

DEMANDE DE FINANCEMENT BQR

Année universitaire 2011/2012

Composante : Institut Galilée

Laboratoire : LAGA - UMR7539

Laboratoire LSPM – UPR 3407

Equipe LAGA: MCS (Modélisation et Calcul Scientifique)

Nom des participants : Fayssal Benkhaldoun, Pascal Omnes, Gilles Scarcella

Porteur du projet et contact : Benkhaldoun, 0149403615 - 0677577402,
fayssal@math.univ-paris13.fr

Equipe LSPM : MP4 (Milieux Polyphasiques et Procédés Plasmas)

Nom des participants : Armelle Michau, Ioan Ionescu, Guillaume Lombardi

Co-porteur du projet : Lombardi, 0149403439 – 0688472226
lombardi@lspm.cnrs.fr

Titre : SOLveurs numériques adaptatifs pour simulations en
PHYsique Complexe (SOLPHYC)

I. Introduction : Contexte scientifique

I. 1. Thématique scientifique générale et ses enjeux

La compréhension des phénomènes d'interaction plasma paroi constitue actuellement une condition incontournable au développement de réacteurs de type tokamak pour la production de l'énergie par fusion magnétique contrôlée. Ces interactions peuvent être à l'origine de détérioration d'éléments de paroi du réacteur, notamment au niveau du divertor, zone de paroi qui reçoit la part la plus importante des flux énergétiques provenant du plasma de fusion (cf. figure 1). Cela peut conduire à des problèmes de rétention de tritium fortement radioactif et des risques d'explosion par accumulation de poussières.

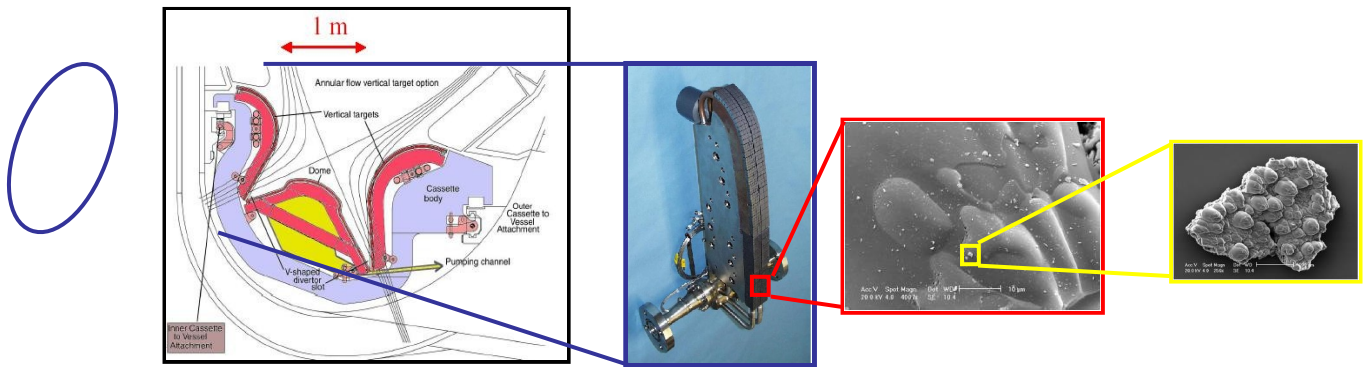


Figure 1 : Schéma montrant la partie divertor, ici en carbone, d'un tokamak et un exemple de détérioration - redépôts de poussières résultant de l'interaction du plasma de bord avec le matériau de paroi.

C'est pour ces raisons qu'un grand nombre d'équipes s'est intéressé à l'étude de l'interaction de plasmas énergétique avec des matériaux comme le carbone, le tungstène et le béryllium. Ces études ont plus particulièrement portées sur les altérations concomitantes du matériau et du plasma provenant de cette interaction. La figure 2 donne un schéma des différents processus d'interactions entre le plasma et le matériau.

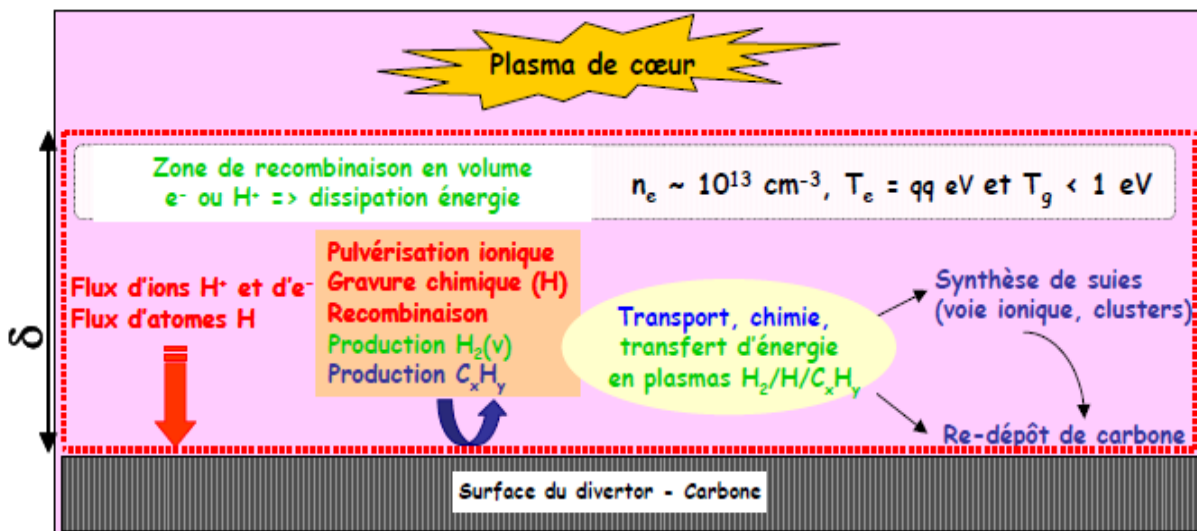


Figure 2: Phénomènes impliqués dans l'interaction plasma-surface

En général, les études de l'interaction plasma-surface se font soit sur des tokamaks [Winter-1998], qui sont en fait de grands instruments de la physique relativement lourds à manier, soit sur des dispositifs de laboratoires qui présentent l'avantage d'être plus accessibles et flexibles que les tokamak mais ne reproduisent malheureusement que certaines des propriétés des plasmas de bord de ces tokamaks [Lombardi-2009].

L'équipe Milieux Polyphasiques et Procédés Plasmas (MP4) s'est engagée dans cette dernière voie depuis maintenant un peu plus de cinq ans. Cette équipe a choisi de développer un dispositif expérimental nommé CASIMIR où l'on génère des plasmas qui viennent interagir avec des cibles de différentes natures.

La figure 3 donne une photographie du dispositif CASIMIR en fonctionnement. Ce dispositif repose sur l'utilisation d'un nouveau concept de décharge appelée source microonde multi-dipolaire magnétisée [Latrassé-2007]. Ce type de source assure l'obtention d'un plasma de grand volume très dense par association d'un grand nombre, 16

dans le cas de CASIMIR, de sources dipolaires telles que celle représentée dans la figure 3b. Le champ magnétique généré par le dipôle a un double rôle (cf. figure 3):

- Il confine les électrons qui ne peuvent quasiment plus diffuser dans la direction orthogonale aux lignes de champs, ce qui limite fortement les pertes et favorise l'obtention de densités élevées.
- Il permet d'assurer une résonance cyclotronique électronique dans une région de l'espace au voisinage de l'aimant, ce qui favorise le chauffage des électrons et exalte les processus d'ionisation permettant par la même de favoriser l'obtention de plasma à haute densité.

Les plasmas générés par les sources dipolaires se recouvrent de manière à donner un plasma de grand volume. Compte tenu du contexte de l'étude nous générons essentiellement des plasmas d'hydrogène ou d'argon-hydrogène qui viennent interagir avec des cibles de carbone et tungstène qui sont les matériaux utilisés dans les divertors de tokamak.

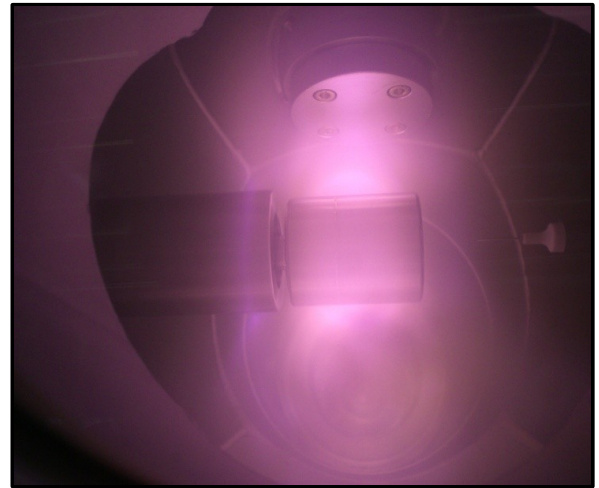
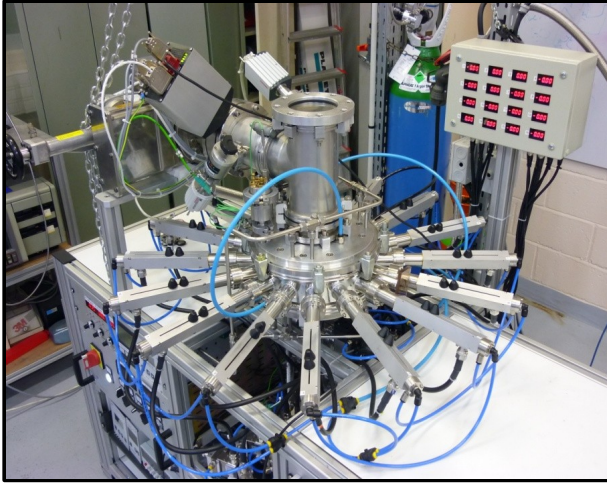


Figure 3: Réacteur CASIMIR avec le détail de la source dipolaire

Les diagnostics par spectrométrie de masse et spectroscopie d'émission ainsi que les analyses ex-situ des matériaux de cibles ont montré que l'interaction entre les plasmas d'hydrogène-argon et les cibles de carbone dans le dispositif CASIMIR conduit effectivement à une forte érosion des matériaux cf. figure 4. Des *re-dépôts* carbonés ont également été identifiés sur les matériaux d'origine comme représentée dans la figure 5.

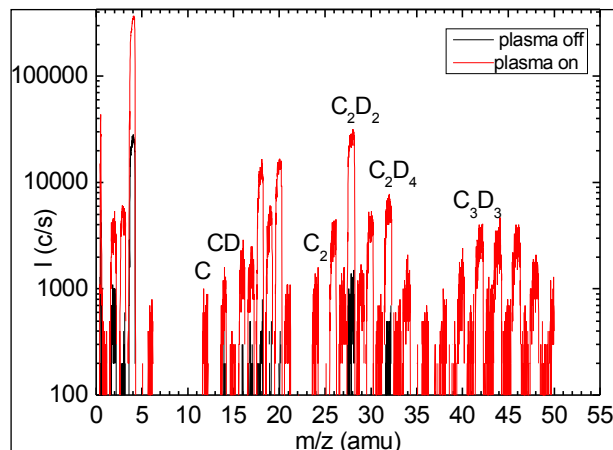


Figure 4 : spectromètres de masse exhibant l'existence de masse importantes indication des processus de gravure-pulvérisation de carbone suivies de processus croissance moléculaire comme schématisés sur la figure 2.

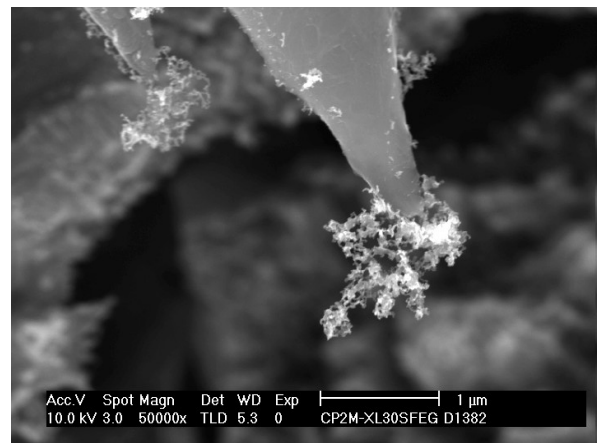
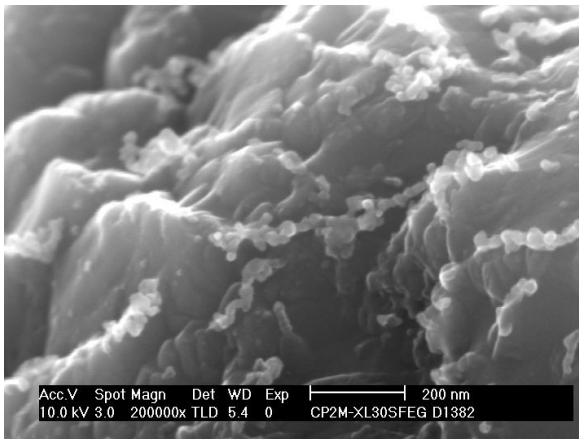


Figure 5 : image de microscopie électronique montrant des phénomènes de redépôt sur le substrat initial

Nous avons dès lors travaillé sur la compréhension des phénomènes impliqués dans l'érosion du carbone et la formation de structures moléculaires bien déterminées, d'agrégats et de poussières.

L'identification de l'effet prédominant nécessite la connaissance précise des flux d'espèces neutre et ionisées arrivant à la surface. La connaissance de ces flux requiert une estimation de la composition du plasma au voisinage des parois et des fonctions de distribution en énergie de ces espèces.

Il est dès lors indispensable de développer des modèles numériques permettant de décrire l'évolution de la composition et l'état énergétique du plasma dans l'ensemble de la zone de décharge, et il est nécessaire de les valider au moins partiellement par comparaison avec des mesures expérimentales.

I. 2 Objectifs du projet – caractère interdisciplinaire de la recherche proposée

C'est à ce niveau que se situe le projet de recherche interdisciplinaire que nous avons initié récemment et qui fait l'objet d'une collaboration entre le LSPM et le LAGA.

Notre objectif est de développer et valider des modèles physiques et numériques permettant de décrire les plasmas d'hydrogène obtenus dans les sources micro-ondes dipolaires magnétiques. Il s'agira d'une part d'utiliser les compétences du LAGA dans le domaine du développement de schémas numériques utilisant des maillages non structurés et adaptatifs pour résoudre les équations de transport dans les milieux fluides complexes, et d'autre part d'utiliser les compétences du LSPM dans le domaine de la modélisation physique et numérique des plasmas de décharge et leur diagnostic expérimental par diverses techniques optiques, électriques ou physico-chimiques. Comme nous le discuterons un plus loin dans le texte les plasmas obtenus l'association des compétences du LAGA et du LSPM est indispensable pour aboutir à des modèles robustes des plasmas de sources dipolaires.

I.3 Contexte scientifique

Le développement de modèles numériques **fiables** de ces plasmas présente une difficulté notable du fait de l'existence de deux zones de décharge: (i) une zone de plasma ambipolaire quasi-neutre et à forte densité où le transport des électrons magnétisés est anisotrope au voisinage de la source et (ii) une zone de plasma où la densité est réduite et la charge d'espace importante. La transition d'une zone à l'autre se fait sur des distances très faibles, de sorte que certains paramètres présentent des variations spatiales extrêmement fortes avec des fronts raides dont la résolution nécessite un raffinement local significatif du maillage. Toutes ces propriétés font que les schémas numériques classiquement appliqués sur les plasmas de décharges perdent de leur efficacité dans le cas des plasmas obtenus dans ces sources dipolaires.

1.4 Originalité du projet

Les techniques faisant appel à **des maillages non structurés adaptatifs deviennent pertinentes, voire incontournables**, pour:

- traiter de manière précise le caractère anisotrope du transport des électrons dans la région magnétisée.
- Capturer les fronts de densité ou de température que présentent certaines grandeurs comme par exemple la densité des électrons, la température des électrons et la charge d'espace (gaines électrostatiques)

En outre l'association de ces techniques de maillages avec de nouvelles approches qui permettent, grâce à un traitement particulier de l'équation de Poisson, de résoudre les équations de transport du plasma de manière similaire

dans les zones neutres ambipolaires et dans les zones à forte charge d'espace devrait rendre possible la simulation des plasmas dans l'ensemble du réacteur par un seul type d'approche.

1.5 Bibliographie :

- [Hagelaar-2004] G. J. M. Hagelaar, K. Hassouni, and A. Gicquel. *J. Appl. Phys.* **96**, 1819 (2004)
- [Hagelaar-2009] G J M Hagelaar , K Makasheva , L Garrigues and J-P Boeuf , 2009 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **42** 194019 doi: 10.1088/0022-3727/42/19/194019
- [Latrasse-2007] L. Latrasse, A. Lacoste, J. Sirou, J. Pelletier, "*High density distributed microwave plasma sources in a matrix configuration: concept, design and performance*", *Plasma Sources Sci. Technol.* **16(1)**, 7-12 (2007).
- [Lieberman-2005] M. A. Lieberman and A. J. Lichtenberg, *Principles of Plasma Discharges and Material Processing*, John Wiley and Sons 2005.
- [Lombardi-2004] G. Lombardi, K. Hassouni, F. Bénédic, F. Mohasseb, J. Röpcke, and A. Gicquel, *J. Appl. Phys.* **96**, 6739 (2004)
- [Lombardi-2005] G. Lombardi, K. Hassouni, G.-D. Stancu, L. Mechold, J. Röpcke, and A. Gicquel, *J. Appl. Phys.* **98**, 053303 (2005)
- [Welzel-2010] S. Welzel, F. Hempel, M. Hübner, N. Lang, P.B. Davies and J. Röpcke, "*Quantum cascade laser absorption spectroscopy as a plasma diagnostic tool: an overview*", *Sensors* **10** (2010) 6861
- [Winter-1998] J. Winter, "*Dust in fusion devices - experimental evidence, possible sources and consequences*", *Plasma Phys. Control. Fusion.* **40**, 1201-1210 (1998).

2. Projet de recherche détaillé

2.1 Objectifs scientifiques précis

L'objectif que nous nous fixons à court terme dans le cadre de cette demande est de développer et de valider un modèle numérique de ces sources pour des plasmas d'hydrogène contenant de faibles concentrations d'hydrocarbures. Nous proposons de procéder en trois étapes :

1. Développer un modèle permettant de décrire les phénomènes de chauffage électronique et les processus d'ionisation dans la décharge micro-onde de H_2/CH_4 .
2. Résoudre les équations de transport résultant de ce modèle par de techniques de maillages adaptatifs tenant compte de la topologie du champ magnétique au niveau de la source et de l'existence d'une forte structuration du champ électromagnétique au niveau du gap de la source (voir paragraphe suivant)
3. Travailler sur la validation du modèle par des mesures de densité plasma par sonde de Langmuir, d'évolution relative de certaines températures par spectroscopie d'émission et, surtout, des densités absolues des espèces carbonées par spectroscopie d'absorption IR et spectrométrie de masse.

La première partie de ce travail s'appuiera sur les acquis du LSPM en termes de modélisation physique et numérique des plasmas de décharge.

Les travaux réalisés dans la seconde partie s'appuieront sur l'expertise du LAGA dans le développement d'approches numériques utilisant des maillages non structurés adaptatifs. Ils seront fortement associés à ceux abordés dans la première partie puisque les choix de stratégies de maillage sont en partie déterminés sur la base de considérations physiques.

Enfin les mesures réalisées dans la dernière partie permettront de tester la validité des calculs, de proposer des améliorations des modèles physicochimiques et éventuellement des simplifications pertinentes de ces modèles qui peuvent présenter dans le cas des plasmas de H_2/CH_4 une forte complexité qui rend des simulations 2D axisymétriques relativement lourdes.

Equations du modèle:

La description phénoménologique donnée dans la section précédente montre que la simulation du dispositif de décharge requiert : le calcul du champ électromagnétique, le calcul de la puissance absorbée, le calcul des distributions spatiales des espèces et températures du plasma.

Le champ électromagnétique est calculé par résolution des équations de Maxwell et plus exactement celles liant les rotationnels du champ électromagnétique à ses dérivées temporelles. Ces équations s'écrivent :

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad (1)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \vec{J}_{HF} \quad (2)$$

Où \vec{J}_{HF} représente la composante haute fréquence du courant électronique, \vec{E} le champ électrique haute fréquence de l'onde excitatrice et \vec{H} le champ d'excitation magnétique haute fréquence.

La composante haute fréquence du courant électronique du plasma qui apparaît dans l'équation (2) traduit l'absorption de l'énergie électromagnétique par le plasma. Elle constitue donc le premier élément de couplage onde-plasma. On peut se dispenser du terme non linéaire convectif et aboutir à une forme locale qui s'écrit:

$$m_e \frac{d\vec{v}_{HF}}{dt} = -e\vec{E} - m_e v_{eff} \vec{v}_{HF} \quad (3)$$

Où les composantes haute fréquence de la vitesse et du courant électronique, \vec{v}_{HF} et \vec{J}_{HF} sont reliées par :

$$\vec{J}_{HF} = en_e \vec{v}_{HF} \quad (4)$$

Où n_e est la densité des électrons qui provient d'un modèle de transport collisionnel dans les plasmas.

La densité de puissance absorbée par le plasma est obtenue à partir du champ électrique et du courant électronique haute fréquence par une loi d'Ohm.

$$P_{MW} = \vec{J}_{HF} \cdot \vec{E} \quad (5)$$

Le modèle plasma utilisé est un modèle fluide stationnaire comme celui décrit dans [Lombardi-2004, Lombardi-2005]. Dans ce modèle le plasma est décrit par des équations de transport des espèces et une équation de transport de l'énergie électronique qui s'écrivent :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_s + W_s = 0 \quad (6)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_s + P_{MW} - Q_{e-c} = 0 \quad (7)$$

Où J_s est une densité de flux de transport de nature diffusif et W_s un terme source qui traduit le taux de production des espèces chimique ou de l'énergie. J_s est la densité de flux d'énergie des électrons, P_{MW} la densité de puissance microonde absorbée et Q_{e-c} la puissance dissipée par les électrons dans les processus collisionnels. On constante le deuxième point de couplage entre onde et plasma dans les termes de puissance microonde qui intervient dans l'équation de l'énergie (7), gouvernant ainsi l'énergie moyennes des électrons et par voie de conséquence les termes sources de production chimique qui dépendent fortement de cette énergie moyenne.

Les flux d'espèces sont donnés par un modèle de dérive-diffusion, $\vec{J}_s \ll n_s \vec{u}_s \cdot D_s \vec{\nabla} n_s$, où la vitesse de dérive est exprimée en fonction de la composante continue du champ électrique, $\vec{u}_s \ll \frac{c}{\omega} \vec{E}$, qui est solution d'une équation de Poisson qui vient se coupler aux équations (6) et (7).

La procédure permettant la résolution du système (1)-(7) a été discuté par Hassouni et Hagelaar [Hagelaar-2004] et étendu par Hagelaar pour traiter des décharges magnétisé dipolaire dans de l'argon à l'ide de maillages structurés [Hagelaar-2010]. Cette procédure comprend deux partie :

- 1- Les équations de Maxwell et l'équation de la composante haute fréquence du mouvement des électrons sont intégrées dans le domaine temporel sur plusieurs périodes micro-onde en supposant un plasma stationnaire. Une fois le régime permanent obtenu pour ce jeu d'équations, on calcule la distribution de puissance absorbée.
- 2- On utilise cette distribution pour relaxer les équations de conservation des espèces et d'énergie (6) et (7) couplées à l'équation de Poisson gouvernant la composante continue du champ pour aboutir à un nouvel état stationnaire du plasma. La procédure est ensuite itérée jusqu'à l'obtention d'une solution stable.

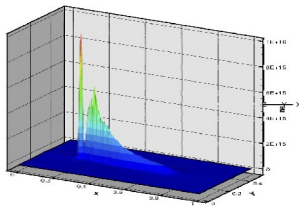
Nous utiliserons un code disponible au LSPM pour résoudre les équations de Maxwell (1)-(3) (approche FDTD sur un maillage structuré). Les équations de transport (6)-(7) couplées à l'équation de Poisson seront quant elles résolue une technique de volumes utilisant des maillages non structurés adaptatifs. Une interpolation de maillage sera également nécessaire pour coupler les deux codes (code électromagnétique du LSPM et code fluide qui sera développé dans ce travail)

2.2 Description des travaux envisagés

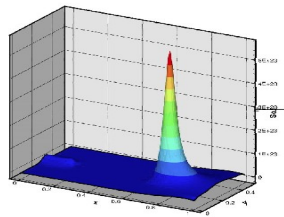
Un exemple d'utilisation de maillages non structurés adaptatifs est donné ci-dessous, et donne un aperçu de leur potentialité pour l'application visée sur la modélisation des sources dipolaires. Le phénomène de propagation de décharges filamenteuses dans un plasma froid (Streamer) constitue par exemple un problème complexe nécessitant des outils de simulation numérique efficaces. Ce problème nécessite la résolution d'une équation elliptique (avec terme source de type Dirac pour le Streamer) et une équation de convection diffusion réaction. Les paramètres physiques de ces équations, notamment ceux de la diffusion et du terme source sont généralement discontinus et mènent à des solutions exhibant des fronts de propagation pouvant être très raides. Une première collaboration entre le LAGA et le LSPM a permis de calculer ce phénomène par le recours à des maillages non réguliers non structurés et par

l'introduction de processus de raffinement dynamique de maillage. Le critère de raffinement du maillage a dans ce cas été basé sur un critère physique: la valeur du terme source de l'équation de convection-diffusion-réaction portant sur la densité d'électrons. Le phénomène d'avalanche électronique a ainsi pu être reproduit.

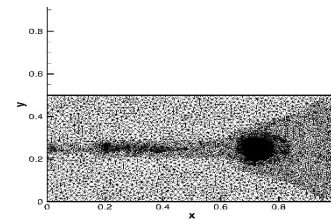
Densité d'électron en avalanche



Terme source



Maillage adapté



2.3 Collaborations éventuelles

Elaboration d'un solveur numérique 3D adaptatif pour les problèmes de plasmas

Les problèmes de plasmas présentent de nombreuses difficultés et nécessitent de disposer d'une plateforme numérique modulaire, moderne, de prise en main aisée, facilitant l'intégration de nouveaux schémas. Cette plateforme devra présenter une gestion rénovée du processus de raffinement dynamique de maillage, basée sur des indicateurs d'erreur performants, et être plus facilement extensible aux problèmes tridimensionnels.

Dans ce contexte un premier travail au LAGA a conduit à l'élaboration d'un module bidimensionnel en langage orienté objet (Plateforme ADAPT en C++), pour la simulation numérique du phénomène de propagation d'une décharge (streamer) dans un plasma froid. Dans la présente proposition nous nous orientons vers un modèle 3D plus réaliste de plasma tridimensionnel proposé par le LSPM. Nous nous proposons d'y intégrer des schémas performants (stabilité, précision et positivité.), notamment pour le traitement des termes de diffusion. Ce travail se fera d'un part par une collaboration entre F. Benkhaldoun et G. Scarcella pour la mise en oeuvre du code numérique, et d'autre part par une collaboration entre F. Benkhaldoun et P. Omnes pour l'intégration des solveurs récents (VF-Mixtes, DDFV) et le développement d'indicateurs d'erreur issus de l'analyse d'erreur *a posteriori* en vue de l'adaptation de maillage.

Validation des modèles de plasmas générés par une source dipolaire en interaction avec une surface

Les modèles développés dans le cadre de cet appel à projet BQR n'auront de sens qu'une fois validé expérimentalement dans le réacteur CASIMIR du LSPM. Comme mentionné ci-dessus, les plasmas étudiés sont complexes en raison des raideurs qui les caractérisent. Un diagnostic unique ne permet pas de rassembler toutes les informations nécessaires à la validation, ce qui explique les efforts de l'équipe MP4 (et du laboratoire LSPM plus généralement) pour s'équiper d'outils de diagnostics complémentaires. Le diagnostic complémentaire que nous souhaitons acquérir *via* ce BQR est une plateforme laser fonctionnant dans l'infrarouge moyen (de 600 à 4000 cm^{-1}), proposé par la société allemande Neoplas Control (spin-off de l'INP-Greifswald). Le gros avantage de cet outil est qu'il permet d'accéder à des **densités absolues** d'espèces carbonées par absorption du rayonnement IR [Röpcke-2006]. Autres avantages, la spectroscopie d'absorption IR est un diagnostic non intrusif, et l'utilisation de QCL donne accès à de bonnes résolutions spatiale (5 mm), et temporelle (jusqu'à la μs).

2.5 Références bibliographiques

[Benkhaldoun-2010] F. Benkhaldoun and J. Fort, K. Hassouni, J. Karel, "Numerical Solution of 2D Streamer Propagation by Finite Volume Method on Unstructured Grid", 2nd European Seminar on Coupled Problems, <http://hpfem.org/events/esco-2010/>.

[Lombardi-2009] G. Lombardi, F. Bénédict, K. Hassouni, A. Michau, X. Bonnin : "Introduction of a new experimental device for simulating parasitic plasmas such as those expected under the divertor dome", *J. Nucl. Mater.* 390-391, 196-199 (2009).

[Omnes-2009] P. Omnes; Y. Penel; Y. Rosenbaum, "A posteriori error estimation for the discrete duality finite volume discretization of the Laplace equation". *SIAM J. Numer. Anal.* 47 (2009), no. 4, 2782

[Röpcke-2006] J. Röpcke, G. Lombardi, A. Rousseau, and P.B. Davies, "Application of infrared tuneable diode laser absorption spectroscopy for plasma diagnostics: a review", *Plasma Sources Sci. Technol.* **15** (2006) S148

3. valeur ajoutée pour Paris 13

L'objectif principal du projet est d'apporter une contribution majeure à la plateforme numérique adaptative 3D (ADAPT) de l'université Paris13. Il s'agit d'une plateforme numérique identifiée, associant robustesse et efficacité et intégrant les schémas les plus innovants et les techniques de programmation les plus modernes, afin d'offrir un outil de diagnostic et de prédiction pour différents problèmes issus de la physique.

Ici on propose une collaboration entre numériciens et physiciens afin de proposer les modèles les plus pertinents et mettre en oeuvre les meilleurs outils numériques pour l'étude et la compréhension de phénomènes complexes issus de la physique des plasmas. Les simulations guidées par la connaissance du problème physique permettront de lever quelques verrous sur ce problème très raide. Rappelons qu'aucune équipe n'a jusqu'à présent proposé de code 3D pour ce type de problème.

Cette collaboration permettra de valoriser les compétences en mathématique appliquée et simulation numérique que possède l'UP13 dans d'autres champs de recherche et notamment les procédés. Ceci devrait permettre de mettre en valeur et profiter de manière concrète à la pluridisciplinarité de l'UP13.

Cette action devrait ouvrir sur des collaborations plus importantes, plus larges et plus systématiques entre mathématique et sciences pour l'ingénieur.

4. Financement prévisionnel (TTC)

1) Coût total du projet ventilé en fonctionnement, équipement, missions, personnels temporaires et, le cas échéant, selon les différents laboratoires ou équipes impliqués.

Coût total du projet (Personnel / Mission / Equipement)				
Nature du coût	Coût sur la période (1 an)	Type	Justification	Commentaires
Jan Karel	24 000,00 €	Doctorant	Développement de la plateforme ADAPT (CTU & LAGA)	Coût annuel d'un chercheur (CR CNRS, Doctorant, ..): Salaire brut chargé fois 12 mois.
Gilles Scarcella (IR CNRS)	10 000,00 €	Permanent	Maintenance de la plateforme ADAPT	
Personnel temporaire	21 000,00 €	Post Doc (6 mois)	Implémentation des schémas VFmixte et DDFV (LAGA)	Coût annuel d'un enseignant chercheur (MdC, Prof, ATER, ..): Salaire brut chargé divisé par 2 (on ne prends pas en compte la partie enseignement) fois 12 mois.
Echanges de visites entre Paris 13 et Prague	2 500,00 €	Missions	Encadrement de doctorant et collaboration (LAGA, LSPM, CTU)	Bourse SETCI de la Région IDF pour la thèses en cotutelle de M. Jan Karel
Machines de bureau et mémoire pour le Cluster	4 000,00 €	Equipement	Développement de la plateforme au LAGA	Noeud de cluster disposant d'une mémoire importantes pour effectuer les développements et les tests numériques 2 & 3D.
Matériel expérimental	123 000,00 €	Equipement	LSPM: PLATEFORME LASER INFRAROUGE	Co-financement avec l'équipe PEMA du LSPM sur l'ANR Plasborediam : 60 keuros (Obtenu), ANR CRWTH de l'équipe MP4 : 20 keuros (obtenu), Contribution du laboratoire LSPM : 18 keuros (Demandé), Financement demandé par le BOR : 25 keuros

2) Plan de financement faisant apparaître les cofinancements obtenus, demandés ou projetés et ventilés, le cas échéant, selon les différents laboratoires ou équipes impliqués. Préciser à quel type de dépenses sera affecté le financement BQR demandé.

Coûts ventilés du projet (Obtenu / demandé)			
Cofinancement	Montant	Bénéficiaire	Origine des fonds (Qui paie Quoi)
Jan Karel	24 000.00 €	LAGA	Professeur assistant à l'université de Prague
Gilles Scarcella	10 000.00 €	LAGA	Ingénieur de recherche de l'université Paris 13 (LAGA)
Personnel temporaire	21 000.00 €	LAGA	demandé au BQR
Bourse SETCI (Missions de visites)	2 500.00 €	LAGA, CTU et LSPM	Obtenue: Bourse SETCI de la Région IDF pour la thèses en cotutelle de M. Jan Karel
Matériel expérimental	80 000.00 €	LSPM	Obtenue: ANR Plasborediam + ANR CRWTH
Matériel expérimental	25 000.00 €	LSPM	demandé au BQR
Matériel expérimental	18 000.00 €	LSPM	demandé au LSPM
Equipement (machines de bureau)	4 000.00 €	LAGA	demandé au BQR
Total	184 500.00 €		

Récapitulatif de notre demande BQR (LAGA / LSPM)			
Nature du coût	Montant en euros	Partenaire	Objet
Personnel temporaire	21 000.00 €	LAGA	Personnel temporaire
Equipement	4 000.00 €	LAGA	Noeud de cluster disposant d'une mémoire importantes pour effectuer les développements et les tests numériques 2 & 3D.
Matériel expérimental	25 000.00 €	LSPM	PLATEFORME LASER INFRAROUGE
Total de notre demande	50 000.00 €		

Devis de la plateforme de lasers QCL

neoplas control
solutions for your operations in gases and plasmas

neoplas control GmbH • Walther-Rathenau-Straße 49a • D-17489 Greifswald

CEO: Dipl.-Kfm. Sebastian Spreeberg,
Dipl.-Ing. Henrik Zimmermann
Phone: +49 3834-515-400 • Fax: +49 3834-515-401
contact@neoplas-control.de • www.neoplas-control.de

Guillaume Lombardi
Lab. d'Ingenierie des Materiaux et des Hautes
Pressions - CNRS LMHP - UPR 1311
Université Paris 13
99, Avenue J.-B. Clément
93430 Villetaneuse
France

Your contact person
Dipl.-Ing. Henrik Zimmermann
Phone: +49 3834-515-400
Fax: +49 3834-515-401
zimmermann@neoplas-control.de

Greifswald, 29.10.2010

Quote – 98 / 2010

Subject

Delivery of a Q-MACS Basic Plus system for the comfortable and versatile use in different experimental setups with single channel setup, three exchangeable Quantum Cascade Lasers, Multi Pass Optics, accessories and comprehensive on-site instruction, including a 3-Days Teaching.

Deliverables

The contract consists of a Q-MACS Basic Plus system. The Q-MACS Basic plus system allows online and in-situ concentration measurements of precursors and reactive species in processes and exhaust gases by utilizing the infrared absorption spectroscopy. Still under low pressure conditions the measurement system based on the Q-MACS Technology provides highest sensitive monitoring of reaction kinetics as a basis for deeper understanding of the processes as well as effective online process control.

Specifications of the Q-MACS Basic Plus system:

- basic optical setup with laser source and detector respectively on different boards for flexible use in different applications
- Q-MACS head mounted with a pulsed QCL
- 3 further exchangeable QCL for monitoring of different species
- a thermoelectrically cooled detector
- Q-MACS Multipass Optics
- software package for control and analysis
- documentation
- accessories (1" Etalon and 4 Reference Gas Cells)
- on-site Installation, including a 3-Days Teaching

banking connection: Commerzbank Greifswald • BLZ: 150 400 88 • account: 836 009 100 • IBAN: DE 111 504 008 808 380 091 00 • BIC: COBADEFF150
register court: Stralsund • registration number: 6286 • int. VAT ID: DE248103500

Quotation (exclusive shipping and customs duties)

No.	Description	Qty	Unit Price	CUR	Amount
1	Q-MACS Basic Plus - single channel setup - for absorption spectroscopy in the mid infrared region - laser head with one OCL installed (spectral range to be defined by the customer) - power supply - connector cable - alignment and collimation module - water chiller - accessories	1	30 680	EUR	30 680
2	OCL - additional OCL at different spectral ranges (to be defined by the customer) - for measurement of different chemical species - TO-3-housing for easy laser change	3	12 150	EUR	36 450
3	Q-MACS Multipass Optics - increase of effective absorption length - robust and compact set of mirrors - in-situ installation in plasma chamber - wide range of possible absorption lengths - standard flange mount	1	12 580	EUR	12 580
4	Q-MACS Detector Board - with IRDM-600 detector for signal acquisition - beam handling board for detector and mirror mounting respectively - open path coupling - ideal for use with Q-MACS Multipass optics	1	13 200	EUR	13 200
5	Q-MACS Control Unit including PC, DAQ-Cards and Software	1	16 400	EUR	16 400
6	Germanium Etalon 1" - single Germanium crystal - accurate tuning rate measurement	1	3 720	EUR	3 720
7	Reference Gas Cell	4	1 250	EUR	5 000
8	Gas Filling	4	350	EUR	1 400
9	Installation and 3-Days Instruction	1	3 600	EUR	3 600

NET	EUR	123 030
VAT		
TOTAL	EUR	123 030

Delivery

Delivery about 12 weeks after receipt of order with the necessary technical specifications by the customer.

Miscellaneous

The focal length of the Multipass Optics and the spectral positions for the QCLs needs to be defined by the customer in close collaboration with the neoplas control GmbH.

During transportation the freight is insured on the part of the neoplas control GmbH.

This contract is covered by the general terms and conditions of the neoplas control GmbH.

Mode of payment

30 % on acceptance of the offer, 70 % on delivery

Validity of the offer: 3 month



Dipl.-Kfm. Sebastian Spreeberg
CEO



Dipl.-Ing. Henrik Zimmermann
CEO

CV court de Guillaume Lombardi

Nom : LOMBARDI

Prénom : Guillaume

Né le 17 juin 1976

Doctorat : **Doctorat en Physique des Plasmas** de l'Université Paris 11 (2000-2003)
Laboratoire d'Ingénierie des Matériaux et des Hautes Pressions,
CNRS LIMHP, Université Paris 13 (Nord), Villetaneuse
Titre de la thèse: "Analyses spectroscopiques et modélisation physico-chimique de plasmas micro-ondes H_2/CH_4 et $Ar/H_2/CH_4$ utilisés pour le dépôt de diamant"
Soutenue le 14 novembre 2003

Stage post-doctoral : Septembre 2003 – Août 2004
Laboratoire de Physique des Gaz et des Plasmas, LPGP, Université Paris Sud, poste ATER
"Étude de l'influence du toluène et du n-décane sur l'oxydation de NO dans les mélanges riches en oxygène dans une décharge électrique photo-déclenchée à la pression atmosphérique"

Stage post-doctoral : Septembre 2004 – Février 2005

INP-Greifswald, Allemagne
"Absorption intra-cavité avec des lasers infrarouges à cascades quantiques appliquée au diagnostic de plasmas moléculaires hors équilibre"

Situation actuelle : depuis Février 2005 : **Maître de Conférences 62ème section CNU à l'Institut Galilée, Université Paris 13**
Recherche effectuée au CNRS LSPM, Villetaneuse.
"Études spectroscopiques et modélisation de décharges de laboratoire simulant certains aspects des plasmas de bords dans les divertors des appareils de fusion par confinement magnétique".

Production scientifique des cinq dernières années (2006-2011) – Publications dans des revues internationales avec comité de lecture:

- [1] K. Hassouni, G. Lombardi, X. Duten, G. Haegeler, F. Silva, A. Gicquel, T. A. Grotjohn, M. Capitelli, J. Röpcke : "An overview of the different aspects in modeling moderate pressure H_2 and H_2/CH_4 microwave discharges", *Plasma Sources Sci. Technol.*, **15**, 117-125 (2006).
- [2] J. Röpcke, G. Lombardi, A. Rousseau, P. B. Davies : "Application of infrared tuneable diode laser absorption spectroscopy for plasma diagnostics : a review", *Plasma Sources Sci. Technol.*, **15**, S148-S168 (2006).
- [3] K. Hassouni, F. Mohasseb, F. Bénédic, G. Lombardi, A. Gicquel : "Formation of soot particles in $Ar/H_2/CH_4$ microwave discharges during nanocrystalline diamond deposition : a modeling approach", *Pure Appl. Chem.*, **78 (6)**, 1127-1146 (2006).
- [4] J. H. van Helden, W. Wagemans, G. Yagci, R. A. B. Zijlmans, D. C. Schram, R. Engeln, G. Lombardi, G. D. Stancu, J. Röpcke : "Detailed study of the plasma-activated catalytic generation of ammonia in N_2-H_2 plasmas", *J. Appl. Phys.*, **101**, 043305 (2007).
- [5] X. Bonnin, G. Lombardi, K. Hassouni, A. Michau, F. Bénédic, C. Arnas : "Modelling of carbon dust formation by cluster growth in plasmas", *J. Nucl. Mater.*, **363-365**, 1190-1194 (2007).
- [6] G. Lombardi, N. Blin-Simiand, F. Jorand, L. Magne, S. Pasquiers, C. Postel, J.-R. Vacher : "Influence of toluene and n-decane adjunction on NO oxydation in oxygen-rich mixtures studied with an homogeneous photo-triggered discharge at atmospheric pressure", *Plasma Chem. Plasma Process.*, **27**, 414-445 (2007).
- [7] J. Achard, F. Silva, A. Tallaire, X. Bonnin, G. Lombardi, K. Hassouni, A. Gicquel : "High quality MPACVD diamond single crystal growth: high microwave power density regime", *J. Phys. D : Appl. Phys.*, **40**, 6175-6188 (2007).
- [8] S. Welzel, G. Lombardi, P.B. Davies, R. Engeln, D.C. Schram, J. Röpcke : "Trace gas measurements using optically resonant cavities and quantum cascade lasers operating at room temperature", *J. Appl. Phys.*, **104**, 093115 (2008).
- [9] F. Bénédic, X. Duten, O. Syll, G. Lombardi, K. Hassouni, A. Gicquel : "Spectroscopic Diagnostics of Pulsed Microwave Plasmas used for Nanocrystalline Diamond Growth", *Chem. Vapor Deposition*, **14 (7-8)**, 173-180 (2008).
- [10] Arnas, C.; Moberi, A.; Hassouni, K.; Michau, A.; Bénédic, F.; Lombardi, G.; Bonnin, X., "[Nanostructure of carbon dust generated in plasmas of different parameters](#) Texte intégral disponible", AIP Conference Proceedings, 2008, vol.1041, pp. 33-6

- [11] C. Arnas, A. Moubéri, K. Hassouni, A. Michau, G. Lombardi, X. Bonnin, F. Bénédic, B. Pégourié: "Formation of nanoparticles in a cold plasma from a sputtered carbon vapour", *J. Nucl. Mater.* 390-391, 140-143 (2009).
- [12] G. Lombardi, F. Bénédic, K. Hassouni, A. Michau, X. Bonnin : "Introduction of a new experimental device for simulating parasitic plasmas such as those expected under the divertor dome", *J. Nucl. Mater.* 390-391, 196-199 (2009).
- [13] Welzel, S.; Lombardi, G.; Davies, P.B.; Engeln, R.; Schram, D.C.; Röpcke, J. : "Using quantum cascade lasers with resonant optical cavities as a diagnostic tool" *J. Phys.: Conf. Series* 157 (2009), p. 012009
- [14] Arnas, C.; Moubéri, A.; Hassouni, K.; Michau, A.; Lombardi, G.; Bonnin, X.; Bénédic, F.; Pégourie, B., "[Carbon dust formation in a cold plasma from cathode sputtering](#)" *Journal of Nuclear Materials*, 2009, vol.390-391, no., pp. 140-3
- [15] A. Michau, G. Lombardi, C. Arnas, L. Colina Delacqua, M. Redolfi, X. Bonnin, K. Hassouni : "Modelling of dust grain formation in a low-temperature plasma reactor used for simulating parasitic discharges expected under tokamak divertor domes", accepté dans *Plasma Sources Sci. Technol.* (2010).
- [16] Bénédic, F.; Hassouni, K.; Lombardi, G.; Mohasseb, F., "[Deposition of nanocrystalline diamond by Ar/H₂/CH₄ microwave discharges](#)" *Materials Science Foundations*, 2010, vol.65-66, pp. 83-109
- [17] Arnas, C.; Martin, C.; Roubin, P.; Pégourie, B.; De Temmerman, G.; Hassouni, K.; Michau, A.; Lombardi, G.; Bonnin, X., "[Similarities and differences between dust produced in laboratory plasmas and in the MAST and Tore Supra tokamaks](#)" *Plasma Physics and Controlled Fusion*, Dec. 2010, vol.52, no.12, 124007
- [18] Michau, A.; Lombardi, G.; Delacqua, L.C.; Redolfi, M.; Arnas, C.; Bonnin, X.; Hassouni, K., "[Modeling carbonaceous particle formation in an argon graphite cathode dc discharge](#)" *Plasma Physics and Controlled Fusion*, Dec. 2010, vol.52, no.12, 124014

CV court de Fayssal Benkhaldoun

BENKHALDOUN Fayssal
Né le 11 Février 1962 à Rabat
Marié, deux enfants
Nationalité Française
Web: <http://www.math.univ-paris13.fr/~fayssal/>
Email : fayssal@math.univ-paris13.fr

ADRESSES

Administrative :
LAGA, Université Paris 13
99 Avenue Jean Baptiste Clement,
93430 Villetaneuse
Tel: 01 49 40 36 15

Personnelle :
83 rue de Paris,
93100 Montreuil
Tel: 06 42 33 69 33

FONCTION

Grade : Professeur des Universités PU1
Section CNU : 26

Encadrement de thèses:

M. Jan Karel a débuté en février 2008 une thèse en cotutelle sous la direction conjointe du professeur Jaroslav Fort de l'université de Prague et de moi-même.
Mlle Saida Sari, bénéficiaire d'une allocation de recherche de l'université Paris 13, a débuté une thèse sous ma direction en octobre 2010.

Thèses soutenues pendant les 2 dernières années :

Monsieur Amadou Mahamane: Analyse et estimation d'erreur en volumes finis, Application aux écoulements en milieu poreux et à l'adaptation de maillage, soutenue en avril 2009.

Gestion de programme scientifiques :

Co-responsable avec Hervé Guillard d'un projet de coopération internationale de l'INRIA (programme Euro Méditerranée 3+3) dont la thématique est la modélisation de l'hydrodynamique côtière et fluviale.
http://www-direction.inria.fr/international/AFRIQUE/euromed/Projets09_ACCEPTES.pdf
Responsable et animateur d'un Programme Hubert Curien (BARANDE) et d'un programme SOCRATES avec la république Tchèque.

Edition de revues et comité de rédaction:

Co-Editeur avec T. Gallouet et J.M. Ghidaglia de la revue : International Journal on Finite Volumes (<http://www.ijfv.fr>)

Organisation de conférences :

fvca 6 (<http://fvca6.fs.cvut.cz/>) à Prague du 6 au 10 juin 2011.
fvca 5 (<http://www.latp.univ-mrs.fr/fvca5/>) : en 2008 à Aussois (co-organisé avec R. Eymard et J.M. Herard).
Fourth International Symposium on Finite Volumes, Université de Marrakech, 4-8 mai, 2005 (<http://averoes.math.univ-paris13.fr/fvca4/>)
Second International Symposium on Finite Volumes, Université de Duisburg, Allemagne, 1999 (<http://averoes.math.univ-paris13.fr/FVCA-2/>)
First International Symposium on Finite Volumes, INSA de Rouen, 1996 <http://averoes.math.univ-paris13.fr/FVCA-1/>)

Collaborations scientifiques:

Collaboration avec Jaroslav Fort de l'université de Prague et le professeur K. Hassouni du laboratoire CNRS Paris 13 LSPM sur les problèmes de plasma.
Collaboration avec le professeur Mohammed Seaid de l'université de Durham (UK) pour le développement de méthodes numériques efficaces pour les systèmes non homogènes.
Collaboration avec le professeur I. Elmahi de l'université d'Oujda sur les méthodes de raffinement dynamique de maillage pour les problèmes d'écoulement de fluides.

- 20-F. Benkhaldoun, M. Seaid**, "Combined Characteristics and Finite Volume Methods for Sediment Transport and Bed Morphology in Free-surface Water Flows", accepted in [Mathematics and Computers in Simulation](#), doi: [10.1016/j.matcom.2010.12.025](https://doi.org/10.1016/j.matcom.2010.12.025), (2011).
- 19-E. Audusse, F. Benkhaldoun, J. Sainte-Marie, M. Seaid**, "Multilayer Saint-Venant Equations over Movable Beds", accepted in [DCDS-B](#), (2011).
- 18-F. Benkhaldoun, S. Daoudi, I. Elmahi, M. Seaid**, "Comparison of unstructured finite-volume morphodynamic models in contracting channel flows", accepted in [Mathematics and Computers in Simulation](#), (2011).
- 17-F. Benkhaldoun, S. Sahmim, M. Seaid**, "Mathematical development and verification of a finite volume model for morphodynamic flow applications", accepted in [Advances in Applied Mathematics and Mechanics](#), (2011).
- 16-F. Benkhaldoun, S. Daoudi, I. Elmahi and M. Zenasni**, Numerical Computations of Pollutant Transport in the Nador Lagoon, [Int. J. Math. Stat.](#), Vol. 8, n° 11, (2011), 1-8.J.
- 15-F. Benkhaldoun, I. Elmahi, M. Seaid**, "A new finite volume method for flux-gradient and source-term balancing in shallow water equations", (2010), [Comp. Meth. App. Mech. Eng.](#), *V 199, Issues 49-52, pp 3324-3335*, <http://dx.doi.org/10.1016/j.cma.2010.07.003>
- 14-Halama, F. Benkhaldoun, J. Fort**, "Numerical modeling of Two-Phase transonic Flow", [Mathematics and Computers in Simulation](#), 80 (2010) 1624–1635.
- 13-F. Benkhaldoun, M. Seaid**, A simple finite volume method for the shallow water equations, [J. Comput. Appl. Math.](#) 234 (2010) 58-72, doi:10.1016/j.cam.2009.12.005.
- 12-E. M. Chaabelasri, N. Salhi, I. Elmahi, F. Benkhaldoun**, "High order well balanced scheme for treatment of transcritical flow with topography on adaptive triangular mesh", [Phys. Chem. News](#), (2010), V. 53, pp 119-128.
- 11-F. Benkhaldoun, S. Sahmim, M. Seaid**, "A two-dimensional finite volume morphodynamic model on unstructured triangular grids", (2010), [Int. J. Num. Meth. Fluids](#), DOI: [10.1002/flid.2129](https://doi.org/10.1002/flid.2129)", Volume 63, Issue 11, pages 1296–1327.
- 10-J. Halama, F. Benkhaldoun, J. Fort**, "Flux schemes based finite volume method for internal transonic flow with condensation", accepté dans [Int. J. Num. Meth. Fluids](#)", (2010), DOI: [10.1002/flid.2223](https://doi.org/10.1002/flid.2223).
- 9-A. Mahamane, F. Benkhaldoun, O. Diallo**, "Simulation numérique par volumes finis d'un écoulement diphasique eau-pétrole en milieu poreux". (French) [Numerical finite volume simulation of two-phase (oil-water) flow in porous media] [Afrika Math.](#) (3) 20 (2009), 85--103.
- 8-F. Benkhaldoun, S. Sahmim, M. Seaid**, "Solution of the Sediment Transport Equations Using A Finite Volume Method Based on Sign Matrix", (2009), [SIAM J. Sci. Comp.](#) Vol. 31, No. 4, pp. 2866–2889.
- 7-F. Boushaba, I. Elmahi F. Benkhaldoun and A. G.L. Borthwick**, "A comparative study of Finie Element and Finite Volume for problems of transcritical free surface flows on unstructured meshes", [IJCM](#), Vol. 5, N° 3, (2008), pp 413-431, doi:10.1142/S0219876208001522.
- 6-F. Benkhaldoun, M. Seaid**, "New finite volume relaxation methods for the third order differential equations", (2008) Commun. Comp. Physics. Vol. 4, No. 4, pp. 820-837.
- 5-E. M. Chaabelasri, N. Salhi, I. Elmahi, F. Benkhaldoun**, High order well balanced scheme for treatment of transcritical flow with topography on adaptive triangular mesh (2009), accepté dans [Phys. Chem. News](#)".
- 4-F. Benkhaldoun, I. Elmahi, M. Seaid**, "Well-balanced finite volume schemes for pollutant transport on unstructured meshes", [J. Comput. Phys.](#), Volume 226, Issue 1, (2007), pp 180-203.
- 3-S. Sahmim, F. Benkhaldoun and F. Alcrudo**, "A sign matrix based scheme for non-homogeneous PDE's with an analysis of the convergence stagnation phenomenon", [J. Comput. Phys.](#), Volume 226, Issue 2, (2007), pp 1753-1783.
- 2-Sahmim, F. Benkhaldoun**, "Analyse et application d'un schéma aux volumes finis dédié aux systèmes non homogènes », [ARIMA](#), (2006), pp 302-316 (<http://www-direction.inria.fr/international/arima>).
- 1-F. Benkhaldoun, L. Quivy**, "A Non Homogeneous Riemann Solver for shallow water and two phase flows", [Flow Turbulence Combust.](#) (2006), 76:391-402.