Solution Solution BILAN 2018 DES PUBLICATIONS ET DE LA VIE SCIENTIFIQUE DE LA DIRECTION DES APPLICATIONS MILITAIRES







CHOCS **AVANCÉES** N° 13 - juin 2019

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives

Revue chocs avancées nº 13

Bilan 2018 des publications et de la vie scientifique de la Direction des applications militaires.

Image de couverture : Intensité des variations saisonnières des azimuts de détections infrasonores, vues sur la station IS17 de l'Otice en Côte d'Ivoire; l'origine des variations est liée à l'évolution saisonnière de la dynamique de l'atmosphère. © CEA - DAM. Voir aussi A. Le Pichon, É. Blanc, A. Hauchecorne, Infrasound monitoring for atmospheric studies, Springer Nature, Londres, 2018.

Directeur de la publication : Laurence BONNET. Coordinateur scientifique : Hélène HÉBERT. Comité scientifique : Christelle BARTHET, Daniel BOUCHE, Serge BOUQUET, Gilles BOURGÉS, Michel BOURZEIX, Remo CHIAPPINI, Jean-François CLOUET, Patrick DAVID, Francis HARDOUIN, Hervé JOURDREN, Stéphane LOUBIER, Pierre-Henri MAIRE, Jean-Luc MIQUEL, Gilles ROY, Olivier VACUS. Rédacteur en chef : Jean-Marc LABORIE. Création, réalisation et impression : EFIL/www.efil.fr. Conformité : Régine REGNAULT. Correction : Stylience / www.stylience.fr. Diffusion et abonnement : Régis VIZET.

La revue est consultable à l'adresse : www-dam.cea.fr

CEA/DAM

Institut supérieur des études nucléaires de défense (ISENDé) Bruyères-le-Châtel, F-91297 Arpajon Cedex Tél.: 33 (0)1 69 26 76 98 Courriel : chocs@cea.fr www-dam.cea.fr

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

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



SOMMAIRE

ÉDITORIAL	02
VIE SCIENTIFIQUE	04

INTERACTION RAYONNEMENT-MATIÈRE, PHYSIQUE DES PLASMAS

Utilisation de lasers de puissance pour l'étude des chocs d'accrétion en astrophysique de laboratoire......12 L VAN BOX SOM, E. FALIZE, C. BUSSCHAERT, J.-M. BONNET-BIDAUD, M. MOUCHET, A. CIARDI, M. KOENIG, B. ALBERTAZZI, T. MICHEL, G. RIGON, P. MABEY

PHYSIQUE NUCLÉAIRE

Effet de la force de Coriolis sur les noyaux	
atomiques N = 100	14
l. Gaudefroy, S. Péru, J. Aupiais	

PHYSIQUE DE LA MATIÈRE CONDENSÉE

Spectroscopie de la matière dense et tiède à des échelles de temps ultracourtes L LECHERBOURG, N. JOURDAIN, V. RECOULES, P. RENAUDIN, B. MAHIEU, K. TA PHUOC, F. DORCHIES	16
De nouvelles formes d'enclume de diamant pour étudier la matière très comprimée P. LOUBEYRE, A. DEWAELE, G. WECK, F. OCCELLI, O. MARIE Transition isolant-conducteur du deutérium fluide	18
à haute densité S. Brygoo, P. Loubeyre, P. Celliers, M. Millot, D. Fratanduono, J. Eggert, J. L. Peterson, N. Meezan, S. Le Pape, R. S. McWilliams, J. R. Rygg, G. Collins, A. Goncharov, R. Jeanloz, R. Hemley	20
Nouvelle stratégie pour comprendre la fusion de l'or L. SOULARD, V. RECOULES, Z. CHEN, M. MO, P. HERING, S. H. GLENZER, Y. Y. TSUI, A. NG	22
MATÉRIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE	24
Dynamique des spins et dynamique moléculaire couplée pour l'étude de nanomatériaux P. ThiBAUDEAU, J. TRANCHIDA, S. PLIMPTON, A. THOMPSON	24
MÉCANIQUE DES FLUIDES	26
Rôle des grands tourbillons dans la modélisation des zones de mélange turbulent 0. SOULARD, J. GRIFFOND, D. SOUFFLAND	26

MÉCANIQUE ET THERMIQUE

OPTIQUE ET OPTRONIQUE

30

32

40

46

Mise en œuvre de la technique d'amplification	
non linéaire par fibre optique pour l'évolution du laser PETAL	
F. HUGONNOT, P. MORIN, I. DUBERTRAND, A. MUSSOT, G. BOUWMANS	

INSTRUMENTATION, MÉTROLOGIE ET CONTRÔLE

Étude des matériaux sous choc par radio-interférométrie Doppler	.32
A. LEFRANÇUIS, J. LUC, Y. BARBARIN, B. RUUGIER, H. AUBERI Modélisation du rendement de piégeage du tritium	
atmosphérique par barbotage dans l'eau	.34
JM. DUDA, P. LE GUFF, Y. LEBLOIS, S. PUNSARD Vers l'étalonnage primaire de capteurs	
de pression infrasonore	.36
P. VINCENT, F. LARSONNIER, D. RODRIGUES	

COMPOSANTS ET Equipements électroniques 38

SCIENCES DU CLIMAT Et de l'environnement

14

16

(

Télédétection hyperspectrale des sites industriels......40 R. MARION, Y. PHILIPPETS, V. CARRERE, P.-Y. FOUCHER, X. BRIOTTET

HIMIE		44

MATHÉMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL

Un nouveau schéma volumes finis pour la simulation d'écoulements multimatériaux R-H. MAIRE, W. BOSCHERI, M. DUMBSER, R. LOUBÈRE	46
Optimiser les communications par du calcul parallèle P. CARRIBAULT, J. JAEGER, M. PÉRACHE, M. SERGENT, G. PAPAURE	48
Utilisation d'un microkernel pour accélérer les simulations numériques HPC D MARTINET R GEROELY ISHIKAWA	50
Techniques de parallélisation innovantes pour la simulation en dynamique moléculaire L. COLOMBET, R. PRAT, R. NAMYST	52

ÉDITO

Directrice scientifique de la Direction des applications militaires du CEA

2018, 60 ANS DE LA DIRECTION DES APPLICATIONS MILITAIRES

orsque le CEA est créé en 1945, l'utilisation de l'atome au service de la Défense fait partie intégrante des objectifs qui lui sont confiés. Pour autant, ce n'est qu'en 1958, lors du retour au pouvoir du général de Gaulle, que le programme d'armement nucléaire, lancé secrètement sous la Quatrième République par Pierre Mendès-France, est officialisé au travers de la création d'une direction du CEA en charge de la conception des armes nucléaires. La Direction des applications militaires (DAM) est née le 1^{er} septembre 1958 et, depuis cette date, les hommes et les femmes qui y œuvrent au quotidien ont à cœur de mettre leur engagement et leurs compétences au service des missions confiées. La contribution de la DAM à la sécurité de la France reste pourtant discrète et peut-être trop mal connue en dehors de ses partenaires. Le professeur Maurice Leroy, président du Conseil scientifique en charge de l'évaluation externe des travaux de recherche et développement menés au profit des différentes missions que l'Etat nous confie, l'a encore rappelé récemment. Il est pourtant vital d'accroître cette visibilité, tout en respectant les impératifs de confidentialité liés à la nature même de nos travaux. Cet antagonisme doit être dépassé, car il en va de notre capacité à attirer les talents qui construiront la DAM de demain en apportant de nouvelles compétences, de nouvelles idées et donc qui préserveront dans la durée la capacité de la DAM à répondre aux besoins exprimés par l'Etat. Un anniversaire comme celui des 60 ans est un moment idéal pour mettre en place des actions spécifiques dans cette optique.

Ainsi, l'ouvrage réalisé à l'occasion des 60 ans de la DAM, que vous pouvez retrouver à cette adresse Internet: www-dam.cea.fr à la rubrique «Un peu de science», met en lumière quelques-uns des grands défis scientifiques et techniques auxquels la DAM doit répondre pour réussir ses missions. Il témoigne de l'ambition collective pour parvenir à relever ces défis et montre la force de la pluridisciplinarité des travaux engagés pour y parvenir. Que ce soit pour améliorer la simulation des processus physiques multiéchelles couplés conduisant in fine au dégagement d'énergie, pour accroître la maîtrise des propriétés métallurgiques de métaux complexes en fonction des procédés de fabrication mis en œuvre, pour progresser encore dans la détection d'ultra-traces de matières nucléaires dans des échantillons, ou encore pour exploiter de manière optimale les calculateurs hétérogènes actuels pour la garantie des performances de furtivité des têtes nucléaires, les perspectives en matière de recherche scientifique et technique sont très nombreuses. Elles constituent un socle indispensable pour préparer le futur et pour maintenir une forte attractivité pour nos activités.

2018, ce n'est pas que l'anniversaire des 60 ans de la DAM. C'est aussi une année marquée par de nombreux jalons majeurs franchis, comme en témoignent les quelques faits marquants rappelés dans ce numéro de la revue *Avancées*: aboutissement du programme de tête nucléaire océanique qui a donné l'occasion d'une célébration interne pour remercier les personnels de leur implication sans faille tout au long de ce projet, mise en service du calculateur pré-exascale TERA 1000-2, développé en partenariat entre la DAM et Atos-Bull, qui exhibe, avec une puissance de 25 pétaflops (millions de milliards d'opérations par seconde) et une consommation électrique de 4 mégawatts, un accroissement de performance d'un facteur 20 et un gain en efficacité énergétique de près de 25, mise en service du système rénové de surveillance géomécanique de l'atoll de Mururoa, mise en service, au sein de l'installation nucléaire de base secrète de la propulsion nucléaire du CEA – DAM Île-de-France à Cadarache, du réacteur d'essais pour la propulsion nucléaire, le RES... Ce qui caractérise tous ces grands projets, c'est leur caractère multidisciplinaire. Leur réussite est ainsi, outre une démonstration de la capacité de la DAM à gérer de grands projets complexes jusqu'à leur terme, un témoignage de la capacité d'équipes venant d'horizons variés à travailler ensemble. C'est aujourd'hui comme hier une des grandes forces de la DAM et cela doit rester une dimension forte dans l'avenir.

La préparation de l'avenir exige de rechercher en permanence comment utiliser au mieux, au profit de la dissuasion et des missions de la DAM d'une manière générale, les avancées scientifiques et techniques issues de la recherche académique. C'est pourquoi les partenariats avec le monde académique se sont encore amplifiés en 2018: un nouveau laboratoire de recherche conventionné a été créé et plusieurs autres sont en projet et devraient aboutir d'ici 2020. La convention d'unité mixte de recherche du laboratoire des composites thermostructuraux de Bordeaux (LCTS) (en cotutelle Safran Ceramics, CEA, université de Bordeaux et CNRS), qui a fêté ses 30 ans en novembre 2018, a également été renouvelée. De nombreux projets collaboratifs ont été engagés, dont plusieurs soutenus par les régions, et témoignent du poids de la DAM dans le paysage de la recherche et de son positionnement comme partenaire majeur. La visibilité à long terme que confère aux travaux de R&D de la DAM l'engagement de l'Etat sur les programmes confiés et les moyens associés est dans ce contexte un atout majeur. Le haut niveau scientifique et technique des personnels, reconnu par les comités d'évaluation thématiques mis en place chaque année dans le cadre du conseil scientifique de la DAM, est à mettre au même plan.

Le conseil scientifique de la DAM a été grandement renouvelé en 2018 suite, d'une part, à l'arrêté de 2016 relatif au conseil scientifique du CEA et, d'autre part, au départ, après plusieurs mandats, de certains membres que je tiens à remercier pour leur action et les recommandations qu'ils nous ont faites au cours des comités d'évaluation qu'ils ont été amenés à présider. Le regard extérieur apporté par les comités est précieux: il permet, de manière quasi systématique, d'identifier des pistes pertinentes d'amélioration de notre efficacité pour relever les défis S&T inhérents à la réalisation de nos missions. Il s'intègre pleinement dans la démarche de crédibilité de la DAM en apportant une évaluation externe et indépendante du niveau scientifique et technique des travaux menés, de la stratégie scientifique déployée et de son positionnement par rapport au meilleur niveau international. Son périmètre s'est élargi au cours du temps: si les domaines évalués dans les toutes premières années étaient majoritairement liés au fonctionnement de la charge nucléaire, les thèmes reliés aux performances de la tête et au programme Simulation ont été rapidement pris en compte et la question des matières dans un contexte de recyclage induit par la fin de production de matières fissiles pour les armes est également traitée depuis plusieurs années. Il porte également un regard sur les travaux menés au profit de la lutte contre la prolifération ou encore de la défense conventionnelle. Le président actuel, Maurice Leroy, après sept années de mandat, cédera début 2020 sa place à Bruno Chaudret, membre de l'Académie des sciences, ancien président du conseil scientifique du CNRS et de l'IFPEN, et expert mondialement connu en chimie. Maurice Leroy a rempli les missions de sa fonction avec un engagement remarquable; il a su, au cours de ses années de mandat, accompagner, avec une humanité rare et un sens aigu de la mission, les comités successifs auxquels il a participé de manière très assidue.

Je vous invite à vous plonger dans les articles de cette nouvelle édition de la revue Avancées qui présentent, chacun dans leur domaine, une synthèse des travaux ayant fait l'objet de publications en 2018. La sélection est toujours difficile tant le choix est vaste et les sujets, passionnants. C'est en partie le travail de la coordinatrice scientifique de cette édition, Mme Hélène Hébert, du CEA-DAM Île-de-France, directrice de recherche en géophysique et spécialiste de l'aléa tsunami, que je remercie pour son implication dans la réalisation de cette revue aux côtés du rédacteur en chef, M. Jean-Marc Laborie.

Bonne lecture à tous !

→ PRIX ET DISTINCTIONS 2018

IEEE Fellow

Philippe PAILLET, du CEA – DAM Île-de-France, a reçu la distinction de IEEE Fellow « pour sa contribution à la compréhension des effets des radiations dans l'électronique ». Cette distinction est réservée à un nombre très limité de membres seniors qui ont contribué de façon importante à l'avancée ou à l'application des technologies, des sciences ou de l'ingénierie avec un apport significatif pour notre société.

Best young research award

Lors de la conférence internationale « Journées des actinides » au Portugal, la récompense *Best young research award* a été décernée à **Boris DORADO**, du CEA – DAM Île-de-France, pour ses travaux sur la modélisation du plutonium à haute température.

Prix Jamieson

Lors de la conférence Gordon « Hautes Pressions » aux États-Unis, **Dominique LANIEL**, qui a effectué sa thèse au CEA – DAM Île-de-France sur la synthèse d'une nouvelle forme d'azote polymérique, a reçu le prix Jamieson. Ce prix international récompense chaque année un jeune chercheur du domaine des hautes pressions pour un travail de thèse remarquable.

Prix Gentner-Kastler et *Fellow* de la Société européenne d'optique

Le prix Gentner-Kastler (Société française de physique et Deutsche Physikalische Gesellschaft), attribué pour des travaux pionniers remarquables et reconnus internationalement, a été décerné à **Luc BERGÉ**, du CEA – DAM Île-de-France, pour ses travaux théoriques sur la filamentation et la génération d'ondes térahertz par des lasers ultrabrefs. Par ailleurs, **Luc BERGÉ** a été élu Fellow de la Société européenne d'optique pour ses travaux sur la propagation des ondes dans les milieux non linéaires, incluant l'optique femtoseconde, ainsi que pour son investissement au sein de la communauté optique en Europe.

Prix Jean-Michel-Besson

En postdoctorat au CEA – DAM Île-de-France, Jean-Antoine QUEYROUX a reçu le prix Jean-Michel-Besson pour son travail de thèse de doctorat, effectué dans un laboratoire de Sorbonne Universités. Le prix Besson est décerné par le réseau de technologie des hautes pressions et récompense une thèse qui utilise les hautes pressions de façon originale et innovante.

Student award of the 69th ARA meeting

Doctorant au CEA – DAM Île-de-France sur l'interaction lumière-nuage de particules micrométriques à haute vitesse, **Jean-Éloi FRANZKOWIAK** a reçu le *Student award of the 69th Aeroballistic Range Association (ARA) meeting*, lors du meeting tenu à Bath, au Royaume-Uni, du 7 au 12 octobre.

Prix de thèse de l'école doctorale Interfaces

Le prix de thèse de l'école doctorale Interfaces (École polytechnique & université Paris-Saclay) a été décerné à **Adrien MARIZY**, du CEA – DAM Île-de-France. Son travail portait sur la synthèse, la caractérisation et la simulation sous très haute pression de nouveaux « superhydrures » pour le stockage de l'hydrogène et la supraconductivité à haute température.

Prix de la fondation Xavier-Bernard

Élève ingénieur à l'ENGEES à Strasbourg, **Alexandre PARIS** a reçu le prix de la fondation Xavier-Bernard, de l'Académie d'agriculture de France, pour son travail de fin d'études réalisé au CEA – DAM Îlede-France sur la modélisation de tsunamis d'origine gravitaire dans le golfe de Gascogne.

FAITS MARQUANTS DE L'ANNÉE 2018

TERA 1000, supercalculateur le plus puissant d'Europe

TERA 1000, supercalculateur codéveloppé par le CEA – DAM avec Atos pour les besoins de la Défense et de la dissuasion nucléaire, a été classé le 25 juin en 14^e position dans le classement mondial Top 500 des machines les plus puissantes au monde. TERA 1000 dispose d'une capacité de calcul de 25 pétaflops et d'une très haute efficacité énergétique, améliorée d'un facteur 25 par rapport à TERA 100. TERA 1000 permet d'augmenter très fortement la qualité prévisionnelle des simulations numériques pour les applications de Défense mais également pour la recherche et l'industrie.

User Meeting LMJ-PETAL : succès de la première édition

Le premier *User Meeting* de l'installation LMJ-PETAL a eu lieu les 4 et 5 octobre au Barp, près du CEA – Cesta. Il était organisé par l'Association lasers et plasmas, la DAM, le Centre des lasers intenses et applications (CELIA) et la Région Nouvelle-Aquitaine. Cette réunion internationale de physiciens utilisant les grands lasers pour leur recherche sur la matière en conditions extrêmes a rassemblé avec succès cent cinquante spécialistes des plasmas, dont les compétences vont de la physique des hautes intensités à l'astrophysique de laboratoire.

Workshop CEA – DAM/DOE – NNSA

La Directrice scientifique de la DAM, Laurence Bonnet, et son correspondant à la NNSA (*National Nuclear Security Administration*), Andrew Shamp, ont coorganisé du 16 au 17 mai à Paris le premier atelier réunissant des étudiants réalisant leur thèse au sein des laboratoires de la DAM ou dans une université américaine avec le soutien de la NNSA. L'objectif de cet atelier est de favoriser l'accès croisé à des postdoctorats de part et d'autre de l'Atlantique. Cette action contribue au renforcement de la collaboration « Basic science » mise en place depuis 2002 dans les disciplines de base, étayant les programmes respectifs de simulation de la France et des États-Unis.

Telsite2, système de surveillance géomécanique de l'atoll de Mururoa

Le système de surveillance géomécanique de l'atoll de Mururoa a fait l'objet d'une rénovation complète par le CEA – DAM dans le cadre du système Telsite2, dont la mise en service opérationnelle a été prononcée le 23 août par les autorités responsables de la Défense et du CEA. Le système déployé répond au double objectif de couvrir le risque lié à la chute de blocs de falaise récifale et de suivre l'évolution géomécanique à plus long terme. La surveillance s'appuie sur un réseau d'environ 80 capteurs installés sur le pourtour de l'atoll et notamment dans 9 forages instrumentés pouvant atteindre une profondeur supérieure à 600 m.

Divergence du réacteur d'essais, le RES

Le 10 octobre, le réacteur nucléaire d'essais (RES) a divergé à 11h 52. Cette divergence (démarrage des réactions nucléaires en chaîne au sein du réacteur) marque sa mise en service opérationnel, au sein de l'installation exploitée par le centre CEA – DAM Île-de-France, dans le centre CEA de Cadarache. Ce réacteur à eau pressurisée à terre est représentatif des chaufferies nucléaires qui propulsent le porte-avions *Charles-de-Gaulle* et les sous-marins de la Marine nationale. Le RES contribuera à améliorer la disponibilité des chaufferies en service et les marges de conception des chaufferies actuelles et futures. Ce projet majeur pour la dissuasion nucléaire française a été conduit par la DAM. La mise en service du RES est une grande réussite pour l'industrie nucléaire française.

04 VIE SCIENTIFIQUE

QUELQUES COLLOQUES ORGANISÉS EN 2018

Colloque Interactions électromagnétiques et simulation numérique

Organisé par le CEA – Gramat, ce colloque a rassemblé une quarantaine de personnes du CEA et de ses partenaires universitaires. Il avait pour but de restituer les conclusions d'une réflexion menée sur les méthodes et outils numériques les plus appropriés pour traiter les problématiques électromagnétiques du CEA – Gramat.

12^e conférence internationale DYMAT

Fondée en 1983 par le CEA et la DGA, la société savante DYMAT rassemble la communauté scientifique internationale des chercheurs et ingénieurs impliqués dans les études du comportement mécanique des matériaux et des structures soumis à des ondes de choc. Sa conférence internationale a rassemblé cette année, à Arcachon, 250 participants, dont 50 étudiants. Trente pays étaient représentés et l'événement a été sponsorisé par une dizaine de partenaires académiques, publics ou privés, dont le CEA – DAM et la Région Nouvelle-Aquitaine. Assurés par des experts internationaux du domaine, des cours magistraux sur la dynamique des matériaux ont contribué au succès de cette conférence auprès des jeunes chercheurs.

Conférence sur les plasmas non idéaux

Le CEA – DAM Île-de-France a organisé la conférence sur les plasmas non idéaux à Saint-Malo, avec le CNRS d'Orsay, le Gremi à Orléans et l'École polytechnique. Cette rencontre a permis à une centaine de chercheurs de mesurer les progrès des méthodes théoriques et de les confronter aux résultats obtenus avec de nouvelles installations expérimentales, comme le laser à électrons libres (XFEL) qui démarre à Hambourg, en Allemagne.

Colloque Phase

Organisé par le CEA – Le Ripault dans le cadre du projet européen de recherche partenariale Copernic piloté par le CEA, dans l'optique de diffuser les avancées du projet à la communauté internationale, le colloque Phase (*Pressurized hydrogen and storage equipment*) a réuni une centaine de participants et a abordé l'ensemble des sujets touchant au réservoir de stockage de l'hydrogène sous pression, incluant les équipements associés. Le CEA – Le Ripault conçoit, fabrique, instrumente, teste et transfère sa technologie de réservoirs composites 700 bar de stockage de l'hydrogène gazeux pour les applications automobiles piles à combustible depuis le début des années 2000.

Colloque NEILS

Le CEA – Cesta a organisé le colloque NEILS (*Networking on extremely high-intensity laser systems*) dans le cadre de Laserlab Europe IV. Le colloque a réuni 32 chercheurs provenant notamment de l'ensemble des laboratoires européens disposant de lasers énergétiques.

Séminaire Anharmonicity and thermal properties of solids

En collaboration avec l'université de Liège et le California Institute of Technology, le CEA – DAM Île-de-France a organisé un séminaire CECAM (Centre européen de calculs atomiques et moléculaires) à l'Institut Henri-Poincaré à Paris. Intitulé Anharmonicity and thermal properties of solids, il a réuni les principaux experts du domaine venus du monde entier (Japon, États-Unis, Allemagne, Royaume-Uni, Italie, Espagne...). C'est la première fois qu'un tel séminaire avait lieu; il a permis d'avoir de vifs débats et d'intenses échanges sur les nouvelles méthodes développées pour tenir compte des effets de la température dans les calculs dits ab initio, et plus spécifiquement quand l'approximation harmonique n'est plus valide. Divers modèles ont été présentés, comparés et discutés ainsi que des applications à des systèmes variés.

Organisation d'un atelier régional pour l'AIEA

Du 26 au 30 novembre, le CEA – DAM Îlede-France a organisé et animé à Paris un atelier régional, pour l'Agence internationale de l'énergie atomique (AIEA), sur le développement et la mise en œuvre de systèmes de mesure de sécurité nucléaire pour les grandes manifestations publiques. Cet atelier a permis à 19 représentants de 8 pays membres (le Tchad, la Côte d'Ivoire, le Gabon, le Mali, le Niger, le Sénégal, le Cameroun et Madagascar) de se préparer à l'organisation d'une grande manifestation publique dans leur pays et d'échanger sur l'expérience acquise par le CEA – DAM Île-de-France.

► Le CEA – DAM a aussi organisé les 3^{es} journées de la chimie au CEA – DAM et les journées des matériaux métalliques, au CEA – Valduc; les 3^{es} journées Multiéchelles des matériaux énergétiques hétérogènes, au CEA – Le Ripault; les journées techniques du génie parasismique et les journées scientifiques du CCRT, au CEA – DAM Île-de-France.

LIVRES PARUS EN 2018



PowerShell Core et Windows PowerShell

Arnaud Petitjean (CEA – DAM Île-de-France) Robin Lemesle

ENI, 2018. ISBN 978-2-409-01334-8.

Infrasound Monitoring for Atmospheric Studies

Infrasound monitoring for atmospheric studies

A. Le Pichon, É. Blanc (CEA – DAM Île-de-France), A. Hauchecorne (Sous la direction de)

Springer Nature, Londres, 2018. ISBN 978-3-319-75138-2.



Dynamic damage and fragmentation

D. E. Lambert, C. L. Pasiliao, **B. Erzar** (CEA – Gramat), B. Revil-Baudard, O. Cazacu

Iste, 2018. ISBN 978-1786304087.

Accelerator physics – Radiation safety and application

Ishaq Ahmad, Malek Maaza.

Serge Y. Kalmikov, **Xavier Davoine** (CEA – DAM Île-de-France), Isaac Ghebregziabher, Bradley A. Shadwick, auteurs du chapitre 4 « Optically controlled laser-plasma electron acceleration for compact γ -ray sources ».

INTECH-open, Londres, 2018. ISBN 978-953-51-3836-5.

Direct analysis in real time mass spectrometry Principles and practices of DART-MS

Yiyang Dong (Sous la direction de).

M. C. Bridoux (CEA – DAM Île-de-France), S. Schramm, auteurs du chapitre 8 « Application of direct analysis in real time coupled to mass spectrometry (DART-MS) for the analysis of environmental contaminants ».

Ed. Wiley-VCH, Weinheim, 2018. ISBN 978-3-527-34184-9.

ACCORDS DE PARTENARIAT OU DE COLLABORATION EN 2018

Projet collaboratif Transition by-pass et interaction choc couche limite par DNS

La modélisation de la transition laminaire/turbulent de couches limites à haute vitesse est un enjeu fondamental pour le dimensionnement de nombreuses applications, dont la conception des protections thermiques de véhicules spatiaux. Les démonstrations de performances en rentrée-précision sont également tributaires de cette phénoménologie. Le passage en régime turbulent augmente fortement les flux pariétaux et modifie les efforts aérodynamiques. La portée des critères de transition heuristiques actuels reste à asseoir sur des bases physiques. La transition par croissance modale de perturbations fait partie de la réponse, mais ne couvre pas toutes les situations d'intérêt. La transition est également tributaire des effets des gradients de pression ou des chocs, des effets de courbure et des rugosités de paroi. Des calculs de DNS (*Direct Numerical Simulation*) et des validations expérimentales dédiées sont mis en oeuvre dans ce projet pour asseoir une démarche de simulation prédictive. Le projet associe les compétences complémentaires de l'institut PPRIME (porteur du projet), du CEA – Cesta et de la société CESAME EXADEBIT.

Projet collaboratif HPC Scalable Ecosystem

La simulation numérique à haute performance (HPC) est un enjeu fondamental pour le CEA – DAM, comme pour les communautés académique et industrielle face à l'émergence des machines HPC exascale à l'horizon 2020. L'avènement de ces supercalculateurs regroupant jusqu'à des millions de cœurs de calcul implique une optimisation de la répartition des calculs et des communications pour les codes de simulation. Les techniques les plus récentes concernant les supports d'exécution seront testées sur des architectures matérielles novatrices au travers d'applications représentatives. Le projet associe des compétences interdisciplinaires et complémentaires de plusieurs instituts de recherche et d'industriels. L'Inria Bordeaux Sud-Ouest est le porteur du projet avec six équipes projets.

Projet collaboratif M6DAS

Porté par l'Institut de mécanique et d'ingénierie de l'université de Bordeaux, ce projet a pour objet l'étude des mesures dynamiques de déplacements 3D pour l'analyse de structures (M6DAS). Le CEA – Cesta y participe au titre de la conception et de la garantie des têtes nucléaires en mécanique. L'objectif est de disposer d'une sonde laser 3D pour l'analyse fine de la propagation d'ondes et des phénomènes de vibration de structures. Cet équipement permettra de disposer de nouvelles méthodes d'évaluation non destructive de matériaux composites pour l'industrie. Sur les surfaces extérieures des structures, la vibrométrie laser à balayage offre la possibilité d'accéder à des mesures non intrusives des champs de réponse en accélération.

Groupement de recherche LEPICE

Le CEA coanime le Groupement de recherche (GDR) LEPICE, qui rassemble des équipes nationales (CEA, CNRS, universités) travaillant dans le domaine des hautes densités d'énergie auprès des installations lasers de puissance – dont l'installation PETAL-LMJ. Le but de ce GDR est d'offrir un cadre qui permette à ces équipes d'associer leurs efforts, de partager leurs découvertes, ainsi que de définir une stratégie d'accès aux grands instruments laser. Cette communauté comprend actuellement plus d'une centaine de chercheurs et ingénieurs dans dix-sept unités de recherche travaillant dans le domaine de la fusion thermonucléaire par laser, la physique des plasmas créés par laser, ainsi que la matière sous conditions extrêmes et l'astrophysique en laboratoire.

Création du LRC CoSMa

Le CEA – Le Ripault entretient des relations étroites et anciennes avec les équipes du laboratoire de mécanique Gabriel-Lamé (universités d'Orléans, Tours et INSA Centre-Val de Loire), qui regroupe plus d'une centaine de chercheurs. Afin de renforcer cette collaboration, les organismes de tutelle universitaires et le CEA ont entériné la création d'un laboratoire de recherche conventionné (LRC). Le champ des collaborations possibles concerne la caractérisation et la modélisation mécanique des matériaux et des structures et des procédés d'élaboration. Il couvre pratiquement tous les matériaux développés ou fabriqués au Ripault, des procédés divers et des aspects numériques.

Lancement du projet Monarque

L'objectif du projet Monarque, lancé dans le cadre du 24^e appel à projets du Fonds unique interministériel (FUI), est de développer un démonstrateur permettant le désassemblage de collages structuraux (matériaux composites ou métaux). Le CEA – DAM Île-de-France et le CEA – Cesta sont impliqués dans le dimensionnement et la réalisation d'essais en collaboration avec le laboratoire Procédés et Ingénierie en mécanique et matériaux (CNRS/ENSAM). Le consortium du projet comprend des PME comme Imagine Optic et Rescoll, mais aussi de grands groupes industriels tels que Thales, Airbus, Safran et Dassault. L'enjeu de ce projet est de pouvoir récupérer des pièces onéreuses qui sont assemblées par collage. Colabellisé par les pôles Astech et Aerospace Valley, ce projet, d'un montant de 4 M€, se déroulera sur une période de trois ans.

Collaboration CBF800

Le CEA – DAM a besoin de maintenir les compétences internes et industrielles externes nécessaires à la maîtrise de la conception et de la mise en œuvre de caméras à balayage de fente (CBF) haut de gamme. Ces instruments sont en effet critiques pour réaliser certains diagnostics expérimentaux, notamment sur le LMJ. C'est dans ce cadre qu'a été lancée en 2018 une collaboration entre le CEA – DAM Île-de-France et la société Greenfield Technology pour le développement d'une caméra à balayage de fente à tube bilamellaire Photonis. Cette caméra sera également commercialisée sous licence pour répondre à des besoins de laboratoires externes. Cette collaboration s'inscrit dans la continuité d'une politique industrielle de partenariat dans le domaine des CBF engagée il y a presque dix ans.

Le CEA – DAM s'investit aussi dans le projet RETIF, porté par Greenfield Technology, qui a pour objectif le développement d'un numériseur de signaux électriques à large bande passante et grande dynamique de mesure, ainsi que dans l'ÉQUIPEX PETAL+, porté par l'université de Bordeaux et destiné à équiper l'installation LMJ-PETAL des premiers diagnostics plasmas, indispensables à la réalisation d'expériences de physique avec le laser PETAL.

THÈSES SOUTENUES ET EN PRÉPARATION - POSTDOCTORATS

En 2018, 138 doctorants préparaient une thèse au CEA – DAM, soit dans un laboratoire d'un des cinq centres, soit dans un laboratoire partenaire avec le soutien financier du CEA – DAM; 47 l'ont soutenue au cours de l'année. D'autre part, 37 docteurs étaient en contrat postdoctoral.

Répartition des thèses soutenues par domaine scientifique et technique



Chimie (15 %)

- Composants et équipements
- électroniques (2%)
- Sciences du climat et de l'environnement (11 %)
- Matériaux et physique du solide (15 %)
- Mathématiques, informatique, logiciel (19%)
- Mécanique et thermique (11%)
- Physique du noyau, atome, molécule (13 %)
- Thermohydraulique et mécanique
- des fluides (2%)
- Instrumentation, métrologie et contrôle (11%)
- Électromagnétisme, génie électrique (2%)

Répartition des postdoctorats par domaine scientifique et technique



Nombre de thèses soutenues 2008-2018



Nombre de thèses en cours 2008-2018



HABILITATIONS À DIRIGER LES RECHERCHES

Julien Mathiaud

CEA – Cesta Université de Bordeaux Spécialité : mathématiques appliquées.

Jean-Philippe Braeunig

CEA – DAM Île-de-France ENS Paris-Saclay Spécialité : mathématiques appliquées.

PUBLICATIONS SCIENTIFIQUES ET TECHNIQUES

En 2018, le CEA – DAM a publié 435 articles et comptes rendus de conférence dans des journaux à comité de lecture, ainsi que 55 comptes rendus de conférence dans un livre ou dans une série (ISI-Web of Science, 26/06/2019).







THÈSES DE DOCTORAT SOUTENUES EN 2018

CHIMIE

Samia AMARA, Caractérisation d'électrolytes organiques et eutectiques profonds à base de sels alcalins: Application aux supercondensateurs, université de Tours.

➤ Amandine LORRIAUX, Élaboration par caléfaction de revêtements carbone, oxycarbure et carbure pour des composites à matrice céramique à vocation aéronautique et nucléaire, université de Bordeaux.

➢ Martin JEGOU, Développement de formulations silicone bicomposant résistantes à la réversion, université Claude-Bernard Lyon 1.

→ Jean-Charles ALEXANDRE, Établissement des diagrammes de spéciation à plusieurs températures du plutonium (V) pour prédire son comportement dans les eaux de surface, université de Montpellier.

→ Coralie LUCHINI, Complexation d'actinides (III, V et VI) par des ligands polyaminocarboxyliques, université Paris-Saclay.

➤ Laurane LÉOST, Plateformes biocompatibles et approches innovantes pour la vectorisation de nanoparticules en décorporation pulmonaire du plutonium, université de Nice.

➢ Gabriel GAIFFE, Caractérisation globale d'explosifs et de substances connexes à l'état de traces par spectrométrie de masse haute résolution, université Pierre-et-Marie-Curie.

COMPOSANTS ET ÉQUIPEMENTS ÉLECTRONIQUES

➢ Maxime GIRARD, Recherche de vulnérabilité des étages de réception aux agressions électromagnétiques de forte puissance : cas d'un LNA GaAs, université de Bordeaux.

SCIENCES DU CLIMAT ET DE L'ENVIRONNEMENT

➢ Vivien LORIDAN, Dynamique des électrons de forte énergie piégés dans la ceinture de radiation externe de la magnétosphère terrestre, École normale supérieure Paris-Saclay.

➢ Hugo JAEGLER, Traçage et modélisation de la dispersion des sédiments contaminés dans les rivières de Fukushima à partir de mesures isotopiques de radionucléides, université Paris-Saclay.

➢ Emmanuelle MARIA, Migration augmentée de l'uranium dans les eaux souterraines par voie colloïdale, université de Pau et des pays de l'Adour.

→ Arthur LACROIX, Caractérisation acoustique des éclairs d'orage, Sorbonne Universités.

→ Florentin DAMIENS, Propagation des infrasons audessus des massifs montagneux, Sorbonne Universités.

MATÉRIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE

➢ Jérémy AVICE, Caractérisation de couches nanostructurées par méthode non destructive, université du Mans.

→ Anthony BAUX, Renforcement de matériaux alvéolaires céramiques, université de Bordeaux. ➡ Benjamin SARRE, Étude expérimentale et modélisation du comportement et de la rupture des soudures homogènes TA6V/TA6V : mécanismes à t0 et dans le temps, université de technologie de Troyes.

Dominique LANIEL, Synthèse de polymères d'azote par pression comme matériaux énergétiques du futur, Sorbonne Universités.

➢ Paul LAFOURCADE, Modélisation multiéchelles du comportement des matériaux énergétiques, Arts et Métiers ParisTech.

➡ Jean-Baptiste MORÉE, Calcul ab initio de l'interaction effective entre électrons f pour les lanthanides et les oxydes d'actinides, université Paris-Saclay.

Thibaut DREHER, Étude de l'interaction polymèresolide par une approche multiéchelles, université de Clermont-Ferrand.

MATHÉMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL

→ Rémi BOUTELOUP, Estimation de propriétés d'intérêt pour les électrolytes liquides, université de Tours.

➤ Thomas BENOUDIBA-CAMPANINI, Approche parcimonieuse pour l'imagerie 3D haute résolution de surface équivalente radar, université de Bordeaux.

Gentien MAROIS, Écoulement de particules en régime hypersonique dans le cadre de la rentrée atmosphérique, université de Bordeaux.

► Alexis MARBOEUF, Schémas ALE multi-matériaux totalement conservatifs pour l'hydrodynamique, École polytechnique.

Sophie MARQUE-PUCHEU, Métamodèles pour l'analyse de fiabilité de systèmes complexes couplés par des variables scalaires ou fonctionnelles, École polytechnique.

Estelle DIRANT, Développement d'un système in situ à base de tâches pour un code de dynamique moléculaire classique adapté aux machines exaflopiques, université Grenoble-Alpes.

Hoby RAKOTOARIVELO, Approche de codesign de noyaux irréguliers sur accélérateurs manycore. Application au cas du remaillage adaptatif pour le calcul intensif, université Paris-Saclay.

► Guillaume MOREL, Schémas asymptotic-preserving et bien-équilibrés pour des modèles de transport en utilisant une méthode Trefftz Galerkin discontinue, Sorbonne Universités.

Hugo TABOADA, Recouvrement des collectives MPI non bloquantes sur processeur manycore, université de Bordeaux.

MÉCANIQUE ET THERMIQUE

Alexia ESTE, Modélisation de l'endommagement d'un composite 3D carbone/carbone. Comportement à température ambiante, université de Bordeaux.

Bertrand AUBERT, Comportement de matériaux carbonés sous sollicitations dynamiques intenses: analogie entre irradiations lasers et impacts hypervéloces, Arts et Métiers ParisTech.

Thomas RONCEN, Dynamique non linéaire et vibration aléatoire pour des structures comportant des incertitudes et des interfaces non linéaires, École centrale de Lyon. ➢ Florian GUILLOIS, Simulation d'une zone de mélange turbulente issue de l'instabilité de Richtmyer-Meshkov à l'aide d'un modèle à fonction de densité de probabilité – Analyse du transport de l'énergie turbulente, École centrale de Lyon.

→ Yohann MAILLOT, Étude de la propagation d'une onde de souffle en milieu non homogène – Étude expérimentale, INSA Centre-Val de Loire.

PHYSIQUE DU NOYAU, ATOME, MOLÉCULE

► Lucile VAN BOX SOM, Des naines blanches magnétiques accrétantes aux plasmas laser : simulations, similitudes et expériences, université Pierre-et-Marie-Curie.

➢ Noémie JOURDAIN, Étude des propriétés du cuivre sous conditions extrêmes et hors de l'équilibre thermique, université de Bordeaux.

Corentin MAILLIET, Étude expérimentale et numérique du stade fortement non linéaire de l'instabilité de Rayleigh-Taylor au front d'ablation en attaque directe, université de Bordeaux.

➢ Amine NASRI, Potentiels microscopiques non locaux pour l'étude des observables de diffusion de nucléons dans le formalisme des voies couplées, université Paris-Saclay.

➢ Petar MAREVIC, Towards a unified description of quantum liquid and cluster states in atomic nuclei within the relativistic energy density functional theory, université Paris-Saclay.

➢ Bertrand MARTINEZ, Effets radiatifs et d'électrodynamique quantique dans l'interaction laserplasma ultrarelativiste, université de Bordeaux.

THERMOHYDRAULIQUE ET MÉCANIQUE DES FLUIDES

→ Sandra PŒUF, Équation d'état des produits de détonation des explosifs condensés, ISAE-ENSMA.

INSTRUMENTATION, MÉTROLOGIE ET CONTRÔLE

 > Jean-Éloi FRANZKOWIAK, Interaction lumière-nuage de particules micrométriques hautes vitesses : application à la vélocimétrie hétérodyne, Arts et Métiers ParisTech.
> Yann CARVALHAIS FERNANDES, Étude des mécanismes réactionnels mis en jeu dans une batterie Li-ion en situation accidentalle université d'Orléans

➢ Vincent DUTTO, Mathématique pour la mesure et l'analyse par radiographie des défauts géométriques de surface de microballons nécessaires aux expériences sur les lasers de puissance, université de Toulon.

➢ Paul VINCENT, Développement d'un étalon de pression acoustique et d'une méthode d'étalonnage de référence associée pour l'étalonnage de capteurs infrasonores à 1 Hz, Le Mans Université.

ÉLECTROMAGNÉTISME, GÉNIE ÉLECTRIQUE

➤ Xavier FAGET, Application expérimentale de méthodes inverses avancées pour l'imagerie des propriétés électromagnétiques d'un matériau magnéto-diélectrique, Aix-Marseille Université.

POSTDOCTORATS EN COURS EN 2018

CHIMIE

➡ Thomas AUDICHON, Préparation et caractérisations électrochimiques d'assemblages membrane électrodes pour électrolyseur PEM, CEA – Le Ripault.

➢ Florian BRULFERT, Spéciation des complexes plutonium-transferrine par focalisation isoélectrique capillaire, CEA – DAM Île-de-France.

COMPOSANTS ET ÉQUIPEMENTS ÉLECTRONIQUES

➡ Jonathan RIFFAUD, Modélisation des effets des rayonnements ionisants dans les composants et circuits électroniques, CEA – DAM Île-de-France.

SCIENCES DU CLIMAT ET DE L'ENVIRONNEMENT

Cécile MEZON, Transfert diphasique dans les milieux poreux fracturés sous gradient thermique, CEA – DAM Île-de-France.

Elsa YOBEGRAT, Isotope du molybdène & traçage des matériaux du cycle nucléaire, CEA – DAM Île-de-France.

⇒ Alexandre SONNETTE, Caractérisation des puces de μ -SM, CEA – DAM Île-de-France.

Rita CICONI, Rétrodiffusion du xénon dans les systèmes magma-gaz, CEA – DAM Île-de-France.

➢ Bruno RIBSTEIN, Calibration bayésienne d'un modèle d'interaction infrason-ondes de gravité, CEA – DAM Île-de-France.

Cécile CLÉMENT, Estimation de l'aléa tsunami sur les côtes françaises (Atlantique et Manche), CEA – DAM Île-de-France.

MATÉRIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE

Scharlène DELACOTTE, Optimisation d'isolants haute température limitant le transfert thermique par rayonnement, CEA − Le Ripault.

➢ Raphaël MAESTRACCI, Pièces avec gradient de fonction par projection thermique pour une application dans les réacteurs de fusion thermonucléaire, CEA − Le Ripault.

➡ Brendan HUITOREL, Développement de matériaux composites graphite/polymère injectables à forte conductivité thermique et électrique : application à la mise en œuvre de plaques bipolaires composites pour pile à combustible, CEA – Le Ripault. ► Loïck BONNET, Cristallogenèse de cristaux pour l'optique non linéaire, CEA – Le Ripault.

➢ Marjorie ALBINO, Synthèse, dépôt et caractérisations de solutions de titanate de baryum dopé à l'hafnium, CEA − Le Ripault.

Émile RENNER, Modélisation 3D de la rupture des matériaux granulaires fragiles sur un volume représentatif de la microstructure des matériaux céramiques, CEA – Le Ripault.

Magali THOME, Caractérisation microstructurale et comportementale d'isolants architecturés élaborés par fabrication additive, CEA − Le Ripault.

➡ Jean-Patrick GOULMY, Étude du comportement de matériaux composites céramiques C/SiC pour emploi à haute température, CEA – Le Ripault.

➢ Matthieu BRUSSON, Étude de l'influence de la granulométrie de la poudre de Pd sur les propriétés de stockage du tritium, CEA − Valduc.

➢ Najat CHABHOUN, Étude de la durabilité de matériaux métalliques obtenus par fabrication additive, CEA − Valduc.

➢ Nils BROUWER, Simulation ab initio de la fusion induite par laser, CEA − DAM Île-de-France.

Sautier LECOUTRE, Étude par dynamique moléculaire du comportement mécanique de polymères, CEA − DAM Île-de-France.

MATHÉMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL

Jean-Marie LALANDE, Apprentissage statistique pour la prédiction de l'environnement nuageux, CEA − Cesta.

➢ Nicolas THERME, Mise au point et développement de modèles physiques et de méthodes numériques innovantes dédiés à la simulation numérique de la réponse dynamique de matériaux suite à des sollicitations intenses, CEA – Cesta.

Swench'lan TYMEN, Modélisation physiconumérique de l'interaction écoulement-particules en régime supersonique, CEA – Cesta.

Charles COLAVOLPE, Résolution numérique de systèmes de type chaleur hyperbolique sur maillage non structuré, CEA – DAM Île-de-France.

Guillaume DELAY, Méthode CutFEM d'ordre élevé pour la propagation d'ondes, CEA – DAM Île-de-France.

► Loïc ROBERT, Développement de la plateforme de simulation en acoustique du LRC LETMA, CEA – DAM Île-de-France.

➢ Mickael BERTIN, Calibration bayésienne, sélection et apprentissage de modèle, CEA − DAM Île-de-France. ➢ Pierre ROLIN, Amélioration de la qualité des reconstructions 3D en zone urbaine à partir d'imagerie satellitaire stéréoscopique, CEA – DAM Île-de-France.

➢ Théo COROT, Tension de surface en référentiel ALE pour les schémas colocalisés, CEA − DAM Île-de-France.

MÉCANIQUE ET THERMIQUE

➢ Yohann SCARINGELLA-GUERRITAT, Optimisation thermique et mécanique de la microstructure d'un isolant, CEA – Le Ripault.

OPTIQUE ET OPTRONIQUE

Benoît DA COSTA, Réparation des réseaux du LMJ par laser (O₂, CEA – Cesta.

► Alexandre BEAUDIER, Effet du vide sur les performances de composants optiques traités sol-gel, CEA – Cesta.

➢ Élodie BOURSIER, Diagnostic fibré d'élargissement spectral pour le LMJ, CEA − Cesta.

ÉLECTROMAGNÉTISME, GÉNIE ÉLECTRIQUE

Kevin EHRHARDT, Simulations HPC des propriétés optiques d'une couche épaisse, CEA – Cesta.

➡ Julien MOREAU, Étude d'un dispositif compact, innovant, destiné à accélérer et focaliser des protons par voie laser, CEA – Cesta.

PHYSIQUE DU NOYAU, ATOME, MOLÉCULE

➢ Gaétan SARY, Simulation cinétique de la physique de l'interaction laser-plasma en fusion par confinement inertiel, CEA – DAM Île-de-France. **O. Larroche** CEA – DAM Île-De-France H. G. Rinderknecht, M. J. Rosenberg Laboratory for Laser Energetics (LLE), université de Rochester, États-Unis

MODÉLISATION CINÉTIQUE DU DÉFICIT DE RENDEMENT THERMONUCLÉAIRE DE CERTAINES CIBLES DE FUSION PAR CONFINEMENT INERTIEL

Dans les expériences d'implosion pour la fusion par confinement inertiel (FCI) mettant en jeu un chauffage rapide de capsules de verre contenant le combustible nucléaire gazeux, certaines mesures ne peuvent être restituées par les simulations numériques hydrodynamiques, qui traitent la matière comme un fluide. Le rendement thermonucléaire calculé se trouve trop élevé, d'un facteur dix ou plus par rapport à la valeur mesurée. Les premières simulations cinétiques du gaz, qui modélisent les particules composant le fluide, ne rendaient compte que de la moitié de ce désaccord. Un nouveau modèle hybride cinétique/hvdrodvnamique inclut l'interaction cinétique du gaz avec le fluide de la capsule. En rendant compte à la fois de l'écart à l'équilibre thermodynamique des ions du gaz et d'un important mélange entre le gaz et la capsule, il permet d'interpréter correctement ces expériences.

our tenter de provoquer une combustion thermonucléaire, on comprime fortement une petite capsule contenant le combustible, un mélange d'isotopes d'éléments légers, au moyen d'une impulsion d'énergie intense, par exemple celle d'un laser de puissance. Le gaz combustible est transformé en un plasma (gaz ionisé) à une densité et une température comparables à celles qui

règnent au centre des étoiles, et nécessaires à l'ignition de la réaction.

Une campagne expérimentale visant à une telle ignition a été menée en 2011-2012 **1** sur le laser américain National Ignition Facility (NIF). Cependant, contrairement à ce que laissaient attendre les simulations numériques qui avaient dimensionné ces expériences, l'ignition n'a pas pu être atteinte. Cela a conduit à



Figure 1

► (d'après les références 2 et 5) (a) Valeurs obtenues pour le rendement thermonucléaire (nombre total de réactions) et (b) pour la température effective des ions qui ont réagi (T_i en keV) pour les réactions D + D → n + ³He (en bleu) et D + ³He → p + ⁴He (en rouge) dans les expériences d'implosion de D³He gazeux mettant en œuvre différentes densités initiales (cercles et carrés) et dans leur restitution par des simulations numériques hydrodynamiques au moyen du code DUED (courbes en trait discontinu) ou des simulations cinétiques au moyen du code FPION (croix). Pour parvenir à ce résultat, un traitement fluide des ions du pousseur a été introduit dans FPION.



Profils de densité calculés par FPION **S** pour les espèces ioniques constituant la cible au moment de la compression maximale dans l'implosion. (a) Cas à plus forte densité initiale (ρ = 3,3 mg/cm³); (b) cas à plus faible densité (ρ = 0,4 mg/cm³). En bleu : espèce ionique représentant le pousseur de silice ; en rouge : ³He du gaz intérieur (le deutérium montre un comportement analogue). On constate, lorsque la densité initiale du gaz diminue, une transition entre un comportement quasi hydrodynamique du pousseur et une interpénétration complète avec le gaz intérieur : il y a coexistence des deux espèces à leur maximum de densité au voisinage du centre de la cible.

Pour approfondir cette idée, FPION a été muni d'un formalisme hybride permettant de traiter comme des fluides les espèces les plus collisionnelles (les ions du pousseur), en incluant leur interaction avec les espèces les moins collisionnelles (le gaz intérieur) traitées en cinétique. On obtient alors **5** un très bon accord avec les données expérimentales, y compris dans le cas le plus cinétique (voir **figure 1**).

Les profils de densité des différentes espèces en présence (figure 2) montrent que la dégradation du rendement dans le cas à plus faible densité est liée à une interpénétration complète entre les ions du gaz et ceux du pousseur, qui parviennent jusqu'au centre de la cible au lieu d'être repoussés par la pression du gaz intérieur. Ce comportement ne peut évidemment être restitué correctement que par un code cinétique tel que FPION. Ces résultats, qui n'avaient jamais été obtenus auparavant, montrent l'apport crucial du code cinétique hybride FPION dans la compréhension des mécanismes cinétiques affectant l'hydrodynamique des cibles de FCI, d'une façon qui peut être importante lorsque les dimensions des structures envisagées ne sont pas suffisamment grandes devant les libres parcours de collision des ions qui les constituent. Notons que le formalisme hybride cinétique/fluide conduit à un gain de temps de calcul très important par rapport à un traitement complètement cinétique, ce qui rend ce modèle utilisable en pratique sur des stations de travail de bureau. Les effets ainsi mis en évidence devront être pris en compte dans le dimensionnement des futures cibles visant à l'ignition thermonucléaire.

RÉFÉRENCES

1 J. D. LINDL *et al.*, « Review of the National Ignition Campaign 2009-2012 », *Phys. Plasmas*, **21**, 020501 (2014).

2 M. J. ROSENBERG *et al.*, « Exploration of the transition from the hydrodynamiclike to the strongly kinetic regime in shock-driven implosions », *Phys. Rev. Lett.*, **112**, 185001 (2014).

3 S. ATZENI *et al.*, « Fluid and kinetic simulation of inertial confinement fusion plasmas », *Comput. Phys. Commun.*, **169**, p. 153 (2005).

4 0. LARROCHE *et al.*, « Ion-kinetic simulations of D-³He gas-filled inertial confinement fusion target implosions with moderate to large Knudsen number », *Phys. Plasmas*, **23**, 012701 (2016).

5 0. LARROCHE et al., « Nuclear yield reduction in inertial confinement fusion exploding-pusher targets explained by fuel-pusher mixing through hybrid kinetic-fluid modeling », *Phys. Rev. E*, **98**, 031201 (2018).

réexaminer les différents mécanismes physiques impliqués, parmi lesquels les effets cinétiques ioniques, dus au fait que le libre parcours de collision des ions composant le plasma n'est pas négligeable devant la taille de la cible.

Pour examiner spécifiquement ces effets, des expériences dédiées ont été réalisées sur le laser OMEGA de l'université de Rochester 2. Il s'agit d'implosions de microsphères de verre d'un peu moins d'un millimètre de diamètre et d'épaisseur relativement faible (quelques microns) contenant un mélange équimolaire de deutérium et d'hélium 3 gazeux, réalisées au moyen d'une impulsion laser particulièrement intense de façon à renforcer le caractère cinétique du plasma ainsi créé. Ces cibles sont caractérisées par des densités initiales de gaz différentes dans le but d'explorer la transition d'un comportement plutôt hydrodynamique (à relativement haute densité) à un autre (à plus basse densité), où on attend des effets cinétiques ioniques importants. Les simulations numériques standard de ces cibles sont réalisées au moyen du code hydrodynamique DUED 3.

Les résultats expérimentaux 2 en matière de rendement des réactions thermonucléaires et de température de combustion sont présentés sur la figure 1, en comparaison avec les résultats des simulations numériques hydrodynamiques. On constate que l'accord entre l'expérience et la simulation se dégrade fortement lorsqu'on utilise des cibles de densité initiale de plus en plus faible. L'hypothèse que ce désaccord était dû à des effets cinétiques ioniques avait été testée en traitant les ions du gaz intérieur au moyen de notre code Vlasov-Fokker-Planck FPION, pour les deux valeurs de densité initiale évoquées plus haut 4. Un meilleur accord avait été trouvé dans le cas à plus forte densité, mais dans le cas à plus faible densité, a priori le plus cinétique, il subsistait un désaccord qu'on suspectait d'être lié à une interaction cinétique entre les ions du gaz et du pousseur.

INTERACTION RAYONNEMENT-MATIÈRE, PHYSIQUE DES PLASMAS L. Van Box Som, E. Falize, C. Busschaert CEA – DAM Île-de-France

J.-M. Bonnet-Bidaud CEA – Paris-Saclav

M. Mouchet

Laboratoire univers et théories (LUTH), UMR 8102 CNRS – Observatoire de Paris – Université Paris-Diderot, Meudon

A. Ciardi

Laboratoire d'études du rayonnement et de la matière en astrophysique et atmosphères (LERMA), UMR 8112 CNRS – Observatoire de Paris – Université Pierre-et-Marie-Curie – École normale supérieure de Paris – Université de Cergy-Pontoise

M. Koenig, B. Albertazzi, T. Michel, G. Rigon, P. Mabey Laboratoire pour l'utilisation des lasers intenses

(LULI). UMR 7605 CNRS – CEA – École polytechnique –

Sorbonne Universités, Palaiseau

UTILISATION DE LASERS DE PUISSANCE POUR L'ÉTUDE DES CHOCS D'ACCRÉTION EN ASTROPHYSIQUE DE LABORATOIRE

Grâce aux développements des lasers de puissance, il est possible d'étudier en laboratoire de nombreux processus de hautes densités d'énergies, tels les chocs d'accrétion. L'approche expérimentale apporte de nouveaux éléments et complète les données d'observation, souvent insuffisantes et difficiles à obtenir, pour contraindre les modèles astrophysiques. Des travaux publiés récemment ont permis de coupler des observations. des simulations numériques à l'échelle astrophysique, des études théoriques et enfin des données expérimentales obtenues sur différentes installations laser ainsi que les simulations numériques associées. Ces travaux ont permis de démontrer la possibilité de recréer en laboratoire un choc d'accrétion tridimensionnel et de mettre en évidence l'influence du champ magnétique.

armi les différents processus du domaine des hautes densités d'énergie (pression de 10 à 100 Mbar et température de 10 eV à 10 keV), les chocs d'accrétion sont particulièrement répandus dans l'évolution stellaire, et permettent d'étudier le couplage entre le rayonnement et la matière. Des approches théoriques et numériques à l'échelle astrophysique permettent au CEA de décrire la structure et la dynamique du choc telles que des oscillations rapides dans la luminosité observée de certains objets **1**. Pour compléter les observations et les simulations, l'approche expérimentale en laboratoire apporte des données complémentaires dans la compréhension de la physique des chocs d'accré-



Figure 1

Comparaison entre (a) le modèle astrophysique et (b) le modèle du laboratoire (figure du milieu) de la colonne d'accrétion. Le principe de l'expérience en laboratoire est de générer un flot de matière pour modéliser le flot d'accrétion. Ce dernier se propage dans le vide soumis à un champ magnétique externe. Le plasma en expansion frappe un obstacle solide qui modélise la surface de l'étoile principale. Une photo d'une véritable maquette laser est présentée sur la figure (c).



tion. Des résultats expérimentaux obtenus récemment permettent de mettre en évidence une structure riche et complexe du choc d'accrétion **2,3**.

Les chocs d'accrétion se retrouvent à plusieurs moments dans l'évolution d'une étoile : depuis l'environnement d'une étoile jeune qui capture de la matière provenant de son cocon environnant, jusque dans les systèmes doubles impliquant une naine blanche (étoile en fin de vie) qui capture de la matière provenant de son étoile compagnon. La matière accrétée (c'est-à-dire «aspirée» par la gravitation) par l'objet central (l'étoile jeune ou la naine blanche) est guidée par le champ magnétique de ce dernier jusqu'aux pôles magnétiques sous la forme d'une colonne. La matière percute la surface à une vitesse de plusieurs centaines, voire plusieurs milliers de kilomètres par seconde. La force de l'impact crée un choc qui remonte le long de la colonne et chauffe la matière à des dizaines de millions de degrés. Ce choc d'accrétion trouve une position d'équilibre à une altitude de plusieurs centaines de kilomètres de la surface. La très faible extension spatiale de cette région interdit l'observation directe détaillée de sa structure et de sa dynamique par les télescopes. La physique particulière de ce type d'environnement possède des propriétés remarquables d'invariance d'échelle. Ces dernières permettent de construire des maquettes aux dimensions

Figure 2

Exemple d'une image expérimentale obtenue avec une radiographie X d'un choc d'accrétion sur le laser LULI2000 de l'École polytechnique 3 L'image est en fausses couleurs et présente la densité de la matière. La matière dense est présentée en vert alors que la matière moins dense est présentée en bleu. Cette image permet de démontrer qu'un choc d'accrétion peut être réalisé en laboratoire. L'expérience représentée a permis de montrer pour la toute première fois la structure tridimensionnelle du choc d'accrétion et du flot de matière sous l'influence du champ magnétique.

millimétriques pour recréer avec les lasers de puissance des conditions analogues à celles présentes à l'échelle astrophysique. C'est pourquoi l'astrophysique de laboratoire est une opportunité unique pour sonder des régions inobservables avec les télescopes, et ainsi répondre aux problématiques astrophysiques.

Le modèle consensuel, retenu par la communauté astronomique, qui décrit le choc d'accrétion fournit une image globale du phénomène. Toutefois, certaines incohérences que nous avons mises en évidence entre ce modèle et les observations questionnent sur sa validité. Ainsi, des oscillations rapides de luminosité observées pour certains objets, qui pourraient trouver leur origine dans la dynamique complexe du choc d'accrétion, ne correspondent pas à celles prédites par le modèle 1. Pour démontrer ce résultat, des simulations numériques réalisées au CEA-DAM ont été comparées à de nombreuses données observationnelles afin de montrer leur incohérence. Plusieurs possibilités sont alors envisagées : soit une partie de la physique du choc d'accrétion nous échappe à ce jour, soit les télescopes actuels ne sont pas assez puissants pour détecter correctement ces oscillations.

Les expériences en laboratoire réalisées dans cette étude ont permis pour la toute première fois d'utiliser le couplage entre les lasers et un champ magnétique externe afin d'étudier la structure des chocs d'accrétion (figure 1). Des expériences ont été réalisées avec succès sur les lasers GEKKO XII de l'université d'Osaka (Japon) 2 et LULI2000 de l'École polytechnique 3 (figure 2). Les résultats obtenus et leur bon accord avec les simulations numériques associées ont permis de tester et de démontrer la faisabilité de miniaturiser le choc d'accrétion en laboratoire sous l'influence du champ magnétique. Ces résultats majeurs montrent que l'exploration tridimensionnelle de la colonne d'accrétion pourrait être une piste intéressante pour améliorer le modèle astrophysique.

En conclusion, le fort couplage entre le rayonnement et la matière engendre des incohérences encore incomprises entre le modèle astrophysique et les observations. L'amélioration du modèle est cependant fondamentale, notamment pour le comparer aux données que l'on obtiendra avec les futures missions spatiales telles que la mission européenne Athena à laquelle participe le CEA. Les résultats expérimentaux obtenus dans cette étude apportent de nouvelles perspectives pour les modèles astrophysiques et préparent ainsi les expériences sur les lasers les plus énergétiques tels que le Laser Mégajoule.

RÉFÉRENCES

1 L. VAN BOX SOM *et al.*, « Numerical simulations of high-energy flows in accreting magnetic white dwarfs », *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, **473**, p. 3158-3168 (2018).

2 L. VAN BOX SOM *et al.*, « Laboratory radiative accretion shocks on GEKKO XII laser facility for POLAR project », *High Power Laser Science and Engineering*, **6**, 02000e35 (2018).

B. ALBERTAZZI *et al.,* « Experimental platform for the investigation of magnetized-reverse-shock dynamics in the context of POLAR », *High Power Laser Science and Engineering*, **6**, 03000e43 (2018).

PHYSIQUE NUCLÉAIRE

L. Gaudefroy, S. Péru, J. Aupiais CEA – DAM Île-de-France

EFFET DE LA FORCE DE CORIOLIS SUR LES NOYAUX ATOMIQUES N = 100

Les isomères nucléaires sont des états excités du novau atomique dont la durée de vie est bien plus grande que la normale, c'est-à-dire très supérieure à la nanoseconde. Cette grande durée de vie reflète les différences significatives entre les propriétés quantiques de l'isomère et celles des états d'énergie inférieure. L'étude de la spectroscopie gamma des fragments produits lors de la fission spontanée de l'isotope de californium, de nombre de masse A = 252, a permis notamment de mettre en évidence l'existence d'un isomère dans les novaux possédant N=100 neutrons. La structure de basse énergie de ces novaux est très similaire, mais, étonnamment, le temps de vie de l'isomère considéré varie fortement d'un novau à l'autre. Le développement théorique réalisé afin d'interpréter ces données montre que la force de Coriolis est à l'origine de cette variation.

ne bonne description théorique de la désexcitation des noyaux permet de mieux prédire les sections efficaces de capture neutronique, qui sont d'intérêt pour la compréhension des processus astrophysiques ou de la physique des réacteurs. L'étude expérimentale de noyaux produits dans des expériences, soit auprès d'un accélérateur de particules, soit auprès d'un accélérateur les modèles qui décrivent les propriétés de l'ensemble des noyaux, stables ou radioactifs. Les états nucléaires présentant une durée de vie supérieure à la nanoseconde, appelés isomères nucléaires, sont le reflet d'une singularité dans la structure du noyau et, à ce titre, de bons candidats d'étude pour tester les modèles.

La fission spontanée présente l'avantage de ne pas nécessiter d'accélérateur pour réaliser des études sur les noyaux produits. En revanche, l'expérience dure plusieurs mois. Plusieurs centaines de paires de fragments de fission sont produites et accompagnées de l'émission d'un grand nombre de rayonnements. L'identification des fragments et la possibilité d'attribuer un rayonnement à



Figure 1

Spectre de masse des fragments peuplés dans la fission sans émission de neutron du ²⁵²Cf, obtenu après six mois de mesure. La masse des fragments est déterminée avec une résolution exceptionnelle de 0,54 unité de masse atomique (u. m. a.), déduite de la largeur des pics, ce qui permet de bien individualiser l'identification des noyaux.



un fragment particulier sont des difficultés majeures. L'étude présentée ici a permis de mettre en évidence et d'analyser les isomères produits au cours de la fission spontanée du californium 252, noté ²⁵²Cf.

La double chambre d'ionisation 1, mise en œuvre au CEA-DAM Île-de-France, permet de déterminer précisément l'énergie cinétique des deux fragments. Pour les événements de fission sans émission de neutron, cette mesure donne accès à leur masse (figure 1). Pour obtenir une identification en masse de cette qualité, il est nécessaire d'utiliser un dépôt de ²⁵²Cf extrêmement mince (50 nm d'épaisseur) afin de minimiser la perte d'énergie des fragments dans le dépôt. Sa fabrication est déjà un défi en soi.

Un ensemble de détecteurs au germanium entoure la chambre d'ionisation afin de mesurer les rayonnements gamma émis par les fragments de fission. Lorsqu'une fission se produit dans la chambre d'ionisation, les fragments y sont arrêtés en moins d'une dizaine de nanosecondes. Leur énergie cinétique est mesurée, donnant accès, événement par événement, à la masse des fragments produits. Les raies gamma émises par les fragments, entre dix nanosecondes et quelques microsecondes après la fission, sont détectées (figure 2a), permettant de remonter au schéma de décroissance des isomères produits au cours de la fission (figure 2b), qu'il faut ensuite interpréter.

L'isotope de gadolinium possédant N = 100 neutrons, noté ¹⁶⁴Gd, est l'un des fragments pour lesquels un nouvel isomère est mis en évidence dans les données, acquises dans cette étude pendant six mois. Les noyaux voisins présentant aussi 100 neutrons ont une structure similaire à celle du ¹⁶⁴Gd. Ils sont déformés et présentent tous le même type d'isomère à un niveau d'énergie autour de 1 MeV 2. Malgré ces similitudes, le temps de vie mesuré pour l'isomère varie entre une nanoseconde et deux microsecondes, soit trois ordres de grandeur, en fonction du noyau considéré.

Afin de comprendre cette variation, les modèles du CEA-DAM qui décrivent la structure des noyaux atomiques ont dû être enrichis. Avant la présente étude, les prédictions des durées de vie des isomères dans les noyaux N = 100 étaient de l'ordre de l'heure. Par analogie avec la géophysique dans laquelle le mouvement de rotation de la Terre se couple au mouvement des corps qui se meuvent à sa surface par le biais de la force de Coriolis, il existe aussi une interaction de Coriolis en physique nucléaire. Ainsi, le mouvement des nucléons au sein du noyau se couple à la rotation de ce dernier. L'intensité de ce couplage est forte dans les noyaux N = 100 du fait des nombres quantiques associés aux orbitales peuplées par les neutrons dans cette région de masse. Le couplage Coriolis permet ainsi d'introduire des

Figure 2

(a) Spectre des gammas retardés émis plus de 100 ns après une fission produisant un fragment de masse A = 164. L'énergie des transitions, en keV, est indiquée à côté des pics. (b) Schéma de niveaux partiel du ¹⁶⁴Gd indiquant la décroissance de l'isomère à 1095 keV observé dans ce travail. Les traits horizontaux représentent les états impliqués dans cette décroissance. Chaque état est repéré par son énergie d'excitation, en keV; les flèches schématisent les transitions gamma entre les états excités du noyau. L'énergie de ces transitions est reportée sur les flèches correspondantes.

> mélanges dans les fonctions d'onde des isomères considérés, dont la décroissance se trouve grandement accélérée, puisque les temps de vie théoriques maintenant obtenus sont en accord avec les données expérimentales 2.

> Ce projet, mêlant expérience et théorie, a permis de mettre en évidence une soixantaine d'isomères peuplés dans la fission du ²⁵²Cf. Le développement théorique accompagnant ces mesures permet d'expliquer beaucoup mieux les variations du temps de vie de l'isomère étudié dans les noyaux N = 100. Plus largement, il contribue à une meilleure prédiction des sections efficaces de capture neutronique, d'intérêt pour les applications menées dans l'ensemble du CEA.

RÉFÉRENCES

1 L. GAUDEFROY *et al.*, « A twin Frisch-grid ionization chamber as a selective detector for the delayed gamma-spectroscopy of fission fragments », *Nucl. Instr. Meth. A*, **855**, p. 133-139 (2017).

2 L. GAUDEFROY *et al.*, « Impact of Coriolis mixing on a two-quasi-neutron isomer in ¹⁶⁴Gd and other N=100 isotones », *Phys. Rev. C*, **97**, 064317 (2018).

PHYSIQUE DE LA MATIÈRE CONDENSÉE

L. Lecherbourg, N. Jourdain, V. Recoules, P. Renaudin CEA – DAM Île-de-France B. Mahieu, K. Ta Phuoc

Laboratoire d'optique appliquée (LOA), UMR 7639 CNRS – École polytechnique – ENSTA ParisTech, Palaiseau

F. Dorchies

Centre lasers intenses et applications (CELIA), UMR 5107 CNRS – CEA – Université de Bordeaux, Talence

SPECTROSCOPIE DE LA MATIÈRE DENSE ET TIÈDE À DES ÉCHELLES DE TEMPS ULTRACOURTES

La spectroscopie d'absorption du rayonnement X permet de sonder la structure électronique des matériaux. La connaissance fine de cette structure permet ensuite de comprendre le comportement macroscopique du matériau. À l'aide d'une source X de durée femtoseconde, il est possible d'observer la dynamique de phénomènes transitoires sur des temps caractéristiques des échanges électron-ion. Cette technique a permis d'étudier pour le cuivre les mécanismes qui pilotent la transition des conditions normales de densité et de température vers le régime plasma dense et tiède.

e régime de la matière dense et tiède (quelques dizaines de milliers de degrés) est un état intermédiaire entre le solide et le plasma. Ce régime, appelé WDM pour *Warm Dense Matter*, se caractérise par un couplage fort entre les ions, ainsi que par des effets quantiques électroniques non négligeables. La WDM se trouve à l'état naturel dans des objets astronomiques comme les intérieurs planétaires. Elle est aussi produite aux premiers instants des expériences de fusion par confinement inertiel.

Dans le régime WDM, les propriétés macroscopiques de la matière sont modifiées, telles la capacité thermique, la conductivité ou l'interaction électron-ion. Ces propriétés, particulièrement difficiles à calculer, font l'objet de nombreuses études au CEA-DAM. Leur calcul utilise des simulations dites *ab initio* (c'est-



Figure 1

Simulation numérique avec le code Abinit de la densité électronique autour des noyaux de cuivre (sphères foncées) lors de la transition du solide au régime de la matière dense et chaude (WDM). L'énergie est transférée aux électrons libres du système sur une durée de l'ordre de la femtoseconde. Elle est ensuite transférée aux ions sur une échelle de l'ordre de la picoseconde. (a) Solide froid avant chauffage : la température électronique T_e égale la température ionique T_i . (b) Juste après le chauffage, un état à fort déséquilibre est produit : les électrons sont chauds tandis que les ions restent froids et gardent leur structure cristalline. (c) Quelques picosecondes après, la structure disparaît alors que les électrons et les ions atteignent l'équilibre thermodynamique. (d-f) Spectres d'absorption calculés correspondant aux régions (a-c). L'absorption froide (d) est reportée en tirets sur les absorptions (e-f).

à-dire basées sur les premiers principes de la physique) de dynamique moléculaire quantique, où la structure électronique et la distribution atomique sont décrites de façon cohérente. Ces calculs sont effectués avec le code Abinit 1, à l'aide des supercalculateurs du CEA-DAM.

L'utilisation de lasers ultracourts à énergie modérée permet de créer et d'étudier la WDM en laboratoire. Le scénario général est le suivant (figure 1a à c): lorsque la matière est irradiée par une impulsion laser de durée femtoseconde avec une intensité suffisante pour provoquer la transition de phase solide-plasma, l'énergie est rapidement transférée aux électrons du système (échelle femtoseconde), puis progressivement transférée aux ions (échelle picoseconde). Dans les premiers instants après le chauffage, la matière est dans un fort déséquilibre thermodynamique, avec des électrons à une température de plusieurs dizaines de milliers de kelvins et un réseau cristallin froid. Cette physique, dite hors équilibre, dépend des matériaux et particulièrement de leur structure électronique 2.

La dynamique mise en jeu entre les électrons et la structure atomique est encore mal comprise dans la WDM. Et les expériences n'en donnent souvent qu'une vision incomplète. Une nouvelle approche a été développée, basée sur une étude résolue en temps de spectroscopie d'absorption proche des flancs (figure 1d à f). Cette technique, appelée TR-XANES (pour *Time Resolved X-ray Absorption Near Edge Structure*), permet de sonder les électrons de valence, c'est-à-dire la densité d'états électroniques inoccupés, ainsi que l'arrangement atomique local dans des conditions WDM.

Afin d'obtenir la résolution temporelle la plus courte possible, les avantages de la source de rayonnement X bêtatron **3** ont été exploités. Ce rayonnement est obtenu en focalisant un laser ultra-intense dans un plasma peu dense, provoquant des champs électriques très intenses. Ceux-ci accélèrent des électrons qui produisent ainsi le rayonnement bêtatron dont la durée est proche de celle du laser, c'est-à-dire de quelques dizaines de femtosecondes. Réalisée par les équipes du Laboratoire d'optique appliquée, à Palaiseau **4**, une telle source a été utilisée pour effectuer la première expérience TR-XANES avec une résolution femtoseconde **5**. Cette expérience a permis de suivre l'évolution de la température électronique dans des échantillons de cuivre sur une échelle de temps inédite, inférieure à la centaine de femtosecondes (**figure 2**). Les résultats expérimentaux ont permis de déterminer un temps de montée de la température de 75 ± 25 fs.

Cette expérience démontre le potentiel du rayonnement X bêtatron pour étudier les phénomènes physiques ultrarapides lors de production de la matière dans le régime WDM, ou plus généralement les transitions de phases induites par laser ultracourt.

L'accès à des résolutions temporelles aussi courtes permet de caractériser finement la transition du solide au régime WDM, et ainsi d'obtenir des données d'intérêt en astrophysique ou pour les expériences de fusion par confinement inertiel.



Figure 2

Évolution temporelle de la température électronique. Les données sont extraites des mesures d'absorption (points) et sont comparées au calcul (trait plein), réalisé à l'aide du code d'hydrodynamique Esther G, développé au CEA – DAM; le calcul de la température ionique est également représenté (trait en pointillés). L'état de la matière correspondant est également représenté pour trois instants caractéristiques décrits sur la figure la à c. Les données expérimentales permettent de suivre l'évolution de la température sur une échelle de temps inédite, inférieure à la centaine de femtosecondes, et ainsi de déterminer un temps de montée de la température de 75 ± 25 fs (voir figure en médaillon).

RÉFÉRENCES

1 X. GONZE *et al.*, « Abinit: first-principles approach to material and nanosystem properties », *Comput. Phys. Comm.*, **180**, p. 2582 (2009).

2 F. DORCHIES, V. RECOULES, «Non-equilibrium solid-to-plasma transition dynamics using XANES diagnostic », *Phys. Report*, 657, p. 1-26 (2017).

3 X. DAVOINE, J. FERRI, « Accélération d'électrons par laser et source de rayonnement X bêtatron », Revue *chocs*, 49, p. 32-40 (2019).

4 K. TA PHUOC et al., « Betatron radiation from density tailored plasmas », Phys. Plasmas, 15, 063102 (2008).

5 B. MAHIEU et al., « Probing warm dense matter using femtosecond X-ray absorption spectroscopy with a laser-produced betatron source », *Nature Communications*, **9**, p. 3276 (2018).

G J.-P. COLOMBIER *et al.*, «Hydrodynamic simulations of metal ablation by femtosecond laser irradiation », *Phys. Rev. B*, **71**, 165406 (2005).

PHYSIQUE DE LA MATIÈRE CONDENSÉE

P. Loubeyre, A. Dewaele, G. Weck, F. Occelli, O. Marie (EA – DAM Île-de-France

DE NOUVELLES FORMES D'ENCLUME DE DIAMANT POUR ÉTUDIER LA MATIÈRE TRÈS COMPRIMÉE

La technologie des hautes pressions est en constante évolution pour pouvoir dépasser les limites du domaine d'exploration. La cellule à enclumes de diamant fut inventée il y a déjà soixante ans; cet article présente deux améliorations développées au CEA-DAM grâce à un usinage des enclumes par faisceau d'ions (ou FIB, pour Focused Ion Beam). L'une permet presque de doubler le domaine de pression atteint, l'autre rend possible le chauffage de nouveaux types d'échantillons, ouvrant dans les deux cas de nombreuses perspectives.

 étude expérimentale de matériaux sous conditions extrêmes de température et de pression permet la compréhension et la description de nombreux systèmes naturels.
Par exemple, la pression au centre de la Terre est de 360 GPa et celle au centre de Jupiter d'environ 8000 GPa. Ces expériences permettent également de tester et de vali-

der les descriptions théoriques de la matière condensée établies pour ces conditions.

Le principe de la cellule à enclumes de diamant (CED) est présenté sur la **figure 1a**: l'échantillon est comprimé entre les pointes de deux diamants; une pression de l'ordre de 100 bar est appliquée sur leur culasse et se trouve multipliée, à hauteur de leur pointe, par le rapport des surfaces entre la culasse



Figure 1

Cellule à enclumes de diamant et nouvelle forme de pointe des enclumes. (a) Dessin de principe : par rapport à la pression appliquée sur la culasse, la pression entre les têtes est multipliée par le rapport des surfaces culasse/pointe. Le diamètre des culasses est de 4 mm et celui des pointes de quelques dizaines de microns quand on souhaite atteindre des pressions de plusieurs centaines de gigapascals.
(b) Forme toroïdale de la pointe usinée par faisceau d'ions, ou FIB pour *Focused lon Beam*, en bleu comparée à la forme classique initiale en biseau. L'évidement n'a que 2 µm de profondeur, mais ce changement suffit à multiplier par 2 la pression atteinte. (c) Image par microscopie électronique d'une enclume usinée par FIB. La barre rouge indique une échelle de 30 µm.



Étude du changement solide-liquide de l'azote en cellule à enclumes de diamant. (a) Schéma en coupe de la chambre de haute pression, entre les pointes des enclumes de diamant. Le four est chauffé par laser infrarouge, qui traverse les diamants, et l'échantillon d'azote dans le four est analysé par diffraction de rayons X auprès d'un synchrotron. (b) Courbe de fusion de l'azote mesurée sous pression. Les ronds pleins désignent un solide et les ronds vides un liquide. La température de fusion augmente régulièrement avec la pression jusqu'à 120 GPa, ce qui est le comportement standard : aucun changement structural dans le liquide n'est donc mis en évidence. La brusque augmentation au-dessus de 120 GPa est due au changement de phase du solide.

et la pointe. Ce rapport étant de l'ordre de 10⁴, on atteint donc des pressions excédant un million de bars, soit 100 GPa. Du fait de la transparence des diamants, un échantillon peut être caractérisé dans ce dispositif de manière presque aussi détaillée qu'à pression ambiante. Mais depuis une quinzaine d'années, les pressions maximales obtenues en CED saturaient vers 300 GPa, même en utilisant des pointes de plus en plus petites. Cela empêchait les chercheurs d'observer de nouveaux états de la matière prédits vers 1000 GPa, et de mieux comprendre les planètes géantes ou étoiles où règnent de telles conditions.

La forme de la pointe des enclumes de diamant était jusqu'à présent imposée par la technique de polissage: une surface plane avec un ou deux biseaux présentant des facettes. La limite de 300 GPa rencontrée en utilisant ces enclumes classiques n'est pas due à l'instabilité mécanique intrinsèque du matériau diamant mais à une déformation excessive de la pointe. L'outil d'usinage par faisceau d'ions (Focused Ion Beam) dans un microscope électronique à balayage est apparu dans les années 2000. Il permet de réaliser des formes beaucoup plus complexes et ainsi de maîtriser la déformation de la pointe des enclumes. Une nouvelle géométrie de pointe de diamant avec un évidement en forme de tore a été obtenue par une démarche empirique d'essaiserreurs en utilisant les rayons X du synchrotron ESRF, situé à Grenoble, pour mesurer la déformation des pointes en fonction de la

pression 1. Le schéma de cet usinage est présenté sur la figure 1. Cette géométrie a permis de comprimer un échantillon d'or jusqu'à 600 GPa à température ambiante, et de faire les mêmes mesures qu'avec une enclume classique, doublant ainsi le domaine de pression couvert par la CED. L'équipe du CEA-DAM a ainsi observé par diffraction de rayons X que l'or gardait la même structure cristalline (cubique à faces centrées) et a pu mesurer la diminution de son volume atomique en fonction de la pression, qui atteint presque 50%. Cette géométrie sera utilisée pour étudier l'hydrogène par absorption infrarouge et rechercher sa métallisation prévue théoriquement vers 450 GPa.

Les matériaux subissent parfois des changements majeurs sous l'effet couplé de la haute pression et de la haute température. Dans le cas de l'azote condensé, on s'attend à ce que la triple liaison chimique de la molécule N=N soit cassée, pour former des chaînes polymériques. Cela a été mis en évidence dans le solide avec l'apparition de la phase polymérique cg-N au-dessus de 120 GPa et 2000°C, mais, dans le liquide, un tel changement est plus difficile à repérer. Les expérimentateurs en recherchent donc des preuves indirectes, comme un accident sur la courbe de fusion qui représente la température du changement solide-liquide en fonction de la pression (figure 2b). La chauffe des échantillons en cellule à enclumes de diamant peut poser des problèmes qui nécessitent des solutions innovantes. En effet, l'azote n'absorbe pas les lasers infrarouges de chauffe utilisés de manière standard en CED; il doit donc être chauffé par le biais d'un four. L'équipe du CEA-DAM a réalisé par FIB un microfour en diamant dopé au bore, destiné à être placé dans la chambre de haute pression de la cellule à enclumes de diamant. Ce four est chauffé par des lasers infrarouges (figure 2a). Il est positionné dans deux petites cavités usinées par FIB sur la tête des enclumes de diamant, puis pourvues d'une fine couche (1 µm) d'isolant. Cette géométrie complexe et originale, possible aussi grâce à l'usinage FIB, a permis de mesurer précisément, par diffraction X, le changement solide-liquide de l'azote à différentes pressions 2. La courbe de fusion est celle d'un matériau standard jusqu'à 120 GPa, ce qui indique que l'azote liquide ne subit aucun changement important dans ce domaine, puis elle augmente brutalement à cause de l'apparition du solide cg-N. Ces résultats contredisent certains travaux théoriques qui prédisaient l'existence d'un maximum sur la courbe de fusion dû à l'apparition d'un liquide polymérique.

L'usinage par faisceau d'ions permet donc des ruptures dans l'utilisation de la cellule à enclumes de diamant pour explorer l'extrême. La frontière des ultra-hautes pressions a été repoussée vers le térapascal tout en gardant la qualité des échantillons. La géométrie d'enclumes toroïdales ouvre une nouvelle voie d'exploration de nouvelles structures pour la matière très dense et est déjà reprise par d'autres équipes. Cet usinage permet également d'adapter l'enclume à des formes plus complexes d'échantillon permettant de nouvelles mesures en cellule à enclumes de diamant.

RÉFÉRENCES

1 A. DEWAELE, P. LOUBEYRE, F. OCCELLI, O. MARIE, M. MEZOUAR, «Toroidal diamond anvil cell for fine measurements under extreme static pressures: data on Al, Ar and Au up to 603 GPa », *Nature Com.*, **9**, p. 2913 (2018).

G. WECK, F. DATCHI, G. GARBARINO,
S. NINET, J.-A. QUEYROUX, T. PLISSON,
M. MEZOUAR, P. LOUBEYRE *et al.*, « Melting curve and liquid structure of nitrogen probed by X-ray diffraction to 120 GPa », *Phys Rev. Lett.*, **119**, 235701 (2017).

S. Brygoo, P. Loubeyre CEA – DAM Île-de-France P. Celliers, M. Millot, D. Fratanduono, J. Eggert, J. L. Peterson, N. Meezan, S. Le Pape Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, États-Unis

R. S. McWilliams University of Edinburgh, Edinburgh, Royaume-Uni J. R. Rygg, G. Collins University of Rochester, Rochester, États-Unis

A. Goncharov Carnegie Institution of Washington, Washington, États-Unis **R. Jeanloz** University of California, Berkeley, États-Unis **R. Hemley** George Washington University, Washington, États-Unis

TRANSITION ISOLANT-CONDUCTEUR DU DEUTÉRIUM FLUIDE À HAUTE DENSITÉ

Jupiter, Saturne, ainsi qu'un grand nombre de planètes extrasolaires sont constituées principalement d'hydrogène. L'étude des modèles d'intérieur de ces planètes nécessite de bien décrire la transition entre l'hydrogène moléculaire (gaz H₂, isolant) et l'hydrogène métallique (conducteur) dans la phase fluide très dense. Le caractère progressif ou abrupt de cette transition ainsi que sa localisation thermodynamique sont actuellement très discutés, et il existe une grande dispersion des différents résultats expérimentaux et des calculs. Une série de plusieurs tirs sur l'installation laser NIF (National Ignition Facility), laser de classe mégajoule, a permis, grâce à une compression dynamique parfaitement contrôlée, de comprimer le deutérium liquide jusqu'à 6 Mbar 1. La transition fluide moléculaire-fluide métallique a été clairement positionnée autour de 2 Mbar pour des températures inférieures à 2000 K. Cela constitue une donnée de référence pour contraindre les modèles planétaires et les modèles fondamentaux.

PHYSIQUE

DE LA MATIÈRE

CONDENSÉE

e passage de l'hydrogène moléculaire isolant à un métal atomique aux hautes densités est, depuis de nombreuses années, l'objet de nombreux travaux et discussions en physique fondamentale et en astrophysique. Les simulations numériques laissent penser qu'en dessous de 2000 K, cette transition isolant-métal dans un fluide dense, dénommée transition de phase plasma, pourrait être abrupte (discontinue). Mais la localisation en pression de cette transition est encore très discutée dans les calculs, entre 1 et 3 Mbar. Une divergence similaire existe aussi entre les différentes mesures réalisées par compression statique ou dynamique. Dans la compression statique, la pression et la température sont explorées de manière indépendante grâce à l'utilisation de presses à diamants couplées à un chauffage laser pulsé. Dans la compression dynamique, un choc est généré dans une cible cryogénique augmentant simultanément la pression et la température. Dans les deux cas, les approches sont poussées à leur limite technologique.

Pour contraindre la température en dessous de 2000 K dans la compression dynamique d'une cible cryogénique, il faut générer une succession de petits chocs pour approximer une compression quasi isentropique. La faisabilité de ce type d'expériences a été obtenue en 2015 par une équipe américaine des laboratoires SANDIA aux États-Unis, qui a généré cette compression douce par compression magnétique (machine Z) **2**. Cette première expérience a motivé son adaptation pour une compression laser.

Cinq chemins thermodynamiques différents ont ainsi été explorés sur l'installation américaine National Ignition Facility (NIF), où 168 faisceaux laser, délivrant jusqu'à 300 kJ, ont été mis en forme et focalisés sur l'échantillon pour le porter jusqu'à des pressions de 6 Mbar 1. Le deutérium est contenu entre un piston de cuivre et une fenêtre de fluor de lithium (LiF), et ses changements sont observés grâce à un diagnostic optique, le VISAR (Velocity Interferometer System for Any Reflector), diagnostic interférométrique qui enregistre à la fois ses mouvements (mise en vitesse), mais aussi ses changements de réflectivité dans le visible (figure 1). L'augmentation de pression est générée grâce à la mise en mouvement du piston par le laser générant une première onde de choc dans l'échantillon, qui, après une série de réverbérations entre le piston et la fenêtre d'observation, augmente progressivement la pression et la densité tout en gardant l'échantillon en dessous de 2000 K. Le chemin thermodynamique suivi (température et pression atteintes au cours du temps) est extrait de simulations hydrodynamiques reproduisant l'expérience (comparaison entre les vitesses mesurées et les vitesses calculées). Les changements optiques, traduits par les changements de l'indice de réfraction



Schéma et image expérimentale. (a) Schéma de la cible : le laser sonde du VISAR (vert) se réfléchit soit sur le cuivre, soit sur une couche d'aluminium déposée sur le LiF. (b) Le mouvement des interfaces est ainsi suivi et enregistré en fonction du temps. Chaque décalage de frange visible sur l'image en haut et en bas correspond à un changement de vitesse de l'interface D_2/LiF et Cu/D_2 respectivement. (c) En reproduisant le mouvement de ces interfaces grâce à la simulation, on peut calculer l'augmentation progressive de la densité du D₂ au cours du temps. En plus du décalage des franges, leur intensité est enregistrée et guatre zones sont ainsi identifiées: dans les zones 1, 2 et 3, l'intensité du signal est directement liée aux propriétés optiques du D₃. Au début, le laser se réfléchit sur le cuivre à travers le D₂ transparent : le signal est intense (couleur claire intense) (zone 1), car le cuivre est naturellement réfléchissant. Lorsque le D₂ devient opaque (zone sombre bleue), le laser est alors absorbé, et on observe une diminution de l'intensité du signal (zone 2). Lorsqu'il devient métallique, le signal réaugmente (zone 3, couleur claire de nouveau), car le laser se réfléchit alors directement sur le D, réfléchissant. Ce changement d'intensité est la signature du passage d'un état isolant à un état métallique. Dans la zone 4, le laser se réfléchit sur l'aluminium : le signal est intense et change peu au cours du temps.

et du coefficient d'absorption, peuvent alors être directement reliés aux pressions de transition.

Au départ, l'échantillon de deutérium était complètement transparent (zone 1, figure 1). Puis, au fur et à mesure que la pression augmentait, il est devenu opaque (zone 2) avant de se transformer en un métal brillant (zone 3) dont la grande réflectivité optique est la preuve de sa grande conductivité électrique. La transition entre les zones 1 et 2 et celle entre les zones 2 et 3 sont représentées sur la figure 2 par les points blancs et noirs. Dans la zone 4, le laser se réfléchit sur une couche d'aluminium dont la réflectivité ne change pas: l'intensité du signal varie peu au cours du temps. L'augmentation rapide de réflectivité attribuée à la transition isolant-conducteur est observée autour de 2 Mbar (figure 2), ce qui contraste avec l'expérience très similaire effectuée sur la machine Z, qui observe cette transition près de 3 Mbar. Cette différence entre les deux installations pourrait être attribuée à des dynamiques différentes dues au temps de compression plus long sur l'installation Z.

D'autres expériences de compression avec le laser NIF sont prévues sur le deutérium et sur l'hydrogène. La mesure de cette ligne de transition isolant-métal à plus haute température devrait permettre de raccorder les mesures en dessous de 2000 K avec les mesures fiables obtenues par chocs générés à l'aide d'un canon à gaz. Des mesures identiques sur l'hydrogène seront aussi importantes pour mesurer les effets isotopiques, et de ce fait l'importance des effets quantiques dans l'hydrogène dense, ce qui pourrait expliquer pourquoi la transition de phase plasma est si difficile à calculer. Comprendre cette transition au niveau fondamental est crucial pour modéliser les intérieurs planétaires, car, même si elle a lieu à des températures plus élevées dans les planètes (~5000 K), cette transition de phase, selon la théorie, est à l'origine de la séparation entre l'hydrogène et l'hélium constituant les couches externes de Jupiter et de Saturne, séparation qui pourrait expliquer les différences de luminosité.



Figure 2

Diagramme de phase du deutérium. Les points blancs indiquent le début de l'absorption et les points noirs l'augmentation de réflectivité (> 30 %). Chaque couple de points (blanc et noir) correspond à un tir laser. Pour le tir le plus bas en énergie, seul le passage transparent-absorbant a été observé. Grâce à cette technique, on comprime l'hydrogène tout en restant très froid, proche de la courbe de fusion (courbe théorique rouge en pointillés).

RÉFÉRENCES

1 P. CELLIERS *et al.*, « Insulator-metal transition in dense fluid deuterium », *Science*, **361**, p. 677-682 (2018).

2 M. KNUDSON *et al.*, « Direct observation of an abrupt insulator-to-metal transition in dense liquid deuterium », *Science*, **348**, p. 1455-1460 (2015).

PHYSIQUE DE LA MATIÈRE CONDENSÉE

L. Soulard, V. Recoules CEA – DAM Île-de-France

Z. Chen, M. Mo, P. Hering, S. H. Glenzer

SLAC National Accelerator Laboratory, Menlo Park, California, États-Unis

Y. Y. Tsui

Department of Electrical and Computer Engineering, University of Alberta, Edmonton, Alberta, Canada

A. Ng

Department of Physics and Astronomy, University of British Columbia, Vancouver, British Columbia, Canada

NOUVELLE STRATÉGIE Pour comprendre la fusion de l'or

La combinaison d'expériences et de simulations numériques à l'échelle atomique permet d'accroître la compréhension du comportement de matériaux soumis à diverses sollicitations. La fusion d'un métal induite par une impulsion laser en est un bon exemple. Elle obéit en effet à une chronologie assez compliquée qui peut avoir des conséquences importantes sur le comportement global du matériau. Pour étudier ce phénomène, des expériences ont été réalisées sur des feuilles d'or ultraminces placées dans le vide et soumises à une impulsion laser ultrabrève. La réponse de la feuille est observée en mesurant le mouvement de ses deux surfaces, ces observations étant complétées par des simulations numériques à l'échelle atomique permettant de suivre son comportement interne. Les résultats obtenus proposent une analyse originale de ce phénomène et démontrent l'intérêt de coupler calculs et expériences.

a fusion d'un matériau soumis à une sollicitation très dynamique est un processus complexe encore mal compris, couplant étroitement les propriétés atomiques de la matière (et donc de très petite échelle) et son comportement hydrodynamique (grande échelle). À l'échelle atomique, la matière peut être représentée par des noyaux baignant dans un nuage d'électrons. Les noyaux sont des ions chargés positivement, et la cohésion du système est assurée par les interactions entre ces ions et le nuage électronique. L'interaction de la matière avec une onde électromagnétique, comme une impulsion laser, se fait au niveau du nuage électronique: ce dernier est chauffé par le rayonnement à une température T_e , selon des règles décrites par la mécanique quantique. Une partie de cette énergie est ensuite transférée aux ions qui s'échauffent progressivement. Quand la température T_i des ions dépasse la température de fusion T_t , le matériau commence à fondre.

Plusieurs facteurs pilotent la chronologie de la fusion. Ainsi, le transfert de l'énergie acquise par les électrons vers les ions n'est pas instantané et dépend d'une constante de couplage électrons-ions notée g. Selon la valeur de g, le transfert d'énergie et, donc, l'échauffement des ions seront plus ou moins rapides. On a là un premier processus qui provoque un retard à la fusion par rapport à l'arrivée de l'impulsion laser. Par ailleurs, la matière s'échauffant, la réponse hydrodynamique du système se traduit par la mise en place d'un jeu d'ondes de compression et de dilatation dont la propagation provoque des variations locales des conditions de fusion: dans les zones de faible densité, T_f diminue par rapport à sa valeur standard, et augmente dans les régions de plus grande densité. On voit donc que la fusion peut être hétérogène, apparaissant plus précocement dans les zones de plus faible densité. Enfin, les défauts structuraux microscopiques initiaux du matériau peuvent favoriser localement la fusion. La fusion sous impulsion laser peut donc se montrer compliquée si les temps caractéristiques des phénomènes évoqués sont comparables, et une expérience ou une simulation ne permet pas à elle seule de démêler cet écheveau.

Dans cette étude (figure 1) 1, une feuille d'or de 30 nanomètres d'épaisseur est éclairée par une impulsion laser de 45 femtosecondes, durée permettant de mettre en évidence le déséquilibre électrons/ions. L'expérience, réalisée au SLAC National Accelerator Laboratory aux États-Unis, permet de mesurer le déplacement de la surface au cours du temps par une technique appelée FDI (Frequency Domain Interferometry), qui mesure le déphasage d'un faisceau laser sonde après sa réflexion sur une surface de la feuille. Ce déphasage peut être lié à la mise en mouvement de la surface, ainsi qu'au changement de ses propriétés électriques et optiques. On observe une évolution en trois étapes (figure 2), la première étant l'échauffement de la feuille, conduisant ensuite à la mise en mouvement



À l'instant t_a, une feuille d'or de 30 nanomètres d'épaisseur est éclairée par une impulsion laser de 45 femtosecondes. Au fur et à mesure que l'énergie du laser est transmise aux ions et accroît leur température T_p, il se met en place un système d'ondes de compression et de dilatation rendant la densité hétérogène, et provoquant des variations locales de la température de fusion T_p. Sur cette illustration, la fusion démarre préférentiellement au centre de la feuille. L'expérience fournit les propriétés optiques de la surface de la feuille, et la simulation numérique son comportement mécanique et structural.

des surfaces, puis enfin à la désintégration de la feuille. Cette expérience rend compte de certaines propriétés de la feuille à proximité immédiate de ses deux surfaces; elle n'apporte en revanche aucune observation directe sur son comportement en son cœur.

La méthode de simulation utilisée au CEA-DAM pour interpréter cette expérience est la dynamique moléculaire classique, dans laquelle le mouvement de chaque atome est pris en compte individuellement, les ions interagissant *via* la loi de Newton et des forces issues d'un modèle élaboré par ailleurs **2**. L'interaction du laser et de la matière, ainsi que les transferts d'énergie entre les ions et les électrons sont modélisés par le modèle TTM (*Two Temperature Model*) **3**. Ce type de simulation, réalisée à la même échelle de temps et d'espace que l'expérience, décrit dans le détail la réponse hydrodynamique de la feuille ainsi que sa fusion. Les temps de fusion obtenus s'accordent très bien avec les valeurs expérimentales et valident le calcul. Les résultats obtenus par la simulation illustrent l'hétérogénéité de la feuille en matière de densité et de pression; ils montrent que la fusion s'amorce au centre de la feuille, puis se propage vers les surfaces. En conclusion, l'association étroite d'expériences dotées d'une très haute résolution en temps et de simulations à l'échelle atomique permet de proposer une vue très complète de la fusion sous impulsion laser ultracourte. Cette étude prototype illustre parfaitement l'intérêt de ce couplage qui s'étend aujourd'hui à d'autres domaines de la physique des matériaux, comme la rupture ou les changements de phase sous choc.



Figure 2

Service du déphasage du faisceau sonde après sa réflexion sur une surface de la feuille. La portion bleue de la courbe est attribuée aux changements des propriétés électriques de l'or ainsi qu'à son évolution hydrodynamique avant la fusion, et la portion orangée à la désintégration de la feuille après sa fusion; on en déduit la ligne en pointillés rouges qui indique l'instant de fusion.

RÉFÉRENCES

Z. CHEN, M. MO, L. SOULARD,

V. RECOULES et al., « Interatomic potential in the nonequilibrium warm dense matter regime », *Phys. Rev. Lett.*, **121**, 075002 (2018).

2 H. W. SHENG *et al.*, « Highly optimized embedded-atom-method potentials for fourteen fcc metals », *Phys. Rev. B.*, **83**, 134118 (2011).

3 D. S. IVANOV, L. V. ZHIGILEIZ, « Effect of pressure relaxation on the mechanisms of short-pulse laser melting », *Phys. Rev. Lett.*, **91**, 105701 (2003).

P. Thibaudeau CEA – Le Ripault J. Tranchida, S. Plimpton, A. Thompson Sandia National Laboratories, Albuquerque, États-Unis

DYNAMIQUE DES SPINS ET DYNAMIQUE MOLÉCULAIRE COUPLÉE POUR L'ÉTUDE DE NANOMATÉRIAUX

Pour ouvrir la voie au calcul précis et de routine des propriétés dynamiques de matériaux magnétiques fortement hétérogènes constitués de plusieurs millions d'atomes en interaction, des chercheurs du **CEA-Le Ripault** et des laboratoires Sandia aux États-Unis ont mis au point une méthode numérique innovante couplant dynamique des spins et dynamique moléculaire. Cette méthode a été implémentée dans le code ouvert de dynamique moléculaire LAMMPS, permettant une diffusion large de la méthodologie.

epuis plusieurs années, les microsystèmes électromécaniques (MEMS) se retrouvent partout dans la vie de tous les jours, servant à déclencher nos airbags ou comme buses d'imprimantes à jet d'encre. À l'image du haut-parleur et du microphone qui sont deux dispositifs au fonctionnement réciproque, les MEMS convertissent l'énergie mécanique en énergie électromagnétique et inversement. Or, on assiste aujourd'hui à une miniaturisation extrême de ces systèmes vers des échelles nanométriques offrant des applications moins énergivores.

Par exemple, pour piloter ces MEMS par un champ magnétique alternatif, la



Figure 1

Tests numériques portant sur un ensemble de 500 atomes de cobalt en interaction. À l'instant initial, ces atomes adoptent une structure cubique à face centrée et leur vitesse suit une distribution de Maxwell-Boltzmann à 300 K. Au cours du temps (en ps), on calcule (a) l'énergie interne par atome et (b) la fraction d'aimantation M rapportée à l'aimantation à saturation. Chaque simulation est réalisée en faisant varier l'incrément temporel Δt , en ps, de résolution des progressions atomiques. On constate que les deux grandeurs fluctuent bien autour de la même valeur moyenne et que cette fluctuation diminue lorsque l'incrément temporel Δt diminue.



matière qui les constitue est magnétique. On caractérise cette matière par l'aimantation, champ vectoriel dont l'orientation varie dans l'espace et le temps. Sa dynamique est à l'origine de l'hystérèse, phénomène qui la fait dépendre de l'histoire magnétique, ou provoque des réponses complexes caractérisées par une distribution spatiale hétérogène de zones où l'aimantation est uniforme. Lorsque ces matériaux subissent des efforts mécaniques, l'aimantation est directement affectée par couplage. Modéliser ces couplages est fondamental tant pour la compréhension du fonctionnement de nouveaux nanosystèmes que pour leur design.

Pour cela, le CEA-Le Ripault a été l'un des premiers organismes à implémenter une dynamique moléculaire magnétique (DMM) **1**, approche numérique originale combinant la dynamique moléculaire, qui prédit instantanément la position et la vitesse des atomes, avec la dynamique des spins, qui prédit l'orientation des spins atomiques. Plus précisément, l'hamiltonien atomique contient l'énergie magnétique, l'énergie mécanique et l'énergie d'interaction 2,3. Les variations énergétiques par rapport à la position ou au spin créent des forces auxquelles les atomes sont soumis. La DMM les calcule séquentiellement, puis fait progresser au cours du temps chaque position, vitesse et spin.

À cause de cette structure hamiltonienne, l'ordre de progression de ces grandeurs est non commutativement entrelacé. Faire d'abord progresser dans le temps la

Figure 2

➡ Test de l'efficacité numérique de l'algorithme parallèle entrelacé pour la dynamique moléculaire magnétique, ou DMM, en rouge, comparé à celui pour la dynamique moléculaire, ou DM, en bleu, pour deux tailles de problème. Dans cette représentation, une droite horizontale montre une efficacité théorique maximale. Les cercles (resp. les carrés) représentent 250 000 atomes (resp. 2000 000 d'atomes) en interaction. Puisque la DM (en bleu) ne contient aucun spin, son efficacité est naturellement supérieure à celle de la DMM (en rouge), d'un facteur cing environ. Une performance théorique parfaite est approchée par l'algorithme parallèle de la DMM.

position, puis le spin, n'est pas équivalent à faire progresser le spin, puis la position. Or, si chaque progression dépend de l'ordre dans lequel elle est combinée, le suivi dans le temps de la totalité de ces grandeurs ne doit pas dépendre d'un ordre particulier. Quelle que soit la précision numérique demandée, un algorithme unique préservant cette propriété a pu être mis au point.

Il a été testé sur un système magnétique ne subissant aucune sollicitation externe. Dans ce cas, l'énergie totale ainsi que l'aimantation doivent rester constantes dans le temps (figure 1).

Pour modéliser des nano-objets magnétiques réels, il faut être capable de suivre dans l'espace et le temps des millions d'atomes en interaction. Afin d'exploiter le potentiel des supercalculateurs comme TERA ou les clusters des laboratoires Sandia, il a été mis au point une version parallèle de notre algorithme entrelacé **4**, car, à la difficulté de traiter la non-commutativité des opérations séquentielles, s'ajoute désormais le problème de leur exécution en parallèle. Si l'algorithme parallèle n'est pas globalement préservé, il brise la structure entrelacée produisant des ordres magnétiques et mécaniques non physiques.

À courte portée, les interactions magnétiques sont les plus intenses, et le calcul de leurs forces dépend de l'orientation des spins dans le voisinage immédiat de chaque atome. Mais comme les atomes sont mobiles, chaque spin voit ses voisins changer, et ceux-ci doivent être constamment suivis. Cela est crucial lorsque deux spins résident sur deux processeurs différents, car il faut absolument s'assurer que lorsqu'un spin est mis à jour, il utilisera la progression temporelle la plus à jour de tous les autres spins qui lui sont voisins. Une méthode de sectorisation a donc été développée comme extension de décompositions en domaines rencontrées en dynamique moléculaire. Désormais, chaque processeur acquiert et intègre temporellement les atomes de son seul sous-domaine, tout en maintenant à jour la liste d'atomes fictifs qui appartiennent aux processeurs voisins, dont l'information est obtenue par communication. On doit diviser chaque sous-domaine en un nombre identique de régions plus petites, de sorte que les processeurs, où résident des spins hors de la distance d'interaction, peuvent être mis à jour simultanément et sans communication. On fait alors progresser les spins dans une région, puis chaque processeur distribue ses valeurs actualisées avant que ne soit mise à jour une autre région. Et ainsi de suite.

La figure 2 montre l'efficacité d'un nouvel algorithme massivement parallèle, préservant la structure de la DMM. Cette avancée, garante essentielle de la qualité des résultats, permet l'évaluation des propriétés dynamiques de plusieurs millions d'atomes magnétiques en interaction, ouvrant ainsi la voie à l'étude par simulation numérique des réponses de réels nano-objets.

RÉFÉRENCES

1 D. BEAUJOUAN, P. THIBAUDEAU, C. BARRETEAU, « Anisotropic magnetic molecular dynamics of cobalt nanowires», *Physical Review B*, **86**, 174409 (2012).

2 A. AHARONI, *Introduction to the theory of ferromagnetism,* Oxford Science Publications (1996).

3 E. DU TRÉMOLET DE LACHEISSERIE, *Magnetostriction*, CRC Press (1993).

4 J. TRANCHIDA, S. J. PLIMPTON, P. THIBAUDEAU, A. P. THOMPSON, « Massively parallel symplectic algorithm for coupled magnetic spin dynamics and molecular dynamics », *Journal of Computational Physics*, **372**, p. 406-425 (2018).

MÉCANIQUE DES FLUIDES

O. Soulard, J. Griffond, D. Souffland (CEA – DAM Île-de-France

RÔLE DES GRANDS TOURBILLONS DANS LA MODÉLISATION DES ZONES DE MÉLANGE TURBULENT

Les zones de mélange turbulent issues de l'interaction d'une onde de choc avec une interface iouent un rôle important dans de nombreuses applications rencontrées au CEA-DAM, notamment lors de l'implosion de capsules utilisées pour étudier la fusion par confinement inertiel (FCI). L'évolution aux temps longs de ces zones est reliée aux propriétés des grands tourbillons présents dans l'écoulement. En effet. ces grandes structures gardent une trace de leur état initial et influencent le taux de croissance de la zone de mélange.

ans une expérience de fusion par confinement inertiel (FCI), une cible sphérique est comprimée à l'aide de lasers, jusqu'à ce que les conditions de densité et température en son cœur permettent d'amorcer des réactions de fusion. Au cours de l'implosion, des ondes de choc peuvent traverser la cible. Celle-ci étant constituée de matériaux divers assemblés en coquilles imbriquées, des instabilités dites de Richtmyer-Meshkov 1 peuvent être engendrées. Ces instabilités se produisent lorsqu'une onde de choc impacte une interface séparant deux fluides de densités différentes. Suite à cette interaction, les perturbations initialement présentes à l'interface se développent. Elles croissent d'abord linéairement. Puis, des structures non linéaires ressemblant à des bulles et à des aiguilles apparaissent.

Enfin, une zone de mélange se forme et atteint un état turbulent (figure 1). Cet état est notamment caractérisé par la présence de tourbillons dont les échelles spatiales varient sur plusieurs ordres de grandeur. La plus petite échelle est associée aux tourbillons dont l'énergie est dissipée par la viscosité. La plus grande est liée à la géométrie de la configuration. Dans l'exemple montré sur la figure 1, les plus grands tourbillons débordent de l'épaisseur de la zone de mélange, tandis qu'à l'inverse, les plus petits s'étendent sur une épaisseur environ cent fois moindre. La répartition de l'énergie cinétique portée par ces différents tourbillons en fonction de leur taille est donnée par une fonction appelée spectre d'énergie turbulente. Elle est notée E(k), où $k = 2\pi/l$ est le nombre d'onde associé aux tourbillons de taille *l*.

Figure 1

Résultat d'une simulation numérique d'une zone de mélange turbulent issue d'une instabilité de Richtmyer-Meshkov. La simulation a été réalisée avec le code Triclade du CEA – DAM 4, qui résout les équations de Navier-Stokes par une méthode de type volumes finis. La figure montre les isocontours du champ de la concentration massique relative c de l'un des fluides, avec en rouge une valeur c=0,9 et en bleu une valeur c=0,1. Dans une expérience de fusion par confinement inertiel, la zone de mélange a une épaisseur très inférieure aux dimensions millimétriques de la cible.





Sevential de l'exposant de croissance de l'épaisseur de la zone de mélange, θ , en fonction de l'exposant infrarouge du spectre initial d'énergie cinétique turbulente, s_0 . La courbe en rouge (prédiction) correspond à la formule $\theta = \frac{2}{S_0+4}$ déduite du principe de permanence des grandes échelles. Les points noirs correspondent aux résultats de simulations numériques réalisées avec le code Triclade. La prédiction $\theta = \frac{2}{S_0+4}$ est validée par les simulations et pourra être utilisée pour améliorer les modèles statistiques de turbulence du CEA – DAM.

Dans sa phase turbulente et aux temps longs, l'épaisseur L d'une zone de mélange issue de l'instabilité de Richtmyer-Meshkov obéit à une loi de puissance en fonction du temps $t: L \propto t^{\theta}$. L'exposant θ de cette loi est un paramètre clé des écoulements de Richtmyer-Meshkov et sa prédiction correcte est l'un des attendus essentiels des modèles statistiques de turbulence utilisés au CEA-DAM 2. L'une des principales questions concernant θ est de savoir s'il dépend des conditions initiales ou non. La réponse à cette question est liée au comportement des grands tourbillons de l'écoulement. En effet, le temps caractéristique de retournement d'un tourbillon (c'est-à-dire le temps mis par le tourbillon pour faire un tour complet sur lui-même) est d'autant plus long que ce dernier est grand. L'évolution des très grands tourbillons peut donc être suffisamment lente pour que l'information initiale qu'ils portent soit préservée au cours du temps. Cette information initiale est alors susceptible de définir la valeur de θ . Lorsque cette propriété est vérifiée, on parle de permanence des grandes échelles.

Pour établir sous quelles conditions cette permanence peut avoir lieu, il faut être en mesure d'estimer le temps de retournement des tourbillons. Or, ce temps est lié aux non-linéarités présentes dans les équations de Navier-Stokes qui régissent l'écoulement. Pour le déterminer, un modèle spectral peut alors être utilisé pour exprimer la façon dont ces non-linéarités sont corrélées au champ de vitesse pour chaque nombre d'onde k. À l'aide d'un tel modèle \exists , on déduit que la permanence des grandes échelles dans une zone de mélange dépend de la valeur de l'exposant spectral initial s_0 . Cet exposant est celui de la loi de puissance vérifiée par le spectre initial aux petits nombres d'onde : $E(k) \propto k^{s_0}$ pour les petits k (grandes échelles). Dans le cas d'une instabilité de Richtmyer-Meshkov, la valeur de s_0 est fixée par les caractéristiques de l'interface initialement impactée par le choc.

Plus précisément, on déduit que les grandes échelles sont permanentes lorsque $s_0 < 4$ et cessent de l'être lorsque $s_0 \ge 4$. De plus, en supposant que le spectre conserve globalement sa forme au cours du temps, on obtient que $\theta = \frac{2}{s_0+4}$ lorsque la permanence

des grandes échelles est établie. Pour vérifier ces prédictions, des simulations numériques ont été réalisées avec le code Triclade du CEA–DAM, qui résout les équations de Navier-Stokes par une méthode de type volumes finis **4**. Un maillage dépassant le milliard de mailles est utilisé. Un bon accord entre valeurs de θ simulées et prédites est obtenu (figure 2).

En conclusion, l'étude menée a permis d'établir un lien entre la croissance aux temps longs d'une zone de mélange issue d'une instabilité de Richtmyer-Meshkov et ses conditions initiales aux grandes échelles. Cette connaissance peut ensuite être utilisée pour améliorer les modèles statistiques de turbulence utilisés au CEA-DAM 2.

RÉFÉRENCES

Y. ZHOU, « Rayleigh-Taylor and Richtmyer-Meshkov instability induced flow, turbulence, and mixing », *Phys. Rep.*, **720-722**, p. 1 (2017).

2 0. GRÉGOIRE *et al.,* « A second-order turbulence model for gaseous mixtures induced by Richtmyer-Meshkov instability », *J. Turb.,* **6**, p. 1 (2005).

3 0. SOULARD *et al.*, « Permanence of large eddies in Richtmyer-Meshkov turbulence with a small Atwood number », *Phys. Rev. Fluids*, **3**, p. 104603 (2018).

4 M. BOULET, J. GRIFFOND, « Three-dimensional numerical simulation of experiments on Richtmyer-Meshkov induced mixing with reshock », *Proceedings of the 10th International Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing (IWPCTM)*, Paris, 17-21 juillet 2006, Eds. M. Legrand et M. Vandenboomgaerde, p. 33-36 (2006).

MÉCANIQUE ET THERMIQUE

P. Pradel, F. Malaise, J.-H. Quessada (FA – Cesta

C. Delhomme CEA – Le Ripault T. de Rességuier

Institut Pprime, Unité propre de recherche 3346 CNRS – École nationale supérieure de mécanique et d'aérotechnique (ENSMA) – Université de Poitiers

G. Le Blanc CEA – Gramat

COMPACTION DYNAMIQUE D'UNE MOUSSE POLYURÉTHANE : EXPÉRIENCES ET MODÉLISATION

Les mousses polymères trouvent de nombreuses applications industrielles en tant qu'isolants thermiques, matériaux de structuration ou atténuateurs de choc. Une des applications envisagées par le CEA-DAM est la protection de structures face à des chargements mécaniques générés lors d'irradiations laser ou lors d'impacts de débris micrométriques. Une campagne expérimentale sur lanceur à gaz a été menée afin de soumettre une mousse polyuréthane à un chargement dynamique. Un modèle a par ailleurs été développé pour restituer, par la simulation numérique, le comportement dynamique de cette mousse. Le bon accord entre résultats expérimentaux et numériques confirme la pertinence d'un tel modèle.

a protection de marchandises ou de personnes lors d'événements accidentels, comme un crash ou l'impact à grande vitesse d'un projectile, intéresse les industries automobile, aérospatiale et militaire. Le point commun à toutes ces applications est la recherche de systèmes performants permettant d'atténuer les effets de chargements intenses et rapides. Des expériences de choc laser sont menées sur le Laser Mégajoule, en France, ou sur le National Ignition Facility, aux États-Unis. Sur ces installations, des ondes de choc intenses (pressions supérieures à dix gigapascals) et brèves (durées inférieures à la microseconde) sont générées dans la chambre d'expérience par impact de débris micrométriques ou irradiation laser directe. Le CEA-DAM cherche ainsi à développer des systèmes de protection efficaces visà-vis d'une irradiation laser ou d'impacts à très grande vitesse de débris. L'utilisation de mousses polymères en tant qu'atténuateurs de choc est d'un grand intérêt, car il s'agit de matériaux légers ayant un excellent rapport masse/rigidité et de faibles coûts de production.

Le matériau étudié est une mousse expansée en polyuréthane rigide, fabriquée au CEA-Le Ripault **1**. Cette mousse a une masse volumique de 320 kg/m³ et une porosité de l'ordre de 66%. Les pores sont sphériques et leur diamètre est de l'ordre de la centaine de microns.

ESSAIS QUASI STATIQUES

Pour étudier le comportement de la mousse à faible vitesse de déformation (environ 10^{-3} s⁻¹), des essais quasi statiques en compression ont été réalisés au CEA-Le Ripault 2. La courbe donnant la contrainte d'une éprouvette en fonction de la déformation (variation relative de sa longueur), enregistrée au cours d'un essai en compression, est présentée sur la figure 1. Des observations au microscope optique



Figure 1

Courbe donnant la contrainte en compression d'une éprouvette de mousse en fonction de sa déformation, c'est-à-dire de la variation relative de sa longueur, et observations au microscope optique Olympus GX 71 des échantillons après essais. La courbe se sépare en trois phases : élasticité linéaire jusqu'à la déformation ε_e , compaction caractérisée par un long plateau au cours duquel la déformation augmente pour une contrainte quasi constante, et compaction du matériau densifié à partir de la déformation ε_a , où le comportement de la mousse est proche de celui du matériau dense. Les parties foncées sur les micrographies correspondent à des zones qui ne laissent pas passer la lumière. Cela signifie que la résine d'imprégnation (utilisée pour préparer les échantillons aux observations microscopiques) n'a pas pénétré ; les pores sont intacts et sont restés fermés. Au contraire, les parties claires correspondent à des zones où la résine d'imprégnation a pu pénétrer ; les pores se sont ouverts suite à une dégradation importante de la structure lors du chargement mécanique.



Olympus GX 71 ont également été effectuées sur des échantillons comprimés jusqu'à des contraintes de plus en plus élevées. Dès le début de la phase dite de compaction, la forme des pores devient elliptique. Au début de la phase suivante de densification, la dégradation de la structure est évidente, avec quelques signes de flambage des parois. Pour le chargement maximal, toute la structure est endommagée.

ESSAIS DYNAMIQUES ET SIMULATION NUMÉRIQUE

Pour étudier le comportement de la mousse à haute vitesse de déformation (environ 10⁵ s⁻¹), des expériences dynamiques ont été réalisées à l'aide du lanceur à gaz Sylex du CEA-Cesta (figure 2) 3. Il s'agit d'observer et d'analyser la propagation d'ondes de contrainte dans les échantillons de mousse.

Ces essais consistent à générer une onde de compression suivie d'ondes de recompression pour compacter progressivement l'échantillon de mousse. Le profil de vitesse expérimental, présenté sur la figure 3, montre les différentes phases qui reflètent la propagation des ondes de choc et de détente dans la mousse. Pour analyser les résultats de ces expériences et pour pouvoir extrapoler à des conditions de chargement difficiles à tester expérimentalement, une représentation des mécanismes de compaction de la mousse est nécessaire. Le comportement dynamique de la mousse a été simulé au moyen d'un modèle phénoménologique macroscopique 4, implémenté dans un code d'hydrodynamique du CEA-DAM. Les paramètres de ce modèle ont tout d'abord été identifiés de manière à reproduire la courbe contrainte-déformation en régime quasi statique (figure 1), puis ajustés de manière à mieux restituer les profils de vitesse en régime dynamique. Le comportement en

Figure 2

Principe des essais lanceur réalisés sur les échantillons de mousse. Un projectile, constitué d'un sabot en polyéthylène et d'un impacteur en polyméthylmétacrylate (PMMA), est mis en vitesse par le lanceur. Il impacte un transmetteur en PMMA, derrière lequel sont collés des échantillons de mousse et des fenêtres en PMMA. Comme il est d'usage dans ce type d'expériences, la réponse dynamique des échantillons de mousse est étudiée en mesurant, par interférométrie laser par effet Doppler, l'évolution de la vitesse u(t) de l'interface mousse/fenêtre au cours du temps.

régime dynamique de la mousse est en effet sensiblement différent de celui en régime quasi statique. La confrontation expérience/ calcul permet de valider le modèle (figure 3), puisque celui-ci permet de restituer à la fois les temps d'arrivée et les niveaux de vitesse du précurseur élastique, de l'onde de compaction et des ondes de re-choc, qui sont des données primordiales pour la détermination des niveaux de contrainte pouvant être atteints dans la fenêtre (ou le composant à protéger).

Des expériences ont également été réalisées sur cette mousse avec le générateur électrique de pression intense (Gepi) du CEA-Gramat, le générateur de faisceau d'électrons Cesar du CEA-Cesta, et différents lasers, pour d'autres vitesses de déformation (de 10^4 à 10^6 s⁻¹). Les confrontations expériences/calculs confirment la pertinence du modèle numérique employé. Cela permet d'être confiant quant à la validité des calculs de dimensionnement des essais qui pourront être menés sur le Laser Mégajoule, où des pressions de 10 GPa pourront être atteintes. Les travaux futurs consisteront à améliorer le modèle en prenant en compte les effets visqueux, et à développer un modèle à l'échelle mésoscopique, afin d'évaluer certaines hypothèses concernant les mécanismes de compaction à l'échelle des cellules.



Figure 3

Profils de vitesse u(t) (voir figure 2) expérimental et numérique mesurés à l'interface mousse/ fenêtre. L'onde de pression générée dans la mousse est scindée en une onde appelée « précurseur élastique» et une onde de compaction. Le précurseur se propage rapidement dans la mousse. C'est la première onde arrivant au niveau de la face arrière de l'échantillon de mousse. La réflexion des ondes de choc au niveau des interfaces transmetteur/mousse et mousse/fenêtre donne naissance à de nouvelles ondes de choc (re-chocs), et la réflexion de l'onde de compression sur la face arrière de l'impacteur génère une onde de détente, qui se propage ensuite dans la mousse. Le modèle permet de restituer à la fois les temps d'arrivée et les niveaux de vitesse du précurseur élastique, de l'onde de compaction et des ondes de re-choc.

RÉFÉRENCES

P. PRADEL, F. MALAISE, T. DE RESSÉGUIER, C. DELHOMME, G. LE BLANC, J.-H. QUESSADA,

« Dynamic compaction of polyurethane foam: experiments and modelling », *Eur. Phys. J. Special Topics*, **227**, p. 3-16 (2018).

P. PRADEL, Étude de la compaction dynamique de mousses polymères : expériences et modélisation, thèse de doctorat de l'École nationale supérieure de mécanique et d'aérotechnique (ENSMA), soutenue le 13 décembre 2017.

PRADEL, F. MALAISE, T. DE RESSÉGUIER, C. DELHOMME, B. CADILHON, J.-H. QUESSADA, G. LE BLANC, « Stress wave propagation and mitigation in two polymeric foams », *Proceedings of the Shock compression of condensed matter conference*, St Louis, États-Unis, 9-14 juillet 2017, *AIP Conference Proceedings*, 1979, 110015 (2018).

L. SEAMAN, R. E. TOKHEIM, D. R. CURRAN, « Computational representation of constitutive relations for porous materials », Stanford Research Institute, Technical Report No. DNA-3412F (1974).

OPTIQUE ET OPTRONIQUE

E. Hugonnot, P. Morin, J. Dubertrand CEA – Cesta, Laboratoire de recherche conventionné SyLFE (Systèmes lasers fibrés énergétiques) A. Mussot, G. Bouwmans

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

MISE EN ŒUVRE DE LA TECHNIQUE D'AMPLIFICATION NON LINÉAIRE PAR FIBRE OPTIQUE POUR L'ÉVOLUTION DU LASER PETAL

Le prix Nobel de physique a été décerné en 2018 pour des travaux sur la technique d'amplification laser par dérive de fréquence (CPA, pour Chirped Pulse Amplification). Cette technique est utilisée dans un laser pilote pour l'injection du laser à ultrahaute intensité PETAL. au sein de l'installation Laser Mégajoule. Dans les évolutions envisagées de PETAL, un système compact, robuste et simple d'utilisation a été concu, qui reste compatible avec les spécifications exigeantes des lasers de puissance. Entièrement réalisé avec des fibres optiques, ce système utilise un processus de transfert d'énergie entre ondes laser. Pour une énergie disponible supérieure au microjoule par impulsion, le gain de l'amplificateur, réalisé au CEA-Cesta, atteint plus de 10⁵, ce qui constitue un record pour cette technologie.

a technique d'amplification par dérive de fréquence (CPA) constitue un principe d'architecture qui permet d'accéder à des intensités laser extrêmement élevées. Il s'agit du concept fondamental utilisé pour la réalisation d'un laser à ultra-haute intensité tel que le laser PETAL, atteignant des puissances crêtes de l'ordre du pétawatt (10¹⁵ W) **1**. La première étape consiste à allonger temporellement une impulsion laser extrêmement courte par un système fortement dispersif. Une impulsion de durée située dans la gamme allant de la femtoseconde à la picoseconde est ainsi étirée typiquement dans le domaine de la nanoseconde. Ce procédé permet de diminuer de plusieurs ordres de grandeur la puissance crête de l'impulsion, qui peut alors être amplifiée à des niveaux inatteignables autrement. Une fois le niveau d'énergie désiré atteint, l'impulsion est ramenée à une durée comparable à la valeur d'origine par compression temporelle.

Il existe plusieurs méthodes d'amplification utilisées dans le concept général



Figure 1

Dispositif expérimental réalisé au CEA – Cesta pour l'évolution de l'injection du laser PETAL. Issues d'un oscillateur laser femtoseconde, les impulsions sont tout d'abord étirées temporellement dans un dispositif dispersif constitué d'un circulateur optique et de deux fibres à réseaux de Bragg. Elles sont ensuite amplifiées par mélange d'ondes dans une fibre à bande interdite photonique, dont le principe de guidage consiste à confiner la lumière dans le défaut central d'un cristal photonique 2D (vue en coupe sur la photographie). Finalement, les impulsions sont comprimées temporellement à une durée proche de celle d'origine.





CPA. La plus répandue est l'amplification par émission stimulée comme sur le laser PETAL, mais la recherche de systèmes laser donnant accès à des puissances moyennes de plus en plus importantes et des impulsions de plus en plus courtes et puissantes rend extrêmement attractives des méthodes alternatives, telles celles basées sur des processus non linéaires. Ainsi, l'amplification paramétrique optique (OPA) permet l'amplification d'impulsions aussi courtes que quelques femtosecondes (soit un ordre de grandeur de mieux que ce qui est possible en utilisant l'émission stimulée), limite le niveau de bruit d'amplification ou supprime les effets thermiques délétères à forte cadence. Ces propriétés remarquables proviennent notamment de l'absence de stockage d'énergie dans le milieu à gain. En effet, le processus est basé sur un mécanisme de mélange d'ondes se produisant en présence de non-linéarités. En respectant une condition appelée accord de phase (qui provient des règles générales de conservation de l'énergie et de conservation de la quantité de mouvement), on peut obtenir un transfert d'énergie entre les ondes en présence. Lorsque ce transfert s'effectue entre un faisceau monochromatique de forte énergie (faisceau de pompe) et un signal étiré temporellement dans le cadre de l'architecture CPA, on parle alors d'amplification paramétrique d'impulsions par dérive de fréquence (OPCPA pour Optical Parametric Chirped Pulse Amplification en anglais). Et si, de plus, cette technique OPCPA est appliquée en géométrie

fibrée, on utilise le terme de FOPCPA (pour *Fiber* OPCPA).

Le système expérimental FOPCPA qui a été réalisé au CEA-Cesta, pour pouvoir injecter une chaîne laser telle que PETAL 2, présente des performances allant bien au-delà de celles démontrées jusqu'à présent. Le schéma de principe est donné sur la figure 1. Les impulsions ultracourtes générées par un oscillateur laser sont étirées temporellement à l'aide d'un système totalement fibré, puis injectées dans un amplificateur paramétrique. Celui-ci est constitué d'une fibre optique spécifique qui permet d'effectuer par mélange d'ondes le transfert d'énergie entre le faisceau de pompe et le signal étiré temporellement. La difficulté principale étant d'obtenir la condition nécessaire d'accord de phase, il a fallu concevoir et réaliser une fibre dont le mécanisme de guidage particulier permet de contrôler soigneusement la dispersion (figure 1). La figure 2 montre les spectres optiques mesurés avant (bleu) et après (rouge) l'amplificateur. En entrée, seul le spectre du signal étiré est visible autour de 1053 nm. Après mélange d'ondes, on obtient, de part et d'autre de la pompe résiduelle, une forte amplification du signal (gain de plus de 10⁵) et l'apparition d'une onde complémentaire (idler en anglais) générée par conservation de l'énergie. Au pied de ces trois ondes principales, on peut voir des composantes spectrales générées par divers effets non linéaires. Parmi ceux-ci, l'interaction de l'onde pompe avec les vibrations du milieu (diffusion Raman stimulée) s'avère particulièrement importante dans notre configuration, car elle génère un gain supplémentaire s'ajoutant au gain paramétrique, et permet ainsi d'atteindre une efficacité de conversion de la pompe vers le signal de 46%, une valeur record. Finalement, la sortie de l'amplificateur est filtrée spectralement pour ne conserver que la partie signal centrée sur 1053 nm, d'énergie 1 μ J, puis comprimée à une durée proche de celle d'origine.

Ces résultats montrent clairement tout le potentiel de la technique FOPCPA qui a permis de mettre en œuvre un système entièrement réalisé avec des fibres optiques délivrant des impulsions intenses. Ce système pourra être utilisé pour les évolutions à moyen terme du système injecteur de la chaîne laser à ultra-haute intensité PETAL.

RÉFÉRENCES

1 N. BLANCHOT *et al.*, «PETAL, un laser pétawatt de haute énergie : performances expérimentales et modélisation », Revue *chocs avancées*, **12**, p. 32-33 (2018).

2 P. MORIN *et al.*, «μJ-level Raman-assisted fiber optical parametric chirped-pulse amplification», *Opt. Lett.*, *43*, p. 4683-4686 (2018).

INSTRUMENTATION, MÉTROLOGIE ET CONTRÔLE

A. Lefrançois, J. Luc, Y. Barbarin CEA – Gramat, Laboratoire de recherche conventionné LICUR

B. Rougier, H. Aubert

Laboratoire d'analyse et d'architecture des systèmes (LAAS), CNRS – Université de Toulouse – Institut national polytechnique de Toulouse, Laboratoire de recherche conventionné LICUR

ÉTUDE DES MATÉRIAUX Sous choc par radio-Interférométrie doppler

La caractérisation des matériaux soumis à un choc est un enjeu majeur pour de nombreuses applications dans les domaines de la défense, de l'aéronautique et du spatial. Pour déterminer la réponse d'un matériau sous choc, deux grandeurs doivent être mesurées: la vitesse de l'onde de choc et la vitesse du milieu sous choc, appelée vitesse matérielle. Parmi les techniques existant dans la littérature 1. la radiointerférométrie Doppler offre des avantages en matière d'intégration pour effectuer une mesure simultanée et non intrusive. Cependant, il faut aussi connaître les propriétés diélectriques sous choc pour déterminer les vitesses. Pour pallier ce problème, un modèle de propagation d'une onde électromagnétique à travers les différentes interfaces en mouvement permet de déterminer à la fois les vitesses et les propriétés diélectriques des matériaux. Ce modèle, dit modèle à deux couches, est proposé, puis validé par une comparaison entre l'expérience et le calcul numérique hydrodynamique.

a simulation numérique en physique des chocs requiert la connaissance fine des propriétés dynamiques des matériaux. De nombreuses techniques expérimentales permettent de les caractériser **1**. Seule la radio-interférométrie par effet Doppler offre la possibilité de mesurer simultanément la vitesse de choc et la vitesse matérielle de manière non intrusive.

Pour étudier une interface en mouvement dans un matériau par radiofréquence, la connaissance de la permittivité relative est nécessaire. La permittivité relative au repos est accessible par ailleurs avec un banc de mesure spécifique. En revanche, la permittivité relative pour le milieu sous choc n'est pas connue. Les modèles disponibles dans la littérature dépendent de la variation de la masse volumique. Ils sont validés dans le domaine de l'optique pour des matériaux solides et en radiofréquence pour quelques matériaux poreux seulement. Pour aller au-delà, l'approche originale étudiée ici propose de déterminer la permittivité relative sous choc et les deux vitesses à partir des données expérimentales.

MODÉLISATION ÉLECTROMAGNÉTIQUE D'UN MATÉRIAU SOUS CHOC

Un modèle à deux milieux, appelé modèle à deux couches, a été développé ici pour permettre de calculer la réflexion et la transmission du signal source aux interfaces du matériau d'étude (figure 1). Un choc plan soutenu, correspondant à une valeur constante de pression égale à plusieurs gigapascals sur une durée limitée de quelques microsondes, est généré par l'impact d'une plaque épaisse sur la cible.



Figure 1

Réflexions du signal source radio-interférométrique sur les interfaces mobiles de la cible, après impact d'une plaque métallique de vitesse V₀ sur une cible. Pendant la propagation du choc dans la cible, une partie du milieu est choquée (densité ρ_2 et permittivité ε_{r_2}), l'autre est encore au repos (densité ρ_1 et permittivité ε_{r_2}). Le trait rouge dans la cible indique la position du choc qui se déplace à la vitesse V₁ (flèche rouge), tandis que la partie choquée de la cible se déplace à la vitesse matérielle V₂. Le signal radiofréquence envoyé sur la cible est réfléchi sur le choc (flèches bleues) et sur l'interface entre l'impacteur et la cible (flèches vertes). La mesure de l'amplitude et de la fréquence des signaux réfléchis permet de déterminer simultanément la permittivité relative du milieu sous choc de la cible, sa vitesse matérielle et la vitesse de l'onde de choc.



Comparaison expérience-calcul de la vitesse de choc et de la vitesse matérielle en fonction du temps pour une composition énergétique à base de TATB (triamino-trinitrobenzène) et une vitesse d'impact de 847,9 m/s. Les barres d'incertitude expérimentale et numérique sont tracées sur le graphique; les données expérimentales sont exploitables dans le matériau d'étude pour une durée inférieure à 3 μs. Pour la vitesse matérielle, les résultats expérimentaux et de simulation sont superposés. La nouvelle approche est ainsi validée.

L'onde électromagnétique incidente est réfléchie d'abord par le choc, puis par l'interface impacteur métallique/cible. Par application de la transformée de Lorentz 2, chaque fréquence associée à chaque interface en mouvement peut être exprimée en fonction de la permittivité relative de chaque milieu au repos, de la fréquence de la source radiofréquence, du rapport d'amplitude des deux fréquences observées et de la vitesse de chacune des interfaces. En faisant les hypothèses du déplacement des interfaces à vitesse constante, de la réflexion totale de l'onde électromagnétique entre l'impacteur et le milieu choqué et de l'absence de pertes diélectriques, on obtient alors un système de trois équations à trois inconnues, qui permet de déterminer les vitesses d'intérêt, ainsi que la permittivité relative du matériau sous choc à partir des fréquences et des amplitudes du signal.

RÉSULTATS EXPÉRIMENTAUX ET COMPARAISON AVEC LES SIMULATIONS NUMÉRIQUES

La configuration expérimentale retenue consiste à réaliser des impacts plans sur des cibles en Plexiglas **3** ou en explosif **4**. Ces travaux sur cibles inerte et énergétique valident l'approche proposée grâce aux faibles écarts constatés entre les résultats expérimentaux et les simulations numériques hydrodynamiques, réalisées au CEA-DAM. Dans le cas de la cible en Plexiglas, moins de 3% d'incertitude sur la vitesse du choc et moins de 6% sur la vitesse matérielle ont été obtenus. L'expérience permet de confirmer aussi l'influence de l'hypothèse de réflexion totale. Les propriétés diélectriques du Plexiglas sous choc obtenues sont cohérentes avec des études de la littérature sur l'indice de réfraction en optique. De plus, dans le cas d'une cible constituée d'un explosif comprimé à base de TATB, les incertitudes sont du même ordre qu'avec la cible en Plexiglas. Les écarts respectifs sur les deux vitesses mesurées sont faibles par rapport à ceux obtenus par simulation numérique hydrodynamique, et dépendent des erreurs sur la détermination des fréquences et des rapports d'amplitude des signaux bruts, ainsi que sur la permittivité relative au repos (figure 2). La nouvelle approche est donc ici validée par la comparaison expérience-calcul.

CONCLUSION

L'apport de l'interférométrie radiofréquence Doppler a été étudié pour accéder aux propriétés des matériaux sous choc. Une nouvelle modélisation de la propagation d'une onde électromagnétique à travers un choc est proposée ici, permettant d'exploiter le signal radio-interférométrique en déterminant les propriétés diélectriques du matériau sous choc, inconnues jusqu'alors. Par l'étude des réflexions sur les différentes interfaces mobiles, il est possible d'extraire simultanément les deux vitesses d'intérêt, à savoir la vitesse de choc et la vitesse matérielle, par un modèle à deux couches, ainsi que la permittivité relative du matériau sous choc. Cette approche a été validée ici par plusieurs études expérimentales lors d'expérimentations d'impacts plans sur des cibles en Plexiglas ou constituées d'explosifs. La suite

des travaux envisagée prévoit la caractérisation des pertes diélectriques au repos et leur intégration dans le modèle à deux couches, l'amélioration de la précision sur l'identification des fréquences et le développement d'un modèle à plusieurs milieux, appelé modèle multicouche. Cela permettra de s'affranchir de l'hypothèse de déplacement des interfaces à vitesse constante et donc de généraliser la caractérisation des matériaux sous choc dans des conditions dynamiques complexes.

RÉFÉRENCES

1 M. A. MEYERS, Dynamic behavior of materials, John Wiley & Sons (1994).

2 B. ROUGIER et al., « Reflection of electromagnetic waves from moving interfaces for analyzing shock phenomenon in solids », *Radio Science*, **53**, p. 888-894 (2018).

3 B. ROUGIER *et al.*, « Measurement of shock wave and particle velocities in shocked dielectric material from millimeterwave remote sensing », *Proceedings of European microwave conference 2018*, Madrid, Espagne, 25-27 septembre 2018, p. 855-858 (2018).

4 B. ROUGIER *et al.*, « Simultaneous shock and particle velocities measurement using a single microwave interferometer on pressed TATB composition T2 submitted to plate impact », *Proceedings of the 16th International symposium on detonation*, Cambridge, Maryland, États-Unis, 15-20 juillet 2018, à paraître.

INSTRUMENTATION, MÉTROLOGIE ET CONTRÔLE

J.-M. Duda, P. Le Goff, Y. Leblois, S. Ponsard CEA – Valduc

MODÉLISATION DU RENDEMENT DE PIÉGEAGE DU TRITIUM Atmosphérique par barbotage Dans l'eau

Les barboteurs sont les dispositifs de piégeage les plus utilisés par les exploitants nucléaires pour quantifier le tritium atmosphérique dans leurs installations et/ou dans leur environnement proche. Pourtant, les informations nécessaires pour passer de la mesure à la quantité de tritium dans l'air ne sont pas facilement accessibles ou peu étavées par des démonstrations en conditions réelles d'utilisation. Dans ce travail. l'approche expérimentale pour v accéder est améliorée en modélisant la grandeur d'intérêt (rendement de piégeage dans un dispositif de barbotage), à partir de plus de 2000 données issues de dix années (2005-2015) de surveillance des installations et de l'environnement du CEA-Valduc.

sotope radioactif de l'hydrogène, le tritium intègre tous les compartiments environnementaux sous différentes formes chimiques. Dans l'atmosphère, il se présente principalement sous forme de vapeur d'eau tritiée (HTO) puis de gaz (HT, T₂). Les installations nucléaires le rejettent, soit sous forme HTO dans les effluents liquides, soit sous forme HT et/ou HTO dans les effluents gazeux. Compte tenu de la très grande mobilité du tritium, les exploitants doivent quantifier les ambiances de travail dans leurs installations

et surveiller l'impact de leurs rejets dans leur environnement proche **1**.

Pour respecter les autorisations de rejet, les exploitants disposent de différents moyens pour quantifier le tritium atmosphérique: par mesure directe, avec des compteurs à circulation de gaz, ou indirecte, par mesure de l'activité HTO contenue dans l'eau atmosphérique, extraite de pièges secs (gels de silice ou zéolithes) **2**, collectée sur des points froids ou encore piégée par barbotage, dans une eau de référence avec une faible teneur en tritium.



Figure 1

Schéma de principe d'un barboteur à quatre pots de barbotage. Après filtration des particules solides d'un diamètre supérieur à 11 µm. le volume d'air échantillonné, contrôlé avec un débitmètre massique, est entraîné vers l'unité de piégeage de la forme HTO (pots B1 et B2), puis vers l'unité de piégeage de la forme HT (pots B3 et B4) après son oxydation par le four catalytique, dont le rôle est de convertir le tritium HT en HTO. Le rôle des générateurs de bulles millimétriques est de favoriser les échanges moléculaires et/ ou l'équilibrage isotopique entre l'atmosphère à l'intérieur des bulles et l'eau de piégeage.

La technique par barbotage est la plus répandue du fait de sa simplicité d'utilisation (figure 1) et de sa capacité à discriminer plusieurs formes chimiques du tritium (principalement HTO et HT) avec une bonne répétabilité des résultats. Par construction, le système de barbotage utilisé dispose de deux unités de piégeage. Chaque unité se compose de deux pots de barbotage, un pot principal (B1 et B3) et un pot de garde (B2 et B4). Les pots B1 et B2 ne piègent que la forme HTO et les pots B3 et B4 captent la forme HT et/ou la forme HTO résiduelle non retenue par l'unité HTO. Le rôle des pots de garde est de capter le tritium non retenu par le pot précédent. Le rendement de piégeage de chaque pot est compris entre 75 et 90%. Dans ces conditions, deux pots par unité de piégeage suffisent pour capter de 94 à 99% du tritium contenu dans l'air échantillonné. Cependant, cette technique dilue le tritium piégé dans l'eau de référence 3. Ainsi, dans le cas de faibles concentrations atmosphériques, il est fréquent qu'en fin de prélèvement, le tritium dans l'eau de barbotage ne soit pas quantifiable au-delà des limites de détection usuelles: typiquement 0,2 Bq·m-3 d'air échantillonné sur une durée de 7 jours. Dans ce cas, il est expérimentalement impossible d'accéder au rendement de piégeage. Le rendement est estimé expérimentalement, à partir des activités intégrées dans tous les pots de barbotage, par le ratio entre la quantité de tritium retenu par les pots de barbotage et la quantité de tritium contenu dans l'air échantillonné.

Pour répondre à cette problématique, une relation directe entre le rendement de piégeage, la durée de prélèvement, la température et l'humidité de l'air échantillonné a été mise en évidence. Cette relation se décompose en deux parties. La première partie, intrinsèque à la durée de prélèvement Δt et aux paramètres de fonctionnement du barboteur (volume d'eau initial dans les pots de barbotage, débit d'air prélevé ou encore températures de refroidissement de l'eau de piégeage et ambiante du local où est placé le barboteur), souligne que le rendement de piégeage diminue lorsque la durée de prélèvement augmente. Elle s'applique indifféremment aux quatre pots de barbotage. La seconde partie, spécifique au premier pot de barbotage, dépend de la température et de l'humidité absolue de l'air prélevé, lesquelles induisent une variation du volume d'eau ΔV dans le premier pot de barbotage aux moments du prélèvement (figure 2). Cette variation est un indicateur des conditions climatiques pendant le prélèvement. Sa pertinence vient du fait que, comme pour l'activité volumique, la variation du volume d'eau dans le premier pot de barbotage est une quantité intégrée satisfaisante, quel que soit le régime des conditions climatiques, transitoire ou continu, sec ou humide.

Cette étude a permis de déterminer, à partir de données facilement disponibles, un modèle robuste du rendement global de piégeage du tritium (HTO et HT) en fonction de la durée de prélèvement et de la variation du volume d'eau dans les pots de barbotage B1 ou B3 (**figure 2**). Contrairement aux autres études, où les paramètres sont contrôlés et stables pendant le prélèvement, le modèle établi est applicable dans un large domaine de fonctionnement, en conditions réelles d'utilisation dans les installations ou dans l'environnement. Ce modèle permet de quantifier le rendement de piégeage et d'estimer l'incertitude, due au prélèvement, dont la connaissance répond aux exigences des normes en vigueur. De plus, il permet d'estimer la concentration atmosphérique (HTO et/ ou HT) et son incertitude associée même lorsque l'activité du pot de garde d'une unité de piégeage n'est pas significative.

Il est à noter que des résultats de cette étude **4** ont été retenus dans le cadre de la publication de la norme nationale, relative au prélèvement et à la quantification du tritium atmosphérique, NF M60 312-1 (en cours de consultation ministérielle pour homologation), laquelle a été retenue comme nouvelle proposition de norme internationale référencée NWIP ISO 20045.



Figure 2

Distribution de 1366 valeurs expérimentales du rendement de piégeage ε_{R1} du premier pot de barbotage, après 7 jours de prélèvement en installation, où les données expérimentales sont représentées par les points noirs. La ligne en trait plein représente le modèle établi, exprimé en fonction de la durée de prélèvement (ici égale à 7 jours) et de l'écart par rapport au volume d'eau restant dans le pot de barbotage en fin de prélèvement. Les lignes en pointillés noirs représentent l'incertitude de modélisation élargie au niveau de confiance de 95% et les lignes en pointillés gris représentent l'incertitude globale élargie incluant l'écart-type expérimental. On constate que le rendement de piégeage diminue lorsque le volume d'eau décroît, et réciproquement. Ce modèle robuste du rendement de piégeage aidera à quantifier le tritium atmosphérique dans les installations et leur environnement proche.

RÉFÉRENCES

 P. GUÉTAT*et al.*, « Apports de la surveillance du centre CEA – Valduc sur la connaissance des transferts de l'eau tritiée atmosphérique dans les différents compartiments de l'environnement », *Radioprotection*, 48, p. 367-389 (2013).

2 P. CALDEIRA IDEIAS *et al.*, « Développement d'un piégeur passif pour la surveillance du tritium atmosphérique », *Radioprotection*, **52**, p. 57-64 (2017).

3 L. F. BELOVODSKI et al., Tritium, Moscow Energoatomizdat (1985).

4 J.-M. DUDA *et al.*, « Efficiencies of tritium (3H) bubbling systems », *Journal of Environmental Radioactivity*, **189**, p. 236-249 (2018).

INSTRUMENTATION, MÉTROLOGIE ET CONTRÔLE

P. Vincent, F. Larsonnier CEA – DAM Île-de-France **D. Rodrigues** Laboratoire national de métrologie et d'essais (LNE), Trappes

VERS L'ÉTALONNAGE PRIMAIRE DE CAPTEURS DE PRESSION INFRASONORE

La maîtrise de la mesure de pression dynamique infrason est au cœur des exigences opérationnelles pour l'Organisation du traité d'interdiction complète des essais nucléaires (Otice). Pour y répondre, le CEA et le Laboratoire national de métrologie et d'essais (LNE) développent un nouvel étalon primaire assurant la traçabilité des mesures au Système international d'unités (SI), au moven d'un pistonphone laser. La validation expérimentale des modèles théoriques d'admittance acoustique de transfert des cavités cylindriques a été une étape primordiale pour atteindre le niveau d'exigence de cet étalon.

es infrasons sont des ondes acoustiques dont la fréquence se situe en dessous du seuil moyen d'audition de l'oreille humaine, soit environ 20 Hz. Récemment, la demande de mesure de pression dynamique aux fréquences infrasonores a émergé, en lien avec les problématiques liées à des événements géophysiques et industriels. Une autre application clé consiste à répondre aux besoins de l'Otice, qui réalise une surveillance internationale à l'aide d'un réseau de capteurs infrasonores, appelés microbaromètres. Le CEA-DAM développe ce type de capteurs depuis les années soixante et équipe plus de 80% des stations infrasonores de ce réseau. Pour répondre à son besoin, l'Otice fixe des spécifications, notamment sur la réponse en fréquence des microbaromètres dans la bande d'intérêt allant de 0,02 Hz à 4 Hz.

La vérification des capteurs infrasonores est un enjeu particulièrement important pour la mission de détection du CEA-DAM. En comparant la mesure du microbaromètre à celle obtenue avec l'étalon connu de la grandeur physique observée, l'erreur de mesure est obtenue, associée à son incertitude.

Dans le domaine des pressions dynamiques, la méthode actuellement utilisée dans le monde par les laboratoires nationaux de métrologie pour l'étalonnage primaire des microphones étalons est la méthode absolue de la réciprocité, décrite dans la norme internationale CEI 61094-2:2009 1. Cette méthode, basée sur l'usage



Figure 1

Dispositif expérimental ayant servi à éprouver les modèles théoriques. Le système de réciprocité (1), composé de deux microphones couplés acoustiquement par une cavité cylindrique en saphir, est placé dans une chambre à pression statique régulée (2), elle-même installée dans une zone de contrôle thermique (3) au sein du laboratoire.



Résultats expérimentaux de l'épreuve des formulations théoriques d'admittance acoustique de transfert des cavités cylindriques, en amplitude et en phase. Les modèles normalisés sont représentés pour leurs solutions à basses fréquences et ondes planes. Or, les grandeurs représentées doivent tendre respectivement vers 0 dB et 0 degré pour une formulation théorique parfaite. Le modèle alternatif « général » apparaît être l'unique modèle valide parmi ceux étudiés dans cette bande de fréquences, en amplitude et en phase. Le modèle alternatif « à court terme » fournit également des erreurs plus faibles que les modèles normalisés.

de coupleurs cylindriques fermés, est couramment appliquée pour des fréquences allant de 20 Hz à 25 kHz. En revanche, l'étalonnage primaire pour des fréquences inférieures n'a pas été étudié jusqu'à récemment. Le manque d'étalon primaire et le niveau de confiance actuel permettent uniquement de faire des mesures relatives entre laboratoires pour un même capteur. Reconnaissant ces défis à relever pour la période 2017-2027, le Bureau international des poids et mesures (BIPM) a souligné le besoin stratégique de capacité d'étalonnage acoustique dans la bande des fréquences infrasonores.

Afin de répondre à cet enjeu, le CEA-DAM et le LNE ont entrepris la conception et le développement d'un étalon primaire à 1 Hz, du point de vue théorique et expérimental.

En se basant sur la norme pour l'étalonnage des microphones étalons par la méthode de la réciprocité, les modèles qui décrivent le comportement acoustique des cavités cylindriques dans les basses fréquences ont été testés. Cette méthode utilise deux microphones réciproques couplés acoustiquement par un coupleur, généralement de forme cylindrique, fermé à ses extrémités par les diaphragmes des microphones, l'un servant d'émetteur et l'autre de récepteur (figure 1). Le produit des efficacités des microphones est déterminé à partir de mesures électriques et du calcul analytique de l'admittance acoustique de transfert du système. Puisque cette quantité décrit les effets acoustiques et thermodynamiques dans les cavités cylindriques, la validité de sa formulation est une étape indispensable. La modélisation analytique de cette quantité a été largement étudiée dans le domaine acoustique, y compris pour la contribution des effets thermiques et visqueux. La collaboration entre le CEA-DAM et le LNE a permis de mettre en évidence des différences significatives de comportement théorique entre les modèles normalisés à très basses fréquences, ce qui entraîne des incohérences dans les résultats d'étalonnage. Ainsi, à partir de l'équation de Navier-Stokes, celle de Fourier pour la conduction de la chaleur, l'équation de conservation de la masse et celle caractérisant la bivariance du milieu thermodynamique, deux formulations théoriques alternatives ont été développées, que l'on peut comparer à des solutions théoriques normalisées 2. L'unique hypothèse utilisée pour la résolution du problème est une pression uniforme, ce qui est largement vérifié

dans les infrasons au vu des dimensions de la cavité cylindrique. L'expérience menée (figure 1) pour tester la validité des formulations discutées conclut clairement que la première solution alternative dite générale est l'unique modèle valide (parmi les formulations étudiées) dans la bande de fréquences ciblée, pour l'amplitude et pour la phase (figure 2). Cette expérience conclut également que la seconde solution alternative dite à court terme fournit également des erreurs plus faibles que les solutions normalisées.

Cette collaboration a permis de démontrer que les modèles cités dans la norme CEI 61094-2:2009 ne sont pas adaptés aux très basses fréquences. Un nouvel étalon primaire est développé suite à ces travaux : il apparaît clairement que son modèle doit se baser sur la solution alternative générale. La conception de cet étalon utilise les enseignements tirés de la caractérisation des instruments développés par le CEA-DAM 3, ainsi que la validation expérimentale de la formulation générale de l'admittance acoustique de transfert des cavités cylindriques en basses et très basses fréquences. Ce dispositif est un générateur d'infrasons, appelé pistonphone laser, de géométrie cylindrique. Il est en cours de caractérisation au LNE. Sur la base des résultats de ces travaux, une révision de norme est en cours, et une future norme pour l'étalonnage primaire par la méthode des pistonphones laser est envisagée par la communauté internationale.

RÉFÉRENCES

1 CEI 61094-2:2009, « Electroacoustics -Measurement microphones – Part 2: Primary method for the pressure calibration of laboratory standard microphones by the reciprocity method », Norme CEI (2009).

P. VINCENT et al., « Acoustic transfer admittance of cylindrical cavities in infrasonic frequency range », *Metrologia*, 56, 015003 (2019).

3 P. VINCENT *et al.*, « Analytical modelling and characterisation of an infrasound generator in the air », *Applied Acoustics*, **148**, p. 476-483 (2019).

COMPOSANTS ET ÉQUIPEMENTS ÉLECTRONIQUES

P. Hoffmann, M. Girard CEA – Gramat T. Dubois, G. Duchamp Laboratoire de l'intégration du matériau au système (IMS), UMR 5218 CNRS – Université de Bordeaux – Bordeaux Aquitaine INP

EFFETS DES AGRESSIONS ÉLECTROMAGNÉTIQUES SUR UNE CHAÎNE DE RÉCEPTION RADIOFRÉQUENCE

Les armes à énergie dirigée électromagnétiques constituent un des domaines de l'armement conventionnel. Après quelques décennies d'étude et de prototypage, aussi bien en matière de génération du rayonnement que de son effet sur des systèmes électroniques, ces armes de nouvelle génération commencent à entrer dans le paysage international des armements. Les études menées au CEA-Gramat ont montré qu'elles peuvent présenter une réelle menace pour les équipements électroniques, notamment pour les chaînes de réception radiofréquence embarquées sur la plupart des systèmes électroniques (GPS pour Global Positioning System en anglais, téléphonie mobile, télécommande, radars, etc.). Une de ces études a permis de révéler et de comprendre les mécanismes physiques induits sur la partie relative à l'amplification à faible bruit des chaînes de réception radiofréquence par une agression électromagnétique représentative d'une arme potentielle. Les effets vont de la perturbation rémanente du module sur quelques heures à sa destruction totale.

epuis quelques années, on observe à l'échelon international un accroissement de la disponibilité de sources électromagnétiques, tant du point de vue de la montée en puissance rayonnée, de la diversité des formes d'ondes engendrées, que de l'augmentation de leur compacité et donc de leur facilité d'emport **1**.

Dans le même temps, les composants embarqués dans les systèmes électroniques sont devenus de plus en plus sensibles, notamment en raison de la diminution de leur taille, de leur marge de bruit et des niveaux de plus en plus faibles des signaux véhiculés. La **figure 1** illustre un schéma typique d'étage d'entrée de chaîne de réception radiofréquence.

Dans un scénario d'attaque par arme à énergie dirigée électromagnétique (AED

EM), le signal d'agression peut pénétrer directement par l'antenne; on parle alors de scénario front door (agression de systèmes électroniques munis d'antennes). L'amplificateur à faible bruit (ou LNA, pour Low Noise Amplifier) est souvent le premier élément actif que le signal AED EM rencontre. Jusqu'à présent, les études ont porté principalement sur l'analyse des susceptibilités électromagnétiques vis-à-vis d'agressions électromagnétiques engendrant des perturbations non destructrices. En revanche, peu d'études ont été conduites sur la compréhension des phénomènes physiques à l'origine de la destruction de LNA 2. Or, la compréhension des mécanismes physiques à la base de la susceptibilité électromagnétique est une condition nécessaire à la protection efficace des systèmes électroniques. Dans cette optique, le CEA-Gramat a



Figure 1

Constitution d'un étage d'entrée d'une chaîne de réception radiofréquence et vue du LNA (Low Noise Amplifier) réalisé au CEA – Gramat.



 Caractéristique d'amplification du LNA (a) avant et après destruction et (b) visualisation sous microscope optique des zones semi-conductrices du transistor.

mis en œuvre une expérimentation sur des LNA **3** réalisés spécifiquement pour appréhender finement les effets induits, de type pHEMT (*pseudomorphic High Electron Mobility Transistor*) de technologie AsGa (arséniure de gallium), largement répandus dans les applications radiofréquence. Elle cherche à mettre en évidence les phénomènes physiques responsables de la susceptibilité, tant en matière de destruction que de perturbations rémanentes.

Le LNA sous test est adapté (ses caractéristiques en transmission et réflexion sont optimisées) au voisinage de la fréquence civile du GPS de 1575 MHz pour être représentatif d'un LNA utilisé dans ce type de système. Après vérification de l'absence d'influence des composants passifs, des impulsions de largeur 100 ns, de fréquence 1575 MHz répétées périodiquement et d'amplitude variable, ont été injectées à l'entrée du LNA sous test derrière l'antenne. Les résultats ont permis de mettre en évidence sa destruction, caractérisée par une chute de l'amplification en puissance du montage d'un facteur 100000 (figure 2). Après une caractérisation statique courant-tension et dynamique en paramètres S (mesures des caractéristiques en transmission S21 et S12 et en réflexion S₁₁ et S₂₂) du LNA, puis une analyse du transistor (élément actif du LNA) en radiographie par rayons X et en microscopie optique, l'hypothèse du lieu de destruction s'est portée sur l'espace grillesource d'une largeur de 1 µm (le croisement des résultats de toutes les mesures a pu valider cette hypothèse). Les caractéristiques de claquage de cette zone, en champ électrique, sont en effet inférieures à celles du champ interne engendré par le signal AED EM lors de l'expérimentation.

Connaissant la valeur en amplitude du signal AED EM ayant provoqué la destruction du LNA, d'autres LNA identiques ont été agressés de façon progressive. En faisant croître l'amplitude de la forme d'onde, tout en restant en deçà de la valeur de destruction, une dégradation fonctionnelle du LNA sur son coefficient de réflexion en sortie a été observée (**figure 3**), altérant ainsi ses performances fonctionnelles.

La singularité des résultats réside dans le temps de recouvrement des paramètres dégradés à leur valeur initiale, supérieur à 30 heures. Cette valeur de constante de temps est typiquement associée au chargement de pièges dits profonds. Les deux types de dégradation présentés dans cet article montrent, si besoin était, qu'il est impératif de protéger les systèmes électroniques vis-à-vis des agressions électromagnétiques. Les protections existantes contre ces agressions nécessitent l'emploi d'une technologie sophistiquée pour minimiser ses effets sur la qualité de la réception du signal radiofréquence, ce qui peut se traduire par un coût non négligeable sur des équipements grand public.



Figure 3

Paramètre d'adaptation en sortie du LNA et son évolution en fonction de l'augmentation de l'amplitude d'agression de l'arme à énergie dirigée électromagnétique.

RÉFÉRENCES

1 W. RADASKY *et al.*, « Introduction to the special issue on high-power electromagnetics (HPEM) and intentional electromagnetic interference (IEMI) », *IEEE Trans. on electromagnetic compatibility*, **46**, p. 314-321 (2004).

2 L. LIN, L. ZHOU, W. YIN, L. HUANG, « Electrothermal breakdown of an intentional electromagnetic pulse injected into Ku-Band GaAs MESFET-based low noise amplifier (LNA) », *Proc. of the 2012 IEEE international symposium on electromagnetic compatibility*, Pittsburgh, Pennsylvanie, États-Unis, 6-10 août 2012, p. 329-333 DOI: 10.1109/ISEMC.2012.6351827 (2012).

3 M. GIRARD, P. HOFFMANN, T. DUBOIS, G. DUCHAMP, « Effects of HPEM stress on GaAs low-noise amplifier from circuit to component scale », *Microelectronics Reliability*, **88-90**, p. 914-919 (2018).

SCIENCES DU CLIMAT ET DE L'ENVIRONNEMENT

R. Marion, Y. Philippets (EA – DAM Île-de-France) V. Carrère

Laboratoire de planétologie et de géodynamique, UMR 6112 CNRS – Université de Nantes – Université d'Angers P.-Y. Foucher, X. Briottet ONERA, Toulouse

TÉLÉDÉTECTION HYPERSPECTRALE DES SITES INDUSTRIELS

L'imagerie hyperspectrale est une technique de télédétection particulièrement adaptée à l'étude des sites industriels et de leur impact sur l'environnement. Son exploitation nécessite d'utiliser des modèles physiques de formation de l'image et de développer des méthodes avancées de traitement du signal et des images pour extraire les informations pertinentes. Des méthodes innovantes sont présentées dans cette étude afin d'identifier et de cartographier les minéraux caractéristiques d'une usine de traitement d'effluents, ainsi que les aérosols émis par une raffinerie.

es problématiques environnementales et climatiques sont aujourd'hui au cœur d'enjeux sociétaux majeurs. Dans ce cadre, les activités industrielles jouent un rôle central, et il est important d'étudier leur impact. Pour cela, de nombreuses techniques sont mises en œuvre combinant observations et mesures sur le terrain et en laboratoire, modélisations physiques et chimiques, et outils mathématiques pour comprendre et prévoir l'impact de ces activités anthropiques sur l'évolution de notre planète. Une difficulté majeure réside dans la complexité des milieux industriels. En effet, ils se présentent généralement sous plusieurs formes: effluents gazeux, liquides et solides, minéraux industriels, pollution des sols et des eaux, impact sur la végétation, etc. Étudier ces milieux suppose de prendre en compte l'ensemble de ces composantes pour caractériser l'activité d'un site. Aujourd'hui, l'imagerie satellitaire ou aéroportée est largement utilisée, car elle permet de fournir des cartographies des paramètres d'intérêt (mesures spatialisées par opposition aux mesures ponctuelles) permettant de caractériser à distance de larges zones à moindre coût.

Il existe différentes modalités d'imagerie (optique, radar, infrarouge et hyperspectrale) qui fournissent des informations complémentaires sur la scène observée. L'imagerie hyperspectrale (ou spectro-imagerie) 1 est particulièrement adaptée, car les images sont acquises dans plusieurs centaines de bandes spectrales simultanément dans le domaine de longueurs d'onde 0,4-2,5 µm, avec une résolution spatiale allant du mètre à la dizaine de mètres. Ainsi, à chaque pixel de l'image est associé un spectre représentant l'énergie mesurée par le capteur pour chaque longueur d'onde. Ce spectre, ou signature spectrale, permet l'analyse physicochimique des différents éléments constituant le pixel. De par sa polyvalence, elle constitue



Figure 1

Cartographie minéralogique du site de neutralisation des effluents liquides de l'usine de production de TiO₂ (dioxyde de titane) de Thann en Alsace. (a) Image optique Pléiades, (b) image hyperspectrale APEX, (c) cartographie obtenue avec l'algorithme d'optimisation 3 du gypse rouge (en rouge), du gypse blanc (en vert) et de la calcite (en bleu), et (d) spectres de laboratoire des minéraux principaux: gypse rouge, gypse blanc et calcite. Ces informations fournissent des renseignements sur le procédé industriel mis en jeu dans l'installation et permettent d'évaluer son impact sur l'environnement.



Caractérisation physico-chimique des aérosols émis par la raffinerie Total Fina située sur le port d'Anvers, en Belgique. (a) Image hyperspectrale AHS sur laquelle un fin panache d'aérosols est visible au-dessus de l'eau sur la gauche de la cheminée d'émission (ellipse rouge). (b) Contribution à l'épaisseur optique totale des particules de type sulfate de rayon moyen 0,3 μm. (c) Contribution à l'épaisseur optique totale du mode fin (0,1 μm) des aérosols de type *brown carbon*. (d) Épaisseur optique totale du panache [0,02-0,15]. Ces informations obtenues avec le filtre adapté a renseignent sur le type, la taille et la concentration des particules émises par l'installation.

un outil puissant pour analyser les différentes composantes des milieux industriels 2. Dans cet article, les résultats obtenus pour la cartographie de minéraux industriels et la caractérisation d'aérosols sont présentés.

Le spectre de réflectance d'un minéral (figure 1) présente des absorptions spécifiques, dont la position en longueur d'onde dépend principalement de sa composition chimique; c'est la caractéristique majeure qui permet de l'identifier. Or, la forme générale du spectre (ou continuum) peut varier de manière importante, car elle dépend des propriétés physiques de la surface (granulométrie, humidité, etc.) et non de ses propriétés chimiques. Cela rend délicate l'identification du minéral par les techniques classiques. Aussi un algorithme d'optimisation **3** a-t-il été développé, qui permet, à partir de la modélisation des spectres en une somme de gaussiennes et d'un continuum, de localiser la position des absorptions spécifiques, d'estimer leur profondeur et leur forme, et de calculer les paramètres du continuum. Il est ainsi possible d'utiliser la position des absorptions pour identifier le minéral en la comparant à une base de données de positions préalablement tabulées pour des minéraux industriels typiques, tout en s'affranchissant des conditions de surface prises en compte dans le continuum. À partir d'une image hyperspectrale obtenue grâce à un imageur aéroporté APEX (*Airborne Prisme Experiment*), cette approche a permis de réaliser une cartographie minéralogique du site de neutralisation des effluents de l'usine de production de TiO_2 de Thann, en Alsace (figure 1). Les résultats montrent une détection de sulfates (gypses) qui indique une utilisation d'acide sulfurique dans le procédé industriel. Les perspectives de ce travail concernent d'une part l'amélioration de la méthode d'estimation des paramètres du modèle des spectres et du module d'identification (utilisation d'un système expert d'intelligence artificielle), et d'autre part le développement de techniques permettant d'apporter une information quantitative sur les concentrations des différents minéraux présents au sein d'un même pixel.

Dans le cas des aérosols, la difficulté est double. Tout d'abord, les propriétés des particules émises par les industries sont encore très mal connues, et les bases de données actuelles ne contiennent pas les informations nécessaires à la compréhension et la modélisation de leur impact radiatif. Il a ainsi été nécessaire de définir une classification spécifique en ce qui concerne le type et la granulométrie. Ensuite, les aérosols ont une signature spectrale qui varie lentement avec la longueur d'onde, rendant complexe la séparation de leur contribution avec celle du sol, en particulier pour les panaches industriels pour lesquels les épaisseurs optiques (grandeur sans unité liée à la concentration et au pouvoir d'extinction des aérosols) sont généralement faibles. Aussi une méthode originale a-t-elle été développée, basée sur un filtrage adapté à la fois à la signature de l'aérosol et au type de sol sous le panache 4. Cela a permis d'obtenir, à partir d'une image hyperspectrale AHS (Airborne Hyperspectral Scanner), une cartographie de la composition et de la granulométrie des aérosols émis par la raffinerie Total Fina située sur le port d'Anvers, en Belgique (figure 2).

Ces résultats obtenus avec des imageurs aéroportés confirment l'intérêt de la mesure hyperspectrale pour l'étude des sites industriels. Ils contribuent au dimensionnement de projets de satellites hyperspectraux de seconde génération en cours d'étude 5, au-delà des instruments récemment lancés ou prévus à court terme (Prisma, Italie, lancé en mars 2019; EnMAP, Allemagne, prévu pour 2020).

RÉFÉRENCES

1 http://www.sfpt.fr/hyperspectral

R. MARION, « Télédétection hyperspectrale des milieux industriels – Développements méthodologiques et applications », Habilitation à diriger des recherches, soutenue le 24 octobre 2016 et délivrée par l'université Pierre-et-Marie-Curie".

R. MARION *et al.*, «Mineral mapping using the automatized gaussian model (AGM) – Application to two industrial French sites at Gardanne and Thann », *Remote Sens.*, **10**, p. 146 (2018).

Y. PHILIPPETS *et al.*, « Anthropogenic aerosol emissions mapping and characterization by imaging spectroscopy – Application to a metallurgical industry and a petrochemical complex », *International Journal of Remote Sensing*, **40**, p. 364-406 (2019).

5 M.-J. LEFÈVRE-FONOLLOSA *et al.*, « Preparing the future: The HYPXIM mission», 36th European association of remote sensing laboratories (EARSeL 2016) symposium, 20-24 juin 2016, Bonn, Allemagne, abstract: <u>http://www.earsel.org/symposia/2016-symposium-Bonn/Abstract_Book_EARSeL_Symp_2016.pdf</u>.

SCIENCES DU CLIMAT ET DE L'ENVIRONNEMENT

A. Dechamp CEA – DAM Île-de-France **F. Hollender** CEA – Cadarache **C. Cornou** Institut des sciences de la Terre (ISTERRE), Grenoble

CARACTÉRISATION DES CONDITIONS DE SOL DE STATIONS SISMIQUES PAR MÉTHODE D'ONDE DE SURFACE

Dans le domaine de l'aléa sismique, les modèles empiriques utilisés dans la prédiction de mouvement sismique sont calés sur des données enregistrées par différentes stations à la géologie contrastée (du sédiment, moins rigide, au rocher, plus rigide). Une partie du signal est contrainte par les propriétés du milieu où est implantée la station. La méconnaissance de ces conditions de sol participe à l'augmentation de l'incertitude sur la prédiction du mouvement sismique. Les méthodes d'imagerie sismique non invasives, fondées sur l'utilisation des ondes sismiques de surface, permettent de produire des profils de vitesse des ondes sismiques en fonction de la profondeur et des métadonnées (ou caractéristiques) fiables sur les stations. À terme, cela permettra une meilleure estimation ou prise en compte des effets de site, correspondant à des amplifications locales des ondes sismiques dans les couches géologiques de proche surface. Ce type d'information est utile pour analyser au plus juste les données enregistrées sur les réseaux sismiques.

n site peut être caractérisé par son profil de sol et particulièrement son profil de vitesse Vs des ondes de cisaillement S (type d'ondes sismiques le plus destructeur). La vitesse Vs30 est la valeur movenne de la vitesse des ondes S sur les trente premiers mètres et permet de classer le sol selon une typologie définie dans les normes appliquées au génie parasismique. Pour obtenir ce paramètre et accéder à des caractérisations validées et justifiées de ces stations, il existe des méthodes invasives fondées sur la réalisation de forages et mesures associées de type cross-hole 1. Ces méthodes sont coûteuses et difficilement réalisables à l'échelle de plusieurs stations isolées, dans des environnements parfois difficiles d'accès.

Une autre approche consiste à caractériser ces sites par des méthodes non invasives, basées sur les ondes sismiques de surface et leurs propriétés dispersives (dépendance à la fréquence de leur vitesse) **1**. Ces méthodes se sont particulièrement développées ces dernières années et le CEA a participé à plusieurs projets ou groupes de travail sur la caractérisation des sites.

Ainsi, entre 2012 et 2015, un effort particulier a été fait pour mieux caractériser un nombre important de stations du réseau accélérométrique permanent français (RAP). La sélection des stations a consisté à retenir les sites qui enregistraient un



Figure 1

Cartes montrant, à deux échelles différentes, les géométries d'acquisition pour la station dite OGIM, située près de Grenoble. La géométrie d'acquisition est adaptée aux contraintes locales. Tous les réseaux AVA (*Ambient Vibration Array*) utilisent la station centrale, nommée «Centre », située le plus près possible de la station sismique (étoile violette). Le profil MASW (*Multi-Analysis Surface Wave*) (à droite) est réalisé le plus près possible de la station centrale. grand nombre d'événements et ceux utilisés comme références dans les travaux d'inversion généralisée à partir des données du RAP 2. Trente-trois stations ont été retenues (sur les 150 du réseau), principalement dans les Pyrénées, en Provence-Alpes-Côte d'Azur et dans le Massif central.

Cette méthodologie inclut une méthode active (MASW pour *Multi-Analysis Surface Wave*) et une méthode passive (AVA pour *Ambient Vibration Array*). La première consiste à déployer une ligne de capteurs sismiques et à enregistrer les vibrations produites par une source ponctuelle en surface. La seconde est basée sur l'enregistrement synchrone de vibrations ambiantes par un réseau 2D de capteurs. Dans l'exemple suivant, les mesures ont été adaptées à la configuration géométrique du site et réalisées sur des cercles concentriques de rayon croissant (figure 1).

À partir de ces deux types de mesures, les vitesses des ondes de surface sont estimées sur chaque gamme de fréquences (des plus hautes fréquences sur le profil MASW pour la très proche surface, aux plus basses fréquences sur les réseaux de sismomètres d'ouverture variable qui permettent de descendre en fréquence, donc en profondeur). Les deux méthodes de prospection sont complémentaires, car elles permettent de couvrir des gammes de fréquences et de profondeurs différentes.

Les courbes de dispersion sont ensuite pointées sur chaque gamme de fréquences recherchées et sont ensuite mises en commun pour estimer une courbe moyenne de dispersion des ondes de surface pour l'inversion conjointe des données. L'étape d'inversion des données obtenues s'appuie sur un algorithme de voisinage **3**, qui permet d'obtenir un ensemble de profils verticaux Vs acceptables, pour lesquels la courbe de dispersion théorique est contenue dans les écarts-types de la mesure (**figure 2**).

Les travaux réalisés ont montré que, même dans des contextes peu favorables, à vitesses de propagation élevées ou marquées topographiquement, ces méthodes sont adaptées à la caractérisation de sites, permettant d'atteindre des profondeurs bien souvent supérieures par rapport aux méthodes classiques d'investigation invasives.

Figure 2

Obtention d'un profil de vitesse Vs pour la station sismique OGIM (voir figure 1). (a) Ensemble des modèles de vitesses des ondes S (Vs) statistiquement acceptables et expliquant les données observées avec leurs limites d'incertitude. (b) Exemples de courbes de dispersion (DC) théoriques obtenues à partir de l'ensemble des modèles des profils de vitesse Vs inversés de la figure (a). La ligne pleine (en noir) montre les vitesses des ondes de surface mesurées, ajustant le modèle préférentiel de courbe de dispersion et permettant d'obtenir l'ensemble des profils de vitesses améliorent la caractérisation des sols.

Comparativement aux données utilisées antérieurement, souvent fondées sur des estimations empiriques de Vs30, ces travaux 4 ont permis de proposer de nouvelles valeurs avec une notion d'incertitude associée, et de déclasser certaines stations vers une classe de sol plus mou. Il a aussi été montré que pour les sites à vitesse élevée, c'est-à-dire sur sol plus dur, souvent utilisés comme références, il est également possible d'accéder aux valeurs de vitesse grâce à de larges ouvertures des réseaux AVA. Des amplifications à haute fréquence ressortent sur la plupart de ces sites, dues à la faible couche de sol à la surface. Cette propriété devrait être prise en compte pour une bonne utilisation des données accélérométriques dans les études à haute fréquence.

Les perspectives consisteront à appliquer ces caractérisations aux autres stations du RAP, puis à confronter les modèles synthétiques tirés des modèles de vitesse aux enregistrements, en incluant d'autres propriétés de dispersion. Ces travaux devraient permettre de mieux contraindre les profils Vs et leurs incertitudes associées, pour rendre plus robustes les caractérisations de site et pour une meilleure prise en compte des effets de site.

RÉFÉRENCES

1 F. GAROFALO *et al.,* «InterPACIFIC project: Comparison of invasive and non-invasive methods for seismic site characterization. Part II: Inter-comparison between surface-wave and borehole methods », *Soil Dyn. Earthq. Eng.*, **82**, p. 241-254, doi: 10.1016/j.soildyn.2015.12.009 (2016).

2 S. DROUET *et al.*, « Vs30, κ, regional attenuation and Mw from accelerograms: application to magnitude 3-5 French earthquakes », *Geophys. J. Int.*, **182**, p. 880-898, doi: 10.1111/j.1365-246X.2010.04626.x (2010).

M. WATHELET, « An improved neighborhood algorithm: Parameter conditions and dynamic scaling », *Geophysical Research Letters*, **95**, p. 1787-1800, doi: 10.1029/2008GL033256 (2008).

F. HOLLENDER et al., « Characterization of site conditions (soil class, Vs30, velocity profiles) for 33 stations from the French permanent accelerometric network (RAP) using surface-wave methods», Bull. of Earthquake Engineering, 16, p. 2337-2365, doi: 10.1007/S10518-017-0235-5 (2018).

CHIMIE

É. Pasquinet, N. Pin, A. Forzy, P. Palmas, J. Rideau, A. Beaucamp, E. Lalière, M.-L.Perdrigeat, S. Quéré, C. Barthet, A. Wuillaume CEA – Le Ripault

AMÉLIORATION DE LA MORPHOLOGIE Et de la stabilité thermique de l'explosif llm-105 obtenu par la voie dapo

Un nouveau procédé de précipitation a été mis au point pour améliorer la synthèse de l'explosif peu sensible LLM-105 (2,6-diamino-3,5dinitropyrazine-1-oxyde). **Différentes solutions** aqueuses contenant des additifs ont été utilisées pour précipiter le produit après la nitration du DAPO (2,6-diaminopyrazine-1-oxyde). Au final, le nitrate d'ammonium et le nitrate de potassium permettent d'optimiser la qualité du LLM-105. En une seule étape et sans recristallisation. le CEA-Le Ripault a directement obtenu un produit présentant une morphologie satisfaisante, une bonne pureté chimique et d'excellentes caractéristiques d'insensibilité au chauffage et à l'impact.

es explosifs peu sensibles sont les explosifs qui ne réagissent pas à des agressions de faible amplitude de nature thermique, mécanique, électrique, etc. Ils présentent un intérêt marqué pour des applications militaires ou civiles (forage pétrolier). Dans ce contexte, le 2,6-diamino-3,5-dinitropyrazine-1-oxyde, connu sous le nom de LLM-105, est un acteur majeur. En effet, avec une vitesse de détonation qui dépasse 8000 m/s, alors que sa température de décomposition est voisine de 350°C, il présente un excellent compromis performances/sensibilité (l'octogène, explosif de référence pour la haute performance avec 9100 m/s, se décompose à 287 °C).

On connaît deux voies d'obtention principales pour le LLM-105 (figure 1). La voie originelle, dite DMP (abréviation de 2,6-diméthoxypyrazine, le réactif de départ), produit des particules relativement grosses et cubiques, adaptées à nos procédés ultérieurs de mise en œuvre. Cependant, on note deux inconvénients majeurs: 1) ce LLM-105 contient une quantité résiduelle d'intermédiaire de synthèse, ce qui diminue légèrement ses performances; 2) la synthèse nécessite trois étapes mettant en jeu des molécules explosives, ce qui complique une éventuelle industrialisation du procédé. C'est pourquoi une seconde voie d'accès, dite voie DAPO (abréviation de 2,6-diaminopyrazine-1-oxyde, le précurseur), a été mise au point récemment 1. Cette synthèse mène à un produit très pur et ne nécessite qu'une seule étape avec des produits explosifs : une réaction de nitration, suivie d'une précipitation dans l'eau.

Elle est donc très prometteuse; malheureusement le LLM-105 obtenu selon cette

Figure 1

Voies de synthèse du LLM-105 par voie DAPO (à gauche) et par voie DMP (à droite). Alors que la voie DMP comporte trois étapes, la voie DAPO présente l'avantage de n'en comporter qu'une; en outre, le CEA – Le Ripault a développé un procédé innovant de précipitation qui permet d'obtenir un produit de qualité optimisée, comparable, voire meilleur, à celui obtenu par voie DMP.

Micrographies obtenues par microscopie électronique à balayage des particules de LLM-105 selon la voie de synthèse : (a) voie DAPO – précipitation dans l'eau seule;
(b) voie DAPO – précipitation dans une solution aqueuse de nitrate d'ammonium; (c) voie DMP (référence). La précipitation dans une solution aqueuse de nitrate d'ammonium permet d'obtenir, par voie DAPO, des particules relativement grosses, de taille comparable à celle obtenue par la voie DMP.

voie («DAPO-LLM-105») se présente sous forme de très petites particules, ce qui complique sa manipulation et son utilisation ultérieure. Une étape supplémentaire de recristallisation est alors requise. Le CEA-Le Ripault a développé des conditions originales de précipitation, menant directement à un DAPO-LLM-105 de qualité optimisée, à la fois en matière de morphologie des particules, mais aussi de stabilité thermique.

Le concept consiste à réaliser l'étape de précipitation non pas dans l'eau, mais dans une solution aqueuse contenant un additif. Dans une première phase, sur de petites quantités (environ 0,5 g), différents additifs ont été testés: acides minéraux et organiques, sels, etc. Ensuite, la qualité des échantillons de DAPO-LLM-105 a été évaluée au travers de diverses analyses. Comme attendu, une influence marquée de l'additif sur les résultats a été observée. En particulier, les tailles des particules se sont révélées très diverses (quelques microns à environ 100 microns). De même, la forme des particules pouvait être quelconque, allongée (bâtonnets) ou proche d'un losange ou d'un cube. En considérant l'ensemble des propriétés des échantillons, comme la pureté, le comportement thermique ou la morphologie, sept additifs ont été sélectionnés pour la suite de l'étude: les acides citrique et trifluoroacétique; le sulfate, le formiate et le nitrate d'ammonium; les nitrates de sodium et de potassium.

Dans une seconde phase, pour la précipitation, des solutions aqueuses contenant à chaque fois l'un des sept additifs retenus ont été testées, lors de synthèses à l'échelle 100-500 g. Une expérience de contrôle a aussi été réalisée sans additif pour comparaison, et l'ensemble des LLM-105 obtenus a été complètement caractérisé du point de vue physico-chimique. Tous les additifs ont permis d'augmenter la taille du LLM-105, mais, plus globalement, le nitrate d'ammonium et le nitrate de potassium ont donné les meilleurs résultats. Ainsi, la forme des particules et la stabilité à haute température étaient nettement améliorées (**figures 2** et 3), avec une excellente pureté chimique et une faible sensibilité à l'impact.

Finalement, le DAPO-LLM-105 précipité dans une solution aqueuse de nitrate d'ammonium ou de potassium présente d'excellentes caractéristiques, aussi bonnes, voire meilleures que celles du LLM-105 produit par la voie DMP. Ce nouveau procédé d'obtention a été validé à l'échelle de 500 g et permet d'accéder en une seule étape et sans recristallisation à un produit directement utilisable 2. Ce travail ouvre ainsi des perspectives très intéressantes pour la voie DAPO 3.

Figure 3

Température d'explosion du LLM-105 en milieu confiné (500 bar) en fonction de l'additif utilisé lors de la précipitation. Les échantillons LLM-105 en vert sont compatibles avec les applications visées. Les échantillons précipités en milieu nitrate de potassium ou d'ammonium présentent les températures d'explosion les plus élevées. Ainsi, ces températures sont largement supérieures à celle de l'octogène (en rouge), à celles obtenues pour les autres milieux de précipitation (en bleu), et dépassent même celle du LLM-105 obtenu par la voie DMP.

RÉFÉRENCES

1 P. F. PAGORIA *et al.*, « Synthesis of pyrazines including 2,6-diaminopyrazine-1-oxide (DAPO) and 2,6-diamino-3,5-dinitropyrazine-1-oxide (LLM-105) », brevet WO 2010/123806 (2010).

É. PASQUINET et al., « Precipitation method and synthesis method of 2,6-diamino-3,5-dinitropyrazine-1-oxide », brevet WO 2018/158177 (2018).

5 É. PASQUINET *et al.*, « DAPO-LLM-105: improving the particle morphology and thermal stability », *Propellants Explos. Pyrotech.*, **44**, <u>https://doi.org/10.1002/prep.201800151</u> (2019).

MATHÉMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL

PH. Maire	W. Boscheri, M. Dumbser
CEA – Cesta	Université de Trente. Italie

R. Loubère

Institut de mathématiques de Bordeaux, UMR 5251 CNRS – Université de Bordeaux – Bordeaux INP

UN NOUVEAU SCHÉMA VOLUMES FINIS POUR LA SIMULATION D'ÉCOULEMENTS MULTIMATÉRIAUX

Cet article décrit une méthode numérique conservative pour résoudre les lois de conservation de la mécanique des fluides compressibles sur des maillages non structurés multidimensionnels. Cette approche permet de simuler des écoulements multimatériaux caractérisés par la présence d'ondes de choc et de détente intenses. La précision d'ordre 2 est obtenue au moyen d'une technique originale de reconstruction linéaire. La robustesse de la méthode est assurée par une stratégie de limitation a posteriori.

a maîtrise de la simulation numérique des écoulements multimatériaux fortement compressibles demeure un enjeu majeur au CEA-DAM pour ses applications en physique des hautes densités d'énergie et en dynamique rapide. Le modèle physique mis en jeu est constitué des lois de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale. La fermeture thermodynamique est satisfaite par une équation d'état. L'écriture de ce modèle dans le référentiel lié au mouvement du fluide produit une représentation lagrangienne bien adaptée au suivi des interfaces entre matériaux et des surfaces libres. Il s'agit d'un système d'équations aux dérivées partielles, hyperbolique non linéaire, caractérisé par la propagation d'ondes à célérité finie. La non-linéarité de ces équations engendre l'apparition de solutions discontinues (ondes de choc) en temps fini, et ce, même pour des données initiales régulières. Par ailleurs, pour une donnée initiale fixée, ce système d'équations peut admettre plusieurs solutions. Pour pallier ces difficultés, il convient de choisir la solution physiquement admissible: celle pour laquelle l'entropie est conservée dans les zones d'écoulement régulier et s'accroît au passage d'une onde de choc. Cette consistance avec le second principe de la thermodynamique doit être préservée lors du passage du modèle continu à la méthode numérique dédiée à la simulation de tels écoulements.

Les méthodes numériques lagrangiennes sont caractérisées par un maillage du domaine de calcul qui se déplace avec la vitesse de la matière. La discrétisation la plus naturelle des équations de l'hydrodynamique lagrangienne consiste à définir les grandeurs cinématiques (position, vitesse) aux nœuds du maillage, et les grandeurs thermodynamiques aux centres des mailles. Cette approche, introduite par Richtmyer et von Neumann il y a plus de soixante-dix ans, a donné naissance à la classe des schémas dits décalés, toujours massivement utilisés et dont l'emploi requiert la délicate mise au point d'une viscosité artificielle pour stabiliser les chocs. Au début des années 2000, au CEA-DAM, une solution alternative fondée sur une discrétisation centrée aux mailles des lois de conservation a été proposée 1. Cette formulation originale repose sur un calcul de la vitesse des nœuds issu d'un solveur de Riemann approché qui permet de satisfaire en même temps la loi de conservation géométrique, la conservation de l'énergie totale et une inégalité d'entropie. Le lecteur intéressé pourra se reporter à la référence 2 pour une revue historique. Comparés aux schémas décalés, les schémas centrés présentent l'avantage d'être intrinsèquement conservatifs et sont caractérisés par un résultat de consistance théorique 1 garantissant que toute solution convergente de ces schémas correspond à la solution physique du problème.

La formulation initiale des schémas centrés repose sur une approximation constante par mailles des variables de l'écoulement. Ainsi, l'erreur de discrétisation ne décroît au mieux que proportionnellement à la taille caractéristique du maillage: d'où une précision maximale d'ordre un. Afin d'accroître la précision de la représentation des zones d'écoulement régulier, différentes techniques de montée en ordre sont envisageables. Elles sont généralement basées sur une représentation polynomiale par maille des variables physiques permettant d'évaluer les flux numériques aux interfaces avec une meilleure précision. Ce gain de précision s'accompagne en contrepartie d'une perte de stabilité du schéma (oscillations au voisinage des chocs). Un compromis est donc nécessaire entre la précision et la stabilité de la méthode.

Les travaux de **3** s'inscrivent dans le cadre de l'extension à l'ordre deux du schéma lagrangien centré 4 sur des maillages non structurés multidimensionnels. L'extension d'ordre élevé est obtenue en deux étapes. Lors de la première étape dite de prédiction, des approximations affines des variables sont construites à partir des équations intégrées sur chaque maille. Il s'agit d'un cas particulier de la méthode ADER (Arbitrary high order schemes using DERivatives) permettant de construire des approximations d'ordre quelconque. Ces approximations sont utilisées pour construire les flux numériques qui permettent de mettre à jour les variables physiques lors de la seconde étape dite de correction. Le schéma ainsi obtenu est

nominalement d'ordre deux en temps et en espace. Afin de garantir la stabilité de la méthode, la technique de limitation a posteriori MOOD (Multidimensional Optimal Order Detection) 5 est utilisée. Elle repose sur l'hypothèse fondamentale que l'on dispose de deux schémas: l'un d'ordre élevé précis et l'autre d'ordre un, mais stable et vérifiant toutes les bonnes propriétés des solutions physiques du problème. L'idée est de créer un critère d'admissibilité qui mesure la qualité de la solution. La solution d'ordre élevé est alors passée au crible de celui-ci dans chaque maille. Pour toutes les mailles où il n'est pas vérifié, le schéma d'ordre un plus robuste est utilisé. Notons que cette méthode se généralise aisément à des extensions d'ordre très élevé. Il est important d'observer que sa robustesse repose sur la maîtrise des bonnes pro-

Figure 1

Problème de l'explosion puissante de Sedov. Ce cas test doté d'une solution analytique auto-semblable décrit l'évolution d'une onde de choc sphérique divergente consécutive à un dépôt d'énergie local et instantané dans un milieu initialement froid. Le domaine de calcul [0; 1,2] x [0; 1,2] x [0; 1,2] est pavé au moyen de 1552 278 tétraèdres. Le dépôt d'énergie est dimensionné de facon que le rayon du choc atteigne la valeur 1 au bout d'un temps égal à 1. Pour un gaz parfait d'indice polytropique γ = 1,4, le niveau du choc infiniment fort atteint la valeur de 6. La figure (a) est une vue écorchée du maillage au temps final. La figure (b) représente la densité au centre de toutes les mailles en fonction du rayon de la maille. Le très bon accord avec la solution exacte montre la capacité du schéma numérique à préserver la symétrie radiale de l'écoulement bien que le maillage ne soit pas aligné avec l'écoulement.

priétés (positivité, monotonie) de la solution à l'ordre un. Cela met en exergue l'intérêt d'un travail d'analyse numérique soigné pour maîtriser les propriétés des méthodes numériques. Le lecteur intéressé par les études de convergence relatives à ce schéma numérique pourra se reporter à 3. La robustesse de la méthode est illustrée (figure 1) au moyen du cas test de Sedov.

Les résultats obtenus confirment l'intérêt de l'approche ADER-MOOD pour étendre à l'ordre deux les schémas lagrangiens centrés. C'est une méthodologie prometteuse pour envisager des extensions d'ordre très élevé, afin d'accroître significativement la précision des méthodes numériques dédiées à l'hydrodynamique lagrangienne sans pour autant sacrifier leur robustesse.

RÉFÉRENCES

1 B. DESPRES, Numerical methods for eulerian and lagrangian conservation laws, Springer (2017).

R. LOUBÈRE et al., « Staggered and colocated finite volume schemes for lagrangian hydrodynamics », dans Handbook of numerical methods for hyperbolic problems: basic and fundamental issues, 17, p. 319-352, North Holland (2016).

W. BOSCHERI *et al.,* « A second-order cell-centered Lagrangian ADER-MOOD finite volume scheme on multidimensional unstructured meshes for hydrodynamics », *J. Comput. Phys.*, **358**, p. 103-129 (2018).

P.-H. MAIRE *et al.*, « A cell-centered lagrangian scheme for two-dimensional compressible flow problem », *SIAM J. Sci. Comput.*, **29**, p. 1781-1824 (2007).

5 S. CLAIN *et al.*, « A high-order finite volume method for systems of conservation laws – multidimensional optimal order detection (MOOD) », *J. Comput. Phys*, **230**, p. 4028-4050 (2013).

MATHÉMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL

P. Carribault, J. Jaeger, M. Pérache CEA – DAM Île-de-France M. Sergent, G. Papaure Atos Bull Technologies, Échirolles

OPTIMISER LES COMMUNICATIONS PAR DU CALCUL PARALLÈLE

Les communications de données entre cœurs de calcul peuvent réduire les performances des applications dans le domaine du calcul à haute performance. Recouvrir ces communications par du calcul est alors une solution permettant de réduire le temps d'exécution global d'une application parallèle. Cet article propose une nouvelle approche pour faire progresser automatiquement les communications pendant des temps d'attente apparaissant lors de phases de calcul. Testée sur deux codes de simulation, cette méthode permet de réduire le temps d'exécution d'un facteur 1.55.

es applications parallèles reposent sur des modèles de programmation pour exprimer les opérations à effectuer sur les différentes ressources de calcul **1**. Mais il est parfois nécessaire d'échanger des résultats entre elles. Cette phase de communication représente alors une perte de performance (augmentation du temps d'exécution). Une solution possible consiste à effectuer des calculs pendant que ces communications se poursuivent. On appelle cela « recouvrir les communications ». Dans ce but, le standard *Message Passing Interface* (MPI) propose des opérations non bloquantes découpées en deux parties : (i) l'initialisation contenant les données à envoyer, et (ii) la complétion qui s'assure que la communication a été réalisée. Entre ces deux parties, l'implémentation MPI gère en arrière-plan la progression de l'envoi des données, permettant ainsi l'exécution de calculs par

Figure 1

Progression des communications MPI. Le code de simulation initie une communication puis exécute une région parallèle OpenMP avant de terminer la communication. À gauche, tous les appels de progression sont réalisés pendant l'appel de complétion. Le schéma de droite représente la nouvelle méthode : la communication progresse pendant les temps d'attente OpenMP. Cela peut retarder la fin de la région OpenMP, mais permet d'aller plus vite sur le temps total d'exécution.

le code. Cet article propose une nouvelle approche 2 pour exploiter automatiquement ce recouvrement.

Trois méthodes sont utilisées pour réaliser cette progression. La première consiste à effectuer l'intégralité de l'envoi des données lors de la complétion. Cette approche ne permet aucun recouvrement entre les communications et le calcul. La deuxième méthode consiste à appeler régulièrement une fonction de progression pour explicitement faire avancer les communications 3. Ces appels ne sont pas recouvrables par le calcul, ce qui limite le gain en performance. Une dernière approche consiste à créer un nouveau fil d'exécution (thread) prenant en charge la gestion des communications 4. Indépendant des autres, ce thread peut donc s'exécuter en même temps que les calculs, mais il nécessite l'allocation de ressources supplémentaires (cœurs de calcul dédiés) afin d'obtenir le meilleur recouvrement possible.

Pour éviter les limitations des approches existantes, une nouvelle méthode de progression est proposée pour des applications hybrides (reposant sur MPI pour les communications par le réseau et sur OpenMP pour le parallélisme entre les cœurs de calcul). Le modèle OpenMP se décompose en régions parallèles: dans une région, différents threads s'exécutent sur des ressources distinctes pour réaliser des calculs en parallèle. Lorsqu'une telle région se termine, les threads se synchronisent: ceux ayant fini leur travail attendent les autres, laissant alors certaines ressources inutilisées. La méthode proposée permet ainsi d'utiliser ces temps d'attente pour faire avancer les communications non bloquantes (figure 1). Cela passe par une collaboration entre les supports exécutifs MPI et OpenMP.

Cette méthode a été implémentée pour des applications hybrides utilisant les modèles de programmation MPI et OpenMP. Elle repose sur une interface de contrôle appelée OMPT permettant de savoir quand une région parallèle se termine. Ainsi, le premier thread atteignant la fin d'une région parallèle peut faire progresser des communications tant que tous les autres threads ne sont pas arrivés

Figure 2

Résultats d'accélération sur deux codes de référence CORAL (LULESH et AMG2013). La première méthode (en orange) ne fait progresser les communications que lors d'appels de fonction spécifiques insérées dans le code, ou à défaut dans l'appel de complétion. La méthode utilisant des *threads* de progression (en vert) permet d'aller plus vite que le cas de base. La nouvelle méthode de cet article (en bleu) permet de dépasser l'utilisation d'un *thread* de progression lorsque les cœurs sont complètement chargés (même avec plusieurs *threads* par cœur de calcul).

au point de synchronisation. Cette implémentation a été évaluée avec OpenMPI et le support exécutif OpenMP de LLVM (le seul avec un support OMPT au moment des tests) sur deux codes de référence du projet CORAL: LULESH, un code d'hydrodynamique, et AMG2013, une méthode de gradient conjugué creux. Les expérimentations conduites sur les processeurs Intel Xeon Phi KNL à 64 cœurs du supercalculateur TERA 1000-2 du CEA-DAM montrent un gain de performance (jusqu'à 1,55) par rapport aux méthodes utilisées traditionnellement (figure 2).

En conclusion, cet article propose une approche permettant de recouvrir les temps de communication par du calcul dans des applications hybrides MPI/OpenMP. Les résultats expérimentaux confirment l'intérêt et la pertinence de cette méthode sur des supercalculateurs haute performance. Ces travaux peuvent être étendus à d'autres modèles de programmation parallèle et peuvent être évalués sur un nombre croissant de codes de simulation.

RÉFÉRENCES

J. DONGARRA et al.,

«The international exascale software project roadmap », *The International Journal of High Performance Computing Applications*, **25**, p. 3-60 (2011).

2 M. SERGENT *et al.*, « Efficient communication/computation overlap with MPI+ OpenMP runtimes collaboration », *European Conference on Parallel Processing*, **24**, p. 560-572 (2018).

R. RABENSEIFNER *et al.*, « Hybrid parallel programming on HPC platforms », *Proceedings of the Fifth European Workshop on OpenMP*, **5**, p. 185-194 (2003).

4 T. HOEFLER *et al.***,** « Message progression in parallel computing: to thread or not to thread? », *Cluster Computing*, **10**, p. 213-222 (2008).

MATHÉMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL

D. Martinet CEA – DAM Île-de-France **B. Gerofi, Y. Ishikawa** RIKEN, Japon

UTILISATION D'UN MICROKERNEL Pour accélérer les simulations Numériques HPC

Les simulations sur supercalculateur se font avec des milliers de processus coopératifs qui communiquent entre eux. Ces processus sont impactés par l'environnement dans lequel ils s'exécutent plus ou moins rapidement à cause du «bruit système » généré par les autres services des nœuds de calcul. tels que la surveillance de bon fonctionnement, par les latences mémoire des différents accès ou encore par les interruptions matérielles impactant les calculs sur de très courtes périodes. Ces variations ne sont pas très importantes indépendamment, mais entraînent, lors des communications, des périodes d'attente qui, à l'échelle du calcul complet, peuvent ralentir la simulation. Le concept de microkernel (micronoyau) a vocation à spécialiser le système d'exploitation pour certains types d'applications comme les codes de calcul haute performance (HPC). Il est ainsi possible de minimiser les perturbations par rapport au noyau Linux, pour accélérer ces codes. La problématique réside alors dans l'utilisation optimale du matériel et dans la compatibilité des appels système avec Linux pour que les codes existants fonctionnent sans modification.

e noyau d'un système d'exploitation gère les accès aux cœurs de calcul (ordonnancement des tâches), à la mémoire et aux périphériques, tels que les disques et le réseau. Un microkernel est une implémentation d'architecture de noyau plus simple, spécialisée pour permettre aux codes de simulation d'utiliser ces ressources de manière optimale. Il existe de nombreux microkernels : Kitten, BG/Q, L4, etc. L'un de leurs problèmes récurrents est lié à leurs spécialisations : la majorité ne supporte pas toutes les fonctionnalités de Linux, causant des problèmes de compatibilité pour les applications existantes, qu'il faut alors adapter. Cet article présente le microkernel McKernel, qui a pour objectif d'être compatible avec Linux. Le CEA-DAM collabore sur ce sujet avec le RIKEN, un centre de recherche japonais.

Pour ne pas réimplémenter toutes les fonctionnalités du noyau Linux, McKernel fonctionne à côté du système d'exploitation Linux. Une partie des cœurs de calcul et de la mémoire du système est déléguée à McKernel 1, qui implémente directement les appels système les plus sollicités par les codes de calcul. Les autres, de performance moins impactante, sont délégués à Linux.

Figure 1

Tracé des débits obtenus pour le test de référence « IMB pingpong » d'Intel sur la machine Oakforest-PACS de l'université de Tokyo, sur des nœuds Xeon Phi KNL (272 cœurs logiques). Les mesures sont réalisées pour Linux, McKernel en mode délégation pour le pilote omni-path, et McKernel avec le picodriver omni-path. La raison principale du gain entre ce dernier et Linux est que le matériel permet de soumettre des requêtes de 10 kB, et que l'implémentation sous Linux se limite à des requêtes de 4 kB.

Tracé des performances obtenues avec le code UMT2013 exécuté sur 32 tâches de 4 fils d'exécution. La comparaison est faite sous Linux, avec la version de base de McKernel sans pilote réseau et la version avec picodriver omni-path. Les courbes montrent que l'absence de driver rend le microkernel inutilisable, et qu'il est absolument nécessaire de bien utiliser le matériel disponible.

Ce système de délégation fonctionne particulièrement bien pour le HPC, car la plupart des réseaux haute performance se pilotent directement depuis les applications sans appel système. Il est inutile de déléguer des appels à Linux pour communiquer entre deux processus sur des nœuds de calculs distincts avec les réseaux infiniband (IB, réseau haute performance utilisé sur les calculateurs du CEA–DAM) ou l'interconnexion Bull (BXI, un réseau haute performance développé par ATOS/Bull).

En revanche, l'interconnexion omnipath d'Intel, pour laquelle les messages à partir de 128 kilooctets nécessitent un appel système non trivial, entraîne une baisse de performance avec McKernel, comparé à Linux, sur un simple test réseau illustré figure 1. Pour contourner ce problème, il a été décidé de ne réimplémenter que la partie du pilote nécessaire, dans un «picodriver» 2. Le travail majeur de l'initialisation est toujours délégué à Linux, et le minimum est traité directement pour tirer parti des performances du réseau.

Cette réimplémentation repose sur plusieurs bases. Premièrement, la partie du pilote sous Linux doit pouvoir exécuter du code de McKernel. Dans ce but, la disposition mémoire virtuelle du micronoyau a été revue. Des segments mémoire ont été déplacés pour éviter des intersections entre les régions utilisées par Linux sous Linux, et par McKernel sous McKernel, et les deux environnements présentent directement les deux cartographies mémoire.

Ensuite, les systèmes d'exploitation doivent utiliser les mêmes structures de

données pour interpréter correctement la mémoire de l'autre système. Le picodriver doit donc être strictement compatible avec le pilote qui évolue dans ses versions successives. Pour ce faire, un outil spécifique a été développé pour extraire une sous-partie arbitraire des structures utilisées par Linux à travers les symboles de debug, et pour compiler un même picodriver pour plusieurs versions du pilote.

Le picodriver doit manipuler avec soin les structures de données Linux depuis le microkernel, ajouter des références à sa propre mémoire, piloter le matériel directement, et être notifié quand l'opération est terminée. Cela évite de déléguer les gros messages réseau à Linux et permet d'obtenir les résultats précédemment illustrés figure 1.

Ce résultat est mis en évidence sur la mini-application de référence UMT2013 de la suite CORAL 3, illustré figure 2.

Disposer d'une implémentation de messages réseau efficace est indispensable. L'implémentation partielle en picodriver réduit la complexité du pilote. Seulement 4% des lignes de code ont été réécrites, et le pilote permet au matériel d'être toujours utilisable sous Linux en parallèle, ce qu'un pilote natif McKernel indépendant n'autorise pas.

Ce projet de recherche a permis d'illustrer le nouveau concept de picodriver. Même si celui-ci nécessite un travail de maintenance vis-à-vis des évolutions du pilote Linux, et si les calculateurs du RIKEN et du CEA-DAM n'utilisent pas aujourd'hui la technologie omni-path, il faut souligner que le microkernel est facile d'utilisation et offre une perspective intéressante, car il n'impose pas de modifier un gros noyau monolithique tel que Linux.

RÉFÉRENCES

1 B. GEROFI, A. SHIMADA, A. HORI, Y. ISHIKAWA, « Partially separated page tables for efficient operating system assisted hierarchical memory management on heterogeneous architectures », *Proceedings of the 13th IEEE/ACM international symposium on cluster, cloud and grid computing* (CCGrid), Delft, Netherlands, 13-16 mai 2013, <u>https://ieeexplore.ieee.org/servlet/opac?punumber=6545869</u>.

2 B. GEROFI, A. SANTOGIDIS, D. MARTINET, Y. ISHIKAWA, « PicoDriver: fast-path device drivers for multi-kernel operating systems », *Proceedings of the 27th International ACM symposium on high-performance parallel and distributed computing* (HPDC'18), 11-15 juin 2018, Tempe, Arizona, États-Unis, p. 2-13 (2018).

3 CORAL Benchmark Codes (2013), Benchmark Codes, <u>https://asc.llnl.gov/CORAL-benchmarks</u>.

MATHÉMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL

L. Colombet, R. Prat (FA – DAM Île-de-France R. Namyst

Laboratoire bordelais de recherche en informatique (LaBRI), UMR 5800 CNRS – Université de Bordeaux – Bordeaux INP – INRIA, Talence

TECHNIQUES DE PARALLÉLISATION INNOVANTES POUR LA SIMULATION EN DYNAMIQUE MOLÉCULAIRE

Les nouvelles générations de supercalculateurs sont équipées de processeurs dont la complexité nécessite une modification profonde des algorithmes physico-numériques mis en œuvre dans les codes de simulation. Dans ce cadre, l'association des techniques de parallélisation par graphe de tâches avec un raffinement de maillage adaptatif (Adaptive Mesh Refinement en anglais ou AMR) a été testée avec succès dans le code de dynamique moléculaire ExaStamp développé au CEA-DAM.

a dynamique moléculaire classique est une méthode de simulation tridimensionnelle de la matière dans laquelle le mouvement de chaque atome est pris en compte individuellement. Cette méthode permet notamment d'étudier avec une richesse de détails inégalée le comportement de la matière sous sollicitations extrêmes. Par exemple, il est aujourd'hui envisageable de simuler précisément un phénomène aussi complexe que celui de la création de microjets générés par le passage d'un choc sur une surface métallique 1. Pour cela, il faut réaliser des simulations avec des milliards d'atomes, ce qui nécessite de très grosses capacités de calcul. Une attention particulière doit donc être apportée à la performance informatique de ces codes de dynamique moléculaire afin de pouvoir traiter de telles quantités d'atomes.

Cet objectif nécessite dorénavant la mise en œuvre de techniques de développement de pointe pour utiliser efficacement les processeurs de dernière génération qui équipent les plus récents calculateurs, comme TERA 1000-2 du CEA-DAM. En effet, pour garantir de très bonnes performances tout en limitant la consommation d'énergie, ces processeurs sont constitués d'un nombre toujours plus important de cœurs de calcul. Les codes de simulation doivent donc les utiliser efficacement pour espérer bénéficier au maximum de la puissance de calcul disponible. En conséquence, il est désormais impératif de prendre en compte simultanément trois niveaux de parallélisme. Le niveau «distribué» est caractérisé par l'utilisation de fonctions spécifiques dans les codes qui permettent l'échange

de données entre des calculs exécutés en parallèle sur différents processeurs du calculateur. Ces fonctions de communication sont disponibles via la bibliothèque standardisée MPI (Message Passing Interface). Le niveau thread est une succession de calculs qui s'exécutent en parallèle sur les cœurs d'un même processeur et qui en partagent la mémoire. Le modèle de programmation se fait par l'ajout de directives OpenMP qui permettent au compilateur de générer automatiquement les tâches parallèles. Le niveau «vectorisation» permet d'exploiter les unités arithmétiques spécifiques disponibles sur chacun des cœurs de calcul du processeur. Sans cela, les performances séquentielles obtenues sont plutôt faibles. Cette unité vectorielle permet de réaliser la même opération arithmétique de manière simultanée sur un ensemble de données de même type. Par exemple, le temps pour calculer l'opération vectorielle A(i) = B(i) + C(i)pour i allant de 1 à 8 est le même que pour calculer la simple opération scalaire a = b + c. Ces unités permettent donc d'augmenter de 2 à 8 la puissance du cœur à condition de décrire sous forme d'opérations vectorielles tout ou partie des opérations arithmétiques du code de simulation.

Si le niveau «distribué», consistant en un partitionnement du domaine de simulation en plusieurs sous-domaines, est classique et maîtrisé depuis les années 90, il est important de focaliser les nouveaux développements sur les niveaux threads et vectorisation. Ces contraintes de développement ont un impact important sur les techniques de parallélisation à mettre en œuvre.

(a) Vue 2D d'un découpage en cellule d'un sous-domaine. Les interactions des atomes situés en dehors du cercle orange avec l'atome situé en son centre sont négligeables. Cette distance est appelée rayon de coupure. Au cours de la simulation, certaines cellules ne contiennent pas d'atome mais sont traitées par le code.
(b) Vue 2D d'un découpage obtenu grâce au système AMR. Le découpage en cellules de taille plus importante, qui peuvent être sous-découpées en cellules plus petites en fonction de la densité atomique, permet d'éviter de traiter des cellules vides.

Le modèle de dynamique moléculaire utilisé ici implique que l'interaction d'un atome avec ses voisins peut être négligée à partir d'une certaine distance appelée rayon de coupure. Afin de pouvoir plus facilement établir la liste des voisins d'un atome, chaque sous-domaine est découpé en cellules. Ainsi, le calcul du mouvement des atomes d'une cellule n'a besoin que des informations contenues dans les cellules voisines (figure 1a). Si une tâche est constituée de l'ensemble des calculs effectués au sein d'une cellule, il est alors possible de distribuer l'ensemble des tâches à calculer dans un sous-domaine sur l'ensemble des cœurs d'un processeur via le système de threads. Il faut éviter que ces threads calculent en même temps sur des cellules voisines afin d'échapper aux conflits d'écriture et de lecture de données liées à des atomes voisins. Pour échapper à la mise en place d'un système peu efficace de verrous, et donc d'accès séquentiel à la mémoire, toutes les tâches (ou cellules) sont coloriées (figure 1a). Les tâches possèdent une couleur différente en fonction de leur voisinage. Ainsi, les tâches d'une même couleur travaillent sur des atomes suffisamment éloignés pour qu'il n'y ait aucune interaction entre eux. Toutes les tâches d'une même couleur peuvent donc être exécutées en parallèle sans conflit.

Généralement, lors des simulations de dynamique moléculaire, la répartition des atomes n'est pas uniforme sur tout le domaine. Ce qui se traduit par de fortes disparités en temps de calcul entre les différentes tâches. De plus, il arrive que des cellules soient vides et donc que les tâches associées soient envoyées au système de threads pour rien. L'idée est donc d'utiliser un système AMR basé sur l'utilisation d'une structure interne au code programmée sous la forme d'un arbre (figure 1b). Cette structure permet d'équilibrer la charge de calcul des tâches et d'éviter de traiter les cellules vides. Ainsi, la taille et le nombre de cellules vont varier en fonction de la densité atomique et du temps de la simulation. Grâce à l'AMR, le nombre d'atomes traités par cellule reste important et quasiment constant au cours de la simulation, ce qui permet d'obtenir de bonnes performances au niveau du parallélisme vectoriel 2. Les cœurs de calcul du processeur sont ainsi pleinement utilisés.

Figure 2 Èvolution du temps de simulation sur un processeur Intel[®] KNL en fonction du nombre de cœurs utilisés. Les résultats présentés sur la figure 2 montrent que sur un processeur Intel[®] KNL[®] de TERA 1000-2 et pour un cas de développement d'un microjet, les performances obtenues par ExaStamp sont meilleures d'un facteur 10 que le code international de référence LAMMPS 3. Sur une plus grande base de cas tests, ExaStamp est en moyenne deux fois plus rapide que LAMMPS.

En conclusion, la mise en œuvre d'un algorithme de coloriage des tâches associé à un modèle de type AMR a permis d'optimiser les performances du code Exa-Stamp sur TERA 1000-2. La version AMR hybride MPI/OpenMP est en cours de développement.

RÉFÉRENCES

1 0. DURAND, S. JAOUEN, L. SOULARD, 0. HEUZÉ, L. COLOMBET, « Comparative simulations of microjetting using atomistic and continuous approaches in the presence of viscosity and surface tension », *J. Appl. Phys.*, **122**, p. 13 (2017).

2 R. PRAT, L. COLOMBET, R. NAMYST,

« Combining task-based parallelism and adaptive mesh refinement techniques in molecular dynamics simulations », *Proceedings* of the 47th International Conference on Parallel *Processing*, 13-16 août 2018, Eugene, Oregon, États-Unis, ACM, New York (2018).

3 S. PLIMPTON, « Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics », *J. Comput. Phys.*, **117**, p. 1 (1995).

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

CEA – DAM Institut supérieur des études nucléaires de défense (ISENDé)

Courriel : chocs@cea.fr