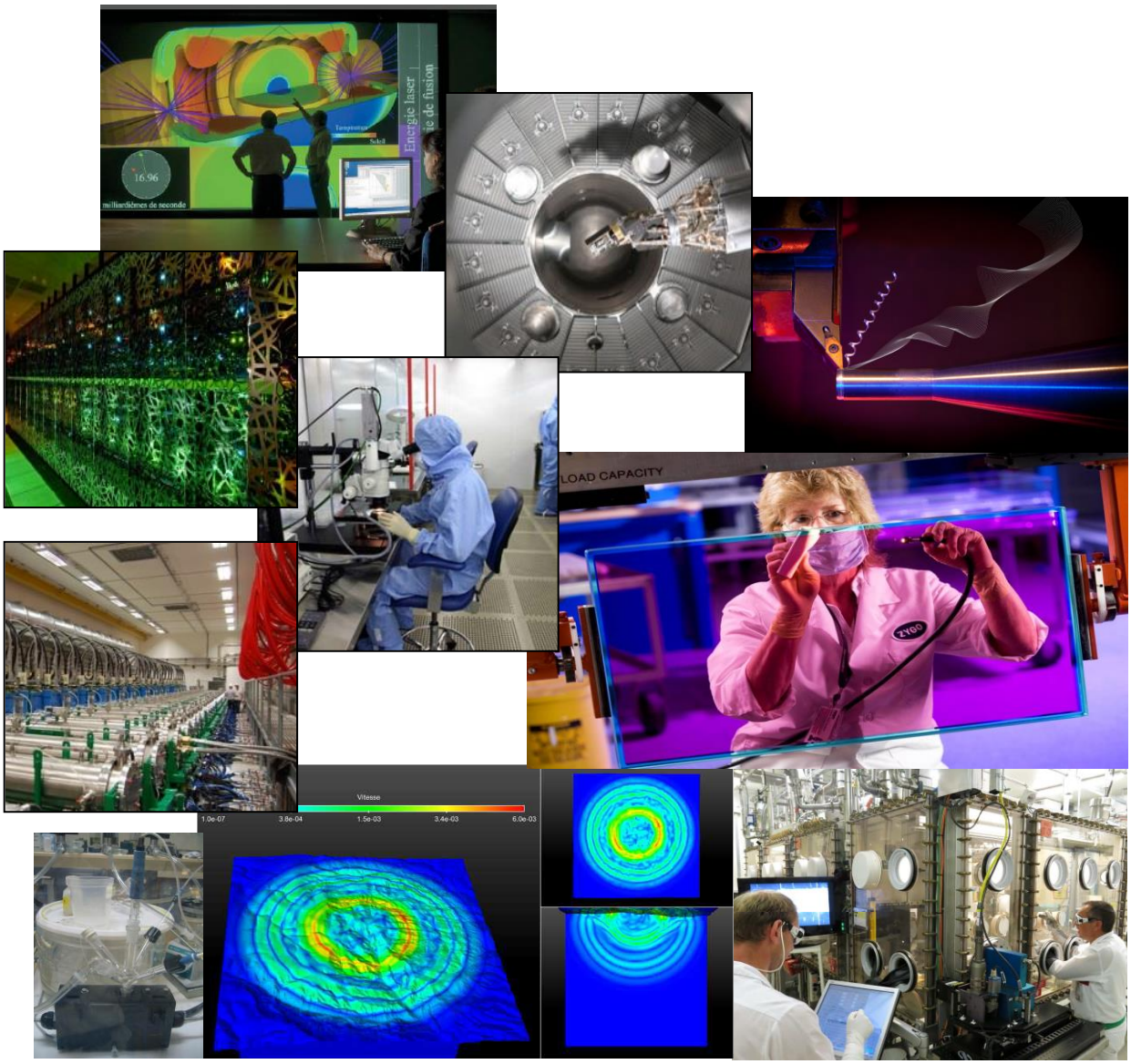
ENGAGEMENT – INTEGRITE – AMBITION – ESPRIT D'EQUIPE – ACCOMPLISSEMENT INDIVIDUEL



POST-DOCTORATS - 2021

PROPOSES AU

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

cea dam

Direction des Applications Militaires

Vous êtes actuellement en thèse et envisager de poursuivre votre carrière en complétant votre formation par un post-doctorat ? Rejoignez la Direction des applications militaires (DAM) du Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA) et ses équipes qui œuvrent, depuis plus de 60 ans, au maintien de la capacité de dissuasion de la France en relevant chaque jour des défis scientifiques et techniques ambitieux.

Vous trouverez dans ce recueil, classé par domaine scientifique, les sujets de post-doctorat proposés par les laboratoires et équipes du CEA/DAM. Dans de très nombreux domaines scientifiques ou techniques, 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 propose des sujets de post-doctorat en lien étroit avec les travaux de recherche et développement menés dans ses cinq établissements (DAM Île-de-France à Bruyères-le-Châtel à proximité d'Arpajon-91, CESTA au Barp près de Bordeaux-33, Gramat à côté de Brive-la-Gaillarde-46, le Ripault à côté de Tours-37 et Valduc à Is-sur-Tille à proximité de Dijon-21).

Vous bénéficierez, pour mener vos travaux, 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 les différents domaines scientifiques, vous pourrez bénéficier 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, ce qui vous constitue un atout formidable pour élargir votre réseau professionnel. Ces collaborations permettent en effet aux scientifiques du CEA/DAM 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 nucléaire.
Vous pourrez également bénéficier, au cours de votre post-doctorat, de formations scientifiques ou techniques complémentaires en lien avec votre thème de recherche et qui seront autant de compétences valorisables pour votre futur parcours professionnel. Le CEA/DAM est en effet expert dans de nombreux domaines de pointe comme la simulation multi-échelles des matériaux, la mécanique des fluides, le calcul hautes performances, la détection sismique, les calculs d'impact, l'élaboration de matériaux spécifiques, l'optique de puissance, l'interaction rayonnement-matière…

L'expertise au meilleur niveau des équipes du CEA/DAM 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 au sein du monde académique, notamment grâce aux collaborations déjà mentionnées avec les meilleures équipes françaises (projets collaboratifs, co-encadrement de thèses, groupes de recherche, laboratoires de recherche conventionnés, unités mixtes de recherche, …) et internationales dans les domaines d'intérêt. Immergé(e) au sein de telles équipes, vous serez fortement incité(e) à valoriser votre travail, au travers de publications dans des revues à comité de lecture mais également de présentations dans des séminaires, congrès, workshops, que ce soit en France ou à l'étranger, afin de donner aux résultats obtenus toute la visibilité qu'ils méritent et ainsi mettre en lumière les compétences et connaissances que vous aurez renforcées ou acquises et qui seront importantes pour votre futur parcours professionnel.

Les perspectives de recrutement au sein du CEA/DAM sont d'ailleurs nombreuses dans les années qui viennent, 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, montrant une capacité à s'engager pour relever des enjeux ambitieux au sein d'équipes pluridisciplinaires, notamment recrutés parmi les viviers constitués grâce à l'accueil de post-doctorant(e)s.

Je vous invite à parcourir avec attention le recueil de sujets que vous trouverez également sur le site Internet du CEA/DAM (http://www-dam.cea.fr/dam/rejoignez-nous/), classé par établissement d'accueil, et sur le site de recrutement du CEA (http://www.emploi.cea.fr/). N'hésitez pas à prendre contact avec les responsables des sujets proposés 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 post-doctorat proposé.

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 équipes et 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

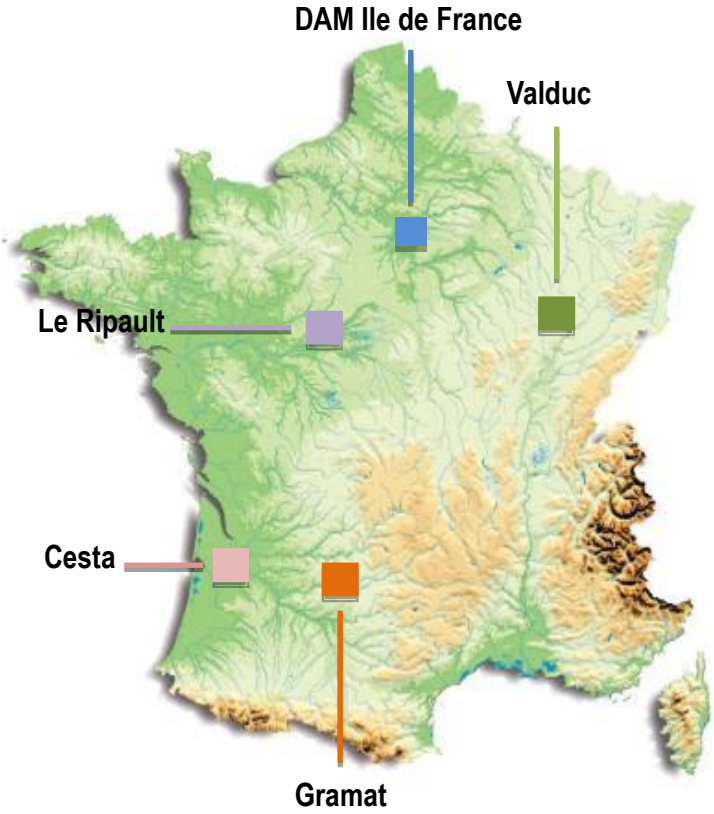
CEA/Cesta **05 57 04 40 00**
B.P. 2
33114 Le Barp
http://www-dam.cea.fr/cesta

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 NouvelleAquitaine, 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 post-doctorats dans le domaine de l'informatique, des mathématiques, de la physique des plasmas, de la physique de la matière condensée, 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

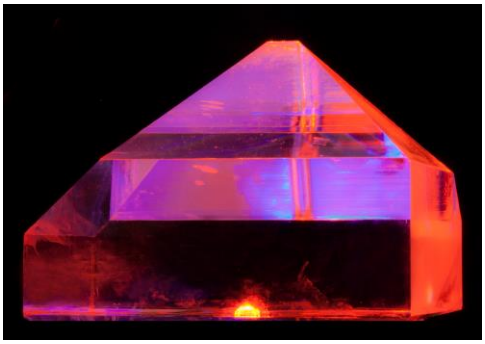
• Lutte contre la prolifération nucléaire

• 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.



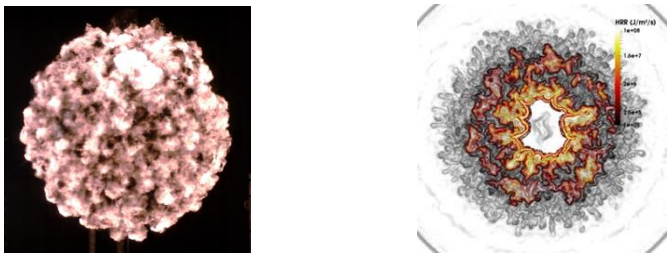
Le CEA/Gramat

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 ses 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.

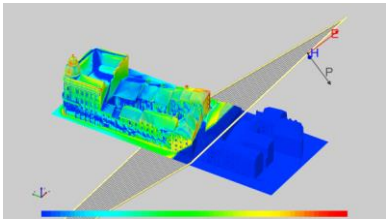


Vue expérimentale et simulation numérique d'une boule de feu (explosif en détonation)

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.



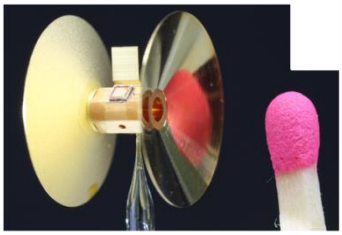
Modélisation électromagnétique d'un quartier de ville

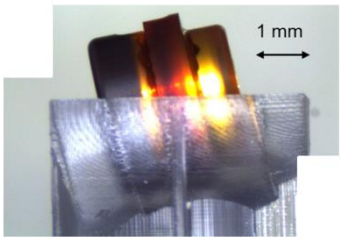
Antenne large bande pour tests électromagnétiques

Les post-doctorats proposés au CEA/Gramat peuvent concerner 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.

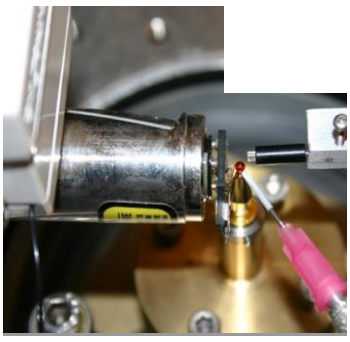
A LA POINTE DE LA SCIENCE ET DE LA TECHNOLOGIE dans des domaines variés : métallurgie, chimie de la purification, physico-chimie des surfaces. Par exemple, les technologies classiques d'usinage et d'assemblage sont poussées aux limites pour réaliser des produits exceptionnels, comme ces cibles destinées 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.

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 !

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 une supervision 24h/24h.

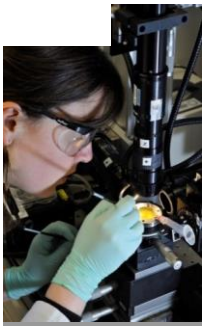
LA PRÉPARATION DE L'AVENIR

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 post-doctorats 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

ELECTROMAGNETISME , GENIE ELECTRIQUE	
Simulation avec un code FDTD, application à la compatibilité électromagnétique : développement d'une démarche de simulation basée sur un code existant, à valider et adapter pour des applications de CEM22	23
MATERIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE	
Simulation de l'interaction entre un impacteur à grande vitesse et un milieu poreux en présence de fluide	30
MATHEMATIQUES - INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE - LOGICIEL	
Algorithme d'aide à la décision pour la maintenance des optiques du LMJ	44
Modélisation et simulation numérique d'écoulements aérodynamiques en régime raréfié hypersonique	45
Développement de méthodes numériques innovantes dédiées à la simulation du comportement, dynamique de matériaux sous sollicitations intenses	46
OPTIQUE & OPTRONIQUE	
Effet thermique dans l'air dans module de pompage diode multi-disques	52

DAM - Ile de France

Bruyères le Châtel
91297 Arpajon

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

CHIMIE	
Développements méthodologiques par spectrométrie de masse à haute résolution en vue de la caractérisation moléculaire de fibres carbone	18
ENVIRONNEMENT	
BIOMIM/HUMIQUE : une approche biomimétique éco-durable pour la remédiation raisonnée de sites pollués	25
INSTRUMENTATION, METROLOGIE & CONTROLE	
Optimisation d'un système de mesure ultra-compact à coïncidence électron/photon pour la détection et la caractérisation de radio-isotopes du xénon	27
MATERIAUX, PHYSIQUE DE SOLIDE	
Caractérisation de l'interaction laser matière en régime confiné avec de très petites taches focales	31
MATHEMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, SIMULATION	
Accélération par GPU d'un code de dynamique des gaz préexistant	47
PHYSIQUE DU NOYAU, DE L'ATOME ET DE LA MOLECULE	
PHOTONUC : Modélisation et simulation numérique des réactions photonucléaires	55
Etude microscopique de l'émission gamma dans les réactions nucléaires induites par neutrons	56
Calcul d'opacités radiatives pour la modélisation des intérieurs stellaires	57
Mise en place de nouvelles méthodes thermodynamiques dans ABINI	58
Modélisation numérique de l'interaction d'un faisceau d'électrons généré par une diode avec un gaz et analyse des phénomènes physiques associés	59
Construction ab-initio d'un diagramme de phases	60
Electron-phonon coupling using DFT based molecular dynamics	61
X-Ray absoption near edge spectroscopy for warm dense matter	62
SCIENCES DU CLIMAT ET DE L'ENVIRONNEMENT	
Réponse d'instabilité gravitaire à des sollicitations statiques et dynamiques. Application à l'atoll de Mururoa (Polynésie française)	64
Variabilité spatio-temporelle de l'organisation des écoulements des différents compartiments de l'aquifère karstique par analyse des réponses naturelles : développement méthodologique appliqué au système de l'Ouysse	65
Data mining : indexation de signaux et recherche rapide de doublets	66
Simulation des ondes de gravité dans la moyenne atmosphère avec le modèle ICON : évaluation et amélioration du modèle à l'aide d'observations infrasonores	67
Méthodes d'éléments finis non conformes pour la simulation de la propagation d'ondes sismo-acoustiques	68
Analyse de source et séparation d'ondes sismiques à partir d'une base de signaux de rotation et de déformation	69

GRAMAT

B.P. 80200
46500 Gramat

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

INSTRUMENTATION, METROLOGIE & CONTROLE	
Traitement de signal par Deep learning pour des applications en vélocimétrie	28
MECANIQUE ET THERMIQUE	
Développement d'outils de morphologie mathématique adaptés à l'analyse de champs thermodynamiques obtenus par simulation numérique de microstructures de matériaux granulaires	49

LE RIPAULT

B.P. 16
37260 Monts

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

CHIMIE	
Etude microstructurale de matériaux polymères et composites organiques	19
Elaboration et étude de céramiques monolithiques multiphasées	20
MATERIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE	
Microstruturation de couches minces d'oxydes magnétiques par procédés laser	32
Elaboration et étude de composites à matrice céramique par impression 3D	33
Simulation de la transition-choc détonation dans des explosifs refroidis ou pré-chauffés	34
Elaboration de matériaux composites à matrice céramique	35
Conception et élaboration de matériaux diélectriques compressibles	36
Rôle des interfaces dans la modélisation du comportement thermomécanique d'un composite carbone-carbone	37
Caractérisations microstructurales de composites à renfort carbone	38
Analyse d'image par deep learning de la microstructure de matériaux céramiques	39
Apprentissage automatique en science des matériaux	40
MECANIQUE & THERMIQUE	
Ecoulement diphasique compressible et réactif – transition à la détonation	50
OPTIQUE & OPTRONIQUE	
Réalisation d'un banc de mesure de réflectivité dans le domaine de l'infrarouge pour des pièces en forme	53

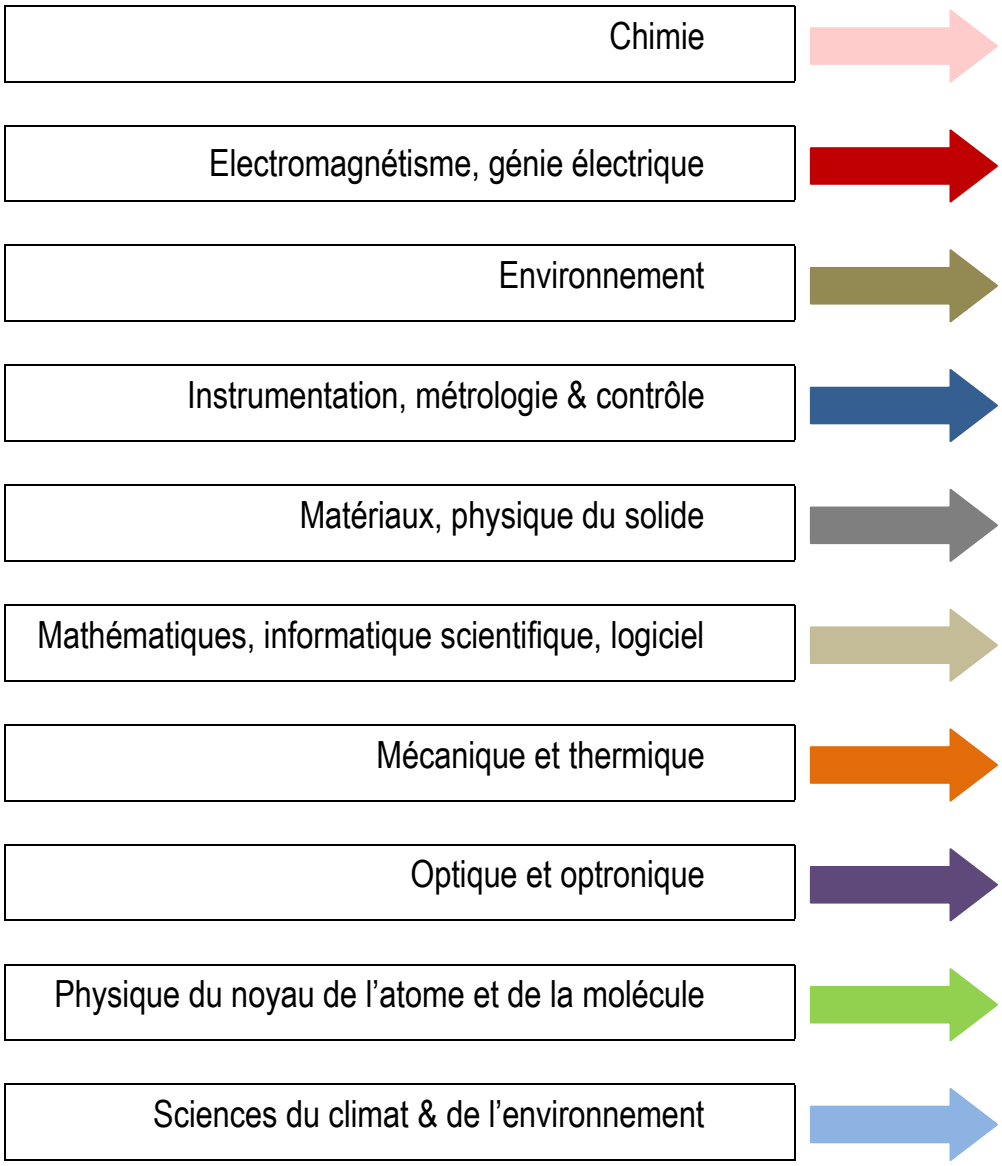
VALDUC

21120 Is-sur-Tille

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

CHIMIE	
Comportement en entreposage de produits contenant des actinides : étude des dégagements gazeux	21
MATERIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE	
Etude in situ des mécanismes d'adsorption de molécules gazeuses et d'apparition de produits de corrosion sur matériaux métalliques par PM-IRRAS (spectroscopie infrarouge de réflexion-absorption par modulation de polarisation)	41
Simulation thermodynamique et cinétique des transformations de phase par la méthode CALPHAD	42

Les thématiques



L'ensemble des sujets, sous forme de recueil, est disponible sur le site Internet du CEA/DAM :
http://www-dam.cea.fr/dam/index.html

Les sujets, classés par centre, sont consultables sur le site internet du CEA/DAM :
http://www-dam.cea.fr/dam/rejoignez-nous.html - rubrique « thèses/post-doctorats »

Vous y trouverez, aussi, pour chacun des centres, des éléments sur ses activités et des informations pratiques.
Ou par recherche libre sur :
https://www.emploi.cea.fr

Table des matières

CHIMIE 17

Développements méthodologiques par spectrométrie de masse à haute résolution en vue de la caractérisation moléculaire de fibres de carbone 18

Etude microstructurale de matériaux polymères et composites organiques 19

Elaboration et étude de céramiques monolithiques multiphasées 20

Comportement en entreposage de produits contenant des actinides : étude des dégagements gazeux 21

ELECTROMAGNETISME, GENIE ELECTRIQUE 22

Simulation avec un code FDTD, application à la compatibilité électromagnétique : développement d'une démarche de simulation basée sur un code existant, à valider et adapter pour des applications de CEM 23

ENVIRONNEMENT 24

BIOMIM'HUMIQUE : Une approche biomimétique éco-durable pour la remédiation raisonnée de sites pollués 25

INSTRUMENTATION, METROLOGIE & CONTRÔLE 26

Optimisation d'un système de mesure ultra-compact à coïncidence électron/photon pour la détection et la caractérisation de radio-isotopes du xénon 27

Traitement de signal par Deep Learning pour des applications en vélocimétrie 28

MATERIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE 29

Simulation de l'interaction entre un impacteur à grande vitesse et un milieu poreux en présence de fluide 30

Caractérisation de l'interaction laser matière en régime confiné avec de très petites taches focales 31

Microstructuration de couches minces d'oxydes magnétiques par procédés laser 32

Elaboration et étude de composites à matrice céramique par impression 3D 33

Simulation de la transition-choc détonation dans des explosifs refroidis ou pré-chauffés 34

Elaboration de matériaux composites à matrice céramique 35

Conception et élaboration de matériaux diélectriques compressibles 36

Rôle des interfaces dans la modélisation du comportement thermomécanique d'un composite carbone-carbone 37

Caractérisations microstructurales de composites à renfort carbone 38

Analyse d'image par deep learning de la microstructure de matériaux céramiques 39

Apprentissage automatique en science des matériaux 40

Etude in situ des mécanismes d'adsorption de molécules gazeuses et d'apparition de produits de corrosion sur matériaux métalliques par PM-IRRAS (spectroscopie infrarouge de réflexion-absorption par modulation de polarisation) 41

Simulation thermodynamique et cinétique des transformations de phase par la méthode CALPHAD 42

MATHEMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL 43

Algorithme d'aide à la décision pour la maintenance des optiques du LMJ 44

Modélisation et simulation numérique d'écoulements aérodynamiques en régime raréfié hypersonique 45

Développement de méthodes numériques innovantes dédiées à la simulation du comportement dynamique de matériaux sous sollicitations intenses 46

Accélération par GPU d'un code de dynamique des gaz préexistant. 47
MECANIQUE & THERMIQUE 48
Développement d'outils de morphologie mathématique adaptés à l'analyse de champs thermodynamiques obtenus par simulation numérique de microstructures de matériaux granulaires 49
Ecoulement diphasique compressible et réactif - transition à la détonation 50
OPTIQUE & OPTRONIQUE 51
Effet thermique dans l'air dans un module de pompage diode multi-disques 52
Réalisation d'un banc de mesure de réflectivité dans le domaine de l'infrarouge pour des pièces en forme 53
PHYSIQUE DU NOYAU DE L'ATOME & DE LA MOLECULE 54
PHOTONUC : Modélisation et simulation numérique des réactions photonucléaires 55
Etude microscopique de l'émission gamma dans les réactions nucléaires induites par neutrons 56
Calcul d'opacités radiatives pour la modélisation des intérieurs stellaires 57
Mise en place de nouvelles méthodes thermodynamiques dans ABINIT 58
Modélisation numérique de l'interaction d'un faisceau d'électrons généré par une diode avec un gaz et analyse des phénomènes physiques associés 59
Construction ab initio d'un diagramme de phases 60
Electron-phonon coupling using DFT based molecular dynamics 61
X-Ray absorption near edge spectroscopy for warm dense matter 62
SCIENCES DU CLIMAT & DE L'ENVIRONNEMENT 63
Réponse d'instabilité gravitaire à des sollicitations statiques et dynamiques. Application à l'atoll de Mururoa (Polynésie française) 64
Variabilité spatio-temporelle de l'organisation des écoulements des différents compartiments de l'aquifère karstique par analyse des réponses naturelles : développement méthodologique appliqué au système de l'Ouysse 65
Data mining : indexation de signaux et recherche rapide de doublets 66
Simulation des ondes de gravité dans la moyenne atmosphère avec le modèle ICON : évaluation et amélioration du modèle à l'aide d'observations infrasonores 67
Méthodes d'éléments finis non conformes pour la simulation de la propagation d'ondes sismo-acoustiques 68
Analyse de source et séparation d'ondes sismiques à partir d'une base de signaux de rotation et de déformation 69

CHIMIE

CHIMIE

SPECIALITE : CHIMIE ANALYTIQUE

Sujet :

Développements méthodologiques par spectrométrie de masse à haute résolution en vue de la caractérisation moléculaire de fibres de carbone

Contexte :

Les fibres de carbone, par leurs propriétés mécaniques et leurs faibles masses, entrent dans la réalisation de composites qui interviennent aujourd'hui dans des domaines aussi variés que le sport, l'industrie (transport, nucléaire, robotique, biomédical…) ainsi que l'aéronautique et le domaine spatial. En effet, ces fibres constituent souvent le renfort de choix pour la majorité des applications qui nécessitent de concilier légèreté et performances.

Les propriétés mécaniques des fibres de carbone dépendent souvent de la topologie et de la chimie de surface de la fibre. Lors des étapes de fabrication des fibres, une couche d'ensimage (sizing en anglais) est notamment déposée à leur surface. Celle-ci est constituée de petites molécules dont le rôle est d'améliorer l'interaction entre la fibre et la matrice. La constitution de ces couches d'ensimage étant spécifique à chaque producteur de fibre, la caractérisation moléculaire de cette couche serait un excellent moyen de classification d'une fibre.

Objectif :

Le(a) postdoctorant(e) sera en charge de développer de nouvelles méthodologies de caractérisation moléculaire d'échantillons de fibres de carbone d'intérêt pour les applications du laboratoire à l'aide de la spectrométrie de masse à haute (Q-TOF) et très haute résolution (Orbitrap). Il/elle sera également en charge de développer un modèle de classification d'échantillons de fibres de carbone en fonction de leurs propriétés mécaniques et de leur composition chimique par analyses à composantes principales (ACP) via le logiciel chimiométrique LiveID.

Le CEA fournira les échantillons de fibres de carbone à analyser. Le laboratoire dispose d'un ensemble de spectromètres de masse couplés à de la chromatographie en phase liquide et à de la chromatographie en phase gazeuse. Les composés organiques de nature volatile seront analysés avec un système de chromatographie en phase gazeuse couplé à la spectrométrie de masse haute résolution à temps de vol munie d'une cellule de collision (GC/Q-TOF). Nos techniques d'analyse possèdent une sensibilité suffisante pour détecter des éléments à l'état de traces (au niveau du sub-ppb) dans de très petits échantillons. Par ailleurs, les composés semi volatils ou non volatils pourront être caractérisés par la spectrométrie à transformée de Fourier de type Orbitrap, ou par la chromatographie en phase liquide couplée à de la mobilité ionique et de la spectrométrie de masse à temps de vol (LC/QTOF). Celles-ci étant couplées au laboratoire à des sources d'ionisation ambiantes telles que le DART (Direct Analysis in Real Time), l'ASAP (Atmospheric Solid Analysis Probe), l'ESI (ElectroSpray Ionisation), l'APPI (Atmospheric Photoionisation), l'APCI (Atmospheric Pressure Chemical Ionisation) ou encore l'AP-MALDI (Atmospheric Pressure Matrix Assisted Laser Desorption Ionisation). Toutes ces sources d'ionisation sont interchangeables très rapidement (car fonctionnant à pression atmosphérique) et permettent de caractériser les échantillons solides, liquides et gazeux en temps réel.

Contact :

BRIDOUX Maxime
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon
Tél. : 01.69.26.40.40. – maxime.bridoux@cea.fr

CHIMIE

SPECIALITE : PHYSICO-CHIMIE

Sujet :

Etude microstructurale de matériaux polymères et composites organiques

Contexte :

Situé à 15 km de Tours, le centre du CEA Le Ripault concentre tous les métiers et compétences scientifiques et techniques pour la mise au point de nouveaux matériaux, depuis leur développement (conception, synthèse, sécurité et fiabilité d'emploi) jusqu'à leur industrialisation (procédés de mise en œuvre et intégration système).
Les matériaux polymères et composites à base de polymère sont utilisés dans une grande variété d'applications. Les polymères souvent chargés peuvent servir de joints, de colle ou de matériaux de calage. Les composés énergétiques développés à la DAM sont des matériaux composites comportant un constituant organique nitré et un liant polymère. Les propriétés de ces matériaux organiques sont intimement liées à leur microstructure, de l'échelle de la molécule à celle des grains de matière qui les constituent. Connaître cette microstructure est essentielle pour améliorer notre compréhension des liens structure propriété et affiner les modèles numériques du comportement.

Objectif :

L'objet du stage postdoctoral sera d'acquérir des données structurales sur divers matériaux et composés en lien avec les problématiques de procédés de fabrications, de cycle de vie et de modélisation du comportement. On s'intéressera en particulier à :

- La morphologie et la répartition du liant dans les composites en déterminant les dimensions caractéristiques, la dimensionnalité, et la répartition des domaines occupés par le polymère par diffusion de spin en spectrométrie RMN du solide et par Microscopie électronique (MEB et EDS)
- La cartographie d'orientations cristallines de surface par la technique EBSD
- La porosité dans les composites, la dynamique des polymères en solide et en solution et leur interaction avec une charge

Ces travaux s'inscrivent dans la continuité d'une thèse réalisée au laboratoire. Certains aspects en RMN solide et en dynamique moléculaire font également l'objet de collaborations avec d'autres laboratoires du CEA et du CNRS.

Contact :

PALMAS Pascal
CEA/Le Ripault – BP16 - 37260 Monts
Tél. : 02.47.34.40.00 – pascal.palmas@cea.fr

CHIMIE

SPECIALITE : MATERIAUX CERAMIQUES

Sujet :

Elaboration et étude de céramiques monolithiques multiphasées

Contexte :

Le CEA/DAM mène depuis plusieurs années, avec des partenaires industriels et académiques, des études sur les protections thermiques à base de matériaux Composites à Matrice Céramiques (CMC ; tels que les C/C, C/SiC, SiC/SiC, oxydes/oxydes) pour améliorer leurs performances.

L'étude proposée porte sur la mise au point d'un matériau présentant des propriétés physiques similaires aux composites SiO_2 / SiO_2 tout en étant plus réfractaire, avec une température de fusion supérieure à 1700 °C. Il devra en outre posséder une bonne résistance à l'oxydation, des propriétés diélectriques adaptées et une ténacité élevée. Les travaux de recherche se focaliseront sur la famille des matériaux céramiques monolithiques multiphasés. Les résultats acquis au travers de cette étude pourraient amener le candidat à collaborer sur d'autres travaux portant sur l'élaboration de composites à matrice céramique.

Objectif :

Ce sujet débutera par une phase d'étude bibliographique qui amènera à sélectionner un ou plusieurs matériaux d'intérêt parmi les céramiques monolithiques à base de nitrure ou oxydes (ou mélange de ces composants).

Ces matériaux seront ensuite élaborés par mélange de poudres, mise en forme par pressage isostatique, frittage de type Hot Pressing, SPS, GPS et/ou microonde. La microstructure des matériaux devra être caractérisée, de même que leurs propriétés thermiques, mécaniques, diélectriques et physico-chimiques.

L'accent sera mis sur la compréhension de l'influence des paramètres d'élaboration et de la microstructure sur les propriétés finales des matériaux.

Enfin, des mises au point de suspensions de poudres céramique ou utilisation de précurseurs précéramiques pourront être menées dans l'objectif de contribuer à l'élaboration de composites fibreux.

Contact :

BEAUDET SAVIGNAT Sophie
CEA/Le Ripault – BP16 - 37260 MONTS
Tél. : 02 47 34 40 00 - sophie.beaudet-savignat@cea.fr

CHIMIE

SPECIALITE : PHYSICO CHIMIE

Sujet :

Comportement en entreposage de produits contenant des actinides : étude des dégagements gazeux

Contexte :

Un programme d'étude a été initié au CEA/Valduc afin de mieux comprendre et de mieux maîtriser les dégagements gazeux pouvant survenir lors de l'entreposage de produits contenant des actinides.

Pour cela, plusieurs actions ont été entreprises et doivent être approfondies :

- Un modèle a été initié, qui prend en compte la production de gaz de radiolyse et les échanges gazeux entre les différentes parois des conteneurs d'emballage.
- Deux dispositifs de mesure sur produits réels sont opérationnels.
- Des moyens de mesure ont été nucléarisés afin de caractériser les produits étudiés (MEB, DRX, ATG/DSC par exemple).

Objectif :

L'objectif principal de ce stage post-doctoral est de disposer d'un modèle prédictif fiable (élaboré sous Matlab) validé par des données expérimentales sur les gaz générés par la radiolyse alpha. En particulier, le(la) candidat(e) retenu(e) devra enrichir le modèle existant en intégrant la contribution des gaz générés par la radiolyse de l'eau contenue dans les produits, et de caractériser finement certains produits réels.

Contacts :

Benoît CLAUX
CEA centre de Valduc, 21120 Is-sur-Tille
Tél. : 03 80 23 40 00 – benoit.claux@cea.fr

ELECTROMAGNETISME, GENIE ELECTRIQUE

ELECTROMAGNETISME, GENIE ELECTRIQUE
SPECIALITE : ELECTROMAGNETISME

Sujet :

Simulation avec un code FDTD, application à la compatibilité électromagnétique : développement d'une démarche de simulation basée sur un code existant, à valider et adapter pour des applications de CEM

Contexte :

Dans le cadre de la montée en régime des capacités de simulation au CESTA, il est prévu de développer l'utilisation de la simulation numérique tri-dimensionnelle prédictive sur le supercalculateur pétaflopique Téra 1000 dans le domaine de la CEM. Le CEA/DAM dispose d'un code développé en interne potentiellement en mesure de répondre au besoin de simulation appliquée à la CEM : le code Sophie, qui résout les équations d'évolution de Maxwell Ampère et Faraday couplées de manière auto-consistante à l'équation de Vlasov qui régit l'évolution de particules chargées. Ce code est basé sur la méthode FDTD ; il est utilisé depuis dix ans dans le domaine des impulsions électromagnétiques générées par l'interaction rayonnement-matière, et est déjà validé sur un certain nombre de configurations dans d'autres contextes que la CEM. Il est capable de traiter des calculs comportant des centaines de milliards de mailles sur plusieurs milliers de processeurs en des temps raisonnables, grâce à un parallélisme hybride MPI et OpenMP.

Objectif :

L'objectif de ces travaux est de proposer, justifier et mettre en oeuvre des méthodes de validation de l'utilisation du code Sophie pour la résolution de problèmes de CEM. Pour cela, le(a) post-doctorant(e) s'appropriera les schémas et algorithmes du code Sophie de résolution des équations de Maxwell (sans l'équation de Vlasov), et prendra en compte le besoin défini par l'ingénieur en charge de la garantie de la fonction tenue aux environnements électromagnétiques. Il est envisageable dans un second temps de définir des modèles et algorithmes physico-numériques complémentaires à mettre en place dans le code Sophie, puis de les y implémenter.

Après une prise en main du code, le post-doctorant :

- simulera des cas de calcul représentatifs de problèmes d'électromagnétisme (par exemple, le couplage d'ondes électromagnétiques avec des lignes de transmission simples puis complexes et multiples, ou la pénétration de champs magnétiques basses fréquence dans des cavités métalliques non assimilables à des conducteurs parfaits),

- comparera les résultats obtenus avec des données de référence pertinemment choisies,

- établira les paramètres d'emploi du code pour résoudre les problèmes de CEM,

- pourra le cas échéant compléter les modèles de Sophie par des développements spécifiques (par exemple, fils non rectilignes, jonctions entre fils).

Contacts :

CESSENAT Olivier & ZUBER Céline
CEA/Cesta – BP 2 - 33114 Le Barp
Tél. : 05 57 04 40 00
olivier.cessenat@cea.fr – celine.zuber@cea.fr

ENVIRONNEMENT

ENVIRONNEMENT

SPECIALITE : PROTECTION DE L'ENVIRONNEMENT

Sujet :

BIOMIM'HUMIQUE : Une approche biomimétique éco-durable pour la remédiation raisonnée de sites pollués

Contexte :

Le projet BIOMIM'HUMIQUE propose d'associer les propriétés naturellement chélatantes des substances humiques (SH) extraites de composts issus de déchets (favorisant ainsi les préceptes d'une économie circulaire) à celles de catalyseurs biomimétiques afin de développer une nouvelle voie, écoresponsable et durable de remédiation de sols et d'effluents contaminés. Les SH sont des associations supramoléculaires de petites molécules hétérogènes aux propriétés amphiphiles, qui s'organisent en domaines pseudo-micellaires dans des solutions aqueuses). Lorsque les composés organiques récalcitrants hydrophobes adsorbés sur les surfaces des particules solides du sol entrent en contact avec des solutions humiques, ils se répartissent de préférence dans les domaines hydrophobes humiques, étant ainsi éliminés du sol. Parallèlement, les groupes fonctionnels acides des substances humiques peuvent complexer les métaux lourds présents dans le sol et ainsi les extraire. Par ailleurs, l'utilisation combinée de substances humiques et de catalyseurs biomimétiques augmente de manière significative le rendement d'extraction de certains polluants. En effet, l'efficacité de ces lavages des sols par les substances humiques est similaire à celle obtenue par l'utilisation de tensioactifs synthétiques. Cependant, l'utilisation de ces derniers présente le grave inconvénient de détruire la microflore du sol, condamnant ainsi le sol à être évacué vers un site d'élimination. Inversement, l'utilisation de solutions humiques d'une part n'abîme pas le biote du sol, et d'autre part favorise une atténuation naturelle supplémentaire des contaminants organiques restants par l'ajout de carbone métaboliquement assimilable par les sols. Outre l'efficacité, la rapidité et l'éco-durabilité, un autre avantage du lavage humique des sols est qu'il peut être mis en œuvre directement sur site et que les sols, après traitement, conservent leurs propriétés physiques, chimiques et biologiques et peuvent donc être replacés dans leur emplacement d'origine.

Objectif :

Différents types de composts seront caractérisés d'un point de vue géochimique en utilisant une méthodologie de type « huméomique », à l'aide de la résonnance magnétique nucléaire (RMN) du carbone (^{13}C) et du proton (^{1}H) en 1 et 2 dimensions ainsi que de la spectrométrie de masse à haute résolution (ESI et APPI-Orbitrap-MS) et de la chromatographie gazeuse couplée à la spectrométrie de masse haute résolution (GC-QTOF MS), afin de déterminer la nature moléculaire des substances humiques extraites des différents composts. Le lavage des sols contaminés se fera en deux étapes. La première consiste en un lavage des radionucléides et/ou des polluants organiques avec les SH. La deuxième étape consistera en une copolymérisation catalytique des contaminants résiduels dans les superstructures humiques. Cette deuxième étape fera donc intervenir un catalyseur biomimétique. Le catalyseur biomimétique choisi est une porphyrine métallique soluble dans l'eau synthétique qui pourra être utilisée soit avec un oxydant (H_2O_2) ou sous irradiation solaire. Nous pensons plus particulièrement aborder l'utilisation de porphyrine de fer solubles qui agissent comme catalyseurs du couplage covalent de certains polluants organiques du sol avec les fragments phénoliques des substances humiques exogènes compte-tenu de la nature particulière des polluants d'intérêt (composés organonitrés et leurs produits de dégradation biotiques et abiotiques). L'efficacité des lavages de sols contaminés sera tout d'abord déterminée à l'échelle du laboratoire, sur les polluants d'intérêt pour les applications du CEA (radionucléides et composés organonitrés), en utilisant un panel de sols pollués aux caractéristiques et aux niveaux de pollution variés. Par ailleurs, les effluents liquides contenant les polluants seront également caractérisés par RMN et SMHR afin de mieux comprendre la nature des complexes formés entre les molécules chélatantes issues des composts et les polluants organiques et inorganiques pour, in fine, élaborer une stratégie d'épuration des effluents sur colonne échangeuse d'ions.

Contact :

BRIDOUX Maxime
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon
Tél. : 01.69.26.40.40. – maxime.bridoux@cea.fr

INSTRUMENTATION, METROLOGIE & CONTRÔLE

INSTRUMENTATION, METROLOGIE & CONTROLE

SPECIALITE : METROLOGIE DES RAYONNEMENTS

Sujet :

Optimisation d'un système de mesure ultra-compact à coïncidence électron/photon pour la détection et la caractérisation de radio-isotopes du xénon

Contexte :

Dans le cadre du Traité d'Interdiction Complète des Essais nucléaires (TICE), le CEA a en charge l'exploitation de dispositifs nommés SPALAX (Système de Prélèvement d'Air en Ligne avec l'Analyse des radioxénons atmosphérique) qui analysent automatiquement les isotopes radioactifs du xénon, produits lors d'activités nucléaires. Le procédé peut être divisé en plusieurs étapes. La première étape d'échantillonnage consiste en un prélèvement continu d'air et en un traitement au travers de membranes de perméation. Le gaz est ensuite envoyé vers l'étage de purification qui consiste en un jeu de colonnes de charbons actifs ayant pour objectif de concentrer le xénon et d'éliminer le radon. Le gaz purifié est concentré autant que possible en xénon sur des colonnes d'adsorbant (tamis moléculaires) avant la détection des radioxénons (Xe131m, Xe133, Xe133m et Xe135) par spectrométrie γ haute résolution.
L'utilisation (i) d'un nouveau matériau adsorbant et (ii) d'un système de détection avec une grande efficacité, permet d'envisager l'allégement, la réduction de la taille des systèmes existants et la diminution de sa demande en énergie.
Afin d'effectuer des mesures sur le terrain, le CEA/DAM Ile de France a commencé le développement des systèmes de type SPALAX simplifiés et compacts. Les premiers travaux, menés lors d'une thèse de doctorat débutée en 2016, ont permis de définir une géométrie de mesure compacte dans laquelle est injecté le gaz. La détection est assurée par un ensemble de deux wafers composés de 4 détecteurs au silicium chacun, placés à l'intérieur de la chambre de mesure en vue de détecter les électrons émis par les différents radioxénons et de deux scintillateurs NaI(Tl), placés à l'extérieur de la chambre de mesure et utilisés pour mesurer les photons X et γ émis lors de la désintégration des radioxénons.
Les signaux électron et photon sont mesurés en coïncidence ce qui permet une identification sans ambiguïté des radioxénons présents dans la chambre de mesure. L'électronique associée est composée de 3 modules numériques Pixie-Net de 4 voies synchronisés en temps via le protocole PTP.

Objectif :

L'objectif du post-doctorat est de continuer les développements logiciels nécessaires à l'analyse et à l'interprétation de signaux collectés dans l'ensemble des détecteurs. En particulier des techniques d'analyse de formes de signaux (Pulse Shape Analysis) pourront être étudiées en vue de discriminer l'origine des différents évènements. Par ailleurs, l'analyse pourra s'appuyer sur des simulations Monte-Carlo utilisant Geant4. Le retour d'expérience sur le dispositif de mesure permettra de proposer des améliorations pour la réalisation d'un second prototype.

Les résultats d'intérêt donneront lieux à des publications scientifiques dans des revues de rang A.

Contact :

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

INSTRUMENTATION, METROLOGIE & CONTROLE

SPECIALITE : METROLOGIE DES RAYONNEMENTS

Sujet :

Traitement de signal par Deep Learning pour des applications en vélocimétrie

Contexte :

Dans le domaine de la physique des chocs ou plus généralement de l'étude du comportement dynamique des matériaux, l'interférométrie Doppler de type VISAR (Velocity Interferometer System for Any Reflector), développé dans les années 1970, a représenté une avancée considérable. Des phénomènes rapides (quelques nanosecondes à quelques microsecondes) et à grande vitesse (plusieurs centaines de mètres par seconde) pouvaient alors être mesurés. Ces systèmes ont évolué au fil des ans, donnant lieu à différentes générations d'équipements et à de nombreux développements. L'apparition de composants optiques fibrés dans le domaine des télécommunications a facilité la réalisation de systèmes Vélocimétrie Hétérodyne (VH, aussi dénommé Interférométrie Doppler Fibré ou Photonic Doppler Velocimetry en anglais). Ces systèmes offrent de nombreux avantages en termes d'exactitude et de reproductibilité des mesures. L'une des orientations du CEA-Gramat sur les recherches et développements actuels porte sur la mise à niveau de l'outil de traitement du signal par l'ajout d'une méthode basée sur le « deep learning ». Les techniques de « deep learning » connaissent actuellement un vif succès dans le domaine de la reconnaissance d'objet(s) dans des images ou des vidéos. Ces techniques peuvent aussi être utilisées dans le traitement de signaux expérimentaux complexes avec pour but d'alléger les temps de calculs et également gagner en performance.

Objectif :

L'objectif de ce post-doc est de développer une solution adaptée pour traiter des signaux de mesures de vitesse par effet Doppler et de quantifier l'erreur résiduelle sur la mesure de vitesse.

Ce travail reprendra un premier travail réalisé récemment au CEA/Gramat. Le(a) candidat(e) effectuera une analyse du besoin et des performances requises pour nos besoins afin de guider le choix de l'architecture et des algorithmes d'un réseau de neurones. Le développement sera réalisé avec le langage de programmation Python. La base de données pour les phases d'apprentissage du réseau de neurones sera fournie et alimentée avec des données expérimentales et théoriques. Le(a) candidat(e) devra proposer des évaluations numériques de la technique et tester le réseau de neurones. Enfin, l'algorithme développé sera comparé à ceux développés dans nos outils classiques de traitement de signaux et l'estimation des incertitudes sur la mesure d'un profil de vitesse sera réalisée. De bons résultats générés pourraient certainement être publiés dans un article scientifique par le(a) candidat(e).

Un volet expérimental complémentaire est également envisagé avec la validation d'un nouveau système VH mis en œuvre sur des expérimentations de dynamique des matériaux notamment sur un générateur de rampe de compression nommé GEPI (Générateur Electrique de Pressions Intenses) utilisant les Hautes Puissances Pulsées (HPP), qui permet d'atteindre des contraintes maximales de l'ordre de 100 GPa avec des temps de montée caractéristiques de 450-500 ns.

Contact :

BARBARIN Yohan
CEA/GRAMAT – BP80200 – 46500 Gramat
Tél. : 05.65.10.54.32 – yohan.barbarin@cea.fr

MATERIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE

MATERIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE

SPECIALITE : MATERIAUX

Sujet :

Simulation de l'interaction entre un impacteur à grande vitesse et un milieu poreux en présence de fluide

Contexte :

Le CEA/CESTA développe des modélisations mathématiques du comportement de matériaux face à des impacts hypervéloces. Dans le cadre d'une collaboration avec l'IUSTI (Université d'Aix-Marseille) une nouvelle méthode numérique de simulation du comportement d'un solide élasto-plastique en très grandes déformations a été mise au point. Cette méthode numérique eulérienne respecte le principe de l'entropie. La suite de ce projet consiste à prendre en compte la porosité et des inclusions fluides dans cette méthode numérique, afin d'en accroître le périmètre d'utilisation.

Objectif :

L'objectif de ce post-doc est double :

- il s'agira d'une part de prendre en main la modélisation établie par l'IUSTI, qui est dérivée d'un système de relaxation de type Maxwell afin prendre en compte la plastification des grains au travers de la loi de comportement, et d'autre part de contribuer à son couplage avec un modèle multiphasique hyperélastique visco-plastique ;
- un deuxième objectif consistera à élargir le champ d'application du modèle en l'implantant dans un code numérique lagrangien et de comparer les résultats à ceux obtenus en formulation eulérienne. Les applications visées sont la modélisation aux grandes déformations de cratères résultant d'impacts hypervéloces (IHV) sur les matériaux poreux et fragiles.

Ce post-doc se déroulera dans un premier temps à l'IUSTI sur une durée de 6 mois qui permettra la prise en main et le développement des méthodes numériques. La deuxième partie du post-doc, de 12 mois, se déroulera au CESTA afin de valider les méthodes numériques sur des données expérimentales issues d'IHV sur des matériaux poreux, et d'adapter la modélisation à des codes lagrangiens.

Contact :

HALLO Ludovic
CEA/Cesta – BP 2 - 33114 Le Barp
Tél. : 05.57.04.40.00 – ludovic.hallo@cea.fr

MATERIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE
SPECIALITE : PHYSIQUE DU SOLIDE

Sujet :

Caractérisation de l'interaction laser matière en régime confiné avec de très petites taches focales

Contexte :

Le sujet de ce post-doc, proposé dans le cadre du projet ANR ForgeLaser, concerne l'étude de l'interaction laser matière en régime confiné, utilisée pour le traitement industriel des matériaux par choc laser (LSP – Laser Shock Peening). Dans ce régime d'interaction laser-matière particulier, un plasma de haute pression est généré sur une cible irradiée par un laser impulsionnel ns avec des intensités typiques de l'ordre de quelques GW/cm^2. Afin de limiter les énergies laser mises en jeu, la surface de la cible est recouverte d'un matériau (liquide, solide, polymère, …) transparent au rayonnement laser, qui va servir à confiner le plasma. Du fait de la présence du milieu de confinement, la détente de ce plasma est contenue, ce qui a pour effet d'augmenter à la fois la durée et l'amplitude de l'onde de compression induite dans le matériau cible en réaction à la détente du plasma. Cette onde de choc va générer un champ résiduel de contraintes de compression, qui va permettre d'améliorer les propriétés mécaniques du matériau, et d'augmenter sa durée de vie. Afin de s'affranchir des effets thermiques du plasma, qui induisent des contraintes de traction néfastes en extrême surface, la cible est aussi recouverte d'un revêtement thermo protecteur additionnel. Actuellement, seule l'eau est utilisée comme milieu de confinement en configuration industrielle, ce qui empêche l'application du procédé dans bon nombre d'applications. Par ailleurs, l'utilisation d'un revêtement thermo protecteur est aussi un frein à l'utilisation du procédé dans l'industrie aéronautique, et on cherche donc à s'en affranchir.
Dans le cadre du Projet ForgeLaser, il est envisagé d'utiliser un confinement polymère souple associé avec des petites taches focales, permettant de réaliser le traitement par LSP sans revêtement thermo protecteur sur des géométries complexes, telles que des surfaces claustrées.

Objectif :

L'objectif du présent post-doc sera donc d'obtenir une description fine des processus physiques mis en jeu dans ces conditions très particulières d'interaction laser plasma. Les travaux seront basés sur une approche couplée expérience/modélisation. Au niveau théorique, on dispose actuellement d'une chaine de calcul monodimensionnelle, basée sur le code ESTHER développé au CEA, permettant de simuler l'interaction laser-matière et la propagation des chocs induits dans les matériaux. On dispose aussi d'un modèle de plasma homogène permettant de bien rendre compte des effets thermiques induits par le plasma. Des études théoriques et numériques seront entreprises afin de déterminer la méthode optimale permettant de coupler judicieusement ce code d'interaction laser-matière 1D à un code de mécanique multidimensionnel afin de rendre compte correctement des résultats expérimentaux. Par ailleurs, des développements pourront aussi être entrepris dans le modèle de plasma homogène. Ces travaux théoriques devront permettre de déterminer de façon précise les chargements thermo mécaniques induits par le traitement.
Au niveau expérimental, il s'agira de caractériser finement les effets induits par l'utilisation de petites taches focales. Les chargements de pression induits dans ces conditions seront déterminés par vélocimétrie Doppler (VISAR, PDV), et on essayera plus particulièrement de réaliser des mesures résolues spatialement sur toute la tache focale. La détente du plasma dans le milieu de confinement, qui modifie la durée et l'amplitude du choc induit à la surface de la cible, sera caractérisée par visualisation ultra-rapide, à l'aide de caméra CCD intensifiée multi-images. Afin de caractériser les effets thermiques induits, des mesures de température du plasma seront aussi réalisées à l'aide d'un pyromètre multi-spectral (UV, VIS, NIR) en cours de développement au CEA. Des mesures complémentaires de zone affectées thermiquement seront aussi réalisées et comparées aux simulations. Pour terminer, un effort sera aussi entrepris afin de comprendre et mieux maîtriser le renouvellement du matériau de confinement pour évaluer le taux de répétition limite que l'on pourra utiliser au niveau industriel. Les travaux débuteront avec de l'eau comme milieu de confinement de référence, et seront ensuite étendus en fonction des résultats aux matériaux polymères.

Contacts : SOLLIER Arnaud & VIDEAU Laurent
CEA/DAM Ile-de-France - Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon
Tél. : 01.69.26.40.00
arnaud.sollier@cea.fr & laurent.videau@cea.fr

MATERIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE

SPECIALITE : ELABORATION ET CONCEPTION DE MATERIAUX

Sujet :

Microstructuration de couches minces d'oxydes magnétiques par procédés laser

Contexte :

L'élaboration de couches minces d'oxydes magnétiques à haute perméabilité peut se faire par différents procédés dans des conditions douces, compatibles d'applications industrielles comme le blindage d'antennes RF-ID, la suppression du bruit électromagnétique, ou la transmission de puissance sans fil pour les applications mobiles. La microstructuration de ces films minces offre la possibilité de réaliser une réponse magnétique dynamique plus sélective et plus efficace à certaines fréquences (comportement multi bande et non large bande) comme cela a été démontré sur des réseaux de plots ferromagnétiques. Différents procédés laser de patterning peuvent être utilisés : la gravure laser, dans laquelle un laser femtoseconde ablate la matière, ou le frittage sélectif laser, tirés par l'essor de l'impression 3D-SLS, permettant de densifier des dépôts réalisés à partir de particules en limitant la fissuration.

L'objectif de cette étude est d'évaluer la solution la mieux adaptée au besoin sur des couches minces d'oxydes synthétisées au laboratoire, à travers des collaborations avec des entreprises ou des laboratoires spécialisés dans ces procédés.

Objectif :

Le(a) post-doctorant(e) réalisera les dépôts d'oxydes par décomposition thermique en micro onde, fera réaliser des microstructurations en sous-traitance, puis évaluera l'intérêt de la microstructuration par rapport à la réponse magnétique obtenue : il(elle) caractérisera ces propriétés magnétiques à l'aide des moyens de caractérisations disponibles au laboratoire. De l'imagerie magnétique (MFM ou microscopie magnétique à centre NV) pourra être également réalisée en collaboration avec les équipes compétentes, pour interpréter les propriétés dynamiques observées. Les compétences demandées pour ce travail sont : des compétences en élaboration de matériaux oxydes en couches minces, en techniques de caractérisation microstructurales et morphologiques classiques des matériaux (MEB, MET). Des connaissances en magnétisme seraient un plus.

Contact :

ADENOT-ENGELVIN Anne-Lise
CEA/Le Ripault – BP 16 - 37260 Monts
Tél. : 02.47.34.40.00 – anne-lise.adenot-engelvin@cea.fr

MATERIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE
SPECIALITE : CHIMIE

Sujet :

Elaboration et étude de composites à matrice céramique par impression 3D

Contexte :

Le CEA/DAM mène depuis plusieurs années, avec des partenaires industriels et académiques, des études sur les protections thermiques à base de matériaux composites à matrice céramiques (CMC ; tels que les C/C, C/SiC, SiC/SiC, oxydes/oxydes) pour améliorer leurs performances.

Le sujet proposé concerne l'élaboration de matériaux composites à matrice céramique (C/SiC) par fabrication additive de type CFF (Continuous Filament Fabrication). Ce procédé permet la co-extrusion de filaments en polymère thermoplastique et de fibres continues (de carbone par exemple) pour élaborer des structures 3D complexes. Après élimination partielle du composant en polymère, ces structures 3D peuvent être soumises à un procédé de type PIP (Polymer Infiltration and Pyrolysis) pour générer la matrice céramique.

Les travaux portent donc sur l'élaboration par impression 3D de matériaux composites à matrice céramique pour des applications thermostructurales.

Objectif :

L'objectif de l'étude est de mettre au point le procédé CFF + PIP pour réaliser des pièces représentatives en composite C/SiC.

Les travaux porteront sur :

- la réalisation de fichiers numériques en collaboration avec une équipe experte dans ce domaine,
- l'étude et l'optimisation des paramètres d'impression 3D pour des pièces représentatives avec un polymère partiellement soluble à l'eau (différentes nuances de polymère possibles) et fibres continues de carbone,
- l'étude de l'influence des paramètres du procédé PIP (différents précurseurs précéramiques, température de pyrolyse, nombres de cycles PIP ...) sur les caractéristiques des pièces obtenues,
- La caractérisation de ces pièces, notamment la microstructure, la composition chimique, les propriétés mécaniques et thermiques.

L'accent sera mis sur la compréhension de l'influence des paramètres d'élaboration et de la microstructure sur les propriétés finales des matériaux.

Contact :

BEAUDET SAVIGNAT Sophie
CEA/Le Ripault – BP16 - 37260 MONTS
Tél. : 02 47 34 40 00 - sophie.beaudet-savignat@cea.fr

MATERIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE
SPECIALITE : MATERIAUX, MODELISATION, SIMULATION

Sujet :

Simulation de la transition-choc détonation dans des explosifs refroidis ou pré-chauffés

Contexte :

Un outil de simulation hydrodynamique du processus de transition-choc-détonation (TCD) dans un explosif au TATB faiblement poreux a été développé afin de réaliser des études de sécurité pyrotechnique. La spécificité de cet outil est de décrire la transformation de l'explosif en produit de détonation en utilisant une loi de cinétique chimique macroscopique incluant différents modèles pour décrire la phase de formation des sites réactifs par effondrement de pores sphériques. Cet outil est aujourd'hui capable de restituer correctement des profondeurs d'amorçage, la désensibilisation totale par choc double ainsi que les seuils de détonation lors d'impact de barreau sur l'explosif nu ou protégé en face avant.

Objectif :

Il s'agit de poursuivre le développement de cet outil en déterminant le modèle de formation de sites réactifs le plus pertinent pour reproduire des essais réactifs à température ambiante. Une fois ce modèle identifié, il faudra le développer afin de restituer l'effet d'un refroidissement ou d'un chauffage de la cible explosive préalablement à sa sollicitation par une onde de choc. Il s'agira d'abord de recenser les travaux disponibles dans la littérature ouverte et décrivant l'effet de la température initiale sur le comportement réactifs sous choc des compositions au TATB. Puis dans un second temps, nous utiliserons les résultats issus de cette étude bibliographique pour développer et valider une nouvelle loi de cinétique chimique macroscopique adaptée à la simulation de la TCD dans la gamme de température initiale -100 à +100°C. Ces travaux pourront déboucher sur la définition d'essais macroscopiques pour mieux caractériser l'effet de la température initiale sur le comportement détonique de notre composition au TATB. Soulignons, en outre, que la réalisation de cette étude nécessite des compétences dans le domaine de la mécanique des fluides, de la détonique et en programmation scientifique (fortran 90 et langage R). C'est aussi une opportunité pour acquérir des compétences dans le domaine des simulations hydrodynamiques en lagrange et en euler sur grands calculateurs.

Contact :

BOUTON Eric
CEA/Le Ripault – BP 16 - 37260 Monts
Tél. : 02.47.34.40.00 – eric.bouton@cea.fr

MATERIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE
SPECIALITE : MATERIAUX COMPOSITES

Sujet :

Elaboration de matériaux composites à matrice céramique

Contexte :

Les matériaux composites à matrice céramique (CMC) sont des matériaux alliant d'excellentes propriétés mécaniques à une très bonne résistance à l'oxydation même à haute température. Parmi les CMC, les composites C/SiC (renfort en fibre de carbone et matrice en carbure de silicium) sont particulièrement étudiés dans le domaine de l'aéronautique comme composants thermostructuraux pour des applications nécessitant une température d'utilisation supérieure à 1000 °C.

Les propriétés mécaniques des composites C/SiC peuvent varier très fortement suivant la méthode d'élaboration (infiltration en phase vapeur, l'infiltration réactive de silicium liquide, infiltration d'une résine précurseur…) et la nature des fibres de carbone utilisées.

Afin de mieux comprendre les relations entre la mise en œuvre et les propriétés mécaniques des composites, le CEA souhaite procéder à différents modes d'obtention de ces matériaux et évaluer leur impact sur leur comportement mécanique. L'influence des fibres utilisées, de la matrice, des interfaces fibres/matrice et des paramètres de fabrication sera étudiée.

Objectif :

L'objectif du post-doctorat sera de mettre au point des méthodes de fabrication d'éprouvettes mécaniques (traction, cisaillement inter-laminaire,…) pour la caractérisation de composites C/SiC. Différentes méthodes de mise en œuvre seront étudiées comme la CVI (infiltration en phase vapeur), la LSI (infiltration de silicium fondu dans un composite C/C) ou la pyrolyse d'une résine précurseur de SiC.

Certaines méthodes de mise en œuvre pourront être réalisées au sein du laboratoire des composites thermostructuraux (LCTS) à Bordeaux, unité mixte de recherche à laquelle le CEA est tutelle.

Les éprouvettes ainsi obtenues seront caractérisées et le(a) candidat(e) devra établir les relations entre les voies de mise en œuvre et les propriétés mécaniques afin d'optimiser ces dernières.

Le(a) candidat(e) évoluera dans un laboratoire de 30 personnes, dans un environnement scientifique et technique de pointe.

Contact :

CADRA Stéphane
CEA/Le Ripault – BP 16 – 37260 MONTS
Tél. : 02.47.34.40.00 – stéphane.cadra@cea.fr

MATERIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE

SPECIALITE : MATERIAUX, MODELISATION, SIMULATION

Sujet :

Conception et élaboration de matériaux diélectriques compressibles

Contexte :

Dans le cadre des sujets techniques pilotés par le CEA/Le Ripault, il existe un besoin de développement de matériaux polymères particuliers. Ces matériaux doivent disposer de la capacité à se comprimer selon des sollicitations particulières tout en maintenant un haut niveau de conductivité électrique planaire.

Les propriétés électriques et compressibles du matériau sont interdépendantes et peuvent varier en fonction de la nature du polymère utilisé, sa densité, le type et la quantité de charge conductrice utilisée ainsi que le mode de mise en œuvre.

Afin de mieux comprendre ces influences, le CEA souhaite développer et évaluer différents types de matériaux, depuis leur formulation (sélection de résines, thermoplastiques ou élastomères; réalisation de compounds à partir de charges commerciales et développées spécifiquement) jusqu'à leur mise en œuvre (polymérisation, extrusion, fabrication additive).

Objectif :

L'objectif du post-doctorat sera de développer de nouveaux matériaux conducteurs électriques et compressibles. Selon les spécificités visées, le(a) candidat(e) devra identifier et proposer différentes formulations et modes d'élaboration de matériaux compatibles avec les critères physiques recherchés.

En particulier, une approche de conception numérique du nouveau matériau alliant une simulation multiphysique (mécanique et diélectrique) et les possibilités offertes par les machines de fabrication additive conduira le(a) candidat(e) à proposer des acquisitions ou développements de moyens innovants.

Il(elle) devra réaliser les formulations d'intérêt (compounds thermoplastiques et/ou résines), puis réaliser des matériaux alvéolaires à partir de celles-ci selon différentes techniques jugées d'intérêt (incorporation de porogènes, émulsion, fabrication additive,…)

Le(a) candidat(e) devra évaluer les propriétés mécaniques et électriques des différents matériaux tout au long de leur mise en œuvre et proposer les axes d'amélioration associés.

Contact :

CADRA Stéphane
CEA/Le Ripault – BP 16 – 37260 Monts
Tél. : 02.47.34.40.00 – stephane.cadra@cea.fr

MATERIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE
SPECIALITE : MATERIAUX, MODELISATION, SIMULATION

Sujet :

Rôle des interfaces dans la modélisation du comportement thermomécanique d'un composite carbone-carbone

Contexte :

Les composites carbone/carbone sont constitués de fibres de carbone dont la cohésion est assurée par une matrice de carbone. Schématiquement, on peut considérer que les propriétés mécaniques dans l'axe des fibres sont assurées par celles-ci alors que les propriétés hors axe sont dues à la matrice et au mélange fibre/matrice. Nous nous intéressons dans le cadre du sujet proposé à l'étude des propriétés hors axe d'un composite et notamment à la relation entre ces propriétés et la nature des interfaces.

Objectif :

Dans les cas des composites C/C 3D, l'architecture 3D joue un rôle dans les propriétés mécaniques « hors axe », c'est-à-dire lorsque la sollicitation générant du cisaillement n'est pas directement dans l'axe des fibres constituant le composite. Dans le type de composites considérés, les fibres sont en effet arrangées en baguettes droites, de sections rectangulaires dont les côtés sont inférieurs au millimètre. Ces baguettes sont arrangées selon une architecture 3D avec des baguettes en X, d'autres en Y et en Z. Les sections des différentes baguettes peuvent différer d'une orientation de baguette à l'autre. Les vides entre les baguettes sont comblés par de la matrice carbone.

Des travaux précédents étudiant notamment les propriétés mécaniques hors axe d'un composite C/C 3D ont montré l'importance des interfaces entre baguettes et plus particulièrement la propriété qu'ont ces baguettes, liées les unes aux autres uniquement par une épaisseur faible de matrice, à « glisser » les unes par rapport aux autres. Cette propriété de cohésion des baguettes entre elles est accessible expérimentalement par un dispositif de « push-out » mis en place au LCTS de Bordeaux lors des travaux mentionnés.

Il s'agit d'une part d'intégrer les nouveaux résultats expérimentaux obtenus depuis les travaux précédents et d'autre part d'approfondir le lien entre la nature des interfaces mettant en jeu les baguettes. Le(a) candidat(e) devra pour cela :

- Valider un nouveau code de calcul sous ABAQUS permettant de réaliser des expériences numériques avec différentes géométries d'éprouvettes.
- Exploiter ce code en comparant les expériences réalisées avec les expériences numériques.
- Intégrer l'ensemble des caractérisations réalisées au LCTS depuis les travaux précédents.

Contact :

GUILLET François
CEA/Le Ripault - BP16 - 37260 Monts
Tél. : 02.47.34.40.00 - francois.guillet@cea.fr

MATERIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE
SPECIALITE : MATERIAUX COMPOSITES

Sujet :

Caractérisations microstructurales de composites à renfort carbone

Contexte :

Les composites à renfort carbone sont constitués de fibres de carbone dont la cohésion est assurée par une matrice qui peut être en carbone, résine ou bien un autre constituant. Les propriétés thermique et mécanique des composites constitués dépendent des propriétés des fibres ainsi que de celles de la matrice. Dans tous les matériaux carbonés, la nature de l'arrangement des cycles aromatiques est un facteur majeur dans l'obtention des propriétés souhaitées. L'étude et la compréhension de cet arrangement sont donc des facteurs primordiaux dans l'élaboration et la maîtrise de ces matériaux. Cela concerne les fibres de carbone mais aussi la matrice quand elle est en carbone et ce quel que soit le procédé d'obtention.

Objectif :

Le CEA fait actuellement appel à un certain nombre de matériaux composites à renfort carbone utilisé dans la réalisation de pièces industrielles. Afin d'optimiser les propriétés des matériaux existants et de maîtriser les propriétés thermiques et mécaniques en lien avec la microstructure des matériaux, il est indispensable d'acquérir une connaissance approfondie des constituants considérés.

Il s'agit pour le(a) stagiaire de caractériser de manière complète les constituants des matériaux existants à l'aide notamment des techniques suivantes :

- Microscopie optique en lumière polarisée (avec ou sans lame d'onde).
- Diffraction des rayons X.
- Microscopie électronique en transmission, technique pour laquelle une méthodologie d'obtention de la me mince par découpe MEB-FIB devra être développée.

Ces résultats pourront être comparés à un corpus de résultats antérieurs acquis au fil de l'évolution des matériaux industriels.

Une fois l'ensemble de ces outils de caractérisation maîtrisé, différents constituants et procédés actuellement en phase de test pourront être évalués et comparés à l'existant.

Contacts :

LONGUET Jean-Louis & GUILLET François
CEA/Le Ripault – BP 16 – 37260 MONTS
Tél. : 02.47.34.40.00
jean-louis.longuet@cea.fr & francois.guillet@cea.fr

MATERIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE

SPECIALITE : MATERIAUX, MODELISATION, SIMULATION

Sujet :

Analyse d'image par deep learning de la microstructure de matériaux céramiques

Contexte :

Hormis quelques techniques expérimentales permettant d'accéder à la structure granulaire 3D de matériaux le plus souvent métalliques, la connaissance de la microstructure des matériaux est acquise à partir d'observations 2D micrographiques (microscopie optique et Microscopie Electronique à Balayage - MEB en différents modes). Dans le cas des matériaux céramiques, la mise en évidence de la microstructure est toujours partielle et donc difficile à automatiser dans le cadre d'une analyse d'image classique. Il faut souvent recourir à une interprétation manuelle des images (tracé des joints de grains manquants, par exemple) pour permettre une analyse numérique des images.

Dans ce contexte, l'analyse d'image par deep learning est très prometteuse puisqu'elle permet de s'affranchir de ces difficultés pour, à l'instar d'un opérateur, distinguer correctement les caractéristiques microstructurales sur une micrographie 2D. La principale difficulté de cette technique, outre la définition d'un modèle de réseau à même de mener à bien l'analyse, est de disposer d'un nombre suffisant d'images analysées pour effectuer l'apprentissage du réseau. Ce nombre assez élevé (plusieurs milliers) dépasse largement la quantité d'images traitées disponibles, même en considérant qu'une observation sur une image de grande taille peut fournir plusieurs sous-images d'entrée.

Une première partie du sujet consiste alors à simuler ces images de manière suffisamment réaliste pour que le réseau constitué soit capable de traiter les images expérimentales qui lui sont soumises. Des essais préliminaires montrent que cette voie est pertinente.

La deuxième partie concerne la construction du réseau qui, même si la littérature propose un certain nombre de modèles applicables, devra être optimisé en fonction des caractéristiques des images étudiées.

Objectif :

L'objectif de ce post-doctorat est de construire une modélisation des images micrographiques analysées de manière à alimenter l'apprentissage d'un réseau deep-learning. Il s'agira également d'optimiser la construction de ce réseau (les essais préliminaires sont basés sur un réseau de type U-net).

Le(a) candidat(e) devra disposer de compétences en deep-learning, des connaissances en science des matériaux étant appréciées mais pas indispensables.

Contact :

GUILLET François
CEA/Le Ripault - BP16 - 37260 Monts
Tél. : 02.47.34.40.00 - francois.guillet@cea.fr

MATERIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE

SPECIALITE : MATERIAUX, MODELISATION, SIMULATION

Sujet :

Apprentissage automatique en science des matériaux

Contexte :

Dans de nombreuses applications (moteurs électriques, stockage des données, détection, antennes, …), les propriétés magnétiques des matériaux s'obtiennent par un équilibre subtil entre différentes interactions, un fait qui rend la conception de nouveaux composés complexe. Or de nos jours, les théories de la structure électronique à grande efficacité offrent une aide inestimable à l'exploration d'un vaste espace chimique disponible, ainsi qu'un outil supplémentaire de conception pour la synthèse expérimentale. Ces méthodes prédisent efficacement les propriétés magnétiques élémentaires d'un composé et la stabilité de certaines de ses propriétés thermodynamiques, mais restent aveugles aux informations cruciales concernant par exemple la température de transition magnétique. Toutefois, il est aujourd'hui apparu possible d'utiliser certains des modèles d'apprentissage automatiques pour prédire par exemple la température de Curie et d'étudier ainsi des composés inédits.

Objectif :

Le travail post-doctoral portera sur le développement d'un outil de prédiction et de recherche de nouvelles structures magnétiques utilisant conjointement un code de dynamique moléculaire précédemment développé au CEA et un algorithme d'apprentissage supervisé sur la base des fonctionnalités de la de la bibliothèque AFLOWLIB-ML.

Il est demandé au(à la) candidat(e) une forte motivation et un vif intérêt pour la théorie et le calcul, ainsi que pour les travaux interdisciplinaires entre physique et science des matériaux. Une expérience antérieure en environnement UNIX/Linux et en programmation est demandée, ainsi que la capacité à travailler de façon autonome et à fonctionner comme un coéquipier actif et efficace. Une connaissance préalable de la théorie fonctionnelle de la densité et/ou d'autres méthodes de structure électronique est essentielle. Une expérience du magnétisme et des matériaux magnétiques et/ou des méthodes d'apprentissage automatique sera considérée comme un avantage.

Contact :

THIBAUDEAU Pascal
CEA/Le Ripault - BP 16 - 37260 Monts
Tél. : 02.47.34.40.00 - pascal.thibaudeau@cea.fr

MATERIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE
SPECIALITE : PHYSIQUE DES SURFACES

Sujet :

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

Contexte :

La compréhension des mécanismes de corrosion des matériaux métalliques constitue un enjeu majeur pour l'industrie nucléaire. Les mécanismes de corrosion gaz-métal mettant en jeu des interactions entre les molécules gazeuses et la surface du matériau métallique ne sont pas intégralement élucidés.

La spectroscopie infrarouge permet l'analyse in situ de mélanges gazeux ou de la surface de matériaux métalliques. Cette technique physico-chimique, non-destructive et non intrusive, sonde les niveaux vibrationnels caractéristiques des liaisons et des groupements chimiques présents dans un milieu. Ceci permet notamment une analyse qualitative des espèces adsorbées et des liaisons constituées avec la surface.

Le laboratoire est équipé depuis mi-2016 d'un dispositif PM-IRRAS (Polarization Modulation InfraRed Reflection Absorption Spectroscopy ou spectroscopie infrarouge de réflexion-absorption par modulation de polarisation), dispositif permettant d'obtenir, séparément et simultanément, les signatures vibrationnelles des espèces de la phase gazeuse et celles des espèces en surface, et ainsi de suivre les évolutions conjointes de l'atmosphère gazeuse et de la surface de l'échantillon au cours des réactions de corrosion.

Après une phase de qualification hors boîte à gants, ce dispositif a été installé en BàG début 2017 pour pouvoir y étudier des matériaux toxiques ou très réactifs. Une étude préliminaire a été effectuée sur le cérium, matériau inflammable.

Objectif :

Le but principal du post-doctorat sera de poursuivre l'étude du comportement du cérium sous différents gaz. Sera considérée l'influence : de la nature des gaz (gaz pur ou en mélange), de la pression, et de la température sur les interactions gaz-cérium.
Les suivis par PM-IRRAS de :

- l'évolution de la composition gazeuse au cours de la réaction,
- et l'évolution de l'état chimique de la surface (identification des espèces gazeuses adsorbées, identification des produits de corrosion formés),

aideront à mieux comprendre le comportement du cérium sous différents gaz, et à en déduire des schémas réactionnels.
Des couplages avec des analyses par XPS, par DRX (Diffraction des Rayons X) ou en modules « vidéo » (permettant la visualisation de la surface de l'échantillon) aideront à affiner la compréhension des phénomènes en jeu.
Ce stage post-doctoral permettra au(à la) candidat(e) de travailler sur un matériau, le cérium, largement étudié dans la littérature pour son oxyde CeO2, très souvent utilisé dans le domaine de la catalyse hétérogène avec des applications dans l'industrie automobile et dans l'industrie chimique notamment. Plus de 26000 articles ont ainsi été publiés entre 1950 et 2015. Ils sont en nombre croissant depuis une vingtaine d'années, avec plus de 2300 articles diffusés en 2015. Ceci permettra au(à la) candidat(e) d'échanger avec la communauté scientifique spécialiste du domaine.
Il lui permettra également, en travaillant sur un dispositif expérimental original, d'accroître ses compétences concernant la spectroscopie infrarouge. Le service dans lequel est situé le laboratoire est un service de recherche, dédié à la métallurgie et aux analyses de surfaces. Il dispose de nombreux autres moyens d'expertises : DRX, MEB, XPS, Microsonde de Castaing, AFM/STM (Microscopie à Force Atomique/Microscopie à Effet Tunnel), ce qui permettra au(à la) candidat(e) d'approfondir ses connaissances sur la caractérisation de surface des matériaux métalliques. Enfin, l'intégration du(de la) candidat(e) au sein d'une équipe d'ingénieurs et de techniciens lui permettra d'enrichir son expérience et d'acquérir les bases pour gérer une équipe dans la suite de sa carrière.

Contact :

WEULERSSE Katia
CEA/Centre de Valduc – 21120 Is-Sur-Tille
Tél. : 03.80.23.40.00 – katia.weulersse@cea.fr

MATERIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE

SPECIALITE : MATERIAUX METALLIQUES, METALLURGIE

Sujet :

Simulation thermodynamique et cinétique des transformations de phase par la méthode CALPHAD

Contexte :

Le plutonium est sans doute un des éléments dont la métallurgie est la plus complexe du tableau périodique puisqu'il possède six variétés allotropiques. Une d'entre elles, la phase δ, est plus ductile et moins oxydable que la phase α. Cette phase peut être stabilisée à température ambiante grâce à l'addition d'éléments comme l'aluminium, le gallium, le cérium ou encore l'américium. Sous l'effet des basses températures ou d'une élévation de pression, ces alliages δ métastables subissent différents types de transformations via différents chemins thermodynamiques (directs ou partiellement indirects avec des phénomènes associés telle la diffusion du soluté). Dans ce contexte, il apparaît opportun de pouvoir simuler ce comportement et d'identifier les phénomènes mis en jeu.

Dans ce but, le CEA/Valduc a réalisé des expériences par diffraction des rayons X (DRX), dilatométrie, calorimétrie (DSC), microsonde de Castaing, et microscopie électronique à balayage (MEB) afin de caractériser, analyser et comprendre les transformations de phase. En parallèle à ces études expérimentales poussées, le CEA/Valduc a initié une étude de simulation thermodynamique et cinétique des transformations de phase par la méthode CALPHAD (CALculation of PHase Diagrams) afin de comprendre les processus mis en jeu d'un point de vue théorique, puis de prédire les transformations impliquées en fonction de la température, des contraintes extérieures et de la composition chimique des alliages.

Cette étude numérique, basée sur l'utilisation du logiciel Thermo-Calc couplé au module cinétique DICTRA (Diffusion Controlled TRAnsformations) repose sur le développement et l'optimisation de la description des volumes au sein des bases de données existantes.

Objectif :

Il sera ainsi demandé au post-doctorant en charge de cette étude de :

- Se former à l'implémentation de la description des volumes au sein des bases de données thermodynamiques utilisées par le logiciel Thermo-Calc et le module DICTRA permettant la modélisation des transformations de phase. Sur ce point, la maitrise des optimisations de type CALPHAD est indispensable.

- Collaborer étroitement avec les expérimentateurs afin de proposer les expériences nécessaires pour alimenter les optimisations des bases de données.

- Participer à la mise en place et au suivi de collaborations avec des acteurs reconnus dans le domaine CALPHAD.

- Synthétiser et de publier les résultats obtenus sous formes de différents documents et de publications dans des journaux internationaux ou communications en congrès.

Le service dans lequel est situé le laboratoire est un service de recherche, dédié à la métallurgie et aux analyses de surface. Il dispose de nombreux moyens expérimentaux nucléarisés qui permettront au candidat d'approfondir ses connaissances sur la caractérisation de surface des matériaux métalliques. Enfin, l'intégration du(de la) candidat(e) au sein d'une équipe d'ingénieurs et de techniciens jeunes lui permettra d'enrichir son expérience et d'acquérir les bases pour gérer une équipe dans la suite de sa carrière.

Contact :

OUDOT Benoît
CEA/Centre de Valduc – 21120 Is-Sur-Tille
Tél. : 03.80.23.40.00 – benoit.oudot@cea.fr

MATHEMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL

MATHEMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL
SPECIALITE : INFORMATIQUE &LOGICIELS

Sujet :

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

Contexte :

Le CEA/Cesta a en charge le suivi de l'endommagement laser des composants optiques sur les chaînes laser du Laser Mégajoule (LMJ). 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. 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.

Objectif :

L'objectif de ce post-doctorat est de développer un outil d'aide à la décision avec un algorithme de classification des dommages en fonction de leur dangerosité et d'en déduire des lois d'exploitation.

En collaboration avec une équipe d'ingénieurs et techniciens, le travail de ce post-doctorat comprend la mise en place 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, la 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 et son développement et la validation des algorithmes par confrontation aux données obtenues sur l'installation.

Contact :

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

MATHEMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL
SPECIALITE : MECANIQUE DES FLUIDES

Sujet :

Modélisation et simulation numérique d'écoulements aérodynamiques en régime raréfié hypersonique

Contexte :

Ce sujet d'étude post-doctorale s'inscrit dans le cadre d'une collaboration entre le CEA/Cesta et le laboratoire ICARE du CNRS portant sur la modélisation des écoulements raréfiés. Lors de la rentrée atmosphérique d'un véhicule spatial, celui-ci traverse différentes couches de l'atmosphère à de grandes vitesses. La conception et le dimensionnement de tels véhicules reposent sur la connaissance de l'écoulement aérodynamique d'air qui les entoure afin de maîtriser les efforts aérodynamiques et les sollicitations thermiques exercées. Les modèles physiques utilisés pour cela dépendent fortement de l'altitude considérée. Dans les basses couches de l'atmosphère, l'air est un milieu continu (le libre parcours moyen des particules de gaz est très petit devant les dimensions du véhicule) qui peut être décrit par les équations de Navier-Stokes. Par contre, dans les hautes couches de l'atmosphère, l'air est un milieu raréfié (le libre parcours moyen des particules de gaz n'est pas petit devant les dimensions du véhicule), les équations de Navier-Stokes ne sont plus valides. Il est nécessaire de recourir à la théorie cinétique des gaz en résolvant l'équation de Boltzmann pour simuler l'écoulement raréfié autour du véhicule d'intérêt.

Le laboratoire ICARE dispose de souffleries hypersoniques en régime raréfié. Ces moyens d'essais exceptionnels offrent la possibilité d'acquérir des données expérimentales permettant de caractériser finement l'écoulement autour du véhicule : champs de densité, pression et température dans l'écoulement et flux de chaleur à la paroi.

Le CEA/Cesta met au point, développe et utilise des codes de calcul dédiés à la simulation de ces écoulements raréfiés : un code développé en interne et un code Open source, le code SPARTA, développé par le Sandia National Laboratory. Ces deux codes résolvent l'équation de Boltzmann et sont dotés de nombreuses modélisations permettant de décrire l'écoulement dans de grandes gammes de densités et pressions.

Objectif :

L'objectif de ce post-doctorat est de réaliser la prévision et la restitution des essais soufflerie conduits par le laboratoire ICARE dans le cadre d'un projet ANR-ASTRID au moyen de ces codes de simulation. Les comparaisons calculs/mesures réalisées dans ce cadre permettront de contribuer à la validation des codes de calcul susmentionnés et des modèles physiques sous-jacents. Ce travail s'accompagnera de l'étude et de la mise au point de modèles physiques élaborés permettant de simuler le plus fidèlement possibles ces écoulements complexes.

Le(a) candidat(e) recherché(e) devra être titulaire d'un doctorat en mécanique des fluides numérique, maîtriser la mécanique des fluides compressibles. Une bonne connaissance de la théorie cinétique des gaz serait un plus. La maîtrise des langages de programmation suivant est nécessaire : Fortran, C, Matlab, Labview.

Contacts :

BARANGER Céline & BRAEUNIG Jean-Philippe
CEA/Cesta – BP 2 - 33114 Le Barp
Tél. : 05.57.04.40.00
celine.baranger@cea.fr & jean-philippe.braeunig@cea.fr

MATHEMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL
SPECIALITE : MATERIAUX, MODELISATION, SIMULATION

Sujet :

Développement de méthodes numériques innovantes dédiées à la simulation du comportement dynamique de matériaux sous sollicitations intenses

Contexte :

La maîtrise de la réponse dynamique de matériaux complexes (mousse, céramique, métal, composite) suite à des sollicitations intenses (dépôt d'énergie, impact hyper-véloce) est un enjeu majeur pour de nombreuses applications développées et conduites par la Direction des Applications Militaires (DAM). Pour répondre à ses besoins et tirer le meilleur parti des architectures des supercalculateurs en constante évolution, la DAM développe un nouveau code de dynamique rapide 2D et 3D.

Objectif :

Dans le cadre du nouveau code de dynamique rapide, le(a) candidat(e), en cohérence avec l'équipe de développement, sera chargé(e) de développer des méthodes numériques répondant à des besoins applicatifs spécifiques. Leur spécificité est en rapport avec :

- la nature des matériaux pris en compte du point de vue des équations d'état, des lois de comportement et des modèles d'endommagement ;
- la nature de la réponse dynamique prise en compte du point de vue des sollicitations intenses envisagées (dépôt d'énergie, impact hypervéloces).

Le travail du post-doctorant, après une formation initiale à l'environnement de développement de ce nouveau code de calcul, consistera à :

- implémenter des modèles physiques globaux pour prendre en main le code de calcul ;
- analyser les méthodes numériques existantes : schéma numérique Volume Fini sur grilles décalées pour l'hydrodynamique lagrangienne avec formulation en énergie interne et ajout de viscosité artificielle pour stabilisation des chocs ; extension à la prise en compte de l'élasticité, de la plasticité et de l'endommagement ;
- reprendre les travaux théoriques sur l'algorithme de contact glissement et l'implémenter au sein de ce nouveau code de calcul en veillant à préserver les performances en termes de parallélisme ;
- valider cet algorithme par comparaison avec des outils numériques existants (codes internes et commerciaux) ;
- adapter les développements précédents en utilisant une nouvelle classe de schémas numériques Volume Fini centrés aux mailles.

Outre ses connaissances en méthodes numériques, le(a) post-doctorant(e) devra être familier avec le langage objet et plus particulièrement le langage C++. Ce post-doc se déroulera au CESTA sur une période de un an renouvelable.

Contact :

BERTRON Isabelle
CEA/Cesta – BP 2 – 33116 - Le Barp cedex
Tél. : 05.57.04.40.00 – isabelle.bertron@cea.fr

MATHEMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL
SPECIALITE : DEVELOPPEMENT CODES & CALCULS

Sujet :

Accélération par GPU d'un code de dynamique des gaz préexistant.

Contexte :

Le code Triclade, développé au CEA-DAM, est un code DNS tridimensionnel écrit en C++ MPI résolvant les équations de Navier-Stockes compressibles pour un mélange binaire de gaz parfaits sur des maillages cartésiens. Il est utilisé, en particulier, pour simuler le mélange turbulent se produisant aux interfaces entre fluides sous l'effet d'instabilités hydrodynamiques.

Objectif :

Le(a) candidat(e) aura pour tâche l'amélioration des performances de l'application en mettant en place un nouveau degré de parallélisme basé sur une programmation sur carte graphique (GPU). Le code ainsi produit devra réduire au mieux la divergence entre les approches CPU et GPU, en permettant notamment d'unifier les appels aux fonctions calculatoires de manière à masquer l'utilisation explicite des accélérateurs. Pour ce faire, il (elle) pourra se baser sur une API existante (telle que Kokkos), ou, suivant les besoins, des directives de pré-compilations (telles que OpenMP). Le(a) candidat(e) sera amené(e) à collaborer fortement avec plusieurs autres équipes travaillant autour de l'accélération GPU.

Une bonne connaissance de la programmation C/C++, des systèmes distribués (calculateurs) ainsi que de la programmation sur carte graphique seront nécessaires à la concrétisation de ces objectifs. Des connaissances en mécanique des fluides seraient appréciées.

Contact :

GRIFFOND Jérôme
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon
Tél. : 01.69.26.40.00. – jerome.griffond@cea.fr

MECANIQUE & THERMIQUE

MECANIQUE & THERMIQUE
SPECIALITE : MATERIAUX ENERGETIQUES

Sujet :

Développement d'outils de morphologie mathématique adaptés à l'analyse de champs thermodynamiques obtenus par simulation numérique de microstructures de matériaux granulaires

Contexte :

La sensibilité au choc des matériaux énergétiques (explosifs) est une propriété cruciale liée à leur sûreté. Des études préliminaires expérimentales et de simulation ont été menées dans le cadre d'une thèse en collaboration avec l'Institut Franco-Allemand de Recherches de Saint-Louis (ISL) et MINES ParisTech PSL.

Plus particulièrement, des essais expérimentaux (menés à l'ISL) sur différents matériaux ont permis d'obtenir des valeurs précises de niveau de choc initiant une réaction. Des échantillons de ces matériaux ont été imagés au CEA Gramat par microtomographie à rayons X et les images ont été segmentées par un logiciel propriétaire (développé par MINES ParisTech). L'analyse de ces images a révélé des différences géométriques à l'échelle de la microstructure de ces matériaux granulaires. Afin de comprendre ces différences et leur influence sur le comportement macroscopique du matériau, des simulations numériques sous différents types de sollicitations ont été réalisées en collaboration avec MINES ParisTech PSL. Plus particulièrement, des simulations sous chargement en pression hydrostatique et sous impact ont été réalisées.

Les champs statiques et spatio-temporels de la pression et de la température obtenus illustrent que des interactions mécaniques complexes ont lieu entre les grains et confirment que le comportement macroscopique des matériaux est influencé par sa structure à l'échelle microscopique.

Ces interactions mécaniques entre grains ne sont pas encore précisément comprises. Elles dépendent non seulement de la forme géométrique des grains, mais aussi de leurs contacts et positions mutuelles ainsi que des imperfections cristallines.

Objectif :

L'objectif de ce post-doctorat sera d'établir les liens entre les propriétés géométriques locales et les valeurs des champs obtenus par simulations. Cet objectif nécessite notamment le développement d'outils de morphologie mathématique adaptés à l'analyse de champs thermodynamiques obtenus par simulation des matériaux à l'échelle mésoscopique. On pourra également s'appuyer sur des méthodes d'apprentissage automatique afin d'établir des corrélations entre structures et propriétés. Ces outils complèteront ceux développés dans le cadre de la thèse précitée et dédiés à la caractérisation de la microstructure des matériaux. Cette étude repose à la fois sur des images des matériaux réels obtenues par tomographie à rayons X et dont les seuils de sensibilité sont connus, mais également sur des matériaux virtuels afin de décorréler les interactions multifactorielles. Les compétences requises pour candidater sont : une thèse de doctorat, compétences en simulations numériques, compétences en analyse d'images. Il est attendu que des compétences solides et confirmées seront acquises dans ces domaines au travers de la réalisation de ce post-doctorat. Une ou plusieurs publications sont attendues à l'issue de ces travaux.

Contact :

BELON Steve
CEA/Gramat – BP 80200 - 46500 GRAMAT
Tél. : 05.65.10.54.32 – steve.belon@cea.fr

MECANIQUE & THERMIQUE
SPECIALITE : GENIE THERMIQUE & THERMOMECANIQUE

Sujet :

Ecoulement diphasique compressible et réactif - transition à la détonation

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). Les équipes du CEA DAM ont développé et homologué un code de 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. Dans le cadre de ce contrat post-doctoral, le cas des agressions par impacts sera plus particulièrement étudié.

La prédiction de la transition combustion-déflagration-détonation nécessite de mesurer, de comprendre et de modéliser plusieurs mécanismes physiques : propagation de la décomposition par conduction thermique, par infiltration des gaz chaud dans un empilement granulaire, par formation de point chaud au passage d'une onde de compression... 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.

Le travail sera réalisé en collaboration avec les équipes du Laboratoire de mécanique Gabriel LaMé (région Centre Val de Loire) et avec les équipes d'autres sites du CEA. Des échanges pourraient avoir lieu avec d'autres équipes universitaires en France ou bien avec des membres de l'INRIA.

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

Objectif :

La simulation de la transition à la détonation nécessite de se placer dans le contexte des écoulements diphasiques compressibles (écoulement de gaz au sein d'un empilement granulaire) et de prendre en compte, pour la phase solide, une équation de compaction du matériau granulaire en plus de l'équation d'état du solide. Le modèle réactif proposé en 1986 par Baer et Nunziato sera implémenté dans ABAQUS explicit dans sa version simplifiée en 2001 par Kapila et ses coauteurs. Il s'agit de programmer les lois de conservation de chaque phase, les relations de fermeture, les termes d'interaction et les lois du mélange en supposant un équilibre mécanique (vitesse et pression) mais un déséquilibre thermique entre les phases.

Les résultats numériques seront comparés à des mesures publiées jusqu'ici dans la littérature ou à des expériences réalisées durant le post-doctorat. Une interaction forte est souhaitée avec l'équipe en charge de la réalisation de ces essais.

Ce travail de recherche donnera l'opportunité au jeune chercheur d'étendre ou de parfaire ses connaissances dans les domaines de la dynamique rapide, des écoulements compressibles réactifs et de la physique des matériaux granulaires et de la matière condensée.

Contact :

PICART Didier
CEA Le Ripault – BP16 - 37260 Monts
Tél. : 02.47.34.40.00 – didier.picart@cea.fr

OPTIQUE
&
OPTRONIQUE

OPTIQUE & OPTRONIQUE
SPECIALITE : THERMIQUE / THERMOMECANIQUE

Sujet :

Effet thermique dans l'air dans un module de pompage diode multi-disques

Contexte :

De grandes installations d'étude de physique par laser de puissance sont actuellement en fonctionnement : le National Ignition Facility aux Etats-Unis et le Laser MégaJoule en France. Il est aujourd'hui envisageable d'améliorer les premiers étages d'amplification de ces chaînes laser en particulier les modules préamplificateurs situés entre la source laser et la section amplificatrice. Cet étage délivrant des énergies de l'ordre du joule est aujourd'hui limité à 1 tir toutes les 5 minutes. Le matériau amplificateur, un verre phosphate dopé au néodyme, utilisé également dans les grands amplificateurs des chaînes lasers impose une longueur d'onde de 1053 nm.

Ces contraintes fortes nous amènent à développer de nouveaux matériaux laser et de nouvelles architectures. Les études sont basées sur des développements de briques technologiques de base (amplificateur régénératif, pompage diode, amplificateurs à barreaux ou à disques, …).

Objectif :

L'objectif du post-doc sera de participer à l'étude des effets thermiques dans l'air dans un amplificateur à disque pompé longitudinalement par des diodes laser. Cette étude sera basée sur le développement croisé de simulations et d'expériences. Il s'agira de :

- Développer des simulations prenant en compte les effets physiques en jeu (transfert thermique par radiation et conduction, effet thermo-opto-mécanique, …). Ces codes seront réalisés sous l'environnement COMSOL.

- Participer à la définition des expériences permettant le recalage des simulations.

- Utiliser les résultats des expériences pour recaler les simulations et ainsi évaluer les effets physiques pouvant perturber le faisceau laser comme la déformation du front d'onde.

Le travail se conclura par la participation à la définition de l'architecture finale du laser 1J à 10Hz basé sur un ensemble de codes validés et recalés.

Contact :

MONTANT Sébastien
CEA/Cesta – BP 2 – 33114 Le Barp
Tél. : 05.57.04.40.00 – sebastien.montant@cea.fr

OPTIQUE & OPTRONIQUE
SPECIALITE : CARACTERISATION OPTIQUE

Sujet :

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

Contexte :

Le Centre du Ripault possède des compétences reconnues dans la caractérisation optique des matériaux. Pour des applications industrielles liées au Laser MégaJoule, il a déjà développé un réflectomètre dans le domaine du visible et proche infrarouge donnant une excellente précision sur de petites pièces, même non planes. Nous souhaitons à présent concevoir un système équivalent fonctionnant dans le domaine de l'infrarouge moyen et lointain, et appliqué à de plus grandes dimensions (de l'ordre de la dizaine de centimètres).

Objectif :

Le CEA/Le Ripault étudie généralement les propriétés optiques des matériaux sur échantillons plans de petite taille (de l'ordre du centimètre) dans un domaine allant de l'UV à l'IR. Afin de valider le protocole de caractérisations sur pièces réelles, l'objectif est de caractériser des formes non obligatoirement planes via la réalisation d'un banc de mesure de réflectivité infrarouge portable. Celui-ci pourra 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 mesure seront les données d'entrées initiales.

Contact :

PIOMBINI Hervé
CEA/Le Ripault – BP 16 – 37260 Monts
Tél. : 02.47.34.40.00 – herve.piombini@cea.fr

PHYSIQUE DU NOYAU DE L'ATOME & DE LA MOLECULE

PHYSIQUE DU NOYAU, DE L'ATOME & DE LA MOLECULE
SPECIALITE : PHYSIQUE NUCLEAIRE

Sujet :

PHOTONUC : Modélisation et simulation numérique des réactions photonucléaires

Contexte :

Les codes Monte-Carlo représentent l'outil de référence pour la simulation du transport de particules dans le domaine de l'instrumentation nucléaire, pour des applications concernant la calibration et la conception des détecteurs dans les réacteurs du parc.
Dans ce contexte, une modélisation détaillée des processus physiques en jeu demande la prise en compte des réactions photonucléaires induites par les photons à haute énergie (de l'ordre de quelques MeV à plusieurs dizaines de MeV) : ces réactions libèrent des neutrons et d'autres photons secondaires qui peuvent donc contribuer à la mesure dans les détecteurs. La distribution des photons à haute énergie dépend à son tour des mécanismes de la cascade électromagnétique, qui relie le transport des photons à celui des électrons et des positrons via les réactions photo-atomiques et les interactions des électrons et positrons pas collisions et rayonnements. A ce jour, peu de benchmarks existent pour montrer la capacité des codes Monte-Carlo à simuler les réactions photonucléaires dans le domaine d'énergie d'intérêt, et les mesures disponibles sont souvent anciennes, avec des erreurs expérimentales très élevées. Un travail préliminaire entre les équipes de la DES et de la DAM a mis en évidence des écarts entre les codes Monte-Carlo TRIPOLI-4 (développé par la DES) et DIANE (développé par la DAM) sur quelques configurations simples. L'objectif de ce post-doctorat est de comparer, discuter et le cas échéant harmoniser les stratégies de simulation de la cascade électromagnétique et des réactions photonucléaires implémentées dans les codes.
Dans un premier temps, il faudra mettre en oeuvre une comparaison systématique code à code entre DIANE et TRIPOLI-4 pour quelques configurations simplifiées de benchmark, afin de déterminer très précisément pour quels noyaux/atomes et dans quels domaines énergétiques les deux codes montrent des écarts significatifs. Ensuite, une analyse de sensibilité menée grâce à la plateforme URANIE développée à la DES permettra de déterminer les modèles et les algorithmes qui contribuent majoritairement à ces écarts et assurer une maîtrise des incertitudes. Sur la base de ces résultats une harmonisation des choix d'implémentation faits dans les codes ainsi qu'une amélioration de ces derniers devront être effectuées.

Objectif :

Le programme de travail du post-doc est le suivant :

1. Etude de l'état de l'art sur la simulation de la cascade électromagnétique. Prise en main des codes DIANE et TRIPOLI-4 et de leurs choix de simulation en ce qui concerne la cascade électromagnétique et les réactions photonucléaires.

2. Identification des noyaux et des plages énergétiques pour lesquelles des écarts importants existent entre les codes. Identification des modèles et algorithmes responsables de ces écarts. Une modélisation par un code permettant de choisir différents modèles physiques (par exemple GEANT4 ou PENELOPE) sera aussi effectuée, afin de confirmer les observations. Une analyse de sensibilité sur les paramètres de ces modèles sera effectuée, ainsi que l'étude de l'effet sur le résultat des différents paramètres, à l'aide de la plateforme URANIE de la DES.

3. Veille scientifique afin d'identifier des expériences plus récentes avec des dispositifs expérimentaux modélisables dans les codes DIANE et TRIPOLI-4.

Contact :

LEMAIRE Sébastien
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon
Tél. : 01.69.26.40.00. – sebastien.lemaire@cea.fr

PHYSIQUE DU NOYAU, DE L'ATOME & DE LA MOLECULE
SPECIALITE : PHYSIQUE NUCLEAIRE

Sujet :

Etude microscopique de l'émission gamma dans les réactions nucléaires induites par neutrons

Contexte :

La modélisation des réactions nucléaires repose sur l'utilisation de codes de réaction dans lesquels de multiples modèles physiques sont implémentés. Pour la plupart des noyaux, le code utilisé à la DAM est le code TALYS, mis au point vers la fin des années 2000 et aujourd'hui largement utilisé à travers le monde, notamment pour mettre au point les fichiers évalués de la bibliothèque européenne JEFF.

Parmi l'ensemble des modèles physiques implémentés dans TALYS, celui qui gouverne les phénomènes impliquant l'émission ou l'absorption photonique s'appuie aujourd'hui sur la « fonction force gamma » à partir de laquelle sont calculées les diverses probabilités d'émission ou d'absorption des photons. Depuis plusieurs décennies, cette « fonction force gamma » est traditionnellement décrite par une forme analytique, inspirée des travaux de Brink-Axel dans les années 50, qui stipule que la probabilité pour un noyau d'émettre ou d'absorber un photon ne dépend que des caractéristiques du photon. Autrement dit, la probabilité de transition électromagnétique entre deux niveaux du noyau ne dépend que de l'énergie du photon et de la différence de spin/parité entre les deux niveaux, et non de l'énergie ou du spin/parité du niveau initial.

Depuis quelques années, le développement des moyens de calculs a ouvert de nouvelles possibilités pour disposer d'alternatives crédibles à ces formes analytiques traditionnelles. L'approche QRPA a ainsi été mise en œuvre pour déterminer les probabilités de transitions de l'état fondamental vers n'importe quel état final. Appliquée tout d'abord avec succès aux réactions de photo-absorption, elle a aussi permis d'obtenir des résultats encourageants pour les voies d'émission gamma, malgré des lacunes aux basses énergies d'émission. Elle a été récemment étendue pour tenter d'améliorer la description des basses énergies, en tenant compte des transitions entre les différents états excités du noyau. Cette étude doit être poursuivie et confrontée aux divers résultats expérimentaux : Il s'agit de l'objectif principal de ce sujet de post-doc.

Objectif :

Il sera nécessaire, dans un premier temps, de modifier le code de réaction nucléaire TALYS pour pouvoir traiter des « fonctions force gamma » plus générales que celles actuellement utilisées. Ce travail ouvrira la voie à des comparaisons entre les prédictions théoriques et expérimentales afin de voir dans quelle mesure les prédictions théoriques doivent être corrigées pour un meilleur accord avec l'expérience. L'utilisation de techniques d'intelligence artificielle pourrait être ici considérée pour « apprendre », de l'écart théorie-expérience, à quantifier les absences actuellement présentes dans notre approche. La dépendance de la probabilité de capture avec le spin du noyau cible sera aussi étudiée, tout comme l'impact des transitions de multipolarités plus élevées que celle considérées aujourd'hui comme dominantes.

Contact :

HILAIRE Stéphane
CEA/DAM Ile-de-France - Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon Cedex
Tél. : 01.69.26.40.00. - stephane.hilaire@cea.fr

PHYSIQUE DU NOYAU, DE L'ATOME & DE LA MOLECULE
SPECIALITE : ASTROPHYSIQUE

Sujet :

Calcul d'opacités radiatives pour la modélisation des intérieurs stellaires

Contexte :

Le rayonnement joue un rôle majeur dans une grande variété de plasmas astrophysiques à haute densité d'énergie. Par exemple, les profils de température interne des étoiles de type solaire sont contrôlés par la capacité de la matière stellaire à absorber le rayonnement, c'est à dire son opacité radiative. Parmi les nombreux constituants des étoiles, les éléments dits « métalliques » (de numéro atomique Z supérieur ou égal à trois) contribuent significativement à l'opacité, bien qu'ils ne représentent que quelques pourcents du mélange complet. Suite à une analyse spectrale récente de la photosphère solaire, les quantités d'éléments métalliques de faible numéro atomique (principalement carbone, azote et oxygène) ont été révisées à la baisse. Les modèles solaires standards utilisant la nouvelle composition photosphérique sont en désaccord avec les observations d'hélio-sismologie et les mesures de flux de neutrinos. On estime qu'une augmentation régulière de l'opacité dans la zone radiative solaire de 5% près du cœur à 25 % à la base de la zone convective pourrait réconcilier modèles et observations. Une telle hypothèse implique que les opacités des éléments plus lourds (comme le chrome, le fer et le nickel) devraient être révisées à la hausse pour compenser la diminution de l'abondance des éléments métalliques de faible Z. Ces éléments lourds sont toujours partiellement ionisés dans les intérieurs des étoiles de type solaire. En raison des températures élevées, de nombreux états atomiques excités sont sensiblement peuplés et contribuent de manière significative à l'opacité. Une grande partie des tables d'opacité utilisées par la communauté des astrophysiciens a été calculée il y a 20 ans, à une époque où les moyens de calculs n'étaient pas ce qu'ils sont aujourd'hui. Jusqu'à encore très récemment, les astrophysiciens utilisaient soit les tables OP (du nom de l' « Opacity Project », une collaboration académique internationale ou OPAL (« OPAcités Livermore », du nom du laboratoire national américain Lawrence Livermore).

Objectif :

Plusieurs groupes développent actuellement de nouveaux codes d'opacité pour des applications à la physique stellaire. Bien qu'ils diffèrent par leur modélisation du plasma, ces codes reposent pour la plupart sur des approches «détaillées» décrivant la structure fine des configurations électroniques. Le modèle d'opacité SCO-RCG appartient à cette famille de codes très précis, mais il est unique en son genre, en ce sens qu'il permet de modéliser les effets de l'environnement plasma sur les fonctions d'onde, et donc sur les énergies et les forces d'oscillateur des nombreuses raies spectrales. Il permet également la prise en compte d'un grand nombre d'états excités et de raies satellites, et dispose d'un calcul exact de l'effet Stark pour les atomes hydrogénoïdes et héliumoïdes. L'objectif du stage post-doctoral est d'utiliser SCO-RCG pour calculer des opacités utiles pour la modélisation des zones radiatives solaires. Même si le code est déjà très abouti (il a été confronté avec succès à de nombreuses expériences de spectroscopie d'absorption laser et Z-pinch), le chercheur devra améliorer certains aspects de la modélisation, comme le traitement de l'effet Bremsstralung inverse, la diffusion Compton par les électrons libres, ou encore la diffusion Rayleigh par les électrons liés. Il(elle) contribuera aussi à rendre le code robuste afin de le mettre en capacité d'effectuer des calculs intensifs dans un domaine étendu de conditions thermodynamiques. Les sources possibles d'incertitude dans les calculs seront examinées et discutées. Les opacités de Rosseland obtenues seront comparées aux données de OP (http://cdsweb.u-strasbg.fr/topbase/topbase.html) et OPAL (http://opalopacity.llnl.gov). Le jeune chercheur devra également interagir avec des astrophysiciens (par exemple au CEA/IRFU) pour tester les nouvelles opacités dans un code de structure et d'évolution stellaires.

Contact :

PAIN Jean-Christophe
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon
Tél. : 01.69.26.40.00. – jean-christophe.pain@cea.fr

PHYSIQUE DU NOYAU, DE L'ATOME & DE LA MOLECULE
SPECIALITE : ASTROPHYSIQUE

Sujet :

Mise en place de nouvelles méthodes thermodynamiques dans ABINIT

Contexte :

Les découvertes récentes sur les exoplanètes, la recherche sur la FCI ainsi que les applications de la DAM requièrent une connaissance précise des propriétés thermodynamiques de divers matériaux ainsi que de leurs diagrammes de phase. Les simulations ab initio sont un outil de choix pour ce type de caractérisation. Toutefois elles n'offrent pas un accès direct à l'entropie de ces matériaux qui est une quantité thermodynamique fondamentale pour valider une équation d'état mais aussi une quantité cruciale pour la détermination des diagrammes de phase.

Objectif :

L'objectif est d'inclure dans le code ABINIT des méthodes numériques déjà existantes telles que l'intégration thermodynamique qui a montré une très grande efficacité pour la détermination de l'entropie indépendamment de la phase. Il s'agira aussi d'inclure une méthode de calculs bi-phasique permettant de déterminer les équilibres entre plusieurs phases. Elle permettra, par exemple, de déterminer le diagramme de démixtion du mélange hydrogène-hélium hautement pertinent dans les planètes géantes et actuellement étudié par les équipes du CEA dans des chocs lasers. Les méthodes numériques développées et implémentées dans le code ABINIT permettront de répondre à des questions clés en astrophysique participant au rayonnement du CEA. Ces méthodes permettront aussi, et surtout, d'améliorer nos équations d'état internes en fournissant une contrainte supplémentaire qui est celle apportée par l'entropie. Nous pourrons également améliorer nos calculs de transitions de phases dans les applications DAM et pour les expériences de chocs laser. L'objectif est que le(a) post-doctorant(e) implémente les méthodes d'intégration thermodynamique et de simulations bi-phasiques. Une collaboration avec Christophe Winisdoerffer de l'Ecole normale supérieure de Lyon apportera un soutien important au projet. L'ensemble du projet bénéficiera bien sûr d'un échange étroit pour les aspects techniques relatifs au code avec les équipes de l'unité. Les calculs seront effectués sur TERA.

Contact :

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

PHYSIQUE DU NOYAU, DE L'ATOME & DE LA MOLECULE
SPECIALITE : PHYSIQUE ATOMIQUE ET MOLECULAIRE

Sujet :

Modélisation numérique de l'interaction d'un faisceau d'électrons généré par une diode avec un gaz et analyse des phénomènes physiques associés

Contexte :

Les faisceaux d'électrons délivrés par les générateurs CESAR et RKA du CEA/CESTA permettent d'étudier des matériaux soumis à des dépôts brefs et intenses d'énergie. Une analyse quantitative des résultats expérimentaux requiert de caractériser précisément les électrons quand ils impactent le matériau considéré. Certaines propriétés électroniques sont accessibles aux diagnostics expérimentaux, mais d'autres le sont beaucoup moins, ce qui nécessite de recourir à la simulation numérique. Toutefois, les calculs et simulations actuels ne permettent pas de prédire correctement le transport du faisceau depuis sa production dans une diode sous vide jusqu'à la cible placée dans du gaz à pression donnée. En effet, lors de sa propagation dans le gaz, le faisceau ionise partiellement celui-ci, créant un plasma dont les caractéristiques (densité, conductivité …) peuvent grandement influer sur le transport du faisceau jusqu'à la cible, via son interaction avec le courant de retour et le développement de diverses instabilités.
Sous vide, les codes Particle-In-Cell (PIC) commerciaux classiques sont prédictifs mais, en présence d'un gaz, dans les conditions correspondant à nos applications, la physique du transport devient complexe et n'est pas correctement traitée par ces outils, notamment parce qu'un trop grand nombre de particules (électrons primaires et espèces secondaires dues à l'ionisation du gaz) doit être géré. En revanche, le code PIC CALDER, développé à la DAM, est adapté aux super-calculateurs actuels, et constitue un outil irremplaçable pour l'étude des divers phénomènes intervenant dans la propagation du faisceau dans le gaz : ionisation du gaz et modélisation de l'interaction entre le faisceau et le plasma créé.

Objectif :

Le but de ce post-doctorat est de simuler avec CALDER les expériences qui seront réalisées sur CESAR et RKA. Seules des simulations 2D incomplètes ont été réalisées jusqu'à maintenant, mais elles ont l'avantage de mettre en jeu une physique réaliste avec un coût calcul raisonnable. La prise en main et l'utilisation de ce code constitueront donc une première partie du post-doctorat. Le(a) candidat(e) étudiera et simulera d'abord des cas physiques simples, théoriquement connus, puis des problèmes de transport plus complexes seront traités comme, par exemple, ceux associés à la présence d'un champ magnétique externe.
Ensuite, une modification de certains algorithmes pourra être nécessaire pour décrire l'évolution du faisceau sur des temps longs correspondant à la durée expérimentale de l'interaction. Une amélioration des conditions aux limites appliquées aux particules du plasma devra en particulier être réalisée, afin de mieux décrire les effets de bords spécifiques à ce type d'expérience. Les expériences satisfaisant à une géométrie 2D axisymétrique, le passage à cette géométrie permettra d'améliorer la compréhension des phénomènes physiques en jeu.
La dernière partie du travail envisagé portera sur l'interprétation des résultats numériques. L'objectif sera ici d'identifier les mécanismes physiques prépondérants, et de parvenir à les modéliser d'une façon simplifiée mais réaliste pour faire le lien avec les données expérimentales accessibles.
Signalons enfin que ces travaux s'intégreront dans une collaboration scientifique déjà existante sur ce sujet avec le Sandia National Laboratories (SNL) et seront ouverts à la publication.

Contacts :

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

GREMILLET Laurent
CEA/DAM Ile-de-France - Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon
Tél. : 01.69.26.40.00. - laurent.gremillet@cea.fr

PHYSIQUE DU NOYAU, DE L'ATOME & DE LA MOLECULE
SPECIALITE : PHYSIQUE ATOMIQUE ET MOLECULAIRE

Sujet :

Construction ab initio d'un diagramme de phases

Contexte :

La recherche des phases cristallines des matériaux en pression est devenue un champ de recherche important depuis plusieurs dizaines d'années, tant en physique de la matière condensée qu'en géophysique ou astrophysique. Les champs d'application sont nombreux et concernent la découverte de nouvelles phases cristallographiques ou de matériaux avec des fonctionnalités particulières, mais aussi la description de la matière dans les intérieurs planétaires. Dans ce cadre, les calculs dits ab initio jouent un rôle important car ils permettent d'obtenir des données, même lorsqu'aucune expérience n'est réalisable dans les conditions thermodynamiques explorées. Depuis une dizaine d'années, de nouvelles méthodes ab initio ont émergé afin de prédire les phases cristallographiques stables d'un matériau, et cela en fonction de la pression. Cependant, cette « recherche de structures » est aujourd'hui limitée à une recherche à température nulle, c'est-à-dire ne tenant pas compte des effets de température.

Objectif :

Cette « recherche de structures » ab initio peut être couplée à une autre méthode qui s'appuie sur des simulations de dynamiques moléculaires ab initio et permet de déterminer le spectre de phonons (vibrations du réseau) en fonction de la température, c'est-à-dire en incluant les effets dits anharmoniques. Ces deux approches mises ensemble, il devient alors possible de réaliser une « recherche de structures en température » d'un matériau puis de prédire les stabilités dynamiques, mécaniques et thermodynamiques des différentes phases, en fonction de la pression et de la température. Ces deux méthodes sont aujourd'hui implémentées dans 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 du post-doc sera d'obtenir, par calcul ab initio, le diagramme de phases en température et pression d'un matériau d'intérêt (Fe, Ti, U…).

Le post-doctorat débutera par un travail théorique d'appropriation des différentes techniques employées : simulations ab initio, dynamique moléculaire, recherche de structure, calculs de spectres de phonons… Il se poursuivra par l'implémentation d'un couplage entre les méthodes de « recherche de structures » et de « calcul de spectres de phonons ». Il se conclura par les calculs de « recherche de structures en température » et l'élaboration d'un diagramme de phase d'un matériau (Fe, Ti, U…) présentant de nombreuses phases en pression et température.

Contacts :

GENESTE Grégory
CEA/DAM Ile-de-France - Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon
Tél. : 01.69.26.40.00. - gregory.geneste@cea.fr

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

PHYSIQUE DU NOYAU, DE L'ATOME & DE LA MOLECULE
SPECIALITE : PHYSIQUE ATOMIQUE ET MOLECULAIRE

Sujet :

Electron-phonon coupling using DFT based molecular dynamics

Contexte :

The advent of femtosecond lasers has shed new light on non-equilibrium physics. The ultrafast energy absorption by electrons and the finite rate of their energy transfer to the lattice creates non-equilibrium states of matter, triggering a new class of non-thermal processes from the ambient solid up to extreme conditions of temperature and pressure. The dynamical interplay between electrons and the atomic structure is the key issue that drives the ultrafast phase transitions dynamics. The heat transfer rate between electrons and ions is accounted for by electron-phonon scattering. This electron-phonon coupling is a crucial input, there is still a controversy on the description of this coupling constant for two-temperature systems. The goal of this post-doc is to advance the theoretical formulation for electron-phonon coupling and implement the new formulation.

The time evolution of the electronic and ionic temperature can be described by rate equations in what is known as Two Temperature Models (TTM). The heat transfer rate is accounted for by electron-phonon scattering and electron-phonon coupling is a crucial input for the TTM. At this time, there is still a controversy on the description of this coupling constant for two-temperature systems as they go from solid states to liquid then to plasma. During this transformation, matter reach extreme condition of temperature (up to ~30000K) and pressure (up to ~100GPa). This seriously challenges theoretical calculation of time evolution of the electronic structure of two-temperature solids. The solid states physics approach considers that the electron kinetic is transferred to the degrees of freedom of bound ions, described as phonons. On the other side the plasmas physics approaches consider the scattering of electrons with plasmons. Recently, new formulations were proposed using Time Dependent DFT.

Objectif :

During this post-doc, the candidate will have to find the formulation for the electron-phonon coupling suitable for warm dense matter starting from the most recent publications.

This formulation will be then implemented in ab initio code. At last, the candidate will run DFT based molecular dynamics simulations on massively parallel computers to obtain the electron phonon coupling for two-temperatures metals at extreme conditions. All implementation and calculation will be done with ABINIT code. All this work will be done in close interaction with people running classical molecular dynamics and experimental teams.

Contacts :

RECOULES Vanina
CEA/DAM Ile-de-France - Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon
Tél. : 01.69.26.40.00. - vanina.recoules@cea.fr

TORRENT Marc
CEA/DAM Ile-de-France - Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon
Tél. : 01.69.26.40.00. - marc.torrent@cea.fr

PHYSIQUE DU NOYAU, DE L'ATOME & DE LA MOLECULE
SPECIALITE : PHYSIQUE DES PLASMAS

Sujet :

X-Ray absorption near edge spectroscopy for warm dense matter

Contexte :

The study of Warm Dense Matter (WDM) is a challenging field that is at the crossroads between condensed matter and plasma physics. XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure) is a standard technique in condensed matter physics measurements which brings valuable information on electronic and ionic structure. This technique was recently extended to WDM regime. We showed (both theoretically and experimentally) that a precise description of X-ray absorption spectrum is a key diagnostic to follow the complex mechanism of phase transition. XANES absorption is computed using Density Functional Theory combined within the framework of Projected Augmented-Wave and linear response theory. This description uses a frozen core approximation which severely limits the description for extreme pressure condition (~100GPa and above). The challenge is now to go beyond the frozen core approximation keeping in mind that an all electrons calculation is numerically out of reach for this extreme condition.

Objectif :

The position of the edge in the absorption spectrum is connected to the energy difference between the DOS and the core orbital. Both undergo variations with temperature and density that we have to take into account to describe a possible energy shift of the absorption features when modifying the thermodynamical conditions. This is mandatory to be able to compare theoretical and experimental spectra. This is challenging using PAW and frozen core approximation. One promising possibility is to make possible the relaxation of the core orbitals consistently with the valence electrons.
During this post-doc, the candidate will have to run DFT based molecular dynamics simulations on massively parallel computers to obtain the properties of metals at extreme pressure (T>10000K) and temperature (P>100GPa). Implementation will be necessary to improve the description of XANES spectra for this extreme condition. All implementation and calculation will be done with ABINIT code. All this work will be done with a close interaction with experimental teams.

Contacts :

RECOULES Vanina
CEA/DAM Ile-de-France - Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon
Tél. : 01.69.26.40.00. - vanina.recoules@cea.fr

TORRENT Marc
CEA/DAM Ile-de-France - Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon
Tél. : 01.69.26.40.00. - marc.torrent@cea.fr

SCIENCES DU CLIMAT & DE L'ENVIRONNEMENT

SCIENCES DU CLIMAT & DE L'ENVIRONNEMENT
SPECIALITE : GEOPHYSIQUE

Sujet :

Réponse d'instabilité gravitaire à des sollicitations statiques et dynamiques. Application à l'atoll de Mururoa (Polynésie française)

Contexte :

Dans le cadre de ses missions de surveillance et d'analyse de l'environnement, le CEA poursuit des travaux de suivi de la déformation et de recherches géomécaniques sur la zone Nord de l'atoll de Mururoa qui présente une instabilité gravitaire bien documentée. Son évolution géomécanique est télésurveillée en continu conformément aux recommandations de l'International Geomechanical Commission de 1999 : suivi des déplacements de surface (GPS et campagnes topographiques), des mouvements en profondeur (câbles en forage et inclinomètres) et monitoring de la sismicité sont disponibles.

Depuis la fin des expérimentations nucléaires, le mouvement présente un net ralentissement mais reste toutefois mesurable.

Objectif :

Ce travail de recherche a pour ambition de mieux modéliser le fluage cataclastique qui induit la déformation et la sismicité du flanc nord de l'Atoll de Mururoa. La déformation et la sismicité associée seront étudiées à deux périodes de temps afin de contraindre au mieux le comportement géomécanique du milieu : celle des expérimentations sur l'atoll, et la période plus récente. En effet, ces deux périodes présentent des gammes de sollicitations statiques et dynamiques très différentes mais d'intérêts complémentaires pour caractériser la réponse du milieu géologique à des transitoires de pression et forçages périodiques.

Des expériences en laboratoire viendront compléter la connaissance de la réponse mécanique des roches en présence. Elles permettront de quantifier in situ le comportement des roches de la zone cataclastique et de son encaissant afin de mieux calibrer les modèles de déformation développés dans un second temps.

Contact :

BOLLINGER Laurent
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon
Tél. : 01.69.26.40.00. – laurent.bollinger@cea.fr

SCIENCES DU CLIMAT & DE L'ENVIRONNEMENT
SPECIALITE : GEOLOGIE

Sujet :

Variabilité spatio-temporelle de l'organisation des écoulements des différents compartiments de l'aquifère karstique par analyse des réponses naturelles : développement méthodologique appliqué au système de l'Ouysse

Contexte :

Les milieux souterrains karstiques sont le siège d'écoulements rapides à la faveur des discontinuités du milieu (fractures, diaclases, failles et cavités karstiques) dans lesquelles la composition des eaux souterraines peut varier brusquement. L'absence de filtration des eaux souterraines et la rapidité des transferts rendent la ressource en eau en milieu karstique hautement vulnérable aux risques de pollution. La prévention des risques de pollution et la préservation de la qualité des eaux souterraines est un enjeu majeur, notamment en regard de l'exploitation des captages pour l'alimentation en eau potable, qui nécessite la connaissance de la dynamique des transferts dans les différents niveaux du karst, et leur influence sur la géochimie des différents réservoirs (aériens et souterrains), notamment au travers des équilibres eau-roche et des phénomènes dilutifs liés au mélange de plusieurs masses d'eau. Le système karstique de l'Ouysse (Causses du Quercy) est exceptionnel du fait de la taille de son bassin versant hydrogéologique (de l'ordre de 650 km²) et se caractérise par une alimentation binaire (pour partie provenant de pertes en amont du massif calcaire, et pour partie provenant de l'impluvium karstique local), et par une très grande rapidité des transferts souterrains. Cette ressource en eau est exploitée pour l'adduction en eau potable en plusieurs points du système alimentant en eau potable les villes de Gramat, Rocamadour et Gourdon, et représente ainsi plus de la moitié de la ressource exploitée pour l'alimentation en eau potable du département du Lot.

La modélisation des écoulements en milieu fissuré fortement hétérogène reste un verrou scientifique important du fait de la non-application des lois d'écoulement classique du milieu poreux telle la loi de Darcy ou l'équation de diffusivité. Les particularités de ces systèmes sont leur hétérogénéité, leur non-linéarité, et la non-stationnarité de la réponse hydrodynamique. Ceci est lié notamment à la structure du milieu (double porosité, double perméabilité), au type d'écoulement non laminaire, à l'organisation des écoulements (drainage hiérarchisé), et à l'hétérogénéité de la structure même de l'hydrosystème (compartiments multiples avec des fonctionnalités différentes). Ces points sont particulièrement cruciaux, notamment lors des épisodes de crue, lorsque le transport de matières turbides est susceptible de dégrader significativement la qualité des eaux. L'étude de ce système karstique doit permettre de faire progresser les modèles conceptuels de fonctionnement hydrogéologique des aquifères karstiques et d'améliorer la connaissance de cet hydrosystème, en vue d'améliorer la protection de la ressource.

Les partenaires de ce projet sont les gestionnaires de la ressource (Agence de l'eau Adour-Garonne, Conseil Départemental du Lot, le Parc naturel régional des Causses du Quercy, et le CEA (dans le but d'améliorer les connaissances du contexte hydrogéologique local d'un site d'intérêt afin d'optimiser sa stratégie de surveillance de l'environnement). Ce projet postdoctoral permettra donc la mise en œuvre d'une démarche coordonnée et solidaire de gestion de l'eau à l'échelle du bassin-versant de l'Ouysse.

Objectif :

L'objectif de ce travail de recherche en hydrologie du milieu souterrain est la compréhension approfondie de la structure du système karstique de l'Ouysse et des modalités de transfert de l'eau souterraine, dans le but de préserver la qualité de la ressource en eau et de développer un réseau de surveillance de l'environnement. Ce travail de recherche s'attachera, en collaboration directe avec le Parc Naturel Régional des Causses du Quercy, à l'exploitation et à la modélisation des données issues des stations de mesure en continu actuellement en fonctionnement sur le site pilote de l'Ouysse, site majeur et original en France pour l'analyse des réponses naturelles aux évènements pluvieux dans les différents compartiments de l'aquifère karstique. On s'attachera à caractériser l'organisation spatio-temporelle des écoulements souterrains dans le système karstique, notamment les temps de transfert et l'inertie du système. Plusieurs méthodes de traitement du signal seront proposées : des méthodes innovantes (analyse en composante indépendante), seront couplées à des méthodes plus classiques (analyse corrélatoire, analyse spectrale, analyse en ondelette) pour préciser le fonctionnement hydrogéologique du système karstique de l'Ouysse. L'analyse de ces réponses doit permettre in fine de faire progresser les modèles conceptuels de fonctionnements hydrogéologiques des systèmes karstiques.

Ce projet s'articule autour d'un sujet postdoctoral dont le but est d'exploiter, sur au moins un cycle hydrologique annuel, les données issues des différents réseaux de mesure hydrologiques actuellement en fonctionnement dans le réseau de l'Ouysse, afin d'en caractériser la structuration, l'organisation et le fonctionnement hydrologique, grâce à la modélisation.

Contact : Pierre CRANCON
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon
Tél. : 01.69.26.40.00. – pierre.crancon@cea.fr

SCIENCES DU CLIMAT & DE L'ENVIRONNEMENT
SPECIALITE : SISMOLOGIE

Sujet :

Data mining : indexation de signaux et recherche rapide de doublets

Contexte :

Une mission du CEA est l'analyse de l'activité sismique en continu dans le cadre de sa mission d'alerte aux autorités, en cas d'essais nucléaires étrangers, de forts séismes et de tsunamis. Pour détecter et caractériser ces événements, le CEA s'appuie sur un large réseau de capteurs sismiques qui mesurent d'infimes mouvements de la Terre. Les informations recueillies sont envoyées par satellite en temps réel au Centre national de données (CND) où les sismologues localisent, définissent les origines et éventuellement déclenchent l'alerte. L'un des traitements opérationnels consiste à comparer les signaux enregistrés avec une base de données de référence. La ressemblance des signaux est largement exploitée en sismologie car elle permet la classification ou la détection d'évènements :
1) Classification : l'objectif est de réaliser des groupes d'événements similaires à partir de la ressemblance de leurs signaux. En effet, il existe de nombreux exemples où des séismes distants de quelques kilomètres ont produit des signaux quasi identiques sur un même capteur : ces événements formant une paire sont appelés des doublets. De tels événements peuvent être provoqués par un mouvement semblable et répété d'une même faille, ou bien engendrés par une série d'explosions s'effectuant dans des conditions analogues. Ces événements similaires peuvent avoir eu lieu à quelques heures d'intervalle comme lors de crises sismiques, ou bien être séparés de plusieurs années. Les événements regroupés peuvent être analysés conjointement afin d'affiner par exemple leur localisation. D'autre part, on peut par inférence, caractériser les événements de nature inconnue (explosion, séisme) en supposant qu'ils ont la même nature que les évènements auxquels ils ressemblent.

2) Détection : l'objectif est de rechercher séquentiellement un signal de référence connu dans le flux continu. Un signal étant comme une « empreinte digitale », si celui-ci ressemble à une observation passée, cela signifie qu'un événement similaire s'est produit.

Objectif :

A ce jour, la comparaison des signaux est effectuée par corrélation. Cette technique a démontré sa performance et son utilité dans les chaînes opérationnelles du CND. Malheureusement, cela implique des temps de calcul importants et la méthodologie contraint à utiliser un nombre restreint de signaux. Certaines utilisations sont aujourd'hui inexploitées, comme par exemple la recherche dans le flux continu. La méthodologie actuelle n'est pas adaptée à cette masse complexe d'informations qui est aujourd'hui en croissance exponentielle. Le CND collecte en continu et en temps réel les données de plus de 650 capteurs répartis sur l'ensemble du globe, soit un volume d'environ 5 Teraoctets (To) par an. Ces informations viennent chaque jour enrichir les bases de données du CEA, où près de 700 000 événements sismiques sont référencés (soit près de 100 To sur environ 30 ans). Il est donc désormais indispensable de bénéficier du développement de nouveaux algorithmes qui traitent et analysent ces volumes massifs de données.
L'objectif est de développer des outils permettant de rapidement rechercher de façon quasi instantanée des doublets dans un ensemble de signaux sismiques, possiblement dans un flux continu de données. La méthode proposée est de construire une table d'index qui prend la forme d'un arbre de décision, puis de réaliser une recherche en seulement quelques dixièmes de seconde au travers de cette structure hiérarchique. L'atteinte de ces objectifs permettra d'utiliser la méthode de comparaison de signaux sur l'ensemble de la base de données : il est ainsi attendu une réduction des seuils de détections et cela permettra aussi une classification plus précise de chaque événement.

Contact :

GAILLARD Pierre
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon
Tél. : 01.69.26.40.00. – pierre.gaillard@cea.fr

SCIENCES DU CLIMAT & DE L'ENVIRONNEMENT
SPECIALITE : SCIENCES ATMOSPHERIQUES

Sujet :

Simulation des ondes de gravité dans la moyenne atmosphère avec le modèle ICON : évaluation et amélioration du modèle à l'aide d'observations infrasonores

Contexte :

Au cours des dix dernières années il a été démontré que la stratosphère et plus généralement la moyenne atmosphère (MA) ont un impact important sur la météorologie des basses couches et sur le climat plus généralement. De ce point de vue, il est fondamental d'évaluer la capacité des modèles à simuler la dynamique de la MA. Une bonne compréhension des perturbations de fine échelle de la MA, telles les ondes de gravité (OG), est en outre identifiée comme essentielle à la bonne évaluation des capacités de détection infrason du Système de Surveillance International (SSI) mis en œuvre dans le cadre du Traité d'interdiction complète des essais nucléaires (TICE) et l'impact de OG doit être quantifié et pris en compte à l'échelle du globe (Le Pichon et al. 2019). La technologie infrason est un moyen d'évaluation des modèles, par le biais de simulations de propagation, ainsi qu'un outil permettant de guider l'implémentation des paramétrisations d'OG. Les longues séries temporelles d'observation infrason obtenues dans le cadre du TICE permettent d'accéder à des contraintes uniques et complémentaires des observations haute résolution (lidar, radar), locales et limitées dans le temps. Les précédentes éditions du projet ARISE menées par le CEA ont démontré le bénéfice de combiner l'observation des infrasons à celle des instruments de télédétection (Blanc et al. 2018), afin notamment de mettre en évidence des biais de modèles dans la MA (Le Pichon et al. 2015). Le modèle ICON, développé conjointement par l'Institut Max Planck de Météorologie et par le Centre de météorologie allemand est un modèle non-hydrostatique haute-résolution de prévision numérique du temps et un modèle utilisé pour la recherche. Il est unique en ce qu'il a été étendu à la moyenne atmosphère (150 km, Borchert et al. 2019). Son autre spécificité réside dans son implémentation récente d'une nouvelle paramétrisation à l'état de l'art des OG, représentant leur interaction transitoire avec le champ de vent moyen, négligée jusqu'alors par les paramétrisations usuelles, et garantissant ainsi un plus grand réalisme des champs d'OG simulés (Bölöni et al. 2020 ; Kim et al. 2020). Ces caractéristiques essentielles du modèle ICON en font un outil de premier choix pour la simulation de propagation infrason et l'étude de l'impact des OG sur les capacités de détection.

Objectif :

Le travail consistera en la planification et la réalisation de simulations régionales et globales de la moyenne atmosphère à l'aide du modèle ICON, en utilisant les moyens HPC accessibles depuis le CEA. Les régions d'intérêt particulier seront ciblées sur la base des précédentes campagnes ARISE et de la localisation des stations infrason du SSI. Des événements de référence (explosion industrielle, éruption volcanique,…) pour la validation du modèle à l'aide de la technologie infrason seront sélectionnés. Des outils de simulation de propagation seront utilisés pour confronter simulations et observations en termes de temps d'arrivée et de durée des signaux, d'azimuts et de vitesses de passage des fronts d'onde, et d'amplitudes de signaux. Les biais seront quantifiés et mis en parallèle des biais enregistrés dans la moyenne atmosphère à l'aide d'observations ARISE haute-résolution depuis la surface. Un moyen de quantifier les liens existants entre biais atmosphériques et dispersion des résultats de simulation de propagation sera étudié. Les performances de la nouvelle paramétrisation ICON des OG seront évaluées par comparaison des simulations de propagation obtenues à partir des champs météorologiques ICON à faible résolution (avec paramétrisation) et haute résolution (sans paramétrisation). Des comparaisons aux résultats obtenus à l'aide d'analyses du CEPMMT alimenteront également le travail d'évaluation de modèles à l'aide des infrasons et serviront de référence pour quantifier les améliorations apportées par ICON. Des ajustements de la paramétrisation des sources dans le modèle OG de ICON seront proposés et des nouvelles simulations ICON seront réalisées pour démontrer la faisabilité de se reposer sur la technologue infrason pour l'amélioration de modèles. Les événements de référence sélectionnés au préalable serviront de moyen de validation des améliorations proposées. L'impact des OG sur les capacités de détection du réseau infrason du SSI et sur la morphologie globale du guidage des infrasons sera étudié afin d'affiner les cartes de capacité de détection dans le contexte du CTBT.

Contact :

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

SCIENCES DU CLIMAT & DE L'ENVIRONNEMENT
SPECIALITE : GEOPHYSIQUE

Sujet :

Méthodes d'éléments finis non conformes pour la simulation de la propagation d'ondes sismo-acoustiques

Contexte :

Les caractéristiques des signaux sismo-acoustiques analysés au CEA dépendent fortement des propriétés physiques des milieux traversés par les champs d'ondes ; ces derniers peuvent être largement perturbés lorsqu'ils rencontrent des discontinuités matérielles, ou traversent certaines régions hétérogènes de notre planète. Imager les variations de vitesses sismo-acoustiques dans la géosphère et posséder des outils à même de prédire précisément l'évolution d'un champ d'ondes dans un milieu hétérogène, sont donc essentiels afin d'obtenir des informations viables sur leurs sources d'émission. Depuis quelques années, le CEA s'est attaché à élaborer un tel outil numérique, nommé SEM3D, méthode d'éléments finis d'ordre élevé, efficace et robuste, et dont l'utilisation passe par un recours à des moyens de calculs HPC.

Une des limitations des méthodes de type éléments finis classiques est la nécessité, afin de ne pas dégrader les propriétés de convergence qui les caractérisent, d'une correspondance entre interfaces matérielles et frontières entre éléments de discrétisation spatiale. Cette contrainte peut engendrer des difficultés dans la construction de maillages idoines, notamment pour SEM3D – ce dernier requérant des briques de base hexaédriques. Afin de s'affranchir de cet obstacle, on peut utiliser des géométries élémentaires assurant une plus grande flexibilité du maillage (tétraèdres, par exemple), ou recourir à des méthodes de type frontières immergées, pour lesquelles les interfaces matérielles sont autorisées à passer au sein des éléments ; la discrétisation spatiale des milieux d'intérêt peut donc idéalement s'en trouver drastiquement facilitée. Dans le contexte des méthodes d'éléments finis, ce paradigme a été désigné par les termes anglais « Cut » ou « Unfitted ».

Récemment, le CERMICS (Ecole des Ponts ParisTech) et le CEA ont entamé un travail d'étude de faisabilité relatif à l'implémentation du paradigme Cut dans la résolution de problèmes sismo-acoustiques, et ce pour des méthodes de type Galerkin Discontinues. Pratiquement, cette implémentation a été réalisée dans la plateforme diskpp du CERMICS.

Objectif :

Trois objectifs majeurs sont poursuivis, et se placent dans le cadre de la continuité d'un travail commun entre le CEA et le CERMICS (Ecole des Ponts ParisTech).

Le premier concerne la poursuite du développement et la validation d'une version 3D et parallélisée des outils mis en place au cours de la collaboration actuelle entre CERMICS et CEA. En particulier, il s'agira de s'assurer de la possibilité et la fiabilité d'un élargissement de la palette des géométries de mailles (tétraèdres, voire polyèdres quelconques) et de mettre en place les fonctionnalités de non-conformité des maillages (h- et p-adaptivités). Le code sera évalué en traitant un cas de propagation d'onde sous un massif montagneux complexe, et en quantifiant le couplage du champ sismique avec l'acoustique atmosphérique.
Le deuxième objectif est la poursuite de l'implémentation des méthodes de type Cut, et leur application à des problématiques sismologiques (couches minces, géométries en biseau de bords de bassins sédimentaires).
Le dernier objectif est d'aller au-delà des intégrateurs en temps actuels, de manière à relaxer certaines contraintes de coût de calcul propres aux applications du CEA, et liées à l'hétérogénéité des tailles de mailles.

Le(a) candidat(e) devra posséder de solides compétences en mathématiques appliquées, en analyse numérique, en programmation, et sera amené à illustrer ses travaux théorétiques et numériques, en traitant des cas d'applications d'intérêt en sismologie.

Contact :

GUILLOT Laurent
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon
Tél. : 01.69.26.40.00. – laurent.guillot@cea.fr

SCIENCES DU CLIMAT & DE L'ENVIRONNEMENT
SPECIALITE : SISMOLOGIE

Sujet :

Analyse de source et séparation d'ondes sismiques à partir d'une base de signaux de rotation et de déformation

Contexte :

Dans le cadre de ses missions de surveillance et d'analyse de l'environnement, le CEA poursuit depuis de nombreuses années des travaux de recherche sur le développement de méthodes de caractérisation du signal sismique permettant notamment d'en extraire une description de la source la plus fine possible.

Depuis maintenant plus d'une dizaine d'années, plusieurs études théoriques ont souligné l'intérêt pour l'étude du mouvement du sol et de la source sismique d'avoir accès à une mesure du gradient spatial du champ d'ondes et notamment des composantes associées au mouvement de rotation (Igel et al. 2014) et/ou de déformation (Doner et al. 2017). L'amélioration de la sensibilité de nouveaux instruments de mesure du mouvement de rotation sismique permet d'envisager des mesures locales 6C (3 translations + 3 axes de rotations) du mouvement du sol, que ce soit en champ proche ou en champ lointain. Or ce nouveau type de mesure locale 6C a montré récemment sa capacité à fournir une information suffisante pour identifier la vitesse et la direction de propagation des ondes (Hadziioannou et al. 2012, Wasserman et al. 2016) ou même, améliorer l'inversion du mécanisme à la source (Donner et al 2018).
En collaboration avec le Laboratoire Souterrain Bas bruit (LSBB, https://lsbb.cnrs.fr/), une antenne sismique dense et tridimensionnelle, composée de plus de dix capteurs sismiques large-bande installés en surface et à l'intérieur des galeries LSBB (Rustrel, Vaucluse), fonctionne en continu depuis 2016. Plusieurs études préliminaires ont montré la capacité de cette antenne à mesurer le champ de rotation (Sèbe et al 2017, Rusch 2020).

Objectif :

L'objectif de ce travail de recherche consistera tout d'abord à mettre en place une base de mouvements de rotation et déformation calculés à partir de l'antenne sismique 3D du LSBB. Des outils d'analyse systématiques seront développés et appliqués pour estimer, d'une part, la précision de la mesure du gradient spatial fournie par l'antenne, et d'autre part, des paramètres géophysiques du champ d'ondes relatifs par exemple à la corrélation inter-composantes (6C) telles que la direction de propagation et vitesse des ondes. Une attention particulière sera apportée à l'analyse du bruit de fond micro-sismique vis-à-vis notamment des capacités de l'antenne LSBB à en estimer précisément les propriétés de rotation et déformation.
Cette base de signaux de rotation et déformation sera ensuite analysée quant à la capacité du champ de rotation et/ou déformation, à améliorer, sur données réelles, la connaissance des paramètres de la source sismique, tels que son mécanisme au foyer ou sa profondeur. Cette analyse pourra s'appuyer sur l'expertise développée au sein du CEA en simulation numérique des champs d'ondes (e.g. méthodes par éléments spectraux). D'une part, l'objectif est d'associer aux signaux réels de rotation/déformation une base de fonctions de Green de déplacement et de gradient spatial permettant d'étudier l'apport de ces données au processus d'inversion de la source sismique. D'autre part, plusieurs études ont montré que la mesure locale du champ de rotation sismique pouvait être biaisée par la présence d'effets de site spécifique associés à une structure géologique à petite échelle complexe (van Driel et al. 2012, Singh et al. 2020). Les outils de simulation numériques du champ d'ondes 3D associé à la bonne connaissance de la structure géologique locale de l'antenne du LSBB offrent une opportunité unique de travailler avec des données réelles sur l'effet des hétérogénéités locales à petite échelle sur la mesure de rotation, mais aussi sur les effets dus à la structure topographique du site de mesure ou de la géométrique 3D de l'antenne.
Enfin le troisième volet de ce travail de recherche s'intéressera à l'étude et au développement de nouvelles approches d'analyse du signal sismique permettant de séparer le contenu énergétique des champs d'ondes P et S, en utilisant une mesure continue du gradient sismique et notamment ses composantes de rotation et déformation.

Contact :

SEBE Olivier
CEA/DAM Ile-de-France – Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon
Tél. : 01.69.26.40.00. – olivier.sebe@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