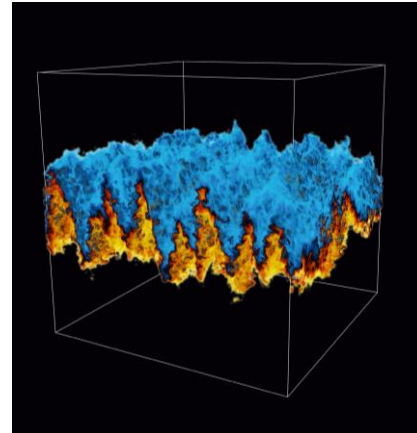
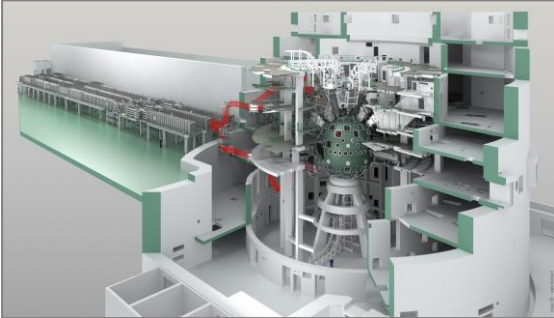


## Direction des Applications Militaires

Maquette de l'installation laser Mégajoule  
(CEA/Cesta)



Simulation 3D du développement  
d'instabilités de Rayleigh-Taylor (CEA/DIF)



Profilométrie d'un  
objet fabriqué  
(CEA/Le Ripault)



Installation anéchoïque MELUSINE  
(CEA/Gramat)



Boîtes à gants – Matériaux de pointe  
Grand instrument – Installation nucléaire  
(CEA/Valduc)

**Thèses proposées au CEA/DAM  
pour l'année 2021**



**Direction des Applications Militaires**



Vous êtes aujourd'hui en Master 2 ou en dernière année d'école d'ingénieurs et vous envisagez de poursuivre votre formation par une thèse ? Ce recueil est fait pour vous !

Il recense, classé par domaine scientifique, l'ensemble des sujets de thèse proposés par les laboratoires et équipes de recherche et développement de la Direction des applications militaires (DAM) du Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA). Depuis plus de 60 ans, les hommes et les femmes de la DAM contribuent, par leur engagement et leur sens du service, au maintien de la capacité de dissuasion de la France en relevant chaque jour des défis scientifiques et techniques pour assurer ensemble la réalisation des programmes de défense que leur confie l'Etat.

Vous aspirez à apporter votre contribution à de grandes missions de Défense tout en poursuivant une activité de recherche de haut niveau ? Rejoignez-nous ! Quel que soit le domaine scientifique ou technique qui vous intéresse, de la physique de la matière à la chimie en passant par les mathématiques appliquées, les sciences de l'information, l'optique, la mécanique des structures, la mécanique des fluides, l'électronique, la neutronique, le traitement du signal, la détection ou encore la propagation des ondes qu'elles soient électromagnétiques, infrasonores ou sismiques..., que vous soyez attiré(e) plutôt par la théorie, l'expérimentation, le numérique ou la technologie, le CEA/DAM peut vous proposer des sujets d'étude répondant à vos centres d'intérêt et à votre souhait de développement de compétences.

Vous bénéficierez d'un environnement de recherche exceptionnel en termes de moyens disponibles : centres de calcul (TERA 1000, Très Grand Centre de Calcul...) équipés de calculateurs pétaflopiques et d'outils logiciels nécessaires à leur utilisation intensive, développés en mode collaboratif et en open Source, moyens d'expérimentation dont les performances sont au meilleur niveau mondial, qu'ils soient de taille considérable comme le Laser MégaJoule couplé au laser Pétawatt PETAL implanté près de Bordeaux, ou que ce soit des installations de dimensions plus réduites et exploitées dans chacun des centres en fonction des thématiques scientifiques, moyens de recherche et développement de procédés en chimie qu'elle soit organique ou inorganique ou encore dans le domaine des matériaux, nucléaires ou non, moyens de caractérisation, moyens de test aux environnements... Dans de nombreux domaines scientifiques, vous pourrez bénéficier, pour réaliser votre projet de recherche, d'interactions avec plusieurs laboratoires et équipes en France ou à l'étranger en vous appuyant sur les nombreuses collaborations dans lesquelles les ingénieurs-chercheurs et techniciens du CEA/DAM sont des acteurs de premier plan. Celles-ci leur permettent d'être associés, en France ou à l'étranger, à des projets impliquant des équipes venues de différents pays, comme du co-développement d'outils logiciels ou des expériences, mais aussi d'être des acteurs majeurs du déploiement et de l'exploitation de réseaux internationaux comme par exemple le réseau international de surveillance déployé dans le cadre du traité d'interdiction complète des essais nucléaires...

Cette excellence se matérialise par une production scientifique considérable, de plus de 400 publications par an dans des revues internationales à comité de lecture de premier plan, par une capacité d'innovation concrétisée notamment par une trentaine de brevets déposés chaque année, par des logiciels informatiques en open source ou encore par des outils de simulation physique du meilleur niveau mondial développés en collaboration. Elle se traduit également par une très forte visibilité des équipes du CEA/DAM au sein du monde académique, grâce notamment aux collaborations déjà mentionnées avec les meilleures équipes françaises (implication dans des projets collaboratifs, participation aux groupes de recherche...) et internationales. Immérgé(e) au sein de telles équipes, vous serez encouragé(e) à valoriser votre travail, au travers de présentations dans des séminaires, congrès, workshops, que ce soit en France ou à l'étranger, afin de donner à vos résultats toute la visibilité qu'ils méritent et ainsi mettre en lumière les compétences et connaissances que vous aurez acquises et qui seront importantes pour votre futur parcours professionnel.

Certaines thèses peuvent faire l'objet d'un parcours dans un laboratoire français ou étranger avec lequel des coopérations existent. Si de plus vous êtes intéressé(e) par un complément de formation aux Etats-Unis à l'issue de votre thèse, sous forme d'un post-doctorat par exemple, le CEA/DAM propose, au travers de ses collaborations établies avec les laboratoires de haut niveau du Department Of Energy (Lawrence Livermore National Laboratory en Californie, Sandia et Los Alamos National Laboratories au Nouveau-Mexique), de vous accompagner dans cette démarche et de vous en faciliter l'accès.

Vous constaterez à la lecture du recueil que les thèses proposées bénéficient d'un co-encadrement, généralement par deux experts, un du CEA/DAM et un choisi au sein du monde académique. Un suivi du bon déroulement de la thèse et de l'avancement des travaux réalisés est également mené chaque année par l'Institut national des sciences et techniques nucléaires (INSTN). L'ensemble de ces éléments concourent à un encadrement de qualité et à un suivi rigoureux du (de la) doctorant(e) et sont autant de conditions favorables à la réussite de votre travail de thèse ainsi qu'à l'élargissement de votre réseau professionnel initié pendant vos stages antérieurs ou votre année de césure.

Les perspectives de recrutement au sein du CEA/DAM sont toujours aussi nombreuses, soutenues par des besoins croissants d'ingénieurs et de docteurs en sciences et techniques liés d'une part à de nombreux départs en retraite et d'autre part à l'évolution des activités vers le développement et la maîtrise de techniques toujours plus pointues et à l'élargissement de la démarche de simulation à de nombreux projets. Pour être à même de réaliser, dans le respect des délais et avec le niveau de performances requis, l'ensemble des travaux nécessaires aux projets à long terme que l'Etat lui a confiés, le CEA/DAM s'appuiera sur des hommes et des femmes de talent, recrutés parmi les viviers constitués grâce à l'accueil régulier de stagiaires, alternant(e)s, doctorant(e)s et post-doctorant(e)s.

Je vous invite à parcourir avec attention le recueil de sujets déjà disponibles, que vous trouverez également sur le site Internet du CEA/DAM (<http://www-dam.cea.fr/dam>) et sur celui de l'INSTN (<http://www-instn.cea.fr/formations/formation-par-la-recherche/doctorat/liste-des-sujets-de-these.htm>). N'hésitez pas à prendre contact avec les responsables des sujets qui vous intéressent pour obtenir auprès d'eux des précisions et également échanger sur vos centres d'intérêt et les conditions de déroulement du travail de thèse proposé. De nouveaux sujets pourront être ajoutés au fil des mois, en fonction de l'avancée des travaux de recherche et développement menés et des besoins de recherche identifiés. Je vous encourage à consulter régulièrement les sites indiqués pour y trouver la mise à jour des listes de sujets proposés.

Je souhaite sincèrement que ces échanges vous donneront envie d'aller au-delà des clôtures qui délimitent nos centres pour découvrir la richesse de nos activités et notre ouverture sur le monde.

A très bientôt au CEA/DAM !

**Laurence BONNET**

**Directrice scientifique du CEA/DAM**

# Les centres CEA / DAM

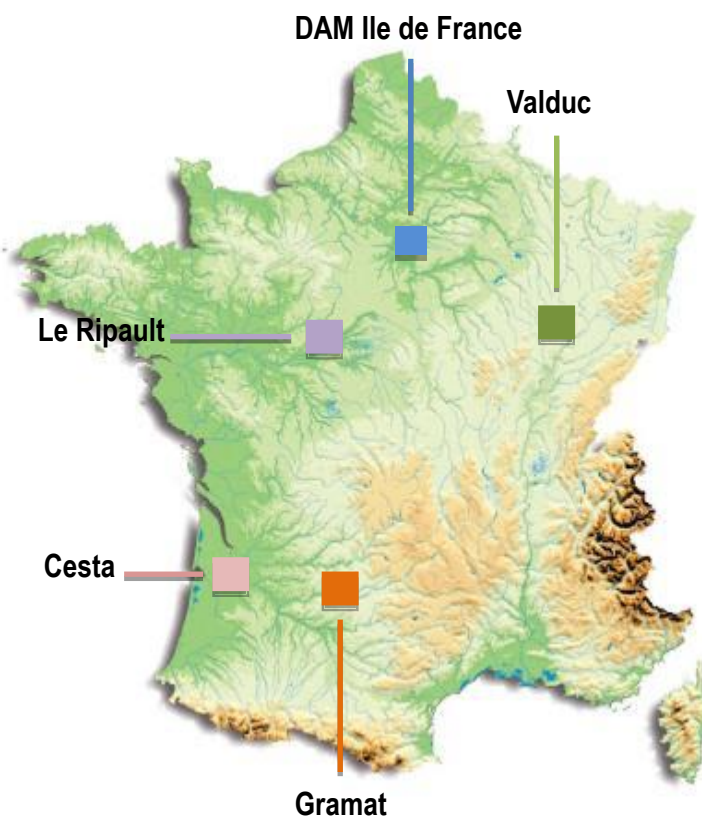
**CEA/Cesta** 05 57 04 40 00  
B.P. 2  
33114 Le Barp  
<http://www-dam.cea.fr/cesta>

**CEA/DAM Ile-de-France** 01 69 26 40 00  
Bruyères le Châtel  
91297 Arpajon  
<http://www-dam.cea.fr/damidf>

**CEA/Le Ripault** 02 47 34 40 00  
B.P. 16  
37260 Monts  
<http://www-dam.cea.fr/ripault>

**CEA/Gramat** 05 65 10 54 32  
B.P. 80 200  
46500 Gramat  
<http://www-dam.cea.fr/gramat>

**CEA/Valduc** 03 80 23 40 00  
21120 Is-sur-Tille  
<http://www-dam.cea.fr/valduc>



Le CEA/DAM est également fortement impliqué dans trois Unités mixtes de recherche : le **LCTS** (Laboratoire des composites thermo-structuraux) et le **CELIA** (Centre lasers intenses et applications) situés à l'Université de Bordeaux (33) ainsi que le **LULI** (Laboratoire pour l'utilisation des lasers intenses) situé à Palaiseau (91).

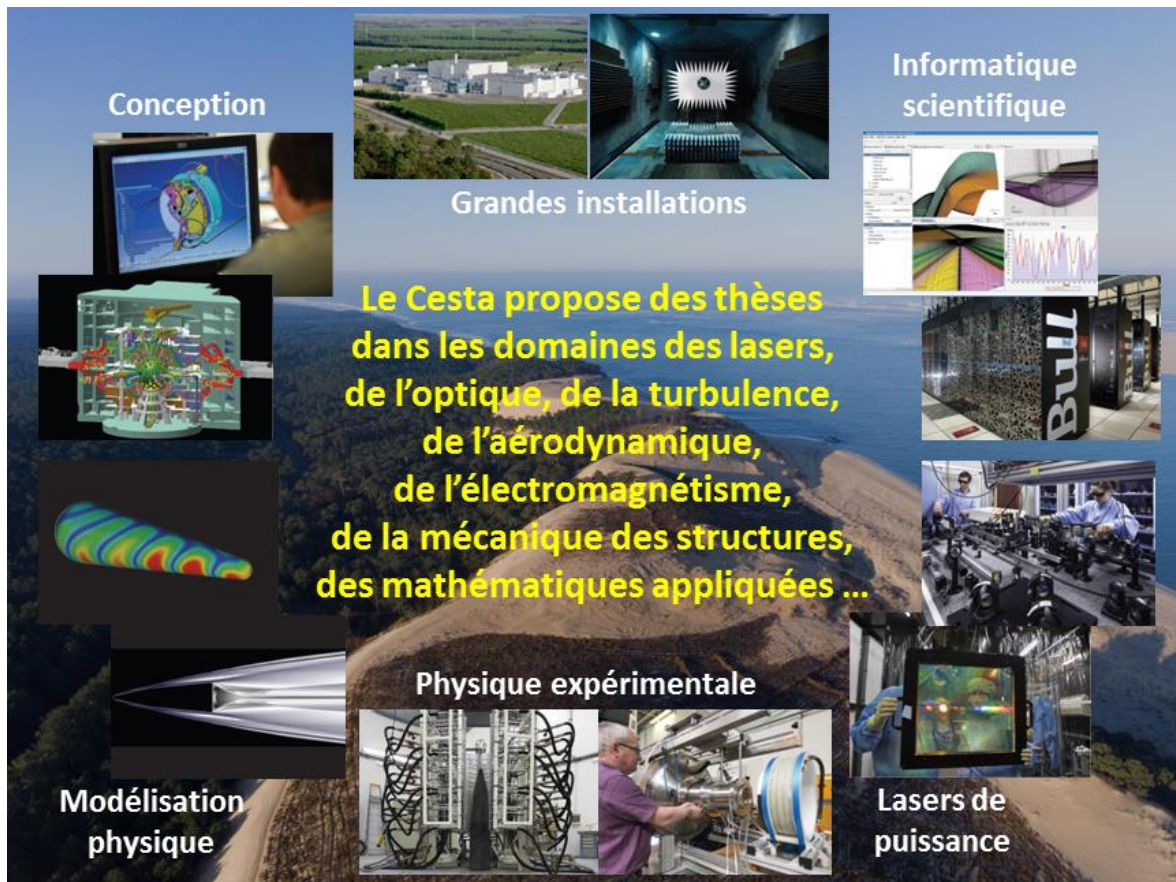




## Le centre CEA/Cesta

Centre d'études scientifiques et techniques d'Aquitaine

Site Web : <http://www-dam.cea.fr/cesta>



Le CESTA, un des 5 centres de la Direction des applications militaires du CEA, rassemble 1000 salariés dans un centre de 700 hectares au cœur de la Nouvelle Aquitaine, au sud de la Gironde **entre Bordeaux et Arcachon**.

Le CESTA conduit la conception d'ensemble des têtes nucléaires de la force de dissuasion française avec des **méthodes d'ingénierie collaborative intégrée**. Le CESTA assure également la démonstration de la fiabilité, de la sûreté et des performances (tenue aux environnements, furtivité électromagnétique, rentrée atmosphérique...) dans une démarche de simulation basée sur le triptyque « modélisation/calculs/essais » mettant en œuvre de la **modélisation physique de haut niveau**, des **calculateurs parmi les plus puissants au monde** et un **parc exceptionnel de moyens d'essais**.

Le CESTA héberge **la plus grande installation laser d'Europe, LMJ/PETAL** (Laser MégaJoule/PETawatt Aquitaine Laser), instrument de recherche exceptionnel qui permet de chauffer et d'étudier la matière aux conditions extrêmes que l'on retrouve lors du fonctionnement des armes ou au cœur des étoiles. Pour cela, le CESTA accueille une **expertise reconnue mondialement, en conception laser, en technologie des composants optiques, en informatique industrielle...**

**Les travaux du CESTA offrent en outre l'opportunité de collaboration avec les industriels et les laboratoires de recherche, en Nouvelle-Aquitaine et au-delà, en France et à l'international.**

## Le Centre CEA/DAM Île-de-France (CEA/DIF)

Site Web : <http://www-dam.cea.fr/damidf>

Le centre CEA DAM-Île de France est un des cinq centres de la Direction des applications militaires (DAM) du CEA. Ses 1600 ingénieurs, chercheurs et techniciens sont mobilisés à la fois sur différents programmes de recherche et développement et sur des missions opérationnelles d'alerte aux autorités.

### Conception et garantie des armes nucléaires, grâce au programme Simulation



© P. Stroppa/CEA

L'enjeu consiste à reproduire par le calcul les différentes phases du fonctionnement d'une arme nucléaire. Les phénomènes physiques sont modélisés, traduits en équations, simulés numériquement sur d'importants moyens de calcul. Les logiciels ainsi développés sont validés par comparaison à des résultats expérimentaux, obtenus essentiellement grâce à la machine radiographique Epure (CEA/Valduc), et aux lasers de puissance (CEA/CESTA).

### Lutte contre la prolifération et le terrorisme

Le centre contribue au respect du Traité de non-prolifération (TNP), notamment avec des laboratoires d'analyses accrédités, des moyens de mesures mobiles et des experts internationaux. Il assure l'expertise technique française pour la mise en œuvre du Traité d'Interdiction Complète des Essais nucléaires (TICE).



© C. Dupont/CEA

### Alerte auprès des autorités



© C. Dupont/CEA

24h sur 24 et 365 jours par an, le CEA/DIF assure une mission d'alerte auprès des autorités :

- en cas d'essai nucléaire, de séisme sur le territoire national ou à l'étranger,
- en cas de tsunami intervenant dans la zone euro-méditerranéenne (CENALT).

Il fournit aux autorités toutes les analyses et synthèses techniques associées.

### Expertise scientifique et technique

- dans l'ingénierie de grands ouvrages (construction et démantèlement),
- dans les sciences de la Terre (géophysique, sismologie, géochimie, physico-chimie, modélisation...),
- en physique de la matière condensée, des plasmas, physique nucléaire,
- en électronique (électronique résistante aux agressions).

Pour remplir ces missions, le CEA/DIF est équipé de grands calculateurs de la classe pétaflopique tel que TERA1000 pour les applications de la DAM. Situé à proximité immédiate du centre le TGCC (Très Grand Centre de Calcul) abrite le centre de calcul utilisé par les différentes directions opérationnelles du CEA et ouvert à des partenaires extérieurs, le CCRT (Centre de Calcul Recherche et Technologie). Le TGCC est une infrastructure réalisée pour accueillir des supercalculateurs de classe mondiale dont la machine européenne Joliot-Curie d'une puissance de 10 Pflops acquise par GENCI (Grand Equipement National de Calcul Intensif) et ouverte au chercheurs Européens dans le cadre de l'initiative européenne Prace. Avec le TGCC et le campus Teratec qui héberge des entreprises et laboratoires du domaine du Calcul Haute performance, le CEA/DIF est au cœur du plus grand complexe européen de calcul intensif. Il prépare les nouvelles générations de calculateurs (classe Exaflops) dont l'exploitation dans la prochaine décennie ouvrira la voie à de belles avancées dans de nombreux domaines scientifiques, que ce soit à la DAM, ou dans les mondes académique et industriel.

**Situé non loin du complexe scientifique du plateau de Saclay, le CEA/DIF est en interaction directe avec la nouvelle Université Paris Saclay et l'Institut Polytechnique de Paris. Le CEA/DIF propose des thèses dans le domaine de l'informatique, des mathématiques, de la physique des plasmas, de la physique de la matière condensée, de la chimie, de l'électronique, de l'environnement et de la géophysique.**

## **Le Centre CEA/Le Ripault**

Site Web: <http://www-dam.cea.fr/ripault>

### **Un pôle de compétences unique pour l'étude et la conception de nouveaux matériaux.**

Le CEA Le Ripault est situé à Monts, près de Tours, en Région Centre Val de Loire. Il rassemble, au profit de la Direction des applications militaires (DAM) du CEA, tous les métiers et les compétences scientifiques et techniques nécessaires à la mise au point de nouveaux matériaux et de systèmes, depuis leur développement jusqu'à leur industrialisation :



- Ingénierie moléculaire & Synthèse
- Microstructures & Comportements
- Conception & Calculs
- Prototypage & Métrologie
- Fabrication & Traitement de surface
- Caractérisation & Expertise

**Missions : Les salariés du Ripault unissent leurs compétences et leurs talents pour :**

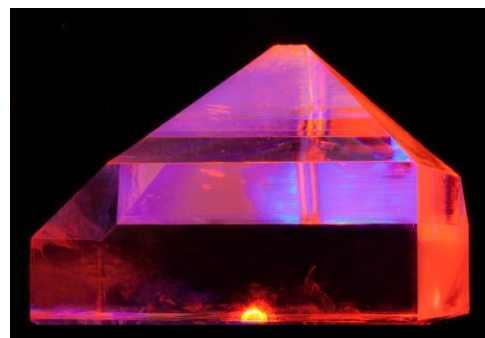
#### **RÉPONDRE AUX ENJEUX DE LA DISSUASION NUCLÉAIRE**

- Armes nucléaires
- Lutte contre la prolifération nucléaire
- Réacteurs nucléaires de propulsion navale

#### **SURVEILLER, ANALYSER ET INTERVENIR POUR LA SÉCURITÉ**

#### **CONTRIBUER À L'EXCELLENCE DE LA RECHERCHE ET À LA COMPÉTITIVITÉ DE L'INDUSTRIE**

Le CEA/Le Ripault propose des thèses et des post-doctorats dans les domaines des matériaux organiques, céramiques et composites, de l'électromagnétisme, des systèmes énergétiques bas carbone, des procédés de fabrication innovants et dans celui des matériaux énergétiques.





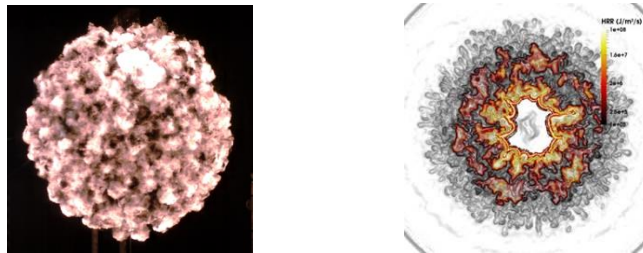
## Le CEA/Gramat

Site Web : <http://www-dam.cea.fr/gramat>

Situé dans la région Occitanie - Pyrénées Méditerranée, près de Brive et à 1h30 de Toulouse, le site de Gramat compte environ 250 salariés et s'étend sur plus de 300 hectares.

Ses activités sont organisées autour de trois domaines d'applications : (i) Dissuasion (ii) Défense conventionnelle et (iii) Sécurité civile. Dans ces trois domaines, le CEA Gramat a la charge des études de vulnérabilité et de durcissement (capacité à résister à une agression) des systèmes d'armes face à des agressions nucléaires ou conventionnelles ; à ce titre, il étudie notamment la vulnérabilité et la protection des installations vitales civiles et militaires de la nation. Par ailleurs, il est également chargé de l'évaluation de l'efficacité de nos systèmes d'armes conventionnels (du champ de bataille).

Pour accomplir leurs missions, les équipes exploitent des moyens d'expertise de très haut niveau, qu'il s'agisse de simulations numériques haute performance ou de plateformes d'expérimentation physique uniques en France et en Europe.

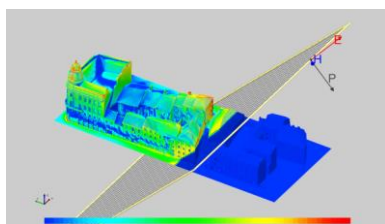


Vue expérimentale et simulation numérique d'une boule de feu (explosif en détonation)

Les domaines scientifiques étudiés sont très vastes et se rapportent à de nombreuses branches de la physique théorique ou expérimentale : mécanique des fluides et des structures, comportement dynamique des matériaux, détonique (science des explosifs), thermique, électromagnétisme, électronique, interactions rayonnement-matière, physique des plasmas, métrologie,....

Afin de développer son niveau scientifique, le Centre s'appuie sur de nombreuses universités françaises (Limoges, Toulouse, Rennes, etc...) et sur de grandes écoles d'ingénieurs (Ecole Polytechnique, Ecole des Mines, etc...). Les ingénieurs du centre participent aux Pôles de compétitivité Aerospace Valley (Occitanie – Nouvelle Aquitaine, aéronautique, systèmes embarqués), et ALPHA Route des Lasers et Hyperfréquences (Nouvelle Aquitaine, lasers, micro-ondes et réseaux). Au niveau régional, le CEA Gramat développe ses partenariats avec les écoles doctorales et les laboratoires des régions proches. Cela se traduit par la création de Laboratoires de Recherche Conventionnés (LRC) permettant de renforcer les compétences de chacune des parties en matière de recherche académique et de recherche appliquée sur des thématiques identifiées.

Ces collaborations se concrétisent par une récurrence d'une quinzaine de doctorants et d'une vingtaine de stagiaires présents sur le site.



Modélisation électromagnétique d'un quartier de ville



Antenne large bande pour tests électromagnétiques

**Les thèses proposées au CEA/Gramat concernent les domaines de l'électromagnétisme, de l'électronique, de la détonique (science des explosifs), de la dynamique des structures, de l'expérimentation et de la simulation numérique.**



## Le Centre CEA/Valduc

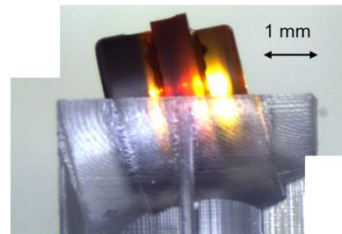
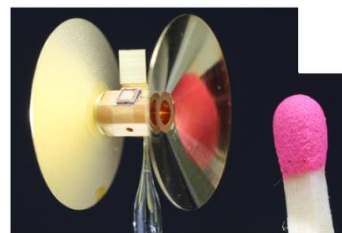
Site Web : <http://www-dam.cea.fr/valduc>

Dédié à la fabrication des composants nucléaires des armes de la dissuasion, **le CEA Valduc est à la fois un centre de recherche et un site industriel**. Caractérisé par des produits de très haute valeur ajoutée et des procédés high tech, il rassemble toutes les compétences et les moyens techniques nécessaires à l'accomplissement de sa mission, de la recherche de base sur les matériaux nucléaires aux procédés de fabrication et à la gestion des déchets.

Ses compétences sont principalement centrées sur la **métallurgie de pointe, la chimie séparative et l'exploitation de grandes installations nucléaires**. Le centre accueille également la nouvelle installation radiographique franco-britannique Epure, dans laquelle sont expérimentées des maquettes inertes d'armes nucléaires.

### L'esprit d'équipe en action ...

Le sport est très pratiqué à Valduc, au quotidien et dans des occasions festives comme lors du tour annuel du centre.



**A LA POINTE DE LA SCIENCE ET DE LA TECHNOLOGIE** dans des domaines variés : métallurgie, chimie de la purification, physico-chimie des surfaces. Par exemple, les technologies classiques d'usinage et d'assemblage sont poussées aux limites pour réaliser des produits exceptionnels, comme ces cibles destinées aux expériences sur laser, dont la taille n'est que de quelques millimètres, bien qu'elles soient constituées d'une centaine de pièces élémentaires, chacune étant réalisée avec une précision du micron.



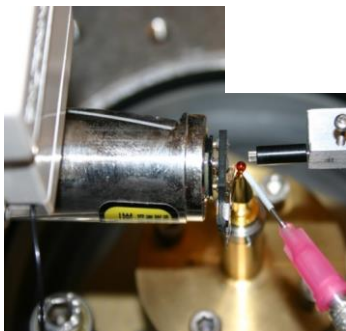
**DE GRANDES INSTALLATIONS NUCLÉAIRES** conçues pour apporter un service très complet aux procédés de recherche et de fabrication qu'ils hébergent (ventilation, filtrage des atmosphères, fluides, réseaux, surveillance de la radioactivité, ...), garantissant un fonctionnement fiable et sûr. Leur fonctionnement très intégré et automatisé s'appuie sur une supervision 24h/24h.



**DES ÉQUIPEMENTS TRÈS ÉLABORÉS** permettant de travailler en toute sécurité sur des matières sensibles, des procédés de fabrication high tech, des contrôles en ligne et une supervision des procédés... l'usine du futur est déjà une réalité à Valduc !



**LA PRÉPARATION DE L'AVENIR** Au-delà des moyens classiques de robotisation, Valduc mène de nombreux développements pour intégrer les dernières évolutions de la robotique (robots autonomes & intelligence artificielle), domaine dans lequel les jeunes ingénieurs et techniciens peuvent exprimer tout leur talent.



Valduc propose des thèses dans le domaine de la métallurgie, du cycle des matières nucléaires, des cibles pour les expériences laser, de la simulation des procédés de mise en forme.

Le Centre collabore étroitement avec de nombreux laboratoires (Université de Bourgogne Franche-Comté) et des écoles d'ingénieurs (ENSAM Cluny, ENS2M, ESIREM...)



**CESTA**

B.P. 2

33114 Le Barp

<http://www-dam.cea.fr/cesta>

|                                                                                                     |    |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>ELECTROMAGNETISME</b>                                                                            |    |
| Modèle de sensibilité du champ électromagnétique et validation expérimentale                        | 28 |
| Développement d'un outil d'évaluation de SER à l'aide du formalisme « Système hamiltonien à Ports » | 29 |
| <b>INFORMATIQUE &amp; LOGICIELS</b>                                                                 |    |
| Algorithme d'aide à la décision pour la maintenance des optiques du LMJ                             | 53 |
| <b>MATHEMATIQUES – ANALYSE NUMERIQUE - SIMULATION</b>                                               |    |
| Développement d'un solveur creux multi-niveau pour des problèmes d'électromagnétisme                | 69 |
| Traitement numérique des jonctions en décomposition de domaine pour les ondes                       | 70 |
| <b>OPTIQUE – OPTIQUE LASER – OPTIQUE APPLIQUEE</b>                                                  |    |
| Endommagement des optiques avec des irradiations multiples                                          | 79 |

# DAM - Ile de France

Bruyères le Châtel

91297 Arpajon

<http://www-dam.cea.fr/damidf>

|                                                                                                                                                                                                             |    |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>CHIMIE</b>                                                                                                                                                                                               |    |
| Recherche de traceurs spécifiques de la fabrication d'explosifs par spectrométrie de masse à très haute résolution                                                                                          | 22 |
| <b>ELECTRONIQUE</b>                                                                                                                                                                                         |    |
| Sensibilité des composants nanoélectroniques innovants aux effets des radiations                                                                                                                            | 35 |
| Evaluation de la tenue des circuits intégrés aux effets de dose ionisante en environnement spatial                                                                                                          | 36 |
| <b>ENERGIE, THERMIQUE, COMBUSTION, ECOULEMENTS</b>                                                                                                                                                          |    |
| Effets non-Boussinesq dans les mélanges turbulents                                                                                                                                                          | 38 |
| Méthodes d'apprentissage pour la modélisation des phrases rapides de la turbulence                                                                                                                          | 39 |
| Turbulence, combustion et instabilité de Rayleigh-Taylor                                                                                                                                                    | 40 |
| <b>ENVIRONNEMENT &amp; POLLUTION</b>                                                                                                                                                                        |    |
| Construction et validation d'un jumeau numérique pour la réponse sismique d'un site d'intérêt                                                                                                               | 44 |
| Estimation rapide des courants et inondations de tsunami à partir d'algorithmes de deep learning                                                                                                            | 45 |
| Etude et comparaison des stratégies de reconstruction de surface à partir d'images multi-angles, multi-dates et multi-capteurs                                                                              | 46 |
| Apport de l'analyse en antenne multidimensionnelle (3D et multi-composantes (3C) à la caractérisation du champ d'ondes sismiques : application aux données de l'antenne du Laboratoire Souterrain Bas Bruit | 47 |
| Traitement statistique du signal pour la séparation de sources multiple sur des antennes                                                                                                                    | 48 |
| Utilisation du bruit ambiant infrason pour l'évaluation des modèles numériques de prévision du temps dans la moyenne atmosphère en vue de leur assimilation                                                 | 49 |
| Couche limite atmosphérique et ondes orographiques : impact sur le climat et la propagation des infrasons                                                                                                   | 50 |
| Application de la fibre optique aux mesures géophysiques                                                                                                                                                    | 51 |
| <b>INSTRUMENTATION</b>                                                                                                                                                                                      |    |
| Développement d'un multi-détecteur neutron pour la lutte contre le terrorisme                                                                                                                               | 55 |

|                                                                                                                                                   |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>INTERACTION</b>                                                                                                                                |    |
| Optimisation de la source X impulsionnelle par diffusion Compton inverse d'un accélérateur linéaire d'électrons                                   | 59 |
| Implémentation d'un modèle quasi-statique dans le code PIC, CALDER, application à la propagation de faisceaux d'électrons ou laser dans un plasma | 60 |
| Modélisation d'une source de rayonnement X générée lors de l'interaction d'un laser ultra-intense avec une cible solide                           | 61 |
| <b>MATHEMATIQUES – ANALYSE NUMERIQUE – SIMULATION</b>                                                                                             |    |
| Reconstruction tomographique multi-contraste et multidimensionnelle par intelligence artificielle                                                 | 71 |
| Résolution de problèmes inverses utilisant des codes de simulation coûteux ayant des images pour sortie                                           | 72 |
| <b>METROLOGIE</b>                                                                                                                                 |    |
| Etude d'un système d'imagerie X à contraste de phase pour des mesures à haute résolution spatiale                                                 | 77 |
| <b>PHYSIQUE NUCLEAIRE</b>                                                                                                                         |    |
| Etude de la dissipation dans le processus de fission                                                                                              | 83 |
| <b>PHYSIQUE DES PLASMAS</b>                                                                                                                       |    |
| Etude par diffraction X des transitions de phase de matériaux modèles multiphasiques dans le domaine de la matière dense et tiède                 | 85 |
| Physique active des particules énergétiques et des ondes électromagnétiques à orbites bas                                                         | 86 |
| Stabilité d'écoulements d'ablation en fusion par confinement inertiel : réceptivité                                                               | 87 |
| <b>PHYSIQUE DU SOLIDE – SURFACES ET INTERFACES</b>                                                                                                |    |
| Construction ab initio d'une équation d'état                                                                                                      | 89 |
| Etude des mécanismes d'adsorption/dégradation de matériaux dopés pour la séparation des gaz rares                                                 | 90 |



# GRAMAT

B.P. 80 200

46500 Gramat

<http://www-dam.cea.fr/gramat>

|                                                                                                                                                                                |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>CHIMIE</b>                                                                                                                                                                  |    |
| Développement d'une méthode innovante pour une amélioration des matériaux énergétiques aluminisés par une structuration à l'échelle cristalline par évaporation flash de spray | 23 |
| <b>ELECTROMAGNETISME</b>                                                                                                                                                       |    |
| Etude et réalisation d'une chaîne de caractérisation du comportement sous agressions électromagnétiques d'objets connectés                                                     | 30 |
| Etude numérique et expérimentale de la transition streamer-arc dans un guide d'onde rempli d'air                                                                               | 31 |
| <b>ENERGIE, THERMIQUE, COMBUSTION, ECOULEMENTS</b>                                                                                                                             |    |
| Simulations mésoscopiques d'un matériau énergétique sous choc pour étudier sa transition vers la détonation                                                                    | 41 |
| <b>INSTRUMENTATION</b>                                                                                                                                                         |    |
| Capteur interférométriques de hautes pressions aérienne par réinjection optique                                                                                                | 56 |
| <b>MATERIAUX &amp; APPLICATIONS</b>                                                                                                                                            |    |
| Polymorphisme et fusion dans l'étain sous sollicitations dynamiques : analyses macroscopique et cristallographique                                                             | 63 |

# LE RIPAUT

B.P. 16

37260 Monts

<http://www-dam.cea.fr/ripault>

|                                                                                                                                                                                                        |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>CHIMIE</b>                                                                                                                                                                                          |    |
| Développement d'un matériau d'électrode à oxygène innovant pour les électrolyseurs haute température                                                                                                   | 24 |
| <b>ELECTROMAGNETISME</b>                                                                                                                                                                               |    |
| Modélisation et développement d'un moyen de mesure de permittivité à haute température                                                                                                                 | 32 |
| Application de meta-surfaces commandables à la caractérisation de matériau                                                                                                                             | 33 |
| <b>ENERGIE, THERMIQUE, COMBUSTION, ECOULEMENTS</b>                                                                                                                                                     |    |
| Modélisation du transfert thermique couplé conducto-radiatif dans les milieux hétérogènes                                                                                                              | 42 |
| <b>INSTRUMENTATION</b>                                                                                                                                                                                 |    |
| Caractérisation des propriétés thermiques de constituants micrométriques à l'aide de nanodiamants                                                                                                      | 57 |
| <b>MATERIAUX &amp; APPLICATIONS</b>                                                                                                                                                                    |    |
| Réalisation de couches minces à fonctions optiques maîtrisées par technique d'évaporation magnétron (PVD)                                                                                              | 64 |
| Enthalpies de formation des matériaux organiques : développement de modèles prédictifs                                                                                                                 | 65 |
| Développement de revêtements ultra réfractaires pour la protection de matériau composites – Etude du procédé de projection plasma et évaluation du comportement à des températures supérieures à 2000C | 66 |
| <b>MECANIQUE</b>                                                                                                                                                                                       |    |
| Comportement dynamique d'un explosif comprime                                                                                                                                                          | 75 |
| <b>OPTIQUE – OPTIQUE LASER – OPTIQUE APPLIQUEE</b>                                                                                                                                                     |    |
| Etude de l'influence de la pollution ambiante sur la génération d'endommagement par choc laser                                                                                                         | 80 |
| Réalisation d'un banc de mesure de rélectivité dans le domaine de l'infrarouge pour des pièces en forme                                                                                                | 81 |

# VALDUC

21120 Is-sur-Tille

<http://www-dam.cea.fr/valduc>

|                                                                                                                                                                   |    |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>CHIMIE</b>                                                                                                                                                     |    |
| Etude de l'influence de la composition des atmosphères de stockage sur les phénomènes de radiolyse alpha de l'eau adsorbée sur les oxydes de plutonium            | 25 |
| Etude expérimentale et par simulation de la stabilité des ions carbonates en sels de chlorures fondus                                                             | 26 |
| <b>MATERIAUX &amp; APPLICATIONS</b>                                                                                                                               |    |
| Modélisation du vieillissement des tritieux métalliques : application au tritium de palladium                                                                     | 67 |
| <b>MATHEMATIQUES – ANALYSE NUMERIQUE - SIMULATION</b>                                                                                                             |    |
| Dynamique d'élimination des produits de radiolyse H <sub>2</sub> et O <sub>2</sub> , dans le gaz environnant une zéolithe 4A partiellement chargée en eau tritiée | 73 |
| <b>PHYSIQUE DU SOLIDE – SURFACES ET INTERFACES</b>                                                                                                                |    |
| Etude des transformations de phases au cours de la solidification et du forgeage d'un acier faiblement allié à haute limite d'élasticité 80 HLES                  | 91 |

# *Les thématiques*

|                                                                                     |                                                |         |
|-------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------|---------|
|    | Chimie                                         | Page 21 |
|    | Electromagnétisme                              | Page 27 |
|    | Electronique                                   | Page 34 |
|    | Energie, thermique, combustion, écoulements    | Page 37 |
|    | Environnement et pollution                     | Page 43 |
|    | Informatique et logiciels                      | Page 52 |
|   | Instrumentation                                | Page 54 |
|  | Interaction                                    | Page 58 |
|  | Matériaux et applications                      | Page 62 |
|  | Mathématiques – Analyse numérique - Simulation | Page 68 |
|  | Mécanique                                      | Page 74 |
|  | Métrologie                                     | Page 76 |
|  | Optique – Optique laser – Optique appliquée    | Page 78 |
|  | Physique nucléaire                             | Page 82 |
|  | Physique des plasmas                           | Page 84 |
|  | Physique du solide, surfaces et interfaces     | Page 88 |

# Table des matières

|                                                                                                                                                                                                                    |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| CHIMIE .....                                                                                                                                                                                                       | 21 |
| Recherche de traceurs spécifiques de la fabrication d'explosifs par spectrométrie de masse à très haute résolution .....                                                                                           | 22 |
| Développement d'une méthode innovante pour une amélioration des matériaux énergétiques aluminisés par une structuration à l'échelle cristalline par évaporation flash de spray .....                               | 23 |
| Développement d'un matériau d'électrode à oxygène innovant pour les électrolyseurs haute température .....                                                                                                         | 24 |
| Étude de l'influence de la composition des atmosphères de stockage sur les phénomènes de radiolyse alpha de l'eau adsorbée sur les oxydes de plutonium. ....                                                       | 25 |
| Etude expérimentale et par simulation de la stabilité des ions carbonates en sels de chlorures fondus .....                                                                                                        | 26 |
| ELECTROMAGNETISME .....                                                                                                                                                                                            | 27 |
| Modèle de sensibilité du champ électromagnétique et validation expérimentale .....                                                                                                                                 | 28 |
| Développement d'un outil d'évaluation de SER à l'aide du formalisme « Système Hamiltonien à Ports » .....                                                                                                          | 29 |
| Etude et réalisation d'une chaîne de caractérisation du comportement sous agressions électromagnétiques d'objets connectés .....                                                                                   | 30 |
| Etude numérique et expérimentale de la transition streamer-arc dans un guide d'onde rempli d'air .....                                                                                                             | 31 |
| Modélisation et développement d'un moyen de mesure de permittivité à haute température .....                                                                                                                       | 32 |
| Application de meta-surfaces commandables à la caractérisation de matériau .....                                                                                                                                   | 33 |
| ELECTRONIQUE .....                                                                                                                                                                                                 | 34 |
| Sensibilité des composants nanoélectroniques innovants aux effets des radiations .....                                                                                                                             | 35 |
| Evaluation de la tenue des circuits intégrés aux effets de dose ionisante en environnement spatial .....                                                                                                           | 36 |
| ENERGIE, THERMIQUE, COMBUSTION, ECOULEMENTS .....                                                                                                                                                                  | 37 |
| Effets non-Boussinesq dans les mélanges turbulents .....                                                                                                                                                           | 38 |
| Méthodes d'apprentissage pour la modélisation des phases rapides de la turbulence .....                                                                                                                            | 39 |
| Turbulence, combustion et instabilité de Rayleigh-Taylor .....                                                                                                                                                     | 40 |
| Simulations mésoscopiques d'un matériau énergétique sous choc pour étudier sa transition vers la détonation ..                                                                                                     | 41 |
| Modélisation du transfert thermique couplé conducto-radiatif dans les milieux hétérogènes .....                                                                                                                    | 42 |
| ENVIRONNEMENT & POLLUTION .....                                                                                                                                                                                    | 43 |
| Construction et validation d'un jumeau numérique pour la réponse sismique d'un site d'intérêt .....                                                                                                                | 44 |
| Estimation rapide des courants et inondations de tsunami à partir d'algorithmes de deep learning .....                                                                                                             | 45 |
| Etude et comparaison des stratégies de reconstruction de surface à partir d'images multi-angles, multi-dates et multi-capteurs .....                                                                               | 46 |
| Apport de l'analyse en antenne multidimensionnelle (3D) et multi-composantes (3C) à la caractérisation du champ d'ondes sismiques : application aux données de l'antenne du Laboratoire Souterrain Bas Bruit ..... | 47 |
| Traitement statistique du signal pour la séparation de sources multiples sur des antennes .....                                                                                                                    | 48 |
| Utilisation du bruit ambiant infrason pour l'évaluation des modèles numériques de prévision du temps dans la moyenne atmosphère en vue de leur assimilation .....                                                  | 49 |

|                                                                                                                                                                                                                |    |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Couche limite atmosphérique et ondes orographiques : impact sur le climat et la propagation des infrasons.....                                                                                                 | 50 |
| Application de la fibre optique aux mesures géophysiques.....                                                                                                                                                  | 51 |
| INFORMATIQUE & LOGICIELS.....                                                                                                                                                                                  | 52 |
| Algorithme d'aide à la décision pour la maintenance des optiques du LMJ .....                                                                                                                                  | 53 |
| INSTRUMENTATION .....                                                                                                                                                                                          | 54 |
| Développement d'un multi-détecteur neutron pour la lutte contre le terrorisme .....                                                                                                                            | 55 |
| Capteur interférométrique de hautes pressions aériennes par réinjection optique.....                                                                                                                           | 56 |
| Caractérisation des propriétés thermiques de constituants micrométriques à l'aide de nanodiamants .....                                                                                                        | 57 |
| INTERACTION .....                                                                                                                                                                                              | 58 |
| Optimisation de la source X impulsionnelle par diffusion Compton inverse d'un accélérateur linéaire d'électrons .....                                                                                          | 59 |
| Implémentation d'un modèle quasi-statique dans le code PIC CALDER, application à la propagation de faisceaux d'électrons ou laser dans un plasma .....                                                         | 60 |
| Modélisation d'une source de rayonnement X générée lors de l'interaction d'un laser ultra-intense avec une cible solide.....                                                                                   | 61 |
| MATERIAUX & APPLICATIONS .....                                                                                                                                                                                 | 62 |
| Polymorphisme et fusion dans l'étain sous sollicitations dynamiques : analyses macroscopique et cristallographique .....                                                                                       | 63 |
| Réalisation de couches minces à fonctions optiques maîtrisées par technique d'évaporation magnétron (PVD) ..                                                                                                   | 64 |
| Enthalpies de formation des matériaux organiques : développement de modèles prédictifs .....                                                                                                                   | 65 |
| Développement de revêtements ultra réfractaires pour la protection de matériaux composites - Etude du procédé de projection plasma et évaluation du comportement à des températures supérieures à 2000 C ..... | 66 |
| Modélisation du vieillissement des tritures métalliques : application au trituration de palladium .....                                                                                                        | 67 |
| MATHEMATIQUES - ANALYSE NUMERIQUE – SIMULATION.....                                                                                                                                                            | 68 |
| Développement d'un solveur creux multi-niveau pour des problèmes d'électromagnétisme .....                                                                                                                     | 69 |
| Traitement numérique des jonctions en décomposition de domaine pour les ondes .....                                                                                                                            | 70 |
| Reconstruction tomographique multi-contraste et multidimensionnelle par intelligence artificielle.....                                                                                                         | 71 |
| Résolution de problèmes inverses utilisant des codes de simulation coûteux ayant des Images pour sortie .....                                                                                                  | 72 |
| Dynamique d'élimination des produits de radiolyse H <sub>2</sub> et O <sub>2</sub> , dans le gaz environnant une zéolithe 4A partiellement chargée en eau tritiée .....                                        | 73 |
| MECANIQUE.....                                                                                                                                                                                                 | 74 |
| Comportement dynamique d'un explosif comprimé.....                                                                                                                                                             | 75 |
| METROLOGIE .....                                                                                                                                                                                               | 76 |
| Etude d'un système d'imagerie X à contraste de phase pour des mesures à haute résolution spatiale .....                                                                                                        | 77 |
| OPTIQUE - OPTIQUE LASER - OPTIQUE APPLIQUEE.....                                                                                                                                                               | 78 |
| Endommagement des optiques avec des irradiations multiples.....                                                                                                                                                | 79 |
| Etude de l'influence de la pollution ambiante sur la génération d'endommagement par choc laser .....                                                                                                           | 80 |
| Réalisation d'un banc de mesure de réflectivité dans le domaine de l'infrarouge pour des pièces en forme .....                                                                                                 | 81 |
| PHYSIQUE NUCLEAIRE .....                                                                                                                                                                                       | 82 |



|                                                                                                                                                       |    |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Etude de la dissipation dans le processus de fission .....                                                                                            | 83 |
| PHYSIQUE DES PLASMAS.....                                                                                                                             | 84 |
| Etude par diffraction X des transitions de phase de matériaux modèles multiphasiques dans le domaine de la matière dense et tiède.....                | 85 |
| Physique active des particules énergétiques et des ondes électromagnétiques à orbites bas .....                                                       | 86 |
| Stabilité d'écoulements d'ablation en fusion par confinement inertiel : réceptivité .....                                                             | 87 |
| PHYSIQUE DU SOLIDE, SURFACES ET INTERFACES .....                                                                                                      | 88 |
| Construction <i>ab initio</i> d'une équation d'état.....                                                                                              | 89 |
| Etude des mécanismes d'adsorption/dégradation de matériaux dopés pour la séparation des gaz rares .....                                               | 90 |
| Etude des transformations de phase au cours de la solidification et du forgeage d'un acier faiblement allié à haute limite d'élasticité 80 HLES ..... | 91 |

# CHIMIE

**Sujet :****Recherche de traceurs spécifiques de la fabrication d'explosifs par spectrométrie de masse à très haute résolution**

**Contexte :** Les fabrications industrielles mettent en jeu de nombreux composés, tels des polymères, des colorants, des composés organiques et inorganiques qui aboutissent à des mélanges complexes. La recherche et l'identification exhaustive de tous les composés, y compris les impuretés résiduelles à l'état de traces, et la mise en évidence de possibles corrélations entre ces composés permettraient d'obtenir une empreinte unique caractérisant d'un produit, de son mode de production (voies de synthèse choisie) et donc de l'industriel et de son origine.

La spectrométrie de masse à très haute résolution est un outil permettant d'élucider précisément la composition de formulations complexes. Ses hautes performances en termes de résolution, de précision sur la mesure de masse et de sensibilité lui permettent de détecter et d'identifier des composés à l'état de trace dans un milieu d'une grande complexité. La richesse des informations obtenues est telle que le recours à des logiciels dédiés et à des traitements statistiques des données, en particulier chimiométriques, est la clé d'une interprétation pertinente.

**Objectif de la thèse :** Le projet de ce programme doctoral consiste à analyser des mélanges explosifs (charge explosive, liants, plastifiants, y compris des composés n'ayant pas de pouvoir détonant) afin d'avoir une identification univoque et rapide de ceux-ci. Une part de la recherche portera sur la recherche de corrélation entre les impuretés détectées et les procédés de fabrication.

Une attention particulière sera donnée à la caractérisation la plus complète possible des polymères entrant dans la composition de l'explosif pour enrichir la connaissance existant déjà au CEA sur ces matériaux. L'analyse des autres éléments constitutifs de ces mélanges (tels que les additifs, colorants, résidus de synthèse...) ne sera pas oubliée, car indispensable à l'obtention d'une empreinte unique.

La thèse se fondera sur l'emploi de la spectrométrie de masse à très haute résolution de type FT-ICR-MS (Fourier Transform Ion Cyclotron Resonance Mass Spectrometry) au LCP-A2MC (Laboratoire de Chimie Physique – Approche Multi-échelles des Milieux Complexes) de l'Université de Lorraine – Metz et de type Orbitrap (site CEA de Bruyères-le-Châtel) et devra évaluer les capacités de ces méthodes en regard notamment des sources d'ionisation employées. Le recours à des couplages techniques séparatives – spectrométrie de masse sera également envisagé (chromatographie en phase gazeuse et en phase liquide, voire électrophorèse capillaire).

Le cas échéant, des analyses par spectrométrie de masse à deux dimensions (2D FTICRMS), particulièrement pertinentes pour l'obtention d'informations structurales, pourront être réalisées. Une comparaison des performances des approches mises en place sera effectuée en conservant le recours au dispositif DART-Orbitrap à Bruyères-le-Châtel comme référence. D'autres méthodes pourront être évaluées, comme la mobilité ionique sur l'Orbitrap ou la chromatographie en phase liquide sur un Q-TOF (spectromètre de masse à temps de vol).

En complément des analyses proprement dites, un intérêt particulier sera porté au traitement des données et aux possibilités d'automatisation de ce traitement afin d'obtenir *in fine* un mode opératoire exhaustif et robuste (préparation d'échantillon, analyse, traitement des données) et simple pour obtenir une identification à partir d'une empreinte spectrale complexe. Des modes de traitement approfondis mettant en œuvre des logiciels dédiés (Polymeric, Composer,...) et une approche chimiométrique (ex : étude en composantes principales) seront employés.

**Déroulement de la thèse :**

Les travaux de doctorat se dérouleront essentiellement sur le site de l'Université de Lorraine-Metz du sein du LCPA2MC et s'organiseront en quatre phases :

- Recherche bibliographique 3 mois
- Mise en place de la méthodologie pour la mesure de polymères et de mélanges énergétiques : 15 mois
- Applications sur échantillons réels : 12 mois
- Rédaction manuscrit et publications : 6 mois

**Directeur de thèse et école doctorale :**

AUBRIET Frédéric  
 frederic.aubriet@univ-lorraine.fr  
 ED 606 -Chimie, Mécanique, Matériaux, Physique  
 (C2MP)  
 Université de Lorraine

**Contacts :**

PROGENT Frédéric  
 CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297  
 Arpajon  
 Tél. : 01.69.26.40.00. - frederic.progent@cea.fr

**Sujet :**

**Développement d'une méthode innovante pour une amélioration des matériaux énergétiques aluminisés par une structuration à l'échelle cristalline par évaporation flash de spray**

**Contexte :**

Pour les besoins de la Défense, le CEA DAM doit maîtriser les domaines des matériaux énergétiques ou explosifs. A cet effet, il est nécessaire d'identifier les potentielles évolutions prévisibles concernant ces matériaux.

De nouvelles voies de formulation chimique de matériaux énergétiques, décrites sous la forme de granulés d'octogène (HMX) enrobés d'oxynitrotriazole (ONTA) et d'aluminium enrobé d'ONTA, ont été identifiées dans la littérature ouverte.

La vitesse de détonation annoncée pour un explosif formulé à partir de granulés ONTA-HMX, en rapport 1:1 molaire, serait supérieure à celle de l'octogène, tout en conservant des caractéristiques de sécurité proches de celles de l'ONTA. Ces performances seraient très prometteuses pour de nouveaux explosifs à usage militaire conventionnel.

Les premières simulations thermochimiques réalisées pour des compositions HMX-ONTA-Al, à différents taux d'HMX, montrent une nette amélioration des performances balistiques et de brisance par rapport à un explosif actuel à l'octogène et à l'aluminium ; et cela sans dégradation des effets de souffle.

Une nouvelle voie de formulation permettant d'allier une performance accrue des explosifs et une faible sensibilité (celle de l'ONTA) est ainsi à explorer.

**Objectif de la thèse :**

L'objectif de la thèse est d'identifier, à partir des travaux publiés, les potentialités de cette composition novatrice HMX-ONTA-Al.

Des premiers travaux exploratoires, menés au laboratoire NS3E (Nanomatériaux pour des Systèmes Sous Sollicitations Extrêmes) du CNRS et de l'Université de Strasbourg, sous tutelle de l'ISL, montrent la possibilité de réaliser ce type de composition par la technique Evaporation Flash de Spray (SFE en anglais) des granulés d'ONTA dans lesquels l'octogène est dispersé sous forme de nano-particules.

L'objectif de cette thèse est de mettre au point une méthode de réalisation de granulés ONTA /HMX-nano/Al-nano utilisant la technique SFE. Ce travail constitue un sujet de thèse novateur, en rupture technologique avec ce qui se fait actuellement.

**Déroulement de la thèse :**

Le(a) doctorant(e) aura à mener à bien : (i) une étude de la formulation des granulés, (ii) une identification des balances en oxygène atteignables, (iii) la mesure des caractéristiques détoniques à petite échelle et à l'échelle centimétrique en fonction de la densité, (iv) et enfin, une étude du comportement détonique (transition vers la détonation) via des expériences de laboratoire et des simulations thermochimiques et numériques.

Les travaux relatifs aux points (i), (ii), et (iii) à petite échelle seront réalisés au laboratoire NS3E, à L'Institut Saint Louis pendant 20 mois.

Les points (iii) à grande échelle et (iv) seront traités au CEA/DAM Centre de Gramat pendant les 16 mois suivants, qui incluront la rédaction du mémoire de thèse.

Les compétences requises sont la chimie des procédés et les moyens de caractérisation chimique et physique des matériaux.

**Directeur de thèse et école doctorale :**

Denis Spitzer - Denis.Spitzer@isl.eu  
ED Chimie Strasbourg  
Laboratoire NS3E  
Université de Strasbourg, CNRS, ISL

**Encadrant :**

Antoine Osmont  
CEA/Gramat – BP80200 - 46500 Gramat  
Tél. : 05 65 10 54 32 - antoine.osmont@cea.fr

**Sujet :****Développement d'un matériau d'électrode à oxygène innovant pour les électrolyseurs haute température****Contexte :**

L'électrolyse de la Vapeur d'eau à Haute Température (EVHT ou EHT) est très prometteuse grâce à son rendement élevé mais elle présente cependant un inconvénient majeur qui retarde l'émergence de cette technologie. En effet, les cellules électrochimiques actuellement utilisées présentent un taux de dégradation (variation de la tension divisée par la tension initiale, de 2 ou 3 %/1000h pour les meilleures cellules commerciales) supérieur à l'objectif (<1%/1000h) qui permettrait de rendre ces systèmes compétitifs par rapport à des technologies plus matures comme l'électrolyse alcaline. Le sujet de la thèse proposée se concentre donc sur cette problématique de durabilité. En effet, une des raisons expliquant la dégradation des cellules est l'évolution du matériau d'électrode à oxygène classiquement utilisé en température et sous polarisation anodique (fonctionnement en mode EHT). La mise en œuvre de matériaux d'électrode à oxygène innovants et la compréhension des mécanismes de fonctionnement et de dégradation associés sont donc indispensables pour atteindre les objectifs de cette technologie prometteuse.

**Objectif de la thèse :**

L'objectif de la thèse est de synthétiser, mettre en forme, caractériser et modéliser un nouveau matériau d'électrode à oxygène, afin d'être intégré à la cellule électrochimique d'électrolyse haute température développée au CEA Le Ripault. Typiquement, un matériau prometteur déjà identifié est l'oxyde de praséodyme  $\text{Pr}_6\text{O}_{11}$ . En effet, ce matériau pourrait permettre d'augmenter la durabilité de la cellule, de même que ses performances initiales. Le moyen de mise en forme privilégié sera la sérigraphie, afin d'être compatible avec un procédé industriel de fabrication, même si d'autres moyens de mise en forme pourraient être étudiés si ces derniers paraissaient prometteurs. Après la synthèse du matériau retenu, le comportement électrochimique de l'électrode mise en forme sera analysé par spectroscopie d'impédance, voltampérométrie et chronopotentiométrie. Des tests de durabilité seront également menés et les évolutions de microstructure et vieillissements physicochimiques du matériau seront caractérisés par MEB, MET, DRX, et tomographie 3D. L'ensemble des données expérimentales serviront à alimenter un modèle électrochimique développé au CEA/Liten, que le(a) candidat(e) devra compléter / modifier en fonction des spécificités du matériau retenu. Une fois le modèle adapté et validé, les simulations permettront de mieux appréhender les mécanismes électrochimiques élémentaires associés à la dégradation de l'électrode. Des recommandations tant sur la microstructure ou la composition du matériau pourront être proposées pour optimiser l'électrode étudiée.

**Déroulement de la thèse :**

Après une étude bibliographique sur les matériaux d'électrodes à oxygène et les mécanismes électrochimiques et de vieillissement associés, les premières synthèses du matériau choisi seront faites. Ces synthèses, ainsi que la mise en forme en cellules symétriques et complètes, seront réalisés au CEA Le Ripault durant la première année en lien avec l'ICMCB (Institut de Chimie de la Matière Condensée de Bordeaux), partenaire spécialisé dans le développement de matériaux d'électrodes à oxygène de type nickelates. La deuxième et troisième année de la thèse seront alors consacrées aux analyses microstructurales et électrochimiques fines associées, puis à leur intégration dans le modèle électrochimique développé au CEA/Liten.

**Directeurs de thèse et école doctorale :**

BASSAT Jean-marc & LAURENCIN Jérôme  
 jean-marc.bassat@icmcb.cnrs.fr  
 I-MEP<sup>2</sup>/Maison Jean Kuntzmann  
 110 rue de la Chimie - 38400 Saint-Martin-d'Hères

**Encadrant :**

LAURENCIN Jérôme & VULLIET Julien  
 CEA/Le Ripault – BP 16 – 37260 Monts  
 Tél. : 04.38.78.22.10 – 02.47.34.40.00  
 jerome.laurencin@cea.fr & julien.vulliet@cea.fr

**Sujet :**

**Étude de l'influence de la composition des atmosphères de stockage sur les phénomènes de radiolyse alpha de l'eau adsorbée sur les oxydes de plutonium.**

**Contexte :**

Les composés plutonifères interagissent avec leur environnement notamment par le biais de processus de radiolyse. Au travers de ces processus, la production de gaz tels que l' $H_2$  ou le  $CH_4$  à l'intérieur des conteneurs peut alors se produire. Ainsi, les phénomènes de radiolyse sont à considérer vis-à-vis de la sûreté des stockages de matière nucléaire.

Il apparaît clairement que ces phénomènes de radiolyse ne peuvent être saisis dans leur globalité sans effectuer des études ciblées visant à comprendre les mécanismes élémentaires mis en jeu. L'objectif à terme est de développer un modèle fiable, validé par des données expérimentales, permettant d'estimer l'évolution au cours du temps des conditions d'entreposage de la matière nucléaire en fonction du type de produit considéré, de sorte à améliorer les standards de stockage et anticiper leur modification.

**Objectif de la thèse :**

Afin de répondre à cette problématique, le rôle des oxydes de carbone sur les mécanismes d'évolution de la composition des atmosphères de stockage au travers de la radiolyse alpha de l'eau adsorbée sur les oxydes de plutonium sera étudié.

**Déroulement de la thèse :**

Dans un premier temps, seul l'effet du rayonnement sur le comportement des gaz d'intérêt ( $N_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ ) en mélange dans un gaz tampon de type atmosphère de stockage ( $Ar$ ,  $N_2$  ou air) sera étudié. Ces essais consisteront à irradier au moyen d'un faisceau d'électrons ou d'une source gamma externe des échantillons de gaz et à analyser leur composition en fonction de la dose délivrée par chromatographie gazeuse, infra-rouge ou spectrométrie de masse. L'influence de la présence d'oxygène sera également traitée pour comprendre les phénomènes dans les stockages sous air. Préalablement aux essais d'irradiation décrits précédemment, il sera nécessaire d'effectuer une étude dosimétrique de l'énergie réellement déposée dans le gaz dans les conditions opératoires. Ce type de mesure, essentiel pour construire des mécanismes de radiolyse fiables, demeure néanmoins original dans le cas de la radiolyse des gaz. Il sera alors également intéressant de comparer les valeurs obtenues avec des simulations d'énergie déposée.

Dans un second temps, l'effet de la nature des surfaces sur la radiolyse de ces gaz devra être étudié. En effet, il est connu que les surfaces peuvent jouer un rôle prépondérant dans les mécanismes physico-chimiques de radiolyse des gaz, notamment au travers des phénomènes d'adsorption/désorption, d'oxydation ou de transferts d'énergie. Pour cela, des expérimentations mettant en œuvre des oxydes de plutonium ou du plutonium métallique de surface spécifique et d'isotopie connues constitueront une part essentielle de la thèse. Il sera alors essentiel de mesurer, par la mise en œuvre de différentes techniques d'analyse, l'évolution de l'atmosphère (IRTF, GC-MS, CPV) et de la matière (MEB, XPS, DRX) avant et après les expérimentations. Les mesures seront faites principalement sur Marcoule.

**Directeur de thèse et école doctorale :**

MOISY Philippe – CEA/Marcoule  
Philippe.moisy@cea.fr  
Université Montpellier II

**Encadrant :**

VENAULT Laurent  
CEA/Marcoule  
30207 Bagnols sur Cèze  
Tél. : 04.66.79.60.00  
laurent.venault@cea.fr

BERLU Lilian  
CEA/Valduc  
21120 Is sur Tille  
Tél. : 03.80.23.40.00  
lilian.berlu@cea.fr

**Sujet :****Etude expérimentale et par simulation de la stabilité des ions carbonates en sels de chlorures fondus****Contexte :**

Un procédé de traitement des produits recyclables a été mis au point du CEA Valduc afin de diminuer l'inventaire des sous-produits générés par les procédés pyrométallurgiques. Ce procédé est actuellement exploité dans une installation pilote au CEA Valduc et requiert d'améliorer les connaissances des étapes élémentaires.

Une des étapes clé de ce procédé consiste à réaliser l'oxydation des actinides présents par l'ajout de carbonates dans le solvant, un sel de chlorures fondus, liquide à haute température (700-900°C). La stabilité des espèces ajoutées pour réaliser l'oxydation dépend cependant du type de solvant et de la température. Les données thermochimiques doivent être déterminées : diagramme de phase, solvation des carbonates, cinétiques de réactions. Ces informations doivent être connues précisément afin d'améliorer la conduite du procédé.

**Objectif de la thèse :**

La thèse proposée a pour but d'étudier la stabilité des espèces carbonates en sels de chlorures fondus. Les principaux travaux à réaliser seront :

- de tracer les diagrammes de phase  $\text{NaCl-KCl-Na}_2\text{CO}_3$  et  $\text{NaCl-CaCl}_2\text{-CaCO}_3$  à l'aide mesures expérimentales associées à une étude thermodynamique (FactSage),
- d'étudier la dissociation des carbonates dans différents sels de chlorures fondus à différentes températures par la mesure des gaz évacués par ATG-IR puis spectroscopie IR combinée à l'électrochimie analytique en abordant les aspects thermodynamiques et cinétiques.
- de suivre la vitesse d'oxydation de métaux dissous dans chaque mélange d'intérêt par électrochimie analytique combinée à la spectroscopie IR en fonction des conditions : température, concentration (en métal et en carbonate), nature des espèces de métal (chlorure, oxychlorure, métal non dissous)
- de proposer et vérifier les conditions optimales pour une oxydation rapide et l'élimination des carbonates en excès dans le procédé mis en œuvre

**Déroulement de la thèse :**

La thèse se déroulera principalement sur le centre du CEA/Valduc. Des travaux sur le site de l'Université Paul Sabatier de Toulouse sont également à prévoir, en particulier pour la prise en main et l'utilisation du logiciel de modélisation thermodynamique.

**Directeur de thèse et école doctorale :**

CHAMELOT Pierre et/ou GIBILARO Mathieu  
pierre.chamelot@ups-toulouse.fr  
Laboratoire de Génie Chimique – Université Paul  
Sabatier -Toulouse III

**Encadrant :**

CLAUX Benoît  
CEA/Valduc - 21120 Is-sur-Tille  
Tél. : 03.80.23.40.00 – benoit.claux@cea.fr



# ELECTROMAGNETISME

# ELECTROMAGNETISME

## Sujet :

### Modèle de sensibilité du champ électromagnétique et validation expérimentale

#### Contexte :

Ce travail s'inscrit dans les études menées par le CESTA dans le domaine de l'électromagnétisme.

La SER (**S**urface **E**quivalente **R**adar) est une grandeur caractérisant la réponse d'une cible lorsqu'elle est illuminée par une onde radar. On peut alors envisager d'exploiter ce signal pour remonter aux caractéristiques radioélectriques des matériaux revêtant la cible.

#### Objectif de la thèse :

Ce sujet de thèse propose de découvrir l'univers des chambres anéchoïques en s'intéressant à l'exploitation de données expérimentales. Le(a) candidat(e) s'appuiera sur des travaux antérieurs qui ont mis en évidence la capacité de déterminer des variations de propriétés de matériaux revêtant une cible grâce à des mesures de champ électrique diffracté par cette cible.

Un modèle de sensibilité du champ électromagnétique aux propriétés matériaux et la résolution d'un problème inverse ont été établis ; ils permettent d'estimer des variations de propriétés à partir des écarts entre le calcul et la mesure du champ diffracté par la cible.

#### Déroulement de la thèse :

La première phase de la thèse portera sur l'appropriation de la méthode permettant de calculer la sensibilité du champ électromagnétique aux propriétés des matériaux.

Une phase de simulation sera ensuite menée dans le but de définir une configuration de mesure permettant d'acquérir des signaux pertinents pour l'inversion.

Pour vérifier la bonne cohérence entre les simulations précédentes et les conditions expérimentales retenues, des mesures en chambre anéchoïque seront réalisées. Une phase préalable devra permettre de quantifier l'incertitude de mesure, et de proposer des solutions de réduction des incertitudes élémentaires principales.

L'analyse et l'exploitation des résultats de mesure seront réalisées au moyen de traitements développés en MATLAB. Le niveau de sensibilité du champ électromagnétique aux propriétés matériaux accessible expérimentalement sera déterminé en tenant compte de l'incertitude de mesure, et validé par la simulation.

Le(a) candidat(e) travaillera dans une équipe d'expérimentateurs, au sein d'un laboratoire expérimental disposant de moyens de caractérisations hyperfréquences uniques en France, en lien avec des théoriciens et des numériciens.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

LITMAN Amélie & GEFFRIN Jean-Michel  
Amelie.Litman@fresnel.fr

Jean-Michel.Geffrin@fresnel.fr

ED 352 - Physique et sciences de la matière

#### Encadrant :

CARTESI Guillaume & MAZE-MERCEUR Geneviève

CEA/CESTA – BP 2 - 33114 Le Barp

Tél. : 05.57.04.40.00

Guillaume.Cartesi@cea.fr

Genevieve.Maze-Merceur@cea.fr

# ELECTROMAGNETISME

## Sujet :

Développement d'un outil d'évaluation de SER à l'aide du formalisme « Système Hamiltonien à Ports »

### Contexte :

Ce sujet de thèse s'inscrit dans le cadre d'évaluation d'observables, c'est-à-dire de quantités mesurables, définies dans la théorie des interactions électromagnétiques (EM) macroscopiques. Ces observables sont, par exemple, la Surface Equivalente Radar (SER) d'un système complexe soumis à un champ incident. Lors de la conception radioélectrique d'un système, les observables d'intérêt sont généralement évaluées à l'aide d'outils de simulation reposant sur une discrétisation fine de la géométrie de l'objet, générant ainsi des problèmes de plusieurs millions de degrés de liberté. Or ces observables ne sont souvent sensibles qu'à quelques paramètres qu'il est difficile d'identifier a posteriori. Il paraît alors plus judicieux de travailler sur des modèles dédiés, intégrant une connaissance a priori des phénomènes physiques mis en jeu et exploitant les propriétés topologiques des équations de Maxwell.

### Objectif de la thèse :

Dans ce contexte, il existe un formalisme mathématique, le port-based modelling, qui permet de représenter l'architecture d'un système physique complexe par un graphe reliant des composants « Hamiltoniens à ports », c'est-à-dire des sous-systèmes dynamiques ouverts passifs, structurés en parties conservatives, dissipatives et externes via des ports d'interaction. Les variables associées à ces ports quantifient le flux d'énergie ( $f$ ) et l'effort ( $e$ ), l'un étant une entrée contrôlable et l'autre une observable. Depuis les premiers travaux, l'approche hamiltonienne à ports a connu un grand essor et est utilisée dans des domaines allant de l'électronique, la mécanique au génie des procédés. Elle offre de nombreux avantages : une interprétation physique des phénomènes plus directe, une modélisation complètement modulaire, des schémas d'intégration associés conservant les invariants physiques, etc. Pour une adaptation de ce formalisme aux équations de Maxwell, il semble pertinent de les appréhender sous leur forme différentielle. L'objectif poursuivi par la thèse proposée est de se doter d'un formalisme de type « Hamiltonien à Ports » adapté à la problématique « Evaluation de la SER d'un objet » et d'en dégager des outils de conception.

### Déroulement de la thèse :

Dans un premier temps, le(a) candidat(e) exploitera la nature géométrique des formes différentielles au profit de l'évaluation de la SER. Ensuite, il sera question de faire de la réduction de modèle tout en préservant la structure Hamiltonienne du système. A ce titre, le(a) candidat(e) s'intéressera aux propriétés de l'opérateur de Scattering pour des objets avec et sans pertes et aux métriques adaptées. Dans un dernier temps, il/elle proposera une modélisation stochastique des systèmes Hamiltoniens.

Ce formalisme sera validé par l'évaluation d'un objet conçu par le(a) candidat(e). Cet objet sera caractérisé selon un protocole à définir.

### Directeur de thèse et école doctorale :

DARCES Muriel  
Muriel.darces@upmc.fr  
ED SMAER (Sciences, Mécanique, Acoustique,  
Electronique et Robotique)

### Encadrant :

MORVAN Sylvain & AGUILERA Paula  
CEA/CESTA –BP 2 - 33114 Le Barp Cedex  
Tél. : 05.57.04.40.00  
sylvain.morvan@cea.fr & paula.aguilera@cea.fr

# ELECTROMAGNETISME

## Sujet :

**Etude et réalisation d'une chaîne de caractérisation du comportement sous agressions électromagnétiques d'objets connectés**

### Contexte :

Le Centre d'Évaluation de la Sécurité des Technologies de l'Information (CESTI), du CEA DRT LETI (Laboratoire des Technologies de l'information) à Grenoble (38) analyse l'impact des cybers attaques sur les technologies et les systèmes électroniques, particulièrement pour les technologies émergentes. Le CEA DAM centre de Gramat (46) analyse l'impact des agressions électromagnétiques intentionnelles (AGREMI) sur les systèmes électroniques, et les protections permettant d'y faire face. Ces deux laboratoires mettent en commun leurs compétences pour définir et réaliser une chaîne de caractérisation électromagnétique spécifique à l'analyse de la vulnérabilité électromagnétique des objets connectés modernes.

### Objectif de la thèse :

Les objectifs principaux de la thèse sont tout d'abord de définir un objet connecté suffisamment générique, les moyens de caractérisation fonctionnelle et de diagnostic de fautes associés, ainsi que la méthode et les moyens de mesure des tensions et/ou courants induits sur les cartes électroniques constituant l'objet, puis :

- de concevoir et réaliser un moyen de caractérisation de la vulnérabilité électromagnétique hyperfréquence, de puissance élevée permettant d'illuminer globalement et/ou localement cet objet.
- de mettre en œuvre cette chaîne de caractérisation sur l'objet générique pour mettre en évidence les risques de dysfonctionnements induits sur ce système sous agressions.

### Déroulement de la thèse :

La première partie de la thèse se déroulera à Grenoble sur une période de 9 à 12 mois et sera consacrée à une revue bibliographique et une réflexion théorique sur les sujets suivants :

- recherche d'une architecture électronique du système connecté de référence présentant des caractéristiques adaptées à l'étude (partie hyperfréquence en bande L ou S, faisabilité des mesures de courant-tension, logiciel de diagnostic, ...),
- conception du dispositif de rayonnement, incluant non seulement la réalisation d'antennes actives à gain variable (focalisation à distance fixe) et d'antennes actives à gain fixe permettant une illumination, non intrusive au plan fonctionnel pour l'objet, en champ lointain et/ou en champ proche, mais également la partie génération de puissance.

La seconde partie se déroulera à Gramat et consistera à réaliser un prototype de la chaîne de caractérisation mettant en œuvre la solution retenue dans la première partie, en plusieurs étapes :

- développement et caractérisation du dispositif de rayonnement par association de modules développés spécifiquement ou achetés sur étagère,
- développement et caractérisation d'une version compacte du dispositif en relation avec le LAPCI (Laboratoire Antennes, Propagation et Couplage Inductif),
- vérification expérimentale de la chaîne de caractérisation sur l'objet connecté défini dans la première partie,
- rédaction du manuscrit de thèse.

### Directeur de thèse et école doctorale :

REINEIX Alain - alain.reineix@xlim.fr  
XLIM Université de Limoges  
ED SISMI Limoges

### Encadrant :

HOFFMANN Patrick - patrick.hoffmann@cea.fr  
CEA/Gramat – BP 80200 - 46500 Gramat  
Tél. : 05 65 10 54 32

# ELECTROMAGNETISME

## Sujet :

Etude numérique et expérimentale de la transition streamer-arc dans un guide d'onde rempli d'air

### Contexte :

La propagation guidée des ondes électromagnétiques, haute fréquence et de fortes puissances ne peut pas s'effectuer via des câbles coaxiaux du fait des fortes atténuations qu'ils induisent généralement au-delà du GigaHertz d'une part, et d'autre part, du fait des risques de claquages aux interfaces entre les éléments métalliques possédant des faibles rayons de courbure et les diélectriques. Pour pallier ces limites, ce sont des guides d'ondes qui sont employés entre les générateurs de forte puissance et leurs charges fonctionnelles. Cependant, même dans les guides d'ondes, des phénomènes de claquage dans l'air peuvent être induits au voisinage de défauts, de raccordements... C'est pour des besoins de maîtrise de ces phénomènes que le CEA souhaite étudier les seuils de claquage de l'air dans un guide d'onde parcouru par une onde de forte puissance.

### Objectif de la thèse :

L'objectif de la thèse est de mettre en évidence les phénomènes de claquage dans l'air pour différentes pressions. De façon à maîtriser la zone de claquage, un pré-plasma d'air faiblement ionisé (et hors équilibre thermodynamique) sera produit par irradiation du guide d'onde avec une impulsion d'électrons de hautes énergies (MeV). La caractérisation de ce pré-plasma a fait l'objet d'études antérieures, son influence sur les seuils de claquage devra être étudiée. Le(a) candidat(e) retenu(e) devra également mettre en œuvre des diagnostics optiques (spectrométrie d'émission) et électriques pour caractériser l'arc électrique en termes de densité et température électronique, ainsi que de courant transporté. Les données mesurées seront analysées par comparaison avec des outils de calcul du CEA ou développés dans le cadre de la collaboration avec le Laboratoire LAPLACE de l'Université de Toulouse. Plus précisément, la caractérisation du plasma depuis la phase hors équilibre jusqu'à la phase thermique sera effectuée par une suite de calculs : Monte-Carlo 3D pour déterminer le débit d'énergie déposée dans le volume irradié, des calculs 2D axisymétriques de l'évolution spatio-temporelle de l'amorçage et du développement des streamers précurseurs du passage à l'arc, et enfin des calculs Maxwell-Vlasov pour modéliser l'évolution temporelle de l'arc en termes de caractéristiques électriques (conductivité, permittivité). Des études paramétriques en fonction de la fluence de l'impulsion d'électrons et de la pression d'air dans le guide seront effectuées, et serviront à la validation de la chaîne de calcul.

### Déroulement de la thèse :

La thèse débutera par une étude bibliographique permettant de faire un bilan des différents moyens de caractérisation du plasma et des champs électromagnétiques générés par les claquages, puis identifier les applications des diagnostics disponibles au CEA-Gramat, comme un spectromètre [200–900] nm, couplé à une caméra ICCD ou des photomultiplicateurs, capteurs de courant. Il s'agira ensuite de concevoir un plan d'expérience d'interaction électrons – guides d'onde sur l'accélérateur d'électrons 6 MeV ORIATRON en service au CEA-Gramat. Puis, les caractéristiques des décharges (vitesse de propagation, appel de courant généré, zone d'amorçage, morphologie...) déterminées expérimentalement seront comparées aux résultats de simulations numériques. Il s'agira notamment d'adapter à la situation expérimentale un code 2D axisymétrique calculant la propagation de streamers dans le guide d'onde soumis à la fois aux ondes EM et aux irradiations.

Ces travaux s'effectueront en étroite collaboration avec le Laboratoire PLASMA et Conversion d'Energie (LAPLACE) à Toulouse (Paul Sabatier).

### Directeur de thèse et école doctorale :

EICHWALD Olivier - eichwald@laplace.univ-tlse.fr  
ED GEET Toulouse

### Encadrant :

RIBIERE Maxime  
CEA/Gramat – BP 80200 - 46500 Gramat  
Tél. : 05.65.10.54.32 - maxime.riberie@cea.fr

# ELECTROMAGNETISME

## Sujet :

### Modélisation et développement d'un moyen de mesure de permittivité à haute température

#### Contexte :

Les contraintes environnementales (température, mécanique,...) influent sur les propriétés électromagnétiques des matériaux diélectriques et/ou magnétiques. Ainsi, au-delà d'une température de transition, les matériaux non métalliques convergent vers un comportement métallique. Dans le cadre du dimensionnement de nos systèmes, il est indispensable de connaître ces températures de transition afin de définir le matériau qui répondra aux besoins spécifiés. Ces températures sont généralement situées au-delà de 1000°C et les moyens de mesures actuellement utilisés au laboratoire permettent uniquement des caractérisations de propriétés électromagnétiques jusqu'à 350°C.

Le moyen de mesures envisagé nécessitera une étude multi-physique. En l'état, les contraintes de conduction thermique imposent une approche de la mesure électromagnétique en espace libre. La réflexion devra être menée en considérant un ensemble de paramètres liés aux contraintes de mise en œuvre :

- Le choix du système de chauffage afin de garantir une isotropie thermique du matériau à caractériser.
- Le dimensionnement d'un four dont les parois diélectriques seront suffisamment éloignées pour minimiser l'incidence thermique et dont les propriétés électromagnétiques connues permettront de remonter à la permittivité diélectrique de l'échantillon mesuré.
- La définition et le choix des matériaux permettant une étanchéité thermique du four.
- La prise en compte des rayonnements thermiques dans la détermination de la permittivité diélectrique de l'échantillon mesuré.

#### Objectif de la thèse :

L'objectif de cette thèse se décline en deux parties principales :

- Modéliser, développer et assembler le moyen de mesure en permittivité matériaux jusqu'à au moins 1500°C.
- Valider sur le plan métrologique les mesures obtenues, par intercomparaisons avec des moyens existants jusqu'à leur température seuil et en effectuant la propagation des incertitudes des principaux contributeurs au résultat.

#### Déroulement de la thèse :

Durant la thèse, le(a) candidat(e) travaillera sur une étude multi-physique en interaction avec les experts CEA et de son école doctorale. Dans un premier temps, le(a) candidat(e) devra s'approprier l'état de l'art existant sur la thématique afin d'identifier les verrous technologiques, de valider le choix de la méthode en espace libre ou de proposer une alternative plus efficiente. Dans un second temps, le(a) candidat(e) devra effectuer l'analyse multi-physique du moyen et mettre en œuvre les analyses, les simulations, les expérimentations, ... permettant le dimensionnement d'un moyen prenant en compte l'ensemble des contraintes tout en fournissant la mesure en permittivité souhaitée avec les meilleures incertitudes possibles. Pour finir, le(a) candidat(e) aura à sa charge l'assemblage du moyen, la mise en sécurité de ce dernier et la réalisation des premières mesures et leur validation par intercomparaison avec d'autres moyens existants.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

TANTOT Olivier  
Olivier.tantot@xlim.fr  
Xlim – 87000 Limoges

#### Encadrant :

CHARLES Michaël  
CEA Le Ripault – 37260 Monts  
Tél. : 02.47.34.40.00 – michael.charles@cea.fr

# ELECTROMAGNETISME

## Sujet :

### Application de meta-surfaces commandables à la caractérisation de matériau

#### Contexte :

Les meta-surfaces sont des surfaces structurées présentant des propriétés inédites vis-à-vis du rayonnement électromagnétique. Leur caractère surfacique est également un atout indéniable pour de nombreuses applications où le volume est contraint. De nombreux travaux ont été réalisés dans ce domaine. En particulier, ces dernières années, celles-ci ont été utilisées comme une solution alternative au cloaking, dont les propriétés matériaux constituent le challenge principal. En revanche, l'utilisation des meta-surfaces pour la caractérisation des matériaux électromagnétiques présente encore des potentialités d'innovation.

#### Objectif de la thèse :

L'objectif de la thèse est de concevoir et réaliser une métasurface dont l'impédance soit contrôlable afin d'utiliser ce contrôle dans le but de caractériser plus finement les propriétés électromagnétiques des matériaux.

#### Déroulement de la thèse :

Dans un premier temps, le(a) candidat(e) devra s'approprier l'état de l'art existant sur la thématique afin d'identifier les verrous technologiques. Il(elle) travaillera ensuite sur la conception de metasurfaces, sur leur réalisation et sur leur application à la caractérisation de matériaux. Ces trois aspects jalonneront respectivement le déroulement de la thèse. La conception s'appuiera sur l'expertise, les modèles analytiques et les codes aux éléments finis disponibles au laboratoire. La réalisation tirera partie des compétences matériaux du CEA/Le Ripault, des compétences en électronique du CEA et pourra également faire l'objet de sous-traitances. Enfin l'application à la caractérisation de matériau s'effectuera dans le laboratoire sur plusieurs types de composants et permettra de quantifier l'apport des métasurfaces ainsi développées.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

ENOCH Stefan – Institut Fresnel  
Stefan.enoch@fresnel.fr  
ED - Physique et Sciences de la Matière  
Université d'Aix-Marseille

#### Encadrant :

MALLEJAC Nicolas  
CEA/Le Ripault – BP16 - 37260 Monts  
Tél. : 02.47.34.40.00 – nicolas.mallejac@cea.fr

# ELECTRONIQUE



## Sujet :

### Sensibilité des composants nanoélectroniques innovants aux effets des radiations

**Contexte :** L'évolution et l'intégration des composants électroniques reposent depuis longtemps sur la miniaturisation des dimensions des transistors. Leur taille atteint désormais des dimensions telles que les épaisseurs de couches minces ne contiennent plus que quelques couches atomiques. Pour poursuivre l'intégration des composants, une des voies les plus prometteuses consiste à explorer les empilements en 3D de composants. Cette démarche conduit à des technologies non planaires et a été initiée au CEA depuis des années. Elle a permis l'apparition de composants tels que les FinFETs (Finger Field Effect Transistors), les nano-fils de silicium (Si nano-wire) et plus récemment les nano-sheets. Désormais, pour ces composants les plus avancés, les dimensions caractéristiques se rapprochent des dimensions des effets induits par les particules de l'environnement spatial.

La fiabilité en environnement radiatif des futurs composants intégrés basés sur ces technologies nécessite d'être étudiée afin d'en estimer la sensibilité. Ces technologies électroniques sont prometteuses, et identifiées comme solution possible pour l'électronique du futur. Cependant, l'utilisation de ces technologies en environnement radiatif (avionique, spatial, physique des hautes énergies, etc...) nécessite une meilleure compréhension des effets induits par les différents types de radiations dans ces empilements complexes de matériaux en couche mince. L'expertise de conception et de développement des composants nanoélectroniques sera amenée par le CEA LETI. Le CEA DAM Ile-de-France, dont une équipe est spécialisée dans l'évaluation des technologies micro, nano et subnanométriques soumises aux radiations, apportera son savoir-faire afin d'appréhender au mieux la conjonction des deux domaines considérés.

**Objectif de la thèse :** Les objectifs de la thèse seront :

- de comprendre le fonctionnement des composants avancés du CEA LETI et des effets prédominants des radiations dans l'électronique,
- d'identifier, de modéliser et de simuler numériquement les environnements radiatifs d'intérêt et leur interaction avec les zones sensibles des dispositifs,
- de définir et réaliser les tests radiatifs pertinents par rapport aux environnements définis,
- d'évaluer les règles de conception pour optimiser les futurs composants électroniques afin de les rendre plus résistants aux effets des radiations.

**Déroulement de la thèse :** Le travail de thèse de déroulera selon les étapes suivantes :

- Etude bibliographique : fonctionnement des composants du LETI et environnements radiatifs d'intérêt.
- Modélisation du comportement électrique des composants étudiés.
- Réalisation de campagnes d'expérimentation radiative sur ces composants (sur site ou à l'étranger).
- Identification/analyse et modélisation des mécanismes originaux de dégradation.
- Identification des stratégies possibles de durcissement.

Les travaux de thèse seront réalisés en interface avec plusieurs équipes des laboratoires impliqués (CEA DAM Ile-de-France et CEA LETI) et des collaborations externes pour les expériences réalisées. Les travaux de thèse se dérouleront principalement au CEA DAM Ile-de-France (Arpajon) avec de nombreux échanges au CEA LETI (Grenoble). Des collaborations nationales ou internationales seront mises à profit aussi bien pour les expérimentations réalisées sous faisceaux de particules que pour la modélisation et la simulation numérique des environnements radiatifs et de leurs effets sur l'électronique.

### Directeur de thèse et école doctorale :

Non définis à ce jour

### Encadrant :

LAMBERT Damien  
CEA DAM Ile-de-France  
Bruyères-le-Châtel  
91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00.  
damien.lambert@cea.fr

BARRAUD Sylvain  
CEA LETI  
17 avenue des Martyrs  
38054 Grenoble  
04.38.78.44.00.  
sylvain.barraud@cea.fr

## Sujet :

### Evaluation de la tenue des circuits intégrés aux effets de dose ionisante en environnement spatial

**Contexte :** Les systèmes électroniques impliqués dans des applications spatiales sont soumis à des environnements radiatifs sévères, issus du rayonnement solaire et cosmique, et constitués d'une grande variété de particules ionisantes (protons et ions lourds notamment). Ces particules sont capables d'interagir avec les composants constituant les circuits embarqués satellitaires via des mécanismes physiques complexes, induisant des erreurs et dégradations des performances des circuits. Ces effets sont étudiés par les universitaires et industriels du secteur de la microélectronique depuis plusieurs décennies afin de permettre la conception et la fabrication de circuits intégrés durcis vis-à-vis de ces environnements. Ces dernières années, la simulation multi-échelles des effets radiatifs est de plus en plus utilisée pour supporter la conception des circuits intégrés durcis, en complément des tests expérimentaux. L'aspect multi-échelles implique que l'on soit capable d'aborder l'ensemble des échelles de description via différents codes de calcul et de les faire communiquer entre elles : échelle matériau (code Monte-Carlo pour simuler l'interaction particule-matière), échelle transistor (simulations TCAD, modèles compacts), échelle circuit (simulation de circuits de type SPICE). Pour l'échelle transistor, les modèles compacts sont essentiels car leur formalisme permet d'inclure des descriptions physiques fines de l'effet des radiations à l'échelle du transistor dans le simulateur SPICE, et donc de reproduire le comportement électrique du transistor sous radiation.

**Objectif de la thèse :** Le principal objectif de la thèse est de développer une chaîne de simulation multi-échelles de l'effet de dose ionisante, qui concerne largement les environnements spatiaux. Il s'agit d'une dégradation permanente des oxydes impliqués dans les technologies microélectroniques, induisant une dérive dans le temps des caractéristiques électriques des transistors et donc des performances du circuit qu'ils constituent. Cette chaîne de simulation, qui devra être validée expérimentalement, aura pour vocation d'assister les concepteurs de circuits durcis afin de les orienter vers les bonnes solutions de durcissement.

**Déroulement de la thèse :** Dans un premier temps, le(a) candidat(e) devra effectuer un travail bibliographique concernant les effets des radiations sur les composants électroniques, en particulier sur les effets de dose ionisante, d'un point de vue simulation/modélisation et expérimental. Le(a) candidat(e) devra ensuite améliorer la compréhension et la modélisation de la dégradation des oxydes sous irradiation, ainsi que la réponse résultante à l'échelle du transistor sur une base de modèles standards (L-UTSOI, PSP, ...), développés au CEA LETI. Ces travaux seront validés par des tests radiatifs expérimentaux à l'aide de moyens internes au CEA DAM Ile de France. L'attention sera ensuite portée à la mise en place à proprement parlé de la chaîne de simulation afin de simuler la réponse à la dose ionisante de circuits élémentaires (matrices RAM, bascules, portes logiques) et de dégager des solutions de durcissement optimales. Là aussi, des expérimentations sur des structures de test permettront de valider la pertinence de la chaîne de simulation.

Les travaux de thèse se dérouleront au CEA DAM Ile-de-France (Arpajon), et incluront une collaboration avec le CEA LETI pour la partie modèle compact.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

BOURNEL Arnaud  
Arnaud.bournel@u-psud.fr  
Ecole doctorale non définie à ce jour  
Université Paris Sud

#### Encadrant :

ROSTAND Neil  
CEA DAM Ile-de-France  
Bruyères-le-Châtel  
91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00.  
neil.rostand@cea.fr

MARTINIE Sébastien  
CEA/LETI  
17 avenue des Martyrs  
38054 Grenoble  
04.38.78.44.00.  
sebastien.martinie@cea.fr

# **ENERGIE, THERMIQUE, COMBUSTION, ECOULEMENTS**

## Sujet :

### Effets non-Boussinesq dans les mélanges turbulents

#### Contexte :

Les instabilités aux interfaces baroclines, comme celles de Rayleigh-Taylor, sont importantes dans de nombreuses applications astrophysiques, géophysiques ou ingénieries comme la fusion par confinement inertiel (FCI). Pour les fluides miscibles à densité variable, ce processus conduit éventuellement à la formation de zones de mélange turbulentes dont la dynamique est intimement liée à celle des grandes structures turbulentes. Comprendre et modéliser ces processus demeure un problème largement ouvert nécessitant le développement de nouveaux outils théoriques, numériques et expérimentaux.

Ce sujet s'inscrit dans la continuation de deux thèses et de deux post-doctorats, où l'on s'est attaché à étudier principalement les mélanges de fluides à faible contraste de densité, c'est à dire sous l'approximation de Boussinesq. Or lorsque les contrastes de densité deviennent forts, de nouveaux phénomènes complexes apparaissent et doivent être pris en compte. Par exemple, dans les mélanges mus par la gravité, on observe une dissymétrie entre le fluide léger et lourd formant des structures dites de bulles et des aiguilles. Par ailleurs de forts gradients de densité qui apparaissent aux petites échelles peuvent conduire à des fronts non présents dans les écoulements de type Boussinesq (voir Figure 1). Enfin, les effets couplés entre la pression et la densité modifient la distribution de l'énergie aux grandes échelles ce qui change les taux de croissance des zones de mélanges turbulentes.

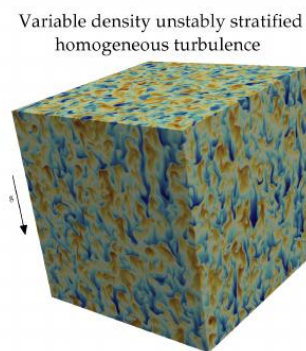


Figure 1 : Champ de densité montrant des effets non-Boussinesq dans une simulation numérique d'écoulement homogène turbulent stratifié instable (voir thèse G. Viciconte, EC Lyon 2019).

#### Objectif de la thèse :

Dans cette thèse on souhaite comprendre, expliquer et valider ces phénomènes au travers de simulations numériques directes, de modèles spectraux en deux points de type EDQNM (eddy-damped quasi normal markovian) ou en coquille (shell model) et de nouvelles expériences dédiées à la turbulence à densité variable. Le sujet étant volontairement vaste, il sera possible d'explorer d'autres pistes que celles proposées.

#### Déroulement de la thèse :

Dans un premier temps, l'étudiant(e) commencera par assimiler les concepts théoriques nécessaires à l'analyse des écoulements turbulents et effectuer des premières simulations numériques directes sur les supercalculateurs du CEA. Progressivement, il(elle) s'intéressera aux modèles spectraux en deux points et pourra proposer des nouvelles fermetures et les comparer aux résultats numériques. Enfin, il s'agira de confronter les résultats sur de nouvelles expériences et mettre en évidence des possibles améliorations pour les modèles pratiques de mélange turbulent. Ainsi, l'étudiant(e) développera à la fois des compétences théoriques, numériques, et expérimentales.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

GREa Benoît-Joseph  
benoit-joseph.grea@cea.fr

ED 579 - Sciences Mécaniques et Energétiques,  
Matériaux et géosciences (SMEMAG)  
Université Paris-Saclay

#### Encadrant :

BRIARD Antoine  
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00. – antoine.briard@cea.fr

## Sujet :

### Méthodes d'apprentissage pour la modélisation des phases rapides de la turbulence

**Contexte :** Les écoulements turbulents rencontrés dans les applications de type FCI (fusion par confinement inertiel) sont généralement soumis à des forces extérieures très diverses et très intenses. Celles-ci agissent sur les termes de production d'énergie cinétique turbulente donnant naissance à des instabilités hydrodynamiques (cisaillements, accélérations) ou inversement sur les termes de dissipation pouvant conduire à des relaminarisations (comme lors de l'augmentation de la viscosité dans un plasma en compression cf. Figure 1). Lorsque le temps caractéristique de ces effets est très petit devant le temps turbulent, l'écoulement entre en phase dite « rapide » et la turbulence doit s'adapter à ces changements de condition. Il en résulte une modification profonde des structures de la turbulence qu'il est très difficile de modéliser avec des approches classiques reposant entre autre sur l'hypothèse d'équilibre spectral.

Les approches récentes utilisant des méthodes d'apprentissage type réseaux de neurones ou autres, permettant de gérer des structures de données variées, offrent de nouvelles possibilités afin d'enrichir et d'améliorer les modèles de turbulence lors des phases rapides. Cela permet ainsi d'introduire des dépendances non triviales des différentes constantes d'un modèle classique aux paramètres adimensionnels caractérisant ces phases rapides.

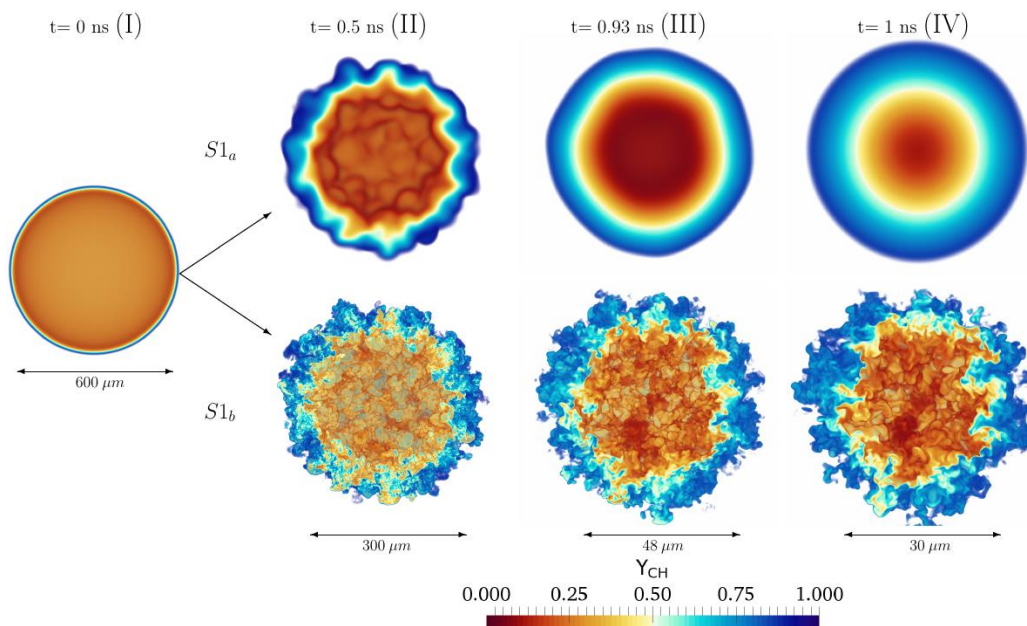


Figure 2 : Relaminarisation rapide d'une zone de mélange turbulente à l'interface entre l'ablateur et le combustible lors de la compression d'une capsule de type FCI. Cet effet est induit par l'augmentation de la viscosité du mélange entre les plasmas.

**Objectif de la thèse :** Dans ce contexte multi-disciplinaire, l'étudiant(e) cherchera à mettre en place les nouvelles approches d'apprentissage sur des configurations représentatives des effets de compression et de flottaisons provoquées par de fortes variations d'accéléérations. Pour cela il(elle) aura accès aux supercalculateurs du CEA. Il(elle) évaluera quel degré de simplification est souhaitable dans un modèle afin de capturer avec précision les phases rapides. A cette fin, il(elle) pourra utiliser les bases de données générées par les simulations numériques directes (DNS) et les modèles de turbulence spectraux de type EDQNM (Eddy Damped Quasi-Markovian Model) développées depuis plusieurs années dans l'équipe.

**Déroulement de la thèse :** L'étudiant(e) commencera par se familiariser avec les outils variés de turbulence et les méthodes d'apprentissage. Avant d'étudier les configurations complexes d'une zone de mélange en compression, il(elle) pourra étudier les phases rapides dans des configurations simplifiées homogènes isotropes ou stratifiées instables.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

GREa Benoit-Joseph  
benoit-joseph.grea@cea.fr  
ED 579 - Sciences Mécaniques et Energétiques,  
Matériaux et géosciences (SMEMAG)  
Université Paris-Saclay

#### Encadrant :

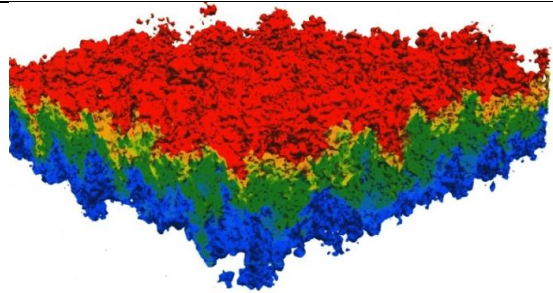
KLUTH Gilles  
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00  
gilles.kluth@cea.fr

## Sujet :

### Turbulence, combustion et instabilité de Rayleigh-Taylor

#### Contexte :

L'instabilité de Rayleigh-Taylor (IRT) se produit lorsqu'un fluide 'lourd' est placé au-dessus d'un fluide 'léger' dans un champ de gravité. Dans cette configuration, les petits défauts initialement présents à l'interface entre les deux fluides croissent exponentiellement. Puis, ils forment des structures de plus en plus complexes jusqu'à ce qu'une zone de mélange se crée et devienne turbulente. Lorsqu'en outre les deux fluides réagissent ensemble, une flamme se propage et interagit avec la turbulence générée par l'IRT.



Ce couplage turbulence-combustion-IRT joue un rôle primordial dans de nombreuses applications, et notamment en astrophysique. Par exemple, dans les phases qui précèdent l'explosion des supernovæ de type Ia, il est probable qu'une flamme turbulente instable au sens de Rayleigh-Taylor se propage dans le progéniteur de la supernova et conditionne le déclenchement de la détonation.

#### Objectif de la thèse :

L'objectif de la thèse est d'étudier le couplage turbulence-combustion-IRT dans le cadre simplifié d'un mélange à faible contraste de densité, avec des termes sources réactifs idéalisés. L'idée n'est pas de reproduire une configuration physique précise mais d'isoler et d'étudier les mécanismes fondamentaux à l'œuvre dans ce type de couplage.

En particulier, l'accent sera mis sur la phase turbulente auto-similaire de ces écoulements. L'une des questions principales sera d'examiner dans quelle mesure la présence de réactions modifie la croissance de la zone de mélange par rapport au cas non-réactif.

#### Déroulement de la thèse :

Après une étude bibliographique, l'étudiant(e) sera amené(e) à utiliser deux types d'outils pour mener à bien son étude.

- Simulations numériques : Un code résolvant les équations de Navier-Stokes non-réactives est actuellement disponible pour simuler les écoulements turbulents de Rayleigh-Taylor. L'étudiant(e) prendra en main ce code et lui ajoutera des termes sources idéalisés. Il(elle) procédera alors à des simulations directes et aux grandes échelles de zones de mélange Rayleigh-Taylor réactives. Ces simulations permettront d'observer l'effet des réactions sur les statistiques des champs de vitesse et concentration.
- Modélisation/théorie : Pour analyser le couplage turbulence-combustion-IRT, l'étudiant(e) fera appel à des approches spectrales modélisant les propriétés statistiques de l'écoulement en deux points. Il(elle) sera en particulier amené à étudier l'effet des réactions sur les très grandes échelles de l'écoulement. Celles-ci influencent en effet le taux de croissance des zones de mélange.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

SIMOENS Serge  
serge.simoens@ec-lyon.fr  
ED 162 - Ecole doctorale Mécanique, Energétique,  
Génie civil, Acoustique (MEGA)  
Ecole Centrale de Lyon

#### Encadrant :

SOULARD Olivier  
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00. – olivier.soulard@cea.fr



## Sujet :

**Simulations mésoscopiques d'un matériau énergétique sous choc pour étudier sa transition vers la détonation**

### Contexte :

Les explosifs sont utilisés aussi bien dans le domaine militaire que civil. Ils sont usuellement amorcés au moyen d'ondes de choc générées par un système pyrotechnique. La modélisation des explosifs soumis à une onde de choc reste un sujet très étudié pour élaborer les modèles macroscopiques de transition choc – détonation nécessaires à la simulation numérique des chargements explosifs. Sous choc, la germination, la nucléation et la croissance des fronts de déflagration locaux sont aujourd'hui modélisés selon des hypothèses établies a priori à partir de l'observation de la microstructure du matériau énergétique. La recherche de modèles à haut niveau de confiance incite à réaliser des simulations numériques à l'échelle mésoscopique.

### Objectif de la thèse :

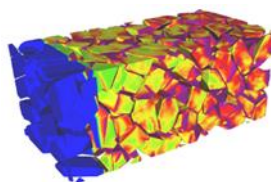
L'objectif est d'améliorer la précision de nos modèles et leur caractère prédictif par une meilleure description des phénomènes.

A ce titre, l'intégration de résultats issus de simulations mésoscopiques pour alimenter les modèles macroscopiques est une voie prometteuse qui sera explorée dans le cadre de cette thèse.

### Déroulement de la thèse :

Les travaux de thèse consistent à réaliser des simulations mésoscopiques bidimensionnelles et tridimensionnelles de compositions énergétiques de type liant/nitramine et liant/nitramine/aluminium dans l'objectif d'établir leurs modèles macroscopiques. La première partie du travail consistera à mettre en place les outils de génération de microstructures représentatives des matériaux réels. La seconde partie consistera à réaliser les simulations mésoscopiques avec un code de dynamique rapide du CEA DAM. Des outils de post traitements seront également à développer afin d'extraire les informations physiques nécessaires à une modélisation macroscopique.

L'influence des paramètres de formulation des matériaux (granulométrie, taux de chargement) devra être étudiée.



Microstructure sous  
choc  
(crédit CEA)

### Directeur de thèse et école doctorale :

CHINNAYYA Ashwin  
Ashwin.chinnayya@isae-ensma.fr - ashwin@ensma.fr  
ENSMA  
ED SIMM, Poitiers.

### Encadrant :

GENETIER Marc  
CEA/Gramat – BP80200 - 46500 GRAMAT  
Tél. : 05 65 10 54 32 - marc.genetier@cea.fr

## Sujet :

### Modélisation du transfert thermique couplé conducto-radiatif dans les milieux hétérogènes

#### Contexte :

La modélisation des transferts thermiques dans les matériaux isolants à hautes températures est une activité de recherche exigeante pour plusieurs raisons :

- les microstructures des matériaux envisagés sont en général complexes (enchevêtrements de fibres de matériaux réfractaires par exemple),
- ces matériaux sont en général très poreux et donc présentent un comportement semi-transparent vis-à-vis du rayonnement thermique,
- le transfert de chaleur au sein de ces matériaux résulte, tout particulièrement à hautes températures, d'un couplage fort entre conduction et rayonnement, phénomènes dont les caractéristiques effectives (conductivité et propriétés radiatives) dépendent fortement de l'arrangement microstructural et de la composition et sont difficiles à déterminer.

Dans ce travail de thèse, nous proposons de poursuivre des activités engagées lors d'une thèse précédente concernant le développement de techniques de modélisation du couplage conducto-radiatif au sein d'agencements matériels réalistes (par exemple issus de tomographies de matériaux réels) par des procédés entièrement stochastiques : marcheurs browniens pour simuler la conduction d'une part, lancer de rayons pour simuler le rayonnement en milieu non Beerien d'autre part. Ces techniques suscitent un vif intérêt car elles évitent le maillage du matériau étudié et sont très économes en termes de mémoire informatique.

#### Objectif de la thèse :

Dans un premier temps, il s'agira de s'approprier les acquis des travaux antérieurs :

- simulation du transfert radiatif par lancer de rayons dans des structures matérielles Beeriennes puis non Beeriennes (telles que les structures fibreuses évoquées plus haut),
- simulation du transfert conductif par marcheurs browniens dans ces mêmes structures.

Le couplage conducto-radiatif sera réalisé par itération entre ces deux modules de calcul, le champ de température alimentant le terme d'émission dans le problème radiatif, et le champ de luminance se traduisant par l'apparition d'un terme source de puissance volumique radiative dans le bilan d'énergie. Ces activités nous amèneront à revisiter quelques problèmes non encore parfaitement élucidés à ce jour (matériaux hétérogènes dont les constituants présentent de forts contrastes de propriétés thermophysiques – certaines conditions aux frontières – puissance volumique à valeurs fortement négatives – liste non exhaustive). Un travail d'optimisation informatique sera également entrepris afin de rendre les procédures de calcul stochastique plus rapidement convergentes. L'objectif final de ce travail est d'aboutir à une chaîne de simulation numérique complète du couplage conducto-radiatif dans des milieux matériels de microstructures précisément décrites et représentatives des matériaux envisagés comme isolants thermiques à hautes températures.

#### Déroulement de la thèse :

Les travaux de thèse bénéficieront des travaux antérieurs sur cette thématique qui ont déjà été menés.

Après avoir étudié la simulation du transfert radiatif par lancer de rayons sur des matériaux modèles comme des structures fibreuses, le travail portera sur la simulation du transfert conductif par marcheurs browniens dans ces mêmes structures. Enfin, la dernière partie du travail consistera à coupler les deux approches de simulation précédentes et ainsi aboutir à un modèle complet conducto-radiatif applicable à des matériaux isolants thermiques haute performance.

Le(a) candidat(e) devra avoir de solides connaissances en énergétique et un goût affirmé pour l'algorithmique et la simulation numérique.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

ENGUEHARD Franck  
franck.enguehard@univ-poitiers.fr  
ED - Science et Ingénierie des Matériaux, Mécanique,  
Énergétique

#### Encadrant :

ROCHAIS Denis (Co-directeur de thèse)  
CEA/Le Ripault – BP 16 - 37260 monts  
Tél. : 02 47 34 40 00 – denis.rochais@cea.fr



# ENVIRONNEMENT & POLLUTION

## Sujet :

### Construction et validation d'un jumeau numérique pour la réponse sismique d'un site d'intérêt

#### Contexte :

Depuis l'accident de Fukushima (Japon), l'exploitation des moyens de calcul à haute performance (HPC) et des modèles de simulation haute-fidélité devient de plus en plus fréquente pour l'estimation du risque sismique associé aux installations nucléaires (soit pour la conception de nouvelles installations, soit pour estimer les performances des installations existantes face à des événements extrêmes, non prévus lors de leur conception). Les limitations à l'utilisation de tels modèles sont les importantes ressources de calcul nécessaires pour fournir un niveau de précision élevé, ainsi que le manque de connaissances sur les propriétés mécaniques et l'incertitude élevée associée aux milieux de propagation et aux sources sismiques : les données et mesures disponibles sont limitées et souvent éparpillées.

#### Objectif de la thèse :

L'objectif de la thèse est l'élaboration, à partir d'un modèle haute-fidélité, d'un métamodèle apte à rendre compte précisément, et pour un coût de calcul réduit, de la réponse sismique d'un site d'intérêt et des incertitudes associées compte tenu des données disponibles (Sochala and De Martin, 2018, Lopez-Caballero and Khalil, 2018, Sochala et al., 2020). Ce métamodèle représente alors un jumeau numérique pour le site étudié et doit permettre d'effectuer efficacement des études de sensibilités statistiques et de maîtriser les incertitudes associées à la réponse sismique à l'échelle des diverses infrastructures composant le site, ce qui en ferait un outil clé pour les études d'aléa sismique.

#### Déroulement de la thèse :

La complexité du modèle et la grande variété d'échelles spatiales et temporelles en jeu font que la dimension de l'espace des incertitudes en entrée est très élevée. Des techniques de réduction de dimensionnalité issues des méthodes avancées de machine learning peuvent être exploitées (Ferrario et al, 2015, Alimoradi & Beck, 2015, Sochala et al., 2020) afin de mettre en œuvre l'étape de métamodélisation par polynômes de chaos, krigeage ou réseau de neurones artificiels. L'entraînement du métamodèle s'appuiera sur des plans d'expérience numériques hautes-performances déployés sur le TGCC (Très Grand Centre de calcul du CEA) à l'aide du code de simulation SEM3D. En cours de développement entre CentraleSupélec, le CEA/DAM et l'Institut de Physique du Globe de Paris, SEM3D permet de résoudre les équations 3D de l'élastodynamique dans un milieu hétérogène viscoélastique à l'aide de la méthode des éléments spectraux (Gatti et al, 2018). Ce code permet d'incorporer dans le métamodèle les irrégularités géologiques et topographiques 3D, les effets de site particuliers, les effets non-linéaires, et des modèles de faille complexes. En outre, une surcouche de deep-learning peut être utilisée pour améliorer la précision des prédictions de mouvement du sol pour les hautes gammes de fréquence caractérisant la vulnérabilité des structures (Gatti & Clouteau, 2020). Cette méthode d'élaboration d'un jumeau numérique sera appliquée au cas du séisme du Teil (11/11/2019) et sur des sites d'intérêt comme les centres CEA de Cadarache et de Marcoule.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

CLOUTEAU Didier  
didier.clouteau@centralesupelec.fr  
ED 579 - Sciences Mécaniques et Energétiques,  
Matériaux et Géosciences (SMEMAG)  
Université Paris-Saclay

#### Encadrant :

BERTIN Michaël  
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00. – michael.bertin@cea.fr

## Sujet :

### Estimation rapide des courants et inondations de tsunami à partir d'algorithmes de deep learning

#### Contexte :

Contrairement à ce qui se passe en océan profond, la simulation de la propagation des tsunamis à la côte nécessite un modèle non linéaire avec une bathymétrie/topographie à résolution fine pour faire face à la non-linéarité et à la morphologie complexe des côtes. Par conséquent, elle impose un temps calcul considérable qui peut ne pas convenir à la prévision des tsunamis en temps réel, particulièrement si l'on considère les événements en champ proche ou régional. Pour pallier ce problème, les centres d'alerte, tel que le Centre national d'Alerte aux Tsunamis (CENALT) au CEA, développent des outils de prévision rapide de l'amplitude des tsunamis côtiers, calculés à partir de lois empiriques ou de fonctions de transfert dérivées de ces lois empiriques. Ce type d'approximation linéaire fournit très rapidement les hauteurs des tsunamis le long du trait de côte, avec des barres d'erreur sur les valeurs calculées de l'ordre d'un facteur 2 au mieux. De telles approches sont adaptées au contexte de champ proche (presque dix fois plus rapide que les prévisions à haute résolution), mais tous les effets locaux ne sont pas bien pris en compte et l'estimation du run-up et de l'inondation horizontale fait défaut. Ces trois aspects peuvent être en revanche appréhendés au travers d'approches utilisées dans le domaine en pleine expansion du machine learning, avec comme objectif de transformer rapidement un résultat de simulation de tsunami en océan profond (résolution grossière) en un modèle d'inondation côtier et champ de vitesse associé (haute résolution).

#### Objectif de la thèse :

Le but de la thèse sera de développer un outil permettant de transformer rapidement un résultat de simulation de tsunami en océan profond en un modèle d'inondation côtier et champ de vitesse associé. Plusieurs méthodes d'apprentissage couramment utilisées en reconnaissance faciale seront explorées à l'aide de bibliothèques et toolbox dédiées. Une étude paramétrique poussée sera réalisée.

Cependant, même lorsque les paires entrée/sortie des données d'apprentissage sont physiquement exactes (i.e., résultats d'une simulation numérique), les quantités interpolées peuvent être très éloignées de la précision physique. Il existe une grande quantité de connaissances préalables actuellement non utilisées dans la pratique moderne de l'apprentissage machine. Une seconde voie très prospective de la thèse sera de développer une approche intermédiaire où les lois de la physique seront (partiellement) respectées (e.g., Raissi et al., 2019).

Dans un premier temps, l'étude se concentrera sur les tsunamis d'origine sismique, avec une application sur les côtes méditerranéennes et les Petites Antilles françaises. L'intégration des tsunamis d'origine gravitaire sur un petit jeu de test pourra également être envisagée.

#### Déroulement de la thèse :

Prendre en main les codes CEA de simulation de tsunamis et construire des bases de données pour la constitution de jeux d'entraînement et de validation

- Développer des scripts python sur la base de bibliothèques de deep-learning dédiées (e.g., Tensorflow-GPU) utilisant différentes approches pour la phase d'apprentissage (CNN, GAN,...) et tests paramétriques (influence de la dimension des grilles sur l'entraînement, robustesse de l'apprentissage vis-à-vis du paramétrage des modèles, optimisation du calcul d'erreur...)
- Enrichir l'apprentissage profond grâce aux lois de la physique pour l'estimation rapide des courants et inondations de tsunami
- Prendre en compte les tsunamis d'origine gravitaire sur un petit jeu de données
- Valoriser les résultats de thèse par des publications de rang A
- Fournir des éléments préparatoires pour la faisabilité d'un calcul rapide opérationnel

#### Directeur de thèse et école doctorale :

VAYATIS Nicolas  
Nicolas.vayatis@ens.paris-saclay.fr  
ED 574 – Mathématiques Hadamard (MH)  
Université Paris Saclay

#### Encadrant :

GAILLER Audrey  
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00. – audrey.gailler@cea.fr

## Sujet :

**Etude et comparaison des stratégies de reconstruction de surface à partir d'images multi-angles, multi-dates et multi-capteurs**

## Contexte :

Depuis quelques années, le développement de méthodes permettant la reconstruction 3D de scènes à partir d'imagerie satellitaire stéréoscopique très haute résolution (THR) rencontre un fort intérêt au sein de la communauté scientifique. L'analyse d'une scène en 3D permet en effet, non seulement une observation plus précise des composants d'une scène à une date déterminée (volume, hauteur), mais aussi l'étude des variations volumétriques de la scène dans le temps : évolution des infrastructures (construction ou destruction de bâtiments) ou dans le relief (glissement de terrain, variations glacières), dans un contexte de détection automatique de changements. Cependant, la plupart des méthodes développées pour la reconstruction 3D satellitaire sont basées sur l'exploitation d'images nativement stéréoscopiques (i.e. acquises quasi simultanément).

Ainsi, que ce soit pour la reconstruction 3D à partir d'images d'archives dans un but d'analyse de l'évolution temporelle d'une scène, ou bien pour la reconstruction 3D rapide et précises de scènes à partir de nombreuses images issues de capteurs variés, la reconstruction 3D de scènes à partir d'images THR multi-dates et multi-capteurs reste un réel besoin opérationnel et nécessite le développement de stratégies adaptées.

## Objectif de la thèse :

L'objectif de cette thèse est d'analyser et de comparer différentes méthodes de mise en correspondance et de reconstruction de surface afin de développer, au sein d'une chaîne de traitements automatique ou semi-automatique, la méthode la plus adaptée pour la génération de modèles 3D à partir d'images multi-dates, multi-angles et multi-capteurs.

## Déroulement de la thèse :

En premier lieu, le(a) doctorant(e) devra **étudier les méthodes de reconstruction 3D existantes** : stratégies de mises en correspondances, critères de similarités, etc. Les techniques implémentées dans l'outil open-source MicMac (IGN) seront particulièrement analysées.

Puis, plusieurs axes de recherche pourront être éprouvés afin de répondre aux contraintes du problème posé :

- **analyse des nappes de corrélation** pour la mise en évidence des changements ;
- sélection d'une image maître et choix des couples d'images par pixel en fonction de la similarité des images ;
- **reconstruction d'une surface en 2.5D ou 3D** à partir des nappes de corrélation.

Enfin le(a) doctorant(e) devra **définir des critères d'évaluation** afin de comparer les performances des méthodes les plus adaptées au problème posé. Cette évaluation sera réalisée à travers l'exploitation d'un **outil de simulation d'images satellitaires** capable de générer des images selon des caractéristiques d'acquisition variées (angles, capteurs, résolution, etc.). Ces simulations seront calculées à partir d'une vérité terrain numérique 3D connue qui permettra ensuite l'analyse précise des résultats issus de la mise en correspondance des images.

Les critères d'évaluation ainsi mis en place permettront notamment d'**associer une mesure d'incertitude** aux produits obtenus selon les différentes méthodes testées. En s'appuyant sur cette étude, une stratégie appropriée à la mise en correspondance d'images multi-datées, multi-angles et multi-capteurs sera développée.

## Directeur de thèse et école doctorale :

VALLET Bruno

bruno.vallet@ign.fr

ED 532 - Mathématiques et Sciences et Technologies de l'Information et de la Communication (MSTIC)

Université Paris-Est

## Encadrant :

GUERIN Cyrielle

CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon

Tél. : 01.69.26.40.00. – cyrielle.guerin@cea.fr

## Sujet :

**Apport de l'analyse en antenne multidimensionnelle (3D) et multi-composantes (3C) à la caractérisation du champ d'ondes sismiques : application aux données de l'antenne du Laboratoire Souterrain Bas Bruit**

**Contexte :** Dans le cadre du TICE (Traité d'Interdiction Complète des Essais nucléaires), les réseaux de faibles ouvertures (antenne) ont une importance primordiale grâce à leur haut niveau de détection. Depuis de nombreuses années, le CEA poursuit des travaux de recherche sur le développement de traitement d'antenne pour caractériser au mieux le signal sismique. Ce sujet se place dans la continuité de ces travaux tels les thèses et post-doc portant sur le traitement d'antenne sismologique effectuées en collaboration avec le LSBB (Laboratoire Souterrain Bas Bruit) et l'IPGP (Institut Physique du Globe de Paris) : notamment l'aspect multi-sources (Schissle 2002) et l'aspect multi-composantes (Labonne 2016, Labonne 2017, Metaxian et al 2019).

L'IPGP bénéficie notamment d'une expertise sur l'aspect tridimensionnel d'une antenne sismique par le biais des travaux de thèse et de stage d'Aldolfo Inza 2013 et de Laurent Verrier 2019. Le LSBB, avec qui le CEA collabore depuis plusieurs années, offre, par le biais de son antenne sismique large-bande multi-composantes, multidimensionnelle (3C-3D) finalisée fin 2015, un jeu de données unique pour le développement et la validation de méthodes de traitement d'antenne multi-sources, multi-composantes et tridimensionnel.

**Objectif de la thèse :** Cette thèse a pour but de développer des outils d'analyse permettant l'exploitation multi-composantes (3C) et tridimensionnelle (3D) d'une antenne sismique large bande afin de mieux caractériser les différentes ondes constituant le champ d'ondes sismiques et donc des sources qui les ont engendrées.

Le CEA maîtrise les traitements d'antenne classique mono-composante plane (2D), et multi-composantes (3C) via l'analyse de polarisation. Récemment, plusieurs études ont étendu ces méthodes de traitement à des antennes de stations sismiques 3 composantes (Gibbons et al 2011, Gal et al 2016, Labonne et al 2016). Cependant, ces méthodes bidimensionnelles composées de stations situées dans un même plan, ne permettent d'accéder qu'aux paramètres de propagation apparents des ondes. Ainsi, à défaut d'estimation locale de la vitesse de l'onde observée, il n'est pas possible d'en déterminer son angle d'incidence, information importante pour identifier l'origine et la nature de l'onde. L'enjeu de la thèse sera donc de développer une nouvelle approche tridimensionnelle de l'analyse en antenne multi-capteurs en utilisant l'information de polarisation.

Les perspectives de ce travail de recherche sont multiples : caractérisation de la source, caractérisation de l'influence de la géologie sur la propagation des ondes, caractérisation de l'anisotropie, des microséismes océaniques. Il permettra par ailleurs une comparaison des systèmes d'enregistrement en antenne avec des mesures locales 6 composantes (3 directions de translations et 3 axes de rotations). Cette thèse permettra aux différents partenaires du projet de se positionner sur les nouvelles orientations de l'instrumentation en sismologie notamment le déploiement d'antennes de stations large bande 3C-3D que ce soit pour l'étude de la source sismique et sa discrimination, qu'elle soit d'origine tectonique, anthropique ou même volcanique, mais aussi pour l'analyse de la houle océanique ou de glaciers...

**Déroulement de la thèse :** Dans un premier temps, l'étudiant(e), en parallèle d'une étude bibliographique, reprendra l'ensemble des programmes de traitement d'antenne disponibles au sein du laboratoire du CEA (tel PMCC, analyse de polarisation) et de l'IPGP (tel 3C-MUSIC). Ce premier travail constituera une base permettant par la suite le développement de nouveaux outils d'identification et de détection des événements sismiques. En plus de l'aspect méthodologique, une forte composante d'analyse de données fera partie du travail de thèse. En termes de données, le travail de thèse s'appuiera d'une part, sur des données synthétiques, mais surtout sur des données réelles provenant d'événements sismiques, locaux, régionaux et téléseismiques enregistrées par l'antenne 3C-3D du LSBB. L'étudiant(e) partagera son temps entre l'IPGP et le CEA.

## Directeur de thèse et école doctorale :

METAXIAN Jean-Philippe et BARRUOL Guilhem  
metaxian@ipgp.fr et barruol@ipgp.fr  
ED 560 - Science de la Terre et de l'Environnement et  
Physique de l'Univers Paris (STEPUP)  
Université Sorbonne Paris Cité

## Encadrant :

LABONNE Claire  
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00. – claire.labonne@cea.fr

## Sujet :

### Traitement statistique du signal pour la séparation de sources multiples sur des antennes

#### Contexte :

Le CEA exploite en routine les données du SSI (Système de Surveillance International) mis en place dans le cadre de la vérification du TICE (Traité d'Interdiction Complète des Essais). La méthode de traitement PMCC développée par le CEA est utilisée par l'organisation du TICE pour traiter l'ensemble des données infrasons du SSI. Dans la bande de fréquence d'intérêt pour la surveillance des explosions, le traitement opérationnel de ces données montre l'existence de nombreux signaux d'origines artificielles ou naturelles. La mesure de l'angle d'arrivée et de la vitesse de propagation des ondes cohérentes est réalisée en calculant les retards entre capteurs en explorant une grille temps-fréquence. Les retours d'expérience sur l'utilisation de ces algorithmes montrent des détections erronées et des estimations imprécises. Les causes en sont notamment que ces algorithmes ont été développés et optimisés pour détecter dans une même cellule temps-fréquence une unique source de signaux cohérents. Dans des conditions réalistes d'enregistrement, les stations détectent des sources multiples et les traitements actuels ne sont pas adaptés.

#### Objectif de la thèse :

Le projet de thèse consiste à élaborer et tester sur des bases contrôlées de signaux synthétiques et réels des méthodes haute-résolution pour séparer des sources multiples infrasons dans une même bande de fréquence. Par exemple, la méthode MUSIC (Multiple Signal Classification) permet d'estimer les arrivées de plusieurs sources d'intérêt à bande étroite dans un même intervalle de temps et bande de fréquence. En général le nombre de sources est préalablement estimé par des modèles statistiques de vraisemblance pénalisée. De nouveaux algorithmes à bande large prenant en compte la perte de cohérence en fonction de la séparation inter-capteurs et la fréquence doivent être développés. Des techniques avancées de traitement de l'information (apprentissage, IA) seront explorées.

#### Déroulement de la thèse :

Des algorithmes haute-résolution pour l'estimation du nombre de sources et des caractéristiques des signaux d'intérêt seront développés. Des approches qui introduisent un a priori sur l'évolution temporelle de ces caractéristiques, comme par exemple les modèles de Markov cachés, doivent être considérées. Pour évaluer les performances des différentes méthodes et critères de détection proposés, des bases contrôlées de signaux synthétiques et réels seront constituées. Elles seront représentatives des conditions réelles de détection, tant concernant la diversité des signaux que la variabilité du bruit de fond. Il sera demandé d'établir systématiquement des tables de contingence des faux positifs et faux négatifs en considérant des configurations variées de stations (géométrie et nombre de capteurs). L'encadrement de la thèse mobilise l'expertise du Laboratoire Pluridisciplinaire de Recherche en Ingénierie des Systèmes, Mécanique, Energétique (PRISME) de l'Université d'Orléans et Département du traitement du signal et des images de Telecom ParisTech pour l'élaboration de méthodes statistiques haute-résolution de traitement du signal. Des collaborations scientifiques établies entre le CEA et instituts partenaires seront renforcées pour constituer des bases de signaux de référence pertinentes. Cet encadrement contribue à mobiliser toutes les compétences nécessaires à la bonne conduite de la thèse pour donner à ce projet de thèse des orientations à des fins opérationnelles.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

ABED-MERAIM Karim  
karim.abed-meraim@univ-orleans.fr  
ED 552 - Energie, Matériaux, Sciences de la Terre et  
de l'Univers (EMSTU)  
Université d'Orléans

#### Encadrant :

LE PICHON Alexis  
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00. – alexis.le-pichon@cea.fr

## Sujet :

**Utilisation du bruit ambiant infrason pour l'évaluation des modèles numériques de prévision du temps dans la moyenne atmosphère en vue de leur assimilation**

### Contexte :

En raison de l'interaction entre la stratosphère et la troposphère, la dynamique de la moyenne atmosphère (MA, ~10-100 km) est devenue un axe de recherche majeur pour la communauté scientifique. Les états initiaux des modèles de prévision numérique présentent de grandes incertitudes au-delà de 30 km à cause du manque de mesures. L'extension de ces modèles à la haute stratosphère rend nécessaire une description fine des perturbations atmosphériques et la recherche de nouvelles techniques de sondage. Cette thèse s'inscrit dans la continuité du projet européen ARISE2 (<http://arise-project.eu/>) dont l'infrastructure intègre le réseau global de stations infrasons du SSI (Système de Surveillance International) déployé pour la vérification du TICE (Traité d'Interdiction Complète des Essais nucléaires). Exploité dans un mode de fonctionnement continu, le réseau du SSI constitue un système performant pour la mesure de la dynamique stratosphérique sur des échelles de temps comprises entre quelques minutes et plusieurs années.

### Objectif de la thèse :

Les ondes infrasonores se propagent dans ces couches élevées de l'atmosphère pour se réfracter ensuite vers le sol après avoir été affectées par les vents dans les zones traversées. Ainsi la connaissance simultanée d'une source d'infrason et de signaux détectés par des stations au sol permet de caractériser l'atmosphère traversée. L'objectif de la thèse est d'exploiter le bruit de fond ambiant infrason enregistré par le réseau du SSI pour caractériser les effets de propagation intégrés le long des chemins de propagation. Ces dernières années, la mise au point de méthodes variationnelles multi-dimensionnelles a permis d'étendre la diversité et le nombre d'observations assimilables. Le modèle global de prévision numérique du temps du centre ECMWF (European Centre for Medium-Range Weather Forecasts) dans ses versions ensemblistes sera utilisé pour la mise en œuvre de techniques d'inversion bayésienne.

### Déroulement de la thèse :

Le(a) doctorant(e) effectuera d'abord une recherche bibliographique approfondie sur l'assimilation de nouvelles données dans la MA. Un premier objectif est de développer un opérateur d'observation décrivant la propagation des signaux et de mettre en œuvre une quantification des biais de modèles dans la MA à l'aide du bruit ambiant. Une méthodologie pour assimiler ces données disponibles et à une échelle globale sera ensuite proposée. Les premiers tests d'assimilation seront effectués dans un contexte idéalisé (solution connue) à des échelles régionales. L'encadrement de la thèse mobilise l'expertise du CERE (Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique) pour la mise en œuvre de méthodes d'assimilation. Les collaborations établies dans le cadre du projet ARISE, et les encadrants permettront également des interactions avec le groupe DARC (Data Assimilation Research Group) de l'Université de Reading.

### Directeur de thèse et école doctorale :

BOCQUET Marc  
marc.bocquet@enpc.fr  
ED 531 - Sciences, Ingénierie et Environnement (SIE)  
Université Paris-Est

### Encadrant :

LISTOWSKI Constantino  
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00. – constantino.listowski@cea.fr



## Sujet :

**Couche limite atmosphérique et ondes orographiques : impact sur le climat et la propagation des infrasons**

### Contexte :

La propagation des infrasons est contrôlée par des guides d'ondes dont les caractéristiques sont modulées par des écoulements complexes qui se développent dans l'atmosphère. Une description de ces écoulements peut être obtenue auprès du Centre Européen de Prévision Météorologique à Moyen Terme (CEPMMT, en anglais ECMWF), sous la forme d'analyses ou de ré-analyses. Or, ces données, qui sont produites en exploitant des modèles de climat, ne couvrent pas toutes les échelles spatiales et temporelles et par construction, ne permettent pas de rendre compte de certains phénomènes. C'est le cas des ondes de gravité, et plus généralement des phénomènes dits sous-maille : turbulence de couche limite, transfert radiatif, convection nuageuse, etc. C'est ce qu'on appelle « la physique » du modèle. Son impact sur la dynamique de l'atmosphère est modélisé par un jeu de paramétrisations physiques. Si avec l'accroissement incessant de la résolution des modèles du climat on aurait pu s'attendre à ce que certaines paramétrisations ne soient plus nécessaires, de récentes études menées au CEPMMT montrent que ce n'est pas le cas. Les séparations entre les paramétrisations ne sont pas aussi nettes que cela et dépendent de propriétés de l'écoulement. C'est notamment le cas de l'impact du relief, qui a été étudié par deux communautés distinctes. La première communauté s'est essentiellement attachée à décrire la manière dont les montagnes modifient la couche limite turbulente de l'atmosphère (Jackson & Hunt, 1975), qui est une problématique centrale dans le domaine des énergies éoliennes. La deuxième communauté s'est plus intéressée à la météorologie de la montagne, en essayant de décrire le déclenchement de bourrasques ou de Föhn en aval des montagnes et l'apparition d'ondes de gravité (Durrán, 1990). Or dans les modèles de climat, les différents effets sont paramétrés dans des modules différents (Beljaars et al., 2004, Lott and Miller, 1997) de sorte que l'accès à des résolutions de plus en plus grandes pose la question de la cohérence des paramétrisations aux différentes échelles.

### Objectif de la thèse :

Le premier objectif de cette thèse est de réunifier les différentes approches de façon à produire un modèle consistant pour quantifier l'impact du relief sur le climat. Un second objectif est d'estimer l'impact du relief sur la propagation des infrasons. En effet, l'interaction de la couche limite et du relief est à l'origine d'ondes de gravité qui interagissent avec les infrasons. En outre, en se propageant au-delà de la troposphère, les ondes de gravité se combinent à celles qui sont émises par d'autres processus physiques pour former un champ d'ondes de gravité complexe, dont les caractéristiques ne peuvent être décrites qu'en termes probabilistes. Actuellement l'effet des ondes non-orographiques sur la propagation des infrasons est estimé en exploitant une paramétrisation stochastique adaptée du code de simulation du climat LMDz, qui est développé au Laboratoire de Météorologie Dynamique (Ecole polytechnique, ENS et UPMC). Cette paramétrisation doit être complétée de manière à tenir compte de l'effet des montagnes et ce, afin de savoir si la dispersion observée dans les enregistrements infrasonores peut être liée aux ondes de gravité (et à leurs sources) ou si elle est la trace d'une caractéristique de l'événement à l'origine des infrasons. Ce type de problématique illustre la forte dualité entre l'amélioration de la qualité des simulations numériques du climat et l'analyse quantitative des événements infrasonores.

### Déroulement de la thèse :

Dans un premier temps, il s'agira de prolonger les études théoriques réalisées sur les interactions entre les ondes de montagne et la couche limite, et cela afin d'établir dans quels domaines d'échelles horizontales une approche convient plutôt qu'une autre. Nous introduirons dans la théorie des ondes des fermetures turbulentes plus élaborées qu'auparavant, de type longueur de mélange et  $k$ -epsilon. Cette approche permettra d'une part, d'estimer la production d'énergie turbulente par les ondes de montagnes et ainsi, de quantifier les sources de dissipation et, d'autre part, d'estimer l'impact de la turbulence de couche limite sur les infrasons qui s'y propagent. Une attention particulière sera portée à l'épaisseur sur laquelle les montagnes d'échelles sous maille affectent l'écoulement de grande échelle dans les basses couches. Nous analyserons dans le modèle LMDz, comment ces différents effets peuvent-être paramétrés et quel est leur impact sur la circulation de grande échelle de l'atmosphère (onde planétaire stationnaire, dépressions synoptiques, blocages, circulations méridiennes) et sur la propagation des infrasons à l'échelle globale. Ces recherches seront menées conjointement avec les équipes de développement du modèle de l'IPSL et du CEPMMT.

### Directeur de thèse et école doctorale :

LOTT François  
flott@lmd.ens.fr  
ED 129 - Sciences de l'Environnement d'Ile-de- France  
(SEIF)  
Sorbonne Université

### Encadrant :

MILLET Christophe  
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01. 69. 26 40. 00. – christophe.millet@cea.fr

## Sujet :

### Application de la fibre optique aux mesures géophysiques

#### Contexte :

La fibre optique, utilisée à des fins géophysiques et/ou de détection d'événements sismiques, permet d'accéder à de nouvelles zones d'études. C'est le cas notamment pour les océans (70 % de la surface de la planète), parcourus par des tronçons de fibres opérées par les télécoms. L'utilisation de l'interférométrie laser sur une fibre optique (système DAS, distributed acoustic sensor) permet de mesurer la déformation axiale (utilisation de l'élongation de la fibre et mesure du temps de parcours du pulse laser entre son émission et sa réflexion sur les aspérités composant la fibre), et d'obtenir ainsi un capteur continu de déformation de longueur pouvant être plurikilométrique. Ces capteurs sous-marins ont déjà montré leur capacité à enregistrer de forts téléseismes (Williams et al., 2019) mais aussi des micro-séismes régionaux tel qu'un séisme de magnitude Mw 1.9 dans le sud-est de la France (Sladen et al., 2019). L'avantage d'un tel capteur est de pouvoir enregistrer la déformation du sol de manière continue tout le long du tracé de la fibre et ainsi de réduire le nombre d'instruments à déployer.

La fibre optique restant déployée sur de grandes périodes de temps, il est également possible de l'utiliser à des fins de prospection géophysique, de manière comparable aux mesures passives de bruit ambiant (de type AVA) : mesure des courbes de dispersion en fonction de la fréquence, qui peuvent ensuite être inversées en profils de vitesse des ondes sous la fibre. Plusieurs applications concrètes ont déjà vu le jour, avec notamment la caractérisation du sous-sol proche d'une ligne de train en Californie (Ajo-Franklin et al., 2019), la source du bruit étant le passage répété des trains, ou encore sur le campus de Stanford en utilisant le bruit citadin (Spica et al., 2020).

#### Objectif de la thèse :

L'objectif de cette thèse est d'explorer les capacités d'un capteur encore non exploité par le CEA dans le cadre de mesures géophysiques.

Dans un premier temps, il s'agira d'évaluer la capacité de la fibre optique à fournir des mesures géophysiques de qualité dans le sous-sol, jusqu'à des profondeurs de l'ordre de 100 m. L'objectif de cette partie sera de fournir une imagerie du sous-sol (géométrie des couches) ainsi que de ses paramètres tels que la vitesse des ondes S avec la meilleure résolution possible. Ces données étant primordiales pour l'évaluation des effets de site locaux et leur implémentation dans les calculs d'aléa sismique, ou encore pour la recherche de cavités.

Dans un second temps, il s'agira d'estimer la capacité de la fibre optique à caractériser une source sismique et le champ d'ondes élastique associé. L'objectif de cette partie sera d'extraire de la mesure les paramètres physiques caractéristiques de la propagation de l'onde sismique le long de différentes branches de fibres optiques et de comparer ces signaux à des signaux enregistrés sur des géophones traditionnellement utilisés en sismologie.

#### Déroulement de la thèse :

Cette thèse comprendra une partie d'acquisition sur le terrain. Cela concerne les mesures géophysiques afin de caractériser le sous-sol, qui seront faites sur le réseau de failles des Cévennes, responsable du séisme du Teuil du 11 novembre 2019, ainsi que sur le centre CEA afin d'imager la géométrie des couches et failles présentes puis inverser les profils de vitesses des ondes proches de la surface à des fins d'aléa sismique.

Les données de propagation de l'onde sismique seront déjà acquises lors de l'expérience PREMISE 2 ayant eu lieu au Laboratoire Souterrain Bas Bruit (LSBB) en 2020. Le(a) doctorant(e) devra développer les outils permettant de traiter ces données et comparer les résultats à ceux enregistrés par les autres capteurs déployés lors de cette expérience.

Le(a) doctorant(e) se formera au traitement des données auprès de son directeur de thèse à Géoazur à Nice. Le(a) doctorant(e) devra donc être mobile entre Nice (10 %) et la région parisienne (90 %).

#### Directeur de thèse et école doctorale :

SLADEN Anthony  
sladen@geoazur.unice.fr  
ED 364 - Sciences Fondamentales et Appliquées  
(SFA)  
Université Côte d'Azur

#### Encadrant :

VALLAGE Amaury  
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00. – amaury.vallage@cea.fr

# INFORMATIQUE & LOGICIELS

## Sujet :

### Algorithme d'aide à la décision pour la maintenance des optiques du LMJ

#### Contexte :

Le suivi de l'endommagement laser des composants optiques sur les chaînes laser du Laser Mégajoule (LMJ) est un élément essentiel pour optimiser le maintien en conditions opérationnelles de cette installation. Sur l'installation, des diagnostics réalisent des mesures d'endommagement des composants optiques afin de s'assurer de leur intégrité. Les dommages sont détectés sur les acquisitions par des algorithmes de traitement d'images. L'analyse de l'évolution de ces dommages doit permettre de repérer leur apparition et de prédire leur croissance. Les contraintes en termes de résolution et de nombre de données à traiter nécessitent la mise en œuvre de traitements numériques pour réaliser ces opérations d'analyse.

#### Objectif de la thèse :

L'objectif de cette thèse est de mettre au point un algorithme de classification des dommages en fonction de leur dangerosité et d'en déduire des lois d'exploitation. C'est sur cette base que sont prises les décisions de maintenance des optiques sur le LMJ. En complément des acquisitions d'endommagement, le LMJ est également équipé, en base arrière, de bancs pour l'analyse expérimentale de la tenue au flux laser de composants représentatifs de la chaîne LMJ. Ces données seront utiles pour la mise au point de l'algorithme.

#### Déroulement de la thèse :

En collaboration avec une équipe d'ingénieurs et techniciens, le travail de cette thèse comprend les tâches suivantes :

- Constitution d'une base de données regroupant les acquisitions traitées, les données laser et, éventuellement, de données complémentaires avec caractérisation manuelle pour la validation des algorithmes
- Conception de l'architecture algorithmique (arbre de décision, machine learning, deep learning) en confrontant les lois observées sur l'installation LMJ et en base arrière afin d'extraire les paramètres pertinents
- Dimensionnement de l'infrastructure informatique nécessaire pour la réalisation des calculs
- Développement des algorithmes de classification
- Validation des algorithmes par confrontation aux données obtenues sur l'installation (la base de données pourra être agrémentée au fur et à mesure de la thèse avec les nouvelles données acquises sur l'installation)

#### Directeur de thèse et école doctorale :

Nicolas BONOD – nicolas.bonod@fresnel.fr  
ED 352 – Physique et sciences de la matière  
Université Aix-Marseille

#### Encadrant :

Chloé LACOMBE – chloe.lacombe@cea.fr  
CEA/CESTA – BP 2 – 33114 Le Barp  
Tél. : 05.57.04.40.00

# INSTRUMENTATION

## Sujet :

### Développement d'un multi-détecteur neutron pour la lutte contre le terrorisme

#### Contexte :

Le programme de recherche en sécurité globale du CEA est centré sur la lutte contre le terrorisme, avec une priorité donnée aux menaces NRBC-E (nucléaire, radiologique, biologique, chimique et explosifs). Les actions portent principalement sur le développement de technologies innovantes dans le domaine de la détection, de l'identification, de l'instrumentation, des contre-mesures médicales et de la décontamination. Les équipes du CEA/DAM Ile-de-France ont la charge des études de R&D des menaces nucléaires et radiologiques. Dans le cas particulier de telles menaces, différents diagnostics actifs (imagerie X basse et haute énergies) ou passifs (spectroscopie gamma, mesures neutroniques) sont déployés par les équipes du CEA pour comprendre la menace que présente un colis terroriste et préparer sa neutralisation, voire son démontage.

Le sujet de thèse proposé concerne le diagnostic neutronique qui permet, notamment, de signer la présence de matière fissile dans un colis suspect à partir de l'étude des instants de détection des neutrons. Actuellement, les détecteurs utilisés sont composés de tubes d' $^3\text{He}$  insérés dans un bloc de polyéthylène. Le ralentissement des neutrons dans le modérateur ne permet pas d'accéder aux faibles constantes de temps de certains colis. L'objectif de la thèse est de développer un multi-détecteur basé sur des scintillateurs et permettant la détection des neutrons rapides. L'absence de modération permettra, entre autres, l'accès à de nouvelles observables.

#### Objectif de la thèse :

Les objectifs de cette thèse sont de développer et de caractériser un prototype de multi-détecteur de neutrons rapides. La conception de ce multi-détecteur sera appuyée par des simulations numériques avec les codes Geant4 et MCNP. Le candidat aura la charge de la conception mécanique du détecteur, la sélection et la qualification des scintillateurs utilisés ainsi que la programmation du système d'acquisition.

Les performances du prototype seront évaluées à l'aide de sources radioactives, sur des objets représentatifs et lors d'expériences sur les accélérateurs électrostatiques du CEA/DAM Ile-de-France.

Le(a) candidat(e) aura également en charge l'analyse des données à l'aide de programmes qu'il(elle) devra mettre au point. Des algorithmes de traitement du signal devront être développés afin d'assurer une bonne séparation des événements dus à l'interaction des neutrons et ceux causés par les rayons gamma dans les scintillateurs. Des méthodes de machine learning pourront notamment être étudiées. L'interprétation des résultats obtenus se fera en collaboration avec des théoriciens du CEA/DAM Ile-de-France.

#### Déroulement de la thèse :

Dans un premier temps, la conception générale du détecteur (géométrie, nombre et type de scintillateur) sera définie à l'aide de simulations numériques. Les éléments composant le détecteur seront ensuite qualifiés expérimentalement avant d'être assemblés. Le prototype sera enfin caractérisé lors d'expériences sur le CEA/DAM Ile-de-France et lors d'exercices faisant intervenir des objets réalistes.

Certains résultats de la thèse pourront faire l'objet de publications dans des revues scientifiques et de présentations lors de conférences internationales.

Le(a) candidat(e) devra avoir des connaissances en physique nucléaire, en interaction rayonnement-matière et un goût prononcé pour l'expérimentation. Des connaissances en programmation C/C++ et/ou Python seraient souhaitables.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

ROIG Olivier  
olivier.roig@cea.fr  
ED non définie

#### Encadrant :

DENIS-PETIT David  
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00. - david.denis-petit@cea.fr

## Sujet :

### Capteur interférométrique de hautes pressions aériennes par réinjection optique

#### Contexte :

Le CEA/Gramat est le centre de référence de la Défense pour l'analyse de la vulnérabilité des systèmes et des infrastructures. OASIS (Optical And Smart Integrated Sensors) est une équipe de recherche du LAAS-CNRS à Toulouse, qui est parmi les plus avancées au monde dans la conception de capteurs interférométriques intégrés, dits à réinjection optique (Optical Feedback Interferometry – OFI). Ces capteurs simples et compacts couvrent un vaste domaine de mesures : vibration, vitesse, distance, etc. et permettent depuis peu la mesure de variations de pression dans le domaine acoustique, ainsi que des mesures de pression dans des gammes élevées comme celles rencontrées dans le cas d'explosions.

Dans le cadre d'une étude menée au sein du laboratoire de recherches correspondant LICUR, créé en 2018, entre le LAAS-CNRS et le CEA Gramat, la faisabilité de la conception d'un capteur par réinjection optique pour l'observation d'onde de choc a été évaluée. Ces premiers essais ont démontré à la fois le fort potentiel de cette technologie et les difficultés inhérentes au développement d'un capteur basé sur ce principe : détection robuste de franges d'interférences en haute fréquence, décorrélation de la mesure de pression avec les autres effets thermodynamiques qui impactent l'indice de réfraction, etc.

#### Objectif de la thèse :

L'objectif de cette thèse est le développement d'un système de mesure opérationnel, efficient et robuste, utilisable sur une dalle de tir. Ce développement est basé sur une connaissance fine de l'effet acousto-optique aux très hautes pressions et des effets thermodynamiques induits par l'onde de choc ; connaissance qui reste à approfondir.

#### Déroulement de la thèse :

A l'issue d'une étape d'analyse à la fois bibliographique et des travaux antérieurs, la modélisation de l'impact de l'effet acousto-optique au niveau de l'interféromètre sera un point important de la thèse proposée. Le développement complet du système capteur, depuis la conception opto-mécanique jusqu'au traitement final du signal, en passant par le système d'acquisition, constituera ensuite l'objet central de la thèse. La mise en œuvre de campagnes de mesures et le traitement de données acquises au CEA/Gramat, ainsi que l'évaluation des incertitudes de mesures associées, en seront l'aboutissement.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

PERCHOUX Julien  
julien.perchoux@enseeiht.fr  
INP/ENSEEIH – LAAS CNRS

#### Encadrant :

BARBARIN Yohan  
CEA/Gramat – BP 80200 – 46500 Gramat  
Tél. : 05 65 10 54 32 - yohan.barbarin@cea.fr



## Sujet :

### Caractérisation des propriétés thermiques de constituants micrométriques à l'aide de nanodiamants

#### Contexte :

Dans le cadre d'une démarche de conception numérique de nouveaux matériaux menée au CEA Le Ripault, il est nécessaire de connaître les propriétés thermiques de constituants de taille micrométrique, telles que des particules ou des fibres, que l'on retrouve dans des milieux hétérogènes (isolants fibreux, composites, polymère chargé). Actuellement, les dispositifs photothermiques de caractérisation qui ont été développés au CEA permettent de déterminer les propriétés thermiques de constituants dont la dimension caractéristique est supérieure à 10  $\mu\text{m}$ . Ce sujet de thèse aboutira à la mise au point d'un dispositif de caractérisation original, abaissant cette limite, en s'appuyant sur l'utilisation de nanodiamants contenant des centres NV et qui peuvent être dispersés sur une surface. Un centre NV est constitué d'un atome d'azote et d'une lacune adjacente qui se substituent à des atomes de carbone de la structure cristalline du diamant. Ce défaut introduit localement une modification de la structure électronique. Des niveaux d'énergie sont alors présents à l'intérieur de la bande interdite du diamant et se comportent comme les niveaux d'énergie d'un atome isolé. En présence d'une perturbation extérieure (champ magnétique, pression, température...), ces niveaux d'énergie vont se déplacer. En détectant cette évolution, il est possible de mesurer la perturbation qui en est la cause. Le centre NV peut donc jouer le rôle de capteur à une échelle spatiale sub-micrométrique. Pour identifier les propriétés thermiques à cette échelle, une mesure de la température du matériau avec cette résolution spatiale est nécessaire. Elle peut être réalisée en suivant le signal de résonance magnétique des centres NV dont la fréquence de résonance se déplace lors d'une variation de température du matériau à la surface duquel ils ont été déposés. La figure ci-dessous illustre la faisabilité d'une telle mesure sur un échantillon de graphite chauffé par un laser focalisé sur quelques micromètres à sa surface. Cet échauffement local induit une évolution de la température de surface qui est mesurée par la résonance de spin des centres NV contenus dans les nanodiamants.

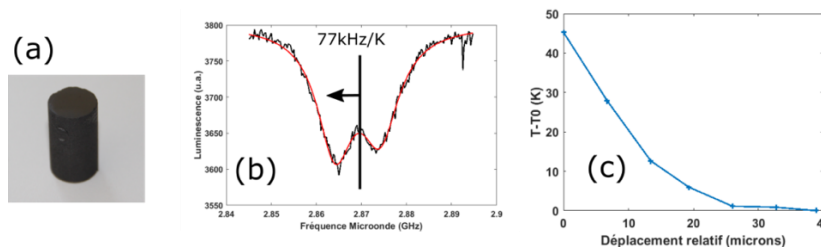


Figure – (a) Cylindre de graphite (1 cm de diamètre) sur lequel sont déposés des nanodiamants. (b) Influence de la température sur le spectre de résonance magnétique des centres NV. La fréquence centrale de la résonance subit un décalage de 77 kHz par kelvin. (c) Profil de température mesuré le long de l'échantillon de graphite.

La modélisation de l'expérience à l'aide des outils développés par le CEA Le Ripault permettra de restituer les profils de température mesurés, afin d'identifier la conductivité thermique des constituants micrométriques.

#### Objectif de la thèse :

Ce sujet de thèse s'inscrit dans le cadre d'une collaboration entre l'ENS Paris-Saclay et le CEA Le Ripault. L'objectif est de développer un banc de caractérisation des propriétés thermiques de matériaux de dimensions micrométriques (1 à 10  $\mu\text{m}$ ) qui sera fondé sur la résonance de spin des centres NV. Une attention particulière sera apportée à la métrologie du banc ainsi qu'à la modélisation de l'expérience associée.

#### Déroulement de la thèse :

Ce travail de thèse se déroulera dans les locaux du CEA Le Ripault et s'appuiera sur l'expérience acquise à l'ENS Paris-Saclay sur l'utilisation des centres NV comme capteurs quantiques. Les phases principales du travail consisteront en (1) la prise en main du sujet au travers d'une étude bibliographique (partie expérimentale et théorique), (2) le montage et la métrologie du banc (calibration de la réponse des centres NV, sensibilité aux paramètres expérimentaux comme la source locale de chaleur et son déplacement...), (3) la modélisation de l'expérience, (4) la validation des mesures sur des fibres de références, (5) la caractérisation de nouveaux constituants. Des réunions d'avancement mensuelles seront organisées avec les directeur et co-directeur de thèse afin de faire le point sur les avancées des travaux et les suites à leur donner.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

ROCH Jean-François  
jean-francois.roch@ens-paris-saclay.fr  
LUMIN – ENS Paris-Saclay  
ED - Ondes et Matière

#### Encadrant :

ROCHAIS Denis (Co-directeur de thèse)  
CEA Le Ripault – BP 16 - 37260 Monts  
Tél. : 02.47.34.40.00 – denis.rochais@cea.fr

# INTERACTION

**Sujet :****INTERACTION****Optimisation de la source X impuls ionnelle par diffusion Compton inverse d'un accélérateur linéaire d'électrons****Contexte :**

On assiste ces dernières années à un intérêt croissant pour le développement de nouvelles sources de rayonnement X compactes reposant sur le principe de la diffusion Compton inverse. Moins coûteuses que les grandes installations telles que les synchrotrons, elles sont à même de délivrer un flux de rayonnement X adapté à des applications variées, que l'on trouve par exemple dans le domaine médical (imagerie et thérapie), l'héritage culturel (identification et préservation), la science des matériaux (caractérisation), ou encore, dans le cas du CEA-DAM, dans l'étude et la caractérisation de détecteurs X. Elles présentent l'avantage d'être impuls ionnelles et accordables dans une grande plage d'énergie. Elles sont notamment bien adaptées pour la caractérisation de la réponse impuls ionnelle de caméras à balayage de fente ou de caméras à imagerie intégrale rapides utilisées sur le Laser Mégajoule. Le développement d'une telle source a été entrepris sur l'accélérateur d'électrons ELSA du CEA de Bruyères-le-Châtel, permettant dès 2010 d'obtenir les premiers photons X dans une configuration tête-bêche (« head-on collision ») entre le faisceau d'électrons de 17 MeV et un faisceau laser intense. C'était, à notre connaissance, la première réalisation expérimentale de ce type en Europe.

**Objectif de la thèse :**

L'objectif scientifique de la thèse est d'optimiser le rendement de production de photons X de cette source afin de la rendre exploitable pour les applications citées. Il s'agit pour cela d'étudier des solutions innovantes à la fois dans le domaine laser et dans le domaine des faisceaux d'électrons à fort courant et de les implémenter sur la source X d'ELSA pour en étudier expérimentalement les bénéfices. L'objectif ultime est d'approcher au plus près les prédictions théoriques de rendement.

Le(a) doctorant(e) sera amené(e) à développer son expertise dans plusieurs domaines de la physique, que ce soient les lasers, la physique des accélérateurs ou encore celle de la détection X. Plus largement encore, il(elle) devra élargir son spectre de compétences dans des domaines techniques tels que l'électronique, la mécanique et la technique du vide, omniprésentes dans le monde des accélérateurs.

**Déroulement de la thèse :**

Cette recherche s'appuiera a priori sur les axes suivants : l'optimisation de la chaîne laser pour intensifier le flux de photons participant à l'interaction avec les contraintes liées aux seuils de dommage des optiques et aux phénomènes non linéaires d'autofocalisation ; l'étude du transport de paquets d'électrons brefs et denses dans le but de contenir l'émission transverse ; l'amélioration du système de repliement de faisceau laser permettant de multiplier par 8 le flux d'X produit ; l'étude et la réduction des émissions X parasites de la cavité accélératrice finale en amont du point d'interaction. Cette recherche essentiellement expérimentale pourra par ailleurs s'appuyer sur des calculs et simulations numériques en physique et en optique.

**Directeur de thèse et école doctorale :**

DELERUE Nicolas  
delerue@lal.in2p3.fr  
ED 576 - Particules, Hadrons, Energie, Noyau,  
Instrumentation, Imagerie, Cosmos et Simulation  
(PHENIICS)  
Université Paris-Saclay

**Encadrant :**

LE FLANCHEC Vincent  
CEA/DAM Ile-de-France - Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01 69 26 40 00 - vincent.le-flanhec@cea.fr

## Sujet :

**Implémentation d'un modèle quasi-statique dans le code PIC CALDER, application à la propagation de faisceaux d'électrons ou laser dans un plasma**

### Contexte :

La propagation d'un faisceau laser ultra-court dans un plasma, ou d'un faisceau d'électrons court et de forte énergie dans un plasma de densité diverse, est propice à l'excitation de nombreux processus physiques conduisant à diverses applications. On peut citer la génération d'une onde plasma de grande amplitude dans le sillage du faisceau (laser ou d'électrons), qui est accompagnée de champs électriques capables d'accélérer un second faisceau d'électrons à très haute énergie sur une très courte distance. De nombreux laboratoires dans le monde étudient ces accélérateurs plasmas afin de fortement réduire la taille et le coût des accélérateurs conventionnels. La propagation de faisceaux d'électrons dans un plasma peut aussi, dans certains régimes, conduire à l'excitation d'instabilités résultant du couplage entre les champs électromagnétiques, le mouvement du plasma, et celui du faisceau. Ce type d'instabilité plasma, qui apparaît aussi dans des scénarios astrophysiques, peut ainsi être reproduit en laboratoire et étudié plus facilement. Ces instabilités peuvent de plus provoquer l'émission d'un rayonnement gamma très intense par les électrons énergétiques du faisceau, ce qui permet de développer de nouvelles sources gamma. De nombreuses interrogations théoriques et expérimentales nous imposent de recourir à des simulations pour mieux comprendre ces cas. La dynamique des deux faisceaux et du plasma ne peut être simulée qu'à l'aide d'un code Particle-In-Cell (PIC), qui modélise le couplage entre les champs électromagnétiques et les particules chargées. Cependant, ces simulations sont longues et coûteuses, et l'accélération du calcul grâce à de nouvelles techniques numériques rendrait l'étude de ces sujets bien plus aisée.

### Objectif de la thèse :

Bien que notre code PIC CALDER soit efficacement parallélisé et tourne sur plusieurs milliers de cœurs de manière routinière, les simulations PIC d'interaction faisceau-plasma, surtout lorsqu'elles sont 3D, nécessitent toujours des calculs très longs. Afin d'accélérer considérablement le calcul, il est proposé pendant cette thèse de développer et d'implémenter un modèle quasi-statique dans notre code PIC CALDER. L'hypothèse quasi-statique repose sur la capacité à découpler les évolutions rapides du plasma, et lentes des faisceaux. Après la compréhension des implications et limitations physiques et mathématiques de cette hypothèse, le(a) candidat(e) devra implémenter le modèle quasi-statique dans CALDER, puis le valider et tester les limites de ce modèle. Il sera ensuite possible d'utiliser ces développements pour étudier la physique de l'interaction faisceau-plasma, et/ou travailler sur l'optimisation du parallélisme du code lorsque le modèle quasi-statique est utilisé.

### Déroulement de la thèse :

Le(a) candidat(e) débutera sa thèse en se formant à l'utilisation de CALDER et à la spécificité du modèle quasi-statique. Ensuite, ce modèle sera implémenté dans CALDER, d'abord en géométrie 1D, puis 2D, 3D et axisymétrique. Chacun de ces développements sera validé pour déterminer les forces et limites du modèle quasi-statique. Un travail d'analyse des propriétés numériques des nouveaux schémas implémentés sera demandé. Selon le profil du(de la) candidat(e) (physicien ou numéricien/informaticien) il(elle) pourra ensuite utiliser ces nouveaux développements pour étudier certains aspects de l'interaction faisceau-plasma ou améliorer la rapidité du code lorsque le modèle quasi-statique est utilisé.

### Directeur de thèse et école doctorale :

BERGE Luc  
luc.berge@cea.fr  
EM 572 - Ondes et Matière (OM)  
Université Paris-Saclay

### Encadrant :

DAVOINE Xavier  
CEA/DAM Ile-de-France - Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00. - xavier.davoine@cea.fr

# INTERACTION

## Sujet :

**Modélisation d'une source de rayonnement X générée lors de l'interaction d'un laser ultra-intense avec une cible solide**

### Contexte :

De nombreuses expériences ayant pour objectif de mieux comprendre le comportement de la matière dans des régimes extrêmes et sur des échelles de temps très courtes (en physique des plasmas, physique du solide, physique atomique, etc.) nécessitent de recourir à des sources de rayonnement X pour radiographier l'objet étudié, ou réaliser une spectroscopie dans le domaine X. L'obtention d'une source X ponctuelle (avec une taille proche de 10 microns de diamètre) une durée très courte (proche de la picoseconde) est nécessaire pour les applications nécessitant une très bonne résolution temporelle et spatiale. L'interaction d'un laser d'ultra haute intensité (UHI) avec une cible de petite taille permet de générer de telles sources : le laser ionise la cible grâce à ses forts champs qui accélèrent ensuite les électrons ionisés dans la cible. Ceux-ci émettent alors du rayonnement X via différents processus : collisionnel (Bremsstrahlung) ou atomiques (e.g. émission de raie  $K_\alpha$ ). La courte durée des lasers UHI assure d'obtenir une courte durée d'émission. La forme et la taille de la cible permettent de limiter l'extension de la zone émissive. Si le principe de base de ces sources est compris, il est à ce jour difficile d'estimer avec précision les propriétés ou le rendement qu'on peut attendre de ces sources sur de nouvelles installations lasers.

### Objectif de la thèse :

Le but de cette thèse sera de simuler ces sources avec le code CALDER, qui est un code de type Particle-In-Cell (PIC) et d'en améliorer leur compréhension. Ce code permet de simuler l'interaction d'un laser UHI avec un plasma. Il est développé dans le laboratoire d'accueil de la thèse et il est utilisé sur les supercalculateurs du CEA auxquels le(a) candidat(e) aura accès. Le(a) doctorant(e) aura pour but de modéliser des expériences récentes ou prochaines servant à développer ces sources X. Le code pourra être adapté pour facilement prendre en compte les géométries complexes de cibles qui seront utilisées (association de cônes, fils, plaques de divers matériaux). CALDER sera aussi interfacé avec un code de type Monte Carlo comme GEANT4 afin de mieux calculer le rayonnement  $K_\alpha$  émis. A partir de ces simulations, le(a) candidat(e) cherchera à comprendre les effets physiques prépondérants qui entrent en jeu dans ces sources et à proposer des modèles physiques simplifiés pour les décrire. La compréhension nouvelle de ces sources permettra aussi de proposer des améliorations au design des cibles.

### Déroulement de la thèse :

Le(a) candidat(e) débutera sa thèse en se formant à la physique de l'interaction laser-plasma à haute intensité, à l'émission de rayonnement X dans ces régimes, et à l'utilisation de CALDER voire de GEANT4 pour simuler ces sources. Ensuite, il(elle) devra chercher à reproduire des résultats expérimentaux qui auront été obtenus aux cours des années 2020-2021. Une adaptation de Calder pourra être nécessaire afin de mieux modéliser ces expériences. Un travail de compréhension des processus physiques impliqués sera demandé. Des propositions pour améliorer ces sources pourront alors être formulées, et testées grâce à la simulation.

### Directeur de thèse et école doctorale :

BLANCARD Christophe  
christophe.blancard@cea.fr  
ED 572 - Ondes et Matière (OM)  
Université Paris-Saclay

### Encadrant :

DAVOINE Xavier  
CEA/DAM Ile-de-France - Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00 - xavier.davoine@cea.fr

# MATERIAUX & APPLICATIONS

## Sujet :

### Polymorphisme et fusion dans l'étain sous sollicitations dynamiques : analyses macroscopique et cristallographique

#### Contexte :

La connaissance de plus en plus détaillée du comportement dynamique des matériaux, et en particulier des changements de phase des métaux sous très fortes sollicitations dynamiques, est une des priorités scientifiques du CEA/DAM. Les expérimentations sous choc classiques, réalisées à partir de lanceurs de laboratoire, ont été progressivement complétées par des expériences en régime de compression quasi-isentropique à l'aide de générateurs électriques de Hautes Puissances Pulsées (HPP). Classiquement, le chargement dynamique du matériau étudié était généralement effectué à partir de la température ambiante. Cependant, comprimer un échantillon à partir de différents pôles initiaux en température permet d'élargir considérablement le champ des investigations. C'est dans cet objectif que des systèmes permettant de préchauffer des matériaux métalliques ont été récemment développés en tenant compte des contraintes associées au fonctionnement des lanceurs et des générateurs HPP. Ils seront expérimentés dans la perspective d'explorer le diagramme de phase de l'étain (phases solides  $\beta$ ,  $\gamma$  et liquide). Les différents temps de sollicitations dynamiques permettront en plus de mieux appréhender les cinétiques de transition de phase. Pour compléter les mesures classiques de température et de vitesse, qui permettent de déterminer des données thermodynamiques macroscopiques, des techniques permettant d'accéder, par diffraction de rayonnement X, à la structure cristallographique, sont apparues depuis les vingt dernières années dans différents laboratoires mondiaux. Le CEA/Gramat a conçu un nouveau type de générateur X spécifique capable de produire un rayonnement X intense, et très localisé, au croisement de fils de matériaux métalliques explosés par un courant électrique pulsé. Des premiers résultats prometteurs, obtenus lors d'une thèse précédente, ont permis d'accéder pour la première fois à la structure cristallographique de l'étain sous choc. D'autres expérimentations sont à prévoir pour étudier en particulier les phases  $\gamma$  et liquide sous pression en fonction des orientations cristallines.

#### Objectif de la thèse :

La thèse consistera à explorer le diagramme de phase de l'étain sous choc, en mettant en œuvre les dispositifs de préchauffage adaptés sur les lanceurs et générateurs HPP, ainsi que le diagnostic de diffraction X spécifiquement développé pour l'analyse cristallographique. Le travail consistera à concevoir, optimiser le dimensionnement, et réaliser les expériences instrumentées, et à mener des comparaisons croisées avec les résultats numériques issus de codes de simulation numérique hydrodynamique.

Elle devra permettre de préciser les mécanismes de changements de phase solide-solide, solide-liquide de l'étain au niveau cristallographique à travers diverses expérimentations sous choc et devra permettre de compléter des essais précédemment réalisés dans les trois domaines d'intérêt phases solides  $\beta$ ,  $\gamma$  et liquide. En complément, il s'agira de valider les outils de simulation multiphasés du CEA/Gramat, en permettant de reproduire ces changements de phase et de comparer les taux de phases en comparaison à d'autres simulations de type moléculaire.

#### Déroulement de la thèse :

La thèse sera basée principalement au CEA/Gramat, en partenariat direct avec l'institut PPrime de l'université de Poitiers, et débutera par une analyse bibliographique des travaux expérimentaux et des simulations antérieures.

Le (la ) doctorant (e) devra ensuite acquérir la maîtrise du fonctionnement des systèmes de préchauffage, des diagnostics déjà implantés sur les moyens lanceurs et HPP, du moyen de diffraction X, ainsi que des différentes techniques de traitement et d'analyse des clichés de diffraction X et des signaux de vélocimétrie Doppler. Puis, Il s'agira de mettre en œuvre les dispositifs de préchauffage sur lanceur et générateur ICE16, de dimensionner et de réaliser des expériences autour de ce dispositif, sur toute la gamme de température souhaitée, afin de valider son fonctionnement dans différentes configurations expérimentales, et de solliciter la matière suivant différents chemins thermodynamique pour atteindre différentes phases. Des comparaisons expérience/simulation seront également réalisées dans le but de développer et de valider la capacité à reproduire les mécanismes de changement de phase à l'échelle macroscopique dans le code Unidim du CEA Gramat et à l'échelle moléculaire avec les codes du CEA et de l'institut PPrime. Des expérimentations similaires menées sur de grandes installations de type synchrotron comme l'Advanced Photon Source (APS) à l'Argonne National Laboratory (USA) ou à l'European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) pourraient également être réalisées et analysées avant la rédaction du mémoire de thèse.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

DE RESSEGUIER Thibaut  
Thibaut.de-resseguier@ensma.fr  
ED 522 - SI-MMEA Université de Poitiers

#### Encadrant :

CHAUVIN Camille  
CEA/Gramat – BP80200 - 46500 Gramat  
Tél. : 05.65.10.54.32 - camille.chauvin@cea.fr

## Sujet :

Réalisation de couches minces à fonctions optiques maîtrisées par technique d'évaporation magnétron (PVD)

### Contexte :

Dans le cadre de l'amélioration de la tenue au flux laser de miroirs utilisés en régime sub-picoseconde sous vide, les procédés de dépôt par pulvérisation présentent l'avantage d'obtenir des couches denses donc quasi insensibles à l'environnement d'utilisation. En revanche ces couches sont contraintes en compression générant ainsi une déformation conséquente du substrat dans le cas d'un empilement multicouches. Cette déformation doit être réduite et maîtrisée pour qu'un composant utilisé en réflexion tel qu'un miroir ou un réseau de compression soit utilisable sur une ligne laser de puissance.

De plus, la tenue au flux laser de l'empilement est étroitement liée au choix du matériau haut-indice de l'empilement et des résultats récents ont permis d'identifier l'oxyde de scandium ( $\text{Sc}_2\text{O}_3$ ) comme un candidat d'intérêt.

### Objectif de la thèse :

La thèse proposée ici consiste donc à explorer le potentiel en termes de tenue au flux et de contraintes du couple de matériaux  $\text{Sc}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$  déposés par pulvérisation cathodique. D'autres matériaux pourront également être étudiés selon leur intérêt potentiel au regard des 2 paramètres précédemment cités.

### Déroulement de la thèse :

Dans un premier temps, le(la) candidat(e) devra s'approprier l'état de l'art existant sur la thématique afin d'identifier les verrous technologiques et définir les axes de travail pertinents.

L'étude sera ensuite réalisée selon 3 volets d'études :

#### 1. étude et caractérisation des matériaux déposés par pulvérisation cathodique

L'objectif est de définir les paramètres de dépôt, les opérations post-traitement (recuit...) et la nature des substrats permettant d'obtenir le meilleur compromis tenue au flux laser/contraintes. Les matériaux seront étudiés en monocouche dans un premier temps afin de déterminer leurs propriétés intrinsèques (TFL, contrainte intégrée, indice de réfraction) et sélectionner les meilleurs paramètres process. Cette phase nécessitera l'utilisation d'équipements de fabrication (bâti de dépôt, four de recuit...) et des moyens de caractérisation variés : ellipsomètre et spectrophotomètre pour les propriétés optiques, banc de TFL, profilomètre, interféromètre ou autre technique pour les contraintes.

#### 2. calculs d'empilements optimisés en termes de TFL et contraintes

Il s'agira ici d'adapter une méthode de calcul d'empilements développée précédemment au CEA en ajoutant un critère supplémentaire de contrainte intégrée. A cette étape seront également prises en compte les incertitudes liées aux procédés de dépôt et post-traitement. Cette approche devra permettre d'extraire les empilements les plus favorables en termes de tenue au flux laser et de contraintes.

#### 3. fabrication et caractérisation des empilements optimisés numériquement

A l'issue de l'étape 2 des premiers empilements seront fabriqués et caractérisés. Les propriétés des matériaux en multicouches seront alors réévaluées et réinjectés en étape 2 pour définir de nouveaux empilements si nécessaire.

L'étudiant(e) sera basé(e) sur le site du CEA Le Ripault à Tours et travaillera en collaboration avec le CEA CESTA à Bordeaux et l'Institut Fresnel à Marseille.

### Directeur de thèse et école doctorale :

MARCEL Corinne

Ecole Doctorale EMSTU / Université de Tours

Energie-Matériaux-Sciences de la Terre et de l'Univers

### Encadrant :

PIOMBINI Hervé

CEA/Le Ripault – BP16 - 37260 Monts

Tél. : 02.47.34.40.00 – [hervé.piombini@cea.fr](mailto:hervé.piombini@cea.fr)



## Sujet :

### Enthalpies de formation des matériaux organiques : développement de modèles prédictifs

#### Contexte :

L'enthalpie de formation constitue une des propriétés les plus importantes des matériaux. Pour cette raison, sa détermination expérimentale présente un grand intérêt et fait l'objet d'études dans de nombreux laboratoires, publiées dans des revues spécialisées comme « Journal of Chemical Engineering Data » ou « Thermochemica Acta ». Ainsi, à l'heure actuelle, cette propriété a été mesurée pour plusieurs milliers de cristaux moléculaires, parmi les plus connus et facile d'accès. Cependant, ceux-ci ne représentent qu'une infime fraction des composés mentionnés dans la littérature (env. 165 millions sans compter les macromolécules) et a fortiori de l'espace chimique : en effet, en se limitant aux éléments C, H, N, O, S, le nombre de molécules potentiellement actives biologiquement est estimé à  $10^{60}$ . La conception moléculaire implique de sonder cet espace chimique pour identifier des composés prometteurs en vue d'applications pratiques, ce qui implique de disposer de modèles prédictifs pour évaluer les propriétés pertinentes, parmi lesquelles l'enthalpie de formation, particulièrement importante dans le domaine des matériaux énergétiques utilisés pour la propulsion, la génération de gaz, la pyrotechnie ou les industries militaire et spatiale. La thèse s'inscrit dans le cadre des programmes de recherche de nouveaux matériaux énergétiques menés au CEA-Le Ripault et à l'Institut Saint-Louis.

L'enthalpie de formation d'un solide comporte deux composantes, à savoir l'enthalpie de formation en phase gazeuse (HGAS) et l'enthalpie de sublimation du cristal (HSUB). Des développements très importants sont en cours depuis quelques années en ce qui concerne l'évaluation de HGAS, mettant à profit les avancées dans les domaines des calculs ab initio et de l'apprentissage automatique (machine learning). Cependant les méthodes nouvellement introduites ne sont pas satisfaisantes pour les composés énergétiques. Pour HSUB, des développements analogues sont désormais envisageables.

#### Objectif de la thèse :

En vue de mieux évaluer l'enthalpie de matériaux énergétiques, la thèse proposée a pour but de mettre en place au CEA-Le Ripault de nouvelles méthodes tirant parti des progrès récents en chimie quantique et dans le domaine de l'apprentissage automatique. Pour HGAS et HSUB, il s'agit de développer des modèles coûteux mais très fiables, ainsi que des méta-modèles permettant des estimations rapides, ajustés afin de reproduire les prédictions des modèles.

Pour le calcul de HGAS, on évaluera précisément pour les matériaux énergétiques, y compris les sels, la performance de modèles basés sur la méthode ab initio DLPNO-CCSD(T) récemment introduite dans le code ORCA. Des métamodèles seront développés selon deux voies : d'une part une méthode basée sur une décomposition de l'enthalpie en contributions de paires atomiques APC [J. Chem. Inf. Model. 2018, 58, 12–26], et d'autre part des techniques d'apprentissage automatique.

Pour le calcul de HSUB, on appliquera les potentiels intermoléculaires récents à un grand nombre de cristaux de la « Crystallography Open Database » (COD) afin d'acquérir des valeurs de référence à partir desquelles pourront également être développés des métamodèles selon deux approches, à savoir celle des fragments géométriques [Ind. Eng. Chem. Res. 2018, 57, 13856–13865] ainsi que des techniques d'apprentissage automatique.

Pour les sels, les enthalpies de sublimation ne sont pas directement accessibles expérimentalement, car ces matériaux se décomposent avant de se sublimer. Des données de référence seront donc obtenues par différence entre les enthalpies théoriques des ions isolés et l'enthalpie expérimentale du cristal. Ces données serviront à développer des modèles, soit par une approche purement empirique, soit par apprentissage automatique.

#### Déroulement de la thèse :

La thèse peut facilement être scindée en tâches indépendantes :

- 1) HGAS : définition et évaluation de procédures basées sur la méthode ab initio DLPNO-CCSD(T) ;
- 2) HGAS : Développement de méta-modèles basés sur étape 1)
- 3) HSUB : constitution d'une base de données par simulation des cristaux de la COD ;
- 4) HSUB : Développement de méta-modèles basés sur étape 3)
- 5) HSUB : Constitution d'une base de données de référence pour les sels par calcul + expérience
- 6) HSUB : Développement de méta-modèles pour les sels basés sur étape 5)

La thèse se déroulera en collaboration avec l'Institut Saint-Louis (ISL).

#### Directeur de thèse et école doctorale :

MATHIEU Didier  
Didier.mathieu@cea.fr  
ED – EMSTY  
Université de Tours

#### Encadrant :

GLORIAN Julien, 68301 Saint-Louis Cedex  
Julien.GLORIAN@isl.eu - Tel. 03.89.69.51.19  
MATHIEU Didier, CEA Le Ripault, 37260 Monts  
Didier.mathieu@cea.fr / Tel. 02.47.34.41.85

## Sujet :

### Développement de revêtements ultra réfractaires pour la protection de matériaux composites - Etude du procédé de projection plasma et évaluation du comportement à des températures supérieures à 2000 °C

#### Contexte :

Certaines applications, telles les composants de moteurs de fusée ou des pièces des véhicules de rentrée atmosphérique, demandent des matériaux capables de défier des températures extrêmes, supérieures à 2000 °C, pendant des durées relativement courtes de l'ordre de quelques minutes. Les composites fibreux tels les C/C, C/SiC ou C/C-SiC sont de bons candidats en tant que matériaux de structure. Face aux atmosphères de fonctionnement agressives, incluant la présence d'oxygène ou de vapeur d'eau, une des solutions est de les protéger via l'application de revêtements à leur surface.

Souvent associés au carbure de silicium, les matériaux ultra-réfractaires (en anglais UHTC, *Ultra High Temperature Ceramics*), qui se caractérisent par des températures de fusion supérieures à 2500-3000 °C et comprennent en particulier les borures, carbures et nitrures des métaux de transition de la colonne IV A, sont proposés. Relativement peu étudié dans l'état de l'art pour la mise en forme de ces matériaux par rapport à des techniques de métallurgie des poudres, le procédé de projection plasma présente de façon manifeste de nombreux atouts. Parmi ceux-ci, peut être citée sa capacité à réaliser des revêtements à microstructures variées à base de matériaux à haut point de fusion, d'épaisseurs ajustables, de plusieurs centaines de microns jusqu'à quelques millimètres, et ce sur des pièces de géométries variées.

#### Objectif de la thèse :

Dans le cadre précédemment défini, le travail de thèse consistera à mettre à profit la projection plasma en termes de diversités de compositions projetables et de microstructures et/ou d'empilements de différentes couches de façon à obtenir des systèmes substrats/revêtements performants pour résister à des températures supérieures à 2000 °C.

En ce qui concerne la composition du revêtement, des questions telles la nécessité de la présence du SiC et l'évaluation d'ajouts visant à l'amélioration de la résistance à haute température, voire à la définition de compositions originales, seront étudiées. Un autre objectif sera la prise en compte de l'adéquation du revêtement avec le ou les substrats envisagés (contraintes résiduelles, adhérence, compatibilité thermo-mécanique). Egalement, la caractérisation, l'analyse du comportement et la définition des limites d'utilisation des matériaux à des températures supérieures à 2000 °C, constitueront un axe important. L'ensemble des résultats permettra l'établissement de corrélations entre propriétés des systèmes substrat/revêtement et comportement à haute température. Après l'étude sur substrats plans, l'application des revêtements les plus prometteurs sur des pièces présentant des géométries d'intérêt pourra être évaluée.

#### Déroulement de la thèse :

La première phase de l'étude consistera à identifier, à travers une étude bibliographique, une, voire plusieurs, association de matériaux susceptibles de répondre à la problématique complexe de la protection de matériaux composites dans des environnements sévères associant haute température et atmosphère oxydante ou corrosive. Seront considérés des critères de sélection tels l'adhérence du revêtement au substrat, la réactivité éventuelle des phases en présence, le caractère protecteur de la couche oxyde formée, la limitation de la quantité de phases de faible viscosité aux températures visées.

La thèse sera ensuite divisée en trois parties avec des itérations possibles. Dans un premier temps, il sera question de mettre en forme, par projection plasma, les matériaux identifiés en prenant soin d'en adapter les microstructures (taux de porosité, taille, quantité et morphologie des différents matériaux). La deuxième phase consistera à caractériser les revêtements obtenus en termes de microstructures et de propriétés thermo-mécaniques. Une attention particulière sera accordée à l'adaptation des propriétés des revêtements aux différents substrats considérés. Des couches d'accroche pourront ainsi être évaluées. Une partie dédiée à la modélisation du comportement thermo-mécanique des systèmes substrat-revêtement sera d'une aide précieuse pour orienter les choix et appréhender la partie suivante dédiée aux tests du comportement des matériaux à des températures supérieures à 2000 °C (tests sous flux plasma, four solaire). Des diagnostics permettant d'analyser les phénomènes qui interviennent lors de l'oxydation des ultra-réfractaires pourront être développés.

La thèse sera principalement réalisée au sein du CEA Le Ripault. Ponctuellement, des déplacements pourront être effectués sur le site de l'Université de rattachement. Le sujet convient à un profil de candidat associant des connaissances théoriques solides en matériaux et procédés, avec un attrait pour la recherche appliquée. Sujet pluridisciplinaire, cette thèse se caractérise par un fort volet expérimental renforcé par un aspect modélisation et permettra le développement de compétences liées aux procédés, aux matériaux composites, à la réactivité et au comportement thermo-mécanique des matériaux, aux moyens de diagnostics pour des tests en conditions extrêmes.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

BALAT-PICHELIN Marianne

balat@promes.cnrs.fr

ED Énergie environnement (Université Perpignan)

#### Encadrant :

QUET Aurélie

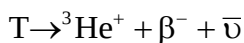
CEA/Le Ripault – BP 16 – 37260 Monts

Tél. : 02 47 34 40 00 – aurelie.quet@cea.fr

## Sujet :

### Modélisation du vieillissement des tritures métalliques : application au trituration de palladium

**Contexte :** Le palladium et les alliages à base de palladium sont couramment utilisés pour le stockage des isotopes de l'hydrogène. Le stockage sous forme d'hydruide solide présente l'avantage d'être compact et sûr, ce dernier point étant particulièrement intéressant pour le stockage du tritium, isotope radioactif de l'hydrogène. Cependant, la décroissance radioactive du tritium avec une période de l'ordre de 12,32 ans s'accompagne de l'apparition d'hélium dans le solide selon la réaction :



où  $\beta^-$  est un électron, et  $\bar{\nu}$  un anti-neutrino électronique. Compte tenu de la faible énergie dégagée lors de cette désintégration (au maximum 18,58 keV), aucun défaut d'irradiation n'apparaît au sein de la matrice métallique. L'hélium-3 généré, très peu soluble, se réorganise rapidement sous forme d'amas puis de bulles, piégées dans la matrice métallique. La rétention de l' ${}^3\text{He}$  est une propriété intéressante des tritures, car elle permet de récupérer un gaz tritium quasiment exempt d' ${}^3\text{He}$ , mais cette accumulation d' ${}^3\text{He}$  dans le solide va provoquer un vieillissement du matériau caractérisé notamment par l'évolution de ses propriétés thermodynamiques, structurales et mécaniques. Ainsi, lorsque la concentration en hélium dans le matériau atteint une valeur critique, la rétention en phase solide n'est plus assurée et il se produit alors un phénomène de désorption massive durant lequel l'hélium est relargué en phase gazeuse à une vitesse proche de sa vitesse de formation. Durant cette dernière phase, la pression d'hélium dans le conteneur contenant le tritium peut augmenter rapidement, conduisant à un risque de rupture de celui-ci. Il est donc fondamental de comprendre et de pouvoir prédire le comportement de l'hélium-3 au cours du temps dans le matériau afin d'une part, de prévenir une montée en pression trop importante dans le conteneur et, d'autre part, de déterminer un critère permettant de sélectionner un matériau pour son aptitude à pouvoir retenir l'hélium sur de grandes périodes, sans avoir besoin du recul expérimental correspondant.

Dans cette optique, de nombreux travaux de caractérisation et de modélisation ont été menés au CEA/DAM depuis une vingtaine d'années, notamment dans le cadre de travaux de thèse dans lequel le sujet proposé ici s'inscrit parfaitement. Trois modèles ont notamment été développés pour simuler les étapes successives du vieillissement des tritures de palladium.

- Le premier modèle concerne la genèse des bulles d'hélium et fait appel à un automate cellulaire ; il permet d'accéder à une densité et une distribution de bulles dans le matériau, le phénomène de nucléation se déroulant sur des temps de l'ordre de huit jours.
- Le second modèle, basé sur la mécanique des milieux continus, simule la croissance d'une bulle. Il permet, entre autres, d'accéder à la pression et à la taille des bulles et au gonflement macroscopique pour des temps de vieillissement de l'ordre de plusieurs années.
- Le troisième modèle, en cours de développement, a pour objectif de simuler le relâchement massif de l'hélium lorsque le palladium semble atteindre une saturation en hélium 3.

#### Objectif de la thèse :

La thèse proposée s'inscrit dans la continuité de ces travaux et a pour objectifs :

- L'amélioration des différents modèles et plus particulièrement l'aboutissement de celui qui décrit la troisième phase du vieillissement, prenant en compte des phénomènes conduisant au relâchement massif d' ${}^3\text{He}$ .
- l'obtention de nouvelles grandeurs caractéristiques du trituration de palladium à différents stades de vieillissement, données nécessaires en entrée des modèles (loi de comportement mécanique, coefficient de diffusion de l' ${}^3\text{He}$ ...) et à leur recalage (densité de bulles, répartition spatiale, pression dans les bulles, gonflement macroscopique ...).

**Déroulement de la thèse :** Le laboratoire d'accueil de la thèse sera le laboratoire de l'Equipe de Chimie et de Métallurgie des Terres Rares du CNRS de Thiais (ICMPE). Le candidat sera amené à faire des déplacements sur les sites du CEA Valduc (Bourgogne) et du CEA Saclay (Ile de France) pour réaliser diverses caractérisations.

Le programme d'études comportera donc une partie expérimentale et une partie théorique et pourra être décomposé comme suit.

1. Etude bibliographique (3 mois, CNRS Thiais).
  - Mise à jour de la bibliographie relative aux propriétés mécaniques des hydrures, deutérides et tritures de Pd et au vieillissement du trituration de Pd.
  - Approche des différents mécanismes de relâchement accéléré de l' ${}^3\text{He}$  possibles
  - Compilation des données et analyse critique.
2. Caractérisation microscopique du vieillissement du trituration de Pd (14 mois, CNRS Thiais et CEA Saclay).
  - Préparation de nouveaux échantillons, exploitation de ceux déjà vieillies.
  - Mise en œuvre des techniques de microscopie électronique et de tomographie: acquisition des images, reconstruction 3D, et traitement des images pour obtenir la taille, la densité et la répartition spatiale des bulles d' ${}^3\text{He}$ .
  - Utilisation de la Résonance Magnétique Nucléaire (RMN) et/ou la Spectroscopie de Perte d'Energie d'Electron (EELS) pour déterminer la pression dans les bulles.
  - Étude de la faisabilité de caractériser les bulles d'hélium 3 et leur répartition spatiale par sonde atomique et éventuellement par le couplage tomographie-EELS.
3. Caractérisation macroscopique du vieillissement du trituration de Pd (6 mois, CEA Valduc).
  - Préparation des échantillons de trituration de Pd.
  - Réalisation d'essais de traction pour étudier l'évolution de la loi de comportement du trituration de palladium à différents stades de vieillissement
4. Modélisation (8 mois, CNRS Thiais).
  - Implémentation des lois de comportements déterminées lors des derniers travaux de recherche et amélioration des modèles existants.
  - Comparaison calculs / expériences.
  - Finalisation et aboutissement du développement de la modélisation de la dernière phase du vieillissement conduisant au relâchement massif d'hélium 3.
5. Rédaction du mémoire et préparation de la soutenance (6 mois).

Le découpage de ce programme est donné à titre indicatif et permet avant tout de faire ressortir les ordres de grandeur du temps accordé à chacun des domaines d'études. En pratique, la mise en vieillissement des échantillons devra intervenir dès le début de la thèse afin d'avoir accès à des temps de vieillissement relativement longs et les actions 2,3 et 4 devront être menées en parallèle.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

Valérie Paul-Boncour  
paulbon@icmpe.cnrs.fr  
ED « Sciences, Ingénierie et Environnement »  
Université Paris-EST - 77455 Marne-La-Vallée

#### Encadrant :

Arnaud FABRE  
CEA Valduc – 21120 Is-sur-Tille  
Tél. : 03 80 23 40 00  
Mail : fabre.arnaud@cea.fr

Mathieu SEGARD  
CEA Valduc – 21120 Is-sur-Tille  
Tél. : 03 80 23 40 00  
Mail : mathieu.segard@cea.fr

# **MATHEMATIQUES - ANALYSE NUMERIQUE – SIMULATION**

# MATHEMATIQUES – ANALYSE NUMERIQUE - SIMULATION

## Sujet :

### Développement d'un solveur creux multi-niveau pour des problèmes d'électromagnétisme

#### Contexte :

Afin d'améliorer la furtivité électromagnétique de différentes plateformes, le calcul de la Surface Equivalente Radar (SER) est indispensable dès le début de la phase de conception. Dans ce cadre, le CEA développe des codes de calcul simulant le comportement électromagnétique d'objets 3D complexes. L'un de ces codes couple une méthode éléments finis (pour le calcul à l'intérieur des matériaux) à une équation intégrale (utilisée comme condition de rayonnement exacte). La partie éléments finis est aujourd'hui traitée par une méthode de décomposition de domaine, chaque sous-domaine étant résolu à l'aide d'un solveur direct pour matrices creuses.

Cependant, avec l'augmentation des capacités de calcul du CEA, les limitations de cette méthode apparaissent :

- L'augmentation du nombre de sous-domaines tend à dégrader la convergence de la méthode
- L'augmentation des tailles des sous-domaines rend l'utilisation d'un solveur direct compliquée, à cause du manque de scalabilité de ce type de solveur.

#### Objectif de la thèse :

L'objectif de cette thèse sera de rechercher et développer une nouvelle méthode de résolution de problèmes de type éléments finis pour l'électromagnétisme avec une scalabilité accrue.

Aujourd'hui, dans la littérature, la piste de recherche la plus prometteuse est la méthode multigrille. Le principe de cette méthode est l'utilisation d'une collection de problèmes grossiers qui permettent d'accélérer le calcul de la solution fine. C'est une méthode itérative, qui est éprouvée pour des problèmes elliptiques, et ayant une scalabilité optimale (la résolution est en  $O(N)$ ,  $N$  étant le nombre d'inconnues du problème). Cependant, il est connu que les méthodes multigrilles ne sont pas performantes pour des problèmes à noyaux oscillants tels que l'électromagnétisme ou l'acoustique (ces équations conduisant à des problèmes indéfinis). Un travail important de recherche est donc nécessaire pour trouver des opérateurs multigrilles qui soient performants pour ce type de problèmes.

#### Déroulement de la thèse :

- 1<sup>ère</sup> année : le(a) doctorant(e) réalisera une recherche bibliographique sur les méthodes multigrilles, en collaboration avec des experts du domaine. Il(elle) s'appropriera les développements faits actuellement sur les problèmes de type Maxwell définis
- 2<sup>ème</sup> année : le(a) doctorant(e) développera les opérateurs appropriés pour un problème indéfini correspondant à une discrétisation d'un problème d'acoustique. Cette étape permettra d'appréhender les problèmes indéfinis dans un contexte plus simple que l'électromagnétisme. Les développements seront effectués dans la bibliothèque Hypra du LLNL (Lawrence Livermore National Laboratory, Californie, USA)
- 3<sup>ème</sup> année : le(a) doctorant(e) étendra les résultats obtenus pour l'acoustique à l'électromagnétisme. Les six derniers mois seront consacrés à la rédaction du manuscrit de thèse.

Des visites annuelles au LLNL sont à prévoir, dans le cadre de leur programme d'été.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

RAMET Pierre  
pierre.ramet@u-bordeaux.fr  
ED 38 - Mathématiques et Informatique  
Bordeaux

#### Encadrant :

LECOUVEZ Matthieu  
CEA/CESTA – BP 2 – 33114 Le Barp Cedex  
Tél. : 05.57.04.40.00 - matthieu.lecouvez@cea.fr

## Sujet :

### Traitement numérique des jonctions en décomposition de domaine pour les ondes

#### Contexte :

Dans le cadre de la furtivité électromagnétique de différentes plateformes, le CEA développe des codes de calcul simulant le comportement électromagnétique d'objets 3D complexes. L'un de ces codes couple une méthode éléments finis (pour le calcul à l'intérieur des matériaux, qui peuvent être hétérogènes) à une équation intégrale (utilisée comme condition de rayonnement exacte). La partie éléments finis est aujourd'hui traitée par une méthode de décomposition de domaine (DDM), chaque sous-domaine étant résolu à l'aide d'un solveur direct pour matrices creuses. Aujourd'hui, dans le but de garantir certaines propriétés mathématiques de la méthode (caractère bien posé, équivalence au problème original et convergence de la méthode), la décomposition de domaine est en couches concentriques, interdisant aux interfaces de sous-domaines de se croiser.

Cependant, la génération des maillages associés est particulièrement complexe, et il est évident qu'un tel partitionnement ne peut pas passer à l'échelle dans un contexte HPC. Cette décomposition est, en outre, mal adaptée pour les objets allongés, les sous-domaines devenant très fins lorsque leur nombre grandit, ce qui introduit artificiellement une anisotropie dans les résolutions locales aux sous-domaines, source de nouvelles difficultés.

#### Objectif de la thèse :

On propose de s'intéresser aux difficultés engendrées par la présence de jonctions dans les interfaces entre sous-domaines, dans l'optique de généraliser la méthode à tout type de découpage de domaine. Dans le cadre du projet ANR NonlocalDD, le laboratoire Jacques-Louis Lions a proposé un substitut à l'opérateur d'échange classiquement utilisé dans la littérature. Cette technique est applicable sous des hypothèses assez générales sur le plan géométrique. Si une théorie de convergence a pu être développée, l'implémentation de ce nouvel opérateur est délicate et engendre un surcoût non négligeable. Pour cela, l'approche nouvelle décrite plus haut n'a pu être testée que sur des cas test de taille modérée, avec un code séquentiel. Le travail de thèse que nous proposons consisterait à mettre en œuvre cette approche nouvelle sur un problème de grande taille avec un code parallélisé pour des architectures à mémoire distribuée, et en optimisant le calcul de l'opérateur d'échange, l'objectif étant la résolution de problèmes ayant des tailles de l'ordre de la centaine de millions d'inconnues.

#### Déroulement de la thèse :

- 1ère année : le(a) doctorant(e) devra se familiariser avec les méthodes de décomposition de domaine classique et le code développé au CEA. Il(elle) s'appropriera les développements déjà réalisés sur le nouvel opérateur d'échange et les conséquences numériques et informatiques de la nouvelle formulation
- 2ème année : le(a) doctorant(e) implémentera cet opérateur dans le code du CEA, dans un contexte de parallélisme MPI+OpenMP et validera ses développements sur des cas tests canoniques. Il(elle) vérifiera les propriétés numériques attendues de la méthode (notamment vitesse de convergence)
- 3ème année : le(a) doctorant(e) travaillera à réduire le surcoût engendré par le nouvel opérateur, en investiguant d'une part des préconditionneurs robustes pour le problème de squelette associé à l'opérateur, et d'autre part des solutions de localisation de l'opérateur pour limiter son empreinte mémoire.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

CLAEYS Xavier

claeys@ann.jussieu.fr

ED - Sciences Mathématiques de Paris

#### Encadrant :

LECOUVEZ Matthieu

CEA/CESTA – BP 2 – 33114 Le Barp Cedex

Tél. : 05.57.04.40.00 - matthieu.lecouvez@cea.fr



# MATHEMATIQUES - ANALYSE NUMERIQUE - SIMULATION

## Sujet :

### Reconstruction tomographique multi-contraste et multidimensionnelle par intelligence artificielle

#### Contexte :

La radiographie X éclair est utilisée au CEA-DAM dans le cadre d'expériences d'hydrodynamique pour observer des objets à forte variation de densité sur des temps d'observation très courts. Ces radiographies ont pour but de reconstruire l'objet radiographié en densité ainsi que les interfaces associées. Actuellement, l'installation franco-britannique EPURE (située sur le centre du CEA Valduc) utilisée pour nos applications ne possède qu'un seul axe radiographique. Ainsi, des hypothèses géométriques simplificatrices sur l'objet doivent être réalisées pour la reconstruction (axi-symétrie par exemple) mais dans ce cas la présence de singularités 3D est mal considérée. Prochainement, l'introduction de 2 axes supplémentaires sur l'installation EPURE amènera des projections supplémentaires pour la reconstruction.

Par ailleurs, la méthode d'imagerie actuelle, basée sur le contraste en absorption, fournit des images dont les contrastes peuvent être très faibles. Une technique déjà éprouvée pour des applications médicales et industrielles, basée sur l'exploitation de la phase des rayons X, permet d'obtenir des informations complémentaires au niveau des interfaces entre les matériaux. La prise en compte d'un nombre de vues supplémentaires et/ou de différents types de contrastes (absorption et phase) conduit à vouloir fusionner toutes ces informations pour une reconstruction plus fine de l'objet. Dans ce contexte, les techniques d'intelligence artificielle (IA) fournissent un cadre naturel pour développer cette nouvelle approche de reconstruction tomographique. L'IA nécessite une base d'apprentissage qui sera construite à partir de simulations radiographiques utilisant le super-calculateur du programme Simulation de la DAM. Cette base d'apprentissage devra intégrer plusieurs types de contrastes et fournir l'information *a priori* nécessaire sur la structure 3D de l'objet reconstruit afin de pallier le faible nombre de projections disponibles.

#### Objectif de la thèse :

La thèse se situe à l'interface entre l'imagerie et les mathématiques appliquées. Le but est de mettre à profit les méthodes d'intelligence artificielle pour explorer deux pistes d'études: 1) l'apport du contraste de phase par rapport aux techniques classiques d'imagerie par absorption dans la reconstruction tomographique, 2) le développement via l'intelligence artificielle d'un outil de reconstruction tomographique et de détection d'interfaces. Si des techniques avancées de reconstruction tomographique 3D existent déjà, notamment dans le domaine médical (CT, mammographie, ...), ces méthodes ne sont pas directement applicables. En effet, l'approche développée devra fonctionner avec un faible nombre de projections (jusqu'à 3) et intégrer des informations provenant de l'imagerie conventionnelle par absorption ainsi que du contraste de phase. En outre, à l'issue de la reconstruction, l'outil développé fournira non seulement une estimation du champ de densité dans l'objet mais également les interfaces entre les différents matériaux, nécessitant la combinaison de méthodes de reconstruction proprement dites et de détection de contours. Il devra permettre l'identification de défauts calibrés dans une maquette expérimentale et fournir l'incertitude associée à la reconstruction.

#### Déroulement de la thèse :

La thèse nécessite un intérêt fort pour les mathématiques appliquées (optimisation, résolution de problèmes inverses, simulation, intelligence artificielle) et l'informatique (Python, C/ C++, Deep Learning) et permettra au(à la) doctorant(e) de renforcer ses compétences dans ces domaines ainsi qu'en imagerie X et traitement d'images. Des connaissances en parallélisation de code seront également utiles pour déployer les outils développés sur le super-calculateur de la DAM.

La première partie de la thèse visera à prendre en main les outils de reconstruction et de détection de contours basés sur l'intelligence artificielle actuellement développés au laboratoire. Ces outils devront être adaptés afin d'intégrer l'information issue du contraste de phase lors de la reconstruction. Cela impliquera notamment la constitution d'une base de données issues de simulations numériques incluant à la fois les contrastes en absorption et en phase. Ce premier travail permettra d'évaluer l'apport éventuel du contraste de phase dans la chaîne radiographique.

Dans un second temps, la reconstruction tomographique pourra être étendue à l'utilisation de plusieurs projections spatiales, en incluant éventuellement les informations issues du contraste de phase pour chaque projection selon les conclusions tirées de l'étude précédente. Après le développement de l'outil de reconstruction et sa validation par simulation, le(a) doctorant(e) participera à la validation expérimentale du code en testant sa capacité à traiter des images issues d'expériences réalisées sur une des installations radiographiques de la DAM (ELSA). Il s'agira d'estimer la qualité de détection et de reconstruction des détails fins de l'objet imagé et des interfaces en utilisant une maquette préalablement fabriquée au laboratoire. Le travail de thèse donnera lieu à la publication dans des revues à comité de lecture et à la participation à des conférences internationales.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

Non définis à ce jour

#### Encadrant :

BRANDON Vincent & GINSBURGER Kevin  
CEA/DAM Ile-de-France - Bruyères-le-Châtel, 91 297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00.  
vincent.brandon@cea.fr & kevin.ginsburger@cea.fr

## Sujet :

Résolution de problèmes inverses utilisant des codes de simulation coûteux ayant des Images pour sortie

### Contexte :

Profitant de l'accroissement des puissances de calcul disponibles, la simulation est de plus en plus utilisée pour la conception et la fiabilité de systèmes physiques complexes. Ces analyses s'appuient sur l'utilisation de codes numériques paramétrés. Afin de maximiser le caractère prédictif de ces codes, il est nécessaire d'optimiser ces paramètres à partir d'un ensemble de confrontations expériences-calculs qui sont représentatives des conditions d'utilisation du système. Dans ce contexte, un certain nombre de difficultés apparaissent lorsque les observations sur lesquelles l'identification de ces paramètres doit se baser sont des images (comme des radiographies X ou des images neutroniques).

### Objectif de la thèse :

Les codes numériques présentent généralement deux types d'entrées. D'une part, on note  $\mathbf{x}$  les paramètres qui caractérisent le système physique considéré ainsi que les conditions d'expériences. D'autre part, on note  $\mathbf{b}$  le vecteur regroupant l'ensemble des constantes physiques et numériques ne dépendant pas du système étudié qu'il convient de fixer pour pouvoir lancer le code. Afin de rendre le code de simulation prédictif, c'est-à-dire lui permettre d'être capable de prédire le comportement d'un nouveau système caractérisé par une nouvelle valeur de  $\mathbf{x}$ , la valeur de  $\mathbf{b}$  doit être optimisée. Lorsque les observations sur lesquelles l'identification de  $\mathbf{b}$  doit se baser sont des images, plusieurs difficultés majeures apparaissent. D'abord, la comparaison entre une image simulée et une image mesurée nécessite l'introduction de métriques de comparaison spécifiques. Ensuite, il est nécessaire de rendre robuste l'identification de  $\mathbf{b}$  à la présence potentielle de bruit de mesure et d'erreur de simulation, dont les structures peuvent être complexes lorsque l'on considère des images. Enfin, lorsque l'appel au code est coûteux numériquement, il s'avère souvent indispensable d'élaborer des approximations des quantités d'intérêt issues de la simulation (appelées métamodèles), pertinentes et rapides à évaluer, à partir d'un nombre limité de simulations. La construction de tels métamodèles dans un contexte image est clairement non triviale.

### Déroulement de la thèse :

Dans un premier temps, le travail de thèse cherchera à proposer des métriques de comparaison d'images permettant de capter la physique des phénomènes étudiés. Dans un second temps, ce travail concernera l'extension de méthodes classiques de machine learning (méthodes à noyau, réseaux de neurones) aux codes à sorties images, et leur utilisation pour la résolution de problèmes inverses (optimisation, analyse de sensibilité, recalage de codes de simulation). On envisagera l'application aux expériences radiographiques réalisées sur les installations du CEA/DAM.

### Directeur de thèse et école doctorale :

GALERNE Bruno  
Bruno.galerie@univ-orleans.fr  
ED 551 - Mathématiques, informatique, physique  
théorique, ingénierie des systèmes (MIPTIS)  
Université Orléans

### Encadrant :

ABRAHAM Isabelle  
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00 – isabelle.abraham@cea.fr

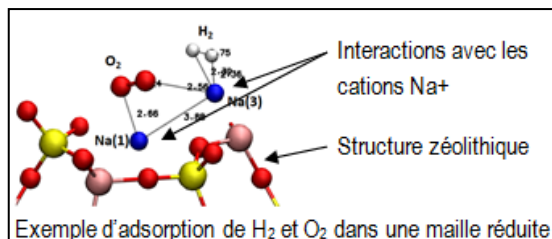


## Sujet :

**Dynamique d'élimination des produits de radiolyse  $H_2$  et  $O_2$ , dans le gaz environnant une zéolithe 4A partiellement chargée en eau tritiée**

**Contexte :** La réduction de l'impact environnemental lié à l'exploitation des installations nucléaires mettant en œuvre du tritium (CEA, ITER,...) nécessite des opérations d'épuration de l'atmosphère des enceintes de confinement par des systèmes de détritiation conduisant à la formation d'eau tritiée dite de faible activité volumique. Étant données les contraintes opérationnelles d'un entreposage de décroissance sous forme liquide, un procédé d'adsorption de l'eau faiblement tritiée sur un matériau de type aluminosilicate (zéolithe 4A) a été développé. La maîtrise et l'optimisation des conditions d'entreposage sur le long terme, nécessitent d'accroître la compréhension des mécanismes de l'auto-radiolyse de l'eau tritiée confinée dans les zéolithes 4A dont le comportement présente de réelles différences par rapport à la radiolyse de l'eau libre.

**Objectif de la thèse :** Le résultat majeur issu de travaux de thèse précédents est la mise en évidence, lorsque les zéolithes sont partiellement hydratées, d'un processus de recombinaison des produits stables gazeux de la radiolyse,  $H_2$  et  $O_2$ . L'observation expérimentale de ces phénomènes n'est pas aisée, puisqu'il s'agit principalement de suivre l'évolution des quantités de matière dans le ciel gazeux de l'enceinte. Une première thèse faisant appel à la chimie quantique a donc été entreprise (J. Randrianandraina, 2017–2020), avec pour objectif de simuler le mécanisme de la recombinaison  $H_2/O_2$  observée expérimentalement.



Ces travaux ont permis de mettre en évidence l'ordre de priorité des sites favorables à l'adsorption de l'eau, d'une part, mais aussi des gaz  $H_2$  et  $O_2$ , seuls ou en mélange. Les simulations en DFT statique ont conduit au calcul de toutes les énergies d'adsorption de ces molécules. Puis, l'introduction de la dynamique, nécessitant l'utilisation du TGCC (Très Grand Centre de Calcul du CEA), a permis de mesurer chaque diffusion au niveau microscopique, dans le cas d'une espèce seule et aussi dans le cas des mélanges. Cependant, il apparaît clairement que la résolution de la problématique de la recombinaison se scinde en deux parties distinctes mais corrélées, à savoir :

- l'étude de la réactivité des molécules adsorbées, par recherche du chemin de réaction, en utilisant les méthodes de chimie quantique,
- l'étude de la dynamique des mélanges gazeux dans la zéolithe, en fonction de son hydratation, afin d'en définir les probabilités de rencontre, par utilisation des méthodes de cinétique Monte Carlo (KMC).

La thèse se focalisera plus particulièrement sur le second point, celui-ci étant crucial pour l'élaboration à terme d'un outil de simulation. L'objectif est d'étudier de manière exhaustive la dynamique de remplissage de la zéolithe, par les mélanges gazeux ( $H_2$ ,  $O_2$ ), en fonction du taux d'hydratation de cette dernière. Reliée aux résultats des travaux sur la compréhension du mécanisme réactionnel de la recombinaison, la thèse permettra de faire le lien essentiel avec les grandeurs expérimentales, ce type d'information étant difficilement accessible expérimentalement, en particulier en situation d'entreposage. L'outil de simulation sera alors validé expérimentalement dans des conditions représentatives, permettant l'optimisation des conditions d'entreposage de l'eau tritiée sur le long terme.

**Déroulement de la thèse :** La présence des molécules de  $H_2O$ ,  $H_2$  ou  $O_2$  dans la zéolithe influence les énergies de stabilisation des autres molécules adsorbées. Par ailleurs, il n'est pas suffisant de connaître les énergies de chacun des sites d'adsorption car la cinétique de remplissage en adsorbats a elle-même une influence. Les possibilités de conformation au sein de la supercage sont nombreuses et il y a donc un important travail à effectuer. Ces études statistiques et probabilistes seront réalisées à l'aide de programmes Monte-Carlo en prenant en compte les énergies d'adsorption calculées en DFT statique, ainsi que les valeurs de diffusion fournies par la DFT dynamique. L'expérimental devra être pris en compte en introduisant dans la simulation : les volumes, les nombres des différents sites et de plus, le taux de production des gaz de radiolyse (valeurs extraites des manipulations antérieures).

Enfin, les gaz stables issus de la radiolyse ne sont que des indicateurs du bilan final. Des intermédiaires chimiques peu stables, tels que les radicaux hydroxyles ( $HO\cdot$ ) peuvent avoir un rôle à jouer dans l'une des étapes du chemin réactionnel de la recombinaison. Ainsi, après avoir exploré les solutions liées à la catalyse  $H_2O / H_2 / O_2$  sur zéolithe, l'introduction de cette espèce radicalaire permettra de simuler la présence de phénomènes radiolytiques.

## Directeur de thèse et école doctorale :

RAMSEYER Christophe  
christophe.ramseyer@univ-fcomte.fr  
Ecole doctorale Environnement-Santé  
UBFC, Besançon

## Encadrants :

CHAMBELLAND Caroline  
caroline.chambelland@cea.fr  
CEA/Valduc – 21120 Is sur Tille  
Tél. : 03.80.23.40.00

GRIVET Manuel  
manuel.grivet@univ-fcomte.fr  
Laboratoire Chrono-Environnement  
UBFC, Besançon

# MECANIQUE

## Sujet :

### Comportement dynamique d'un explosif comprimé

#### Contexte :

L'évaluation de la sécurité d'une structure pyrotechnique passe par la prédiction du niveau de réaction atteint lors d'agressions thermiques (chauffage, feu) ou mécaniques (impact). Or, la complexité du processus menant à des réactions violentes n'a pas permis jusqu'ici à la communauté scientifique internationale de proposer une démarche unifiée et pragmatique. Cette thématique est donc un enjeu majeur pour les industriels des applications civiles et militaires des compositions explosives.

Le CEA/DAM a développé et homologué une approche par simulation numérique (sur la base du logiciel aux éléments finis ABAQUS) permettant de prédire l'explosion thermique, la première étape du processus réactif. L'attention se tourne maintenant vers les étapes suivantes que sont la combustion, la déflagration et la transition à la détonation. Plus particulièrement dans le cadre de ce contrat de thèse, le cas des impacts sera étudié.

Le travail sera réalisé en collaboration avec les équipes du Laboratoire de mécanique Gabriel LaMé (région Centre Val de Loire) et avec l'équipe du CEA le Ripault.

Les travaux seront présentés dans des conférences nationales et internationales ou devant un groupe d'experts « Computer Modelling » de l'Insensitive Munition European Manufacturer Group (association d'industriels) et feront l'objet de publications.

#### Objectif de la thèse :

Le matériau étudié est constitué de deux phases cristallines et d'un liant. L'ensemble est densifié par compaction isostatique pour obtenir un matériau à très faible porosité. Sa microstructure est hétérogène.

Lorsque ce matériau est soumis à une sollicitation dynamique, son comportement est complexe et la réalisation des caractérisations expérimentales est difficile.

Pour cela, le CEA/Le Ripault a développé un outil numérique permettant de simuler la réponse mécanique d'un polycristal à l'aide de la méthode aux éléments finis. La réalisation d'expériences numériques permet d'approcher la réponse macroscopique du matériau lorsque les conditions expérimentales sont difficiles ou impossibles à réaliser.

Le but de ce travail de recherche est de mettre en place dans le code aux éléments finis ABAQUS explicite une loi de comportement mécanique dynamique macroscopique pour cette composition explosive. Cette loi s'appuiera sur des simulations réalisées à l'échelle de la microstructure.

Pré-requis : MASTER dans le domaine de la mécanique des milieux continus. Expérience ou formation en science des matériaux appréciée.

Compétences acquises : dynamique rapide, simulation non linéaire en grandes transformations, modélisation des processus irréversibles

#### Déroulement de la thèse :

Le début de la thèse consistera à simuler la réponse microstructurale de polycristaux soumis à différents trajets de chargement sur la base des comportements mécaniques des constituants accessibles dans la littérature (élasticité, plasticité...). Les données numériques recueillies permettront de proposer une loi de comportement macroscopique dynamique, cette dernière étant implémentée dans le logiciel ABAQUS explicit sous la forme d'une routine utilisateur. Des impacts de structures pourront enfin être simulés et les résultats seront comparés à des expérimentations.

L'étudiant(e) sera basé(e) au CEA le Ripault et il(elle) se rendra régulièrement au Laboratoire Gabriel LaMé (Bourges, Blois).

Formation : MASTER 2 en mécanique des milieux continus, MASTER 2 en mathématiques appliquées

Durant cette thèse, l'étudiant(e) aura l'opportunité d'étendre ou de parfaire ses connaissances dans les domaines de la dynamique rapide, de la simulation non linéaire des processus en grande transformation et de la physique des matériaux.

#### Directeurs de thèse et école doctorale :

BAILLY Patrice  
patrice.bailly@insa-cvl.fr  
INSA CVL

#### Encadrant :

PICART Didier  
CEA le Ripault – BP 16 - 37260 Monts  
Tél. : 02.47.34.40.00 – didier.picart@cea.fr

# METROLOGIE

## Sujet :

### Etude d'un système d'imagerie X à contraste de phase pour des mesures à haute résolution spatiale

**Contexte :** L'étude de l'interaction de lasers de puissance (multi-kJ/ns) avec la matière est d'un intérêt majeur en perspective des futures expériences de fusion thermonucléaire prévues sur le Laser MégaJoule (LMJ). Pour cela, une des techniques d'imagerie couramment utilisées est la radiographie X par absorption. Toutefois, cette méthode de mesure présente certains défauts : les informations obtenues ne sont que partielles (en particulier pour des éléments de faibles densités) puisque le contraste de l'image est uniquement lié à l'atténuation de l'émission X se propageant au travers de l'échantillon. Pour obtenir davantage d'informations, une alternative est de développer une instrumentation complémentaire, permettant d'extraire la phase de l'objet (additionnellement à son amplitude) en prenant en compte la réfraction par cet objet de l'émission X. Cette technique novatrice, plus connue sous le nom d'imagerie à contraste de phase, est aujourd'hui largement développée sur de grandes installations type synchrotron, et semble être une alternative prometteuse pour des expériences d'interaction laser-plasma. Cependant, le domaine d'applicabilité de cette méthode de mesure dans ces conditions extrêmes est encore assez flou et l'extraction de l'information de phase à partir de ces mesures purement d'intensité n'est pas immédiate, ce qui nécessite une étude paramétrique approfondie ainsi que le développement d'algorithmes de traitement de données complexes.

**Objectif de la thèse :** A ce jour, un certain nombre de dispositifs ont déjà permis de réaliser des mesures par contraste de phase. Toutefois, en raison de certaines contraintes propres à une installation laser telle que le LMJ, ces dispositifs ne sont pas tous transposables à nos besoins expérimentaux. La thèse proposée aura donc pour objectif d'étudier et d'adapter ce principe de contraste de phase dans le cadre d'expériences laser-plasma et plus particulièrement pour les installations de puissance du type LMJ, avec la possibilité de réaliser un prototype pour des installations de taille intermédiaire comme le Laboratoire pour l'Utilisation des Lasers Intenses (LULI) à Palaiseau. Pour réaliser cet objectif, l'étudiant(e) intégrera une équipe pluridisciplinaire du centre DAM Ile-de-France de Bruyères-le-Châtel et sera amené à travailler sur ce site. Différentes missions à l'extérieur du centre seront également planifiées notamment pour la validation expérimentale ainsi que la mise en œuvre du prototype. Ce sujet permettrait également d'ouvrir la voie à des thématiques d'imagerie numérique complémentaires telles que la tomographie 3D ou l'imagerie par diffraction cohérente.

A l'issue de sa thèse, l'étudiant(e) sera formé(e) à la conception et la réalisation de systèmes imageurs X adaptés pour le LMJ. Il(elle) aura acquis une solide expérience tant en développement numérique et traitement du signal avancé qu'en physique et instrumentation laser-plasma et sera familiarisé(e) avec les installations de fusion thermonucléaire.

**Déroulement de la thèse :** Le travail de thèse sera scindé en plusieurs parties déclinées de la façon suivante :

1. Etude bibliographique et développement numérique - L'étudiant(e) devra réaliser dans un premier temps une étude approfondie des techniques d'imagerie envisageables au LMJ ainsi que des algorithmes de reconstruction d'image associés (analyse dans le domaine de Fourier – algorithmes itératifs). Une fois les concepts physiques et numériques maîtrisés, il(elle) pourra implémenter ces différents algorithmes et caractériser leurs performances et leurs limites (étude de convergence – impact du bruit de mesure sur la reconstruction).
2. Validation expérimentale - Une première preuve de principe devra ensuite être apportée à partir de données expérimentales. Une étude paramétrique sera également nécessaire afin de déterminer les conditions optimales d'acquisition de l'image et d'en déduire plus précisément un domaine de validité de la technique ainsi que ses potentielles limitations. Ces résultats devront finalement être confrontés à des mesures réalisées sur synchrotron dans le but d'analyser clairement l'influence des propriétés de la source de radiographie X.
3. Mise en œuvre sur une installation laser de puissance - Enfin, une fois la démonstration d'un prototype d'imageur X à contraste de phase effectuée et les contraintes liées aux installations lasers de puissance identifiées, des expériences pourront être envisagées au LULI dans le but notamment d'approfondir la connaissance des mécanismes physiques fondamentaux sous-jacents à l'interaction de lasers de puissance avec la matière. Dans ce cadre, l'étudiant(e) pourra également être amené à réaliser des études hydrodynamiques ainsi que des simulations sur supercalculateur.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

KOENIG Michel  
ED 626 – Institut polytechnique de Paris

#### Contact :

CHOPINEAU Ludovic  
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00. – ludovic.chopineau@cea.fr

# **OPTIQUE - OPTIQUE LASER - OPTIQUE APPLIQUEE**

# OPTIQUE – OPTIQUE LASER – OPTIQUE APPLIQUEE

## Sujet :

### Endommagement des optiques avec des irradiations multiples

#### Contexte :

Dans le cadre du Laser Mégajoule, l'endommagement laser des composants optiques est étudié sur différentes installations permettant l'analyse de la tenue au flux laser des différents composants des faisceaux du LMJ. Un moyen unique a été développé au CEA/Cesta afin de tester les composants avec des faisceaux laser de grandes dimensions (jusqu'à 7 mm de diamètre) représentatifs des faisceaux du LMJ. Cet outil, équipé de nombreux diagnostics, permet d'étudier les différents aspects critiques de l'endommagement laser sur une chaîne laser de puissance, notamment l'amorçage des dommages lors d'un premier tir et leur croissance lors des irradiations successives. Les tests sont alors réalisés à des niveaux d'énergie supérieurs au seuil d'endommagement.

#### Objectif de la thèse :

L'objectif de la thèse est de réaliser des mesures à des niveaux d'énergie inférieurs aux seuils lors d'irradiations successives afin de considérer l'effet de fatigue des matériaux qui peut aussi conduire à l'endommagement des optiques. L'aspect propreté des optiques, qui peut être un contributeur à l'endommagement, sera également considéré. Le(a) doctorant(e), en collaboration avec une équipe d'ingénieurs et techniciens, mettra en œuvre les protocoles de tests, réalisera les expériences, les analysera afin d'en extraire des lois d'endommagement sous seuils liées à la fatigue des matériaux et à leur propreté.

#### Déroulement de la thèse :

Le(a) doctorant(e) participera :

- au développement de l'installation et sa caractérisation. Une grande attention sera portée à la mise en place de nouveaux diagnostics permettant de qualifier les faisceaux lasers ;
- à la mise en place de différentes procédures de tests permettant de réaliser les mesures précises d'endommagement lors de séquence d'irradiations multiples ;
- aux expériences, leur dépouillement et leur interprétation.

Des travaux de modélisation seront également réalisés avec le soutien de spécialistes de la simulation numérique. Les tests s'inscrivent dans la compréhension des mécanismes d'endommagement laser et sur la prédiction de la durée de vie des composants optiques.

La pertinence de l'étude permet d'envisager la rédaction de plusieurs articles scientifiques. Le doctorant sera également amené à présenter ses résultats lors de congrès nationaux et internationaux.

Il(elle) réalisera également des missions à l'Institut Fresnel à Marseille qui est associé à cette thèse.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

NATOLI Jean-Yves – jean-yves.natoli@fresnel.fr  
ED 352 – Physique et sciences de la matière  
Université Aix-Marseille

#### Encadrant :

LAMAIGNERE Laurent – laurent.lamaignere@cea.fr  
CEA/CESTA – BP 2 – 33114 Le Barp  
Tél. : 05.57.04.40.00



# OPTIQUE – OPTIQUE LASER – OPTIQUE APPLIQUEE

## Sujet :

### Etude de l'influence de la pollution ambiante sur la génération d'endommagement par choc laser

#### Contexte :

Le CEA Le Ripault travaille depuis de nombreuses années sur le développement de matériaux optiques à vocation de revêtements de surface pour les composants du laser de puissance LMJ. Un des besoins est la mise au point d'un revêtement antireflet fonctionnant dans le domaine ultraviolet ou infrarouge, avec une propriété de transmission optique optimale. Le revêtement utilisé aujourd'hui est à base d'une monocouche de silice qui se caractérise par une forte porosité (ouverte) permettant de répondre de manière adéquate à ses spécifications optiques.

Cependant, cette porosité ouverte s'accompagne d'une sensibilité à la pollution ambiante qui génère non seulement une baisse de transmission dans le temps et parfois un endommagement lié à une absorption et un choc laser.

L'ENSTA Bretagne qui développe depuis des années une compétence sur les chocs lasers et le CEA Le Ripault souhaitent mettre leurs compétences en commun pour étudier ce phénomène de sensibilité à la pollution et son impact sur la résistance des composants soumis à de fortes fluences lasers.

#### Objectif de la thèse :

L'objectif de cette thèse est d'étudier la phénoménologie et l'influence de différents paramètres sur la création des endommagements par chocs lasers. Les revêtements optiques actuels et des versions optimisées seront soumis à une pollution, dont la nature et le taux de pollution seront contrôlés par des moyens adaptés, et exposés ou non à des flux lasers. Les moyens développés à l'ENSTA Bretagne permettront de mettre en évidence par des caméras rapides et des diagnostics Doppler l'existence et le développement de plasma au sein des matériaux ainsi que les ondes de choc.

L'impact d'une pollution déterministe sur les revêtements sera étudié afin de déterminer la criticité de ces pollutions spécifiques sur l'endommagement des optiques sur chaîne. Une modélisation des phénomènes d'absorption et des ondes acoustiques générées par le choc laser sera également menée en parallèle des expériences à l'aide d'un code mono- voire multidimensionnel. La caractérisation fine de ces phénomènes d'endommagement laser permettra en parallèle d'orienter le choix et la structure des matériaux utilisés dans les empilements optiques pour mieux résister au flux laser, et à terme, d'optimiser ces empilements pour les rendre moins sensibles aux polluants.

#### Déroulement de la thèse :

Actuellement la silice colloïdale est le matériau qui constitue une référence dans les empilements utilisés. Elle servira de couche test dans les premières campagnes de pollutions (taux et nature en lien avec le REX du LMJ) et sera caractérisée précisément avec les moyens CEA utilisés lors des thèses précédentes. L'installation de choc laser de l'IRDL de l'ENSTA Bretagne sera optimisée pour travailler avec les matériaux transparents fournis par le CEA.

Les seuils de rupture mécanique de la silice avec ou sans empilement pollué seront mesurés afin de déterminer des liens avec la nature et le mode d'élaboration de la couche. Une attention sera portée sur les modifications matériaux induites par un flux intense au moyen de spectroscopies rapides (Raman, LIBS...) ou DRX. Le soutien à l'analyse des données expérimentales se fera au moyen du code Esther développé au CEA/DAM qui permettra d'identifier l'historique des états mécaniques dans le matériau, à partir de la confrontation essais-calculs.

Cette démarche sera transposée à la caractérisation de nouveaux revêtements optiques.

Outre le soutien des équipes du CEA et de l'ENSTA Bretagne engagés dans ce travail, la thèse s'appuiera également sur des collaborations avec l'INSP de Paris Sorbonne et l'IEMN de Valenciennes qui contribueront à la caractérisation précise des paramètres mécaniques des couches élaborées par le CEA.

Le(a) doctorant(e) devra participer à l'élaboration des couches et à leur pollution. Il(elle) caractérisera celles-ci avec l'ensemble des moyens de caractérisations disponibles au CEA : spectromètre UV/Vis/IR, ellipsométrie indentation, microscopie, effet mirage, LIBS, luminescence, Raman. Il(elle) participera à l'amélioration des moyens mis en œuvre en particulier avec l'ENSTA Bretagne et il(elle) devra maîtriser LabView, Ardhino, Mathematica.

Il(elle) devra présenter régulièrement la synthèse de ses avancées aux équipes du CEA et de l'ENSTA Bretagne, rédiger des articles pour des revues scientifiques de bon niveau et participer à des congrès nationaux et internationaux. Le(a) doctorant(e) aura également la possibilité d'effectuer des heures d'enseignement.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

ARRIGONI Michel  
michel.arrigoni@ensta-bretagne.fr  
SPI de l'ENSTA Bretagne

#### Encadrant :

PIOMBINI Hervé & BELLEVILLE Philippe  
CEA/Le Ripault – BP 16 - 37260 Monts  
Tél. 02 47 34 40 00  
herve.piombini@cea.fr & philippe.belleville@cea.fr

# OPTIQUE – OPTIQUE LASER – OPTIQUE APPLIQUEE

## Sujet :

### Réalisation d'un banc de mesure de réflectivité dans le domaine de l'infrarouge pour des pièces en forme

#### Contexte :

Le CEA/Le Ripault travaille sur des matériaux qui sont utilisés dans tout le domaine spectral, de l'UV à l'IR. Ces matériaux doivent répondre à des caractéristiques optiques qui sont souvent mesurées sur des petits échantillons plans. Le CEA/Le Ripault possède des compétences reconnues dans la caractérisation optique des matériaux. Pour des applications industrielles liées au LMJ, il a déjà développé un réflectomètre dans le domaine du visible et proche infrarouge donnant d'excellentes précisions même sur des pièces non planes. Il s'agit désormais de disposer d'un système équivalent mais fonctionnant dans le domaine de l'infrarouge moyen et lointain avec des dimensions de pièces de quelques dizaines de centimètres.

#### Objectif de la thèse :

L'objectif de cette thèse est la réalisation d'un banc de mesure de la réflectivité infrarouge permettant d'obtenir les caractéristiques optiques sur des pièces réelles (formes non obligatoirement planes) pour valider, sur des pièces de quelques dizaines de centimètres, la démarche de mesure mise en œuvre sur petits échantillons. Ce banc de mesure devra être portable, pour pouvoir être disposé dans un atelier de production en partant des idées qui ont été déployées pour la mise au point du réflectomètre visible. La limitation du domaine spectral, des déplacements, des précisions et du temps de mesures seront ainsi les données d'entrées initiales.

L'objectif de cette thèse sera, in fine, de pouvoir optimiser la formation du revêtement avec la voie PDMS actuelle ou une voie alternative pour atténuer l'endommagement sous flux laser.

#### Déroulement de la thèse :

Selon les données initiales, il faudra choisir et qualifier les bonnes sources, les bons détecteurs permettant de couvrir le domaine spectral et définir la nécessité ou non de séparer le domaine spectral qui nécessiterait l'introduction de composants supplémentaires (qui seraient également à fabriquer ou commander, puis à vérifier en termes de qualité / performances).

L'utilisation d'un spectromètre à transformée de Fourier sera initialement privilégiée en tant qu'appareil flexible (spectralement) et disposant de voies d'acquisition extérieures. Cet appareil sera étudié dans la configuration voie extérieure pour évaluer les précisions selon le domaine spectral et avec les différents détecteurs donc un bolomètre pour l'infrarouge lointain.

L'utilisation d'une fibre infrarouge qui faciliterait la portabilité du système sera étudiée pour l'utilisation future dans un atelier. Le système devant mesurer des caractéristiques infrarouges aura une tête d'acquisition optique sous vide pour éviter les perturbations liées à l'absorption spectrale fluctuante de l'air en fonction du temps extérieure.

Outre le soutien des équipes du CEA engagés dans ces actions, la thèse s'appuiera également sur des laboratoires spécialisés dans la métrologie infrarouge comme le LNE.

Une étude initiale de la bibliographie fixera le choix des sources infrarouges, des détecteurs, des fibres et des configurations potentielles d'un spectromètre. Le(a) doctorant(e) se familiarisera à l'utilisation des spectromètres FTIR et des détecteurs refroidis (MCT, Bolomètre,...) en évaluant les précisions de mesure en lien avec le LNE. Il(elle) établira des Encadrant pour l'utilisation de fibre infrarouge et évaluera leur atténuation pour vérifier la compatibilité avec l'application. Il(elle) élaborera une solution de tête optique permettant une mesure sur des pièces planes d'abord à l'ambiante, puis regardera les résultats sur des pièces dont la courbure est de plus en plus prononcée en évaluant la perte de précision du système.

Ensuite, le(a) doctorant(e) mettra sous vide la tête de mesure et étudiera l'influence de cette mise sous vide de l'application.

Enfin, le(a) doctorant(e) munira la tête de mesure d'un système de déplacement 3D et testera ses performances sur des objets d'abord à géométrie plane puis à géométrie sphérique pour finir sur une géométrie quelconque. Il(elle) évaluera les écarts de précision avec les précisions préalablement déterminées afin de valider les performances du banc ainsi développé.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

PIOMBINI Hervé (soutenance HDR 2021)  
herve.piombini@cea.fr  
ED 575 – EOBÉ Paris Saclay

#### Encadrant :

MARCEL Corinne  
CEA/Le Ripault – BP 16 – 37260 Monts  
Tél. : 02.47.34.40.00 – corinne.marcel@cea.fr

# PHYSIQUE NUCLEAIRE

## Sujet :

### Etude de la dissipation dans le processus de fission

#### Contexte :

Parmi les différentes réactions nucléaires, la fission est sans aucun doute l'une des plus difficiles à décrire, reflétant la diversité des aspects dynamiques du problème à N corps. Lors de ce processus dynamique, le noyau se retrouve dans des états de déformations extrêmes aboutissant à la formation de deux fragments. La sensibilité des propriétés de fission par rapport au noyau étudié ou aux conditions initiales atteste de la richesse du phénomène dans lequel interviennent différents aspects de structure comme les effets de couches ou la superfluidité.

#### Objectif de la thèse :

Dans ce cadre, les études réalisées au CEA se concentrent jusqu'ici sur la fission d'actinides à l'hypothèse adiabatique : à chaque étape du mouvement collectif le noyau est considéré dans son état de minimum d'énergie. Seuls les degrés de libertés collectifs (typiquement des variables de déformation) sont alors utilisés. Néanmoins les mécanismes de brisure de paires de nucléons ont été expérimentalement observés et l'énergie dissipée dans les excitations individuelles (ou intrinsèques) de ces nucléons est estimée de l'ordre de 15-20 MeV au moment de la scission. Ce sujet de thèse s'intéresse à la prise en compte des états excités de basse énergie du noyau pour décrire la fission de basse énergie, jusqu'à quelques MeV au-dessus de la barrière de fission.

#### Déroulement de la thèse :

Pour cela, le Schrödinger Collective Intrinsic Model (SCIM) a été récemment développé en généralisant la méthode de la coordonnée génératrice (GCM) couramment utilisée pour décrire la fission. Dans le SCIM des excitations à 2 quasi-particules sont prises en compte et l'équation de type Schrödinger du modèle est régie par un Hamiltonien comprenant les couplages entre les différents degrés de libertés collectifs et intrinsèques choisis. Dans un premier temps, les différents termes de cet Hamiltonien collectif-intrinsèque entre états excités seront dérivés et calculés numériquement. Il s'agira de déterminer l'importance des différents termes du Hamiltonien et ainsi comprendre la nature des couplages dominants entre états quantiques du noyau.

D'autre part, en GCM, la fonction d'onde du noyau se propage sur une surface d'énergie potentielle dont chaque point correspond à l'état d'énergie minimale du noyau pour une déformation fixée. La seconde partie de la thèse sera dévolue à la mise en œuvre du SCIM : la fonction d'onde du noyau fissionnant se propagera ici sur les différentes surfaces d'énergie potentielle générées par les excitations intrinsèques et l'état de minimum d'énergie grâce aux différents couplages précédemment étudiés.

L'application du SCIM sera alors réalisée sur des actinides d'intérêt. L'estimation de l'énergie dissipée dans les excitations intrinsèques permettra une bien meilleure estimation de la distribution de l'énergie disponible à la scission dans l'énergie cinétique totale de fission, l'émission de neutrons prompts ou de photons. Ces applications seront permises grâce aux ressources exceptionnelles de calcul du CEA DAM.

Cette thèse s'inscrira dans le cadre d'une collaboration internationale entre le CEA DAM, l'Australian National University (Canberra, Australie), l'Universidad Autonoma de Madrid (Espagne) et le Lawrence Berkeley national laboratory (Berkeley, USA) et sera co-dirigé par Rémi BERNARD de l'Université de Canberra (Australie).

#### Directeur de thèse et école doctorale :

PILLET Nathalie  
ED 576 - Particules, Hadrons, Energie, Noyau,  
Instrumentation, Imagerie, Cosmos et Simulation  
(PHENIICS)  
Université Paris-Saclay

#### Encadrant :

PILLET Nathalie  
CEA/DAM Ile-de-France - Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00. - nathalie.pillet@cea.fr

# PHYSIQUE DES PLASMAS

## Sujet :

**Etude par diffraction X des transitions de phase de matériaux modèles multiphasiques dans le domaine de la matière dense et tiède**

### Contexte :

Un nouveau diagnostic de diffraction X vient d'être mis au point fin 2019 sur l'installation LULI2000, et sera adapté prochainement sur l'installation Laser MegaJoule (LMJ du CEA/CESTA près de Bordeaux). Un tel dispositif expérimental offre désormais la possibilité d'étudier avec précision les transitions de phase de matériaux cristallins comprimés à l'aide d'un laser de puissance et soumis à de très hautes pressions relevant du domaine de la matière dense et tiède. En première étude, les changements de phases du fer, matériau d'intérêt géophysique qui sera étudié sur le LMJ, ont été explorés le long de son Hugoniot. Ceci a permis d'encadrer sa courbe de fusion sous choc avec une précision encore jamais atteinte et d'acquérir des données importantes quant à la compréhension des intérieurs planétaires. En outre, le diagramme de phase du bismuth a été exploré avec une cinétique inédite offerte par ce type d'installation, à savoir en comprimant le matériau de manière quasi-isentropique avec l'aide de rampes laser. Ce diagramme apparaît différent du diagramme de phase statique et du diagramme de phase exploré sous choc et met ainsi en lumière toute l'importance d'étudier les effets cinétiques pour comprendre les processus de transition de phase.

### Objectif de la thèse :

A la manière des deux pré-études citées ci-dessus, l'objectif de cette thèse est d'exploiter ce nouveau dispositif expérimental sur l'installation LULI2000 afin d'identifier la fusion sous choc de différents matériaux (Fer, Tantale, Molybdène, Nickel, ...) pour lesquels il subsiste des désaccords majeurs entre les courbes de fusion statiques relativement plates, et les courbes de fusion dynamiques prédisant des températures beaucoup plus élevées. Il s'agira aussi d'explorer le diagramme de phase de matériaux multiphasiques (Fer, Bismuth, Titane) avec des dynamiques de compression inédites hors-Hugoniot. En plus de participer activement à la préparation et à la réalisation de ces expériences ainsi que de la campagne LMJ, le (la) doctorant(e) sera amené(e) à développer tous les outils nécessaires à la prévision et à l'analyse du diagnostic de diffraction X. En parallèle, il (elle) devra réaliser des simulations hydrodynamiques à l'aide du code ESTHER afin d'analyser les données des diagnostics optiques permettant d'évaluer les conditions extrêmes de pression et de température sondées. Il (elle) participera en cela à l'amélioration et à la validation des modèles d'interaction laser-matière et des modèles hydrodynamiques (équations d'état multi-phases, conductivité thermique, cinétique des changements de phase) utilisés dans ces calculs.

### Déroulement de la thèse :

La thèse se déroulera en plusieurs étapes. Il sera demandé au doctorant(e) une étude bibliographique sur l'état de l'art des courbes de fusion plates ainsi que des cinétiques des changements de phases dans le domaine de la matière dense et tiède. Cette étude sera poursuivie par l'analyse de la première expérience de diffraction X citée précédemment. Cette analyse permettra au doctorant(e) de se familiariser à la fois avec les méthodes expérimentales utilisées pour étudier la matière dense et tiède à l'aide d'un laser de puissance, au moyen des outils de dépouillement qu'il (elle) se devra de compléter, ainsi qu'avec les simulations hydrodynamiques 1D. Pendant toute la durée du doctorat, l'étudiant(e) bénéficiera d'un co-encadrement multidisciplinaire CEA-DAM / LULI composé d'expérimentateurs laser et synchrotron, de théoriciens et de géophysiciens, qui lui permettra à la fois de préparer et de réaliser au mieux les différentes campagnes expérimentales citées ci-avant, ainsi que d'analyser ces dernières avec l'aide de simulations hydrodynamiques.

### Directeur de thèse et école doctorale :

BENUZZI-MOUNAIX Alessandra  
alessandra.benuzzi-mounaix@polytechnique.edu  
ED 626 - IP de Paris  
Institut Polytechnique de Paris

### Encadrant :

DENOEUD Adrien  
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00. – adrien.denoed2@cea.fr

## Sujet :

### Physique active des particules énergétiques et des ondes électromagnétiques à orbites bas

#### Contexte :

Avec l'important essor de l'activité spatiale, les états et les sociétés commerciales imaginent, investissent et développent de nouveaux concepts spatiaux pour les télécommunications, la navigation, l'observation et la défense qui sont hautement stratégiques pour les peuples et leurs économies. Ces systèmes sont alors soumis à des menaces, soit naturelles et engendrées par les orages magnétiques, soit potentiellement humaines. Cette thèse va s'intéresser, au plan de la physique, aux effets d'activités électroniques ou électromagnétiques sur des systèmes embarqués, et aux moyens d'y remédier ou d'y résister.

#### Objectif de la thèse :

L'objectif de cette thèse de physique est d'étudier différentes expériences spatiales récentes (e.g. l'émission d'ondes électromagnétiques depuis le satellite DSX) ainsi que leur mesure à distance effectuée depuis des satellites d'observation (e.g. Arase de JAXA, DSX) afin de mieux comprendre les interactions ondes-particules dans l'espace à orbite basse. En particulier, le(a) candidat(e) cherchera à caractériser la propagation des ondes et leurs propriétés ainsi que leurs interactions avec des électrons énergétiques, comme, par exemple, les électrons du milieu ambiant des ceintures de Van Allen. Pour cela, le(a) candidat(e) traitera et analysera un ensemble d'observations spatiales d'ondes électromagnétiques et de particules effectuées récemment (e.g. DSX, Arase) soit en conditions naturelles (du temps calme à l'orage magnétique), soit en condition d'expériences actives. Il(elle) utilisera et développera des codes numériques sophistiqués qui permettront d'analyser les mesures satellites, de comprendre les effets naturels ou provoqués et leurs limites, et de préconiser des moyens de protection.

#### Déroulement de la thèse :

Cette thèse bénéficie d'un co-financement commun DGA-CEA et sera basée au CEA DAM-Ile-de-France. Diplômé d'école d'ingénieur ou de Master 2, le(a) candidat(e) devra posséder de très bonnes bases dans l'une ou plusieurs des disciplines suivantes : physique des plasmas, MHD, science de l'espace, data science, informatique, mathématiques appliquées, ou calcul numérique parallèle. Le cumul de compétences et/ou l'appartenance à une école partenaire de la DGA favorisera la sélection. Le(a) candidat(e) sera amené(e) à interagir avec des membres de missions américaines et japonaises. Maîtrise de l'anglais indispensable.

#### Directeur de thèse et école doctorale :

RIPOLL Jean-François  
jean-francois.ripoll@cea.fr  
ED 572 - Ondes et Matière (OM)  
Université Paris-Saclay

#### Encadrants CEA et DGA :

RIPOLL Jean-François  
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00. – jean-francois.ripoll@cea.fr

POULIGUEN Philippe  
DGA/AID, Balard, 75015 Paris  
Tél. : 09 88 67 17 79 – philippe.pouliguen@intradef.gouv

## Sujet :

### Stabilité d'écoulements d'ablation en fusion par confinement inertiel : réceptivité

#### Contexte :

La fusion par confinement inertiel (FCI) vise à produire de l'énergie à partir de réactions nucléaires de fusion d'éléments légers. Une voie possible pour obtenir les hautes densités et températures nécessaires au déclenchement de ces réactions, consiste à imploser un micro-ballon, rempli d'un mélange fusible, au moyen d'un rayonnement intense. Ce rayonnement provoque une vaporisation violente – ablation – de l'enveloppe du micro-ballon conduisant à l'implosion de celui-ci. La maîtrise des instabilités hydrodynamiques au sein de ces écoulements d'ablation est un élément critique pour parvenir au déclenchement des réactions de fusion et pour la réussite de la FCI. La durée limitée de l'implosion du micro-ballon met en exergue la nécessité d'identifier d'éventuelles amplifications transitoires de perturbations susceptibles de dominer l'écoulement aux temps courts. Une telle identification nécessite l'emploi de méthodes propres à l'analyse de stabilité non-modale (cf. Schmid, Ann. Rev. Fluid Mech. 2007). Ce sujet s'inscrit dans un effort visant une meilleure prédiction des instabilités hydrodynamiques se développant lors de la phase initiale de l'éclairement d'un micro-ballon en FCI. Le caractère instationnaire, compressible et stratifié des écoulements associés impose une approche globale, et donc nécessairement numérique, du problème de stabilité. L'approche suivie, élaborée au cours de thèses précédentes et qui n'a pas d'équivalent dans le domaine, a conduit au développement d'un code de stabilité hydrodynamique à haute résolution (méthode Chebyshev multi-domaine) pour le calcul d'ondes d'ablation auto-semblables instationnaires, servant d'écoulements de base modèles, et de leurs perturbations. Ce code a été récemment enrichi d'une méthode de l'analyse de stabilité non-modale (Varillon, thèse 2019) afin de pouvoir déterminer les perturbations initiales les plus dangereuses, ou perturbations optimales, d'un écoulement donné. On a ainsi pu mettre en évidence, pour une onde d'ablation de type FCI, des amplifications de perturbations plus importantes que celles communément envisagées et qu'aucune autre méthode utilisée auparavant en FCI (analyse de stabilité modale, modélisation ou simulation) n'avait permis d'identifier.

#### Objectif de la thèse :

On propose, pour cette thèse, de rechercher des perturbations optimales de conditions aux limites (problème de réceptivité), plutôt que de conditions initiales. En effet, au cours de son ablation, un micro-ballon est soumis à des sollicitations extérieures, du fait de l'environnement changeant dans lequel il évolue, qui sont susceptibles d'exciter les phénomènes d'amplification transitoire les plus dommageables pour l'écoulement. Il est donc crucial de pouvoir les identifier avant de pouvoir, à terme, envisager des stratégies de contrôle. L'objectif est de mener une étude de réceptivité pour des écoulements représentatifs de l'ablation, par rayonnement X, d'un micro-ballon. La pertinence des résultats obtenus sera ensuite éprouvée dans un contexte plus réaliste, au moyen de simulations multi-physiques d'implosions de micro-ballon. Le sujet est à la croisée de plusieurs disciplines : mécanique des fluides compressibles, physique des plasmas de FCI, analyse de stabilité non-modale, méthodes d'optimisation, méthodes numériques pseudo-spectrales. Du fait de ce caractère multidisciplinaire, l'expérience acquise au cours de la thèse pourra aussi être valorisée dans d'autres domaines que la FCI : par exemple, dynamique des fluides réactifs, mécanique des fluides numérique – que ce soit pour des activités de recherche appliquée ou d'études à caractère industriel – ou encore simulation numérique.

#### Déroulement de la thèse :

Acquisition des notions nécessaires, formulation du problème de réceptivité, implantation dans le code de stabilité (12 à 18 mois).

#### Directeur de thèse et école doctorale :

COUAIRON Arnaud  
arnaud.couairon@polytechnique.edu  
ED 626 - IP Paris  
Institut Polytechnique de Paris

#### Encadrant :

CLARISSE Jean-Marie  
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00 – jean-marie.clarisse@cea.fr



# PHYSIQUE DU SOLIDE, SURFACES ET INTERFACES

### Sujet :

#### Construction *ab initio* d'une équation d'état

##### Contexte :

Établir les propriétés d'un matériau, et cela quelles que soient les températures et pressions, est un des plus grands enjeux de la physique moderne. Lorsque ces données thermodynamiques (expérimentales et/ou théoriques) sont disponibles, il est alors possible de construire une « équation d'état » (EoS). Dans ce cadre, les calculs dits *ab initio* jouent un rôle important car ils permettent de construire cette EoS, même lorsqu'aucune expérience n'est réalisable dans les conditions thermodynamiques explorées. L'une des briques de base de ces EoS est le spectre de phonons (vibrations du réseau). Celui-ci permet d'obtenir de nombreuses grandeurs thermodynamiques (entropie, chaleur spécifique, énergie libre...) nécessaires à la construction de l'EoS. Cependant, le spectre de phonons, comme les autres grandeurs, peut être fortement affecté par la température, autrement dit par des effets dits anharmoniques.

##### Objectif de la thèse :

La dépendance explicite du spectre de phonons vis-à-vis de la température peut aujourd'hui être obtenue au moyen de dynamiques moléculaires *ab initio*. Ces études, bien que coûteuses en ressources de calcul, sont aujourd'hui réalisables, à la fois en raison des avancées théoriques mais aussi grâce aux efforts de développement des outils numériques. En particulier, nous disposons aujourd'hui d'un code de calcul de structure électronique ABINIT capable de profiter efficacement des capacités des supercalculateurs (Curie et TERA-1000) disponibles sur notre centre de recherche. L'objectif de la thèse sera d'obtenir, par calcul *ab initio*, différentes grandeurs thermodynamiques en température d'un matériau d'intérêt (Fe, Ti, U...) puis de construire son EoS.

##### Déroulement de la thèse :

La thèse débutera par un travail théorique d'appropriation des différentes techniques employées : simulations *ab initio*, dynamique moléculaire, calculs de spectres de phonons, construction d'une EoS... Elle se poursuivra par la réalisation des différentes étapes de calculs permettant d'aboutir à la construction d'une EoS d'un matériau (Fe, Ti, U...) présentant de nombreuses phases en pression et température. Selon le profil du(de la) candidat(e), ce travail peut s'accompagner de développements théoriques et d'implémentations afin d'obtenir d'autres grandeurs dérivées nécessaires à la construction d'une EoS.

##### Directeur de thèse et école doctorale :

GENESTE Grégory  
gregory.geneste@cea.fr  
ED 574 - Sciences Chimiques : Molécules, Matériaux,  
Instrumentation et Biosystèmes (2MIB)  
Université Paris-Saclay

##### Encadrant :

BOTTIN François  
CEA/DAM Ile de France - Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00. - francois.bottin@cea.fr

**Sujet :**

**Etude des mécanismes d'adsorption/dégradation de matériaux dopés pour la séparation des gaz rares**

**Contexte :** Le CEA s'intéresse à la mesure de certains gaz rares comme les isotopes radioactifs du xénon qui sont émis vers l'atmosphère lors de divers événements nucléaires et développe ainsi des systèmes de prélèvement et traitement d'échantillons concentrés en gaz rares dans le cadre du système de surveillance international du Traité d'Interdiction Complète des Essais nucléaires (TICE). Par ailleurs, le xénon est un sous-produit important de l'industrie du nucléaire et la récupération sélective du xénon présente des intérêts à plusieurs niveaux. Dans ce cadre, le CEA a récemment mis en place avec Orano des actions pour traiter le xénon. La difficulté du traitement du Xe réside notamment dans sa faible concentration dans les effluents considérés et dans ses caractéristiques chimiques (peu réactif).

La présente thèse s'inscrit notamment dans la continuité de deux thèses (2012-2015 puis 2016-2019) menées au CEA en collaboration avec l'IRCE-Lyon et le LIPhy-Grenoble. La thèse de Ludovic Deliere (2012-2015) a permis de démontrer les capacités exceptionnelles pour l'adsorption du xénon et la séparation des gaz rares de la zéolithe Ag@ZSM5 et d'identifier les mécanismes responsables de l'adsorption. Ce matériau présente en revanche une réactivité vis-à-vis de certains composants de l'air qui lui font rapidement perdre ces propriétés. La thèse d'Arnaud Monpezat (2016-2019) a permis d'identifier les mécanismes responsables de cette dégradation et d'évaluer les méthodes pour s'en affranchir. Elle a également permis d'évaluer les performances dans le cas d'un dopage avec d'autres métaux dopants par une approche utilisant la dynamique moléculaire (DFT) en partenariat avec un autre département du CEA. Le CEA dispose d'une solide expérience dans le domaine de la synthèse de matériaux adsorbants poreux avec le développement de voies de synthèses novatrices. La présente thèse s'appuie donc sur la compétence des laboratoires du CEA ainsi que du CNRS. Elle est complémentaire d'une autre offre de thèse publiée conjointement.

**Objectif de la thèse :** L'objectif de cette étude est de poursuivre la définition du métal dopant et des caractéristiques morphologiques optimales pour l'adsorption du xénon et la stabilité du matériau. Ces résultats permettront d'orienter les conditions de synthèse qui font l'objet du sujet de thèse complémentaire. Dans la continuité des travaux précédents, l'étudiant(e) poursuivra les recherches sur le lien entre la structure, les performances et la stabilité des matériaux. Il a notamment été démontré précédemment qu'à partir de fournisseurs ou même de lots différents d'un fournisseur, une même zéolithe native (ZSM-5), présentant la même composition, pouvait présenter, après échanges à l'argent au CEA, des performances et une stabilité très différente en fonction notamment de l'organisation de la porosité et de la taille des grains. En effet, cette première étude permet d'approfondir la compréhension des interactions métal-soluté en quantifiant la composante chimique et la composante physique (force de dispersion) qui varient en fonction de la nature du métal et de la taille des particules (clusters, nanoparticules). La poursuite de ces travaux doit permettre de sélectionner des métaux ou alliages, de distributions de tailles de particules variables, susceptibles de produire un matériau plus stable et éventuellement plus efficace.

**Déroulement de la thèse :** Cette thèse comprend à égalité une composante expérimentale et de modélisation. Elle s'adresse à un(e) étudiant(e) possédant de solides connaissances en chimie physique et se déroulera au sein du site CEA de Bruyères-le-Châtel. Afin de caractériser les matériaux et leurs performances, l'étudiant(e) a accès à un large panel de techniques d'analyse sur les sites du CEA (Isothermes d'adsorption, DRX, MEB, XAS, RMN,...) ou de ses partenaires (MET, Tomographie, ...). Par ailleurs, les études en DFT qui ont été entreprises à la fin de la thèse précédente permettent de reconsidérer le type de métal à utiliser pour une fonctionnalisation optimale. La poursuite de ces travaux doit permettre de sélectionner des métaux ou alliages, de distributions de tailles de particules variables, susceptibles de produire un matériau plus stable et éventuellement plus efficace.

D'une manière générale, la participation à des congrès et la publication d'articles dans des revues scientifiques de rang A doivent mettre en avant l'expertise acquise par le CEA ces dernières années sur ces sujets très porteurs.

**Directeur de thèse et école doctorale :**

FARRUSSENG David  
david.farrusseng@ircelyon.univ-lyon1.fr  
ED 206 - Chimie (Chimie, Procédés, Environnement)  
Université de Lyon

**Contacts :**

TOPIN Sylvain  
CEA/DAM Ile-de France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon  
Tél. : 01.69.26.40.00. – sylvain.topin@cea.fr

# PHYSIQUE DU SOLIDE

## SURFACES ET INTERFACES

### Sujet :

**Etude des transformations de phase au cours de la solidification et du forgeage d'un acier faiblement allié à haute limite d'élasticité 80 HLES**

### Contexte :

Les aciers faiblement alliés à haute limite d'élasticité présentent d'excellentes caractéristiques mécaniques notamment en résilience et en ténacité du fait de leur microstructure bainitique ou martensitique. Ces aciers sont utilisés pour des applications mécaniquement exigeantes à l'instar du 80 HLES qui est un acier à haute limite d'élasticité soudable développé pour des applications de constructions navales. Au cours de la fabrication de composants, ces aciers subissent plusieurs transformations de phase avec potentiellement plusieurs allers et retours entre différentes phases. Ces allers-retours successifs peuvent impacter la microstructure finale du fait de phénomènes d'héritages lors des transformations de phase. Afin de pouvoir prédire les microstructures finales et donc les propriétés mécaniques des composants, il est nécessaire d'intégrer une modélisation métallurgique dans la modélisation des procédés qui soit capable de prédire l'ensemble des phases générées. Cette démarche est assez récente dans l'industrie et est communément appelée *integrated computational materials engineering* (ICME).

### Objectif de la thèse :

L'objectif de la thèse consiste premièrement en un travail de caractérisation expérimentale des transformations de phase d'un acier 80 HLES. Ce travail alimentera le développement d'un modèle de prévision des microstructures en fonction de chemins thermomécaniques appliqués au matériau. Un lien sera ensuite effectué entre les différentes microstructures obtenues et les propriétés mécaniques faisant ainsi intervenir une transition d'échelle.

### Déroulement de la thèse :

La thèse sera effectuée dans le cadre d'un partenariat avec Aubert & Duval Les Ancizes et l'Institut Jean Lamour à Nancy. Le(a) doctorant(e) sera basé(e) sur le site de Valduc et sera amené(e) en fonction des travaux à mener à réaliser des déplacements sur le site industriel des Ancizes ou sur le campus Artem à Nancy. Dans un premier temps, le(a) doctorant(e) initiera une étude bibliographique des aciers faiblement alliés à haute limite d'élasticité à l'instar des aciers HSLA-80 et HSLA-100. En parallèle, il(elle) établira mesures de transformations de phases du 80 HLES au cours de refroidissements et chauffages contrôlés avec différentes microstructures de départ. A la suite de cela, le(a) doctorant(e) mettra en œuvre une modélisation et un calibrage des transformations de phase du 80 HLES issu d'un brut de fonderie. Il(elle) réitérera ces études sur du 80 HLES ayant subi des opérations de forgeage. La modélisation finale pourra intégrer les aspects liés à la recristallisation ayant lieu au cours du forgeage. La thèse se terminera par la confrontation d'un ou plusieurs cas de validation expérimentale avec la simulation.

### Directeur de thèse et école doctorale :

DENIS Sabine & APPOLAIRE Benoît  
Sabine.denis@univ-lorraine.fr  
Benoit.appolaire@univ-lorraine.fr  
Institut Jean Lamour, Campus Artem  
54011 Nancy Cedex

### Encadrant :

DERANCOURT Victor  
CEA/Valduc – 21120 Is-sur-Tille  
Tél. : 03.80.23.40.00 – victor.derancourt@cea.fr



**CESTA**  
BP 2  
33114 Le Barp  
05 57 04 40 00

**DAM Ile de France**  
Bruyères le Châtel  
91297 Arpajon  
01 69 26 40 00

**Le Ripault**  
BP 16  
37260 Monts  
02 47 34 40 00

**Gramat**  
BP 80200  
46500 Gramat  
05 65 10 54 32

**Valduc**  
21120 Is-sur-Tille  
03 80 23 40 00