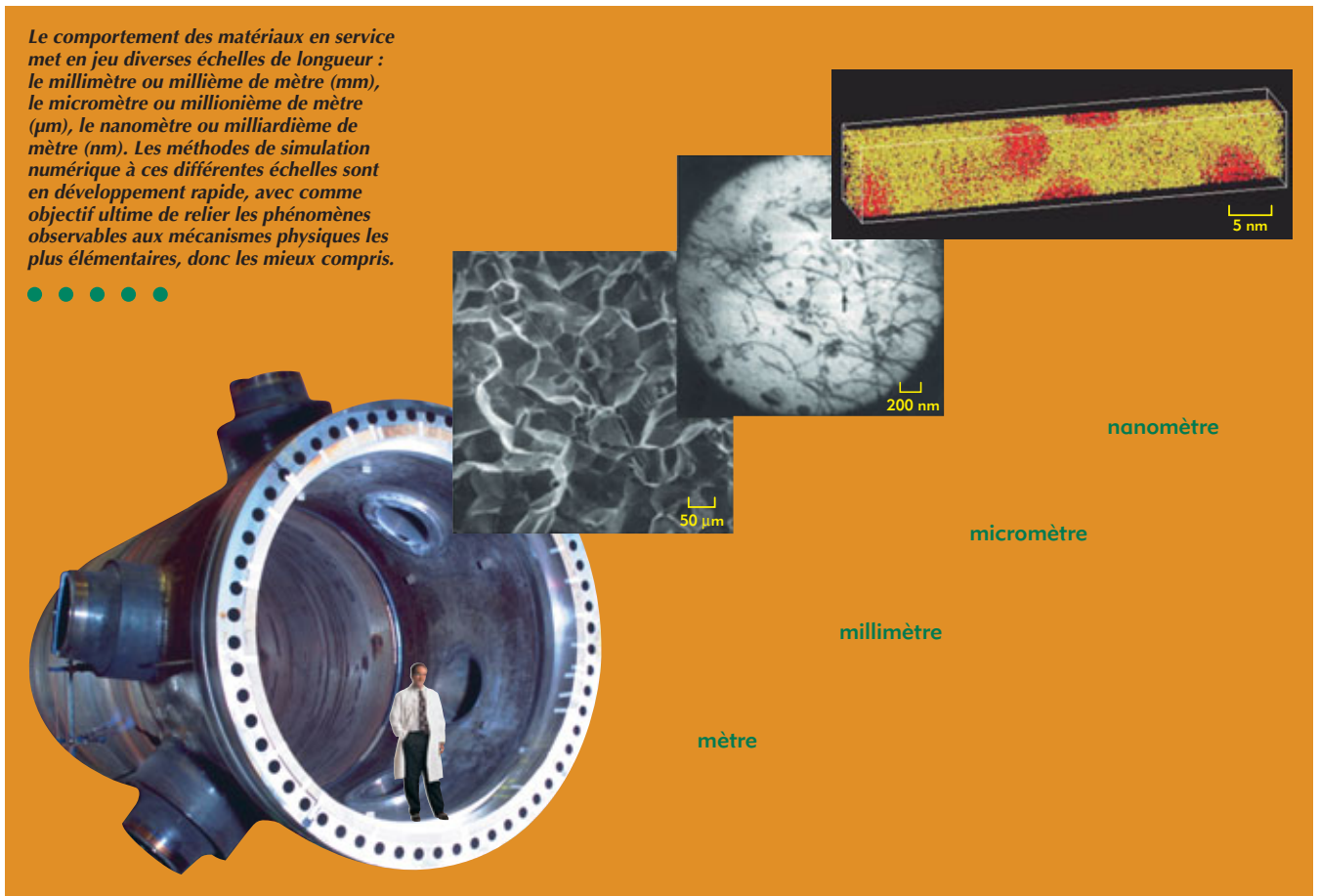


LA SIMULATION DES MATÉRIAUX

Dans l'industrie nucléaire, les matériaux interviennent pour une large part dans l'accroissement des performances, de la fiabilité et de la sûreté des réacteurs et des installations du cycle du combustible. Leur comportement sous irradiation est évidemment pour le métallurgiste une préoccupation majeure. En effet, l'action des rayonnements ionisants et des flux de neutrons induit une évolution structurale du matériau, appelée vieillissement, pouvant se traduire par une modification de ses propriétés. Comment prédire le comportement des matériaux sur de très longues périodes, extrapoler leur évolution à des conditions d'irradiation nouvelles, prédire leurs propriétés dans des conditions sévères d'exposition ? La simulation numérique s'avère un outil incontournable, soit comme soutien à l'expérimentation pour en augmenter le "retour sur investissement", soit comme unique recours lorsque l'expérimentation est inaccessible.

Le comportement des matériaux en service met en jeu diverses échelles de longueur : le millimètre ou millième de mètre (mm), le micromètre ou millionième de mètre (µm), le nanomètre ou milliardième de mètre (nm). Les méthodes de simulation numérique à ces différentes échelles sont en développement rapide, avec comme objectif ultime de relier les phénomènes observables aux mécanismes physiques les plus élémentaires, donc les mieux compris.



De gauche à droite : R. Quatrain/Framatome ANP - d'après O. M. Yahya et al., *Fatigue and Fracture of Engineering Materials and Structures* 21 (1998) pp. 1485-1502 - CEA - Université de Rouen (GPM)

Des matériaux exposés à des conditions extrêmes

Les performances des matériaux résultent toujours d'un compromis entre leur chimie (types de liaison⁽¹⁾), leur structure atomique et leur microstructure. Les aciéristes, notamment, savent parfaitement optimiser les propriétés de leur matériau en jouant sur ces trois composantes. En service, les matériaux sont soumis à de nombreuses sollicitations qui en transforment les caractéristiques. L'exposition à une irradiation (ionisante ou pas) affecte ces trois fondements. Les **transmutations** et autres réactions nucléaires

provoquent des changements dans la composition chimique des matériaux, tout particulièrement des **combustibles**. Les excitations électroniques modifient la liaison chimique dans les isolants. Les collisions nucléaires, en éjectant des atomes de leur position d'équilibre, affectent la structure atomique, conduisant à l'**amorphisation**, à la création de défauts ponctuels tels que des lacunes (sites vacants) et les interstitiels (atomes se trouvant entre les plans du réseau). Les atomes éjectés peuvent avoir une énergie cinétique suffisante pour déplacer d'autres atomes et ainsi provoquer des cascades de déplacements atomiques. La migration lente et le

rassemblement des défauts ponctuels engendrés induisent des évolutions de microstructure : formation ou dissolution de **précipités**, qui altèrent la résistance mécanique (capacité à soutenir des efforts importants) et la tenue à la corrosion, modification du réseau de **dislocations**, qui contrôle la plasticité des matériaux, recristallisation...

Une autre spécificité du nucléaire est le coût très élevé, et parfois l'absence complète de retour d'expérience. Ainsi veut-on *prédire* le comportement des matériaux sur des *durées* qui dépassent parfois toute possibilité d'expérience en vraie grandeur : peut-on accélérer le vieillissement des



matériaux de manière maîtrisée ? Comment extrapoler à des conditions d'irradiation nouvelles, aujourd'hui inaccessibles (par exemple pour les réacteurs à fusion ou pour les réacteurs à haute température), l'évolution d'un matériau qui n'est connue que dans un éventail de conditions très limité (spectre d'énergie des neutrons, plage étroite de température...)?

Les matériaux sont exposés à des conditions extrêmes (collisions nucléaires, chocs très intenses, incursions à très hautes températures et pressions), conditions pour lesquelles l'observation directe, à l'échelle pertinente et résolue en temps, est impossible : peut-on prédire les propriétés des matériaux dans ces conditions extrêmes, inaccessibles à l'expérimentation élémentaire ?

Ces questions motivent un effort soutenu de développement de méthodes de modélisation des matériaux qui, partant de l'échelle à laquelle la physique des processus est relativement sûre, tentent de reproduire le comportement macroscopique d'intérêt pratique. Pour cela, quatre grands types d'outils existent.

Les outils de modélisation des matériaux

Les outils de modélisation se classent tout naturellement en quatre catégories, suivant qu'il est question :

- de **modélisation de la liaison chimique** (modèles de cohésion). Il s'agit de suivre l'évolution des liaisons chimiques au cours de la sollicitation. Ce sont des calculs de *structure électronique* aussi prédictifs que possible ;
- de **modélisation à l'échelle atomique des événements rapides** (collisions nucléaires, propagation d'ondes de choc, endommagement). Ces phénomènes impliquent un nombre élevé d'atomes pendant de nombreuses **périodes de vibration atomique**. La **dynamique moléculaire** est l'outil approprié ;
- de **modélisation des cinétiques lentes de vieillissement**, c'est-à-dire d'évolution ou de **relaxation** de la microstructure. Diverses méthodes sont utilisées, **déterministes** ou **stochastiques**, aux échelles atomique, micronique ($1 \mu\text{m} = 10^{-6} \text{m}$) ou macroscopique ;
- du **passage de la microstructure aux propriétés d'emploi**. Pour cette étape, le nucléaire ne se distingue guère des autres secteurs et le domaine est en plein développement.

Modélisation de la cohésion des solides

L'outil est la **simulation** "à partir des premiers principes" (*ab initio*) : la matière est considérée comme une assemblée de noyaux et d'électrons ; ces derniers, à cause de leur

très faible masse, s'adaptent instantanément au mouvement des noyaux. L'image obtenue est celle d'une densité électronique se déformant en suivant les positions des noyaux, et définie uniquement par celles-ci. La détermination de la densité électronique induite fait nécessairement appel à la **mécanique quantique** et une théorie remarquable, dite de la Fonctionnelle Densité (DFT), traitée dans diverses approximations, permet de réaliser ces calculs pour un grand nombre d'atomes en un temps raisonnable. *In fine*, le modélisateur dispose de l'énergie totale d'un échantillon de matière comme fonction des seules coordonnées des noyaux.

D'un point de vue numérique, le problème principal consiste à résoudre l'**équation de Schrödinger** pour un grand nombre de noyaux et d'électrons et couvrant la plus grande partie du tableau de classification périodique des éléments. Les tailles de systèmes considérées vont de la centaine à plusieurs milliers d'atomes suivant le compromis que le numéricien est prêt à faire entre précision et rapidité.

Que faire de la masse phénoménale de données ainsi générées ? Il faut d'abord qualifier le **modèle** employé, puisque le point de départ est une approximation de l'équation de Schrödinger. Toutes les propriétés structurales peuvent être évaluées : **équation d'état**, **diagramme de phases**, spectre des vibrations atomiques (ensemble des modes de vibration du **crystal**). La cohésion des solides, leur volume d'équilibre, leurs propriétés élastiques, les propriétés vibrationnelles des noyaux sont généralement très bien reproduits (à quelques pourcents près). Les diagrammes de phases le

sont avec une plus grande incertitude (quelques dizaines de pourcent). Les **actinides** sont une remarquable exception, comme le montre la figure 1, qui représente le volume d'équilibre observé et calculé pour ces éléments. La situation, bonne pour les actinides dits légers, se dégrade à partir du plutonium qui se trouve à la charnière. Il faut dans ce cas introduire des modélisations plus élaborées allant au-delà du champ moyen⁽²⁾.

La détermination d'un diagramme de phases, en particulier la transition solide-liquide, pose un problème plus complexe, car on fait une simulation sur un milieu hétérogène liquide-solide, trop grand pour être simulé par une approche *ab initio*. Afin de pouvoir effectuer des calculs sur ces plus grands échantillons, le numéricien ajuste les paramètres d'un **potentiel semi-empirique** pour reproduire au mieux les données d'un

(1) La **liaison métallique** survient entre des éléments électropositifs (dont la couche externe possède peu d'électrons) : les électrons des couches externes sont délocalisés. La **liaison ionique** associe des éléments fortement électropositifs à des éléments fortement électronégatifs (dont la couche externe possède beaucoup d'électrons) : les électrons des couches externes sont piégés sur les ions négatifs. La **liaison est covalente** lorsqu'un électron de la couche externe d'un atome forme avec un électron de la couche externe d'un atome proche voisin une paire commune aux deux atomes : ces électrons sont stabilisés entre les atomes ; un atome s'associe avec plusieurs voisins pour saturer sa couche externe.

(2) Comme la méthode LDA+U (voir par exemple J. Bouchet *et al.*, *J. Phys. Cond. Mat.* **12** (2000), p. 1723) ou la technique DMFT.

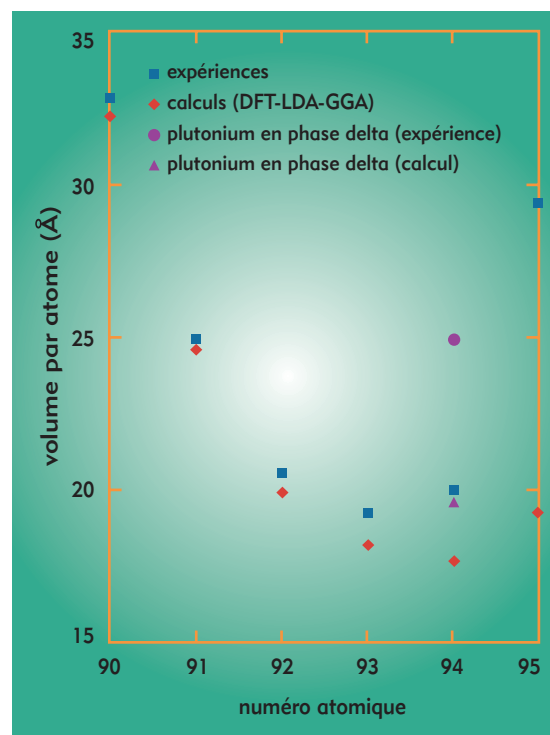
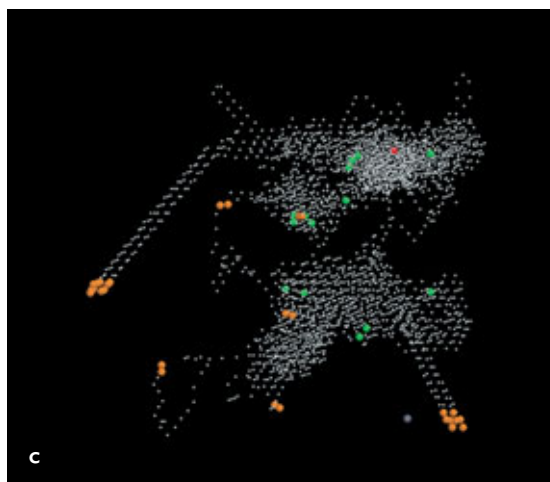
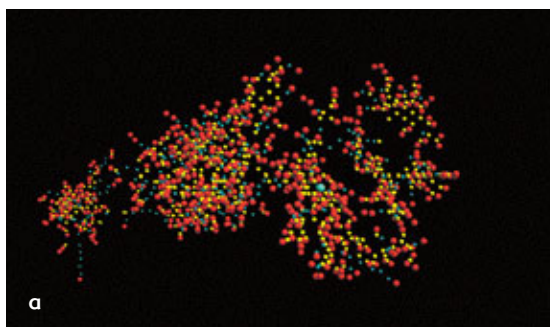
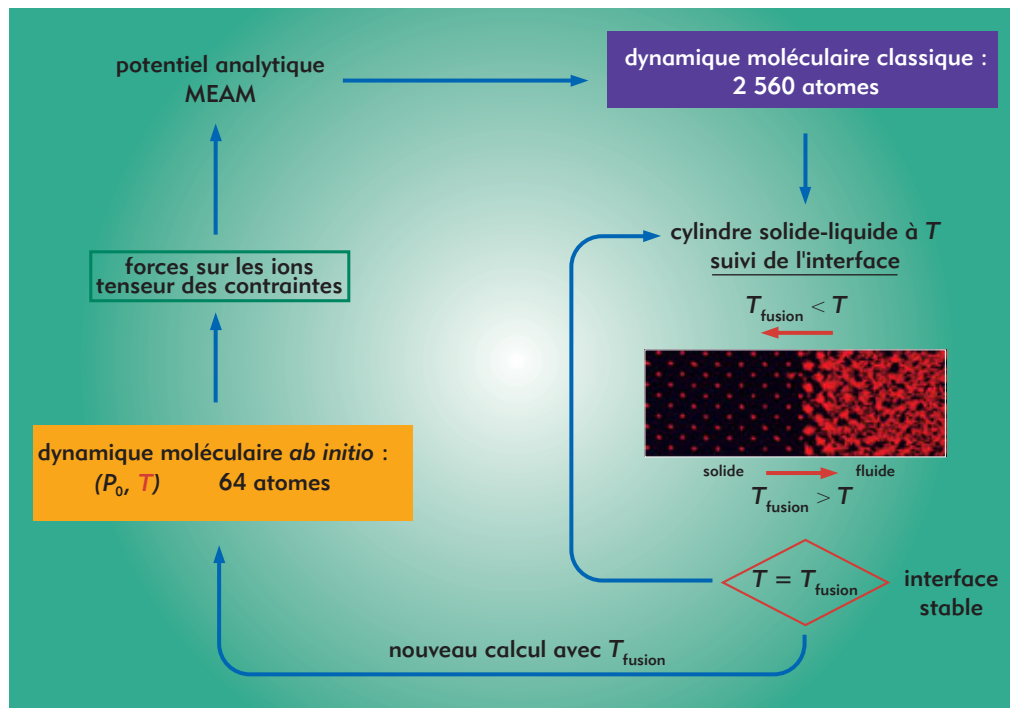


Figure 1. Pour les actinides, dont la structure électronique est compliquée du fait du remplissage progressif de la sous-couche électronique 5f, les calculs effectués par la Théorie de la Fonctionnelle Densité (DFT) dans l'approximation LDA-GGA sont en bon accord avec l'expérience, jusqu'au plutonium, de numéro atomique (nombre de protons) 94. La situation se dégrade fortement pour le plutonium en phase delta (cubique face centrée) et encore plus pour l'américium (de numéro atomique 95). (Calculs réalisés par N. Richard et M. Pénicaud).

Figure 2. Cycle de calcul visant à la détermination ab initio de la courbe de fusion d'un solide. Un potentiel semi-empirique MEAM (Modified Embedded Atom Potential) est ajusté sur les résultats de calculs ab initio effectués sur un petit système compatible avec les possibilités des calculateurs (boîte de gauche) pour des conditions de température et de pression données. Ce potentiel est ensuite utilisé dans une simulation classique (boîte de droite) sur un système beaucoup plus grand, dans les mêmes conditions thermodynamiques. La température de fusion T_{fusion} est atteinte lorsque l'interface solide-liquide se stabilise. Une application de ce procédé a conduit à une réévaluation du diagramme de phases du fer. (A. Laio, S. Bernard et al., Science, Vol. 287, n° 5455, pp. 1027-1030, 11 février 2000).



Cascades de déplacements dans un modèle de solution diluée de cuivre dans le fer, suite à une collision de 10 keV d'énergie : (a) après 0,21 ps (environ 2 vibrations atomiques) un grand nombre d'atomes (en rouge) sont expulsés de leurs sites cristallins, laissés vacants (lacunes en jaune); (b) après 15,27 ps (environ 150 vibrations atomiques) la plupart des atomes éjectés ont retrouvé un site cristallin (en bleu). Quelques défauts ponctuels subsistent, isolés ou en amas; (c) à l'échelle de la nanoseconde, les amas d'interstitiels sont mobiles et éliminent les lacunes sur leur passage. Après 3 ns, la guérison du métal est très avancée. Les défauts résiduels n'emmagasinent que quelques millièmes de l'énergie transférée par la collision.

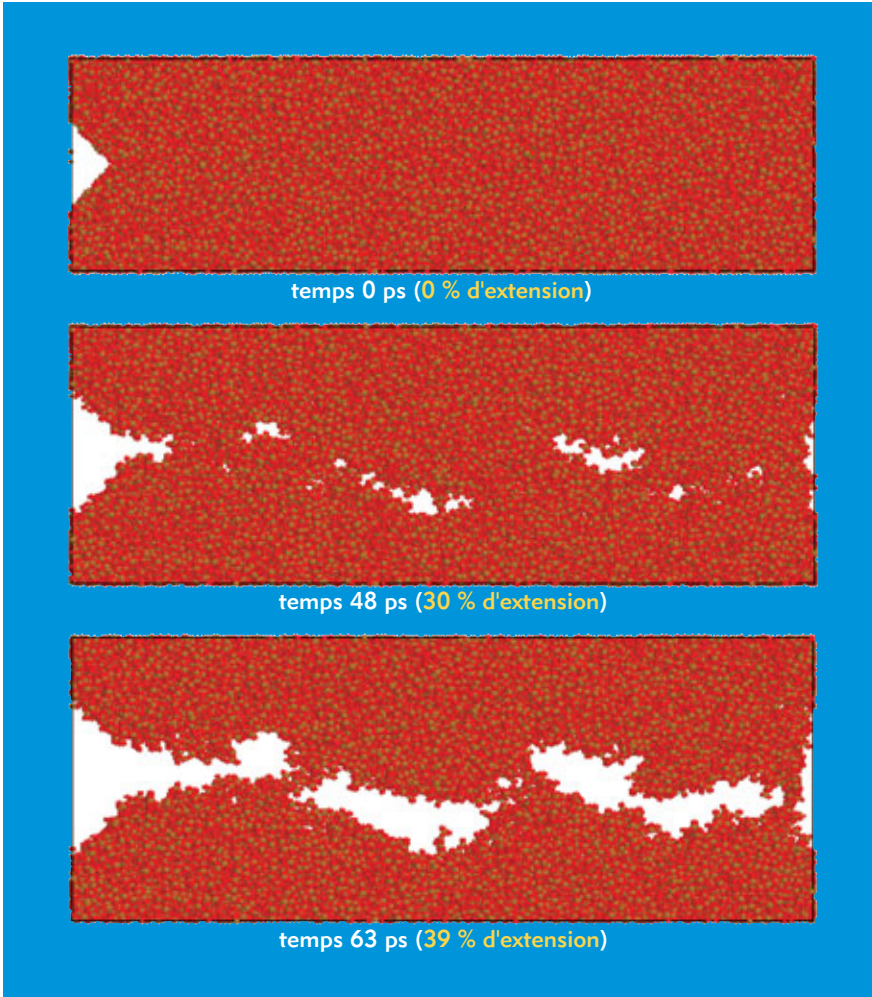
CEA

calcul ab initio. Une telle démarche a été testée, d'abord sur la courbe de fusion du fer, puis étendue aux actinides (figure 2).

Modélisation des événements rapides à l'échelle atomique

L'outil est la dynamique moléculaire. Considérons un ensemble d'atomes liés entre eux par l'un des modèles énergétiques décrits ci-dessus. Dans la limite de la mécanique classique, la trajectoire des atomes est donnée par l'intégration de l'équation de Newton : l'accélération d'un atome est égale à la force qu'il subit divisée par sa masse ; la force est fournie par la variation de l'énergie potentielle avec la position. Cette équation est intégrée à l'aide d'un algorithme très rapide et d'une grande précision. Le modélisateur dispose donc de la trajectoire du système dans son espace de phases (positions et quantités de mouvement). Les ordinateurs actuels permettent d'effectuer de tels calculs pour des ensembles contenant jusqu'à un milliard d'atomes pendant des durées physiques qui peuvent atteindre plusieurs centaines de nanosecondes ($1 \text{ ns} = 10^{-9} \text{ s}$) pour les petits systèmes, du moins si le numéricien a recours à des potentiels semi-empiriques. Au cas où l'énergie potentielle est calculée à partir des premiers principes, il n'est possible de traiter que mille atomes pendant quelques picosecondes ($1 \text{ ps} = 10^{-12} \text{ s}$).

Que fait le modélisateur de telles trajectoires ? Deux choses bien distinctes. Lorsque la mécanique statistique l'autorise, il calcule des grandeurs macroscopiques par intégration le long de la trajectoire et ce, dans divers ensembles thermodynamiques (par exemple en fixant l'énergie totale, le volume et le



Le verre de silice est réputé fragile, mais le mécanisme de propagation de fissure n'a été révélé que récemment, par la dynamique moléculaire. Des pores s'ouvrent et croissent jusqu'à se rejoindre au voisinage des atomes d'oxygène "non pontants", c'est-à-dire qui ne sont pas partagés par deux tétraèdres SiO_2 voisins. La même simulation effectuée sur une forme cristalline de SiO_2 conduit à une rupture par clivage (rupture franche le long d'un plan cristallographique), comme observé expérimentalement.



Précipitation de carbure de niobium dans un acier, simulée par la méthode de Monte-Carlo cinétique à l'échelle atomique : (a) après 2 secondes, la solution solide initiale (les atomes de niobium sont marqués en rouge, ceux de carbone en gris) a donné naissance à des carbures de fer, transitoires (amas gris et jaune) ; (b) au bout de 30 secondes, apparaissent les précipités stables de carbure de niobium qui, en se développant, provoquent la dissolution des carbures de fer ; (c) après une demi-heure, seuls subsistent les carbures de niobium. L'algorithme est capable de gérer deux échelles de temps élémentaires distinctes, celle (rapide) des sauts du carbone interstitiel et celle (lente) des sauts des lacunes permettant la diffusion du fer et du niobium.

CEA

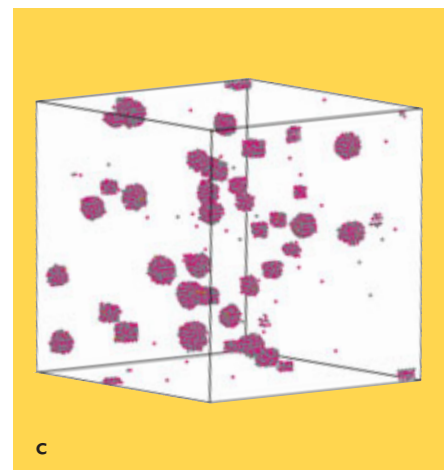
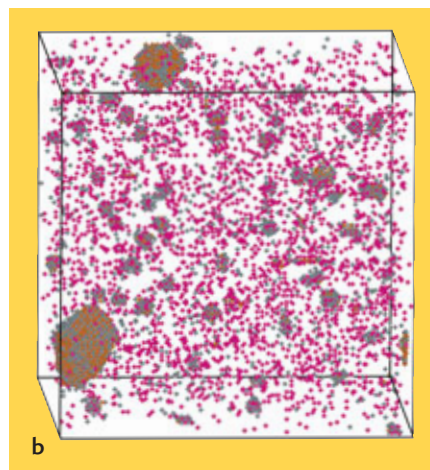
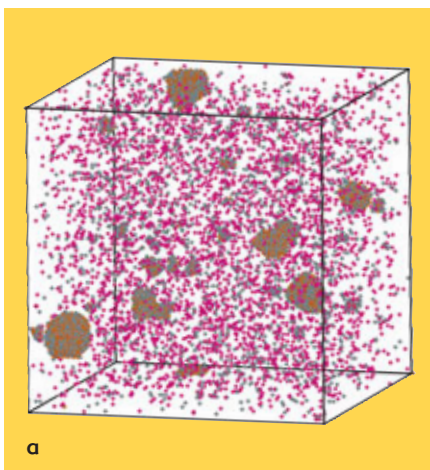
nombre de particules, ou la température, ou la pression...). Si ce n'est pas le cas, à l'aide d'outils de visualisation, il observe les quelques atomes dont l'arrangement est à l'origine des modifications de propriétés du matériau modélisé. Il s'agit d'une véritable "microscopie numérique", le chercheur pouvant, par diverses techniques, observer, caractériser et voir fonctionner la configuration atomique qu'il a repérée. Cette démarche est, par exemple, la source principale de l'idée que le physicien se fait aujourd'hui des cascades de déplacements atomiques, étape pri-

mordiale de l'endommagement des matériaux par l'irradiation.

Ces techniques commencent à porter leurs fruits pour des problèmes de plasticité ou de fracture, où l'échelle atomique est pertinente.

Modélisation de l'évolution lente de la microstructure

Bien souvent, l'évolution de la microstructure est contrôlée par la diffusion des défauts ponctuels ou de leurs amas. Dans ce cas, plusieurs techniques permettent de

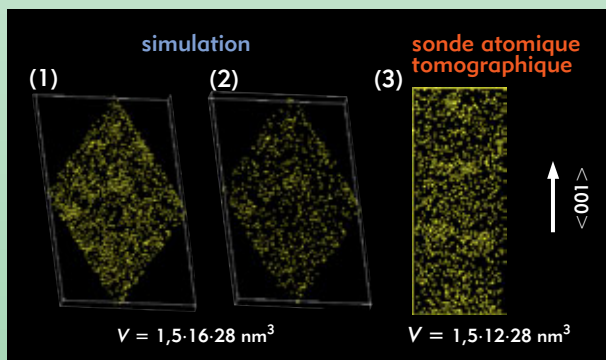


Collaboration Usinor-CEA

Confronter la simulation à l'expérience : la sonde atomique tomographique

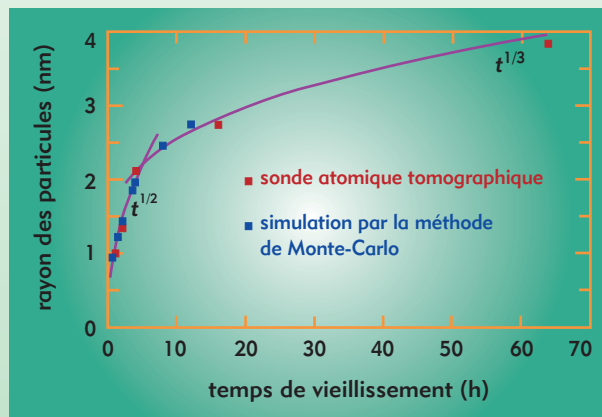
Les chemins de transformation dans les alliages peuvent être observés directement à l'échelle atomique, grâce à la sonde atomique tomographique. En arrachant les ions un à un d'une pointe métallique taillée dans l'alliage, en les accélérant dans un champ électrique et en mesurant leur temps de vol jusqu'à un détecteur à localisation, il est possible de remonter à la répartition spatiale des divers atomes constitutifs de l'alliage. Les volumes analysables par cette technique sont du même ordre de grandeur que ceux simulables par la méthode de Monte-Carlo cinétique à l'échelle atomique. La confrontation directe de la simulation à l'expérience est alors réalisable et a été faite avec succès, en collaboration avec l'université de Rouen, dans le cas relativement complexe de la précipitation dans les alliages ternaires nickel-chrome-aluminium (Ni-Cr-Al).

Un alliage Ni - 14,8 at. % Cr - 5,2 at. % Al a été vieilli à 600 °C pendant des durées croissantes et examiné par sonde atomique



Collaboration CEA-université de Rouen (Pr. D. Blavette et Dr. C. Pareige)

Figure a. Distribution tridimensionnelle de l'aluminium suivant la direction $\langle 001 \rangle$ de l'alliage Ni - 14,8 at. % Cr - 5,2 at. % Al vieilli à 600 °C pendant 1 h. En (1), configuration obtenue par simulation avec 100 % des atomes d'aluminium représentés. En (2), configuration obtenue par simulation avec 50 % des atomes d'aluminium représentés (ce facteur 1/2 correspond au rendement de détection de la sonde atomique tomographique). En (3), distribution expérimentale obtenue par sonde atomique tomographique dans ce même alliage.



Collaboration CEA-université de Rouen (Pr. D. Blavette et Dr. C. Pareige)

Figure b. Taille des précipités en fonction du temps de vieillissement, observée par la sonde atomique tomographique et simulée par la méthode de Monte-Carlo.

tomographique à diverses étapes de sa décomposition. Un chemin cinétique de type "germination-croissance-coalescence" est observé.

Pour les **simulations numériques**, le **modèle** est **paramétré** sur les données expérimentales disponibles dans la littérature (limites de solubilité dans les alliages binaires et ternaires, quelques coefficients de diffusion, structure cristallographique du composé $Ni_3(Al,Cr)$ apparaissant par précipitation). La confrontation des résultats simulés aux résultats de tomographie (figure a) a montré que la simulation par la méthode de Monte-Carlo décrit correctement de manière qualitative et quantitative le chemin cinétique de la transformation : après la formation précoce de zones ordonnées riches en aluminium (diamètre de 1 nm environ), ces zones croissent et s'enrichissent en Al puis, dans un stade ultérieur, s'appauvrissent en Cr. La simulation rend parfaitement compte de ce processus ainsi que, de manière quantitative, de l'évolution au cours du temps de la densité de particules, de la composition des phases et de la taille des particules (figure b).

modéliser, de manière réaliste, c'est-à-dire avec une échelle de temps correcte, le "chemin cinétique" suivi par la microstructure. La *méthode de Monte-Carlo cinétique à l'échelle atomique* est la plus précise, car elle simule l'enchaînement des sauts successifs des défauts, en prenant en compte toute la physique connue sur ces sauts. Les temps simulables peuvent être très longs. Jusqu'à un milliard de sauts de défauts dans du fer ont été simulés ce qui, à la température d'une cuve de **réacteur à eau sous pression**, représente 87 années. Les volumes restent faibles puisque le modélisateur travaille à l'échelle atomique (encadré).

Par des outils théoriques mis au point récemment (*méthode auto-cohérente de champ moyen cinétique*), le modélisateur sait passer de cette description très précise (tel atome sur tel site à chaque instant) à une description probabiliste. Les concentrations en tout point en fonction du temps

sont solutions d'**équations aux dérivées partielles** couplées. On retrouve les méthodes dites de "champ de phase" mais avec un fondement atomistique qui leur confère une définition réaliste du temps physique, tout en s'affranchissant de l'échelle atomique (figure 3).

Une technique en cours de développement au centre de Saclay du CEA est la *méthode de Monte-Carlo cinétique sur événements* (EKMC). Cette méthode est prometteuse, car elle s'affranchit de l'échelle atomique et s'adapte automatiquement aux changements d'échelle temporelle. La microstructure est schématisée par les lignes de dislocations, les **joints de grains** et les amas de défauts ; les espèces mobiles (défauts ponctuels, impuretés mineures, hélium produit par réaction nucléaire...) sont repérées par leur position. Des modèles simples décrivent la probabilité qu'une espèce mobile donnée soit captée, au bout d'un certain temps, par chacun des éléments de la microstructure. Un algorithme

microstructure en fonction des conditions d'irradiation.

Passage de la microstructure aux propriétés d'emploi

Cette étape n'est pas propre au nucléaire et bénéficie du foisonnement actuel des méthodes de modélisation. C'est le domaine

de choix pour la modélisation multi-échelle qui peut prendre les formes les plus diverses, dont la plus courante est l'insertion de grandeurs évaluées par des modélisations à fine échelle (comme la force d'ancrage des dislocations par des amas de défauts) dans les modèles simples de la métallurgie physique classique (par exemple de limite d'écoulement) (figure 4).

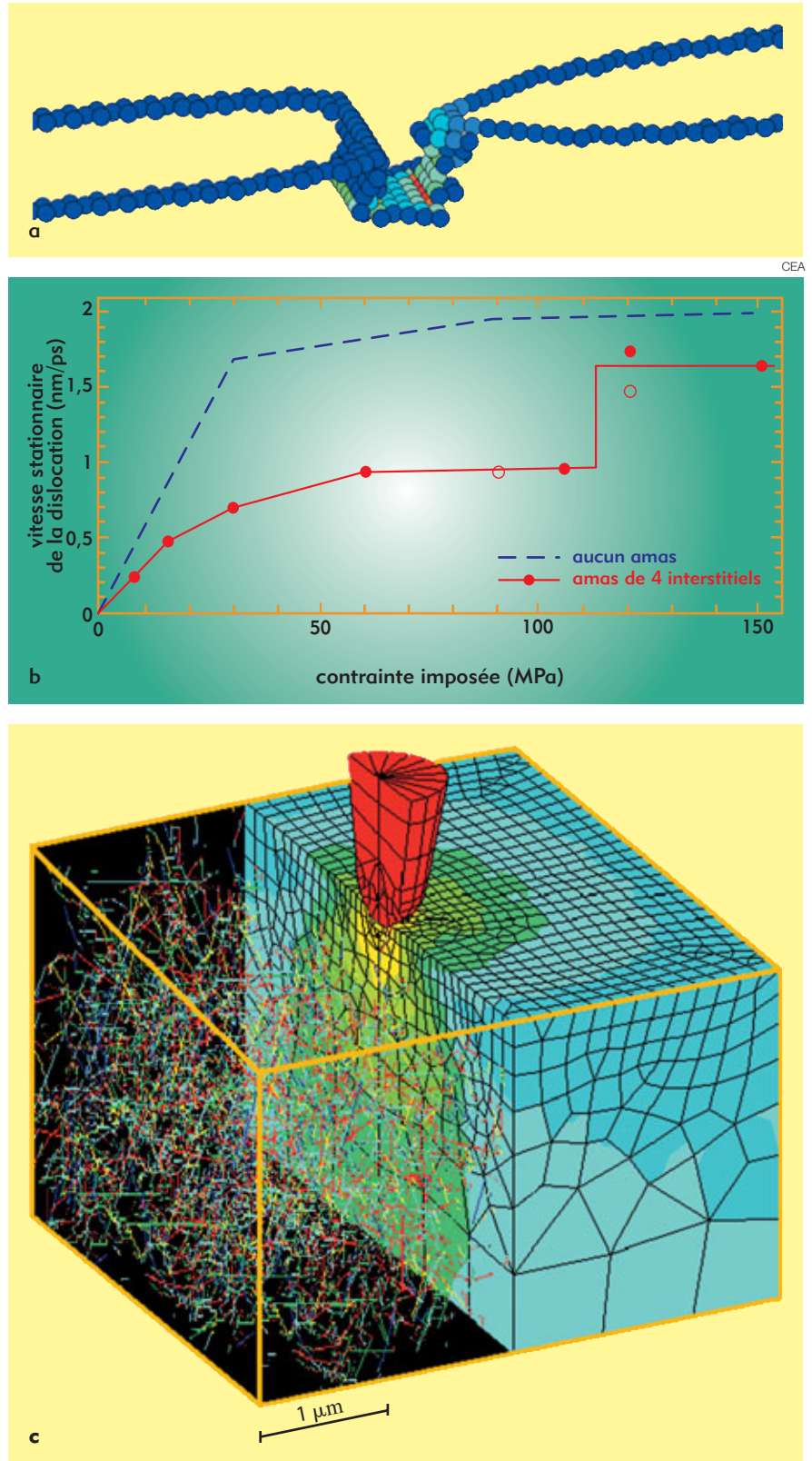
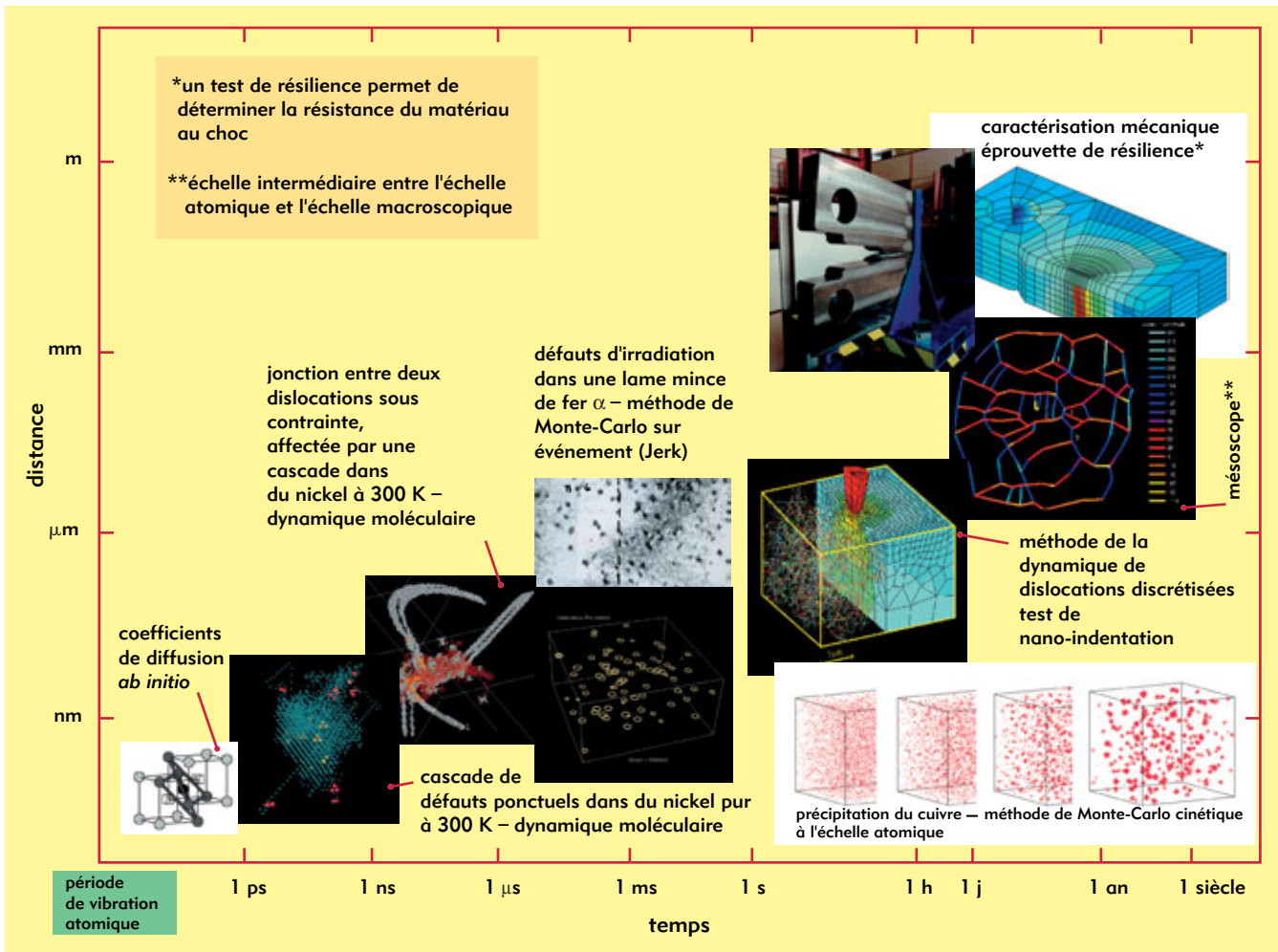


Figure 4. Le durcissement induit par l'irradiation, un exemple de modélisation multi-échelle (le durcissement trouve son origine dans l'élimination des défauts ponctuels, en amas, sur les dislocations) : (a) simulation par dynamique moléculaire de l'épinglage d'une dislocation (qui ne peut plus se déplacer) par un amas d'interstitiels créé par irradiation ; (b) mesure, sur cette simulation, de la force d'ancrage de la dislocation par les amas d'interstitiels ; (c) simulation, par la méthode dite de la dynamique de dislocations **discretisées** (DDD), d'un test de nano-indentation permettant de mettre en évidence le durcissement dû à l'irradiation. Ce test consiste à poser une pointe de diamant sur le matériau et à déterminer l'effet de la force appliquée sur la profondeur de pénétration de la pointe, et ceci à l'échelle **nanométrique**.



CEA

Les modélisations fines sont également susceptibles de fournir les ingrédients de théories sophistiquées (par exemple sur la stabilité des phases dans les alliages sous irradiation)... Il faut signaler que certains couplages entre modèles ou entre un modèle (par exemple d'évolution de micro-structure) et une théorie macroscopique (telle une loi de comportement en mécanique des solides) ne sont pas toujours réalisables en l'état actuel des choses. Des développements théoriques restent à faire.

Simulation et expérience : une confrontation indispensable

L'un des principaux défis et enjeux industriels de la modélisation des matériaux consiste à se doter d'une modélisation prédictive de leurs performances. Celle-ci ne pourra être acquise que par une incorporation, *via* les théories phénoménologiques, de données acquises aux échelles inférieures. L'ensemble des connaissances autour de ces approches se constitue progressivement, permettant à chacun dans son domaine (mécanique, corrosion...) de faire appel à ces outils comme dans un vaste laboratoire numérique de modélisation multi-échelle des matériaux.

Compte tenu de la complexité des matériaux et de leur évolution en service, en particulier sous irradiation, il n'est pas pensable de développer des modèles sans une confrontation permanente à l'expérience. Les expériences "élémentaires" sont des juges infiniment plus sévères du réalisme et de la robustesse d'une modélisation que des mesures de propriétés composites macroscopiques des matériaux. De telles expériences élémentaires sont trop rares ; elles doivent être encouragées parallèlement au développement des méthodes de modélisation.

Cette démarche va s'épanouir sous l'effet conjoint de l'augmentation considérable des moyens de calcul (et de visualisation) et de la miniaturisation des dispositifs expérimentaux.

Georges Martin

Direction de l'énergie nucléaire
CEA centre de Saclay
et Cabinet du Haut-Commissaire
à l'énergie atomique
CEA Siège (Paris)

et **Gilles Zerah**

Direction des applications militaires
CEA centre DAM-Ile de France

Palette des méthodes de modélisation des matériaux, disponibles ou en cours de développement, à diverses échelles d'espace et de temps.



Qu'est-ce qu'une simulation numérique ?

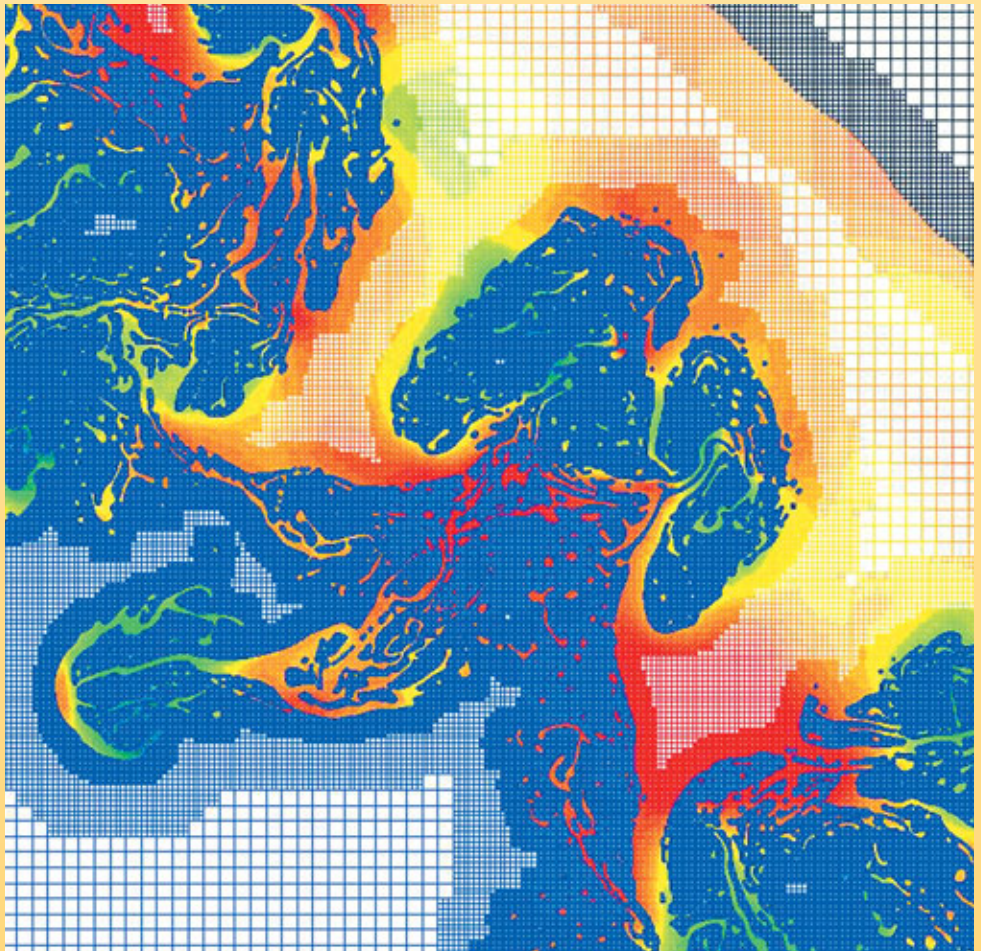
La **simulation numérique** consiste à reproduire par le calcul le fonctionnement d'un système, préalablement décrit par un ensemble de **modèles**. Elle s'appuie sur des méthodes mathématiques et informatiques spécifiques. Les principales étapes de la réalisation d'une étude par simulation numérique sont communes à de nombreux secteurs de la recherche et de l'industrie, en particulier le nucléaire, l'aérospatial ou l'automobile.

En chaque point de l'"objet" considéré, plusieurs grandeurs physiques (vitesse, température...) décrivent l'état et l'évolution du système étudié. Celles-ci ne sont pas indépendantes, mais reliées et régies par des **équations**, généralement **aux dérivées partielles**. Ces équations constituent la traduction mathématique des lois de la physique qui modélisent le comportement de l'objet. Simuler l'état de ce dernier, c'est déterminer – idéalement en tout point – les valeurs numériques de ses **paramètres**. Comme il y a un nombre infini de points, donc une infinité de valeurs à calculer, cet objectif est inaccessible (sauf dans des cas bien particuliers où l'on peut résoudre les équations de départ à l'aide de formules analytiques). Une approximation naturelle consiste donc à ne considérer qu'un nombre fini de points. Les valeurs des paramètres à calculer sont ainsi en nombre fini et les opérations nécessaires deviennent abordables grâce à l'ordinateur. Le nombre effectif de points traités dépendra bien sûr de la puissance de celui-ci : plus il sera élevé, meilleure sera finalement la description de l'objet. À la base du calcul des paramètres comme à la base de la simulation numérique, il y a donc la réduction de l'infini au fini, la **discrétisation**.

Comment opère-t-on précisément à partir des équations mathématiques du modèle ? Deux méthodes sont très souvent utilisées, respectivement représentatives des méthodes de **calcul déterministe**, qui résolvent les équations régissant les phénomènes étudiés après avoir discrétisé les variables, et des méthodes de **calcul statistique** ou **probabiliste**.

Le principe de la première, connue sous le nom de **méthode des volumes finis**, est antérieur à l'usage des ordinateurs. Chacun des points de l'objet est assimilé simplement à un petit volume élémentaire (un cube par exemple), d'où le nom de *volume fini*. Un plasma, par exemple, est ainsi vu comme un ensemble ou un réseau de volumes contigus qui, par analogie avec la trame d'un tissu, sera dénommé **maillage**. Les paramètres de l'état de l'objet sont maintenant définis dans chaque maille du maillage. Pour chacune d'elles, en reformulant les équations mathématiques du modèle par des moyennes volumiques, il sera alors possible de construire des *relations algébriques* entre les paramètres de la maille et ceux de ses voisines. Au total, il y aura autant de relations que de paramètres inconnus et ce sera à l'ordinateur de résoudre le *système* de relations obtenu. Il faudra pour cela recourir aux techniques de l'**analyse numérique** et programmer des **algorithmes** spécifiques.

L'accroissement de la puissance des ordinateurs a permis d'augmenter la finesse de discrétisation, permettant de passer de quelques dizaines de mailles dans les années soixante à plusieurs dizaines de milliers dans les années quatre-vingt, à des millions dans les années quatre-vingt-dix et jusqu'à la dizaine de milliards de mailles aujourd'hui (machine Tera de la Direction



Exemple d'image d'une simulation 2D d'instabilités réalisée avec le supercalculateur Tera du CEA. Le calcul a fait appel au maillage adaptatif, qui se fait plus fin dans les zones où les phénomènes sont les plus complexes.

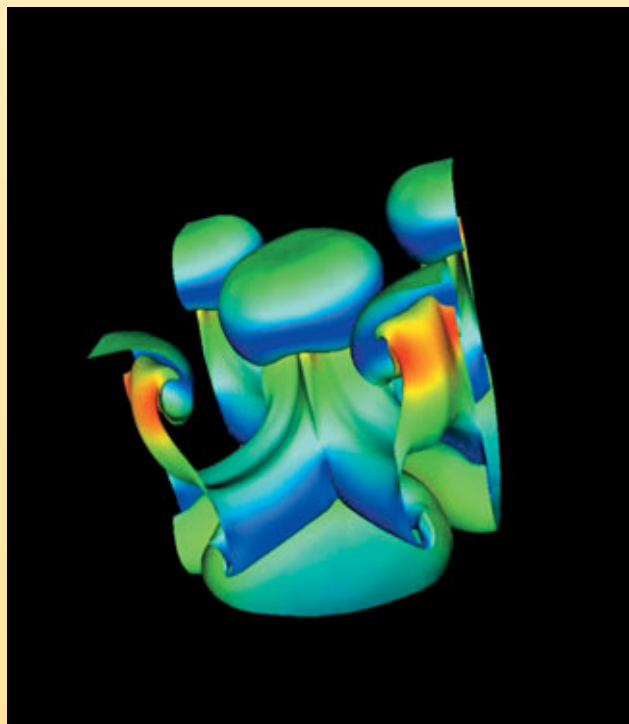
des applications militaires du CEA), chiffre qui devrait décupler à la fin de la décennie.

Un raffinement du maillage, le **remaillage adaptatif**, consiste à ajuster la taille des mailles en fonction des circonstances, par exemple en les rendant plus petites et plus serrées aux interfaces entre deux milieux, là où les phénomènes physiques sont les plus complexes, ou là où les variations sont les plus importantes.

La méthode des volumes finis s'applique dans des contextes physiques et mathématiques très variés. Elle autorise toute forme de maille (cube, hexaèdre, tétraèdre...) et le maillage peut être modifié durant le calcul, en fonction de critères géométriques ou physiques. Enfin, elle est aisée à mettre en œuvre dans le contexte des **ordinateurs parallèles** (encadré B, **Les moyens informatiques de la simulation numérique hautes performances**), le maillage pouvant en effet faire l'objet d'un découpage pour des calculs sur ce type de machines (exemple figure B, p. 13).

Appartiennent à la même famille la **méthode des différences finies**, cas particulier de la **méthode des volumes finis** où les côtés des mailles sont orthogonaux, et la **méthode aux éléments finis**, qui peut juxtaposer divers types de mailles. La deuxième grande méthode, dite de **Monte-Carlo**, est particulièrement adaptée pour simuler le *transport de particules*, par exemple des neutrons ou des photons d'un **plasma** (voir *Les simulations en physique des particules*). Un tel transport est en fait caractérisé par une succession d'étapes lors desquelles chaque particule peut subir différents événements (diffusion, absorption, émission...) possibles *a priori*. Les probabilités élémentaires de chacun de ces événements sont connues individuellement pour chaque particule.

Il est alors naturel d'assimiler un point du plasma à une particule. Un ensemble de particules, en nombre fini, va constituer un échantillon représentatif de l'infinité de particules du plasma, comme lors d'un sondage statistique. D'étape en étape, l'évolution de l'échantillon sera déterminée grâce à des tirages au hasard (d'où le nom de la méthode). L'efficacité de cette méthode, mise en œuvre à Los Alamos dès les années 1940, dépend bien sûr de la qualité statistique des tirages au hasard.



Simulation 3D réalisée à l'aide du supercalculateur Tera installé fin 2001 au centre CEA/DAM Île-de-France à Bruyères-le-Châtel (Essonne).

Il existe pour cela des méthodes de nombres aléatoires, bien adaptées au traitement par un ordinateur.

Les méthodes des volumes finis et de Monte-Carlo ont suscité et suscitent de nombreuses études mathématiques. Ces études s'attachent notamment à préciser la convergence de ces méthodes, c'est-à-dire comment la précision de l'approximation varie avec le nombre de mailles ou de particules. Cette question est naturelle lors de la confrontation des résultats de la simulation numérique à ceux de l'expérience.

Comment se déroule une simulation numérique ?

Il est souvent question d'*expérience numérique* pour souligner l'analogie entre la pratique d'une simulation numérique et la conduite d'une expérience de physique.

Brièvement, cette dernière utilise un dispositif expérimental, configuré selon des conditions initiales (de température, de pression...) et des paramètres de contrôle (durée de l'expérience, des mesures...). Durant l'expérience, le dispositif produit des points de mesures qui sont enregistrés. Ces enregistrements sont ensuite analysés et interprétés.

Dans une simulation numérique, le dispositif expérimental consiste en un ensemble de programmes informatiques exécutés sur des ordinateurs. Les **codes** ou **logiciels de calcul** sont la traduction, à travers des algorithmes numériques, des formulations mathématiques des modèles physiques étudiés. En amont et en aval du calcul, les *logiciels d'environnement* effectuent la gestion de plusieurs opérations complexes de préparation des calculs et de leur dépouillement.

Les données initiales de la simulation comporteront d'abord la délimitation du domaine de calcul à partir d'une représentation approchée des formes géométriques (produite par le dessin et la CAO, conception assistée par ordinateur), suivie de la discrétisation de ce

domaine de calcul sur un maillage, ainsi que les valeurs des paramètres physiques sur ce maillage et les paramètres de contrôle du bon déroulement des programmes... Toutes ces données (produites et gérées par les logiciels d'environnement) seront saisies et vérifiées par les codes. Les résultats des calculs proprement dits, c'est-à-dire les valeurs numériques des paramètres physiques, seront sauvegardés au fur et à mesure. En fait, un protocole spécifique structurera les informations produites par l'ordinateur afin de constituer une base de données numériques.

Un protocole complet organise l'échange informatique des informations requises (dimensions notamment) suivant des formats prédéfinis : *modeleur*⁽¹⁾, *mailleur*⁽²⁾, *découpeur de maillage*, *code*

(1) Le *modeleur* est un outil qui permet la création et la manipulation de points, courbes et surfaces en vue par exemple de la création d'un maillage.

(2) Les formes géométriques d'un maillage sont décrites par des ensembles de points reliés par des courbes et des surfaces (de Bézier par exemple) qui en représentent les frontières.

de calculs, logiciel de visualisation et d'analyse. Les études de *sensibilité* des résultats (au maillage et aux modèles) font partie des "expériences" numériques.

À l'issue des calculs (résolution numérique des équations décrivant les phénomènes physiques qui se déroulent dans chaque maille), l'analyse des résultats par des spécialistes reposera sur l'exploitation de la base de données numériques. Elle comportera plusieurs étapes : extraction sélective des données (selon le paramètre physique recherché) et visualisation, extraction et transfert des données pour calculer et visualiser des diagnostics.

Le parallèle entre la conduite d'un cas de calcul, d'une expérience numérique et la conduite d'une expérience physique ne s'arrête pas là : les résultats numériques seront comparés aux résultats expérimentaux. Cette analyse comparative, effectuée sur la base de critères quantitatifs standardisés, fera appel et à l'expérience

et à l'art de l'ingénieur, du physicien, du mathématicien. Elle débouchera sur de nouvelles améliorations des modèles physiques et des programmes informatiques de simulation.

Bruno Scheurer

Direction des applications militaires
CEA centre DAM-Ile de France

Frédéric Ducros et Ulrich Bieder

Direction de l'énergie nucléaire
CEA centre de Grenoble

L'exemple d'un calcul de thermohydraulique

La mise en œuvre d'un protocole de simulation numérique peut être illustrée par les travaux réalisés par l'équipe de développement du logiciel de calcul **thermohydraulique** Trio U. Ces travaux se sont déroulés dans le cadre d'une étude faite en collaboration avec l'Institut de radioprotection et de sûreté nucléaire (IRSN). L'objectif était d'obtenir des données très précises pour fournir à l'ingénieur les sollicitations en température à la paroi des composants d'un réacteur à eau sous pression dans le cas d'un accident grave impliquant une circulation naturelle turbulente de gaz chauds. Cette étude requiert la modélisation simultanée d'effets "système" à grande échelle et de phénomènes **turbulents** à petite échelle (encadré F, **Modélisation et simulation des écoulements turbulents**).

Elle débute par la définition du modèle de calcul global (figure A), suivie de la réalisation du modèle CAO et du maillage correspondant avec des logiciels du commerce (figure B). Les maillages de plus de cinq millions de mailles exigent l'utilisation de puissantes stations graphiques. Dans cet exemple, le maillage d'un générateur de vapeur (figures C et D) a été découpé pour répartir les calculs sur huit processeurs d'un ordinateur parallèle du CEA : chaque couleur symbolise une zone affectée à un processeur particulier. Les calculs, dont les conditions aux limites sont données par un calcul "système" (Icare-Cathare), produisent des résultats qu'il appartient aux spécialistes d'interpréter. En l'occurrence, les visualisations sur des stations graphiques des valeurs instantanées des champs de vitesse montrent l'impact d'un panache chaud sur la plaque tubulaire du

générateur de vapeur (coupe dans le champ de vitesses à gauche de la figure E) et la température instantanée dans la boîte à eau (à droite).

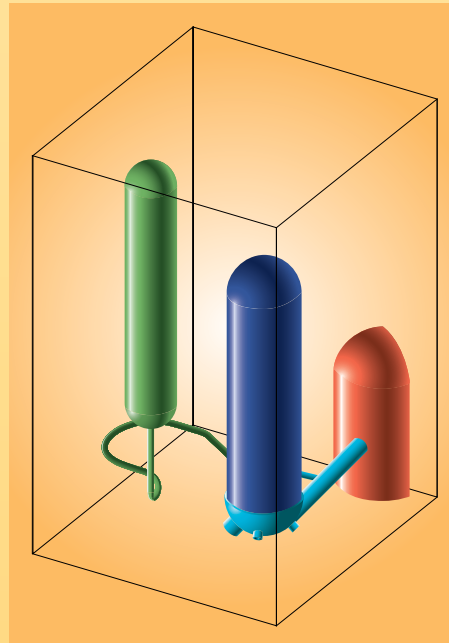


Figure A. Domaine de calcul global incluant une partie de la cuve réacteur (rouge), la conduite de sortie (branche chaude en bleu clair), le générateur de vapeur (bleu foncé) et le pressuriseur (vert).

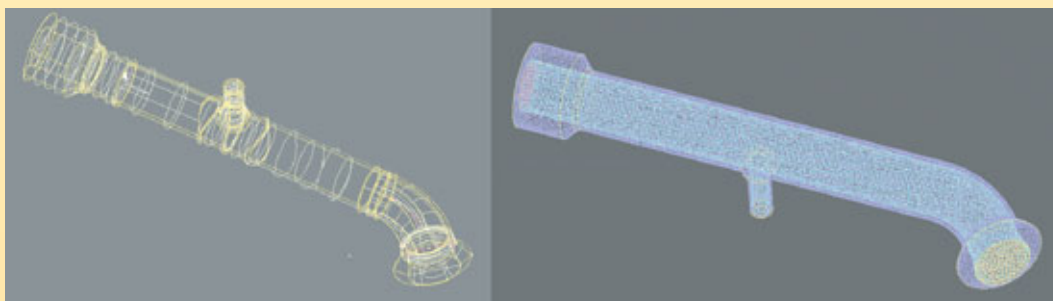
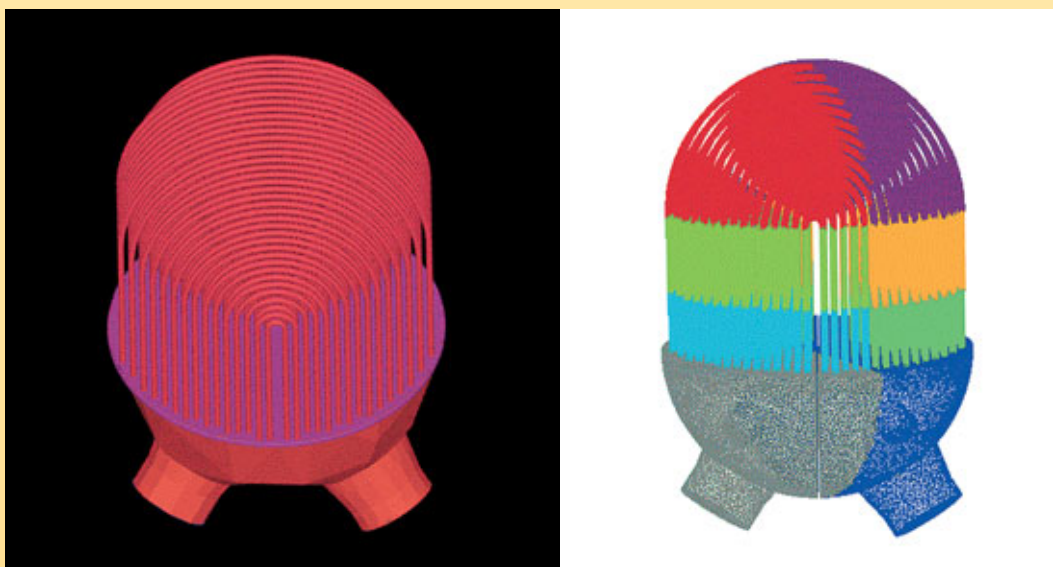


Figure B. Modèle CAO de la branche chaude en sortie de la cuve réacteur (à gauche) et son maillage non structuré (à droite).



Figures C et D.

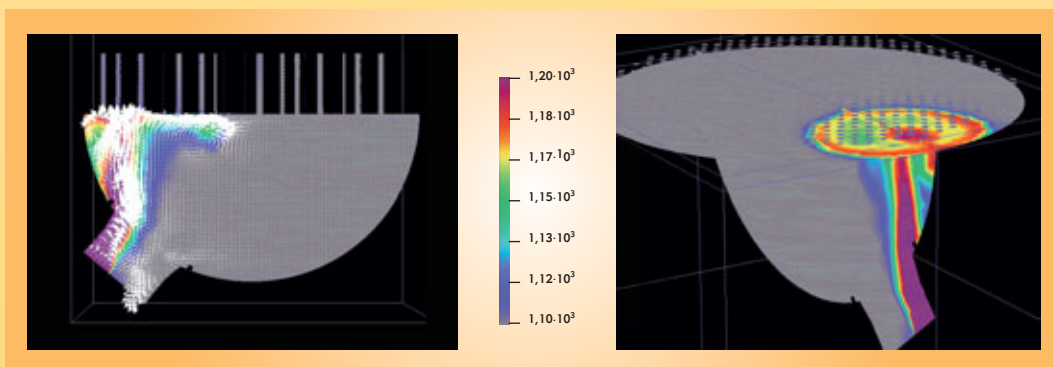


Figure E.

Les moyens informatiques de la simulation

Effectuer des **simulations numériques** plus précises impose de mettre en œuvre des **modèles** physiques et numériques eux-mêmes plus précis portant sur des descriptions plus fines des objets simulés (encadré A, *Qu'est-ce qu'une simulation numérique ?*). Tout ceci nécessite des progrès dans le domaine des logiciels de simulation mais aussi une augmentation importante de la capacité des équipements informatiques sur lesquels ces logiciels sont utilisés.

Processeurs scalaires et vectoriels

Au cœur de l'ordinateur, le processeur est l'unité de base qui, déroulant un programme, effectue les calculs. Il en existe deux grands types, les **processeurs scalaires** et les **processeurs vectoriels**. Les premiers exécutent des opérations portant sur des nombres élémentaires (scalaires), par exemple l'addition de deux nombres. Les seconds exécutent des opérations portant sur des ensembles de nombres (vecteurs), par exemple additionner deux à deux les nombres composant deux ensembles de 500 éléments. À ce titre, ils sont particulièrement adaptés à la simulation numérique : lors de l'exécution d'une opération de ce type, un processeur vectoriel peut fonctionner à une vitesse proche de sa performance maximale (crête). La même opération avec un processeur scalaire exige de nombreuses opérations indépendantes (opérations par composante des vecteurs) qui s'exécutent à une vitesse bien inférieure à sa vitesse crête. L'avantage principal des processeurs scalaires est leur prix : il s'agit de microprocesseurs généralistes dont les coûts de conception et de fabrication peuvent être amortis sur de larges marchés.

Forces et contraintes du parallélisme

Les processeurs récents permettent de hautes performances, d'une part en utilisant une fréquence de fonctionnement plus élevée, d'autre part en cherchant à exécuter en même temps

plusieurs opérations : c'est un premier niveau de **parallélisme**. L'accélération de la fréquence est limitée par l'évolution de la technologie micro-électronique, tandis que les dépendances entre instructions à exécuter par le processeur limitent le parallélisme possible. La mise en œuvre simultanée de plusieurs processeurs constitue un second niveau de parallélisme, qui permet d'obtenir des performances accrues à condition de disposer de programmes capables d'en tirer parti. Alors que le parallélisme au niveau des processeurs est automatique, celui *entre processeurs* dans un ordinateur parallèle est à la charge du programmeur, qui doit découper son programme en morceaux indépendants et prévoir entre eux les communications nécessaires. On procède souvent par un découpage du domaine sur lequel porte le calcul, chaque processeur étant chargé de simuler le comportement d'un domaine, et par l'établissement de communications régulières entre processeurs afin de garantir la cohérence d'ensemble du calcul. Pour obtenir un programme parallèle efficace, il faut s'assurer de l'équilibrage de charge entre processeurs et chercher à limiter le coût des communications.

Les différentes architectures

Les équipements informatiques ont différentes fonctions. À partir de son ordinateur de travail sur lequel il prépare ses calculs et en analyse les résultats, l'utilisateur accède à des moyens de calcul, de stockage, et de visualisation partagés, mais beaucoup plus puissants que les siens propres. L'ensemble de ces équipements sont reliés par des réseaux informatiques permettant de faire circuler les informations entre eux avec des débits compatibles avec le volume de données produites, pouvant atteindre 1 **téraoctet** (1 To = 10^{12} octets) de données pour une seule simulation.

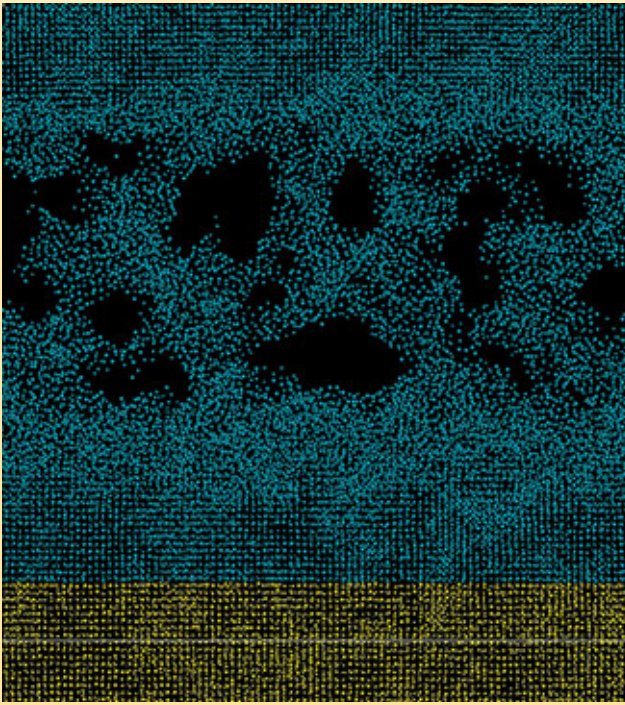
Les grands équipements de calcul sont généralement appelés **supercalculateurs**. Ils atteignent aujourd'hui des puissances qui se chiffrent en **téraflops** (1 Tflops = 10^{12} opérations de calcul par seconde).

Il existe aujourd'hui trois grands types de supercalculateurs : les supercalculateurs vectoriels, les grappes de mini-ordinateurs à mémoire partagée et les grappes de PC (l'ordinateur que chacun possède chez soi). Le choix entre ces architectures dépend largement des applications et de l'utilisation visées. Les supercalculateurs vectoriels disposent de processeurs très performants mais dont il est difficile d'augmenter la puissance en ajoutant des processeurs. Les grappes de PC sont peu coûteuses mais mal adaptées à des environnements où de nombreux utilisateurs font beaucoup de calculs très gourmands en puissance machine, en mémoire et en entrées-sorties.

Ce sont ces considérations qui ont en particulier conduit la Direction des applications militaires (DAM) du CEA à choisir pour son programme simulation (voir *Le programme Simulation : la garantie des armes sans essais nucléaires*) les architectures de type grappe de mini-ordinateurs à mémoire partagée, encore appelées **clusters de SMP** (Symmetric Multi-Processor). Un tel système utilise comme brique de base un mini-ordinateur com-



Installée en décembre 2001 au CEA (centre DAM-Ile de France) et conçue par Compaq (devenue depuis HP), la machine Tera a pour élément de base un mini-ordinateur à 4 processeurs Alpha à 1 GHz partageant une mémoire de 4 Go et fournissant une puissance totale de 8 Gflops. Ces éléments de base sont interconnectés par un réseau rapide conçu par la société Quadrics. Une opération de synchronisation sur l'ensemble des 2 560 processeurs s'effectue en moins de 25 microsecondes. Le système de fichiers global offre un espace de stockage de 50 téraoctets pour les entrées-sorties avec une bande passante agrégée de 7,5 Go/s.



Les calculateurs parallèles sont adaptés aux méthodes numériques basées sur des maillages (encadré A, **Qu'est-ce qu'une simulation numérique ?**) mais aussi au traitement de calculs ab initio comme cette simulation par dynamique moléculaire de l'endommagement par choc de deux plaques de cuivre à 1 km/s (voir La simulation des matériaux). Le système considéré est constitué de 100 000 atomes de cuivre représentant un parallélépipède de section carrée (0,02 µm de côté) à densité normale. Les atomes interagissent suivant un potentiel EAM (embedded atom potential) pendant 4,6 picosecondes. Le calcul, effectué sur 18 processeurs du supercalculateur Tera de Bruyères-le-Châtel à l'aide du logiciel Stamp développé au CEA, a représenté une dizaine de minutes de temps "utilisateur" (calcul réalisé par B. Magne). Des tests impliquant jusqu'à 64 millions d'atomes ont été réalisés, mobilisant 256 processeurs pendant une centaine d'heures.

portant plusieurs microprocesseurs qui partagent une mémoire commune (figure). Ces mini-ordinateurs étant largement diffusés dans des domaines variés allant de la banque au serveur web

en passant par les bureaux d'études, ils offrent un excellent rapport performance/prix. Ces "briques" de base (encore appelées *nœuds*) sont reliées entre elles par un réseau d'interconnexion hautes performances : la puissance cumulée de plusieurs centaines de ces "briques" peut atteindre plusieurs téraflops. On parle alors d'**ordinateur massivement parallèle**.

Cette puissance peut être disponible pour une seule application parallèle utilisant toutes les ressources du supercalculateur mais aussi pour de multiples applications indépendantes, parallèles ou non, utilisant chacune une partie des ressources.

Si la caractéristique mise en avant pour décrire un supercalculateur est en général sa puissance de calcul, il ne faut pas négliger l'aspect entrées-sorties. Ces machines capables d'effectuer des simulations de grande taille doivent disposer de systèmes de disques avec des capacités et des performances adaptées. Dans les *clusters* de SMP, chaque mini-ordinateur dispose d'un espace disque local. Il n'est néanmoins pas judicieux d'utiliser celui-ci pour les fichiers utilisateurs, ce qui obligerait l'utilisateur à explicitement déplacer ses données entre les différentes phases de ses calculs. Pour cette raison, il est important de disposer d'un espace disque accessible par l'ensemble des mini-ordinateurs du supercalculateur. Cet espace est en général constitué de batteries de disques reliées à des nœuds dont la fonction principale est de les gérer. Comme pour le calcul, c'est le parallélisme pour les entrées-sorties qui permet d'offrir des performances élevées. Il faut, pour ce faire, disposer de systèmes de fichiers globaux parallèles permettant un accès rapide et sans contraintes à l'espace disque partagé.

Offrant des puissances de calcul considérables, les *clusters* de SMP posent néanmoins plusieurs défis. Parmi les plus importants, outre la programmation de logiciels de simulation capables de tirer parti du grand nombre de processeurs, il faut mettre au point des systèmes d'exploitation et les logiciels associés compatibles avec de telles configurations et tolérants vis-à-vis des pannes.

François Robin

Direction des applications militaires
CEA centre DAM-Ile de France

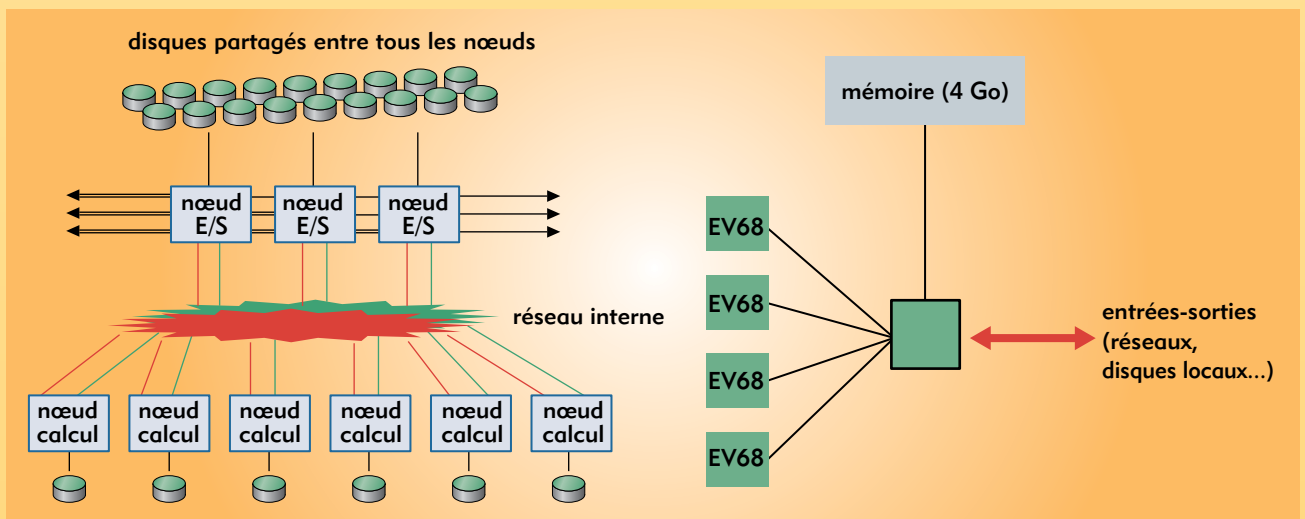


Figure. Architecture d'une machine du type "cluster de SMP". À gauche, l'architecture générale (E/S = entrée/sortie), à droite celle d'un nœud avec quatre processeurs Alpha EV68 cadencés à 1 GHz.

Modélisation et simulation des écoulements turbulents

La **turbulence**, ou l'agitation de l'écoulement dit turbulent, se développe dans la plupart des écoulements qui conditionnent notre environnement immédiat (rivières, océan, atmosphère). Elle se révèle être aussi un, sinon le, paramètre dimensionnant dans un bon nombre d'écoulements industriels (liés à la production ou la conversion d'énergie, à l'aérodynamique...). Il n'est donc pas étonnant que soient entrepris des efforts visant sa prédiction – fût-elle encore imprécise – surtout lorsqu'elle se trouve combinée à des phénomènes qui la compliquent : stratification, combustion, présence de plusieurs phases... C'est que, paradoxalement, même s'il est possible d'anticiper la nature turbulente d'un écoulement et même, d'un point de vue théorique, de dégager certaines caractéristiques communes et apparemment universelles aux écoulements turbulents⁽¹⁾, leur prédiction dans

des cas précis reste délicate. Celle-ci doit en effet prendre en compte l'importante gamme d'échelles spatiales et temporelles⁽²⁾ impliquées dans tout écoulement de ce type.

Les chercheurs ne sont pourtant pas démunis, aujourd'hui, pour aborder ce problème. En premier lieu, les équations qui régissent l'évolution spatio-temporelle des écoulements turbulents (équations de Navier-Stokes⁽³⁾) sont connues. Leur résolution complète, dans des cas très favorables, a conduit à des descriptions prédictives. Mais l'emploi systématique de cette méthode de résolution se heurte à deux difficultés rédhibitoires : d'une part, il nécessiterait la connaissance complète et simultanée de toutes les variables attachées à l'écoulement et des forçages s'exerçant sur lui⁽⁴⁾ et, d'autre part, il mobiliserait des moyens de calculs irréalistes pour encore des décennies.

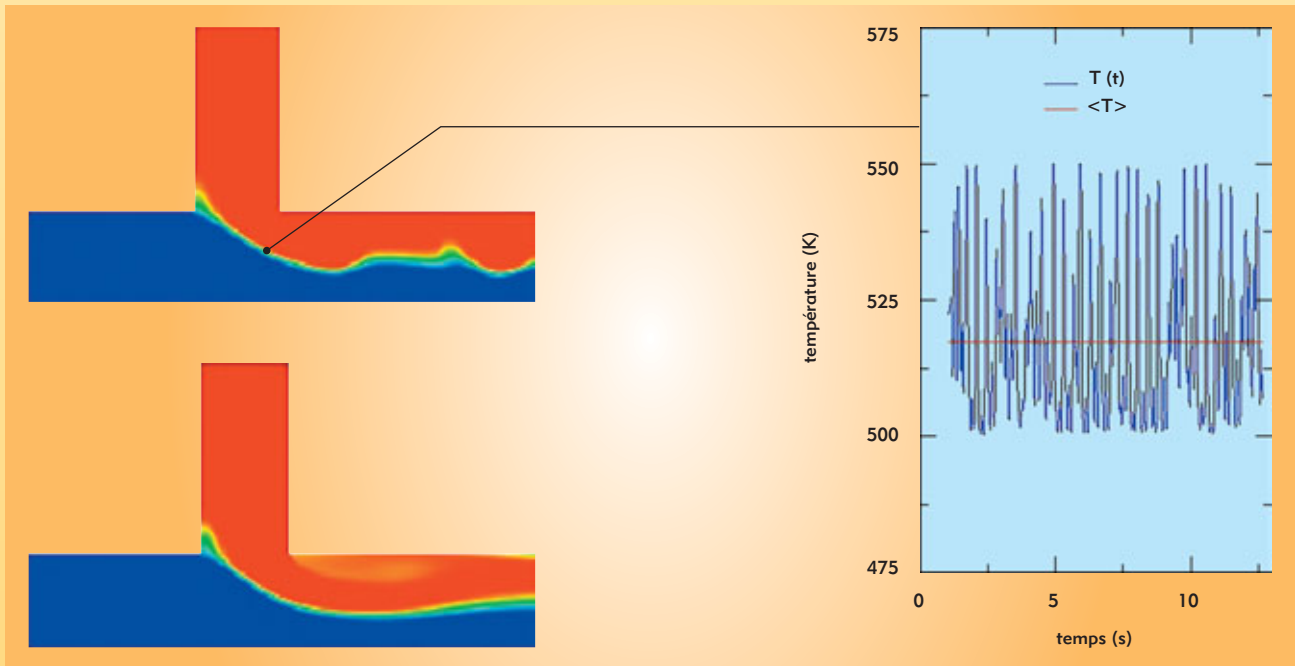


Figure. Champ de température instantané (haut) et moyenné (bas) dans une situation de mélange. La courbe donne l'historique de la température en un point : valeur instantanée fluctuante en bleu et moyenne en rouge (d'après la thèse d'Alexandre Chatelain [DEN/DTP/SMTH/LDTA]).

Il faut donc se résoudre, en s'appuyant sur le caractère fluctuant dû à l'agitation turbulente, à définir et utiliser des moyennes. Une des approches les plus répandues consiste à aborder le problème sous un angle statistique. Les moyennes d'ensemble de vitesse, de pression, de température... dont la distribution caractérise l'écoulement turbulent sont définies comme les variables principales de l'écoulement qu'on cherche à qualifier par rapport à ces moyennes. Ceci conduit à une décomposition du mouvement (dite de Reynolds) en champs moyen et fluctuant, ce dernier mesurant l'écart instantané et local entre chaque grandeur réelle et sa moyenne (figure). Ces fluctuations représentent la turbulence et couvrent une partie importante du spectre de Kolmogorov⁽¹⁾.

Cette opération réduit considérablement le nombre de degrés de liberté du problème et le rend « manipulable » informatiquement. Elle comporte aussi de nombreuses difficultés : il faut tout d'abord constater que, précisément en raison des non-linéarités des équations du mouvement, toute moyenne fait surgir des termes nouveaux et inconnus qu'il faut estimer. En fermant la porte à la description complète et déterministe du phénomène, on ouvre celle de la modélisation, c'est-à-dire à la représentation des effets de la turbulence sur les variables moyennes.

Beaucoup de progrès ont été accomplis depuis les premiers modèles (Prandtl, 1925). Les modélisations n'ont cessé d'évoluer vers plus de complexité, se basant sur le fait généralement vérifié que toute nouvelle extension permet de conserver les propriétés antérieurement acquises. Il faut aussi constater que, même

si de nombreux développements remettent en avant la nécessité de traiter les écoulements en respectant leur caractère *instationnaire*, les modélisations les plus populaires ont été développées dans le cadre des écoulements *stationnaires*, pour lesquels on n'accède donc qu'à une représentation de la moyenne temporelle de l'écoulement : dans le modèle mathématique final, les effets de la turbulence proviennent ainsi intégralement de la modélisation.

Il est également remarquable que, malgré de nombreux travaux, aucune modélisation n'est aujourd'hui capable de rendre compte de l'intégralité des phénomènes qui influencent la turbulence ou sont influencés par elle (transition, instationnarité, stratification, compression, etc.). Ce qui semble pour l'instant empêcher les modélisations statistiques de nourrir une ambition d'universalité.

Malgré ces limitations, la plupart des modélisations statistiques courantes sont maintenant disponibles dans les codes commerciaux et les outils des industriels. Il n'est pas possible de prétendre qu'elles permettent des calculs prédictifs dans toute situation. Leur précision est variable, offrant des résultats utiles pour l'ingénieur dans des situations maîtrisées et favorables (prédiction de la traînée avec une précision de 5 % à 10 % d'erreur [parfois mieux] sur certains profils), mais parfois faux dans des situations qui se révèlent, après coup, en dehors du champ de validité du modèle. Tout emploi maîtrisé d'une modélisation repose donc sur une qualification particulière au type d'écoulement à traiter. Des modélisations alternatives, répondant au besoin d'une plus grande précision sur des gammes d'échelles spatiales et temporelles plus étendues et donc basées sur un opérateur de "moyenne" d'une nature différente, sont actuellement en développement et représentent des voies nouvelles.

Le paysage des modélisations de la turbulence est aujourd'hui très complexe et l'unification des points de vue et des divers concepts de modélisation est une gageure. La tentation de l'universalité des modélisations reste donc hors de propos. Leur mise en œuvre réelle relève la plupart du temps de compromis généralement guidés par le savoir-faire de l'ingénieur.

(1) On peut faire référence à la répartition spectrale de l'énergie cinétique turbulente, connue comme le "spectre de Kolmogorov", qui illustre de manière très simple la hiérarchie des échelles, des grandes échelles porteuses d'énergie aux échelles de plus en plus petites et de moins en moins énergétiques.

(2) Cette étendue est le résultat des non-linéarités des équations du mouvement qui donne naissance à une gamme étendue d'échelles spatiales et temporelles. Cette gamme est une fonction croissante du nombre de Reynolds, Re , mesurant le rapport entre force d'inertie et force visqueuse.

(3) L'hypothèse selon laquelle la résolution complète des équations de Navier-Stokes permet la simulation de la turbulence est généralement admise, tout du moins dans la gamme des écoulements sans choc.

(4) Il s'agit d'un problème régi par des conditions initiales et aux limites.

La modélisation moléculaire

C

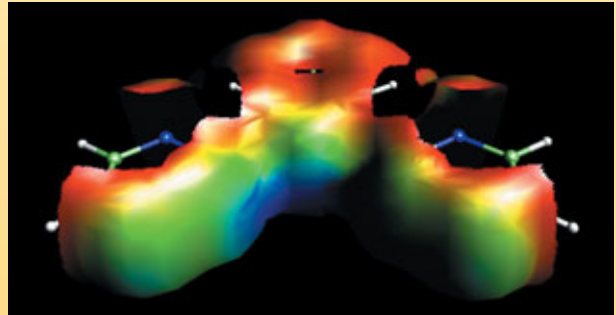
Les chercheurs en chimie et en biologie, ainsi qu'en physique des matériaux, font de plus en plus largement appel à des outils qui leur permettent de prévoir avec toujours plus de finesse les effets des molécules en fonction de leur structure et, ce qui est encore plus intéressant pour les concepteurs, d'imaginer la structure de nouveaux édifices qui est susceptible d'induire un comportement donné et *in fine* produire l'effet recherché.

Cette approche **théorique** dispose d'une large gamme d'outils mais parmi les principaux figurent la chimie quantique, la mécanique et la dynamique moléculaires, également utilisées en physique des matériaux.

La **chimie quantique**, basée sur les lois de la mécanique quantique, sert avant tout à décrire la structure des molécules et leur comportement dans les processus tels que les réactions chimiques.

La **dynamique moléculaire classique** simule le mouvement des atomes des systèmes moléculaires et l'évolution de leur configuration spatiale à partir d'équations de la mécanique classique. Elle donne accès à des propriétés structurales, dynamiques et thermodynamiques.

Comme la chimie quantique, la **mécanique moléculaire** est une méthode permettant d'étudier la structure et le comportement des molécules mais elle est moins coûteuse, plus rapide et, donc, peut être utilisée pour décrire les systèmes de milliers d'atomes tels que les **macromolécules biologiques**.



CEA/DEN/J.-P. Dognon

Représentation, calculée par une méthode de chimie quantique, du potentiel électrostatique autour d'une molécule de BTP (bis-triazinyl-pyridine) développée pour le procédé Sanex de séparation des actinides et des lanthanides.