

## Séminaire « Modélisation & Simulation » au Laboratoire Hubert Curien

Vendredi 15 mars, salle D03, Campus Carnot, Saint Etienne.

Plusieurs équipes mènent des travaux de recherche dans le domaine de la modélisation et la simulation au sein du laboratoire Hubert Curien. Si les sujets traités couvrent des thématiques assez différentes, il est cependant évident que des recoupements entre les approches, les méthodes physiques ou numériques mises en œuvre sont possibles. Par ailleurs, les compétences du laboratoire dans ce domaine ne manqueront pas d'intéresser également les collègues expérimentateurs.

L'objectif de ce séminaire est donc de donner un aperçu de certaines des activités de modélisation et de simulation au sein du laboratoire afin de stimuler d'éventuelles collaborations internes ou externes à celui-ci. Une priorité a été donnée aux activités de recherche nouvelles, ainsi qu'aux axes de recherche à l'interface entre plusieurs disciplines.

Ces présentations étant destinées à un public non nécessairement spécialiste, un effort de pédagogie sera donc demandé aux intervenants.

Merci de s'inscrire par mail avant le 11 mars à [raphael.clerc@univ-st-etienne.fr](mailto:raphael.clerc@univ-st-etienne.fr) (l'inscription est gratuite).

### Modélisation et Simulation en Optique et Photonique.

9h - 9h15 : « [Introduction aux présentations suivantes en optique et photonique à l'usage des non spécialistes](#) », *Raphaël Clerc*.

9h15 - 9h40 : « [Modélisation des interactions laser avec des cibles solides: seuil d'endommagement, d'ablation et la formation de nanoparticules](#) » *Tatiana E. Itina*.

9h40 - 10h05 : « [Modélisation de la nano-structuration périodique de surface après impact d'une impulsion laser ultra brève sur une cible métallique](#) » *Jean Philippe Colombier*.

10h05 - 10h30 : « [Simulation multi - échelle des effets des radiations sur les fibres optiques](#) » *Sylvain Girard*.

10h30 - 11h : Pause Café

11h - 11h25 : « [Modélisation des composants à semiconducteurs](#) », *Raphaël Clerc*.

11h25 - 11h50 : « [De  \$N^3\$  à  \$N \log N\$  : Repousser la frontière entre modélisation électromagnétique scalaire et exactes](#) », *Alexandre V. Tishchenko*.

11h50 - 12h15 : « [Modéliser l'apparence des surfaces colorées](#) », *Mathieu Hebert*.

### Modélisation et Simulation en Informatique, Télécommunication et images.

13h30 – 13h45 : « [Introduction aux présentations suivantes en Informatique, Télécommunication et images, à l'usage des non spécialistes](#) », *Thierry Fournel*.

13h45 – 14h10 : « [Modélisation des phénomènes aléatoires dans les circuits électroniques: problématique, enjeux et perspectives](#) », *Florent Bernard*.

14h10 – 14h35 : « [Restauration et Reconstruction des images par simulation](#) », *Loïc Denis*.

14h35 – 15h00 : « [Contrastes et métriques logarithmiques. Application aux images à éclairage non contrôlé](#) », *Michel Jourlin*.

15h00 – 15h25 : « [Apprentissage de modèles de métriques](#) », *Marc Sebban*.

**Un résumé de chaque intervention est donné dans la suite du document →**

## **Modélisation des interactions laser avec des cibles solides: seuil d'endommagement, d'ablation et la formation de nanoparticules**

Tatiana E. Itina, N. S. Shcheblanov, T.-Y. Derrien

**Résumé:** Les modèles multi-échelle des interactions laser sont développés au Laboratoire Hubert Curien dans le cadre du projet LASERMODE (mis en place en 2009). Les processus physiques mis en jeu lors de ces interactions sont très complexes et dépendent à la fois des paramètres laser et des propriétés de la cible. Les modèles comportent une ou plusieurs des étapes numériques suivantes

- ionisation (multi-photonique/tunnel par impacts d'électrons) et transport des porteur dans un solide;
- absorption de l'énergie laser ;
- relaxation de l'énergie (collisions électron-électron, électron-phonon, excitons, etc..)
- transitions de phase (fusion, évaporation, explosion des phases, etc) ;
- effets mécaniques (contraintes, ondes de choc, etc..) ;
- éjection de la matière (vapeur, agrégats, ions, électrons) ;
- expansion d'un panache d'ablation ; formation de nanoparticules et/ou nanostructures.

Au lieu de développer un seul modèle, nous proposons un développement de plusieurs modèles couplés. Des exemples des modules séparés et des modèles à l'échelle plus large seront présentés.

## **Modélisation de la nano-structuration périodique de surface après impact d'une impulsion laser ultra brève sur une cible métallique**

Jean Philippe Colombier

**Résumé:** Une approche numérique est développée afin de décrire les effets d'une excitation laser ultrabrève (~100 fs) en terme de dé-structuration séquentielle, de transformation structurelle ou d'auto-organisation en surface d'un solide irradié. Ainsi, un premier aspect de cette modélisation consiste à décrire l'évolution des propriétés de transport engendrées par l'impulsion électromagnétique. En particulier, ses propriétés optiques hors d'équilibre sont actuellement à l'étude par des moyens ab initio afin de déterminer la quantité d'énergie déposée dans le matériau ainsi que sa réponse plasmonique pouvant initier des rides en surface. Les conséquences de la forte concentration spatiale et temporelle de l'énergie laser sont ensuite évaluées au moyen de simulations hydrodynamiques, permettant d'évaluer les niveaux de contraintes, les transitions de phase, et les mouvements de la surface, en réaction à l'intense rayonnement.

## **Simulation multi - échelle des effets des radiations sur les fibres optiques**

Sylvain Girard, Y. Ouerdane, A. Boukenter

**Résumé:** Une approche couplée simulations/expériences a été mise en place par le laboratoire Hubert Curien et le CEA DAM depuis 2006 en vue d'établir une chaîne de simulation permettant de prédire le comportement de verres massifs ou fibres optiques en environnements radiatifs (nucléaire civil, spatial, physique des hautes énergies). Pour cela, des outils ont été validés à différentes échelles. A l'échelle atomique, des simulations utilisant des codes post-DFT (Density Functional Theory) se sont révélées nécessaires pour le calcul des propriétés optiques des défauts ponctuels à l'origine de la dégradation. Au niveau composant, des outils sont en cours de développement afin de modéliser l'interaction de la lumière avec des guides d'onde dont les propriétés optiques évoluent durant ou après une irradiation. Dans cette présentation, nous détaillerons le contexte de nos travaux, les principales avancées ainsi que les perspectives à moyen terme.

## Modélisation des composants à semiconducteurs

Raphaël Clerc

**Résumé :** la modélisation des composants à semiconducteurs pour l'électronique et l'optique repose sur une grande variété d'approches physiques différentes.

Dans cette présentation, nous présenterons l'expérience acquise dans le domaine de la modélisation et la simulation du transistor MOS Métal Oxyde Semiconducteur (effet tunnel, confinement quantique, transport hors équilibre par méthode Monte Carlo), composant de base de la microélectronique silicium. Dans un second temps, nous décrirons les approches mises en œuvre pour modéliser les composants organiques imprimés (photodiodes et cellules solaires notamment), une technologie radicalement différente de la première, et les perspectives de recherche dans ce domaine au sein du laboratoire Hubert Curien.

## De $N^3$ à $N \log N$ : Repousser la frontière entre modélisation électromagnétique « scalaire » et « exactes »

Alexandre V. Tishchenko

**Résumé:** La formulation des problèmes de diffraction/diffusion du point de vue des sources généralisées ouvre un chemin où de puissants algorithmes numériques ultra-rapides peuvent être utilisés pour la modélisation exacte de sections de taille exceptionnellement élevées. La modélisation de systèmes optiques aussi complexes était jusqu'ici, uniquement accessibles par des méthodes scalaires. Repousser les limites usuelles de temps de calcul ( $N^3$ ) et de mémoire ( $N^2$ ) par une dépendance linéaire en  $N$  permet de modéliser des systèmes tel que la lithographie DUV et EUV, le design de DOEs de grande NA, éventuellement non périodiques, ainsi que dans la gestion de lumière d'éclairage et le piégeage/extraction de lumière par couches diffusantes.

Dès lors qu'une dépendance temporelle linéaire a été obtenue et que le problème de mémoire a été résolu, de larges perspectives sont ouvertes pour la modélisation électromagnétique exacte qui pourra élargir progressivement son champ d'application aux domaines et aux problèmes où les techniques scalaires ont atteint leurs limites. Cela nécessite encore de gros efforts et des actions de partenariat scientifique et industriel.

## Modéliser l'apparence des surfaces colorées

Mathieu Hebert

**Résumé:** L'apparence d'un objet résulte de l'interprétation par le système visuel humain d'un ensemble de signaux lumineux provenant de cet objet et de son environnement. Modéliser l'interprétation de ces signaux lumineux sous forme d'attributs d'apparence reste un enjeu majeur pour la plupart des surfaces dès lors qu'elles sont brillantes, satinées, irisées, translucides ou texturées. En amont de cet enjeu, il est toujours possible de caractériser les signaux lumineux issus de l'objet. Il est plus intéressant encore de les prédire, surtout dans le cas des surfaces que l'on colore avec un procédé contrôlé. C'est notamment le cas de surfaces imprimées, où un nombre réduit de mesures permet de connaître les propriétés optiques du support et des encres, permettant de prédire le facteur spectral de réflexion, donc la couleur, de tous les échantillons imprimables avec ces encres et ce support.

## Modélisation des phénomènes aléatoires dans les circuits électroniques: problématique, enjeux et perspectives

Florent Bernard

**Résumé:** La génération de nombres réellement aléatoires est une problématique délicate mais cruciale pour la cryptographie qui utilise cet aléa en particulier pour générer des clés confidentielles. Depuis le début des années 2000, une révolution s'est opérée dans le domaine de la génération d'aléa où l'accent a été mis sur l'importance d'une "bonne" caractérisation de la source d'aléa plutôt que sur la capacité d'un générateur à passer une batterie de tests statistiques.

L'objectif de cet exposé est de présenter la stratégie d'évaluation complète d'un générateur d'aléa dans laquelle la modélisation mathématique de la source d'aléa est primordiale. Nous préciserons au cours de cet exposé quels sont

les enjeux d'une telle approche pour les partenaires industriels concernés par ces problématiques ainsi que les perspectives dans ce domaine.

## Restauration et Reconstruction des images par simulation

Loïc Denis

**Résumé:** La restauration et la reconstruction des images nécessitent la modélisation du processus de formation de l'image et des dégradations subies. L'estimation d'une image restaurée/reconstruite suppose aussi la modélisation statistique d'une classe d'images. Une fois ces modèles définis, le problème de reconstruction peut se traduire en un problème d'optimisation en très grande dimension (million-milliard d'inconnues). Des applications en imagerie biomédicale, métrologie optique et imagerie satellitaire traitées par l'équipe "reconstruction" du laboratoire H. Curien seront présentées.

## Contrastes et métriques logarithmiques. Application aux images à éclairage non contrôlé

Michel Jourlin

**Résumé:** Le Modèle LIP présente un cadre basé initialement sur la physique (loi des transmittances) et un cadre mathématique solide puisqu'il structure l'espace des images en espace vectoriel. Enfin il possède une compatibilité avec la vision humaine qui le rend efficace chaque fois que l'on veut interpréter une image comme le ferait l'oeil humain.

Les dernières avancées concernent la définition d'un contraste additif, d'un contraste multiplicatif et de métriques associées, dont la distance d'Asplünd, y compris pour des images couleur. Ces métriques permettent évidemment de "corrélérer" deux images, de rechercher une cible sur une image ou une séquence d'images, de définir de nouveaux extracteurs de contours (peu sensibles aux dérives d'éclairage) et de nouveaux algorithmes de segmentation d'images : croissance de région, nuées dynamiques, classifications hiérarchiques...

Les perspectives de développement sont immenses, soit sous l'angle mathématique: théorie des jauges, théorie des espaces vectoriels topologiques, théorie de la dualité, soit sous l'angle multispectral. Ce dernier point fait l'objet d'une collaboration avec le Centre de Morphologie Mathématique de l'Ecole des Mines de Paris (démarrage imminent...)

## Apprentissage de modèles de métriques

Marc Sebban

**Résumé :** Les métriques sont des objets mathématiques utilisés dans un très nombre d'applications dès lors que la comparaison entre deux objets (numériques ou structurés) est nécessaire. L'équipe Machine Learning du LaHC s'intéresse depuis plusieurs années à l'apprentissage de modèles de métriques à partir de données. L'objectif est d'optimiser sous contraintes des fonctions de distance adaptées à un problème donné, et à un algorithme particulier (de classification, de clustering, de ranking, etc.). Ces contraintes sont généralement exprimées selon une connaissance a priori disponible sur un échantillon, visant par exemple à rapprocher des instances de même classe et à éloigner des objets de classes différentes. Formellement, l'apprentissage se réduit généralement à la recherche d'un nouvel espace de projection ayant un pouvoir discriminant plus important que celui d'origine. Dans cette intervention, nous présenterons les principaux outils mathématiques et statistiques permettant d'apprendre ces métriques et les champs d'applications pouvant tirer avantages de celles-ci.