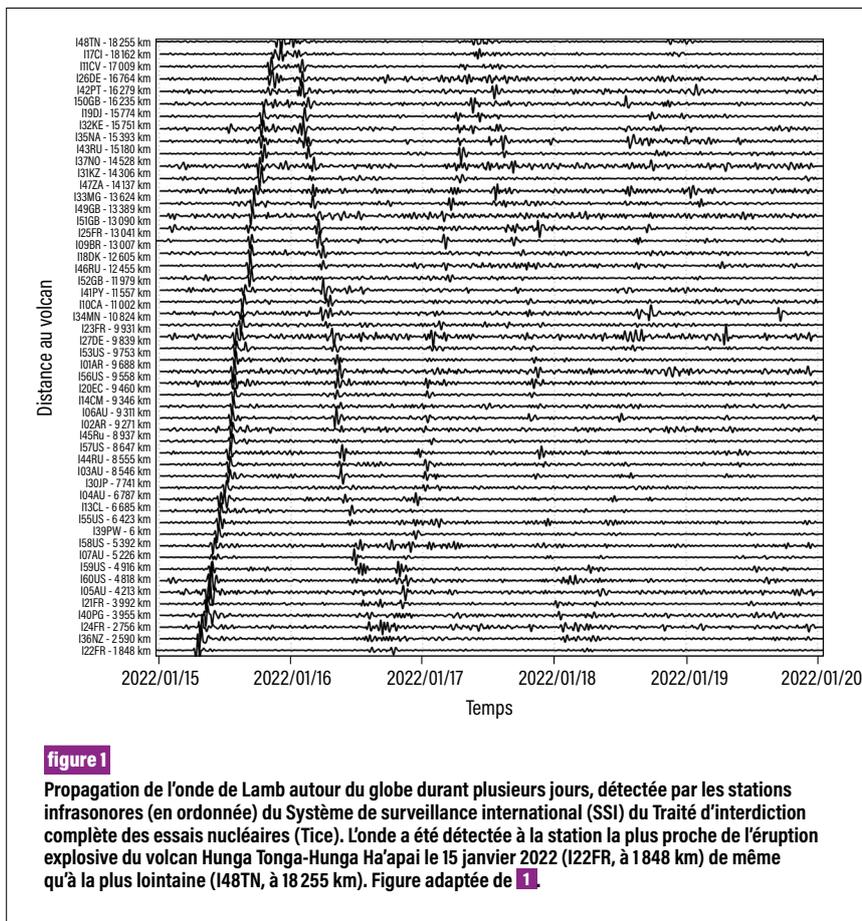
La France entière venait d'être balayée par une onde atmosphérique géante en provenance de l'archipel des Tonga, dans l'océan Pacifique Sud, à 17 000 km de là.

Pour la première fois dans l'histoire du Système de surveillance international (SSI), lancé dans les années 1990 dans le cadre du Traité d'interdiction complète des essais nucléaires (Tice), l'ensemble des stations du globe détectait des signaux issus d'une même source. Ceux-ci provenaient du volcan sous-marin Hunga Tonga-Hunga Ha'apai, dont l'éruption fut rendue explosive par le mélange d'eau et de magma. L'onde de Lamb, une onde particulière dans la famille des ondes atmosphériques, s'est propagée parallèlement à la surface de la Terre à une vitesse proche de celle du son, telle une gigantesque ondulation atmosphérique principalement concentrée dans les dix premiers kilomètres de notre atmosphère.

En collaboration avec dix laboratoires de six pays européens et américains, des chercheurs du CEA – DAM ont coordonné une étude basée sur les observations du SSI. Trois des quatre technologies utilisées pour la surveillance du Tice (hydroacoustique, sismique, infrasonore) **2** ont permis de caractériser la séquence éruptive à la source, des premiers sursauts du volcan en décembre 2021 à l'explosion paroxysmique du 15 janvier 2022 **1**. L'ensemble des stations infrasonores du SSI a enregistré l'ébranlement de l'atmosphère qui s'est ensuivi dans une large gamme de fréquences (10^{-4} à 1 Hz). Certaines stations continuaient d'enregistrer des signaux treize jours après l'éruption au gré des multiples révolutions des ondes acoustiques, et jusqu'à cinq jours après pour l'onde de Lamb (**figure 1**). Une méthode d'estimation de l'énergie à partir de l'amplitude et de la période de l'onde de Lamb, développée du temps des essais nucléaires atmosphériques, a permis de calculer une énergie à la source **1**. De l'ordre de la centaine de mégatonnes (équivalent TNT), cette estimation est en accord avec celle obtenue par d'autres méthodes pour l'éruption du Krakatoa de 1883. L'énergie serait ainsi de l'ordre de 7 000 fois celle libérée par l'explosion d'Hiroshima.

L'éruption aux Tonga constitue un événement de référence sans précédent par la qualité des enregistrements obtenus à l'échelle du globe; il a permis d'enrichir et d'affiner l'expertise du CEA – DAM. Celle-ci a en effet conduit la collaboration à interpréter les signaux des capteurs microbarométriques du SSI en dehors de leur gamme de fréquences usuelles de fonctionnement, permettant les comparaisons à d'autres réseaux d'observation barométrique et aux données plus parcellaires de l'éruption du Krakatoa **3**.

Le CEA – DAM a également contribué à l'interprétation des données issues de plateformes aéroportées dérivant au gré des vents à 20 km d'altitude. Menée par le Laboratoire de météorologie dynamique



(LMD), l'étude établit l'apport de ballons pour la mesure des infrasons [4]. Les capteurs placés dans des nacelles suivant le mouvement des masses d'air ne sont pas affectés par les bruits associés aux vents de surface qui dégradent les signaux des stations au sol (figure 2). Compte tenu de leur localisation en

altitude, ces observatoires permettent de s'interroger sur l'origine exacte des ondes acoustiques le long de la colonne éruptive. Les mécanismes exacts ayant généré les différentes ondes demeurent un mystère aujourd'hui.

En surface, les océans et mers du globe ont imprimé le passage de l'onde

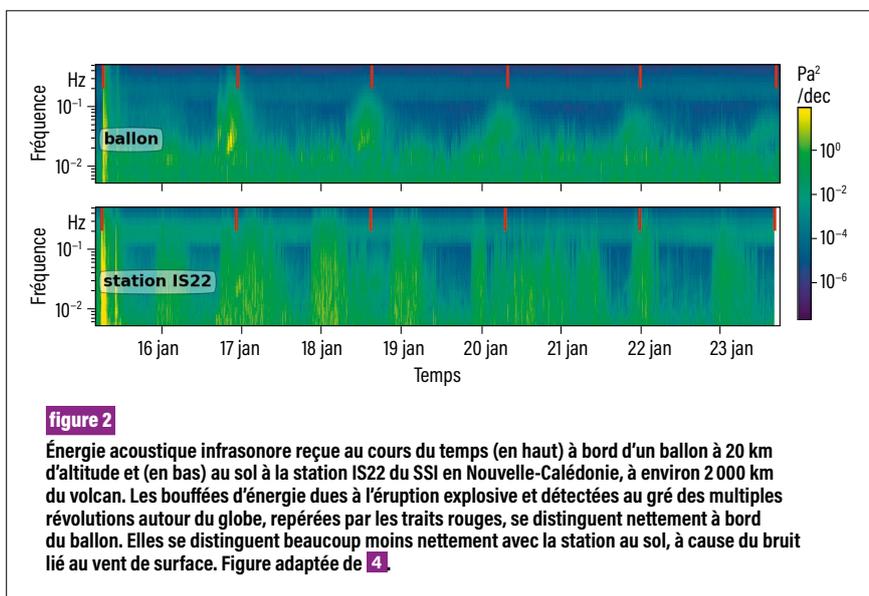
de Lamb en se déformant et en propageant un tsunami planétaire affectant jusqu'à la Méditerranée, aux antipodes du volcan. Une note interorganismes coordonnée par le CEA – DAM et le Centre national de recherche météorologique (CNRM) documente ces effets de couplage [5]. Des simulations de propagation tsunami du CEA – DAM ont notamment permis d'expliquer les observations marégraphiques sur les côtes méditerranéennes françaises [6].

Les réseaux de surveillance opérationnels actuels n'étant pas adaptés, l'Unesco a créé un groupe de travail sur la prise en compte des tsunamis engendrés par les événements volcaniques. Cela faisait suite à la mise en place, dès l'été 2022, de procédures de surveillance marégraphique autour du volcan des Tonga.

Les réseaux d'observation modernes, dont le SSI, ont ainsi démontré qu'il était actuellement possible de documenter précisément les oscillations de notre atmosphère en temps réel dans une large bande de fréquences. Ils apportent des données uniques permettant d'enrichir les capacités du CEA – DAM à modéliser la réponse de l'atmosphère et des océans à un tel phénomène planétaire.

RÉFÉRENCES

- [1] J. Vergoz, P. Hupe, C. Listowski *et al.*, « IMS observations of infrasound and acoustic-gravity waves produced by the January 2022 volcanic eruption of Hunga, Tonga: a global analysis », *Earth. Planet. Sci. Lett.*, <https://doi.org/10.1016/j.epsl.2022.117639> (2022).
- [2] Collectif du CEA – DAM, « Détection des essais nucléaires – À l'écoute du globe », revue *chocs*, **50**, 116 pages (2020).
- [3] R. Matoza *et al.*, « Atmospheric waves and global seismoacoustic observations of the January 2022 Hunga eruption, Tonga », *Science*, <https://doi.org/10.1126/science.abo7063> (2022).
- [4] A. Podglajen, A. Le Pichon, R. Garcia *et al.*, « Stratospheric balloon observations of infrasound waves from the January 15 2022 Hunga eruption, Tonga », *Geophys. Res. Lett.*, <https://doi.org/10.1029/2022GL100833> (2022).
- [5] C. Lac, A. Le Pichon, C. Listowski *et al.*, « L'éruption du volcan Hunga Tonga -Hunga Ha'apai le 15 janvier 2022: un ébranlement du système Terre à l'échelle planétaire », *Zenodo*, <https://doi.org/10.5281/zenodo.7510334> (2022).
- [6] P. Heinrich, A. Gailler, A. Dupont, V. Rey, H. Hebert, C. Listowski, « Observations and simulations of the meteotsunami generated by the Tonga eruption on 15 January 2022 in the Mediterranean sea », *Geophysical Journal International*, **234**, <https://doi.org/10.1093/gji/ggad092> (2023).



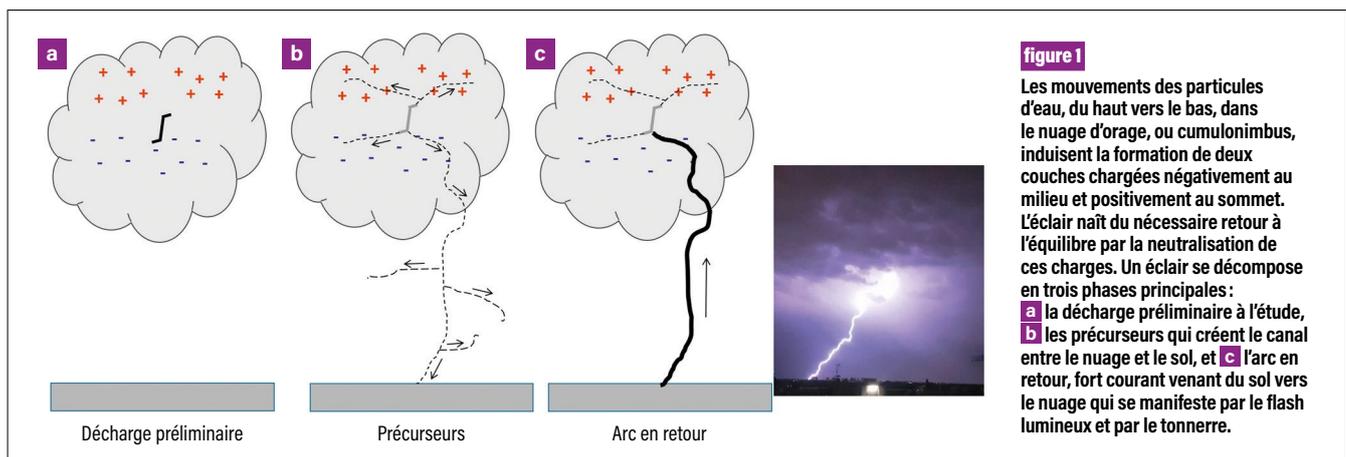
T. Farges [CEA – DAM, centre DAM Île-de-France]
I. Kolmašová, O. Santolík [Institute of atmospheric physics of the Czech Academy of sciences, République tchèque]
S. Soula [Laboratoire d'aérodynamique, UMR 5560 CNRS – Université Paul-Sabatier Toulouse III – Observatoire Midi-Pyrénées, Toulouse]
O. Bousquet [Laboratoire de l'atmosphère et des cyclones (LACy), UMR 8105 CNRS – Météo-France – Université de La Réunion, Saint-Denis]
G. Diendorfer [Department of the Austrian lightning detection and information system (Aldis), OVE Service GmbH, Vienne, Autriche]

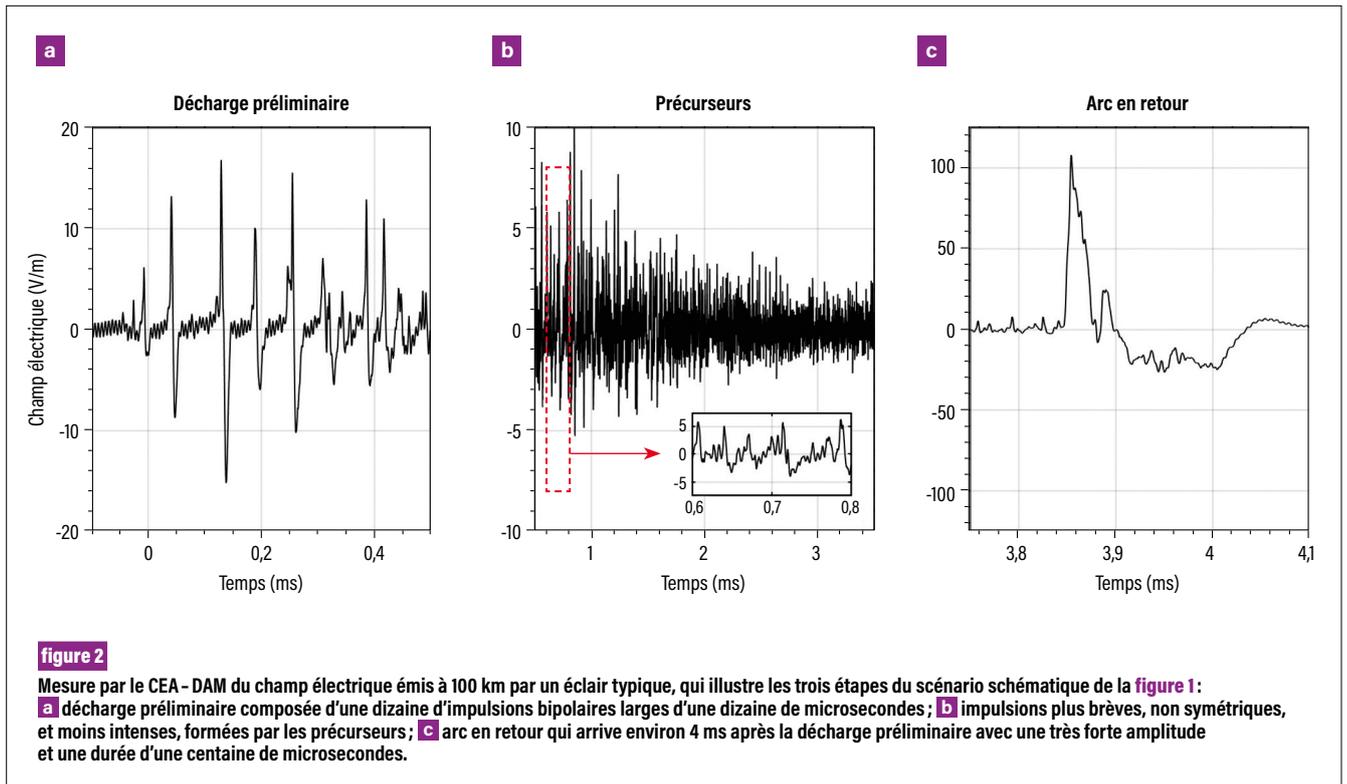
À la recherche de l'étincelle initiale des éclairs

Une équipe du CEA – DAM a mis en œuvre et analysé des mesures de champ électrique qui contribuent, au sein d'une collaboration européenne, à mieux appréhender les éclairs et particulièrement leur amorçage **1**. De plus, des mesures météorologiques apportent un éclairage nouveau et complémentaire des mesures électromagnétiques, venant considérablement enrichir le modèle communément admis. L'intérêt du CEA – DAM pour les éclairs vient de ce que leurs signaux électromagnétiques sont proches de ceux du flash électromagnétique produit par une explosion nucléaire aérienne.

Le modèle admis d'un éclair se décrit en trois phases : la décharge électrique préliminaire dans le nuage d'orage (cumulonimbus), les précurseurs qui préconditionnent le canal entre le nuage et le sol, et enfin l'arc en retour qui se manifeste par une émission de lumière (appelé communément l'éclair) et d'ondes sonores (tonnerre) (**figure 1**). Dans le nuage d'orage,

composé de particules d'eau sous différentes phases suivant l'altitude, deux poches de charges opposées se forment : les charges négatives au milieu et les charges positives au sommet du nuage. L'étincelle initiale, c'est-à-dire la décharge préliminaire, se produit entre ces deux poches pour des raisons qui ne sont pas encore totalement élucidées. Elle induit la formation de précurseurs, autrement dit de petites décharges qui, dans certaines conditions, se dirigent par bonds successifs et de manière aléatoire vers le sol. Au contact avec le sol, les charges électriques présentes au sol remontent très rapidement dans le canal formé par les précurseurs pour neutraliser les charges présentes dans le nuage. Un très fort courant d'une vingtaine de kiloampères en moyenne chauffe l'air contenu dans le canal jusqu'à 40 000 degrés et produit le flash lumineux et le tonnerre dont nous sommes familiers. On parle pour cette phase d'arc en





retour. Ces trois étapes se déroulent en une dizaine de millisecondes (figure 2). Dans trois cas sur quatre environ, l'éclair reste dans le cumulonimbus sans former d'arc en retour 1. L'étude rapportée dans cet article s'intéresse à ce type d'éclair intranuage, qui peut être décrit à l'aide de mesures électriques, magnétiques et météorologiques auxquelles le CEA - DAM contribue.

Une précédente étude 2, exploitant des mesures électromagnétiques acquises en octobre 2012 par les instruments déjà utilisés dans 1, montrait que les décharges électriques préliminaires sont mesurables à plus de 600 km 2 et permettait de valider un code de propagation de l'onde électromagnétique sur d'aussi grandes distances.

Pour comprendre l'origine de ces décharges, un modèle expliquant leur formation nécessite d'avoir une

description statistique ainsi que de connaître les conditions d'électrification des nuages. De plus, les mesures des radars météorologiques donnent accès à des informations décrivant le nuage (extension verticale, profils de température et de vent), ainsi qu'à l'organisation spatiale des particules d'eau chargées. Une équipe internationale a analysé ce type de mesures pour un orage ayant eu lieu en France en juin 2013. Les mesures de caractérisation confirment et enrichissent le modèle, à d'autres latitudes et pour des orages différents, et en particulier confirment le rôle des poches de charges déduites des mesures météorologiques. Le CEA - DAM a assuré la mise en œuvre des mesures de champ électrique et contribué à leur analyse.

De nouvelles campagnes sont prévues, incluant d'autres types de mesures, comme celles donnant la

structure tridimensionnelle et temporelle des décharges dans les nuages ou des observations optiques réalisées par des satellites géostationnaires de météorologie.

RÉFÉRENCES

- 1 I. Kolmašová, S. Soula, O. Santolík, T. Farges, O. Bousquet, G. Diendorfer, R. Lán, L. Uhlíř, « A frontal thunderstorm with several multi-cell lines found to produce energetic preliminary breakdown », *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, **127**, e2021JD035780 (2022).
- 2 I. Kolmašová, O. Santolík, T. Farges, S. A. Cummer, R. Lán, L. Uhlíř, « Subionospheric propagation and peak currents of preliminary breakdown pulses before negative cloud-to-ground lightning discharges », *Geophysical Research Letters*, **43**, p. 1382-1391 (2016).

Réduction de la toxicité des matériaux de protection thermique

Une équipe du CEA – DAM est parvenue à réduire drastiquement la toxicité d'un matériau innovant tout en conservant ses performances **1**. Ce matériau appartient à la famille des matériaux composites pouvant être utilisés comme protection thermique dans le domaine de la rentrée atmosphérique. Ils sont conçus et mis au point pour répondre à des sollicitations thermiques et mécaniques sévères.

Produire des matériaux innovants ne présentant aucun impact environnemental et sanitaire est un graal industriel du XXI^e siècle. Le CEA – DAM s'applique à relever ce défi pour des protections thermiques qu'il développe pour la rentrée atmosphérique. Les équipes scientifiques et techniques savent développer des matériaux composites répondant aux critères de performance thermomécanique recherchée, mais elles doivent aussi minimiser leur toxicité : il en va de la sécurité des utilisateurs comme du respect de la réglementation européenne. En particulier, la directive Reach, pour *Registration, evaluation and*

authorisation of chemicals, fixe le cadre européen à respecter pour la fabrication et l'utilisation des substances chimiques dans l'industrie.

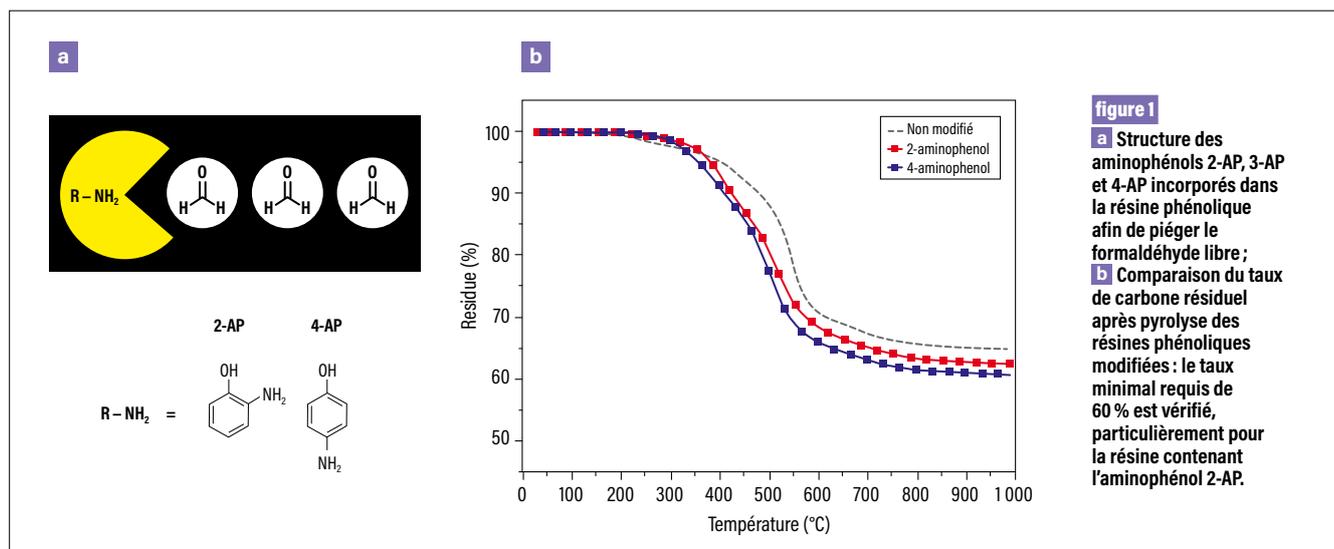
Les matériaux composites, constitués de fibres de carbone et de résines phénoliques, étaient au cœur du défi technique à relever. Ces résines sont actuellement les plus performantes pour une application de protection thermique. Elles sont obtenues par réaction chimique de deux composés dangereux, à savoir le phénol (toxique) et le formaldéhyde (cancérigène). La réaction entre ces deux composés n'est pas complète, si bien que leurs teneurs massiques dans la résine après prépolymérisation (en moyenne 18 % de phénol et 2,5 % de formaldéhyde) restent particulièrement élevées et doivent être réduites. De plus, le taux de formaldéhyde résiduel dépasse le seuil réglementaire de 0,1 % de la directive Reach.

Ainsi, une équipe du CEA – DAM a mené des travaux dans le double objectif de diminuer le taux de formaldéhyde et de phénol libre dans la résine après polymérisation, sans dégrader ses propriétés, en particulier sa teneur en carbone après pyrolyse qui doit être supérieure à 60 % en masse. Il est en effet important de garantir l'intégrité du matériau, qui subit un échauffement violent lors de la rentrée atmosphérique. La voie identifiée a porté sur

Additif	%m F	%m P
Aucun	2,4-3,0 %	17-20 %
2-aminophénol (2-AP) 4-aminophénol (4-AP)	< 0,1 % < 0,1 %	13 % 8 %

tableau 1

Comparaison des teneurs massiques en formaldéhyde libre (%m F) et en phénol libre (%m P) mesurées dans les résines phénoliques contenant de l'aminophénol (2-AP ou 4-AP) et dans une résine phénolique sans additifs : l'addition d'aminophénol à la résine conduit à la quasi-disparition du formaldéhyde libre.



l'intégration d'additifs agissant comme des pièges qui peuvent condenser le phénol et le formaldéhyde. Les additifs retenus sont des molécules de la famille des aminophénols AP (**figure 1a**), qui présentent l'autre avantage de lier chimiquement les molécules toxiques libres directement dans le squelette polymère de la résine et donc d'éviter la fragilisation de cette dernière **1**.

L'équipe a réalisé différents travaux de formulation dans le but, d'une part, de déterminer à quelles proportions initiales de formaldéhyde-phénol (ratio F/P) la réaction de polymérisation de la résine est la plus complète et, d'autre part, d'identifier la teneur optimale de

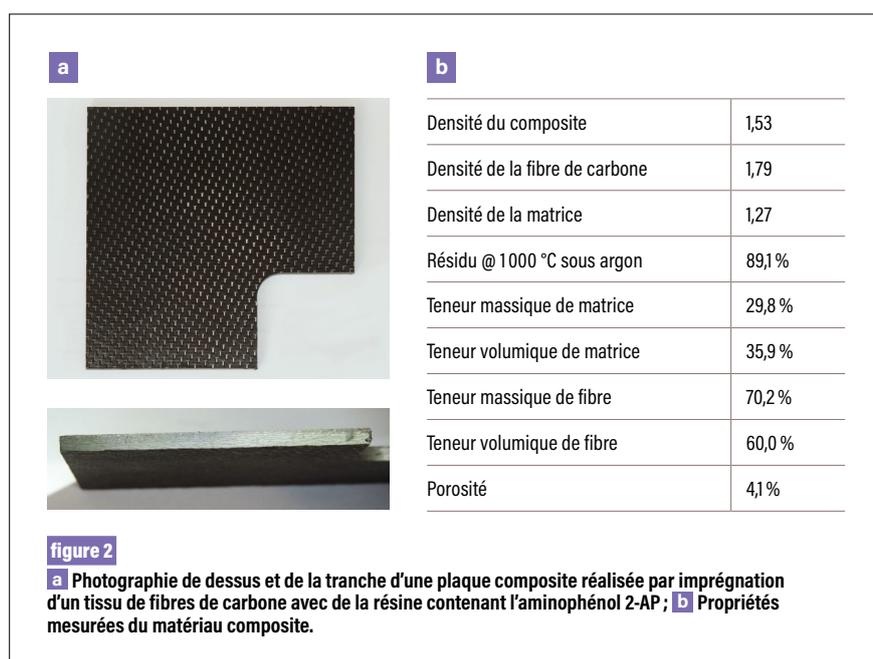
pièges du formaldéhyde dans la résine. Ces premières études ont montré que les résines disposant des teneurs les plus faibles en phénol et formaldéhyde libres devaient disposer d'un ratio F/P de 1,3 et contenir 5 % de fraction molaire d'amine.

Une comparaison entre les différentes formulations de résine (**tableau 1**) a montré que celles contenant les aminophénols 2-AP et 4-AP présentent des teneurs en formaldéhyde et phénol significativement réduites par rapport à la résine phénolique sans additif : la quasi-totalité du formaldéhyde semble avoir réagi, tandis que les teneurs en phénol libre ont été diminuées d'un

facteur deux. De ce fait, les deux résines sont compatibles avec la directive Reach, avec un taux de formaldéhyde libre inférieur à 0,1 %.

Le rendement en carbone de ces résines a ensuite été déterminé par pyrolyse à 1 000 °C (**figure 1b**) et comparé à celui d'une résine phénolique non modifiée. Avec des taux de carbone de 63 % et 61 % pour les résines contenant du 2-AP et du 4-AP respectivement, celles-ci présentent un rendement compatible avec les critères fonctionnels recherchés, plus particulièrement pour la résine contenant du 2-AP. La mise en œuvre de cette résine dans une pièce composite a été validée (**figure 2**).

L'optimisation de la formulation chimique des résines phénoliques a permis de minimiser leur teneur en composés toxiques résiduels et d'être en conformité avec la réglementation européenne, tout en conservant la performance du matériau composite **2**. Le prochain objectif scientifique consiste à se passer totalement du phénol et du formaldéhyde pour élaborer de nouvelles résines, tout en visant les performances des résines phénoliques actuelles.



RÉFÉRENCES

- 1** N. Chaussoy, D. Brandt, J.-F. Gérard, « Versatile method to reduce the free formaldehyde content in phenolic resins for high-temperature applications », *ACS Applied Polymer Materials*, **4**(6), p. 4454-4463 (2022).
- 2** N. Chaussoy, D. Brandt, J.-F. Gérard, « Procédé de préparation d'une résine phénolique de type Résol à teneur en formaldéhyde réduite », Brevet FR1914977 (2021).

F. Ledoux [CEA – DAM, centre DAM Île-de-France
Université Paris-Saclay, CEA, Laboratoire d'informatique haute performance pour le calcul
et la simulation (LiHPC), Bruyères-le-Châtel]
D. Sokolov [Université de Lorraine, Nancy]
C. Bourcier [CEA – DES, centre Paris-Saclay]

Les polycubes, un nouvel outil pour aider à la simulation numérique

Pour pouvoir procéder à la simulation numérique des expériences réalisées sur le Laser Mégajoule, un maillage spécifique est nécessaire, et la préparation du calcul peut nécessiter plusieurs semaines de temps ingénieur. Grâce à des transformations mathématiques *ad hoc*, ce travail est aujourd'hui en passe d'être ramené à quelques heures **1-4**.

La simulation numérique est aujourd'hui un outil incontournable dans le milieu scientifique et industriel. Elle permet de comprendre des phénomènes complexes trop coûteux à réaliser expérimentalement, comme le crash d'un avion ou l'atterrissage d'un module spatial sur la Lune, voire totalement inaccessibles, comme l'effet d'un tsunami ou l'explosion d'une étoile. De manière générale, simuler numériquement un phénomène physique nécessite de le modéliser par des équations qui sont ensuite résolues à l'aide de méthodes numériques. Ces dernières représentent les équations à l'aide de fonctions simples qui s'appliquent à de petits volumes élémentaires que l'on appelle des mailles.

Quand un ingénieur veut mener la simulation numérique d'une expérience sur le Laser Mégajoule, une des premières étapes est de découper la cible des faisceaux laser en de nombreuses petites mailles, l'ensemble formant un maillage. La nature des mailles est imposée par la méthode numérique utilisée. Dans notre cas, il est nécessaire d'utiliser un maillage hexaédrique structuré par blocs, c'est-à-dire un maillage hexaédrique grossier où chaque hexaèdre, nommé communément bloc, est décomposé en une grille régulière dont chaque maille est un cube légèrement déformé (voir **figure 1**) **1**. Malheureusement, générer automatiquement de tels maillages est aujourd'hui un problème insoluble.

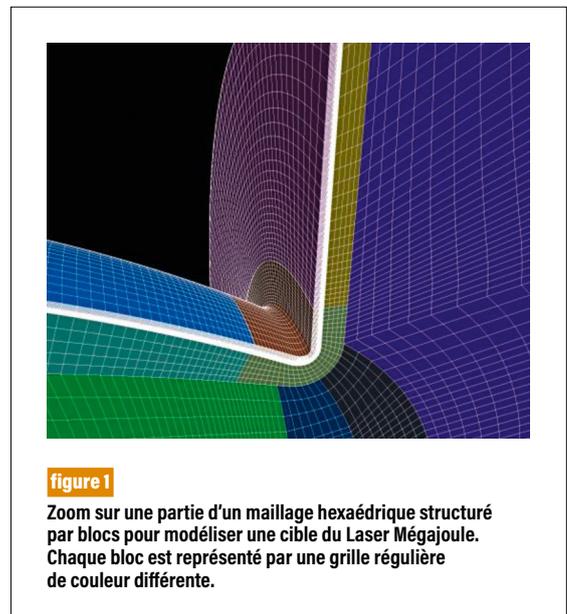


figure 1

Zoom sur une partie d'un maillage hexaédrique structuré par blocs pour modéliser une cible du Laser Mégajoule. Chaque bloc est représenté par une grille régulière de couleur différente.

L'ingénieur passe ainsi plusieurs semaines à les créer manuellement à l'aide de logiciels graphiques interactifs. Notre ambition est de réduire ce temps de réalisation du maillage. Dans cette optique, nous travaillons depuis quelques années à l'utilisation de polycubes (voir **encadré**).

Nos travaux ont porté sur la validité et la robustesse de la déformation qui transforme un objet 3D quelconque en un polycube. Nous garantissons que notre déformation est valide, au sens qu'elle préserve des caractéristiques structurelles comme le nombre de trous **2**. Par exemple, on ne peut pas déformer la tasse de la **figure E1** en un cube, car on perdrait alors son anse. Pour offrir l'approche la plus robuste possible, nous avons conçu conjointement avec une équipe de la Direction des énergies du CEA, une déformation basée sur un algorithme génétique **4**. L'idée sous-jacente à de tels algorithmes est de considérer que notre problème a un grand



figure 2
Utilisation d'un algorithme génétique pour labéliser correctement le bord du domaine initial et obtenir ainsi le maillage hexaédrique final souhaité.

nombre de solutions. Chaque solution est un individu d'une population, qui va potentiellement muter et se reproduire avec d'autres individus pour former les individus d'une nouvelle génération. Après quelques générations, on obtient des solutions inaccessibles par des méthodes classiques d'optimisation. Dans notre cas de figure, partant d'un objet 3D, chaque individu est un polycube possible (figure 2).

Si cette stratégie nous permet de réduire le temps consacré à la génération du maillage, le procédé nécessitera toujours des interventions manuelles. La structure de blocs ne remplira pas forcément tous les critères souhaités. Mais le bénéfice est important : plutôt que de démarrer d'une page blanche, l'ingénieur disposera déjà d'une structure

de blocs à modifier. Le reste du travail sera réalisé avec les outils que nous développons.

Dans l'optique d'améliorer ces solutions, nous avons engagé des échanges avec de nombreux chercheurs reconnus internationalement pour fédérer une recherche académique sur cette thématique. Cela passe par l'écriture d'un état de l'art [3], qui fera référence dans les années qui viennent, et par la mise en place de cas tests significatifs et en accès libre [1] pour éprouver et comparer les nouvelles méthodes proposées par les chercheurs dans le domaine du maillage hexaédrique. Cette démarche est similaire à celle suivie aujourd'hui en apprentissage profond où les données de tests sont partagées pour faire évoluer collectivement la recherche.

RÉFÉRENCES

- 1 N. Pietroni, M. Campen, A. Sheller, G. Cherchi, D. Bommes, X. Gao, R. Ricardo Scateni, F. Ledoux, J. Remacle, M. Livesu, « Hex-mesh generation and processing: A Survey », *ACM Transactions on Graphics*, 42 (2022).
- 2 P.-A. Beaufort, M. Reberol, D. Kalmykov, H. Liu, F. Ledoux, D. Bommes, « Hex me if you can », *Computer Graphics Forum*, 41(5) (2022).
- 3 N. F. Protais, M. Reberol, N. Ray, E. Corman, F. Ledoux, D. Sokolov, « Robust quantization for polycube maps », *Computer-Aided Design*, 150, 103321 (2022).
- 4 N. C. Dumery, F. Protais, S. Mestrallet, C. Bourcier, F. Ledoux, « Evocube: a genetic labelling framework for Polycube-maps », *Computer Graphics Forum*, 41 (2022).

encadré

Structure de blocs hexaédriques et polycubes

Pour créer une structure de blocs, une méthode polycube procède en trois étapes. Tout d'abord, on déforme notre domaine d'intérêt pour obtenir un objet dont toutes les faces sont alignées sur des plans horizontaux ou verticaux. Cet objet est appelé polycube qu'il est facile de

décomposer lors de la seconde étape en de nombreux petits cubes. Enfin, lors de la troisième étape, on applique la déformation inverse pour obtenir un maillage de notre domaine d'intérêt (voir figure E1). Toute la difficulté est de définir la bonne déformation à appliquer.

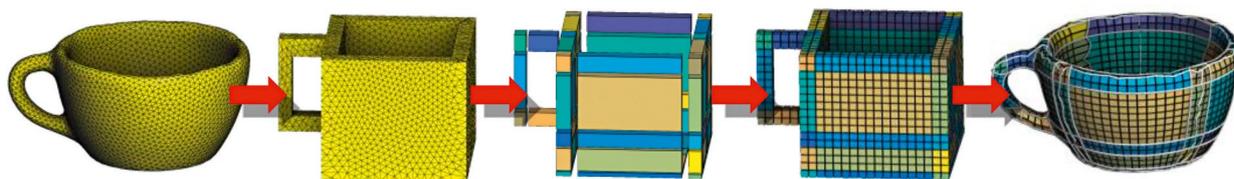


figure E1
Maillage et polycube. De gauche à droite, le domaine initial décomposé en tétraèdres est déformé pour obtenir un polycube duquel on extrait une grille régulière de mailles hexaédriques.

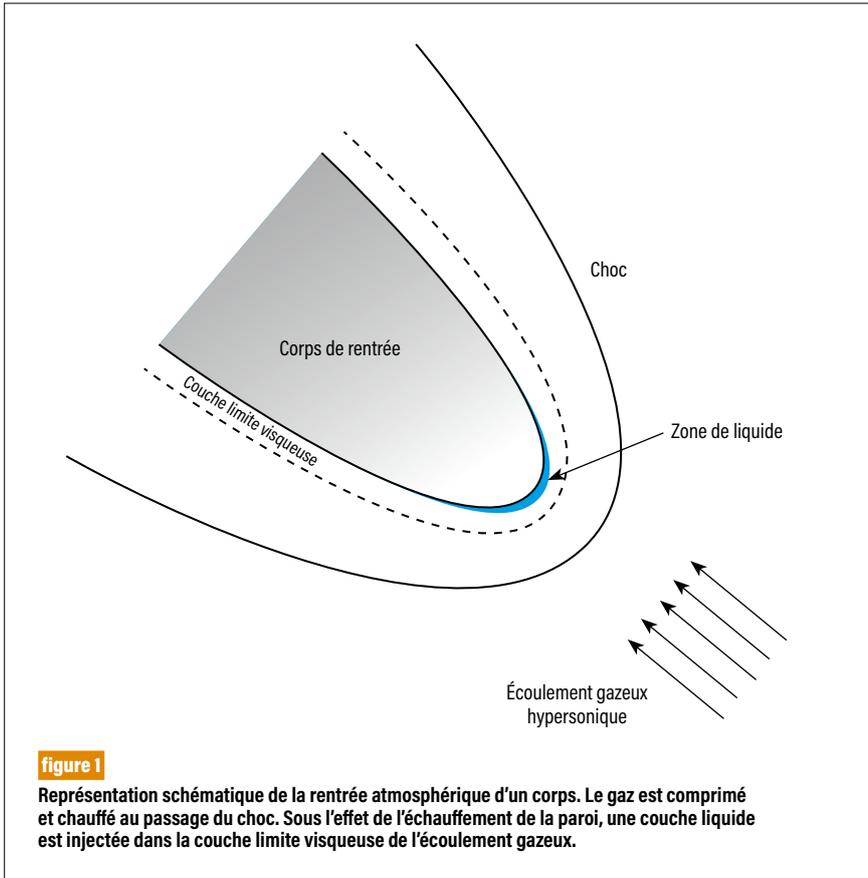
Mieux simuler la dégradation d'un bouclier thermique

Pour dimensionner au mieux la protection thermique d'un corps s'échauffant lors de la rentrée atmosphérique, le CEA - DAM développe des modèles physiques et des algorithmes de résolution numérique de plus en plus précis. La dégradation physico-chimique des matériaux constituant le bouclier thermique permet de consommer de l'énergie et de limiter la quantité de chaleur transmise à l'objet. Jusqu'à présent, le processus de sublimation était le seul phénomène simulé. La phase liquide est maintenant prise en compte dans les modèles. Pour simuler finement l'interaction de la couche liquide avec l'atmosphère gazeuse, la précision des méthodes numériques a été améliorée 1.

La dégradation de la protection thermique est un des points critiques du dimensionnement des corps de rentrée atmosphérique. Les flux de chaleur atteints dans les applications balistiques, ainsi que les niveaux de pression et de cisaillement excluent le maintien de l'intégrité des matériaux en contact avec l'écoulement externe, quels qu'ils soient. Le phénomène d'ablation permet de préserver l'intérieur du corps de rentrée d'un échauffement excessif en consommant de la masse de manière contrôlée. Ce processus d'ablation résulte de l'interaction entre la surface du matériau et l'écoulement qui, dans sa partie visqueuse, est le siège d'échanges complexes de masse et d'énergie. Dans certaines configurations, la dégradation physico-chimique du bouclier thermique fait apparaître des produits sous formes gazeuse et liquide. Trois phases sont donc en présence : le corps de rentrée solide, une

partie liquide et le gaz environnant (c'est-à-dire l'air) comme schématisé sur la **figure 1**.

Pour simuler fidèlement l'écoulement autour du corps de rentrée et la couche de liquide à la paroi, le CEA - DAM utilise un modèle liquide-gaz dans la partie fluide couplé avec la résolution de l'équation de la chaleur dans la partie solide. Plusieurs approches existent dans la littérature pour décrire de tels écoulements diphasiques. Une approche communément employée consiste à suivre explicitement l'interface entre le liquide et le gaz en déplaçant la grille de calcul avec la vitesse de la matière. Cette approche dite lagrangienne a l'avantage d'être très précise, mais ne permet pas de gérer de grandes déformations de l'interface entre les deux fluides. La démarche que nous avons choisi d'utiliser s'appuie au contraire sur un maillage fixe et un système d'équations aux dérivées partielles permettant de restituer l'interface entre le liquide et le gaz. Ce modèle, dit à interface diffuse, décrit l'évolution spatiale et temporelle de la fraction de volume du liquide, en plus des équations de conservation de la masse des deux fluides, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale. Cette approche permet de simuler de grandes déformations de l'interface entre les deux fluides et de gérer l'apparition du liquide dans le gaz tout au long du processus de fusion à la paroi. Cependant, la résolution numérique de ce type de modèle génère une zone de mélange artificielle à l'interface entre les deux fluides. Dans l'application visée, le liquide ne se mélangeant pas avec le gaz de l'atmosphère, il faut limiter au maximum l'étalement de l'interface.



diminue d'un facteur quatre. De plus, l'utilisation d'un limiteur compressif sur la fraction volumique du liquide permet de restituer plus précisément la discontinuité entre le gaz et le liquide. Cela permet d'empêcher l'étalement purement numérique et non physique de la zone de mélange entre les deux fluides (**figure 2**).

Finalement, les flux de chaleur à la paroi de l'objet calculés avec les nouvelles méthodes numériques permettront de simuler plus précisément la masse de bouclier thermique consommée pendant la phase de rentrée atmosphérique.

Les méthodes numériques développées précédemment **2** ne permettaient pas de restituer assez finement la frontière entre le gaz et le liquide. En effet, l'erreur commise par ces méthodes du premier ordre dépend linéairement de la taille des mailles. Ainsi, si on utilise

une discrétisation spatiale deux fois plus fine, l'erreur de la méthode sera deux fois plus petite. L'extension du schéma numérique au second ordre nous permet d'améliorer grandement la précision de la méthode : en doublant le nombre de mailles utilisées, l'erreur

RÉFÉRENCES

- 1** L. Tallois, S. Peluchon, P. Villedieu, « A second-order extension of a robust implicit-explicit acoustic-transport splitting scheme for two-phase flows », *Computers & Fluids*, **224**, 105531 (2022).
- 2** S. Peluchon, G. Gallice, L. Mieussens, « Development of numerical methods to simulate the melting of a thermal protection system », *Journal of Computational Physics*, **448**, 110753 (2021).

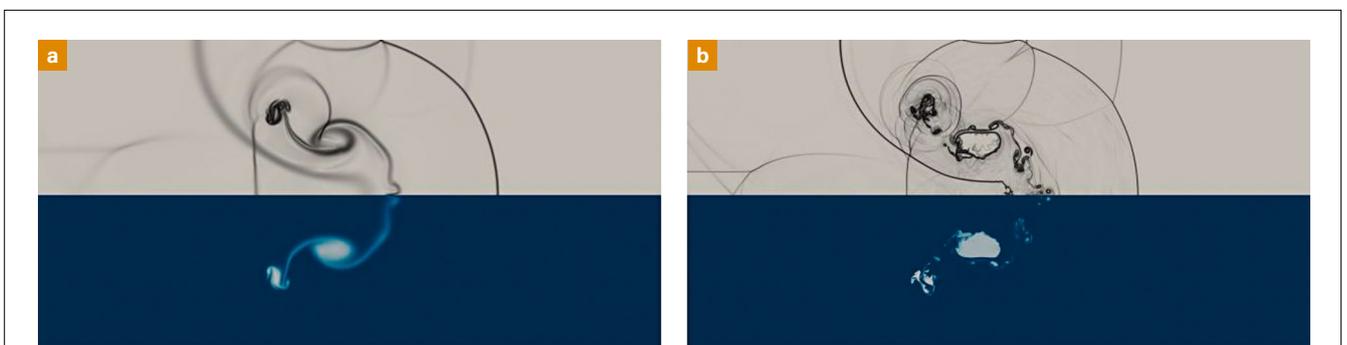


figure 2

Interaction d'un choc se propageant dans l'eau et d'une colonne d'air : représentation de la norme du gradient de la densité (en haut) et de la fraction volumique du liquide (en bas). **a** Résultats de la simulation effectuée avec les méthodes numériques à l'ordre 1. **b** Résultats que nous avons obtenus avec l'extension au second ordre et le limiteur compressif. En haut, les différentes ondes acoustiques sont plus précisément restituées avec la méthode d'ordre deux. En bas, l'étalement de la zone de mélange purement numérique (en nuances de bleu et blanc), généré par la méthode d'ordre 1, a été limité. En effet, la colonne d'air représentée en blanc et l'eau représentée en bleu sont vraiment séparées.

Transport en milieu aléatoire

Quel point commun peut-il exister entre un combustible nucléaire dégradé en situation post-accident, un béton contenant des déchets radioactifs pour leur stockage, une zone turbulente engendrée au sein d'une cible lors de son implosion au Laser Mégajoule ou bien encore un nuage ? Il s'agit de milieux dits aléatoires (ou désordonnés ou encore stochastiques) : la répartition spatiale des matériaux qui les constituent n'est pas connue en détail, mais statistiquement *via* la donnée des tailles moyennes des structures qu'ils forment, appelées longueurs de cordes. Deux méthodes existent pour la simulation du transport de particules, des neutrons ou des photons par exemple, dans de tels milieux : une voie approchée et une voie de référence. Une percée majeure dans cette dernière ouvre des perspectives pour le développement de modèles de transport permettant de traiter les cas plus réalistes où les longueurs de cordes ne sont plus constantes, mais évoluent spatialement au sein d'un milieu **1**.

La modélisation du transport de particules dans les milieux aléatoires est basée sur la théorie du transport linéaire dans les milieux stochastiques **2**. Elle se scinde en deux grandes familles.

La première constitue la voie de référence. Elle s'appuie sur la génération, à partir de la donnée de la longueur de corde associée à chaque matériau, d'un grand nombre de géométries aléatoires décrivant le milieu traversé par les particules. Pour chaque réalisation géométrique, l'équation du transport est résolue numériquement et les grandeurs d'intérêt telles que le flux de particules sont extraites. Ensuite, les moyennes statistiques de ces grandeurs sur l'ensemble des réalisations sont calculées. Cette voie, en principe exacte, donne accès à des résultats dits de référence. Elle

implique cependant de disposer d'un outil numérique de modélisation des géométries stochastiques et nécessite des temps de calcul extrêmement élevés, de plusieurs dizaines à plusieurs centaines de milliers d'heures sur un ordinateur classique, soit plusieurs années ! Dans la pratique, des supercalculateurs tels que ceux accessibles au CEA – DAM sont mis à contribution pour produire de tels résultats.

La seconde repose sur la dérivation d'équations de transport dites efficaces, prenant en compte de manière condensée les effets du désordre lors d'un seul calcul de transport, sans modéliser explicitement la géométrie. Un modèle efficace particulièrement bien connu est le modèle *Chord Length Sampling* (CLS) **3**. Ce traitement n'est pas exact, mais permet une résolution bien plus rapide par simulation que la voie de référence. Il est de ce fait utilisé dans de nombreux codes de transport, dont ceux du CEA. La précision de ces modèles doit néanmoins être établie sur la base de comparaisons par rapport aux solutions de référence.

Une équipe de la Direction des énergies du CEA (CEA – DES) a récemment franchi une étape dans la voie de référence en développant un outil de simulation pour la génération de géométries aléatoires, prenant en compte pour la première fois des configurations tridimensionnelles **4**. Ce dernier est cependant limité à des géométries homogènes spatialement, c'est-à-dire dans lesquelles la longueur de corde de chaque matériau est constante.

Depuis 2021, la collaboration entre le CEA – DAM et le CEA – DES dans le cadre du programme transverse de compétences Géostoh (GÉOmétries STOchastiques Hétérogènes) a levé cette contrainte avec le développement de nouveaux algorithmes en rupture avec l'existant permettant de produire

des géométries aléatoires spatialement hétérogènes, qui s'avèrent indispensables dans la modélisation de structures désordonnées réalistes. Ils ont été intégrés dans un nouveau générateur de géométries qui est ainsi adapté pour l'étude, dans la voie de référence, de l'impact des variations spatiales des longueurs de cordes – on parle de gradients spatiaux – sur le transport de particules dans les milieux aléatoires. Un exemple de réalisation géométrique issue de ce générateur est proposé dans la **figure 1**.

Nous avons obtenu des résultats de référence sur les flux de particules dans plusieurs configurations – longueurs de cordes, formes de gradients – en utilisant ce générateur et en sollicitant massivement le calculateur Exa 1 du CEA – DAM avec plus de vingt millions d'heures de calcul consommées. Pour

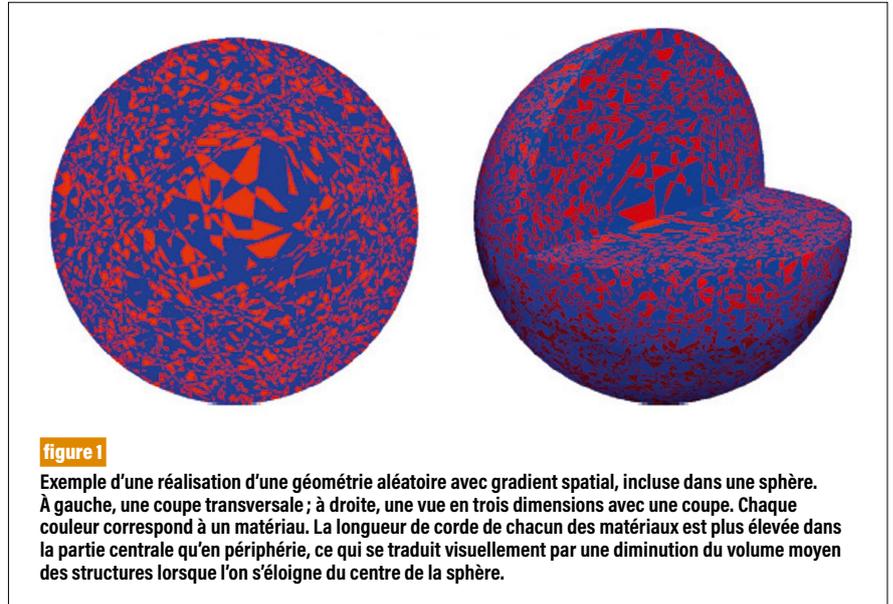


figure 1

Exemple d'une réalisation d'une géométrie aléatoire avec gradient spatial, incluse dans une sphère. À gauche, une coupe transversale ; à droite, une vue en trois dimensions avec une coupe. Chaque couleur correspond à un matériau. La longueur de corde de chacun des matériaux est plus élevée dans la partie centrale qu'en périphérie, ce qui se traduit visuellement par une diminution du volume moyen des structures lorsque l'on s'éloigne du centre de la sphère.

chaque configuration, les résultats ont été comparés à ceux fournis par le modèle approché CLS. Nous avons ainsi pu mettre en évidence que le modèle CLS ne reproduit pas de manière satisfaisante les résultats de référence lorsque les géométries étudiées présentent des hétérogénéités spatiales, comme

l'illustre la **figure 2**, où le rapport des valeurs obtenues avec les deux approches atteint un facteur deux. L'accès à des résultats de référence dans des configurations avec gradients et la découverte de cette limitation du modèle CLS, ainsi que des modèles qui en sont dérivés, nous invitent à poursuivre le développement de nouvelles approches. C'est l'objectif du projet Transparems (TRANsport Stochastique de PARTICules avec Effets de Mémoire Spatiale), qui a commencé en janvier 2023, toujours dans le cadre d'une collaboration entre le CEA – DAM et le CEA – DES.

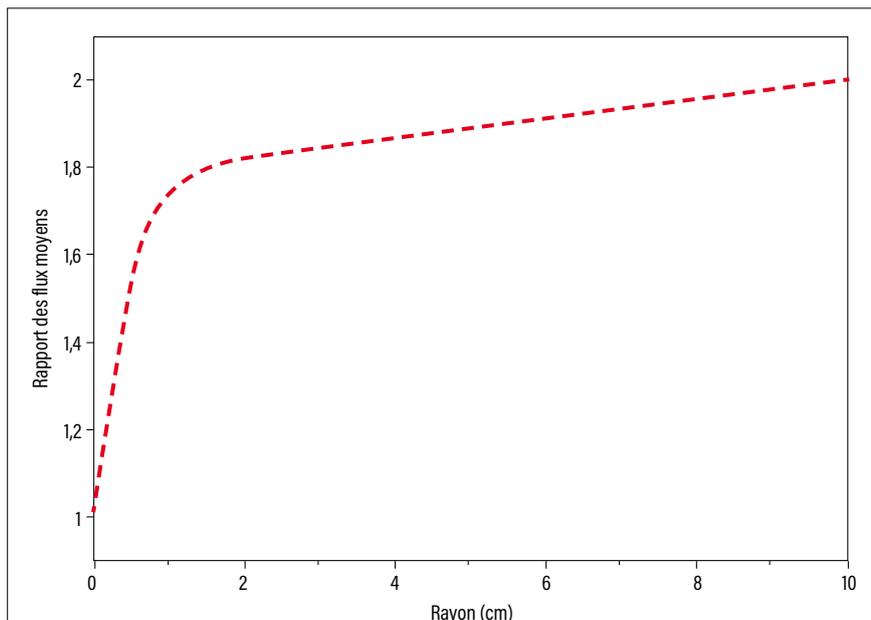


figure 2

Rapport entre les valeurs d'une solution de référence et celles d'une solution obtenue avec le modèle efficace CLS pour une configuration donnée. L'observable calculé est le flux moyen de particules à l'intérieur de la sphère en fonction du rayon de cette dernière. Ce rapport, variant entre 1 et 2, souligne le besoin d'améliorer le modèle CLS pour s'approcher du résultat de référence.

RÉFÉRENCES

- 1** M. A. Kowalski, C. Larmier, F. Madiot, J. Durand, S. Lemaire, A. Zoia, « Particle transport in Markov media with spatial gradients: comparison between reference solutions and Chord Length Sampling », *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **286**, 108185 (2022).
- 2** G. C. Pomraning, *Linear kinetic theory and particle transport in stochastic mixtures*, World Scientific Publishing (1991).
- 3** G. B. Zimmerman, M. L. Adams, « Algorithms for Monte Carlo particle transport in binary statistical mixtures », *Transactions of American Nuclear Society*, **66**, 287 (1991).
- 4** C. Larmier, F.-X. Hugot, F. Malvagi, A. Mazzolo, A. Zoia, « Benchmark solutions for transport in d -dimensional Markov binary mixtures », *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **189**, p. 133-148 (2017).

N°17 / JUILLET 2023

CHOCS AVANCÉES

Bilan 2022 des publications
et de la vie scientifique
de la Direction des
applications militaires



À PARAÎTRE
REVUE CHOCS N° 53
Électronique

N°17 / JUILLET 2023

CHOCS AVANCÉES



BILAN 2022 DES PUBLICATIONS ET DE LA VIE SCIENTIFIQUE
DE LA DIRECTION DES APPLICATIONS MILITAIRES

www-dam.cea.fr