



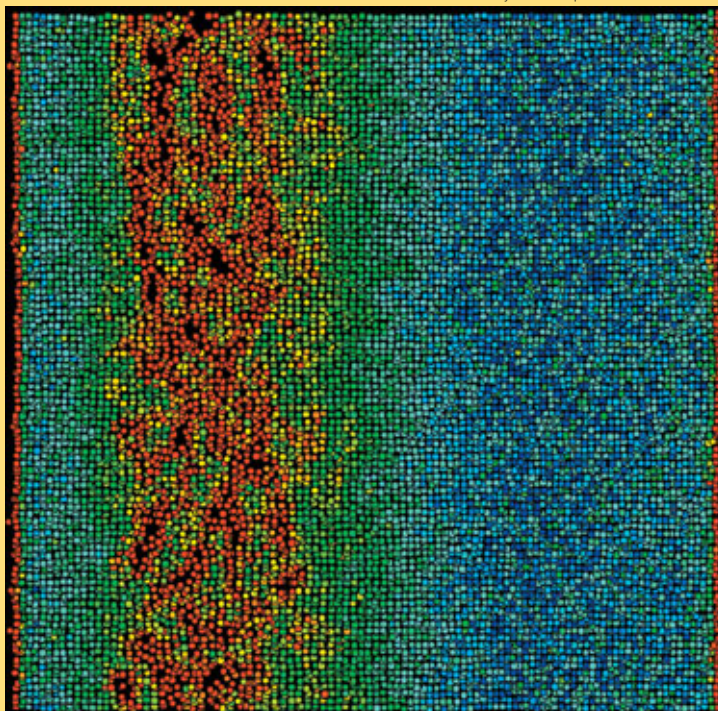
I. SIMULER POUR COMPRENDRE

Plus encore que dans le développement technologique, où elle a fait la preuve de son efficacité, la simulation occupe un rôle particulier dans la recherche scientifique, puisque c'est précisément à elle de traduire les effets des phénomènes fondamentaux, bien que certains puissent être insuffisamment connus ou même inconnus. Les quelques sujets de ce chapitre montrent comment la simulation aide à comprendre les phénomènes, mais aussi qu'elle n'est qu'un maillon de la compréhension, entre théorie, modélisation et expérimentation, cette dernière restant le "juge de paix". Ceci est par exemple spectaculaire dans le domaine des matériaux, où elle jette un pont entre la théorie des phénomènes à l'échelle atomique et la constatation des effets macroscopiques. En climatologie, la modélisation de l'ensemble constitué par l'atmosphère et les océans est indispensable pour prédire le sort de la Planète. Les nanotechnologies ont besoin de la modélisation des surfaces, interfaces et autres nanostructures. Les biotechnologies, au sens large, ne peuvent plus se passer de la modélisation moléculaire. S'agissant des déchets nucléaires, la simulation s'avère indispensable pour prévoir leur comportement à très long terme une fois entreposés dans un milieu géologique et pour optimiser ainsi la conception des colis, des conteneurs et du site.

Dans un autre ordre d'idées, la modélisation "comportementale" permet de s'assurer que des expérimentations ciblées et réduites en nombre peuvent être conduites sans risquer de "faire l'impasse" sur des paramètres déterminants.



CEA – analyse réalisée par J. Bontaz-Carion et al.



CEA – calcul réalisé par B. Magne

Comparaison de la microtomographie d'un échantillon de cuivre endommagé par choc (en haut) et du même phénomène d'impact simulé par dynamique moléculaire (en bas). Pour l'échantillon analysé, les dimensions du parallélépipède sont de $1\,200\ \mu\text{m} \times 1\,200\ \mu\text{m} \times 2\,400\ \mu\text{m}$. Celles du système simulé sont de $20\ \text{nm} \times 20\ \text{nm} \times 3,6\ \text{nm}$ pour 100 000 atomes à densité normale. Une tranche de 20 000 atomes épaisse de $0,36\ \text{nm}$ est représentée ici. Le temps d'expérience est de 7 picosecondes. La distribution en taille des pores de l'échantillon analysé suit une loi d'échelle comparable à celle observée en dynamique moléculaire.