

chocs avancées 2014

Avancées scientifiques et techniques de la direction des applications militaires

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

cea

SOMMAIRE

ÉDITORIAL

02 T. MASSARD

ÉLECTROMAGNÉTISME

04 **Antenne dipôle Log-Périodique imprimée**
J.-C. DIOT, J.-L. LASSERRE, A. CHAULOUX, F. COLOMBEL, M. HIMDI,
P. POULIGUEN

INTERACTION LASER-MATIÈRE

06 **Diffusion Brillouin stimulée et autofocalisation dans des plasmas en détente**
S. HÜLLER, D. PESME, P.-E. MASSON-LABORDE, S. DEPIERREUX,
P. LOISEAU, C. LABAUNE, H. BANDULET

PHYSIQUE DES PLASMAS

08 **Démonstration expérimentale des performances de cavités rugby sur OMEGA**
F. PHILIPPE, V. TASSIN, P. GAUTHIER, P.-E. MASSON-LABORDE,
M.-C. MONTEIL, S. ROSS, H.-S. PARK, B. LASINSKI, P. AMENDT

10 **Modélisation cinétique de l'allumage en FCI: une approche multi-échelle**
B. PEIGNEY, O. LARROCHE, V. TIKHONCHUK

12 **Coefficients de transport et pression hors équilibre thermodynamique local**
G. FAUSSURIER, C. BLANCARD, P. COSSE

MÉCANIQUE DES FLUIDES

14 **Évaluation de modèles aux tensions de Reynolds pour l'interaction de mélanges turbulents avec des chocs**
J. GRIFFOND, O. SOULARD

PHYSIQUE DE LA MATIÈRE CONDENSÉE

16 **Calcul des tensions de surface des liquides métalliques**
E. BOURASSEAU

PHYSIQUE NUCLÉAIRE

18 **Mesure des spectres de neutrons prompts émis lors de la fission du ^{239}Pu**
A. CHATILLON, G. BÉLIER, T. GRANIER, B. LAURENT, B. MORILLON, J. TAIEB,
R.C. HAIGHT, M. DEVLIN, R. O. NELSON, S. NODA, J.M. O'DONNELL

20 **Excitations nucléaires β et γ dans la même boîte**
S. PÉRU, S. HILAIRE, E. BAUGE, M. MARTINI

PHYSIQUE DE L'ATMOSPHÈRE

22 **Treize ans d'observations des ondes de gravité en Afrique**
E. BLANC, T. FARGES, A. LE PICHON, P. HEINRICH

INSTRUMENTATION & MÉTROLOGIE

24 **Influence de la pureté spectrale sur la calibration des analyseurs optiques X du LMJ**
S. HUBERT, V. PRÉVOT

SCIENCE DES MATÉRIAUX & CHIMIE

26 **Augmentation des Capacités d'Adsorption du Xénon par dopage à l'argent d'une Zéolithe – Rôle des Nanoparticules d'Argent**
L. DELIÈRE, S. TOPIN, S. DE VITO

28 **Résistance cohésive des bétons en dynamique rapide**
B. ERZAR, P. FORQUIN

30 **Compositions énergétiques nanostructurées sûres**
A. WUILLAUME, A. BEAUCAMP, F. DAVID-QUILLOT, C. ERADES

32 **Comportement atypique et vieillissement statique du tantale**
D. COLAS, S. FLOURIOT, E. FINOT, T. PARIS, S. FOREST, M. MAZIERE

34 **Application des sulfones dans la formulation d'électrolytes pour batteries Li-ion à base de $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$: étude des interfaces**
J. DEMAUX, M. LE DIGABEL, H. GALIANO, E. DE VITO,
B. CLAUDE-MONTIGNY, M. CAILLON-CARAVANIER, D. LEMORDANT

36 **Étude de la phase σ dans l'acier 316Nb**
A. PERRON, F. BUY, E. SUZON, C. TOFFOLON-MASCLET, F. CORTIAL,
V. VIGNAL, P. PETIT

38 **Capteurs chimiques revêtus de calixarènes pour la détection d'explosifs**
P. MONTMEAT, F. VEIGNAL, L. HAIRAULT, C. METHIVIER, C.-M. PRADIER

CALCUL NUMÉRIQUE

40 **Écoulements hypersoniques en atmosphère raréfiée – Raffinement local de grille en vitesses**
C. BARANGER, J. CLAUDEL, N. HÉROUARD, L. MIEUSSSENS

42 **Simulation d'électrons de très basse énergie pour la microélectronique**
M. RAINE, P. PAILLET, M. GAILLARDIN

44 **Optimisation des opérations collectives dans les applications MPI+OpenMP**
A. MAHÉO, W. JALBY, P. CARRIBAULT, M. PÉRACHE, J. JAEGER

46 **Réponses vibratoires non-linéaires**
M. CLAEYS, J.-P. LAMBELIN, B. ALCOVERRO, J.-J. SINOÛ

PRIX ET DISTINCTIONS, LIVRES PARUS, HDR



Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives

Chocs Avancés 2014, Avancées scientifiques et techniques de la Direction des applications militaires.

Image de couverture: Simulation d'un plasma détendu de silice SiO_2 à 10 000K (silicium: rose, oxygène: jaune) – ©/CEA/DAM

Directeur de la publication: Thierry MASSARD. **Coordinateur scientifique:** Daniel MALYS.

Comité scientifique: Daniel BOUCHE, Pierre BRUGUIÈRE, Jacques CAGNOUX, Catherine CHERFILS, Jean CLÉROUIN, Jean-François CLOUET, Gilles DAMAMME, Patrick DAVID, Philippe DUVIGNAC, Francis HARDOUIN, Denis JURASZEK, Christophe LÉLOUP, Stéphane LOUBIÈRE, Daniel MALYS, Christophe MOULIN, Bruno SCHEURER, Philippe SIMONETTI.

Rédacteur en chef: Jean-Marc LABORIE.

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

Chocs Avancés

CEA/DAM

Institut supérieur des études du nucléaire de défense (ISENDé)

Bruyères-le-Châtel, F-91297 Arpajon cedex

Tél: 33 (0)1 69 26 76 98 - Fax: 33 (0)1 69 26 70 80

E-mail: chocs@cea.fr

Brochure imprimée sur papier écogéré
ISSN 1961-7399

ÉDITORIAL



THIERRY MASSARD
 Directeur scientifique
 de la Direction des applications militaires du CEA

2014, des avancées d'exception

2014 fut une très grande année pour la Direction des applications militaires (DAM) du CEA. En présentant ce numéro d'Avancées 2014, je ne peux m'empêcher de revenir sur quelques temps forts que la DAM a connu en 2014.

Le 23 octobre, l'ensemble de l'équipe projet du Laser Mégajoule est présent dans le poste de conduite de l'installation (PCI) du plus grand laser d'Europe. Une expérience de physique des armes est sur le point d'être réalisée pour la première fois sur le Laser Mégajoule (LMJ). Cette première est l'aboutissement d'un projet admirablement mené par une équipe d'ingénieurs de la DAM mais aussi par un grand nombre d'industriels français qui ont contribué au succès de ce projet. Cette expérience a pu même être réalisée deux mois plus tôt que prévu. Le résultat de l'expérience est totalement conforme aux prévisions. Le laser a parfaitement fonctionné ainsi que l'ensemble du dispositif expérimental associé, que ce soit la cible ou les diagnostics de mesure. Une ère nouvelle s'ouvre pour la DAM avec un laser qui sera de plus en plus performant au fur et à mesure que le nombre de faisceaux laser augmentera. Mené en parallèle, un programme expérimental ambitieux mobilisera les équipes de la DAM qui conçoivent, réalisent et exploitent les expériences laser. Cette

voie passionnante, la DAM la partage avec la communauté scientifique académique qui disposera à partir de 2017 d'un accès au LMJ avec de surcroît un laser Petawatt à très haute énergie, PETAL, laser unique par ses caractéristiques et qui fait de l'ensemble LMJ-PETAL une très grande infrastructure de recherche unique au monde.

D'autres jalons tout aussi emblématiques ont été franchis avec succès en 2014 : la mise en service et les premières expériences de l'installation EPURE. Il s'agit, avec une machine radiographique de grande puissance, de scruter les matériaux en mouvement très rapide. Là encore les plus hautes performances ont été atteintes par la qualité des images obtenues et la précision temporelle mesurée. En service l'installation compte aujourd'hui un axe de radiographie. À terme elle en comportera trois permettant une reconstitution tridimensionnelle de l'expérience à laquelle les calculs 3D de prévision seront confrontés.

Enfin, grâce au programme Simulation, la DAM a franchi également fin 2014 une étape très importante pour la garantie des armes nucléaires.

Ces trois jalons marquent de façon significative les avancées du programme Simulation destiné à garantir la sûreté et la fiabilité des armes de

Le Premier ministre
Manuel Valls, accompagné
de Madame la Ministre de la
Recherche Geneviève Fioraso,
prononce la mise en service
du LMJ – 23/10/2014.
© CEA – DAM Ile-de-France



la dissuasion, en l'absence d'essais nucléaires nouveaux. Ils démontrent également la qualité des travaux scientifiques et techniques des équipes de la DAM dans un grand nombre de domaines qui vont de la gestion des grands projets à la technologie de réalisation de composants complexes, en passant par une recherche amont de très haut niveau dans la physique nucléaire, la physique atomique ou encore la physique de la matière condensée.

C'est pourquoi *Avancées* 2014 – comme les éditions précédentes – est aussi riche en thèmes abordés. Ils reflètent la diversité et la complexité des sciences et des techniques nécessaires à la DAM pour remplir ses missions. On voit bien à travers ces publications que le concept de simulation est devenu un outil fédérateur permettant à la DAM de conforter ses résultats, d'accélérer sa recherche et ses développements et de permettre une innovation soutenue par la puissance de la modélisation. C'est pourquoi les techniques de la simulation ne sont plus l'apanage de la seule mise au point des armes nucléaires : elles concernent tout autant les autres missions de la DAM, que ce soit la propulsion nucléaire, la lutte contre la prolifération ou encore l'armement conventionnel.

La DAM multiplie les actions visant à accroître la valeur scientifique de ses travaux : augmentation du nombre et de la qualité des publications, dépôts de brevets, expérimentations conjointes sur des grandes installations de recherche avec

des équipes internationales, collaborations sur de grands projets avec des instituts de recherche ou des industriels, organisation de conférences ou de workshops internationaux.

Avancées présente donc, comme chaque année, une sélection des publications les plus marquantes de la DAM. En 2014, la physique des plasmas, l'interaction laser-matière et les diagnostics du laser Mégajoule occupent une place importante, au même titre que la science des matériaux et la chimie. La physique amont dans le domaine nucléaire, dans le domaine de l'atmosphère et la simulation numérique sont également tout particulièrement à l'honneur dans ce numéro. Tous ces travaux illustrent l'excellence de la DAM et sa capacité à s'investir dans tous les domaines scientifiques d'importance qui feront la dissuasion de demain.

Antenne dipôle log-périodique imprimée

J.-C. DIOT - J.-L. LASSERRE / CEA – Gramat

A. CHAULOX - F. COLOMBEL - M. HIMDI / Institut d'Électronique et de Télécommunications de Rennes (IETR)

P. POULIGUEN / DGA – Mission pour la Recherche et l'Innovation Scientifique (MRIS)

Le développement de nouvelles applications dans le domaine des armes à énergie dirigée électromagnétiques (AED EM), des radars ou de la guerre électronique, impose l'étude de nouvelles antennes, de plus en plus contraintes notamment au niveau de la gestion de leur diagramme de rayonnement et de leur largeur de bande passante. Les travaux présentés dans cet article s'inscrivent dans cette démarche d'innovation. Ils fournissent un exemple de développement d'antenne large bande compacte orientée vers ces nouveaux besoins.

L'antenne est un élément essentiel dans la conception d'un système radiofréquence. Sa fonction est de transformer l'énergie électromagnétique conduite via des câbles, lignes ou guide d'onde, en onde électromagnétique rayonnée et de la transmettre vers le milieu de propagation. Les caractéristiques d'une antenne vont dépendre de la fréquence du signal à transmettre, de sa bande passante, des spécifications de direction plus ou moins privilégiées du rayonnement (gain, diagramme de rayonnement) et de la puissance à émettre (ou à recevoir). Un des axes de recherche actuel consiste à rechercher une antenne la plus compacte possible ayant une bande passante la plus large possible avec un comportement indépendant de la fréquence et un gain maximisé. Il s'agit d'un compromis délicat à obtenir puisque ces caractéristiques ont tendance à s'opposer les unes aux autres (par exemple la bande passante large et la compacité limitent la tenue en puissance). Pour atteindre une bande passante large, plusieurs solutions d'antennes existent comme par exemple les antennes à onde progressives [1], les antennes cornets [2], les patchs [3] et les antennes indépendantes de la fréquence (log-périodiques ou spirales) [2]. Les antennes à ouverture progressive peuvent être employées sur des bandes passantes voisines de la décade et leurs diagrammes de rayonnement sont directifs et restent stables en fréquence. En revanche, leur encombrement est important. Les antennes planaires disposées au-dessus d'un plan réflecteur sont compactes et leur largeur de bande de fréquence est supérieure à une octave, mais leur diagramme de rayonnement n'est pas stable sur la largeur de leur bande passante. La solution retenue dans cette étude est l'utilisation d'une antenne dipôle log-périodique imprimée, disposée au-dessus d'un plan de masse

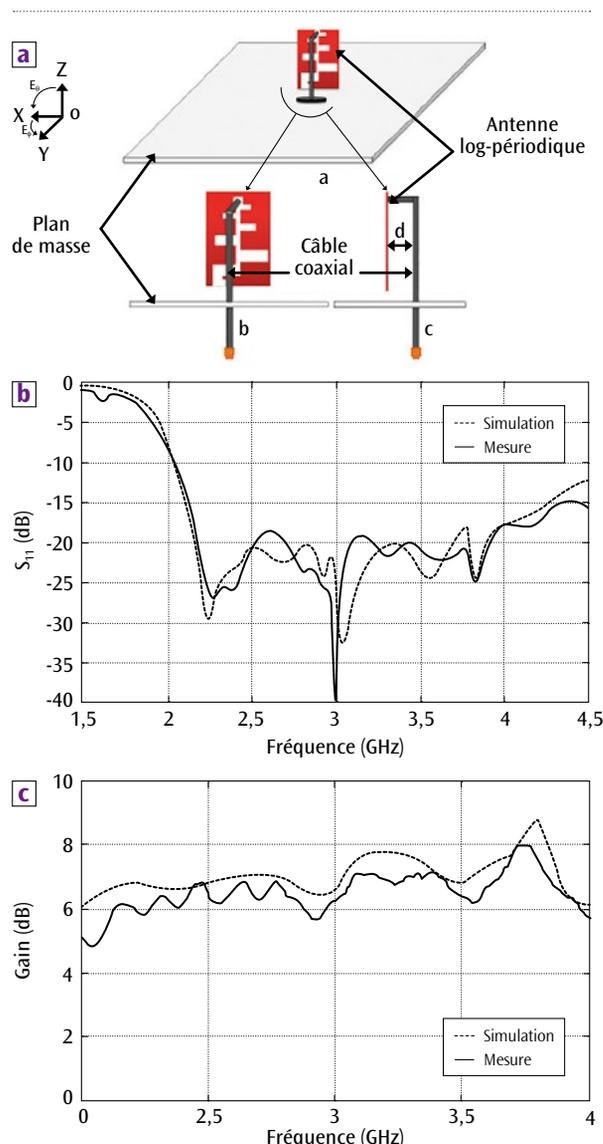


Figure 1.

(a) Antenne log-périodique imprimée ; (b) Coefficient de réflexion ; (c) Gain.

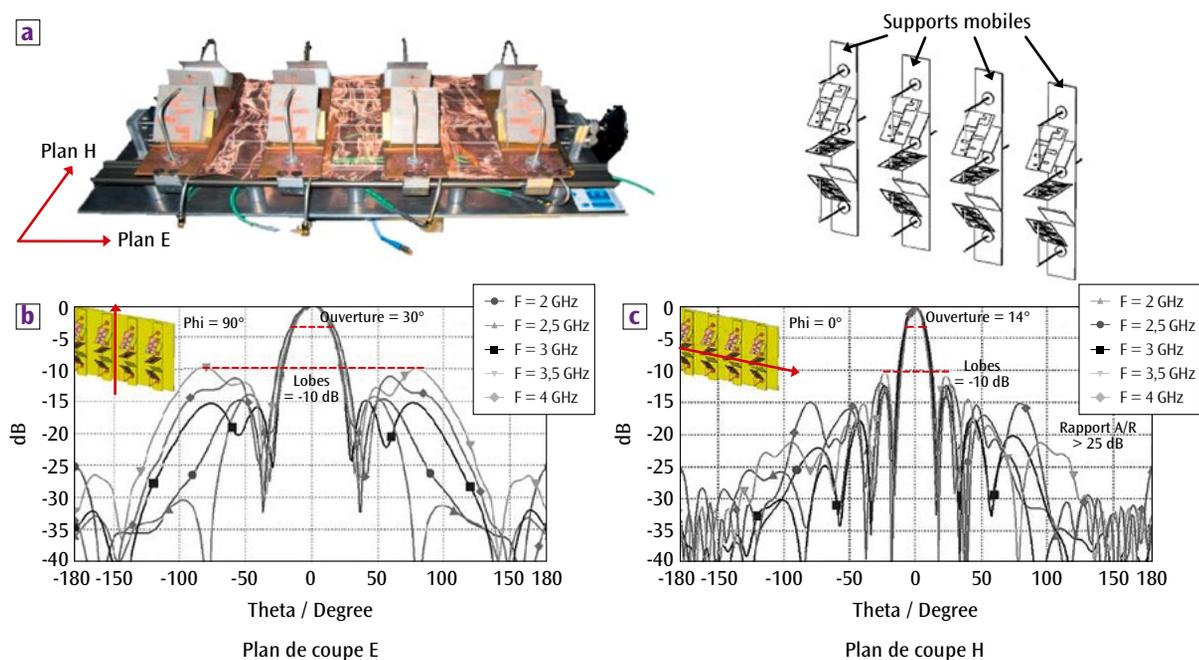


Figure 2. Association en réseau d'antennes log-périodiques imprimées: (a) Structure; (b) et (c): Diagrammes de rayonnement suivant deux plans de coupe.

faisant office de réflecteur. Elle allie compacité, bande large et stabilité du diagramme de rayonnement (figure 1a).

Cette antenne est constituée d'un assemblage de six brins, chacun de taille différente, oscillant autour d'une fréquence donnée. Les dimensions des brins et leur espacement sont choisis afin de combiner les fonctionnements individuels de chacun des brins et d'obtenir un comportement large bande global [4][5]. La distribution d'énergie est réalisée par une ligne placée au centre de l'antenne. La bande passante obtenue pour un coefficient de réflexion inférieur à -10 dB est supérieure à une octave (figure 1b). Son gain est quasiment constant en fonction de la fréquence (figure 1c) mais celui-ci reste faible.

La solution adoptée pour augmenter le gain consiste à associer plusieurs antennes log-périodiques en réseau (figure 2a). La mise en sous-réseau de trois antennes log-périodiques inclinées et le maintien d'une distance inter-éléments stable en fonction de la longueur d'onde permet d'obtenir des ouvertures de diagramme de rayonnement stables en fréquence dans le plan de coupe E [5][6], comme le montre la figure 2b. Afin de limiter le couplage entre les antennes, dû au rayonnement des antennes inclinées sur le plan de masse, des déflecteurs (plaques de métal inclinées) ont été ajoutés sous les antennes inclinées. Quatre sous-réseaux de trois antennes log-périodiques couplées dans le plan de coupe H sont associés et montés sur des supports mobiles. Le réglage de l'écartement de ces quatre assemblages permet d'obtenir un diagramme constant en fonction de la fréquence par accord mécanique (figure 2c). L'alimentation est réalisée via des répartiteurs de

puissance. Le gain varie entre 14 et 17 dB sur la plage de fréquence.

Perspective

Le domaine exploré à travers ces travaux montre qu'il est possible d'obtenir des antennes large bande compactes tout en contrôlant la façon dont elles rayonnent. Il reste toutefois la question de la tenue en puissance qui est majeure pour certaines applications. L'augmentation des densités de puissance est de plus en plus recherchée de même que le pilotage du diagramme de rayonnement des antennes. De nouvelles études sont donc à mener afin de faire cohabiter ces deux paramètres importants.

Références

- [1] B. CADILHON *et al.*, "Chapter 15: Ultra Wideband Antennas for High Pulsed Power Applications", *Ultra wideband communications: Novel trends - Antennas and propagation*, Dr M. Matin (Ed.), InTech (2011).
- [2] J.D. KRAUS, R.J. MARHEFKA, *Antennas*, Éd. Mc Graw-Hill (2003).
- [3] J.-C. DIOT, T. TARATI, B. CADILHON, B. CASSANY, P. MODIN, E. MERLE, "Wideband Patch Antenna for HPM Application", *IEEE Transactions on plasma science*, **39**, p. 1446-1454 (2011).
- [4] A. CHAULOUX, *Contribution à l'étude d'antennes de puissance à efficacité optimisée. Application aux réseaux large bande et reconfigurables en diagramme*, Thèse de doctorat de l'université Rennes 1 (2014).
- [5] A. CHAULOUX, F. COLOMBEL, M. HIMDI, J.-L. LASSERRE, P. POULIGUEN, "Low-return-loss printed log-periodic dipole antenna", *IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters*, **13**, p. 503-506 (2014).
- [6] A. CHAULOUX, F. COLOMBEL, M. HIMDI, J.-L. LASSERRE, "Antenne large bande", Brevet en cours de dépôt.

Diffusion Brillouin stimulée et autofocalisation dans des plasmas en détente

S. HÜLLER - D. PESME / Centre de Physique Théorique, CNRS, École Polytechnique, Palaiseau
 P.-E. MASSON-LABORDE - S. DEPIERREUX - P. LOISEAU / CEA – DAM Île-de-France
 C. LABAUNE / Laboratoire pour l'utilisation des lasers intenses (LULI), UMR 7605 CNRS – CEA – École Polytechnique – Université Pierre et Marie Curie, Palaiseau
 H. BANDULET / Institut National de la Recherche Scientifique, Varennes, Québec, Canada

La compréhension des processus de diffusion Brillouin stimulée (DBS) et d'autofocalisation est cruciale pour la réussite des schémas de fusion par laser. Ces deux instabilités pouvant se développer en même temps, il est très important d'étudier la croissance de la DBS dans le plasma modifié par l'autofocalisation du faisceau laser. Un nouveau modèle théorique décrivant l'autofocalisation d'un faisceau laser dans un plasma en expansion est proposé, qui permet de reproduire et d'expliquer le comportement des instabilités paramétriques dans des expériences menées au laboratoire pour l'Utilisation des Lasers Intenses (LULI).

Les récents résultats du National Ignition Facility montrent la nécessité de comprendre les mécanismes de l'interaction laser-plasma et en particulier les instabilités de diffusion telles que l'instabilité de diffusion Brillouin stimulée (DBS) mettant en jeu le couplage entre l'onde laser et les ondes sonores du plasma. Un faisceau laser peut aussi provoquer localement des modifications des profils de densité et de vitesse du plasma lorsque sa puissance devient supérieure à la puissance dite « puissance critique d'autofocalisation ». Ce phénomène se produit très facilement pour des faisceaux dits « monospeckle » dont le profil transverse en intensité est très proche d'une fonction gaussienne, mais aussi dans les points chauds (ou speckles) d'un faisceau laser lissé par lames de phases, ce qui affecte sa propagation dans le plasma.

Un modèle dit de « décomposition en harmoniques » a été développé, qui permet de modéliser en plusieurs dimensions l'interaction laser-plasma dans des plasmas en expansion en séparant les échelles spatiales et temporelles des processus hydrodynamiques, de diffusion et de filamentation laser. Cette approche implémentée dans les codes du Centre de Physique Théorique de l'École Polytechnique, le code HARMONY, et le code HERA du CEA, a permis de faire avancer notre capacité à modéliser les expériences actuelles. En utilisant ces simulations à l'échelle millimétrique et en trois dimensions (3D) avec le code HERA, nous avons pu identifier le scénario qui explique les taux de rétrodiffusion Brillouin observés dans des expé-

riences faites au LULI avec un unique point chaud et correctement reproduits dans les simulations. Un élément important de ce scénario est la déter-

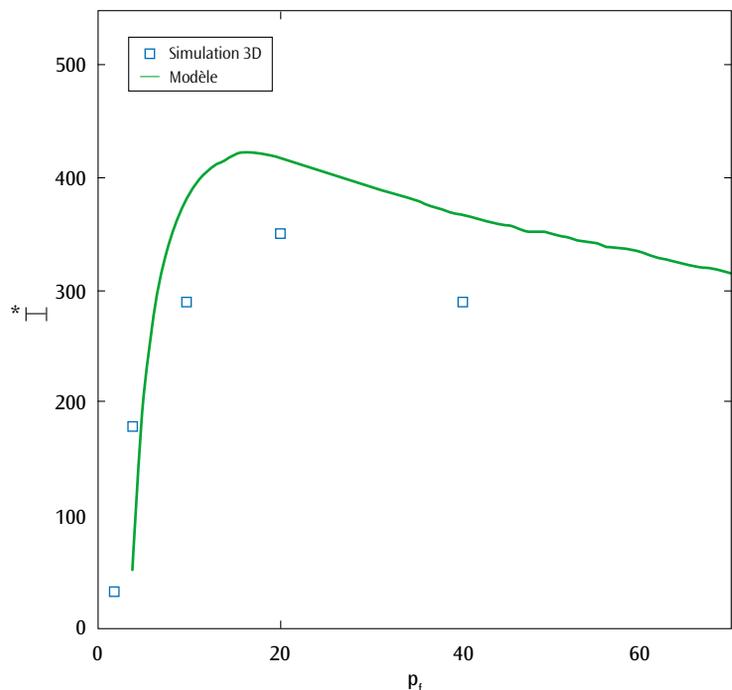


Figure 1. Évolution de la surintensité ($I^*=I/I_0$) du faisceau laser autofocalisant, en fonction de la puissance du faisceau par rapport à la puissance critique d'autofocalisation ($p_i=P/P_0$). Courbe verte : calcul avec le système d'équation déterminé à partir du Lagrangien. Carrés bleus : résultats des simulations HERA 3D.

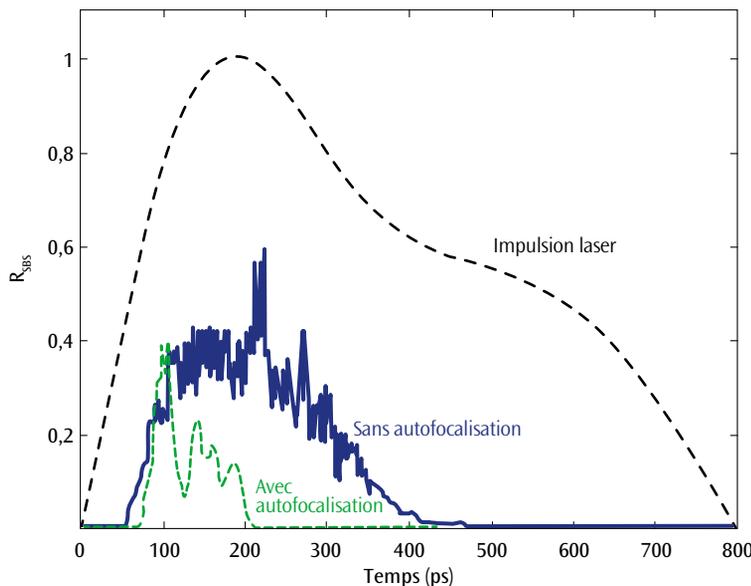


Figure 2. Réflectivités Brillouin issues de simulations 3D HERA sans (courbe bleue) et avec (courbe verte) prise en compte de l'effet d'autofocalisation pondéromotrice, et impulsion laser (courbe noire). Simulation d'un plasma de longueur 3 mm et de largeur 150 μm pendant une durée de 800 ps.

mination d'une densité lagrangienne du champ laser autofocalisant qui est une fonction mathématique permettant d'obtenir l'équation d'évolution du faisceau. Les modèles déjà existants sont basés sur un travail d'Anderson et Bonnedal [1] valable en plasma homogène et sans vitesse d'écoulement.

Lagrangien du champ laser autofocalisant dans un plasma en détente

À partir de la densité lagrangienne décrivant l'autofocalisation du laser dans un plasma ayant une vitesse d'expansion parallèle à la direction de propagation du laser, nous avons établi un système d'équations différentielles qui permet de traiter ce problème sans avoir recours aux simulations 3D. Ce modèle est comparé aux simulations HERA 3D (figure 1) en ce qui concerne les valeurs maximales des intensités crête du faisceau autofocalisé et montre un très bon accord [2].

Réduction du gain pour l'instabilité Brillouin

En utilisant les résultats du modèle, à savoir les valeurs de la surintensité du faisceau autofocalisant, et la densité du plasma où se produit ce pic d'intensité, nous avons obtenu un modèle de réduction du gain pour l'amplification de la DBS. Ce modèle est basé sur deux hypothèses vérifiées dans les simulations 3D: (i) l'activité Brillouin reste localisée dans un premier point chaud autofoca-

lisé situé à l'avant du plasma, (ii) la densité dans ce point chaud autofocalisé est réduite par la pression exercée par la force pondéromotrice, et ainsi le produit de l'intensité locale par la densité est faible.

L'évolution temporelle de l'activité Brillouin est considérablement modifiée par la prise en compte de l'autofocalisation (figure 2). Sans prise en compte de cette dernière, l'instabilité Brillouin suit temporellement l'impulsion laser. En revanche, lorsque l'autofocalisation est prise en compte, l'instabilité Brillouin est temporellement localisée et fortement réduite à des niveaux comparables à l'expérience.

En conclusion nous avons franchi une étape importante dans la compréhension et la modélisation des processus de diffusion Brillouin stimulée et d'autofocalisation dans les plasmas préformés. Nous avons reproduit quantitativement les résultats d'une expérience LULI en incluant toutes les caractéristiques lasers et plasmas, et nous avons pu trouver un modèle théorique expliquant et reproduisant les comportements de l'instabilité Brillouin observés dans l'expérience.

Références

- [1] D. ANDERSON, M. BONNEDAL, "Variational approach to nonlinear self-focusing of Gaussian laser beams", *Phys. Fluids*, **22**, 105 (1979).
- [2] P.-E. MASSON-LABORDE, S. HULLER, D. PESME *et al.*, "Stimulated Brillouin scattering reduction induced by self-focusing for a single laser speckle interacting with an expanding plasma", *Phys. Plasmas*, **21**, 032703 (2014).

Démonstration expérimentale des performances de cavités rugby sur OMEGA

F. PHILIPPE - V. TASSIN - P. GAUTHIER - P.-E. MASSON-LABORDE - M.-C. MONTEIL / CEA – DAM Île-de-France
S. ROSS - H.-S. PARK - B. LASINSKI - P. AMENDT / Lawrence Livermore National Laboratory, États-Unis

La conversion du rayonnement laser en un bain thermique de rayons X s'obtient par chauffage d'une cavité, habituellement un cylindre d'or. Une comparaison expérimentale directe des performances d'une telle cavité classique avec la cavité en forme de ballon de rugby conçue par le CEA – DAM Île-de-France a démontré l'efficacité de cette dernière. Les mesures obtenues sur l'installation laser OMEGA indiquent que cette nouvelle géométrie permet d'atteindre des températures plus élevées tout en préservant de bonnes conditions d'interaction laser-matière. Ceci conduit à des implosions plus rapides, permettant de produire près de dix fois plus de neutrons que la géométrie cylindrique classique.

L'effort actuellement mené pour atteindre l'ignition thermonucléaire par confinement inertiel nécessite la conversion efficace de l'énergie laser en rayons X par thermalisation dans une cavité. Cette étape, caractéristique de l'approche dite d'« attaque indirecte », produit le bain de rayonnement isotrope qui comprime ensuite la capsule de combustible par réaction, en chauffant et éjectant ses couches externes. Pour atteindre et maintenir les pressions les plus élevées possibles avec une installation laser donnée, il est crucial de minimiser les pertes d'énergie lors de cette étape intermédiaire. La majeure partie de ces pertes ayant lieu par diffusion thermique dans la paroi de la cavité, une voie possible consiste à réduire la surface de cette paroi. La tâche n'est pas triviale, de nombreuses contraintes pesant sur la forme de cavité. Cette idée de base a donné naissance à toute une famille de concepts de cibles, rassemblés sous le nom de « cavités rugby » en raison de leur

forme générale [1]. La cavité que nous avons testée sur le laser OMEGA est un exemple, simple mais représentatif, de la phénoménologie de ce concept de cibles. Nous avons comparé directement les performances d'une cavité « rugby » (profil en arc de cercle) à une cavité de forme cylindrique classique, pour le même éclairage laser et la même capsule (figure 1). Ces cavités sont remplies de gaz qui limite la détente des parois, étendant ainsi à des conditions plus réalistes les résultats que nous avons obtenus auparavant en cavité vide [2].

Compte tenu du volume plus réduit de la cavité rugby, le plasma y évolue plus rapidement vers des densités élevées, ce qui aurait pu constituer un obstacle à une bonne propagation des faisceaux laser. Les mesures calorimétriques et spectroscopiques de la lumière rétrodiffusées ont cependant montré que les instabilités laser-plasma (Raman et Brillouin) demeuraient faibles, dégradant peu le bilan énergétique de la cavité. La modélisation numérique du spectre de la lumière rétrodif-

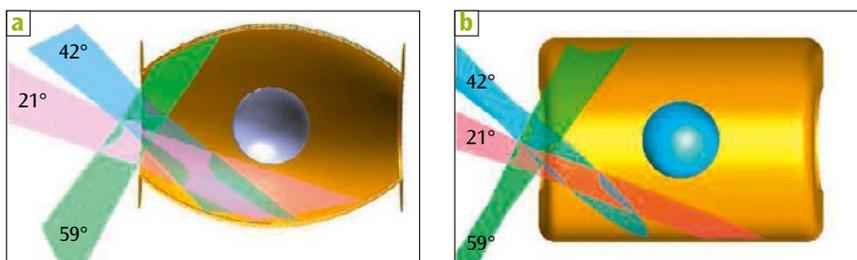


Figure 1. Cavités de forme cylindrique classique (b) et de forme « ballon de rugby » (a). Un seul faisceau est représenté pour chaque angle d'incidence, sur un total de 20 de chaque côté. Les cavités ont le même diamètre et la même taille de trous d'entrée laser.

fusée nous a également permis d'identifier les mécanismes à l'origine de la rétrodiffusion dans ces cibles. Celle-ci coïncide avec le passage des faisceaux dans une zone de gaz comprimé par la détente des parois et des couches externes de la capsule. Nous validons ainsi des outils d'évaluation des risques qui sont la clé d'une optimisation globale des performances de la cavité, intégrant la problématique de l'interaction laser-plasma.

Le rayonnement X émis par la cavité est mesuré par deux réseaux de diodes ayant fait l'objet d'un étalonnage absolu préalable. Ces deux instruments, DANTE (Lawrence Livermore National Laboratory) et DMX (CEA - DAM) donnent des résultats cohérents et montrent que le flux radiatif issu de la cavité rugby est près de 50 % plus élevé que celui issu de la cavité classique (figure 2). Nous nous sommes assurés, au moyen d'une imagerie des trous d'entrée laser, que ceci ne résultait pas d'un effet lié à la taille de source.

Il fallait cependant s'assurer que la puissance effectivement délivrée à la capsule, au centre de la cavité, était également améliorée avec la nouvelle géométrie. Pour cela nous avons étudié les performances neutroniques lors de l'implosion avec un scintillateur placé au voisinage de la cible. Les mesures (figure 3) montrent sans ambiguïté

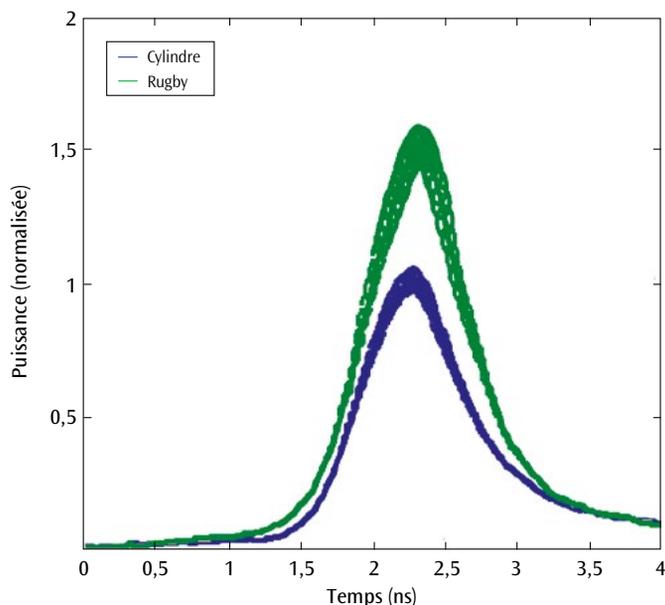


Figure 2. Rayonnement X émis par la cavité, près de 50 % plus intense avec une cavité rugby (en vert) par rapport à la cavité de conversion cylindrique classique (en bleu).

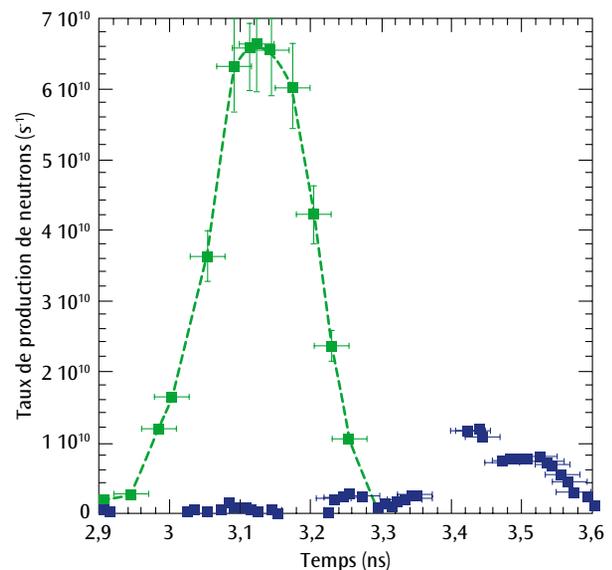


Figure 3. Production neutronique au cours du temps, plus précoce et plus intense pour la cavité « rugby » (en vert) que pour la cavité classique (en bleu).

un fonctionnement plus précoce et une plus forte production de neutrons, caractéristiques d'une implosion plus efficace.

Enfin, nous avons vérifié que même en alimentant la cavité rugby avec une énergie laser réduite de 10 %, les performances de celle-ci restent significativement supérieures à celle de la cavité cylindrique. Dans ce cas, les images de l'émission X de la capsule montrent de plus une excellente symétrie de l'implosion.

Ces résultats [3] démontrent l'efficacité de notre approche d'optimisation de la forme de cavité. Il est ainsi possible d'atteindre des performances équivalentes à énergie laser réduite, ou des performances supérieures à énergie donnée. On peut également choisir d'exploiter le gain d'efficacité pour augmenter le diamètre de la cavité. Cette dernière voie, intéressante pour favoriser une bonne propagation des faisceaux laser, est actuellement testée sur la NIF (National Ignition Facility), avec des résultats prometteurs.

Références

- [1] M. VANDENBOOMGAERDE *et al.*, "Prolate-spheroid ("rugby-shaped") Hohlraum for inertial confined fusion", *Phys. Rev. Lett.*, **99**, 065004 (2008).
- [2] F. PHILIPPE *et al.*, "Experimental demonstration of X-ray drive enhancement with rugby-shaped Hohlraums", *Phys. Rev. Lett.*, **104**, 035004 (2010).
- [3] F. PHILIPPE *et al.*, "Demonstrated high performance of gas-filled rugby-shaped Hohlraums on Omega", *Phys. Plasmas*, **21**, 074504 (2014).

Modélisation cinétique de l'allumage en FCI: une approche multi-échelle

B. PEIGNEY - O. LARROCHE / CEA – DAM Île-de-France

V. TIKHONCHUK / Centre lasers intenses et applications (CELIA), UMR 5107 CNRS – CEA – Université de Bordeaux 1, Talence

Une méthode originale a été conçue pour modéliser le processus d'allumage de cibles de deutérium-tritium dans le contexte de la fusion par confinement inertiel (FCI). On cherche ainsi à décrire le phénomène d'ignition au niveau cinétique, par une approche de type Fokker-Planck appliquée à la fois aux ions thermiques du plasma et aux particules α créées par réaction de fusion. La différence des échelles de vitesse entre les particules thermiques et les particules suprathermiques produites par fusion nous conduit à développer une stratégie multi-échelle consistant à traiter simultanément et conjointement les deux échelles caractéristiques. La méthode multi-échelle a donné naissance à un nouveau code cinétique « Fuse » (FPion Upgrade with two Scales of Energy), construit sur la base du code FPion [1].

La conception des cibles et l'interprétation des expériences FCI s'appuient sur des codes résolvant numériquement des modèles de type fluide ou hydrodynamique. Ce type d'approche est pertinent lorsque le libre parcours des particules est petit devant la longueur caractéristique du système. Si cette condition est bien respectée pour les particules thermiques (ions D,T), ce n'est pas le cas des particules suprathermiques dont le libre parcours moyen est de l'ordre de la taille caractéristique du système. Une approche cinétique, basée sur les fonctions de distribution des particules, est donc a priori requise pour traiter les produits de fusion de façon précise. Notre objectif est de développer une modélisation cinétique du processus d'ignition et de combustion des cibles, tout en conservant des temps de résolution numérique raisonnables en vue de l'application à des configurations réalistes de cible.

Séparation des échelles de vitesse

La difficulté d'une telle approche réside dans le couplage entre des populations ioniques caractérisées par des échelles d'énergie très différentes (**figure 1**):

- les ions dits thermiques D, T, caractérisés par une énergie de l'ordre du keV et formant l'essentiel de la masse du plasma en implosion;
- les particules α suprathermiques, créées à 3,52 MeV par les réactions de fusion.

Le problème à traiter est donc caractérisé par deux échelles d'énergie couplées. Pour le résoudre, on développe une technique multi-échelle [2] spécifique basée sur l'analyse du processus de ralentissement des particules rapides décrit par l'équation de Vlasov-Fokker-Planck. Plus précisément, on montre [2] que l'on peut décomposer la fonction de distribution des particules α sous la forme de deux composantes :

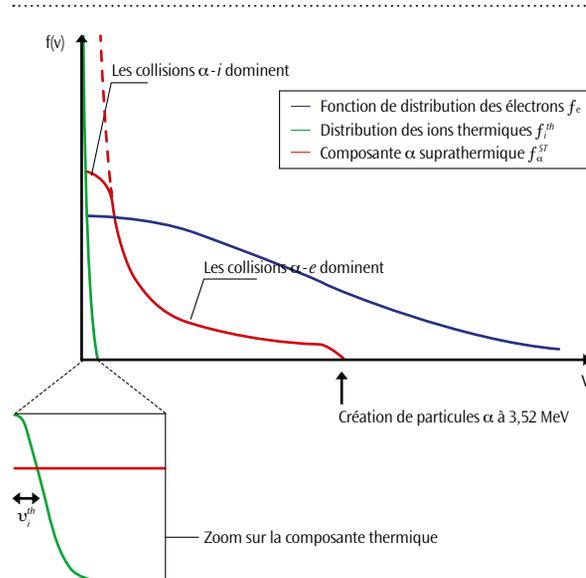


Figure 1. Représentation schématique de la relaxation collisionnelle des particules α sur les ions cibles thermiques.

- une composante suprathermique (représentée sur la **figure 2** pendant le processus de combustion observé localement), évoluant sur un large domaine de vitesses, mais avec une échelle de variation relativement lente. Cette composante est alors discrétisée sur un maillage en vitesse étendu avec un pas relativement grossier ;

- une composante thermique, qui évolue rapidement sur un support localisé de l'espace des vitesses, concentré dans le domaine des vitesses thermiques. Un maillage en vitesse localisé autour du domaine thermique avec un pas fin est requis pour décrire cette échelle de vitesse.

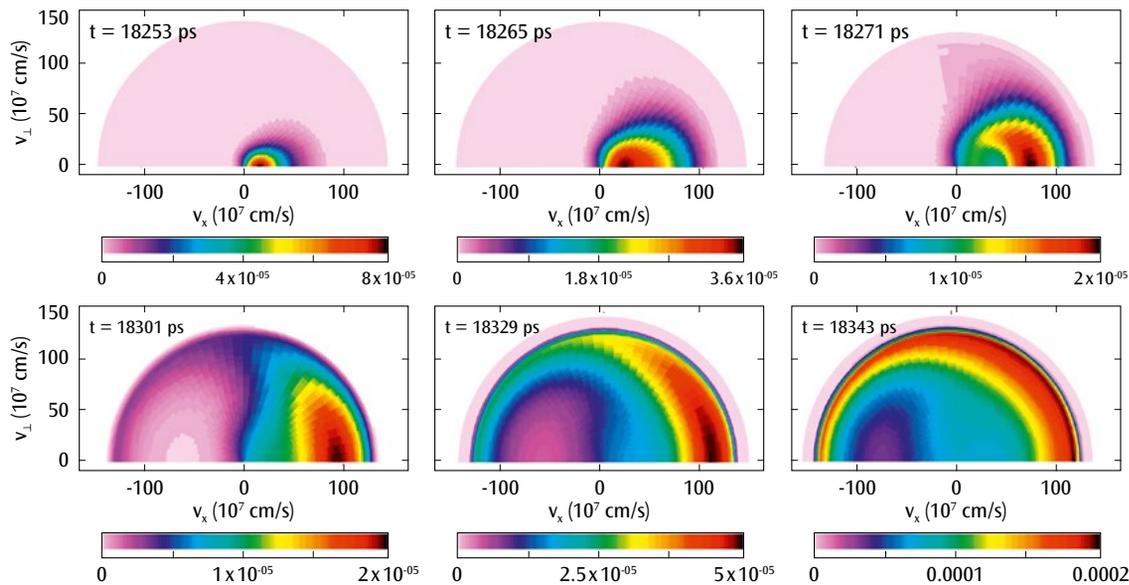


Figure 2. Évolution temporelle de la composante suprathérmiq ue des particules α pendant le processus de combustion, observée en suivant de manière lagrangienne une cellule du point chaud. La composante suprathérmiq ue est peuplée à 3,52 MeV par les réactions de fusion. L'anisotropie vers les vitesses radiales positives est liée à l'inhomogénéité du terme source, plus piqué au centre. La cellule d'observation est ici légèrement décentrée, de sorte que l'on voit passer les particules de gauche à droite. Les particules suprathérmiq ues déposent leur énergie dans une cellule située à la périphérie du point chaud.

Cette technique de décomposition nous permet de mieux répartir l'effort de calcul, en discrétisant chaque composante sur un maillage adapté à l'échelle de variation à traiter. À partir de l'écriture du système, on déduit une méthode numérique pour résoudre le couplage entre les deux échelles d'énergie, découlant naturellement de la forme des termes de l'opérateur de Fokker-Planck [3]. La méthode traite ainsi conjointement, mais de façon couplée, les deux échelles de vitesse. La forme du couplage est en fait dictée par la structure de l'opérateur de Fokker-Planck modélisant les collisions entre les différentes espèces de particules chargées [3].

Effets cinétiques ioniques sur l'allumage et la combustion en FCI

Durant le processus de combustion, les effets cinétiques associés aux particules α suprathérmiq ues modifient significativement la structure de la flamme. En particulier, l'aspect non-local du trans-

port des particules rapides est mis en évidence par la modélisation cinétique. Les particules α suprathérmiq ues déposent leur énergie et leur quantité de mouvement principalement hors du point chaud, dans une région correspondant à l'entrée de la coquille de combustible dense [4].

Il s'ensuit une modification importante de la structure de la flamme de combustion (figure 3), caractérisée par la présence d'un précurseur liée au transport non-local des produits de fusion. La propagation de l'onde de combustion et les performances globales de la combustion sont alors significativement impactées. Le dégagement d'énergie est beaucoup moins élevé (réduction de l'ordre de 40 à 50 %), ce qui apparaît dans les calculs cinétiques comme une conséquence directe du transport non-local des particules suprathérmiq ues.

Ce nouvel effet physique mis en évidence par l'approche multi-échelle du problème du ralentissement des particules rapides peut constituer une piste d'explication rendant compte des difficultés rencontrées aujourd'hui dans l'atteinte de l'ignition des configurations actuelles de cibles de FCI.

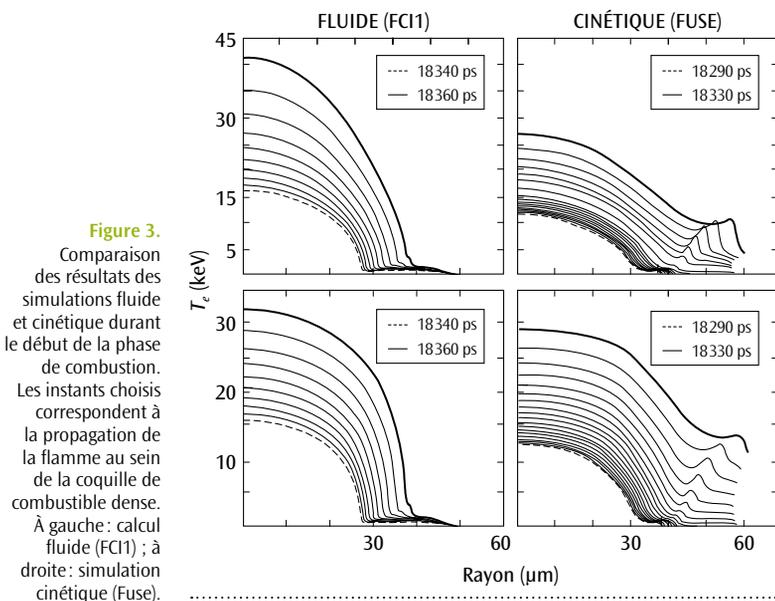


Figure 3. Comparaison des résultats des simulations fluide et cinétique durant le début de la phase de combustion. Les instants choisis correspondent à la propagation de la flamme au sein de la coquille de combustible dense. À gauche : calcul fluide (FCI) ; à droite : simulation cinétique (Fuse).

Références

- [1] M. CASANOVA, O. LARROCHE, J.-P. MATTE, "Kinetic study of a shock wave in a high temperature plasma", *Phys. Rev. Lett.*, **67**, 2143 (1991).
- [2] B. PEIGNEY, « Contribution à l'analyse de problèmes multi-échelles : application à des processus de combustion et de diffusion », Thèse de l'université Paris Diderot (2015).
- [3] B. PEIGNEY, O. LARROCHE, V. TIKHONCHUK, "Fokker Planck kinetic modeling of α suprathermal particles in a fusion plasma", *Journal of Computational Physics*, **278**, 416-444 (2014).
- [4] B. PEIGNEY, O. LARROCHE, V. TIKHONCHUK, "Ion kinetic effects on the ignition and burn of ICF targets: a multi-scale approach", *Phys. Plasmas*, **21**, 22709 (2014).

Coefficients de transport et pression hors équilibre thermodynamique local

■ G. FAUSSURIER - C. BLANCARD - P. COSSE / CEA – DAM Île-de-France

Une méthode combinant les modèles d'atome moyen et d'équilibre collisionnel-radiatif est proposée pour calculer des coefficients de transport électronique ainsi que la pression de plasmas hors équilibre thermodynamique local.

La modélisation des propriétés microscopiques des milieux à haute densité d'énergie joue un rôle crucial dans de nombreux problèmes de physique des plasmas. Si des progrès ont été accomplis ces dernières années, des difficultés subsistent pour décrire les plasmas d'ions multichargés hors équilibre thermodynamique local (HETL). Ce constat prend tout son sens lorsqu'il s'agit de plasmas créés en laboratoire puisque les enjeux scientifiques, techniques voire industriels sont majeurs.

La description des plasmas HETL est complexe puisque l'occupation des états atomiques est intimement liée à la façon dont ils sont connectés les uns aux autres. Ces connexions sont assurées par des processus atomiques de différente nature faisant intervenir des particules – essentiellement des électrons – et/ou des photons. Les probabilités d'occupation de ces

états peuvent être évaluées à l'aide d'un modèle d'équilibre collisionnel-radiatif (ECR). Pour ce faire, on sélectionne un certain nombre d'états et on calcule les probabilités de transition les reliant. On définit une matrice dite de taux où apparaissent ces probabilités de transition entre états. La conservation de la probabilité de ces états permet de construire une nouvelle matrice qui définit le modèle ECR. Son inversion permet de déterminer la probabilité d'occupation de chaque état. Cette approche est bien adaptée pour calculer des moyennes thermodynamiques mais pas pour calculer des coefficients de transport ou une pression. À l'inverse, de telles grandeurs sont aisément calculables à l'équilibre thermodynamique local (ETL) en utilisant un modèle quantique d'atome moyen censé représenter l'état atomique moyen des ions du milieu considéré.

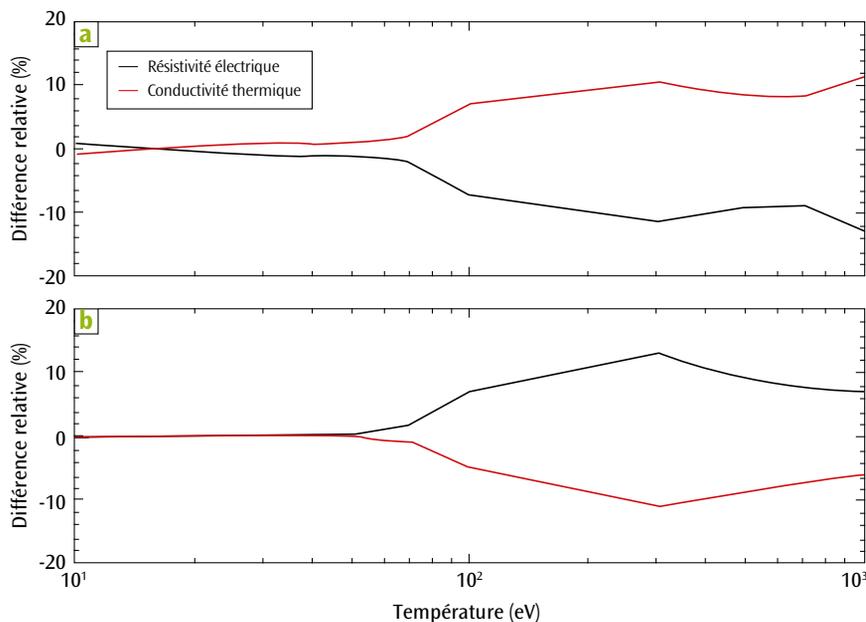


Figure 1. Différence relative (%) entre les valeurs calculées à l'ETL et HETL de la résistivité électrique et de la conductivité thermique pour un plasma de titane à 10^{23} g/cm³ en utilisant un modèle d'atome moyen (a) ou l'approche de Spitzer (b).

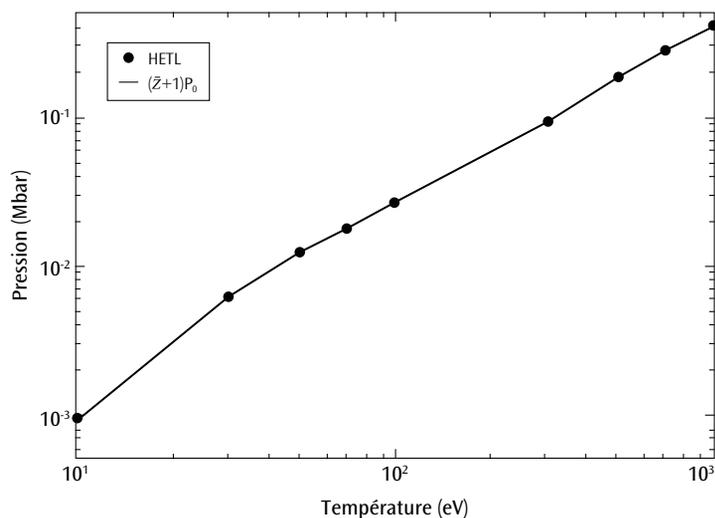


Figure 2. Pression en fonction de la température pour un plasma de titane à 10^{-3} g/cm^3 calculée HETL en utilisant un modèle d'atome moyen ou la règle $(\bar{Z}+1)P_0$, où \bar{Z} est l'ionisation moyenne et P_0 la composante idéale.

Nous avons proposé [1] de coupler ces deux approches afin de calculer des coefficients de transport électronique ainsi que des pressions HETL. Basé sur la notion de configurations non-relativistes pour décrire les états, un calcul ECR permet d'évaluer, pour des conditions thermodynamiques données, les populations moyennes des orbitales liées. Ces populations sont ensuite introduites et maintenues figées dans un code quantique d'atome moyen dont les équations sont résolues en autorisant les électrons libres supposés à l'ETL à se polariser autour de cet ion moyen. On obtient ainsi des fonctions d'onde pour les orbitales liées et libres de l'atome moyen HETL. Ces dernières sont alors utilisées pour calculer la résistivité électrique, la conductivité thermique ainsi que la pression électronique du milieu considéré.

Sur la figure 1 sont tracées les différences relatives entre les valeurs calculées à l'ETL et HETL de la résistivité électrique et de la conductivité thermique. On considère notre méthode (a) ou une approche de type Spitzer [2] étendue HETL (b) en remplaçant le numéro atomique par la valeur du degré d'ionisation HETL. Le milieu considéré est un plasma de titane à une densité de 10^{-3} g/cm^3 dans lequel on fait varier la température et pour lequel on néglige les effets de rayonnement. Sur la figure 1(a), on constate que la résistivité électrique à l'ETL est en général inférieure à la résistivité électrique HETL. Le milieu à l'ETL est donc plus conducteur que le milieu HETL. Cela se conçoit car à l'ETL, l'ionisation moyenne du milieu est supérieure à celle du milieu HETL. Le nombre de porteurs de charge libres est donc plus grand à l'ETL qu'HETL. On constate également que le milieu à l'ETL est meilleur conducteur de chaleur que le milieu HETL. L'utilisation d'une approche du type Spitzer étendue

HETL montre un résultat opposé. Elle prédit qu'un milieu HETL est meilleur conducteur d'électricité et de chaleur qu'un milieu à l'ETL. Contraire au bon sens, ce résultat suggère que l'extension HETL du modèle de Spitzer, initialement développé pour des milieux à l'ETL totalement ionisés, est sujette à caution. Dans notre exemple, la différence maximale entre un calcul ETL et HETL est de l'ordre de 10 %.

Sur la figure 2, on trace la pression HETL obtenue à l'aide de notre approche pour un plasma de titane dans des conditions thermodynamiques identiques à celles de la figure 1. Ces valeurs sont comparées à celles déduites de la règle utilisant l'ionisation moyenne \bar{Z} du plasma en supposant un gaz parfait. On s'aperçoit que les résultats sont en excellent accord. Cela signifie que l'on peut utiliser la formule simple s'appuyant sur l'ionisation moyenne du plasma dans les présentes conditions thermodynamiques.

Cette nouvelle approche consistant à coupler un modèle collisionnel-radiatif et un modèle d'atome moyen est source d'applications potentielles majeures. Elle a permis de mettre en évidence les limites d'une extension sans précaution de l'approche de Spitzer HETL. Elle sera utilisée afin de construire des tables de coefficients de transport HETL utiles aux simulations d'hydrodynamique radiative.

Références

- [1] G. FAUSSURIER, C. BLANCARD, P. COSSÉ, "Coupling of an average-atom model with a collisional-radiative equilibrium model", *Phys. Plasmas*, **21**, 112707 (2014).
- [2] L. SPITZER, R. HÄRM, "Coupling of an average-atom model with a collisional-radiative equilibrium model", *Phys. Rev.*, **89**, 977 (1953).

Évaluation de modèles aux tensions de Reynolds pour l'interaction de mélanges turbulents avec des chocs

■ J. GRIFFOND - O. SOULARD / CEA – DAM Île-de-France

L'interaction de chocs avec des mélanges homogènes est un problème difficile pour les modèles de turbulence. On résume ici une démarche menée à la DAM et développée dans deux articles successifs. Le premier [1] montre comment les résultats tirés de l'analyse d'interaction linéaire (LIA) peuvent être synthétisés en matrices de transfert reliant les valeurs amont et aval des corrélations turbulentes du second ordre. Ces résultats sont obtenus dans la limite des mélanges faiblement turbulents. Le second [2] est dédié à l'évaluation de trois modèles aux tensions de Reynolds augmentés (RSM) pour le même type d'interaction avec des mélanges faiblement turbulents. Celui-ci montre comment dériver des matrices de transfert pour les RSM analogues à celles de la LIA puis comment comparer les matrices ainsi obtenues à la référence donnée par la LIA. Des corrections destinées à améliorer la compatibilité avec la LIA sont finalement proposées pour l'un de ces RSM.

Le mélange turbulent aux interfaces entre fluides joue un rôle majeur dans des domaines variés. Sa prévision est généralement réalisée à l'aide de modèles de turbulence dérivés dans des limites asymptotiques simplificatrices reposant entre autres sur l'hypothèse de continuité des champs moyens, hypothèse invalide en présence de chocs. Prédire la turbulence produite lors d'interaction avec des chocs est de ce fait délicat alors qu'il s'agit du principal moteur du mélange aux interfaces dans les expériences en tube à chocs par exemple [3]. Une autre difficulté tient à ce que très peu de résultats de référence existent concernant le passage d'un choc dans un mélange turbulent. Une des rares théories fournissant des informations de ce type est la LIA. C'est donc la compatibilité des modèles de turbulence avec la LIA que nous cherchons à évaluer et à améliorer.

Matrices de transfert de la LIA

La LIA est une théorie prédisant l'évolution d'un champ de petites perturbations au passage d'un choc. Elle est basée sur la décomposition des fluctuations en ondes d'entropie, de vorticités et acoustiques. Chaque onde incidente, interagissant avec un choc, produit à l'aval tous les types d'ondes avec des amplitudes données par des fonctions de transfert dépendant de son angle d'incidence et de l'intensité du choc. Cette information est trop riche pour être directement exploitée en modélisa-

tion de la turbulence. Le problème est restreint au cas des configurations statistiquement axisymétriques, telles que les tubes à chocs. Celles-ci sont décrites par les modèles RSM à l'aide de vecteurs d'états, notés X , constitués de 4 scalaires impliquant les corrélations des fluctuations de vitesse longitudinale, vitesse transverse et densité. Pour un champ amont libre de fluctuations acoustiques, à l'ordre dominant, un lien univoque peut être établi entre cette classe de champs et le vecteur d'état des modèles. La prévision du champ aval par la LIA autorise alors la définition d'une matrice de transfert S_{lia} reliant les vecteurs d'état amont X_{am} et aval X_{av} selon l'expression $X_{av} = S_{lia} \cdot X_{am}$, la matrice S_{lia} étant de dimension 4×4 .

Matrices de transfert des RSM augmentés

La deuxième étape consiste à obtenir les matrices de transfert S_{rsm} synthétisant l'évolution prédite par un RSM de manière analogue à S_{lia} . La difficulté tient ici à ce que l'implantation numérique et le modèle de turbulence ne peuvent être considérés séparément lors du passage des chocs du fait des propriétés particulières de ces derniers. Une formulation spécifique est retenue ici : celle basée sur l'utilisation d'une pseudo-pression ajoutée à la pression et imposant au front de choc de s'étaler sur une largeur finie. Les équations continues ne peuvent plus former de discontinuité de sorte que les difficultés sont levées indépendamment de l'étape de discrétisation.

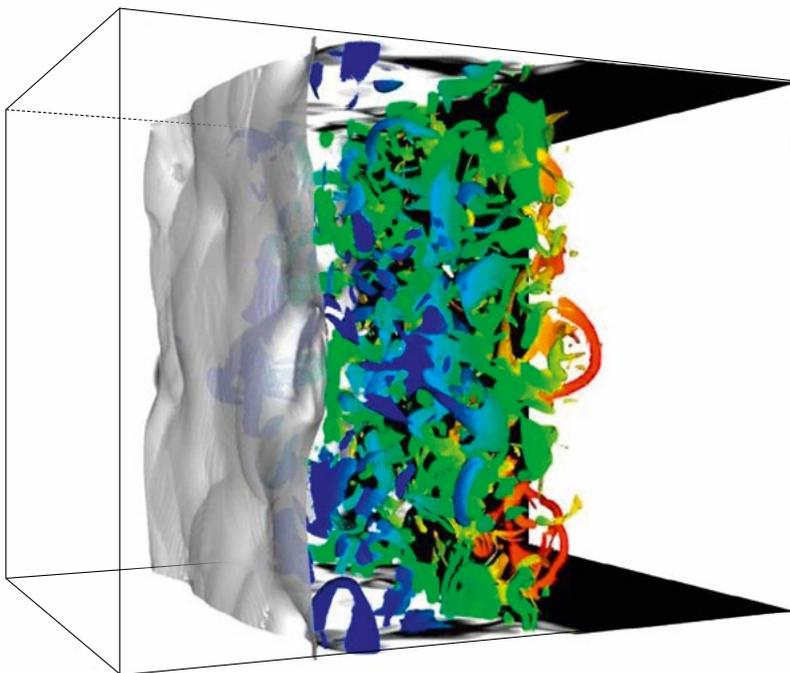


Figure 1.
Passage d'un choc à travers une zone de mélange turbulent.

sation. Elle se prête donc à des développements analytiques simplifiés pour notre problème permettant d'aboutir à l'expression recherchée de la matrice reliant l'état aval prédit par le modèle à l'état amont du choc selon $X_{av} = S_{rsm} \cdot X_{am}$. Bien que le passage par une formulation continue en pseudopression soit nécessaire à sa dérivation, S_{rsm} est indépendante de la forme particulière de pseudopression retenue.

Évaluation de la compatibilité de RSM avec la LIA et amélioration

Cette démarche est applicable aux différents RSM proposant une équation d'évolution pour les tensions de Reynolds, le flux de masse turbulent et la variance de densité. La matrice S_{rsm} synthétise le comportement du modèle lors du passage d'un choc sur un mélange turbulent. Si elle est identique à S_{lia} pour un nombre de Mach de choc donné, alors le résultat de l'interaction selon le modèle sera toujours celui de la LIA pour ce Mach. Comparer les matrices obtenues pour différents RSM entre elles et à la matrice S_{lia} permet donc d'estimer la compatibilité des modèles avec la référence et d'anticiper les types de mélange qui seront plus ou moins bien prédits. On constate ainsi que les modèles testés dans la référence [2] traitent mieux

les turbulences à faible variance de densité que les mélanges issus du passage d'un précédent choc.

Enfin, disposer de la matrice S_{lia} comme cible pour un RSM permet de mettre en œuvre des modifications ad hoc visant à améliorer la compatibilité avec la référence.

Références

- [1] J. GRIFFOND, O. SOULARD, "Evolution of axisymmetric weakly turbulent mixtures interacting with shock or rarefaction waves", *Phys. Fluids*, **24**, 115108 (2012).
- [2] J. GRIFFOND, O. SOULARD, "Evaluation of augmented RSM for interaction of homogeneous turbulent mixture with shock and rarefaction waves", *J. Turbulence*, **15**, p. 569-595 (2014).
- [3] F. POGGI, M.H. THOREMBEY, G. RODRIGUEZ, "Velocity measurements in turbulent gaseous mixtures induced by Richtmyer-Meshkov instability", *Phys. Fluids*, **10**, p. 2698-2700 (1998).

Calcul des tensions de surface des liquides métalliques

■ E. BOURASSEAU / CEA – DAM Île-de-France

Lorsqu'une onde de choc débouche sur la surface libre d'un métal, la présence de défauts peut provoquer une éjection de matière sous forme de nappes liquides. On peut montrer expérimentalement que ces nappes s'étirent puis se fragmentent pour former des gouttes nanométriques. Des études menées au CEA – DAM Île-de-France ont établi que la restitution de ce phénomène par un code hydrodynamique passait par la compréhension de la physique liée à l'interface entre le métal et le milieu extérieur. Ainsi, une des données primordiales à prendre en compte dans les codes hydrodynamiques est la tension de surface de cette interface. Or, cette propriété est difficile à mesurer expérimentalement. Nous avons donc utilisé la simulation microscopique (à l'échelle des atomes) pour déterminer la tension de surface de systèmes métalliques.

La tension de surface se manifeste lorsqu'on étire l'interface entre deux phases. Une force de rappel apparaît, qui est proportionnelle à la largeur d'étirement; la tension de surface est donc une force par unité de longueur, exprimée en $\text{N}\cdot\text{m}^{-1}$. La tension de surface s'interprète aussi comme une énergie qui stocke le travail fourni pour déformer l'interface; elle est donc également homogène à une énergie par unité de surface. La simulation microscopique d'un ensemble d'atomes présentant deux phases à l'équilibre permet de décrire l'interface entre ces deux phases à l'échelle des atomes (**figure 1**). À partir de cette simulation, il est possible de calculer la tension de surface. Il existe pour cela deux approches différentes.

La première est l'approche thermodynamique. Celle-ci définit la tension de surface comme la variation d'énergie libre associée à une variation de l'aire de l'interface à volume constant. La méthode reposant sur cette approche consiste à déformer l'interface au cours de la simulation, tout en calculant la variation d'énergie libre associée en utilisant

la théorie des perturbations. La deuxième approche est mécanique. La théorie mécanique des fluides inhomogènes permet d'exprimer rigoureusement la tension de surface en fonction du tenseur de pression à l'interface. La méthode basée sur cette approche permet donc de calculer le tenseur de pression d'un système inhomogène en fonction des interactions entre atomes. La tension de surface est ensuite calculée en intégrant la différence entre la composante normale et les composantes tangentielles du tenseur à travers l'interface.

Dans un récent travail, ces deux méthodes ont été appliquées pour calculer la tension de surface dans le cas d'interfaces planes de liquides métalliques: le cuivre et l'étain. Dans le cas du cuivre, des résultats très proches des quelques résultats expérimentaux existants ont été obtenus, en meilleur accord que les autres résultats de calcul déjà publiés [1]. Concernant l'étain, il s'agit du seul exemple publié de calcul de la tension de surface et les résultats sont en bon accord avec les quelques résultats expérimentaux disponibles [2].

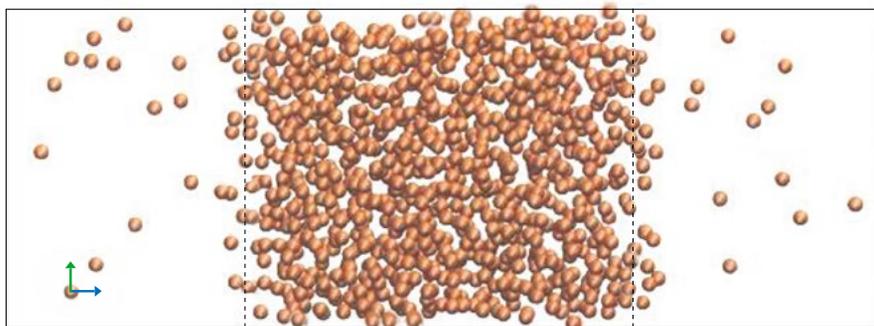


Figure 1. Simulation à l'échelle atomique d'un système présentant une phase liquide encadrée par une phase gazeuse. Les traits pointillés permettent de localiser les deux interfaces.

L'évolution de la tension de surface en fonction de l'épaisseur d'une nappe de métal liquide a ensuite été étudiée [3]. Le but était de déterminer un critère de rupture, c'est-à-dire l'épaisseur à partir de laquelle la nappe se fragmente. On a montré que la tension de surface évolue en fonction de l'épaisseur (figure 2). Elle est d'abord constante tant que la nappe reste intacte, puis diminue au fur et à mesure que des trous apparaissent. Enfin, lorsque la nappe devient instable, il n'est plus possible de calculer la tension de surface. Ces résultats se sont révélés similaires quel que soit le matériau concerné et quelle que soit la température. On a montré qu'un critère de rupture peut être déterminé à partir de l'étude d'une seule interface et que l'épaisseur de rupture d'un matériau était inversement proportionnelle à

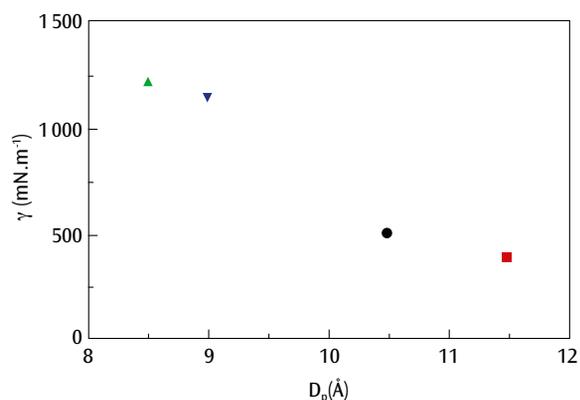


Figure 3. Épaisseur de rupture (D_p) d'une nappe de métal liquide en fonction de la tension de surface. Cuivre à 1700 K (vert) et 2000 K (bleu) - Étain à 1000 K (noir) et 1500 K (rouge).

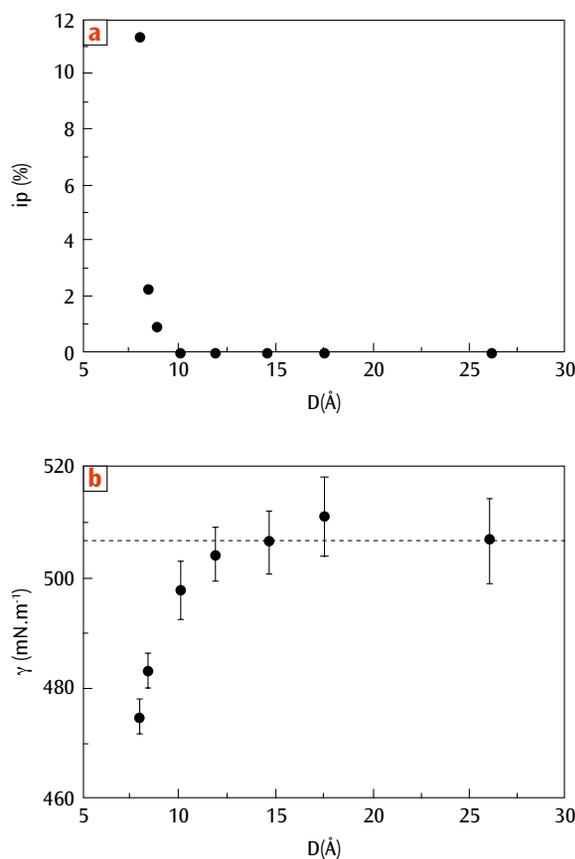


Figure 2. Résultats de simulations de nappes liquides d'étain à 1000 K. (a) Évolution de l'indice de perforation (ip) en fonction de l'épaisseur (D), correspondant au nombre de trous observés pendant la simulation. (b) Evolution de la tension de surface (γ) en fonction de l'épaisseur (D).

sa tension de surface (figure 3). Ceci s'explique par le fait qu'un matériau dont la tension de surface est faible se déforme plus facilement et supporte mieux les tensions dues à la déformation. Il se fragmente donc pour une épaisseur plus faible.

Finalement, cette étude constitue la première brique d'un modèle de fragmentation des nappes liquides de métaux qui pourra ensuite être intégré dans les codes hydrodynamiques. Le phénomène d'éjection de matière sera ainsi mieux restitué par ces simulations à l'échelle macroscopique. Par ailleurs, une étude du même type est en cours pour déterminer l'évolution de la tension de surface des métaux liquides pour des interfaces cylindriques et sphériques en fonction de leurs rayons.

Références

- [1] E. BOURASSEAU, A. A. HOMMAN, O. DURAND, A. GHOUI, P. MALFREY, "Calculation of the surface tension of liquid copper from atomistic Monte Carlo simulations", *Eur. Phys. J. B*, **86**, 251 (2013).
- [2] E. BOURASSEAU, G. FILIPPINI, A. GHOUI, P. MALFREY, "First calculations of the surface tension of liquid tin from atomistic simulations", *Mol. Phys.*, **112**, 2654-2657 (2014).
- [3] G. FILIPPINI, E. BOURASSEAU, A. GHOUI, F. GOUJON, P. MALFREY, "Slab thickness dependence of the surface tension: toward a criterion of liquid sheets stability", *J. of Chem. Phys.: Communication*, **141**, 081103 (2014).

Mesure des spectres de neutrons prompts émis lors de la fission du ^{239}Pu

A. CHATILLON - G. BÉLIER - T. GRANIER - B. LAURENT - B. MORILLON - J. TAIEB / CEA – DAM Île-de-France
R.C. HAIGHT - M. DEVLIN - R. O. NELSON - S. NODA - J.M. O'DONNELL / Los Alamos National Laboratory

Bien que cruciaux pour les applications, les spectres de neutrons prompts émis lors de la fission des actinides ne sont pas connus avec une bonne précision. Les résultats obtenus lors d'une mesure sur le ^{239}Pu sont présentés ainsi que les perspectives à court terme de cette thématique de recherche.

L'étude des spectres en énergie des neutrons prompts émis par les fragments de fission, lors de la fission des actinides est capitale, que ce soit pour l'évaluation des données nucléaires (prédiction de la criticité) ou pour des aspects plus fondamentaux (répartition de l'énergie d'excitation dans le système fissionnant). Jusqu'à présent, aucun modèle microscopique n'est capable de prédire cette observable. Ainsi les spectres évalués, utilisés dans les bases de données comme JEFF ou ENDF/B-VII, sont-ils basés sur des modèles phénoménologiques et souffrent de fortes incertitudes dues au manque de précision des données existantes. Cette difficulté expérimentale est liée à la difficulté de maîtriser l'efficacité du système de détection ainsi qu'à celle de réaliser des mesures à très bas bruit de fond.

Le CEA – DAM Île-de-France s'est engagé dans une campagne expérimentale auprès de l'instal-

lation WNR (*Weapon Neutron Research*) à Los Alamos, dans le cadre d'un accord de collaboration entre le CEA – DAM et la NNSA. Les spectres émis lors de la fission des isotopes ^{238}U , ^{235}U et ^{237}Np ont déjà été mesurés avec succès. La dernière mesure a porté sur le ^{239}Pu [1].

La source de neutrons WNR présente un fort avantage: elle délivre un faisceau de neutrons de 1 à plusieurs centaines de méga électronvolts (MeV). En une seule prise de données il est ainsi possible d'obtenir les spectres des neutrons de fission sur cette large gamme en énergie de neutrons incidents. Cet ensemble de spectres présente donc des incertitudes cohérentes car il a été mesuré avec le même dispositif expérimental. Une chambre à fission placée dans le faisceau de neutrons est entourée par une vingtaine de détecteurs de neutrons. Le principe de la mesure

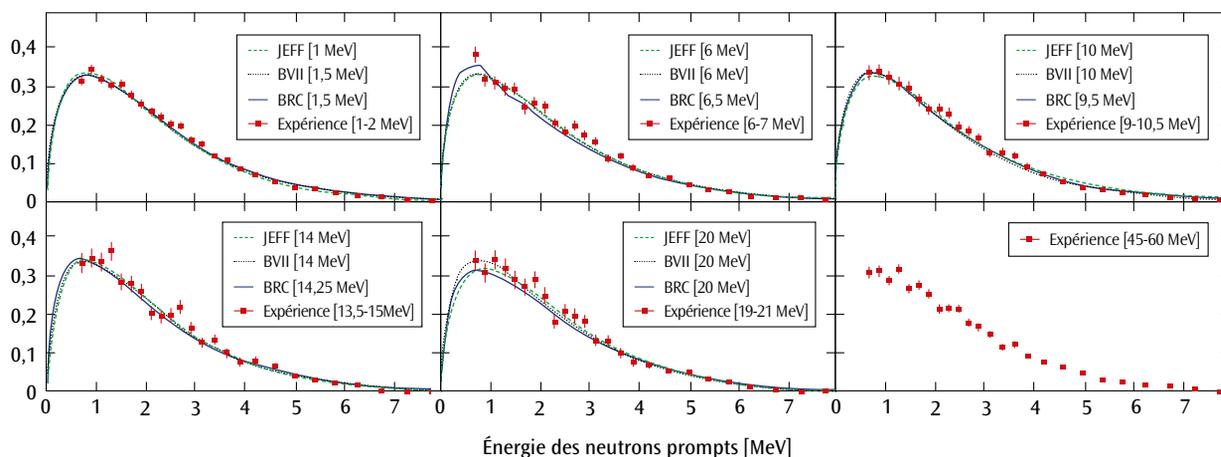
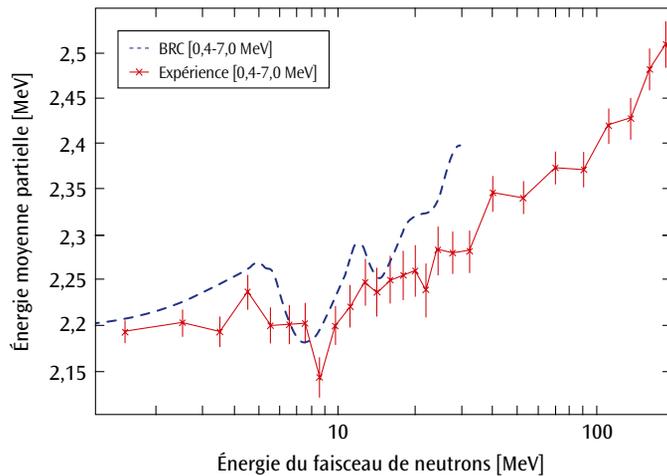


Figure 1. Spectres de neutrons prompts de fission pour différentes énergies de faisceau (indiquées entre crochet). Les points expérimentaux (en rouge) sont comparés aux calculs BRC de Bruyères-le-Châtel (ligne pleine) et aux évaluations européenne JEFF 3.1 (tirets) et américaine ENDF/B-VII.1 (ligne pointillée).

Figure 2.
Évolution de l'énergie moyenne des neutrons prompts en fonction de l'énergie du faisceau de neutrons, comparée aux évaluations issues du code BRC.



est basé sur la méthode dite de double temps de vol. La chambre à fission est une cible active qui permet de connaître le temps où la fission a lieu. Ainsi deux temps de vol sont-ils mesurés en coïncidence : Le premier correspond à celui du neutron incident qui induit la fission, entre la source WNR et la chambre à fission ; quant au second, il s'agit de celui d'un neutron émis par un des fragments de fission et mesuré entre la chambre à fission et un des détecteurs de neutrons. L'énergie du neutron incident et celle du neutron prompt émis pendant la fission sont déduites à partir de ces temps de vol. La **figure 1** montre une sélection de ces spectres. Ces données sont en accord avec les évaluations issues des bases de données européennes JEFF 3.1, américaine ENDF/B-VII.1, ainsi que des calculs BRC de Bruyères-le-Châtel. Jusqu'à présent, les mesures publiées n'existaient qu'aux énergies thermiques ou à plus haute énergie et étaient entachées d'une très forte incertitude.

À partir de ces spectres l'énergie moyenne des neutrons prompts est déduite et comparée à des calculs BRC dédiés, qui appliquent les mêmes coupures en énergie que le dispositif expérimental. La **figure 2** montre l'évolution de l'énergie moyenne des neutrons émis en fonction de l'énergie du neutron qui induit la réaction de fission. La tendance générale, très bien reproduite par les calculs, est une augmentation de l'énergie moyenne qui traduit une augmentation de la température du noyau qui fissionne. Cependant, pour les plus basses énergies de neutron incident, les données semblent indiquer une énergie constante, seul point de désaccord avec les calculs théoriques

qui eux prédisent une augmentation immédiate de la température. Malgré la bonne précision de ces mesures, autour de 2 %, il est impossible de conclure sans ambiguïté : faut-il voir dans le point entre 4 et 5 MeV une fluctuation statistique ou un effet de température ?

Finalement sont ressortis de cette campagne expérimentale des résultats améliorant nettement la précision des données et couvrant une plus grande gamme en énergie incidente ; mais également de nouvelles exigences en termes de précision. En effet le bruit de fond ambiant (diffusion des neutrons) empêche encore d'obtenir des mesures de très haute précision. De plus, l'efficacité du dispositif est excessivement difficile à maîtriser. Avec le retour sur expérience de cette campagne à WNR, une nouvelle génération d'expériences est en train d'être mise en place avec le développement de chambres à fission bas bruit, dont une sera dédiée à l'étalonnage en efficacité du dispositif. Ces avancées technologiques arrivent alors que de nouvelles sources de neutrons sont en train de voir le jour en France : LICORNE à l'Institut de Physique Nucléaire d'Orsay et NFS (*Neutron For Science*) au GANIL (Caen) qui devrait produire ses premiers faisceaux l'année prochaine. Une expérience pionnière a eu lieu en février de cette année auprès de la source de neutrons LICORNE, qui présente l'avantage d'avoir très peu de neutrons diffusés, donc peu de bruit de fond, mais une énergie faisceau limitée à une dizaine de MeV. Les résultats préliminaires sont extrêmement encourageants et montrent que cette thématique de recherche sur les spectres de neutrons prompts vient de passer un nouveau cap.

Références

- [1] A. CHATILLON *et al.*, "Measurement of prompt neutron spectra from the $^{239}\text{Pu}(n,f)$ fission reaction for incident neutrons from 1 to 200 MeV", *Phys. Rev. C*, **89**, 014611 (2014).

Excitations nucléaires β et γ dans la même boîte

S. PÉRU - S. HILAIRE - E. BAUGE / CEA – DAM Île-de-France
M. MARTINI / Université de Gand, Belgique

Un formalisme unique a été utilisé pour décrire aussi bien les états excités d'un noyau que les probabilités de décroissance par radioactivité β . Ainsi un seul et même cadre théorique et numérique permet d'alimenter avec succès les modèles de réactions nucléaires et les modèles astrophysiques gourmands en données nucléaires telles que les temps de vie β et les fonctions de force γ .

Lorsque l'on excite le noyau, ses constituants participent à l'excitation en changeant d'orbites quantiques : s'ils sont nombreux à contribuer cette excitation est collective, sinon elle est individuelle. Quelle que soit la nature de ces excitations, les modèles tentent de les décrire microscopiquement.

Parmi les approches disponibles, le 5DCH (*Five-Dimension Collective Hamiltonian*) a montré un grand pouvoir prédictif sur l'ensemble de la carte des noyaux [1], mais se limite aux états collectifs pour les modes quadripolaires de basse énergie. L'approche QRPA (*Quasi-particle Random Phase Approximation*) quant à elle, décrit sur un pied d'égalité états collectifs et individuels qu'elles que soient leur multipolarité et leur parité. Une étude [2] a montré la complémentarité de ces deux approches. Si dans certains cas, approches 5DCH et QRPA donnent des résultats comparables, souvent une seule d'entre elles permet de reproduire l'expérience : cela se produit par exemple pour les premiers états 2^+ des isotopes de l'étain (figure 1). De plus, la QRPA n'étant pas limitée aux basses énergies, elle est l'approche maîtresse pour l'étude des résonances géantes. La plus ancienne et la plus étudiée de toutes est la résonance géante dipolaire, une oscillation cohérente des protons et des neutrons en opposition de phase. Elle contribue majoritairement aux sections efficaces d'absorption (ou d'émission) de γ dans lesquelles l'apparition de double pic a été interprétée comme la signature d'une déformation intrinsèque du noyau. Une section efficace de photo-absorption à double bosse pour un noyau déformé est fournie pour exemple (figure 2a), et comparée à nos prédictions. Ce résultat fait partie d'une étude systématique des excitations dipolaires utilisant de façon intensive les supercalculateurs [3], une étude soutenue par l'infrastructure européenne PRACE (*Partnership for advanced computing in Europe*).

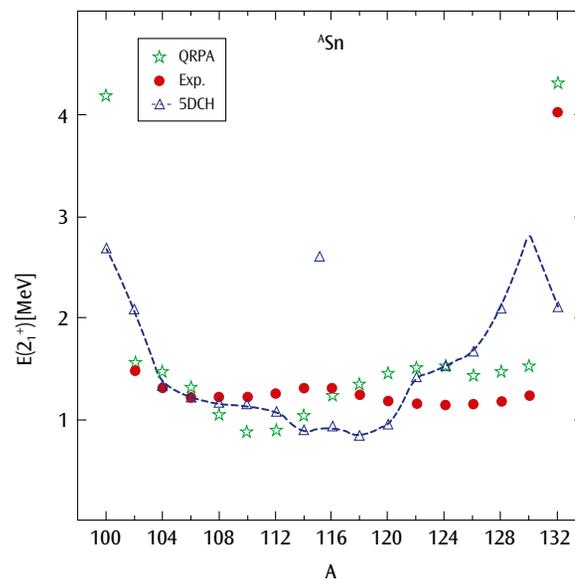


Figure 1. Énergies des 2^+ des isotopes de l'étain : comparaison des approches théoriques QRPA et 5DCH et de l'expérience.

Depuis la découverte des modes collectifs dipolaires, d'autres résonances géantes de multipolarités différentes ont été cherchées, observées et étudiées. Les résultats QRPA jusqu'au mode octupolaire pour l'uranium 238, noyau lourd et déformé, ont été déjà discutés [4] et utilisés dans le domaine des applications [5].

Au-delà des excitations électromagnétiques qui conservent la charge et donc la nature chimique de l'élément, d'autres excitations peuvent se produire dans le noyau, comme la radioactivité β (processus électrofaible le plus connu). Ce phénomène peut lui aussi être décrit par la QRPA en incluant des excitations élémentaires qui transforment un neutron en proton ou vice-versa. Notre outil numérique

original [4] a donc été généralisé pour traiter aussi bien les excitations électromagnétiques γ qu'électrofaibles β [6]. Comme illustré sur la partie droite de la **figure 2**, un accord satisfaisant entre la théorie et l'expérience est obtenu pour l'excitation Gamow-Teller, responsable majeur de la radioactivité β , faisant intervenir un échange de spin et d'isospin.

Comme l'intégrale de cette fonction β jusqu'à l'énergie dégagée par la désintégration du radio-nucléide donne sa probabilité de décroître, notre modèle microscopique permet de prédire les temps de vie de tous les noyaux, déformés ou sphériques. La **figure 3** illustre son pouvoir prédictif en comparant à l'expérience les résultats obtenus pour des chaînes isotopiques de noyaux déformés. Un tel succès positionne le modèle parmi les meilleurs disponibles actuellement en structure nucléaire.

Le CEA – DAM dispose donc d'un outil théorique très puissant qui permet de décrire dans un cadre unique la majorité des excitations nucléaires. Il est compétitif avec les autres modèles microscopiques de structure nucléaire et est en même temps un des seuls capable de fournir des valeurs

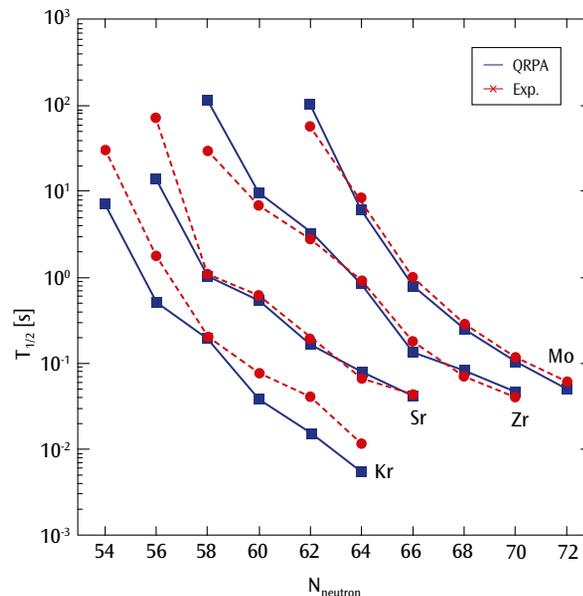


Figure 3. Demi-vie de désintégration β pour les isotopes déformés Kr, Sr, Zr et Mo.

pour l'ensemble de la carte de noyaux. Sa particularité à pouvoir traiter les noyaux connus aussi bien qu'inaccessibles expérimentalement est un atout pour la physique des étoiles et des réacteurs. Il alimente les simulations des processus de nucléosynthèse primordiale caractérisés par une compétition entre la capture radiative de neutrons (gouvernée par la photo-émission γ) et la désintégration β . Il peut être également utilisé dans les calculs des flux d'antineutrinos provenant des réacteurs, une quantité cruciale dans la physique fondamentale des neutrinos ainsi que dans les études de non-prolifération.

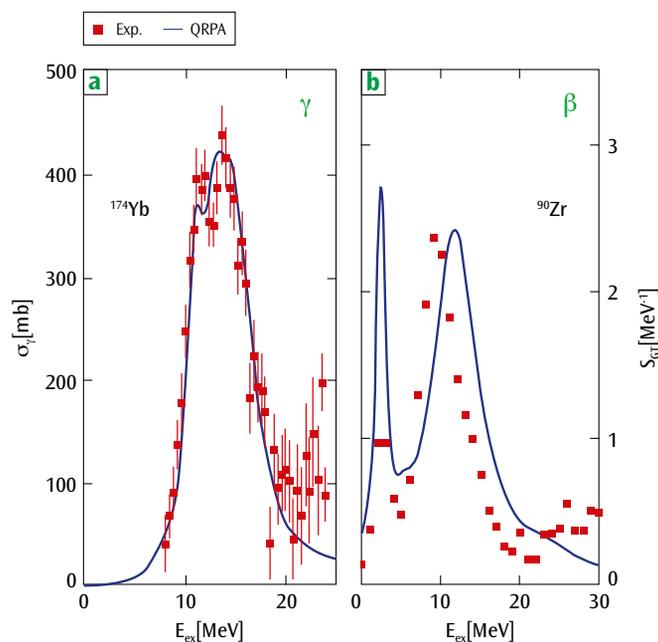


Figure 2. Comparaison de l'approche QRPA et de l'expérience. (a): section efficace de photoabsorption (γ); (b): distribution Gamow-Teller (β).

Références

- [1] J.-P. DELAROCHE *et al.*, « Collectivité nucléaire avec l'interaction de Gogny pour 1 700 noyaux », *CHOCS avancées 2010*.
- [2] S. PÉRU, M. MARTINI, « Mean field based calculations with the Gogny force: Some theoretical tools to explore the nuclear structure », *Eur. Phys. J. A*, **50**, p. 88 (2014).
- [3] M. MARTINI *et al.*, « Improved nuclear inputs for nuclear model codes based on the Gogny interaction », *Nucl. Data Sheets*, **118**, p. 273 (2014).
- [4] S. PÉRU *et al.*, « Des multiprocesseurs pour des réponses multipolaires », *CHOCS avancées 2011*.
- [5] E. BAUGE *et al.*, « Connecting the dots, or nuclear data in the age of supercomputing », *Nucl. Data Sheets*, **118**, 32 (2014).
- [6] M. MARTINI, S. PÉRU, S. GORIELY, « Gamow-Teller strength in deformed nuclei within selfconsistent charge exchange quasiparticle random-phase approximation with the Gogny force », *Phys. Rev. C*, **89**, 044306 (2014).

Treize ans d'observation des ondes de gravité en Afrique

■ E. BLANC - T. FARGES - A. LE PICHON - P. HEINRICH / CEA – DAM Île-de-France

Une nouvelle étude, utilisant des enregistrements de la station IS17 (Côte d'Ivoire) du Système de surveillance international (SSI) de vérification du Traité d'Interdiction Complète des Essais nucléaires (TICE), a révélé une activité très intense des ondes de gravité qui suit le mouvement de la zone intertropicale de convergence des vents. Leur origine est essentiellement liée à la convection des orages, très nombreux dans cette région de l'Afrique. L'altitude élevée du sommet des nuages suggère un impact significatif de ces ondes sur la dynamique de la stratosphère, confirmé par des études théoriques récentes.

Exemple d'orage

Les échanges dynamiques de la troposphère vers la stratosphère se font en partie par le biais des ondes atmosphériques qui affectent des échelles spatio-temporelles très larges. Les ondes de gravité, dont la force de rappel est de nature gravitationnelle, sont générées principalement par quatre types de sources: les jet-streams, les fronts dans la basse troposphère, les ondes de montagne et les orages. Elles se propagent verticalement dans les couches supérieures de l'atmosphère en s'amplifiant avec l'altitude. Lorsqu'elles déferlent, elles agissent sur l'écoulement moyen, en transférant une partie de la quantité de mouvement qu'elles transportent. Leur période varie entre 5 minutes et plusieurs heures. Leur vitesse est de l'ordre de 20 à 100 m/s.

Ces ondes sont mesurées dans la partie basse fréquence des capteurs infrason du SSI malgré le filtrage instrumental car leur amplitude est très importante. Les techniques d'observation opérationnelle sont rares. Les études, réalisées sur 13 ans de données en Côte d'Ivoire, montrent que l'activité est importante toute l'année et est liée à celle des

orages. Les nuages sont organisés en lignes de grains qui se propagent d'est en ouest en générant des orages, ce qui est caractéristique de ces régions d'Afrique de l'Ouest. La température au sommet des nuages (**figure 1**) est très faible (-70°C à -80°C) ce qui indique une altitude élevée. L'amplitude des ondes de gravité (**figure 2**) augmente lors du passage des cellules de convection à proximité de la station. L'azimut correspond à celui de l'orage. À 22h00 UT, plusieurs directions se distinguent, indiquant une structure orageuse multicellulaire.

Statistiques

L'azimut des ondes de gravité évolue du sud en février au nord en août. La direction s'inverse en octobre et revient vers le sud en décembre (**figure 3**). Ces variations correspondent à celles des orages mesurés par satellite et à celles de la ceinture des précipitations tropicales en partie liée à la zone de convergence intertropicale des vents (**figure 4**). Cette zone en Afrique de l'Ouest, correspond approximativement à la région où deux masses d'air de nature

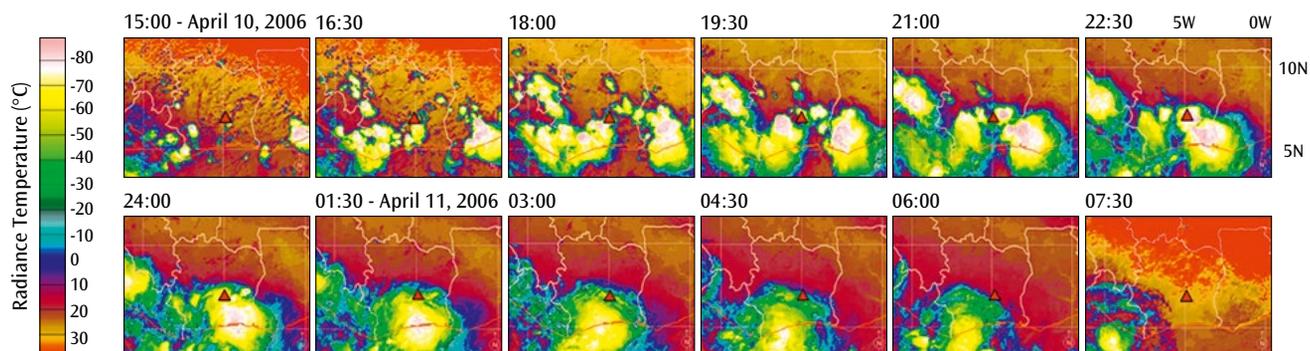
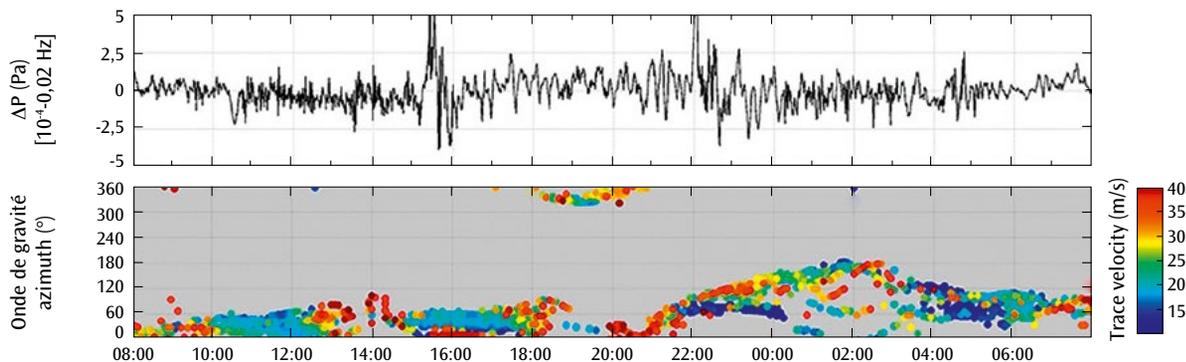


Figure 1. Cartes du satellite METEOSAT6 le 10-11 avril 2006, indiquant la température au sommet des nuages (communiquées par P. Husson, Météo France). Le triangle rouge indique la position de la station.

Figure 2.
Exemple d'ondes de gravité observées pendant l'orage du 10-11 avril 2006.



différente interagissent : une masse d'air océanique humide (mousson) et une masse d'air sec relativement plus chaude.

Ces observations montrent que cette activité intense observée pour la première fois sur une durée aussi importante est essentiellement produite par la convection profonde associée aux orages très nombreux dans cette région d'Afrique. La contribution d'autres sources possibles, comme le vent sur le relief, est faible, car les vents de surface sont faibles. De plus, les régions situées au sud de la station sont couvertes par l'océan. La surveillance des ondes de gravité par les stations infrason permet de déterminer le mouvement de la ceinture tropicale des précipitations [2].

Perspectives

Les études théoriques montrent que les ondes de gravité pénètrent dans la stratosphère et peuvent interagir avec la circulation générale globale [3]. En raison de leur résolution grossière, les modèles paramétrisent l'effet des ondes de gravité, conduisant à des biais sur les températures et les vents atteignant 20 K et 30 m/s au-dessus de 40 km d'altitude. Des modèles régionaux déterminent plus précisément la génération et la propagation de ces ondes dans la stratosphère [4].

Ces mesures présentent un potentiel important pour décrire plus précisément ces interactions. Un enjeu scientifique majeur est de paramétriser ces données afin de pouvoir dans la suite les assimiler dans les modèles de prévision météorologique et de climat. Ces études s'intègrent dans le projet européen ARISE (<http://arise-project.eu>) financé par le programme-cadre Horizon 2020 qui met en réseau des infrastructures de recherche [5].

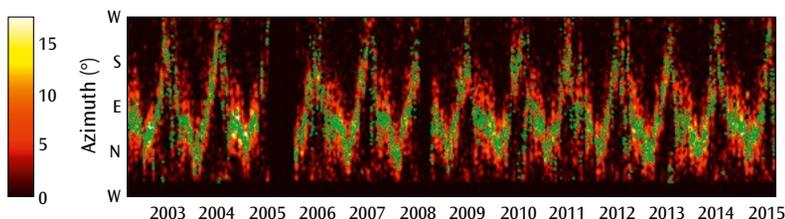


Figure 3.
Statistiques effectuées sur 13 ans de données mesurées à la station infrason IS17. L'échelle en couleur indique le logarithme du nombre de détections.

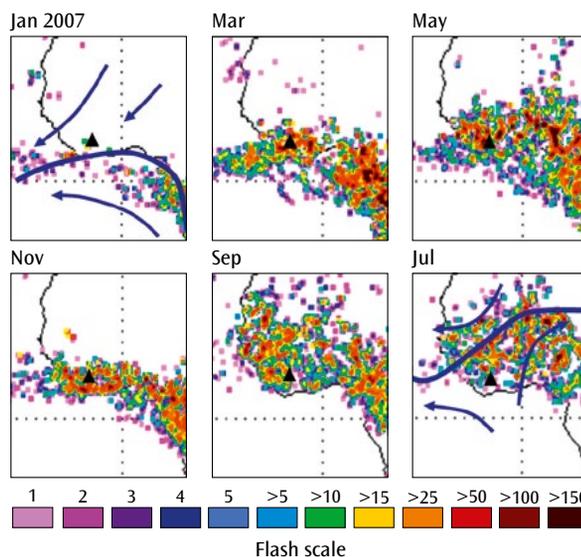


Figure 4.
Localisation des impacts d'éclairs à partir d'observations par satellite (<http://thunder.msfc.nasa.gov>). La position de la zone de convergence intertropicale des vents de surface en janvier et juillet est indiquée en bleu.

Références

- [1] J. MARTY, D. PONCEAU, F. DALAUDIER, "Using the International Monitoring System infrasound network to study gravity waves", *Geophys. Res. Lett.*, **37**, L19802 (2010).
- [2] E. BLANC, T. FARGES, A. LE PICHON, P. HEINRICH, "Ten year observations of gravity waves from thunderstorms in western Africa", *J. Geophys. Res. Atmos.*, **119**, p. 6409-6418 (2014).
- [3] L. COSTANTINO, P. HEINRICH, "Tropical deep convection and density current signature in surface pressure: comparison between WRF model simulations and infrasound measurements", *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, **13**, p. 15993-16046 (2013).
- [4] P. HEINRICH, L. COSTANTINO, «Simulation numérique des orages tropicaux», *Chocs*, n°45 (2014).
- [5] E. BLANC, A. LE PICHON, J. ASSINK, D. TAILPIED, P. HEINRICH, L. COSTANTINO, A. DUPONT, «Projet ARISE : De la dynamique de l'atmosphère à la surveillance des événements extrêmes», *Chocs*, n°45 (2014).

Influence de la pureté spectrale sur l'étalonnage des analyseurs optiques X du LMJ

■ S. HUBERT - V. PRÉVOT / CEA – CESTA

Le laser Mégajoule (LMJ) est un outil de physique fondamentale mis en oeuvre pour l'étude de l'interaction laser-matière. Cette interaction génère du rayonnement X, enregistré par des caméras étalonnées. Un monochromateur X a révélé l'importance que revêt une émission strictement monochromatique dans l'étalonnage de ces caméras.

Le laser Mégajoule vise à approfondir notre connaissance du comportement de la matière soumise à une forte densité de rayonnement laser. Le plasma résultant émet du rayonnement X enregistré par des caméras X dédiées. Au sein du LMJ ces caméras X, dénommées Analyseurs Optiques X (ou AO X), sont étalonnées. Généralement la métrologie de capteurs X est effectuée sur des sources synchrotron, qui bénéficient d'une forte brillance et d'un rayonnement monochromatique. Les générateurs X constituent une alternative attrayante de par leur taille modeste, leur meilleure accessibilité, qui leur permettent d'être implantés à proximité de l'installation sur laquelle sont déployés ces capteurs.

Dans le laboratoire de métrologie X du CEA – CESTA, un générateur X assure l'étalonnage des AO X. Ce type de source X est constitué d'un canon à électrons, accélérés vers une anode, cette dernière étant choisie pour ses raies d'émission X naturelles. En utilisant un barillet d'anodes différentes, on dispose d'une source X à « énergies X variables » sur une certaine gamme spectrale. Toutefois, l'inconvénient de ces sources est leur spectre naturellement polychromatique. Leur spectre d'émission X est constitué d'un continuum d'émission X sur lequel est superposée la raie X caractéristique de l'anode. Cette polychromaticité rend ces spectres inadaptés à la métrologie. Les physiciens « monochromatisent » alors ce type de spectres avec des filtres ultraminesces (< 100 μm). Cet artifice réduit le continuum autour des raies X, sans toutefois l'éliminer complètement, conduisant à une source d'erreur systématique potentielle.

Pour s'affranchir de cette source d'erreur, la solution consiste à éliminer complètement le continuum d'émission parasite, en utilisant un système de monochromatisation dédié. Nous avons ainsi développé un monochromateur dont le principe repose sur la diffraction X des cristaux naturels, régie par la loi de Bragg. Cette loi exprime le fait que, pour observer une longueur d'onde du spectre polychromatique incident, il convient d'orienter le cristal selon un angle d'attaque précis.

Le monochromateur développé [1] comporte deux cristaux plans de germanium, maintenus rigoureusement parallèles et orientables entre 0° et 60° (figure 1) au sein d'une mécanique de type pantographe.

La première utilisation de cet appareil a été la mesure quantitative de l'efficacité quantique (EQ) d'une caméra CCD X (*Charge Coupled Device*). Déterminer l'EQ consiste à mesurer l'intensité absolue de la raie X, de mesurer le nombre de charges générées dans le capteur CCD par ces photons X, puis d'en faire le rapport. Les spectres monochromatiques obtenus ont confirmé le fonctionnement du monochromateur par l'obtention d'une pureté spectrale ayant significativement augmenté (> 99 %). Les mesures d'EQ obtenues ont été comparées avec des mesures présentées comme référentes, dans la littérature, malgré une monochromatisation par filtres. Nos mesures se sont avérées en accord avec ces mesures de référence [2], tout en étant légèrement plus élevées.

Nous avons cherché à comprendre l'origine de ces différences, en particulier si celles-ci étaient dues à la monochromatisation par filtre. La différence entre les mesures résidant dans la pureté

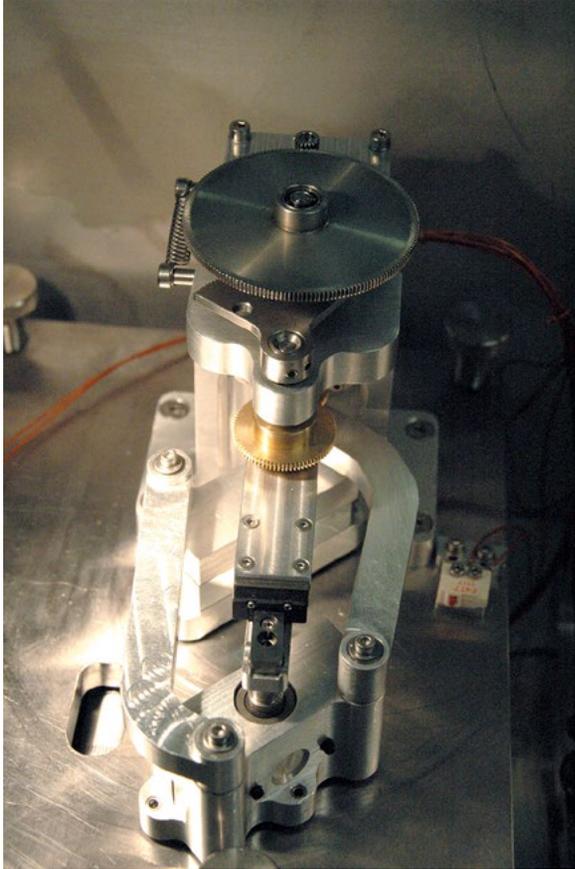


Figure 1.
Détail de la monture
pantographique du
monochromateur avec les
deux supports de cristaux
parallèles.

Conclusion

Les caméras X du Laser MégaJoule sont étalonnées sur générateurs X, dans un laboratoire de métrologie dédié. Le développement d'un monochromateur X a permis l'étalonnage d'une caméra CCD X. Cet étalonnage est comparable à celui de référence décrit dans la littérature, mais présente néanmoins des efficacités quantiques plus élevées. Ces différences ont pu être attribuées à la méthode de monochromatisation utilisée lors de cette étude de référence. Nous avons ainsi montré que la monochromatisation par filtres minces ne peut être utilisée pour étalonner des détecteurs X de manière absolue. Cette technique génère en effet intrinsèquement un biais de mesure lié à une monochromatisation incomplète. À l'avenir, l'étalonnage des AO X du LMJ sera conduit au moyen de ce nouveau monochromateur.

du spectre reçu par la caméra, il était important de statuer sur la pertinence de la monochromatisation par filtres par rapport à celle utilisant un monochromateur. La méthode par filtres a été éprouvée en modifiant la pureté spectrale de la source tout en mesurant l'EQ résultante. Pour cela, l'épaisseur du filtre utilisé et la tension d'accélération des électrons ont été progressivement modifiées. La variation de ces deux paramètres a conduit à des variations significatives de l'EQ (au maximum 25 %). Ce résultat montre que la monochromatisation par filtres, ne peut pas être retenue pour étalonner des détecteurs X. Un autre résultat obtenu appuie d'autant plus ce constat : une combinaison épaisseur du filtre-tension d'accélération a pu être trouvée permettant d'obtenir une valeur d'EQ, pour notre CCD, comparable à celle de référence (CCD différente de la nôtre), contredisant de ce fait les modèles théoriques et les étalonnages précédents, décrits dans la littérature.

Références

- [1] S. HUBERT, V. PRÉVOT, "A compact low cost master-slave double crystal monochromator for X-ray cameras calibration of the laser MégaJoule Facility", *Nucl. Instr. Meth. Phys.*, **768**, p. 186-191 (2014).
- [2] S. HUBERT, V. PRÉVOT, "Quantum efficiency measurements of an X-ray CCD in the 2-10 keV spectral region by means of double crystal monochromator coupled to an X-ray tube", *Appl. Opt.*, **53**, p. 8078-8085 (2014).

Augmentation des capacités d'adsorption du xénon

par dopage à l'argent d'une zéolithe – rôle des nanoparticules d'argent

L. DELIERE - S. TOPIN / CEA – DAM Île-de-France

S. DE VITO / CEA – Le Ripault

Le développement de matériaux fortement adsorbant pour la capture du xénon est un enjeu majeur pour la production industrielle de xénon ou pour les systèmes de surveillance des essais nucléaires. Le dopage à l'argent de zéolithes (matériaux adsorbants) leur confère des capacités d'adsorption du xénon, à hauteur des teneurs proches du xénon atmosphérique, de l'ordre du ppm, supérieures de deux ordres de grandeur à celles de leurs homologues non dopés. Le couplage expérience/simulation permet de caractériser les sites d'adsorption spécifiques du xénon à l'échelle moléculaire. Mise en évidence expérimentalement, la présence des nanoparticules en surface du matériau permet d'expliquer l'adsorption du xénon à basses concentrations. La simulation Monte Carlo a montré la forte interaction entre le xénon et les nanoparticules et a ainsi permis d'élucider le rôle des nanoparticules sur l'adsorption du xénon.

La récupération du xénon (Xe) de l'air est requise pour des applications majeures comme la production industrielle de xénon (lumière, anesthésiant, etc.) ou la surveillance des essais nucléaires. La faible teneur en xénon dans l'atmosphère (0,087 ppm) implique la mise en œuvre de matériaux qui l'adsorbent fortement. Récemment, la présence d'un site préférentiel (site fort) spécifique à basses concentrations (0,1

à 100 ppm) qui confère à la zéolithe des capacités d'adsorption supérieures de 2 ordres de grandeur à celles des matériaux habituellement utilisés comme les charbons actifs ou les zéolithes non échangées, a été identifié pour la première fois par des équipes du CEA – DAM et de l'IRCE [1]. En revanche, les différents mécanismes d'adsorption du xénon dans les zéolithes dopées à l'argent n'ont alors pas pu être identifiés. La caractérisation et la compréhension des mécanismes d'adsorption est un enjeu crucial dans le développement de nouveaux matériaux. Le couplage expérience/simulation a permis pour la première fois d'identifier ces mécanismes.

La première étape des travaux est la caractérisation physico-chimique, par l'expérience, des matériaux dopés, permettant d'accéder aux données d'entrée nécessaires à la simulation. La caractérisation du matériau par microscopie électronique en transmission (MET) a permis de

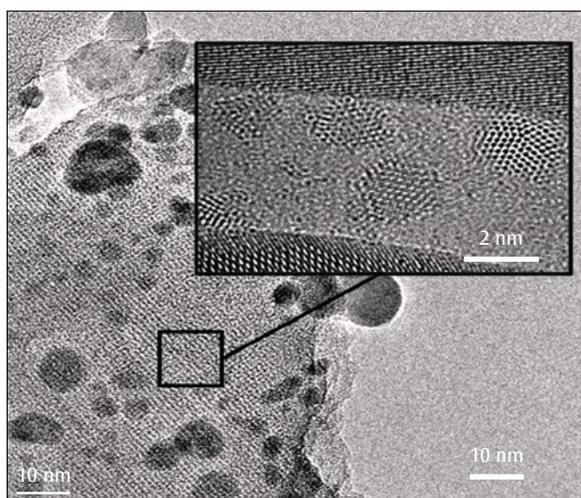


Figure 1. Images MET permettant d'identifier la présence de nanoparticules d'argent. Le zoom (MET-Haute résolution) montre la présence de particules nanométriques.

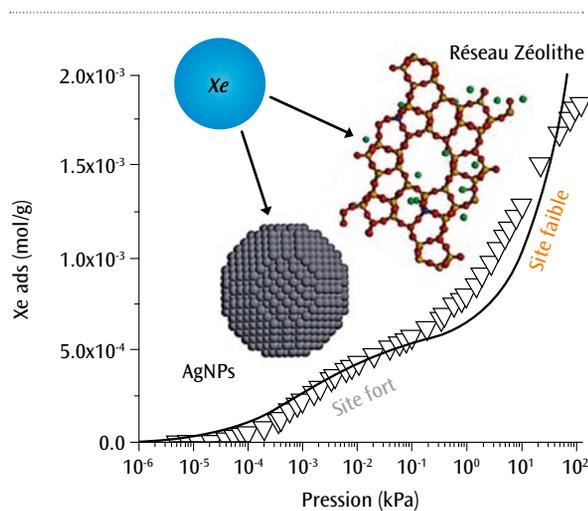


Figure 2. Isotherme d'adsorption expérimentale (▽) et simulée (-) du xénon dans une zéolithe Ag@ZSM-5 à 303 K. Identification des sites d'adsorption : rôle des nanoparticules d'argent (site fort) sur l'adsorption du xénon à basses pressions partielles (i. e. basses concentrations).

mettre en évidence la formation de nanoparticules d'argent en surface du matériau (**figure 1**), qui a ensuite été confirmée par la diffraction X (DRX) et l'absorption des rayons X (EXAFS).

Sur la base des données expérimentales, la simulation de l'adsorption du xénon a été étudiée de manière distincte d'une part sur le réseau de la zéolithe ZSM-5 (zéolithe de type MFI: Modernite Framework Inverted) et d'autre part à la surface de nanoparticules d'argent, noté AgNPs sur la **figure 2**. La simulation dans le réseau de la zéolithe montre une adsorption quasi-nulle pour des pressions inférieures à 10^{-1} kPa et ne reproduit pas l'isotherme d'adsorption à basses pressions. Inversement, l'adsorption à la surface des nanoparticules a été caractérisée à très basses pressions (des 10^{-5} kPa), avec une saturation de la surface des particules autour de 10^{-1} kPa. Les chaleurs d'adsorption du xénon extraites par simulation sont de l'ordre de -50 à -65 kJ/mol pour les nanoparticules d'argent et -30 à -35 kJ/mol pour le réseau de la zéolithe. Ces données de simulation sont en accord avec les chaleurs d'adsorption expérimentales estimées autour de -60 kJ/mol pour le site fort (basses pressions) et -34 kJ/mol pour le site faible. Afin de simuler l'isotherme d'adsorption expérimentale (**figure 2**), une relation entre les deux sous-systèmes, le réseau de la zéolithe et les nanoparticules d'argent a été mise en place. Ce modèle simple permet de simuler l'adsorption d'un gaz sur un système mixte composé de zéolithe et de nanoparticules de métaux. Le principe est de coupler les isothermes d'adsorption simulées sur le réseau de zéolithe et les nanoparticules d'argent afin de reproduire le comportement du matériau. Appliqué à notre système, l'isotherme d'adsorption du xénon dans Ag@ZSM-5 a été simulée

en accord avec l'expérience (**figure 2**). L'accord entre l'expérience et la simulation a permis de confirmer l'effet de la présence de nanoparticules d'argent à la surface de l'échantillon sur l'adsorption du xénon à très basses concentrations [2].

Conclusion

Sur la base de la simulation Monte Carlo, et en accord avec l'expérience, le mécanisme d'adsorption du xénon dans les zéolithes dopées à l'argent a été identifié pour la première fois. D'après les calculs numériques, l'interaction spécifique, entre le xénon et la zéolithe dopée à l'argent, observée à basses pressions de xénon (i. e. basses concentrations) est expliquée par la présence de nanoparticules d'argent localisées majoritairement à la surface de l'échantillon. La caractérisation des sites d'adsorption a été possible grâce au couplage expérience/simulation et notamment, au développement d'un modèle simple permettant de simuler l'adsorption de gaz sur des systèmes composites.

Références

- [1] C. DANIEL *et al.*, "Xenon capture on silver-loaded zeolites: characterization of a very strong adsorption sites", *J. Phys. Chem. C.*, **117**, p. 15122-15129 (2013).
- [2] L. DELIÈRE *et al.*, "Role of silver nanoparticles in enhanced xenon adsorption using silver-loaded zeolites", *J. Phys. Chem. C.*, **118**, p. 25032-25040 (2014).

Résistance cohésive des bétons en dynamique rapide

B. ERZAR / CEA – Gramat

P. FORQUIN / Laboratoire Sols, Solides, Structures, Risques, UMR 5521 CNRS – Université Joseph Fourier – Grenoble INP, Grenoble

La simulation numérique constitue aujourd'hui un outil d'intérêt majeur pour évaluer la réponse de structures face à des agressions comme le souffle ou un impact. Les travaux présentés dans cet article visent à améliorer la modélisation de l'endommagement dynamique du béton à partir de la description des mécanismes activés et des spécificités liées à sa nature hétérogène. Tout d'abord, des essais d'écaillage ont été réalisés. Ils ont permis de générer des endommagements partiels pour plusieurs éprouvettes qui ont ensuite été évalués par des essais de traction quasi-statique. Enfin, un modèle d'endommagement, basé sur la description des mécanismes activés au cours de la fragmentation des matériaux fragiles, a été modifié pour prendre en compte la résistance cohésive liée à la présence des granulats.

L'endommagement et la rupture dynamique des bétons sont aujourd'hui encore mal compris. En effet, le manque de données expérimentales affecte la qualité des modèles et limite les capacités prédictives des simulations pour des structures subissant des sollicitations rapides et intenses. Dans des travaux précédents [1,2], l'influence de la saturation en eau et de la vitesse de déformation sur la résistance en traction des bétons ont été investigués. Dans la littérature, on ne trouve que très peu de données sur le comportement postérieur au pic de contrainte en dynamique. Il est pourtant nécessaire d'étudier quantitativement la résistance de cohésion des bétons à haute vitesse

de déformation afin de disposer d'une modélisation fiable de l'endommagement dynamique.

Étude expérimentale de la résistance cohésive du béton en régime dynamique

Deux bétons, présentant des mésostructures différentes, ont été soumis à un chargement de traction dynamique. L'essai d'écaillage aux barres de Hopkinson [1] a été utilisé pour solliciter des éprouvettes à différents niveaux de chargement, permettant d'initier des dommages plus ou moins importants. Dans cet essai, une onde élastique de compression est transmise à l'éprouvette de béton placée au bout de la barre de Hopkinson. Cette impul-

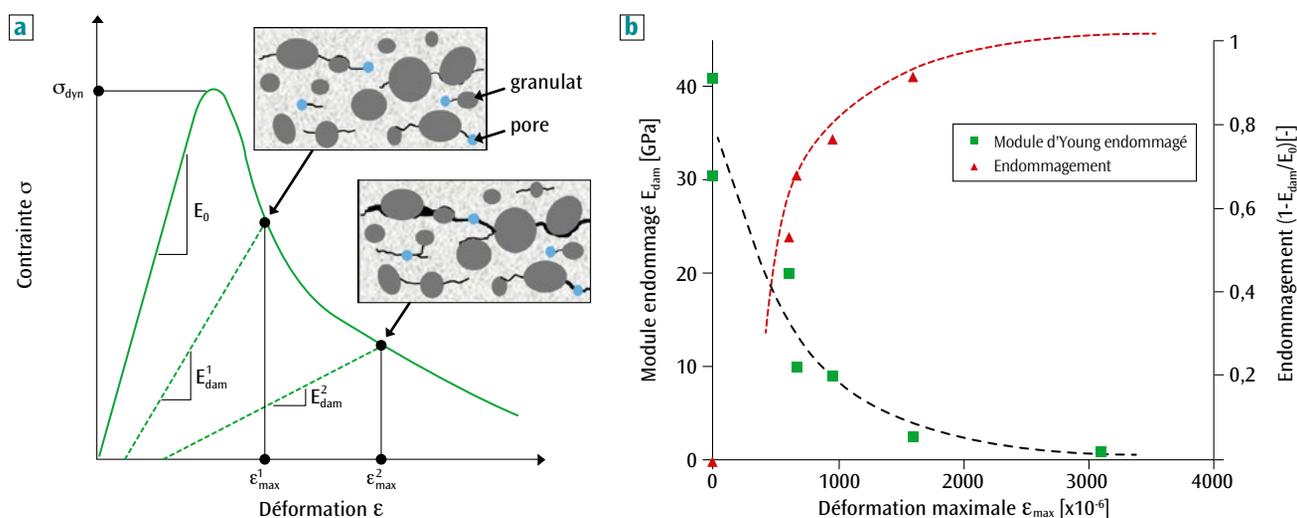


Figure 1.

(a) Comportement en traction dynamique d'un béton et (b) résultats expérimentaux obtenus sur des éprouvettes endommagées par un chargement dynamique [3].

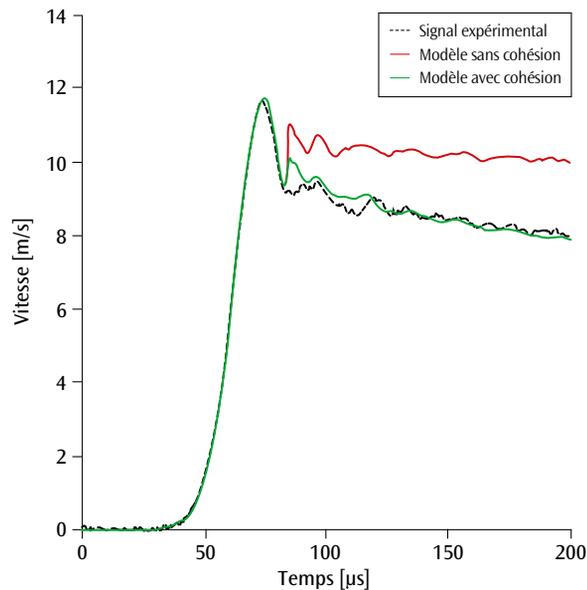


Figure 2. Comparaison expérience-calcul du profil de vitesse mesuré sur la surface libre (essai sur béton séché, $\dot{\epsilon} = 135 \text{ s}^{-1}$) [3].

sion est réfléchiée sur la surface libre et entraîne l'apparition de contraintes de traction à des vitesses de déformation comprises entre 20 et 180 s^{-1} . L'instrumentation, composée de jauges de déformation et d'une mesure de vitesse de la surface libre par interférométrie, permet de déterminer la célérité des ondes élastiques dans le béton, donc le module d'Young, mais aussi la contrainte maximale atteinte au cours de l'essai et la vitesse de déformation dans la zone endommagée.

Lors des essais réalisés aux plus faibles vitesses de déformation (de 20 à 60 s^{-1}), les éprouvettes ont été récupérées endommagées mais non rompues par le chargement de traction dynamique. Des essais de traction quasi-statique ont ensuite été conduits sur ces éprouvettes, permettant de mesurer des pertes locales de raideur dans les zones endommagées [3]. Ces données (figure 1) montrent que le niveau d'endommagement est directement lié à la déformation maximale atteinte durant l'essai d'écaillage. Malgré des tailles maximales de granulats différentes, les deux bétons montrent des résistances de cohésion similaires [3].

Modélisation de la rupture dynamique des bétons

Les données expérimentales de la figure 1 montrent que le béton, sollicité en traction dynamique, ne se comporte pas comme un matériau fragile. Les multiples fissures initiées par le chargement dynamique trouvent de nombreux obstacles sur leur chemin. Les granulats, par un phénomène de pontage (figure 1a), contribuent à résister à l'ouverture des fissures. Ainsi, pour rompre une éprouvette de béton en dynamique, il faut atteindre une déformation 5 fois supérieure à celle correspondant au pic de contrainte.

Si l'initiation, la propagation de fissures et l'occultation de défauts sont bien décrits par le modèle de Denoual-Forquin-Hild [4,5], un ingrédient supplémentaire doit être ajouté pour décrire la résistance cohésive du milieu endommagé. Ce terme, dépendant de la vitesse de déformation et piloté par la déformation du béton, est activé lorsque l'endommagement est initié. L'identification des paramètres additionnels est réalisée à partir d'essais d'écaillage menés à des vitesses de déformation de l'ordre de 50 s^{-1} . Le modèle est ensuite confronté à d'autres essais menés à des vitesses supérieures (figure 2). L'ajout de cohésion permet d'améliorer la restitution par la simulation numérique de mesures locales (déformations, vitesse) et de l'endommagement des éprouvettes de béton [3].

Conclusion

Afin d'améliorer la compréhension du comportement dynamique des bétons, des essais d'écaillage ont été réalisés se soldant pour certains par un endommagement partiel des éprouvettes. Des essais de traction quasi-statique ont permis de quantifier le niveau d'endommagement résultant du chargement dynamique, montrant que le béton résiste en dynamique à des déformations très largement supérieures à celles menant à sa rupture en quasi-statique. Pour prendre en compte ces spécificités liées à la nature hétérogène des bétons, un terme de cohésion a été ajouté à un modèle dédié à la fragmentation des matériaux fragiles. La restitution des essais par simulation a ainsi été notablement améliorée en reproduisant correctement l'évolution de comportements locaux et le faciès d'endommagement multi-fissuré d'éprouvettes de bétons.

Références

- [1] B. ERZAR, F. FORQUIN, "An experimental method to determine the tensile strength of concrete at high rates of strain", *Experimental Mechanics*, **50**, p. 941-955 (2010).
- [2] B. ERZAR, F. FORQUIN, "Experiments and mesoscopic modelling of dynamic testing of concrete", *Mechanics of Materials*, **43**, p. 505-527 (2011).
- [3] B. ERZAR, F. FORQUIN, "Analysis and modelling of the cohesion strength of concrete at high strain-rates", *International Journal of Solids and Structures*, **51**, p. 2559-2574 (2014).
- [4] C. DENOUAL, F. HILD, "A damage model for the dynamic fragmentation of brittle solids", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **183**, p. 247-258 (2000).
- [5] F. FORQUIN, F. HILD, "A probabilistic damage model of the dynamic fragmentation process in brittle materials", *Advances in Applied Mechanics*, **44**, p. 1-72, (2010).

Compositions énergétiques nanostructurées sûres

A. WUILLAUME - A. BEAUCAMP - F. DAVID-QUILLOT / CEA – Le Ripault
C. ERADES / ONERA, Palaiseau

Afin d'améliorer la sûreté des compositions énergétiques, il est possible de jouer sur la qualité cristalline (pureté, microstructure) de molécules performantes comme les nitramines hexogène (RDX) et octogène (HMX). Une première voie consiste à effectuer une recristallisation contrôlée du matériau (cas du VI-RDX). Une seconde voie, choisie par le CEA – Le Ripault [1], cherche à diminuer la taille des cristaux en préparant des matériaux énergétiques nanostructurés. Pour éviter les risques de manipulation de nanoparticules, les matériaux préparés sont des matériaux macroscopiques tridimensionnels constitués en masse de 90 % de nanoparticules (150-300 nm) de RDX incorporées dans 10 % d'une matrice nanostructurante organique. La synthèse de telles compositions ainsi que les caractérisations réactives les plus démonstratives sont décrites dans cet article. En parallèle, des caractérisations structurales (MEB, DRX) et de sécurité (analyse thermique (DSC), sensibilité mécanique, comportement thermomécanique) ont été menées.

Depuis une vingtaine d'années, en parallèle des recherches menées sur les nouvelles molécules énergétiques plus performantes que les explosifs de référence (TATB, HMX) du CEA – DAM mais souvent plus sensibles ou de faisabilité synthétique ardues, des travaux ont été menés par les industries et organismes de recherche de l'armement conventionnel sur la désensibilisation d'explosifs connus et performants (RDX). L'idée est de diminuer l'ensemble des défauts présents dans les cristaux (pores, résidus de solvant occlus...) pour accroître l'insensibilité du composé. Ainsi, depuis le milieu des années 1990 l'Institut Saint Louis travaille à la recristallisation contrôlée du RDX et produit ainsi un RDX baptisé VI-RDX (Very Insensitive-RDX). Ce matériau, qui intéresse les industriels de l'armement conventionnel est en cours de transfert industriel.

Le CEA – Le Ripault s'intéresse à cet objectif de désensibilisation du RDX depuis 2010 à travers l'étude de compositions énergétiques nanostructurées au RDX. Cette démarche fait suite aux travaux menés de 2003 à 2007 sur la formulation et la caractérisation de matériaux énergétiques nanostructurés à charge perchlorate d'ammonium.

Synthèse et formulation des compositions nanostructurées au RDX

Les matériaux préparés sont des matériaux pulvérulents de taille macroscopique (100 à 300 μm) constitués à 90 % massique de nanoparticules de RDX (100 à 300 nm). Le point clé de ce concept de matériau est basé sur l'utilisation d'une sorte de moule, appelé matrice nanostructurante préalablement lavée à l'éthanol (EtOH), dans lequel le RDX va être guidé à l'état de solution saturée (figure 1), puis va recristalliser.

Afin de contrôler voire stopper la croissance des cristaux de RDX au cours de la cristallisation puis du séchage, il est intéressant de procéder par congélation dans l'azote liquide puis par lyophilisation. Mais seule l'eau peut être lyophilisée. La γ -butyrolactone (GBL) utilisée pour imprégner la matrice de RDX est donc préalablement remplacée par de l'éthanol puis de l'eau avant lyophilisation (figure 2).

Les matériaux obtenus sont des cryogels (séchage par voie cryogénique) et sont constitués à 10 % massique d'une matrice polymérique (P/NP(7/3))F (condensation d'un mélange 7/3 de précurseurs phloroglucinol (P) et nitrophloroglucinol (NP) avec du formaldéhyde (F)) et à 90 % massique de RDX.

Caractérisations structurales et réactives

Les compositions énergétiques nanostructurées ont été caractérisées d'un point de vue physico-chimique et structural par analyse élémentaire

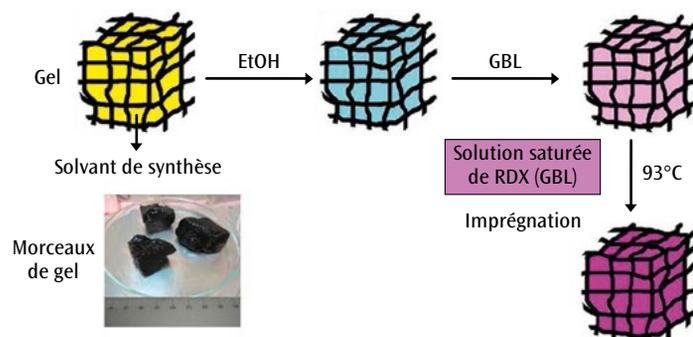
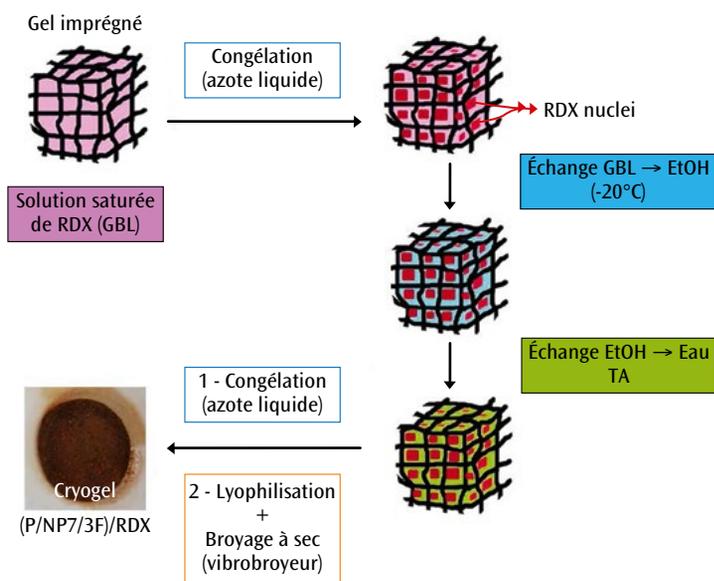


Figure 1. Imprégnation de la matrice nanostructurante avec la solution saturée de RDX.

Figure 2. Cristallisation et séchage des nanocompositions au RDX.



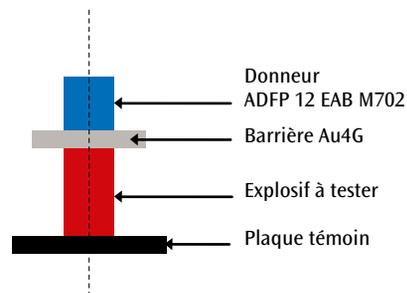
(taux de charge: 89 % massique \pm 4 %), microscopie électronique à balayage (MEB: matériau homogène), diffraction des rayons X (DRX: taille moyenne des particules de charge dispersées dans la matrice de 100-150 nm) et microscopie à force atomique (AFM).

D'un point de vue sécurité de manipulation, une nanoformulation est moins sensible à la friction que le RDX (0-100 μ m) seul et que son homologue macrostructuré. Un effet combiné de la taille des particules et du rôle protecteur de la matrice vis-à-vis des agressions peut expliquer ces résultats. La sensibilité à l'impact des compositions énergétiques nanostructurées bien que très légèrement supérieure reste du même niveau que celui de leurs homologues macrostructurés et du RDX (0-100 μ m) seul.

Des essais préliminaires de gap-test à petite échelle (**figure 3**) mettent en évidence qu'une nanoformulation est moins sensible à l'onde de choc que son équivalent macrostructuré. Ces essais réalisés sur des cylindres comprimés montrent que cette amélioration est significative puisque cette nanoformulation est aussi insensible qu'une formulation contenant 30 % de TATB (fortement insensible à l'onde de choc) et 65 % d'HMX (proche du RDX en termes de sensibilité).

La formulation de compositions énergétiques nanostructurées à 90 % massique de RDX a été effectuée à l'échelle de laboratoire puis à une échelle de 200 g, par lots unitaires de 25 à 50 g. Les caractérisations structurales effectuées sur les compositions

(MEB, DRX, AFM) ont validé la nanostructuration des nanocryogels. Les quantités importantes de matière formulées ont permis de mener des caractérisations réactives diverses (sensibilité mécanique, gap-test, etc.). Les résultats obtenus montrent que les nanocryogels sont significativement moins sensibles à l'onde de choc que leurs homologues macrostructurés tout en restant sûrs en termes de manipulation. Il conviendra d'approfondir ces premiers résultats par des essais complémentaires, mais aussi de les comparer à des essais d'amorçabilité sur VI-RDX. En parallèle des évolutions du procédé de formulation des nanocompositions pourraient être effectuées en vue de s'affranchir de la porosité résiduelle issue de l'étape de lyophilisation qui rend complexe la mise en œuvre des poudres.



Formulation		e_{50} (mm)*	Intervalle de confiance à 95%
P/NP(7/3)F/RDX	macro	2,70	[2,52 - 3,01]
(10/90) 95% TMD**	nano	1,84	[1,51 - 2,22]
HMX/TATB/technoflon (65/30/5) 98% TMD		1,88	[1,78 - 2,00]

*Épaisseur de barrière pour laquelle 50 % des essais aboutissent à une détonation de l'explosif à tester. Plus e_{50} est faible, plus l'explosif est insensible.
**Densité maximale théorique

Figure 3. Principe et résultats du gap-test.

Références

[1] A. WUILLAUME, A. BEAUCAMP, F. DAVID-QUILLOT, C. ERADÈS, "Formulation and characterizations of nanoenergetic compositions with improved safety", *Propellants, Explosives and Pyrotechnics*, **39**, p. 390-396 (2014).

Comportement atypique et vieillissement statique du tantale

D. COLAS - S. FLOURIOT / CEA – Valduc

E. FINOT - T. PARIS / Laboratoire Interdisciplinaire Carnot, UMR 5209 CNRS – Université de Bourgogne, Dijon

S. FOREST - M. MAZIERE / Centre des matériaux, Mines ParisTech, Évry

Le comportement mécanique du tantale de pureté commerciale présente en traction un pic sur la courbe contrainte = $f(\text{élongation})$, ce qui est un comportement atypique. Ce comportement intervient dans les premiers stades de déformation plastique du matériau et si l'on s'intéresse aux sollicitations cycliques subies en fatigue, il est crucial d'en comprendre les mécanismes. Cet article présente les caractérisations menées afin de mettre en évidence l'origine de ces mécanismes. Ces caractérisations ont également permis d'identifier un modèle de comportement mécanique simple restituant ce comportement atypique.

Dans bon nombre de matériaux, le passage du comportement élastique au comportement plastique est caractérisé par une instabilité connue sous le nom de phénomène de Lüders. Dans les aciers faiblement alliés notamment, un pic de traction prononcé est observable sur les courbes de traction. Ce pic est suivi d'un plateau associé à la propagation d'une bande de localisation le long du fût de l'éprouvette. Ce phénomène est également observé dans le zirconium et le titane pur, mais le pic de traction est de faible amplitude. Ce phénomène est attribué à l'ancrage des dislocations par l'atmosphère de solutés.

Le travail présenté ici s'intéresse au tantale, matériau réfractaire. Celui-ci a fait l'objet de nombreux

travaux de recherche sur son comportement mécanique dans les dernières décennies, mais la plupart de ces travaux portent sur le comportement à grande vitesse et/ou grande déformation [1]. Ce travail cherche quant à lui à étudier le comportement mécanique du tantale sur les premiers stades de déformation, où peu d'études ont été réalisées.

Résultats expérimentaux

La **figure 1** montre le comportement à température ambiante pour trois vitesses de déformation. Elle met en évidence une forte dépendance à la vitesse de déformation, mais également un pic de traction. La forme de ce pic est différente de celles observées

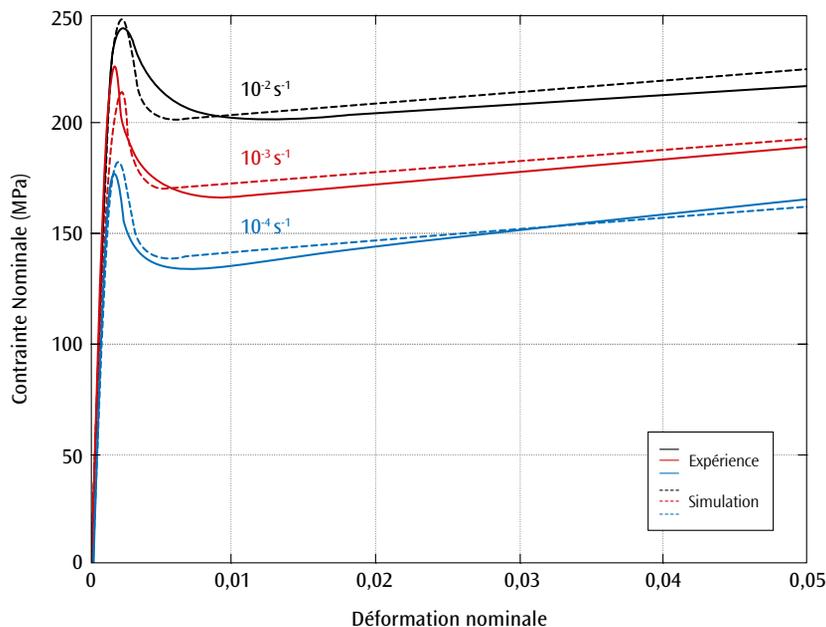


Figure 1. Courbes de traction du tantale à température ambiante entre 10^{-4} et 10^{-2} s^{-1} et restitution du comportement par le modèle EKMC.

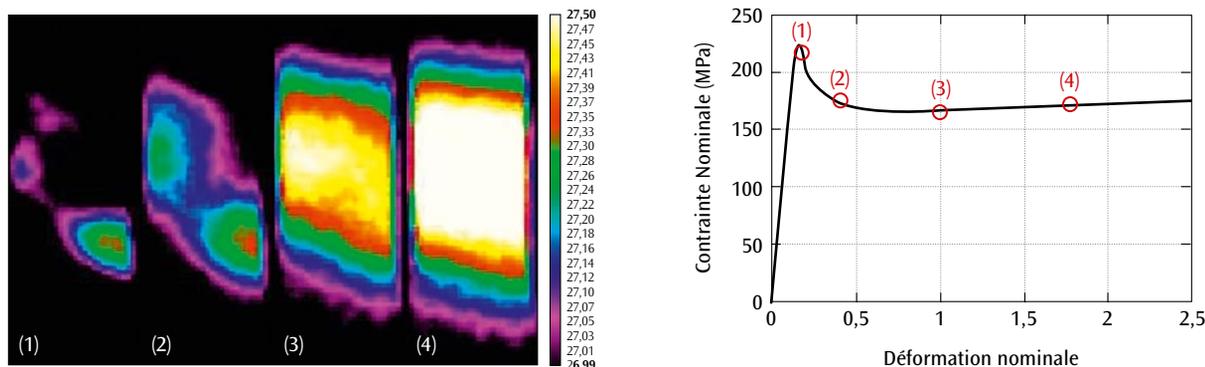


Figure 2. Champs de température mesurés et réponses mécaniques obtenues sur une éprouvette lors d'un essai de traction à température ambiante et à la vitesse de déformation de 10^{-3}s^{-1} .

sur d'autres matériaux tels que l'acier. En effet, ce pic est moins brutal. De plus dans le cas de l'acier, il est associé à la propagation d'une bande de déformation plastique le long de l'éprouvette. Or, dans le cas du tantale, la propagation de la bande est plus diffuse comme le montre l'analyse par thermographie infra-rouge (figure 2). Une faible augmentation de température de 0,5 K est observée au moment du passage à la contrainte maximale. Une bande diffuse germe et se propage le long de l'éprouvette. La présence d'un pic large et d'une bande de localisation diffuse sont dues à la forte sensibilité à la vitesse du matériau.

Ce point a été confirmé par des observations au microscope électronique à balayage faites lors d'essais interrompus. En effet des lignes de glissement ont été observées à la surface de l'éprouvette dans la bande de localisation. Les observations ont pu mettre en évidence l'avancée de la bande de localisation [2].

Enfin des essais séquentiels consistant à solliciter le matériau puis à le décharger et à attendre une période avant de le solliciter à nouveau ont montré un pic de traction à chaque nouvelle sollicitation. Ce résultat montre qu'il s'agit bien d'un mécanisme de vieillissement statique qui est mis en jeu.

Modélisation

La modélisation choisie est basée sur des lois empiriques proposées par Estrin, Kubin et McCormick (EKMC) [2,3]. Ce modèle est capable de rendre compte du pic de traction dû au vieillissement statique et du phénomène de Portevin Le Chatelier, c'est-à-dire du vieillissement dynamique [3]. L'originalité de ce modèle est l'introduction d'une variable t_a qui représente le temps laissé aux atomes présents en solution dans le matériau pour diffuser le long des dislocations. Un terme d'érouissage (contrainte) isotrope

est donc introduit prenant en compte ce terme de vieillissement.

Le modèle de comportement identifié permet de restituer des chargements mécaniques monotones et cycliques jusqu'à des taux de déformation de 10 % (figure 1).

Conclusion

Les essais mécaniques réalisés ont mis en évidence un comportement plastique atypique qui se caractérise par un pic de contrainte en début d'écoulement plastique et la propagation d'une bande de déformation plastique diffuse. Ce comportement est induit par un mécanisme de vieillissement mettant en jeu l'interaction entre les dislocations et les atomes d'oxygène en solution solide dans le matériau.

Un modèle de comportement phénoménologique a été identifié à température ambiante pour des essais monotones et cycliques. La réponse globale est en bon accord avec les données expérimentales. Les calculs par éléments finis permettent de rendre compte des phénomènes de localisation observés.

Références

- [1] S. NEMAT-NASSER, J.B. ISAACS, M. LIU, "Microstructure of high-strain, high-strain-rate deformed tantalum", *Acta Mater.*, **46**, p. 1307-1325 (1998).
- [2] D. COLAS, E. FINOT, S. FLOURIOT, S. FOREST, M. MAZIÈRE, T. PARIS, "Investigation and modeling of the anomalous yield point phenomenon in pure tantalum", *Mater. Sci. & Eng. A*, **615**, p. 283-295 (2014).
- [3] S. GRAFF, S. FOREST, J. STRUDEL, C. PRIOUL, P. PILVIN, J. BÉCHADE, "Finite element simulations of dynamic strain ageing effects at V-notches and crack tips", *Scripta Mat.*, **52**, p. 1181-1186 (2005).

Application des sulfones dans la formulation d'électrolytes pour batteries Li-ion à base de $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$: étude des interfaces

J. DEMEAUX - M. LE DIGABEL - H. GALIANO / CEA – Le Ripault, Laboratoire de recherche correspondant LRC CEA/LPCM2E n°1
 E. DE VITO / CEA – Grenoble, Laboratoire de recherche correspondant LRC CEA/LPCM2E n°1
 B. CLAUDE-MONTIGNY - M. CAILLON-CARAVANIER - D. LEMORDANT / Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux et des Électrolytes pour l'Énergie (LPCM2E), Université François Rabelais, Tours, Laboratoire de recherche correspondant LRC CEA/LPCM2E n°1

L'interface électrode $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ (LTO)/électrolytes binaires contenant des solvants de type sulfone (R-SO₂-R') a été étudiée dans des accumulateurs symétriques $\text{Li}_{4+x}\text{Ti}_5\text{O}_{12}/\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$. Ces cellules symétriques ont été assemblées dans le but de caractériser l'interface aux états de charge et de décharge. Une étude de surface des électrodes par XPS (spectrométrie photoélectronique X) révèle que les sulfones ne participent pas à la formation de couches de surface. Seuls les carbonates d'alkyles linéaires (RO-CO-OR'), utilisés en tant que co-solvants des sulfones, assurent la formation de couches de surface organiques. L'épaisseur de ces couches est variable selon l'état d'oxydation de l'électrode.

Les batteries Li-ion sont des dispositifs comprenant deux électrodes et un électrolyte (mélange de solvants organiques et d'un sel de lithium) qui assure le transfert ionique (Li^+). Les électrodes négatives de type LTO présentent un intérêt pour les charges rapides mais aussi pour des aspects de sécurité. En raison d'un potentiel nominal élevé (1,5 V vs. Li^+/Li), il est préférable d'associer ce matériau à une électrode positive « haute tension, 5 V » de type $\text{LiNi}_{0,4}\text{Mn}_{1,6}\text{O}_4$ pour préserver une densité d'énergie au moins équivalente aux technologies actuelles. De nos jours, le développement de batteries utilisant ces matériaux est toutefois limité par l'instabilité à haut potentiel des constituants de l'électrolyte



Figure 1.

Tests électrochimiques sur accumulateurs de type pile bouton.

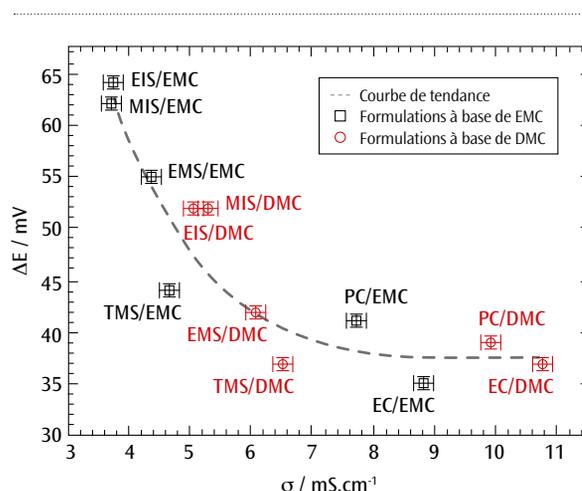


Figure 2.

Polarisation (mV) des cellules symétriques $\text{Li}_{4+x}\text{Ti}_5\text{O}_{12}/\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ en fonction de la conductivité ionique des électrolytes binaires à base de carbonates d'alkyles (EC, PC, DMC ou EMC) et de sulfones (EMS, MIS, EIS et TMS) (LiPF₆, 1M).

(actuellement des solvants de type carbonate). Les électrolytes contenant des sulfones sont connus pour être une alternative aux carbonates d'alkyles de par leur stabilité en oxydation. Cependant, ces molécules pourraient modifier l'interface de l'électrode LTO (suite à des mécanismes de dégradation chimiques ou électrochimiques) et avoir un impact sur les performances en cyclage. La contribution des sulfones sur la formation de couches sur l'électrode a été étudiée

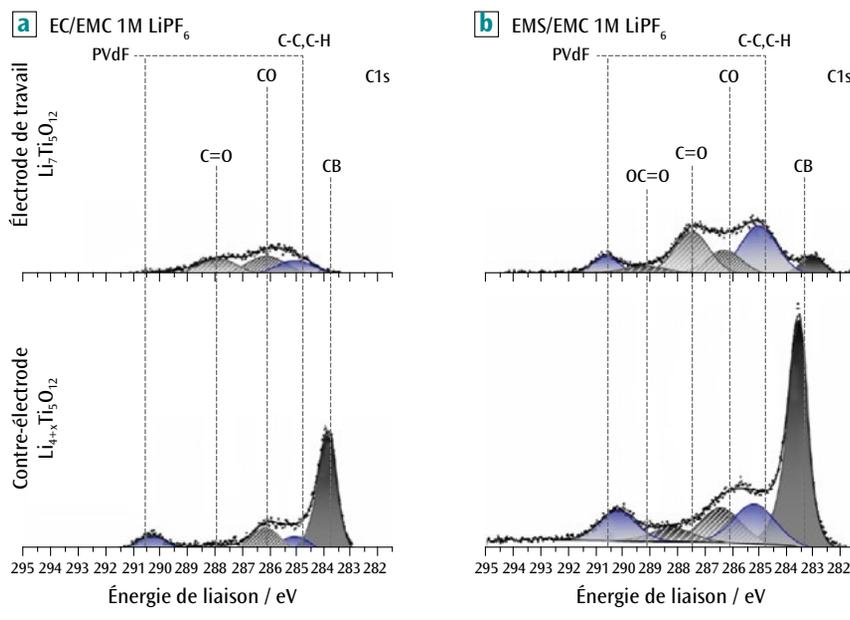


Figure 3. Spectres XPS du carbone d'électrodes $\text{Li}_7\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ et $\text{Li}_{4+x}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ cyclées 100 fois à $20,0 \pm 0,3^\circ\text{C}$ en cellules symétriques avec des électrolytes contenant des solvants de type carbonate (a) et sulfone (b).

au travers de tests électrochimiques (figure 1) et par des analyses de surface par XPS.

Cyclage des cellules symétriques



Afin de vérifier la compatibilité des sulfones cycliques ou linéaires vis-à-vis de l'électrode LTO et de caractériser uniquement l'interface électrode/électrolyte, des cellules symétriques ont été assemblées. En raison de la forte viscosité des sulfones, ces molécules ont été associées à des co-solvants peu visqueux de type carbonate d'alkyle linéaire pour formuler des électrolytes binaires. Il a été montré au cours de cette étude que la polarisation de la cellule (ΔE , reliée à la résistivité de la cellule) mesurée lors des cyclages galvanostatiques (figure 1 et 2) peut être classée inversement à la conductivité de l'électrolyte (figure 2). Cette corrélation entre la polarisation et la conductivité laisse supposer que la résistivité de l'interface électrode/électrolyte est faible par rapport à la résistance de l'électrolyte.

Étude de l'interface LTO/électrolytes

Afin d'approfondir l'étude de l'interface électrode/électrolyte, des spectres XPS ont été réalisés à partir d'électrodes cyclées soit dans une formulation à base de carbonate (référence) soit dans un électrolyte contenant un solvant de type sulfone. Les électrodes analysées sont extraites des cellules symétriques après le cyclage en charge/décharge. Les électrodes sont constituées de 82 % de la matière active (LTO), de 6 % d'un liant (PVdF), de 6 % de fibres Tenax et de 6 % de noir de carbone. Les spectres XPS du carbone sont présentés en figure 3. La couche de surface doit être fine sur la contre-électrode (état oxydé) puisque le noir de carbone de l'électrode est détecté à 283,5 eV. Concernant l'électrode de travail (état réduit), le noir de carbone n'est uniquement visible que pour l'électrolyte contenant la molécule de sulfone. De leur côté, les spectres du soufre (non présentés ici) montrent

qu'aucune espèce soufrée n'est déposée sur les électrodes suite au cyclage.

Dans le cas de la formulation à base du sulfone, la formation des couches de passivation sur l'électrode est assurée uniquement par le carbonate d'alkyle linéaire présent. Il en résulte des couches de passivation constituées d'oligomères contrairement aux électrolytes conventionnels à base uniquement de carbonates où ces couches sont principalement formées de polymères (intensité du noir de carbone plus faible).

Conclusions

Les couches de surface formées sur LTO à partir des électrolytes contenant des sulfones sont faiblement résistives. Une étude par XPS des électrodes $\text{Li}_{4+x}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ (partiellement oxydée) et $\text{Li}_7\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ (réduite) issues de cellules symétriques révèle que les sulfones ne participent pas à la formation des couches de surface. Les carbonates d'alkyle linéaire, utilisés en tant que co-solvants des sulfones dans des électrolytes binaires, assurent la formation de couches de surface organiques. Les couches formées sont plus fines sur l'électrode délithiée (partiellement oxydée) que sur l'électrode lithiée (réduite). La formation des couches organiques a donc lieu lors de la réduction de l'électrode LTO et leur dissolution partielle dans l'électrolyte lors de son oxydation [1,2].

Références

- [1] J. DEMAUX, E. DE VITO, M. LE DIGABEL, H. GALIANO, B. CLAUDE-MONTIGNY, D. LEMORDANT, "Evaluate sulfone-based reduction sensitive electrolytes with lithium $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}/\text{Li}$ and symmetric $\text{Li}_{4+x}\text{Ti}_5\text{O}_{12}/\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ cells", *ECS Transactions*, **53**, p. 5-21 (2013).
- [2] J. DEMAUX, E. DE VITO, M. LE DIGABEL, H. GALIANO, B. CLAUDE-MONTIGNY, D. LEMORDANT, "Dynamics of $\text{Li}_7\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ /sulfone-based electrolyte interfaces in lithium-ion batteries", *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, p. 5201-5212 (2014).

Étude de la phase σ dans l'acier 316Nb

A. PERRON - F. BUY - E. SUZON / CEA – Valduc, Laboratoire de recherche correspondant DAM-VA-11-02

C. TOFFOLON-MASCLET / CEA – Saclay

F. CORTIAL / DCNS Research – Centre d'Expertise des Structures et Matériaux Navals (CESMAN), La Montagne

V. VIGNAL / Institut Carnot de Bourgogne, Université de Bourgogne, Dijon, Laboratoire de recherche correspondant DAM-VA-11-02

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

La précipitation de la phase σ dans un acier stabilisé au niobium a été étudiée en détail au travers d'une étude expérimentale couplée à des calculs thermocinétiques basés sur la méthode CALPHAD [1]. Cette démarche vise, à travers l'extrapolation des résultats numériques recalés à haute température, à garantir la durée de vie de cet acier sur quelques dizaines d'années aux alentours de 300°C. La présente étude met en évidence la plus grande facilité de précipitation aux joints de grains des îlots de ferrite présents dans le matériau. Il a été possible d'observer et de modéliser une transformation directe ($\delta \rightarrow \sigma$) contrôlée par la diffusion suivie par une transformation eutectoïde $\delta \rightarrow \sigma + \gamma_2$.

Les aciers inoxydables austénitiques, de par leur qualité de résistance à la corrosion associée à de bonnes propriétés mécaniques à haute température sont des candidats tout désignés pour une utilisation en atmosphère hostile. Ils sont ainsi largement utilisés dans les industries chimiques, pétrolières et nucléaires pour élaborer des conduits, des tubes de surchauffeur de vapeur, des composants de coeur de centrales nucléaires de nouvelle génération et de réacteurs chimiques. L'emploi des aciers de type 316 s'est ainsi développé en raison de l'augmentation des températures et pressions d'utilisation des générateurs de vapeur. Ces aciers très riches en éléments d'alliage peuvent être le siège de transformations microstructurales, en particulier la formation dans le temps et à haute température de phases secondaires telles que des carbures ($M_{23}C_6$, M_6C et MC) des nitrures (Cr_2N) ou des phases intermétalliques (phases sigma (σ), khi (χ) ou Laves (η)).

La phase σ a été largement étudiée en raison de son caractère fragilisant pour les aciers austénitiques dû à sa grande dureté [2-5]. Par ailleurs, la présence de phase σ joue un rôle sur la résistance à la corrosion. En effet, cette phase riche en chrome et en molybdène peut appauvrir les zones avois-

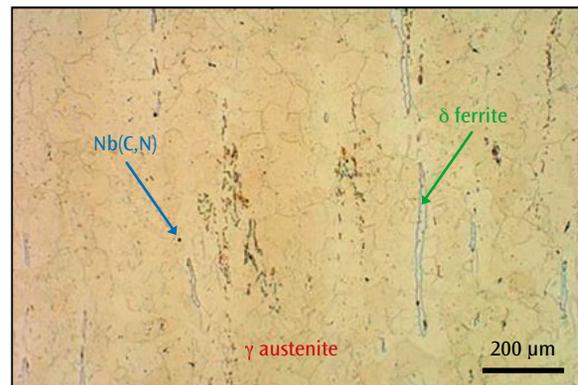


Figure 1.
Microscopie optique du 316Nb.

nantes en ces éléments et amoindrir le caractère inoxydable. Pour ces deux raisons – dégradation des propriétés mécaniques et de résistance à la corrosion – la phase σ est indésirable dans les aciers. Notre objectif a consisté à évaluer à la fois sous un angle expérimental et de simulation numérique les mécanismes et cinétiques de précipitation de la phase σ dans l'acier 316Nb.

Élément	Fe	Cr	Ni	Mo	Mn	C	Nb	Si	N
%	bal.	19,30	12,50	2,70	1,40	0,06	de 1% à (8x%C)	0,40	≤ 0,05

Tableau 1.
Composition du 316Nb (pourcentage massique).

Le 316Nb

L'acier 316Nb, dont la composition est indiquée dans le **tableau 1**, se présente sous la forme d'une matrice austénitique γ parsemée d'environ 1 % d'îlots de ferrite δ , résidus de la solidification de l'acier et de carbonitrides de niobium (**figure 1**).

L'addition de niobium (Nb) améliore la tenue au fluage grâce à la précipitation fine de carbonitrides de niobium Nb(C,N) qui se forment à haute température et empêchent la formation de carbures de chrome nocifs vis-à-vis de la corrosion. En contrepartie à ce rôle protecteur, le niobium favorise la formation de la phase σ .

Des expertises menées au microscope électronique à balayage (MEB) équipé d'une sonde EDS (electron dispersive spectrometry) ont permis de révéler la composition locale des îlots de ferrite, sièges des premiers stades de transformation de la phase σ . À travers des traitements thermiques appropriés, ces sites riches en chrome et en molybdène favorisent la germination de la phase σ dans la ferrite (**figure 2**).

La précipitation de la phase σ , processus lent dans l'austénite [2], s'avère relativement rapide dans la ferrite (de l'ordre de quelques minutes aux environs de 850°C). Nous avons pu restituer, grâce aux logiciels ThermoCalc muni du module DICTRA et MatCalc développés par la société Thermo-Calc Software pour le premier et la Technische Universität de Vienne pour le second, un diagramme temps-température-précipitation relatif à l'acier 316Nb (**figure 3**).

Les résultats obtenus ont permis de mieux appréhender les mécanismes de transformation des périphéries des îlots de ferrite en phase σ puis la transformation eutectoïde de l'intérieur des grains de ferrite suivant la réaction $\delta \rightarrow \sigma + \gamma_2$, γ_2 étant une phase austénitique enrichie en chrome et appauvrie en nickel par rapport à la matrice.

En marge de ce travail, une étude portant sur l'évolution des propriétés mécaniques en

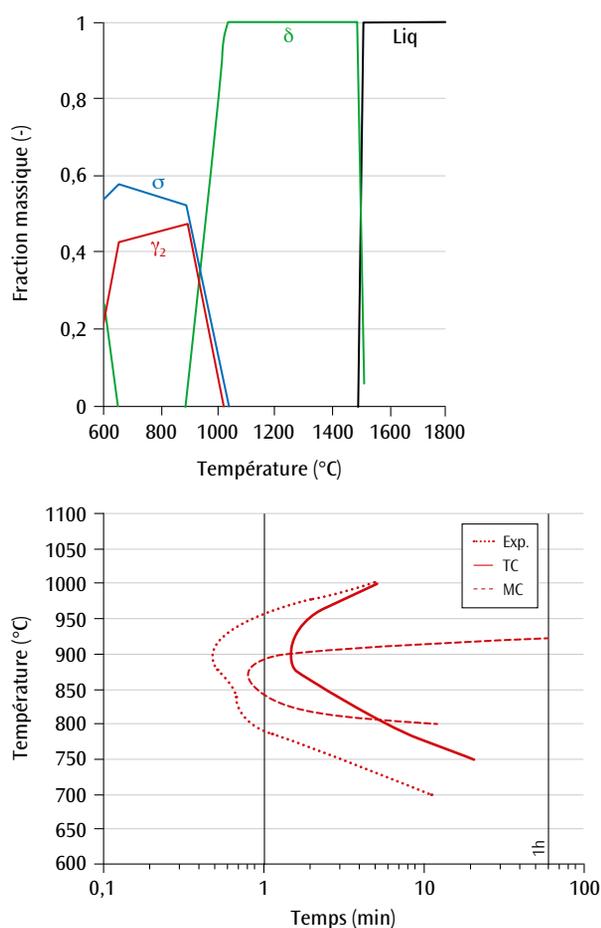


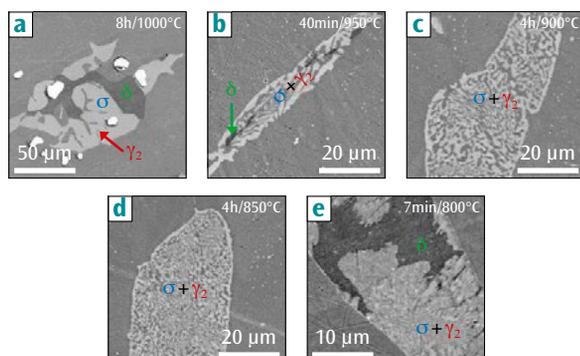
Figure 3.

Diagramme de refroidissement de la ferrite et diagrammes temps-température-précipitation expérimentaux et calculés par les logiciels ThermoCalc et MatCalc de la phase σ dans la ferrite δ .

fonction du taux de phase créé a montré que le peu de phase σ créée lors de la fabrication de ce matériau ne présentait pas de caractère nocif. L'extrapolation des résultats obtenus sur des années à plus basse température confirme la stabilité de cet acier pendant toute sa durée de vie.

Figure 2.

Transformation de la ferrite en phase σ suivant différents traitements thermiques (observation MEB).



Références

- [1] A. PERRON *et al.*, "Understanding sigma-phase precipitation in a stabilized austenitic stainless steel (316Nb) through complementary CALPHAD-based and experimental investigations", *Acta Materialia*, **79**, p. 16-29 (2014).
- [2] J. ENERMAN *et al.*, "Quantitative metallography of sigma phase precipitates in AISI 347 stainless steel", *Materials Science and Technology*, **20**, p. 1245-1251 (2004).
- [3] D.Y. LIN, T.C. CHANG, "Effect of s phase formation on mechanical properties of stainless steel SUS 309 L after isothermal aging", *Steel research int.*, **75**, p. 204-208 (2004).
- [4] V.E. MAY, "Sigma phase embrittlement of austenitic stainless steel FCCU regenerator internals", *Materials Performance*, **24**, p.18-22, (1985).
- [5] T. SOURMAIL, "Precipitation in creep resistant austenitic stainless steels", *Materials Science and Technology*, **17**, p. 1-14 (2001).

Capteurs chimiques revêtus de calixarènes pour la détection d'explosifs

P. MONTMEAT - F. VEIGNAL - L. HAIRAULT / CEA – Le Ripault, Laboratoire de recherche correspondant LRC CEA/UPMC/CNRS n°1
C. METHIVIER - C.-M. PRADIER / Laboratoire de Réactivité de Surface, UMR 7609 CNRS – Université Pierre et Marie Curie, Paris, Laboratoire de recherche correspondant LRC CEA/UPMC/CNRS n°1

Les calix(n)arènes ($n = 4, 6, 8$) sont des molécules complexantes qui s'organisent dans l'espace en conformation de seau. Utilisées sous forme de film mince recouvrant des capteurs chimiques de type microbalance à quartz, ils ont été évalués pour la détection du 2,4-dinitrotoluène (DNT) qui est une impureté d'un explosif bien connu, le trinitrotoluène (TNT) [1]. Pour mieux cerner les mécanismes de détection et les interactions entre les vapeurs de DNT et les calixarènes, une étude a également été menée en spectroscopie infrarouge de surface. Alors qu'on pouvait imaginer que la taille du seau du calixarène aurait une influence sur la sensibilité du capteur, il a été démontré que pour la détection du DNT, il n'en était rien.

La lutte contre le terrorisme est une priorité nationale et dans ce domaine, disposer de moyens de détection d'explosifs est important. Pour ce faire, le CEA – Le Ripault développe depuis quelques années des détecteurs d'explosifs basés sur les capteurs chimiques de gaz. Ces dispositifs possèdent l'avantage d'être facilement miniaturisables et industrialisables à bas coût. Leur principe est basé sur l'adsorption de molécules gazeuses présentes dans l'atmosphère par un matériau sensible dont les propriétés physico-chimiques (masse, résistivité, fluorescence, etc.) se trouvent de ce fait modifiées et converties en un signal électrique mesurable [2, 3].

Le capteur étudié repose sur la microbalance à quartz (MBQ) revêtue de matériaux dénommés calixarènes. Ces molécules ont une conformation en forme de seau dont le diamètre est modulable (figure 1) [4]. Cet article nous éclaire sur les performances obtenues avec différents calixarènes vis-à-vis de la détection de vapeurs de DNT. Pour ce faire des mesures de détection par microbalance à quartz et des caractérisations de surface par spectroscopie infrarouge de surface (technique PM-IRRAS) ont été réalisées et comparées.

Microbalances à quartz

Le système mis au point repose sur un capteur chimique de type MBQ revêtu d'un matériau sensible à base de calixarène déposé par spray. Les MBQ piézoélectriques (figure 2) utilisées dans cette étude sont des cristaux de quartz commer-

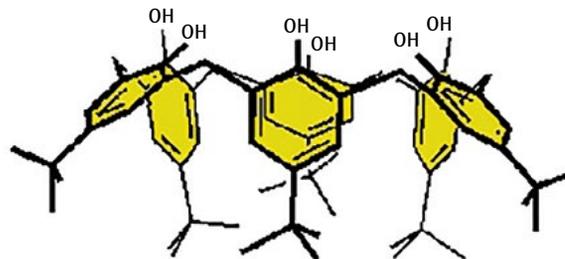


Figure 1. Structure chimique et conformation dans l'espace du calix[6]arène.

ciaux caractérisés par une fréquence d'oscillation de 9 MHz, intégrant, sur leurs deux faces, des électrodes d'or. L'adsorption de molécules de gaz à la surface de la couche sensible provoque une modification de la fréquence, proportionnelle à la masse adsorbée, en accord avec l'équation de Sauerbrey.

Comparaison des performances des différents calixarènes

L'un des objectifs de l'étude était de déterminer l'influence de la taille du seau du calixarène sur les propriétés de détection du DNT. Trois composés ont été testés avec 4, 6 et 8 motifs offrant donc trois diamètres à la cage ainsi formée. Nous avons comparé :

- ▶ les signaux en microbalance à quartz pour lesquels une variation de fréquence correspond

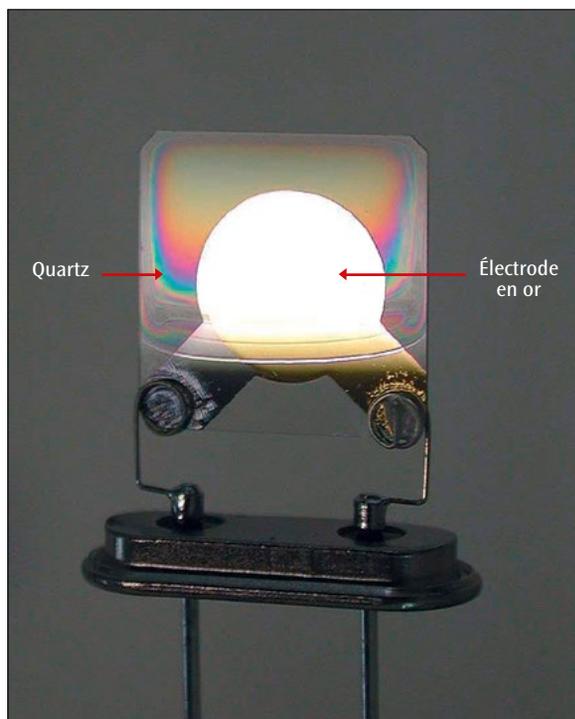


Figure 2.
Photo d'une microbalance à quartz (MBQ).

à une adsorption en masse de DNT à la surface du capteur. La **figure 3** démontre que le calix[4]arène est le composé qui présente la plus grande sensibilité vis-à-vis de 300 ppbv (parties par billion en volume) de DNT. On note néanmoins que la taille du calixarène influe assez peu sur la sensibilité du capteur ;

► les signaux correspondant au DNT mesurés en PM-IRRAS lorsqu'un film de calixarène est exposé à 300 ppbv de DNT. La bande infrarouge caractéristique des liaisons N-O du groupement NO_2 du DNT augmente en fonction du temps jusqu'à atteindre un plateau au bout de 80 minutes. De nouveau, le calix[4]arène semble être celui pouvant accepter le plus de DNT mais la différence de sensibilité entre les trois composés est très faible.

Les résultats obtenus permettent d'indiquer que le calix[4]arène est le composé le plus sensible des trois matériaux sensibles testés, mais ces différences restent plus faibles qu'attendu. Les mesures réalisées renseignent également sur la faible réversibilité de ces capteurs. Ces deux

observations nous conduisent à affirmer qu'il existe une interaction forte entre le motif du calixarène et le DNT certainement due à l'interaction des électrons des orbitales $\Pi-\Pi$ entre le cycle aromatique du DNT pauvre en électrons et les cycles aromatiques du calixarène riches en électrons. Par ailleurs, on suppose également que les hydroxyles du calixarène et les nitros du DNT interagissent fortement. De ce fait la taille du seau et l'encombrement stérique influent en deuxième niveau par rapport aux interactions $\Pi-\Pi$, ce qui explique le faible impact de la taille du seau sur les propriétés de sensibilité au DNT. Les calixarènes sont donc des matériaux intéressants pour la détection de composés nitroaromatiques mais il est difficile de moduler leur sensibilité au DNT en fonction de la taille du seau formé.

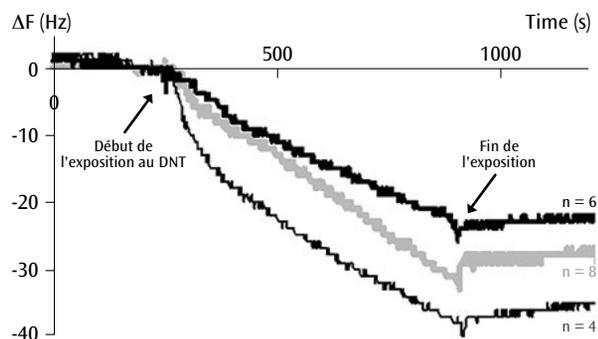


Figure 3.
Sensibilité de MBQ recouvertes de différents calixarènes à 300 ppbv de DNT.

Références

- [1] P. MONTMEAT, F. VEIGNAL, C. MÉTHIVIER, C.-M. PRADIER, L. HAIRAUT, "Study of calixarenes thin films as chemical sensors for the detection of explosives", *Applied Surface Science*, **292**, p. 137-141 (2014).
- [2] P. MONTMEAT, S. MADONIA, E. PASQUINET, L. HAIRAUT, C.P. GROS, J.M. BARBE, R. GUILARD, "Metalloporphyrins as sensing material for quartz-crystal microbalance nitroaromatics sensors", *IEEE Sensors Journal*, **5**, p. 610-615, (2005).
- [3] E. PASQUINET, C. BOUVIER, F. THERY-MERLAND, L. HAIRAUT, B. LEBRET, C. MÉTHIVIER, C.M. PRADIER, "Synthesis and adsorption on gold surfaces of a functionalized thiol: elaboration and test of a new nitroaromatic gas sensor", *Journal of Colloid and Interface Science*, **272**, p. 21-27, (2004).
- [4] D. DIAMOND, K. NOLAN, "Calixarenes: designer ligands for chemical sensors", *Anal. Chem.*, **73**, p. 22-29 A (2001).

Écoulements hypersoniques en atmosphère rarefiée - raffinement local de grille en vitesses

C. BARANGER - J. CLAUDEL - N. HEROUARD / CEA – CESTA

L. MIEUSSENS / Institut de Mathématiques de Bordeaux, UMR 5251 CNRS – Université de Bordeaux – Bordeaux INP

De nombreuses méthodes déterministes simulant la dynamique des gaz raréfiés utilisent l'approximation en vitesse discrète de la fonction de distribution sur une grille cartésienne. Pour les écoulements hypersoniques tridimensionnels rencontrés dans les problèmes de rentrée atmosphérique, l'utilisation de ce type de grille rend les codes déterministes inutilisables en termes de taille mémoire et de temps de calcul, même sur le supercalculateur du CEA – DAM. Nous proposons une méthode de raffinement automatique de la grille de vitesse [1] afin de diviser par 25 le coût d'un calcul en 3D (7 en 2D) tout en gardant la même précision sur le résultat.

Lors de la rentrée atmosphérique d'un objet de vol à des altitudes comprises entre 120 et 60 km, l'atmosphère, qui est raréfiée, ne peut être décrite par les lois classiques de la mécanique des fluides. L'écoulement est considéré comme un ensemble de particules. La fonction de distribution de ces particules est définie sur un espace à 6 dimensions : 3 pour l'espace physique (variable x), 3 pour l'espace des vitesses (variable v). Cette fonction est solution d'une équation aux dérivées partielles détaillant le devenir des particules formant l'écoulement : déplacement, collisions entre elles et avec l'objet de vol. C'est l'équation de Boltzmann. Dans les régimes transitionnels rencontrés lors de la rentrée atmosphérique, cette équation peut être remplacée

par l'équation de BGK [2] : les particules relaxent vers un état d'équilibre dit « équilibre Maxwellien » qui est une fonction gaussienne centrée autour de la vitesse macroscopique u avec un écart-type fonction de la température T . Ces quantités macroscopiques sont des intégrales en v de la fonction de distribution multipliée par des fonctions de v (par exemple $\frac{1}{2}v^2$ pour obtenir u). En considérant la quantité macroscopique, les quantités (p, u, T) sont alors solutions du système de Navier-Stokes à faible altitude (limite dite « asymptotique »).

Méthode déterministe

La méthode numérique la plus courante pour simuler les écoulements raréfiés est la méthode

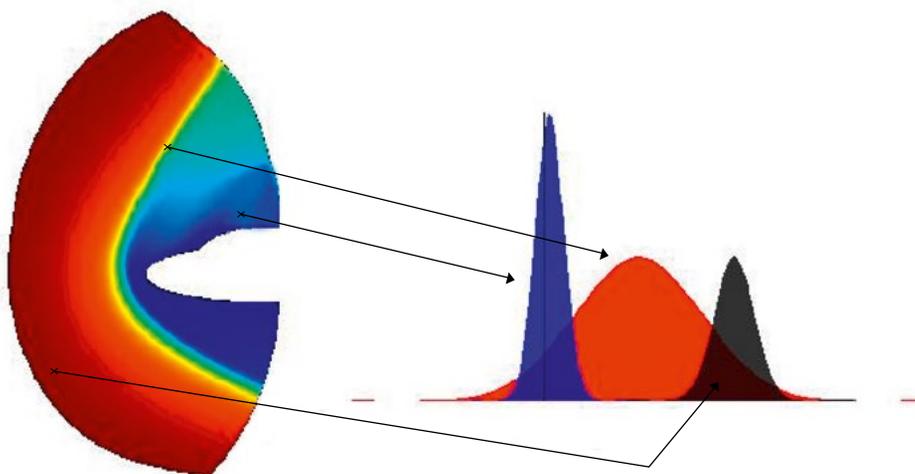


Figure 1.
Trois maxwelliennes d'équilibre en différents points de l'espace pour un problème de rentrée atmosphérique.

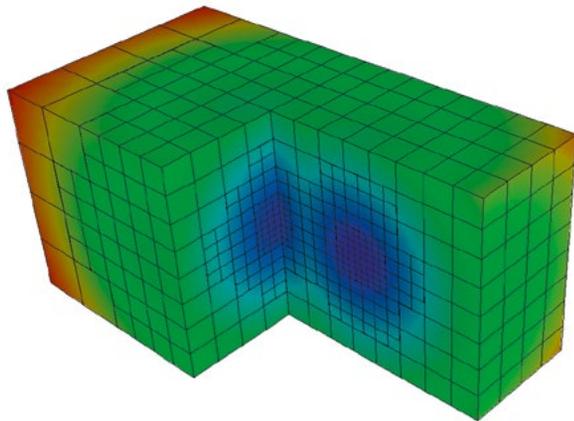


Figure 2. La grille AMR (*Adaptive Mesh Refinement*) en vitesse et la fonction couleur qui a permis sa construction, pour un calcul 3D d'écoulement autour d'une géométrie sphère-cône. Les zones bleues sont les faibles valeurs de la fonction couleur (petite taille de maille), les zones rouges sont ses grandes valeurs (maille plus large).

Direct Simulation Monte Carlo (DSMC). Dans les régimes transitionnels où la méthode DSMC s'avère coûteuse, les méthodes déterministes sont plus efficaces. La contrainte des méthodes déterministes est qu'il faut se doter d'un maillage de l'espace des vitesses. Ce maillage doit être assez étendu pour représenter les fortes vitesses dans l'écoulement en amont de l'objet ainsi que les vitesses quasi-nulles en proche paroi. La taille des mailles de la grille de vitesse doit être assez petite pour pouvoir représenter correctement la fonction de distribution (critère lié à la température). Si on applique ces deux contraintes pour caractériser un maillage cartésien en vitesse, on obtient un nombre de mailles conséquent : 10^{10} mailles pour un calcul 3D à Mach 20. Sachant que le coût de calcul pour ce type de méthode est proportionnel aux nombres de mailles en vitesse, il devient nécessaire de décrire autrement ce maillage.

Algorithme de raffinement de la grille de vitesse

L'idée est simple : raffiner la grille de vitesse dans les zones d'intérêt, mais de manière automatique, permettant une utilisation à toute vitesse et toute altitude. L'hypothèse prise ici est qu'il suffit d'avoir une grille de vitesse adaptée à la description de toutes les maxwelliennes d'équilibre de l'écoulement pour pouvoir décrire avec précision

la solution cherchée. Schématiquement, il y a trois Maxwelliennes à discrétiser (amont, paroi et choc, cf. **figure 1**). On dispose ainsi de couples (vitesse, température) définissant ces maxwelliennes. Une pré-simulation avec un code résolvant les équations de Navier-Stokes, bien qu'imparfaite, donne des couples (u, T) bien adaptés. On définit alors la fonction dite « fonction couleur », qui dépend de v , et qui a pour valeur la taille de la grille de vitesse adéquate pour cette vitesse microscopique. Cette fonction vaut $\sqrt{RT(x)}$ s'il existe dans l'espace physique un point x tel que $|v - u(x)| < 2\sqrt{RT(x)}$. On utilise alors la fonction couleur pour déterminer la grille raffinée : si en au moins un point de la grille de vitesse, la taille de maille est supérieure à la valeur de la fonction couleur, alors on coupe la maille en 8 (4 si on est en 2D), et ainsi de suite. On obtient ainsi une grille raffinée localement (**figure 2**). Les gains constatés sont de 25 en 3D et 7 en 2D axisymétrique en termes de taille mémoire et de temps de calcul pour des écarts en précision inférieurs à 4 %.

Conclusion

Nous avons proposé une méthode de raffinement de grille de vitesse permettant d'effectuer des simulations d'écoulements stationnaires hypersoniques tridimensionnels inaccessibles auparavant. Le raffinement s'effectue de manière automatique en fonction des données d'entrées. Le gain obtenu est de 7 pour les calculs 2D axisymétrique et de 25 pour les calculs 3D. Ce type d'adaptation automatique peut être adapté à toute méthode déterministe résolvant un modèle cinétique avec une grille de vitesse cartésienne.

Références

- [1] C. BARANGER, J. CLAUDEL, N. HÉROUARD, L. MIEUSSENS, "Locally refined discrete velocity grids for stationary rarefied flux simulations", *J. of Comput. Phys.*, **257**, p. 572-593 (2014).
- [2] P.L. BATHNAGAR, E.P. GROSS, M. KROOK, "A model for collision processes in gases I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems", *Phys. Rev.*, **94**, p. 511-525 (1954).

Simulation d'électrons de très basse énergie pour la microélectronique

■ M. RAINE, P. PAILLET, M. GAILLARDIN / CEA – DAM Île-de-France

L'étude de la sensibilité radiative de technologies électroniques intégrées nécessite une simulation toujours plus détaillée des dépôts d'énergie ionisante. Les codes de transport actuels étant inadaptés, nous avons développé de nouveaux modèles permettant de suivre pas à pas des électrons de quelques eV dans le silicium, afin d'atteindre une précision nanométrique sur la forme des dépôts d'énergie, à l'échelle des composants électroniques actuels.

La simulation de systèmes électroniques sous irradiation est un enjeu critique dans de nombreux domaines, tels que les missions spatiales, l'instrumentation des centrales nucléaires ou certains équipements médicaux. Avec la diminution constante de leur taille, l'évaluation précise de la sensibilité de composants requiert une description de plus en plus détaillée des profils de dépôts d'énergie induits par des particules chargées incidentes. Le code Monte Carlo de simulation des interactions particule-matière Geant4 est un outil adéquat pour traiter cette question, avec toutefois des limites pour les électrons d'énergie inférieure à quelques centaines d'eV. En effet, les modèles standards d'ionisation ne permettent pas de les générer ni de suivre leur trajectoire à ces énergies, pourtant nécessaires à la simulation dans des volumes nanométriques. Nous avons donc développé de nouveaux modèles de génération et de transport d'électrons dans le silicium (matériau principal de la microélectronique), implémentés dans Geant4 sous le nom de « MicroElec ».

Description de la théorie

MicroElec permet de simuler deux processus physiques :

- ▶ l'ionisation, i.e. l'éjection d'un électron d'un atome cible par une particule chargée incidente ;
- ▶ la diffusion élastique des électrons.

Nos développements se sont concentrés sur le

premier processus. La diffusion élastique est traitée par l'utilisation de sections efficaces tabulées par l'ICRU (*International Commission on Radiation Units*).

Les données implémentées dans Geant4 sont des sections efficaces et sections efficaces différentielles inélastiques, calculées à l'aide de la théorie de la fonction diélectrique complexe $\epsilon(\omega, \vec{q})$. $\hbar\omega$ et \vec{q} sont respectivement l'énergie et le moment transférés de la particule incidente à un électron du matériau cible, \hbar étant la constante de Planck réduite et ω la fréquence plasma. Tous les calculs sont basés sur la modélisation de la fonction de perte d'énergie ou *Energy-Loss Function* (ELF) :

$$ELF(\hbar\omega, \vec{q}) = \text{Im} \left[\frac{-1}{\epsilon(\omega, \vec{q})} \right]$$

avec $\text{Im}[\]$ la partie imaginaire d'une variable complexe. L'ELF est approchée par une somme de fonctions [1], dont chaque élément correspond à une énergie d'ionisation du silicium. Les sections efficaces différentielles sont calculées pour chaque couche atomique (chaque élément de la somme) par intégration de l'ELF sur \vec{q} . Une seconde intégration sur $\hbar\omega$ permet d'obtenir les sections efficaces en fonction de l'énergie de la particule incidente.

Les modèles MicroElec ont ainsi été développés et validés pour des électrons incidents de 16,7 eV à 100 MeV [1,3], et pour des protons et ions lourds incidents de 50 keV/nucléon à 10 GeV/nucléon [2,3].

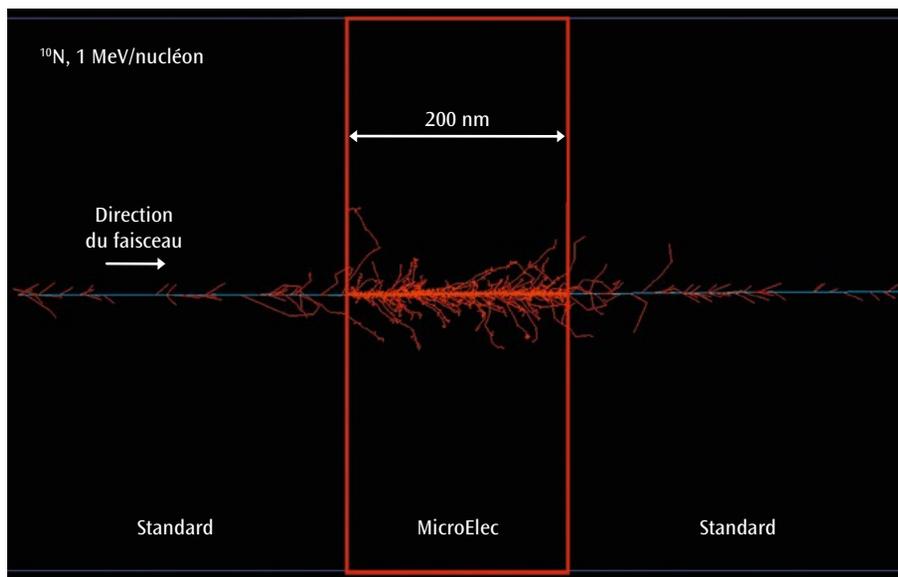


Figure 1. Exemple d'utilisation combinée des processus détaillés MicroElec (activés uniquement dans la tranche centrale) et des processus Geant4 Standard. En bleu, la trace projetée de l'ion incident, en rouge les électrons secondaires.

Utilisation pratique des modèles

Les calculs MicroElec requièrent une puissance de calcul importante et ne sont pour l'instant implémentés que pour le silicium. À l'inverse, les processus Geant4 Standard sont nettement moins gourmands en puissance de calcul, moins détaillés, mais couvrent de nombreux matériaux. De plus, l'impact réel de calculs détaillés se fait surtout sentir dans de petits volumes cibles, tels que le volume sensible d'un transistor, généralement inclus dans une géométrie complexe plus large, impliquant différents matériaux. Il peut ainsi s'avérer pertinent de combiner les processus Standard et MicroElec dans la même simulation, comme illustré sur la **figure 1**. Dans cet exemple, MicroElec n'est utilisé que dans une tranche de silicium de 200 nm, au centre de la géométrie, tandis que les processus Standard sont utilisés partout ailleurs. La trajectoire d'un ion incident ^{10}N de 1 MeV/nucléon apparaît en bleu; les électrons secondaires générés sont en rouge. Ils sont clairement plus nombreux dans la tranche MicroElec centrale, où tous les électrons sont explicitement générés, que dans le reste de la géométrie où seuls les électrons d'énergie supérieure à 1 keV sont produits.

Conclusion

Des modèles détaillés de transport et de génération d'électrons de très basse énergie dans le silicium ont été développés et implémentés dans le code Geant4, utilisables en combinaison avec

des modèles classiques. Ces nouveaux modèles permettent une étude détaillée du comportement de composants électroniques nanométriques sous irradiation, comme illustré dans la référence [4]. Les futurs travaux s'attacheront à élargir la base de données des matériaux couverts par ces modèles.

Références

- [1] A. VALENTIN, M. RAINE, J.-E. SAUVESTRE, M. GAILLARDIN AND P. PAILLET, "Geant4 physics processes for microdosimetry simulation: very low energy electromagnetic models for electrons in silicon", *Nucl. Instr. Meth. B*, **88**, p. 66-73 (2012).
- [2] A. VALENTIN, M. RAINE, M. GAILLARDIN AND P. PAILLET, "Geant4 physics processes for microdosimetry simulation: very low energy electromagnetic models for protons and heavy ions in silicon", *Nucl. Instr. Meth. B*, **287**, p. 124-129 (2012).
- [3] M. RAINE, M. GAILLARDIN AND P. PAILLET, "Geant4 Physics Processes for Silicon Microdosimetry Simulation: Improvements and extension of the energy-range validity up to 10 GeV/nucleon", *Nucl. Instr. Meth. B*, **325**, p. 97-100 (2014).
- [4] M. RAINE, A. VALENTIN, M. GAILLARDIN AND P. PAILLET, "Improved simulation of ion track structures using new Geant4 models - Impact on the modeling of advanced technologies response", *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, **59**, p. 2697-2703 (2012).

Optimisation des opérations collectives dans les applications MPI+OpenMP

A. MAHÉO - W. JALBY / Exascale Computing Research Laboratory, Versailles
 P. CARRIBAUT - M. PERACHE - J. JAEGER / CEA – DAM Île-de-France

La plupart des applications scientifiques sont parallélisées avec la bibliothèque d'échanges de messages MPI (Message Passing Interface). Le développement des processeurs multi-cœurs dans les grappes de calcul incite à l'utilisation de MPI combinée avec un modèle à mémoire partagée de type OpenMP dans les applications parallèles. Cependant, l'exploitation des ressources matérielles peut être sous-optimale avec de tels modèles. Nous proposons le concept de communications collectives hybrides, utilisant les threads (fils d'exécution indépendants) OpenMP pour paralléliser les collectives MPI. Nous validons notre approche sur plusieurs bibliothèques MPI, améliorant le temps total d'exécution d'une application réelle jusqu'à un facteur 5,29.

Introduction

De nos jours, les processeurs multi-cœurs sont les blocs de base des supercalculateurs. La tendance est à la diminution de la quantité de mémoire disponible par cœur. Pour permettre une meilleure utilisation de la mémoire, une solution possible est de mélanger le modèle de programmation MPI avec un modèle à mémoire partagée à base de threads comme OpenMP.

Une approche est d'ajouter progressivement des directives OpenMP sur les boucles [1]. Hors des parties OpenMP, seule une fraction des cœurs est utilisée. Nous proposons une solution à ce manque de parallélisme en ciblant les opérations collectives MPI (opérations mettant en jeu un ensemble de

tâches MPI) qui peuvent représenter jusqu'à 50 % du temps d'exécution [2].

Notre approche [3] adapte des travaux d'optimisation de collectives MPI via une parallélisation des opérations en mémoire partagée [4], en l'appliquant à des codes hybrides, hors des régions OpenMP, pour exploiter les cœurs libres.

Utilisation d'OpenMP dans les opérations de réduction (MPI_Allreduce)

Dans notre solution, nous proposons de découper le vecteur des éléments d'une opération de réduction collective (fonction MPI_Allreduce) en

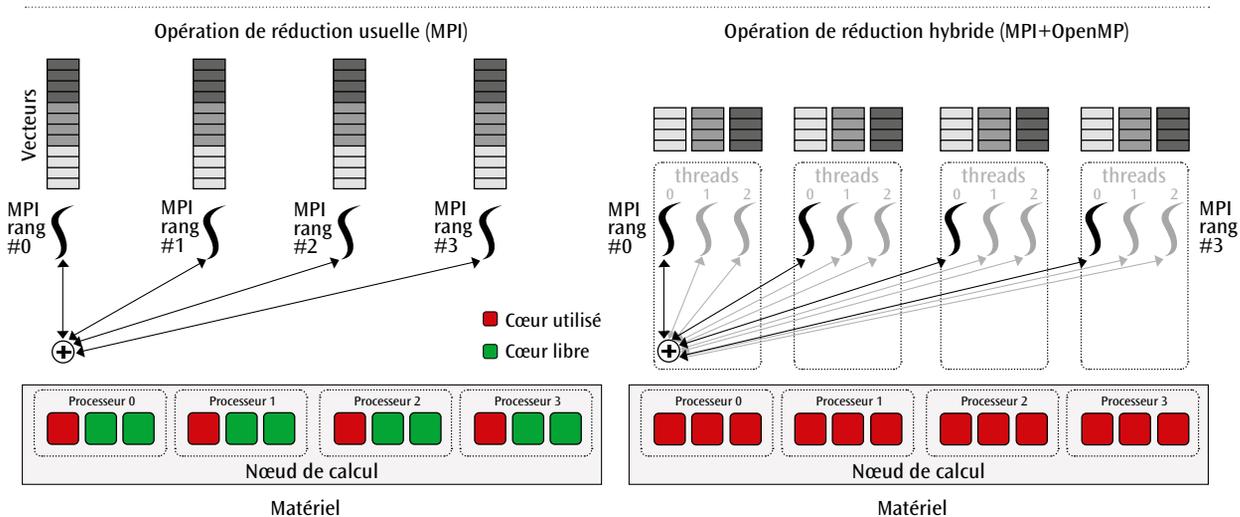


Figure 1. MPI_Allreduce s'exécutant sur 4 processeurs de 4 cœurs. À gauche : exécution classique sur 4 cœurs. À droite : exécution hybride utilisant les 16 cœurs disponibles.

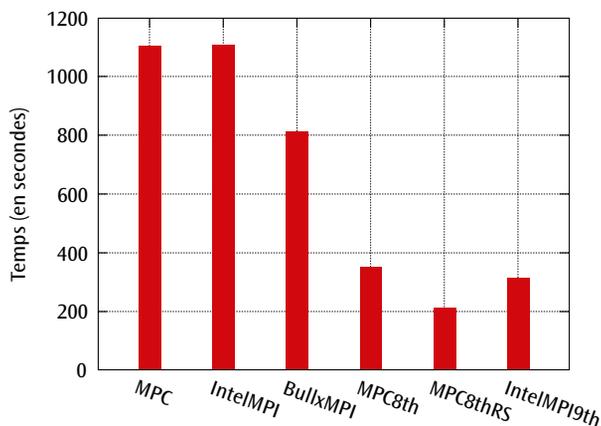


Figure 2. Comparaison du temps d'exécution d'un code Monte Carlo avec MPI_Allreduce classique et hybride.

plusieurs blocs. Chaque cœur disponible a alors la charge de la réduction d'un bloc. Ainsi, chaque thread OpenMP calcule une sous-partie du vecteur contenant les données initiales en réalisant une réduction plus petite. L'utilisation d'opérations indépendantes permet de paralléliser les phases de calcul et de communication de la réduction globale.

La figure 1 représente un exemple d'application sur un nœud de calcul avec 4 processeurs contenant 3 cœurs, pour un total de 12 cœurs. Pour une application MPI+OpenMP s'exécutant avec 4 processus MPI, l'approche la plus courante est de placer un processus MPI par processeur. La partie gauche de la figure 1 montre le comportement de la réduction hors d'une région OpenMP : seuls 4 cœurs vont réaliser cette opération, laissant 8 cœurs complètement inutilisés. La partie droite de la figure 1 montre notre solution, répartissant le calcul sur 3 threads et utilisant tous les cœurs disponibles pour réaliser une réduction hybride.

Résultats expérimentaux

Nous avons implémenté ce concept dans une bibliothèque capturant les appels à MPI_Allreduce.

Les tests ont été réalisés avec une application réelle MPI+OpenMP simulant les interactions de particules avec une méthode de Monte Carlo [2], sur 4 nœuds de calcul contenant chacun 16 processeurs octo-cœurs. Ce code effectue une réduction pour mettre à jour le nombre de particules à chaque pas de temps. Nous avons testé notre approche sur cette opération avec divers supports exécutifs : IntelMPI 4.1.3, MPC 2.4.1 [5] et BullxMPI 1.1.16. Chaque cœur accueille un thread OpenMP, et seul le nombre de threads actifs pour la collective a été évalué.

La figure 2 compare le temps d'exécution de cette application avec les différentes implémentations MPI,

en ne plaçant qu'un processus MPI par nœud. Avec MPC, la meilleure hybridation de MPI_Allreduce est obtenue en utilisant 8 threads, réduisant le temps d'exécution d'un facteur 3,14. Pour IntelMPI, une hybridation avec 9 threads apporte la meilleure performance, avec un facteur 3,54 de réduction du temps d'exécution. Dans cette configuration, tous les threads d'un processus vont réaliser leur propre réduction suivant le même schéma de communications, générant donc une saturation localisée des accès à la mémoire [3].

Pour éviter ce problème, nous proposons de décaler le rang de chaque thread cycliquement dans leur sous-communicateur, donnant ainsi un rôle différent à chaque thread OpenMP lors de la réduction interne. Nous obtenons une amélioration supplémentaire de 68% avec MPC (barre MPC8thRS sur la figure 2), pour une réduction du temps total d'un facteur 5,29.

Conclusion

Dans cet article, nous proposons une optimisation des applications MPI+OpenMP en parallélisant les opérations collectives sur les cœurs inutilisés. Les résultats expérimentaux montrent une amélioration du temps d'exécution d'un facteur 5,29 sur une application réelle.

Des travaux futurs visent à prédire la meilleure combinaison hybride en considérant la taille du vecteur, et à améliorer le décalage de rang en tenant compte de la topologie matérielle et réseau.

Références

- [1] G. HAGER, G. JOST, R. RABENSEIFNER, "Communication characteristics and hybrid MPI/OpenMP parallel programming on clusters of multi-core SMP nodes", *Proc. of the Cray User Group 2009*, Atlanta, USA, May 4-7, 2009, D. Gigrich, N. P. Cardo (Eds.), 9B-3 (2009).
- [2] D. DUREAU, G. POËTTE, "Hybrid parallelism models for neutron Monte Carlo solver in an AMR framework", *Proc. of the Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo SNA&MC 2013*, Paris, France, October 27-31, 2013, D. Caruge, C. Calvin, C.M. Diop, F. Malvagi and J.-C. Trama (Eds.), 04202 (2014).
- [3] A. MAHEO, P. CARRIBAUT, M. PERACHE, W. JALBY, "Optimizing Collective Operations in Hybrid Applications", *Proc. of the 21st European MPI Users' Group Meeting (EuroMPI/ASIA 2014)*, Kyoto, Japan, September 9-12, 2014, J. Dongarra, Y. Ishikawa, A. Hori (Eds.), p.121-122 (2014).
- [4] A. R. MAMIDALA, R. KUMAR, D. DE, D. K. PANDA, "MPI collectives on modern multicore clusters : Performance optimizations and communications characteristics", *Proc. of the 8th IEEE International Symposium on Cluster Computing and the Grid (CCGRID 2008)*, Lyon, France, May 18-21, 2008, Priol T., Lefevre L., Buyya R. (Eds.), p130-137 (2008).
- [5] CARRIBAUT, M. PERACHE, H. JOURDREN, "Enabling low-overhead hybrid MPI/OpenMP parallelism with MPC", *Proc. of the 6th International Workshop on OpenMP (IWOMP 2010)*, Tsukuba, Japan, June 14-16, 2010, Sato M., Hanawa T., Müller M., Chapman B., de Supinski B. (Eds.), p1-14 (2010).

Réponses vibratoires non linéaires

M. CLAEYS - J.-P. LAMBELIN - B. ALCOVERRO / CEA – CESTA

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

L'étude des réponses vibratoires des structures se fait traditionnellement par analyse modale expérimentale et numérique. Ces méthodes reposent sur l'hypothèse que les réponses vibratoires sont linéairement dépendantes du niveau d'excitation. En réalité, les grands déplacements, le frottement, les contacts ou encore les matériaux non élastiques induisent des réponses vibratoires non linéaires. Dans ces premiers travaux au CEA – DAM, plusieurs méthodes de simulation ont été introduites et appliquées à un cas d'étude, puis validées expérimentalement. Cette nouvelle approche de la dynamique vibratoire permet de comprendre et de prédire les réponses vibratoires non linéaires.

Les méthodes linéaires de calcul des structures ne permettent pas de simuler des modes de résonance qui évoluent avec le niveau d'excitation. Pour y pallier le recours à l'expérience est inévitable. On peut approcher le comportement expérimental de la structure par plusieurs modèles linéaires qui ne sont valables qu'à certains niveaux d'excitation. Les modèles numériques ne sont ainsi pas prédictifs pour des niveaux d'excitation non observés expérimentalement.

Expériences

Pour observer et simuler ces réponses vibratoires non linéaires, une poutre bi-encastée a été étudiée (figure 1). La structure est excitée à sa base par un pot vibrant et la réponse est mesurée par un accéléromètre au centre de la poutre. Plusieurs comportements vibratoires non

linéaires sont observés (figure 2). La fréquence de résonance augmente avec le niveau d'excitation (raidissement). À fort niveau d'excitation, des discontinuités sont présentes. À la résonance maximale, un changement incrémental de la fréquence d'excitation provoque un grand « saut » de l'amplitude de la réponse. Un phénomène d'hystérésis est également présent : la courbe de réponse fréquentielle n'est pas la même selon que l'on excite la structure des basses fréquences vers les hautes ou l'inverse. Enfin la réponse vibratoire est multi-harmonique. L'excitation est sinusoïdale de pulsation Ω , mais la réponse stationnaire du système est une superposition de signaux à Ω , 2Ω , 3Ω , etc. Sur la figure 2 seule la composante harmonique (1Ω) est tracée, les autres composantes harmoniques, tracées sur la figure 3, ont été obtenues par une méthode de traitement du signal avancée [1].

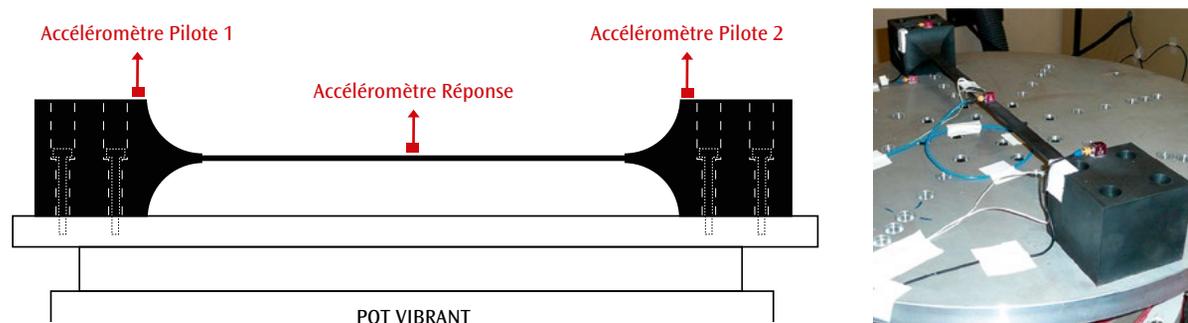


Figure 1. Schéma et photographie du cas d'étude, une poutre bi-encastée.

Simulation

La non-linéarité s'explique ici par les grands déplacements de la poutre. La fréquence de résonance de la poutre augmente avec la tension interne (comme une corde de guitare). Lorsque la poutre oscille avec une amplitude importante (quelques millimètres), elle tire sur ses encastresments et génère une tension. Cette tension oscille aussi et en moyenne, elle croît avec le niveau d'excitation. On explique ainsi l'augmentation de la fréquence de résonance. Au niveau mathématique, un terme cubique apparaît dans l'équation de la dynamique, qui devient une équation de Duffing. La solution de cette équation peut être obtenue par de nombreuses méthodes [2]. Une méthode de développement multi-échelles, une méthode de tir basée sur l'intégration temporelle et une méthode de balance harmonique ont été utilisées [1] et comparées à l'expérience. Les deux dernières méthodes sont numériques et donnent des résultats identiques qui sont comparés à l'expérience sur la **figure 2**. On retrouve par la simulation les phénomènes de raidissement, de saut et d'hystérésis.

La méthode de balance harmonique est basée sur une décomposition en série de Fourier tronquée de la solution. Elle permet directement de calculer les composantes harmoniques de la réponse à 2Ω et 3Ω (**figure 3**). L'influence du signal d'entrée sur la réponse multi-harmonique est très importante.

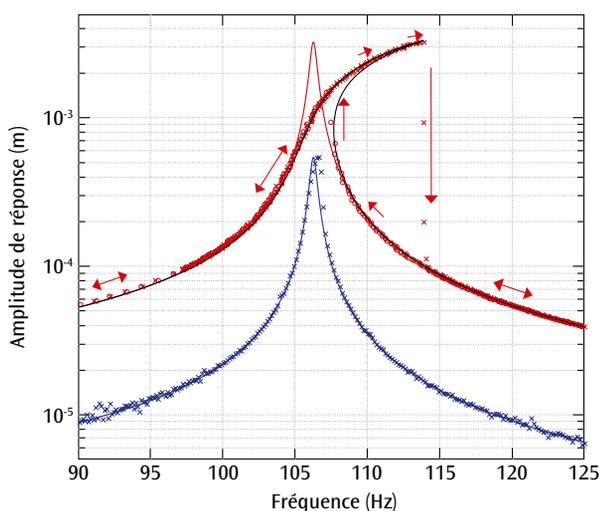


Figure 2. Réponse fréquentielle à faible (bleu) et fort (rouge) niveau d'excitation. Les résultats expérimentaux sont représentés par des croix et des cercles, selon qu'ils ont été effectués des basses fréquences vers les hautes ou inversement. Les résultats de simulations linéaires sont représentés en trait plein bleu et rouge, le résultat de simulation vibratoire non linéaire en noir.

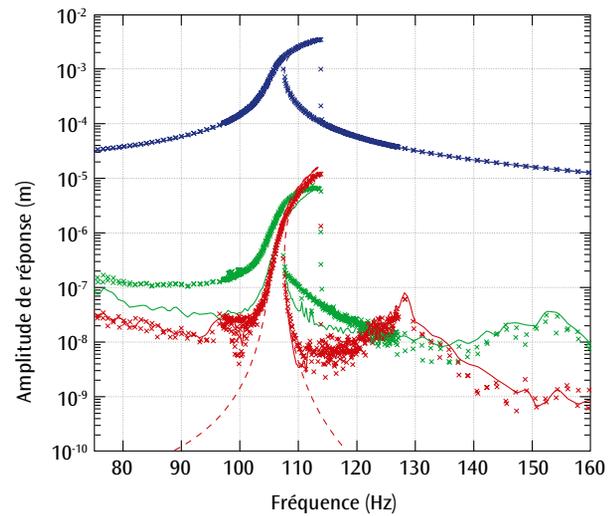


Figure 3. Décomposition en harmoniques de la réponse vibratoire à fort niveau d'excitation. Les harmoniques 1, 2 et 3 sont représentées en bleu, vert et rouge, les croix représentent les mesures. Les courbes en trait plein correspondent aux résultats de simulation vibratoire non linéaire avec une excitation mesurée multi-harmonique, les courbes en pointillés correspondent à une excitation idéale mono-harmonique.

Le signal d'excitation expérimental est lui-même multi-harmonique et la prise en compte de ce signal d'entrée dans la simulation permet de simuler très correctement le signal de sortie. Les calculs avec une entrée multi-harmonique mesurée ou bien mono-harmonique idéale permettent d'expliquer l'origine des signaux multi-harmoniques. Ils peuvent être uniquement dus au signal d'entrée, c'est le cas de l'harmonique 2, ou bien être une conséquence du terme non-linéaire, c'est le cas de la résonance observée à l'harmonique 3.

Conclusion

Cette étude montre l'intérêt de considérer les effets vibratoires non linéaires dans une démarche de dimensionnement des systèmes mécaniques. La méthode de simulation présentée permet une prédiction efficace des réponses vibratoires non linéaires et ainsi une compréhension fine des phénomènes observés. Désormais des travaux sont en cours pour appliquer cette méthode à des structures industrielles modélisées par la méthode des éléments finis avec d'autres types de non linéarités.

Références

- [1] M. CLAEYS, J.-P. LAMBELIN, J.-J. SINOU, B. ALCOVERRO, "Multi-harmonic measurements and numerical simulations of nonlinear vibrations of a beam with non-ideal boundary conditions", *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat.*, **19**, p. 4196-4212 (2014).
- [2] A.H. NAYFEH, D.T. MOOK, *Nonlinear oscillations*, John Wiley & sons, New-York (1979).

PRIX DE L'INGÉNIEUR DE L'ANNÉE

Pierre Vivini, chef du projet Laser MégaJoule (LMJ), a reçu le 3 décembre 2014 le prix de l'ingénieur de l'année décerné par *L'Usine Nouvelle*. Ce trophée récompense, depuis onze ans, des parcours d'ingénieurs « passionnés et passionnants » pour faire découvrir au grand public l'excellence technologique des entreprises françaises et stimuler son goût des sciences et de la technologie. Cette récompense vient saluer la mise en service récente du LMJ, événement de portée internationale, fruit d'un travail exceptionnel mené par les équipes de la DAM depuis 1996, tant sur le plan scientifique et technologique qu'en termes d'ingénierie et de développement industriel, dont Pierre Vivini vient de conduire avec succès la dernière phase.

MÉDAILLE BRIDGMAN : UNE MÉDAILLE D'OR POUR DES CELLULES À ENCLUME DIAMANT

La médaille « Bridgman » 2015, prix international qui récompense tous les deux ans les meilleurs chercheurs dans le domaine des hautes pressions, a été attribuée à **Paul Loubeyre** du CEA – DAM Île-de-France. Paul Loubeyre a mis en place une structure avec la volonté de produire des données dans des domaines extrêmes de pression, au-delà de quelques millions d'atmosphères, avec la même précision que celle atteinte dans les conditions ambiantes. Cet objectif ambitieux est atteint en développant de nouvelles techniques expérimentales, utilisant les presses enclumes diamant auprès des grands instruments, synchrotrons et lasers de puissance. Ses travaux, allant d'un système quantique simple comme l'hydrogène très dense à de nouveaux matériaux moléculaires complexes, ont des applications directes dans les domaines de la planétologie, de la fusion par confinement inertiel et de la synthèse de nouveaux matériaux.

TROPHÉE NRBC

Lors de la conférence internationale sur les menaces terroristes non conventionnelles NCT CBRNE Asia, qui s'est tenue à Phnom Penh (Cambodge) du 14 au 16 octobre 2014, le CEA a remporté le prix de la catégorie « Innovation NRBC-E » avec la technologie BIOGEL SYS. Ce gel de décontamination biologique et chimique a été développé par la Direction de l'énergie nucléaire (DEN) dans le cadre du programme interministériel de R&D NRBC-E piloté par la Direction sécurité non-prolifération (DAM/DSNP). Cette technologie a été licenciée à la société NBC-SYS du groupe NEXTER.

PALMES ACADÉMIQUES

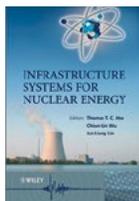
Grade de chevalier:

Sylvie DEPIERREUX
(CEA – DAM Île-de-France)

Grade d'officier:

Denis JURASZEK
(CEA – DAM Île-de-France)

LIVRES PARUS EN 2014



INFRASTRUCTURE SYSTEMS FOR NUCLEAR ENERGY

J. MAZARS (Laboratoire 3SR, Université de Grenoble), B. CAPRA (Oxand), **Alain ROUQUAND, Christophe PONTIROLI** (CEA – Gramat)

Chapter "Concrete Properties, Safety and Sustainability of Nuclear Power Plant Infrastructures: New Tools and Themes for Future Research"

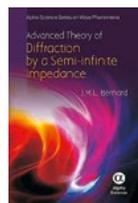
Édition Wiley and Sons, Ltd., Chichester, UK.
572 pages. ISBN 978-1-119-97585-4.



MAÎTRISER LES RISQUES INDUSTRIELS DE CONTAMINATION

Isabelle TOVENA-PECAULT (CEA – CESTA)

Éditions Lavoisier.
240 pages. ISBN 978-2-7430-1990-7.



ADVANCED THEORY OF DIFFRACTION BY A SEMI-INFINITE IMPEDANCE CONE

Jean-Michel BERNARD (CEA – DAM Île-de-France)

Alpha Sciences Intl Ltd., Oxford, UK.
170 pages. ISBN 978-1-8426-5776-8.

HABILITATIONS À DIRIGER LES RECHERCHES EN 2014

JEAN-MICHEL DAUGAS

CEA – DAM Île-de-France
Investigation de la structure via les moments nucléaires.

LAURENT LAMAIGNERE

CEA – CESTA
Métrologie de la tenue au flux laser : de la qualification des optiques à la physique de l'endommagement laser.

FRANCK LEDOUX

CEA – DAM Île-de-France
Maillage hexaédrique pour la simulation numérique: Représentations et algorithmes.

XAVIER RIBEYRE

CEA – CESTA
Contributions à la physique des hautes densités d'énergie.

NICOLAS RICHARD

CEA – DAM Île-de-France
Simulation depuis l'échelle atomique pour le durcissement des composants électroniques et optoélectroniques.

MARINA OLAZABAL-LOUMÉ

CEA – CESTA
Modélisation et méthodes de contrôle des instabilités hydrodynamiques dans le cadre de la fusion inertielle pour l'énergie.

DENIS ROCHAIS

CEA – Le Ripault
Contribution à la caractérisation et à la modélisation des propriétés thermiques de matériaux hétérogènes.

GUILLAUME DUCHATEAU

CEA – CESTA
Modifications de la matière condensée par une impulsion laser d'intensité modérée.

THIERRY D'ALMEIDA

CEA – Gramat
Exploration en régime dynamique d'états transitoires de la matière condensée soumise à diverses sollicitations: électronique, photonique, mécanique et magnétique.

5TH EUROPEAN WORKSHOP ON HPC CENTRE INFRASTRUCTURES

Organisé en avril par le CEA – DAM Île-de-France, le 5^e workshop européen dédié aux infrastructures et centres HPC a regroupé une soixantaine de spécialistes de grands centres de calcul européens, américains et australiens et représentants de constructeurs de supercalculateurs. Le CEA – DAM Île-de-France est un des fondateurs de ce type de séminaire, lancés en 2009, avec les centres de calcul CSCS en Suisse et LRZ en Bavière.

11^E JOURNÉE SCIENTIFIQUE DU CCRT

La 11^e journée scientifique du CCRT (Centre de calcul pour la recherche et la technologie) s'est tenue le 13 novembre 2014 dans l'amphithéâtre du **TGCC (Très grand centre de calcul)** à Bruyères-le-Châtel. Un peu plus de 140 participants, majoritairement issus du monde industriel, sont venus assister aux témoignages des partenaires du CCRT. Modélisation de la chevelure, perspectives de médecine personnalisée, définition et conception de moteurs d'avion au rendement optimisé : le panorama des résultats obtenus au CCRT et les perspectives envisagées ont montré la diversification des secteurs industriels concernés par la simulation numérique et les enjeux de la maîtrise des données associées (BigData). En clôture, le CEA – DAM Île-de-France a présenté le développement des futures technologies du calcul haute performance (HPC), que ce soit en matière d'environnement des centres de calcul ou d'architecture de stockage.

JOURNÉES SUR LA CHIMIE À LA DAM

Le CEA – DAM Île-de-France a organisé les 25 et 26 novembre au **TGCC** les 2^e journées sur le thème « La chimie au CEA – DAM ». Avec une centaine de participants du monde académique comme du monde industriel (Air Liquide, Veolia, Héraklès...), ces journées ont permis de faire le point sur les avancées récentes des études menées par la DAM, notamment celles en partenariat avec les universités et les industriels français. Des trois thématiques de ces rencontres – instrumentation, méthodologie et simulation – il ressort notamment que les nouvelles possibilités offertes par le calcul haute performance (HPC) permettent de faire progresser les connaissances sur le sujet pour des échelles de distance et de temps très diverses.

COLLOQUE SUR LA PROJECTION THERMIQUE DE SUSPENSIONS

Le CEA Le Ripault a organisé à Tours, avec le soutien de la Région Centre, les 8 et 9 octobre 2014, la 6^e édition de l'International Workshop on Solution and Suspension Thermal Spraying (S2TS). Ce workshop est consacré à la recherche et au développement industriel de revêtements nanostructurés par projection thermique en voie liquide. Avec 25 présentations, la cinquantaine de participants de différentes nationalités (Allemagne, France, Italie, Canada, Pologne, Suède, Japon, Royaume Uni) ont exposé leurs travaux de plus en plus centrés sur les applications et les performances accessibles avec ce type de revêtements. Cette manifestation reçoit le soutien de l'European Thermal Spray Association et une sélection des meilleurs articles sera publiée dans un numéro spécial du Journal of Thermal Spray Technology à paraître en août 2015.

10TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON HIGH ENERGY DENSITY LABORATORY ASTROPHYSICS

La 10^e édition de la conférence internationale *High Energy Density Laboratory Astrophysics* (HEDLA 2014) s'est déroulée à Bordeaux du 11 au 16 mai. Depuis sa création en 1996, c'est la première fois que cette conférence se déroule hors des États-Unis. Organisée par le CEA – DAM Île-de-France en collaboration avec l'Observatoire de Paris, l'Observatoire de Bordeaux, le CELIA (Bordeaux) et le centre du CESTA, cette édition a rassemblé plus de 130 scientifiques de 19 nationalités. HEDLA 2014 était axée sur l'astrophysique et la physique des plasmas avec des exposés relatifs aux expériences d'astrophysique de laboratoire menées sur les plus grands lasers du monde. Cette conférence s'est achevée par la visite du laser Mégajoule.

LES JOURNÉES SOL-GEL DU CEA – DAM

Pour leur 10^e édition, les Journées Sol-Gel organisées à Tours par le CEA – Le Ripault, avec le soutien de la Région Centre, ont réuni du 13 au 15 mai, une centaine de participants dont 30 % d'industriels autour de différents thèmes : l'énergie, l'environnement, les nanomatériaux... L'objectif de ces journées est de rassembler les acteurs francophones de la chimie et des procédés sol-gel, de faire le point sur les connaissances récentes, les réalisations émergentes et leur potentiel.

FORUM SUR LA QUANTIFICATION DES INCERTITUDES

Les 1^{er} et 2 octobre, le CEA – DAM Île-de-France a organisé un forum dédié aux méthodes de quantification des incertitudes dans les simulations, les expériences, la métrologie et les procédés de fabrication. Il a rassemblé 120 personnes, dont 35 spécialistes extérieurs à la DAM.

PREMIÈRES JOURNÉES DES UTILISATEURS ABAQUS

Les premières Journées des utilisateurs Abaqus ont été organisées les 4 et 5 juin par le CEA – CESTA. Abaqus est un code de calcul utilisé pour des simulations numériques en mécanique, en thermique et en thermomécanique. Ces journées, qui ont réuni une cinquantaine de personnes (utilisateurs, développeurs, intégrateurs), ont permis d'échanger sur les méthodes de modélisation et techniques de calcul et les développements spécifiques aux besoins.

PERSPECTIVES ON NUCLEAR DATA FOR THE NEXT DECADE

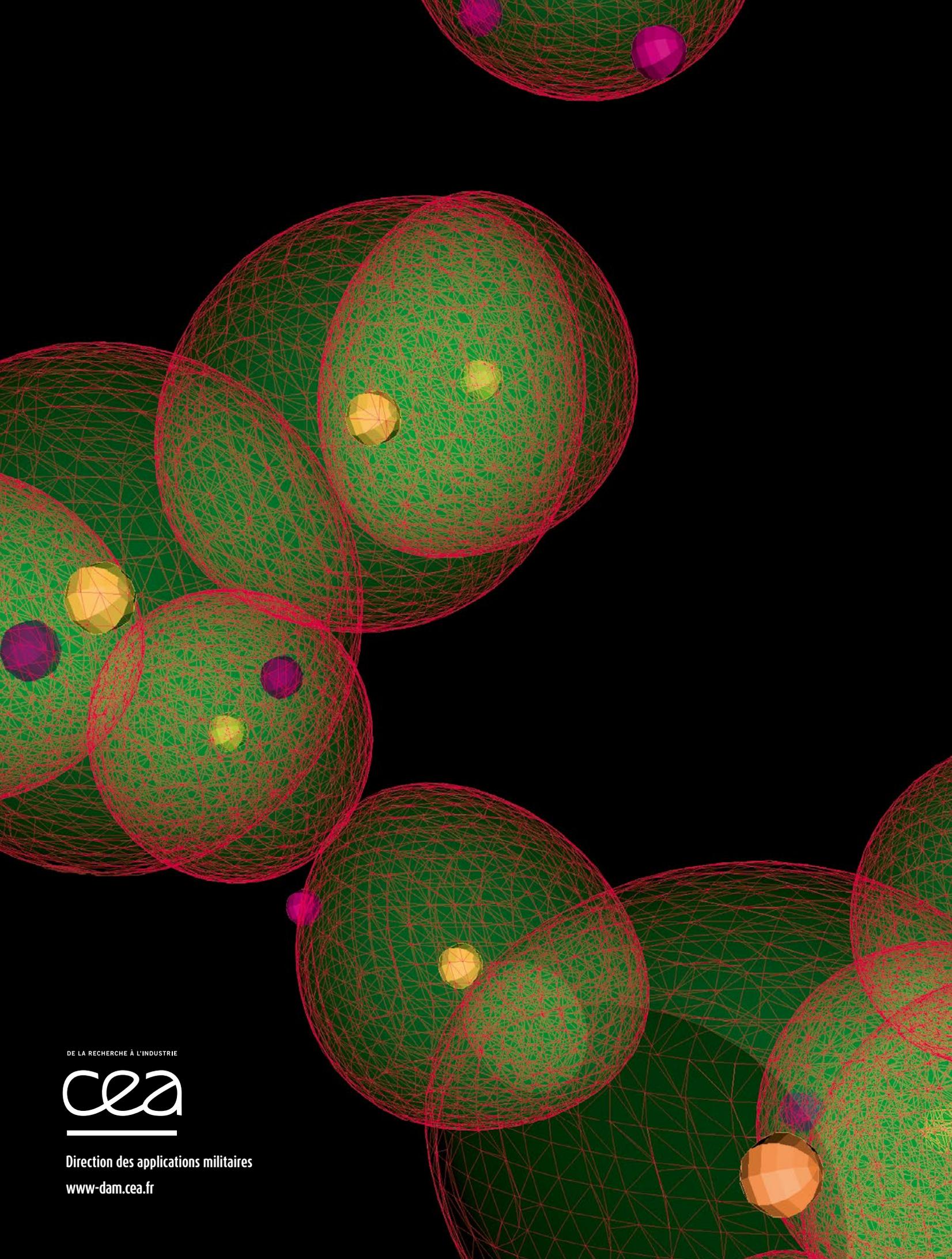
La deuxième édition du workshop international, « Perspectives on Nuclear Data for the Next Decade », P(ND)2-2, s'est déroulée au **TGCC** du CEA du 14 au 17 octobre. Organisée par le CEA – DAM Île-de-France et soutenue par l'Agence de l'énergie nucléaire (AEN), elle a réuni près de 70 participants internationaux. L'objectif était de faire le point sur l'état des connaissances en matière de données nucléaires et d'identifier les axes de recherche pour les dix prochaines années.

65^E MEETING DE L'AEROBALLISTIC RANGE ASSOCIATION

Le 65^e meeting de l'*Aerobalistic Range Association* (ARA) a été organisé à Arcachon du 20 au 24 octobre par le CEA – CESTA. Cette manifestation, qui réunit des scientifiques de l'Otan sur le thème des lanceurs de projectiles et des applications associées, a été marquée par la participation importante des grands laboratoires américains (LLNL, LANL et Sandia), d'universités, d'industriels et des représentants des centres DAM.

SÉMINAIRE SUR LA TURBULENCE

Le CEA – DAM Île-de-France a organisé le 3 juin au **TGCC** du CEA, la réunion annuelle du Groupe de recherche « Turbulence » du CNRS, qui a rassemblé plus de 70 spécialistes venant de laboratoires mixtes CNRS-Université et de grands établissements publics. Le thème était la phénoménologie de la turbulence, et plus particulièrement la transition à la turbulence, les écoulements induits par des variations de température et les effets de compressibilité.



DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE



Direction des applications militaires
www-dam.cea.fr