

IRSN

INSTITUT
DE RADIOPROTECTION
ET DE SÛRETÉ NUCLÉAIRE

Faire avancer la sûreté nucléaire

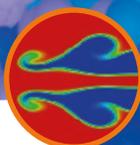
AKTIS

L'actualité de la recherche à l'IRSN

N° 29
printemps - été 2018

FOCUS

SIMULATION *des effets précoces*
d'un RAYONNEMENT alpha
ou PROTON sur l'ADN



AVANCÉES

P²REMICS, modèles
à l'état de l'art et schémas
numériques originaux
pour simuler
la déflagration



FORMATION

Vers une évaluation
plus fine des transferts
sol-plantes
du césium

L'OUVERTURE DES INFRASTRUCTURES AU CŒUR DE LA POLITIQUE PARTENARIALE

Le Haut conseil de l'évaluation de la recherche et de l'enseignement supérieur (Hcéres) présente, dans son récent rapport d'évaluation, l'IRSN comme un Institut disposant d'une identité bien marquée et d'un solide positionnement institutionnel dans le secteur de l'expertise avec un impact significatif et démontré. Cette expertise s'appuie sur des infrastructures d'envergure et sur une recherche finalisée en sûreté nucléaire et en radioprotection. Le comité d'évaluation relève aussi la grande visibilité et la reconnaissance de l'IRSN au niveau international, notamment au travers de sa forte participation aux plateformes et réseaux de recherche que l'Institut a contribué à construire ces dernières années pour structurer la recherche européenne.

Le comité d'évaluation invite l'IRSN à s'appuyer sur les questions scientifiques prioritaires identifiées dans son document de stratégie scientifique pour identifier et concrétiser des partenariats structurants avec les établissements d'enseignement supérieur et de recherche et les organismes de recherche en se saisissant de l'opportunité de valoriser ses plateformes d'expérimentation ou de simulation.

La politique partenariale de l'IRSN a déjà conduit à de belles avancées comme en témoigne, dans ce numéro d'Aktis, l'article sur le logiciel P²REMICS qui a été développé grâce aux travaux réalisés avec R. Herbin (CNRS) qui a reçu en 2017 un prix de l'innovation du CNRS ou l'article sur l'implication des chercheurs de l'Institut dans le développement de Geant4-DNA pour simuler les effets précoces d'un rayonnement sur l'ADN. Elle en appelle d'autres avec, par exemple, la mise en fonctionnement du microfaisceau MIRCOM de l'IRSN qui permettra d'obtenir des données expérimentales bien plus adaptées pour la validation des modèles d'interaction entre les rayonnements utilisés en radiothérapie et l'ADN des tissus sains. Dans un contexte de contrainte budgétaire, l'ouverture des plateformes de l'IRSN s'inscrit dans une politique partenariale visant à optimiser et mutualiser les infrastructures de recherche. Elle doit permettre de renforcer l'attractivité de l'IRSN au sein de la communauté scientifique et de favoriser le développement de cofinancements de recherche équilibrés entre les différents acteurs.

Les conclusions de l'évaluation du Hcéres viennent ainsi conforter l'Institut dans son engagement en matière de recherche mais également dans les réflexions qu'il a entamées et les pistes d'évolution qu'il est en train de construire concernant ses orientations stratégiques, son organisation et ses modes de fonctionnement.

Jean-Christophe Niel,

Directeur Général de l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire

Aktis est la lettre d'information scientifique de l'IRSN. Elle présente les principaux résultats de recherches menées par l'Institut dans les domaines de la radioprotection, de la sûreté et de la sécurité nucléaire. Gratuite, elle est aussi diffusée sous forme de mail. Éditeur IRSN - standard : +33 (0)1 58 35 88 88 - www.irsn.fr - Directeur de la publication : Jean-Christophe Niel - Directeur de la rédaction : Patrice Deschamps - Rédactrice en chef : Sandrine Marano - Comité de lecture : Christian Tamponnet, Jean-Michel Bonnet, Nathalie Lemaitre - Comité éditorial : Gauzelin Barbier, Christian Tamponnet, Aleth Delattre, Richard Gonzalez, Christine Gouedranche, Pascale Monti, Mélanie Frand/UMAP5 - Rédaction : Sandrine Marano - Réalisation : www.grouperougivif.fr 25 458 - Impression : Idéale Prod, certifiée ImprimVert - ISSN : 2 110-588X - Droits de reproduction sous réserve d'accord de notre part et de mention de la source. Conformément au Règlement (UE) Général de Protection des Données (RGPD) n° 2016/679 du Parlement Européen et du Conseil du 27 avril 2016, entré en vigueur le 25 mai 2018 et conformément à la loi n° 2018-493 relative à la protection des données personnelles. Toutes les données personnelles collectées directement ou indirectement dans le cadre de la lettre AKTIS sont traitées aux fins de mise à disposition de la lettre AKTIS. Les utilisateurs sont informés qu'ils disposent d'un droit d'accès, de modification, de suppression et d'effacement des informations personnelles les concernant. Ces droits peuvent être exercés sur simple demande écrite auprès de l'IRSN/DSDP/BC25 BP117 92262 Fontenay-aux-Roses  cedeo ou par mail : contact.aktis@irsn.fr

SOMMAIRE

ÉDITO

Jean-Christophe Niel

AVANCÉES DE LA RECHERCHE

PAGE 3

- Arythmies cardiaques et faibles doses de césium 137 : étude épidémiologique sur une population d'enfants russes
- P²REMICS, modèles à l'état de l'art et schémas numériques originaux pour simuler la déflagration

FOCUS

PAGE 6

Simulation des effets précoces d'un rayonnement alpha ou proton sur l'ADN

FORMATION PAR LA RECHERCHE

PAGE 9

- Caractérisation du séisme pour l'étude des bâtiments, les biais des méthodes de calcul
- Vers une évaluation plus fine des transferts sol-plantes du césium

VIE DE LA RECHERCHE

PAGE 11

- Évaluation de la recherche
- Programme de recherche
- Prix
- Collaborations
- Publications

Glossaire ^{GL0}

PAGE 12

Photo de couverture - Modélisation du noyau d'une cellule rempli de chromosomes.
© IRSN / www.nature.com/Scientific Reports

Arythmies CARDIAQUES et faibles doses de CÉSIIUM 137 : ÉTUDE épidémiologique sur une population D'ENFANTS RUSSES

EPICE est la première étude de grande ampleur portant sur des enfants vivant dans des territoires contaminés par l'accident de Tchernobyl. L'analyse des observations faites chez ces enfants montre qu'il n'existe pas d'association entre les arythmies cardiaques et leur charge corporelle en césium 137.

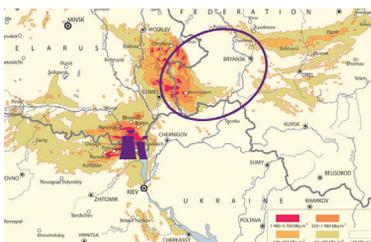
Les conséquences sanitaires les plus fréquemment évoquées à la suite d'une exposition aux rayonnements ionisants sont les cancers, notamment de la thyroïde après un accident nucléaire, ou les leucémies. Il a aussi été observé, pour les survivants des bombardements d'Hiroshima et de Nagasaki ainsi que pour les liquidateurs de Tchernobyl, une augmentation du risque de maladies non cancéreuses, comme les maladies cardiovasculaires et les opacités du cristallin. Est-ce que cette augmentation du risque de maladies non cancéreuses existe également pour des enfants exposés à de faibles doses de rayonnements ionisants, habitant notamment des territoires contaminés par l'accident de Tchernobyl ? Pour répondre à cette question, l'IRSN a lancé en 2009, en partenariat avec le Centre de diagnostic clinique de Bryansk, l'étude épidémiologique EPICE⁽¹⁾ sur une population d'enfants vivant dans l'oblast de Bryansk au nord-est de la centrale de Tchernobyl en Russie.

Prévalence des arythmies

L'un des axes de ce programme de recherche est de déterminer la prévalence^{GL0} des arythmies cardiaques dans les territoires contaminés en comparaison des territoires non contaminés et d'examiner s'il existe une association avec la contamination corporelle en césium 137 des enfants. Le but est de déterminer si le césium 137 constitue un facteur associé à l'observation d'arythmies cardiaques dans le cadre de cette étude épidémiologique. Pendant quatre ans, entre 2009 et 2013, 18 152 enfants âgés de 2 à 18 ans ont été examinés sur le plan cardiaque et radiologique : électrocardiogramme, échographie cardiaque et mesure de l'activité corporelle en césium 137 ont

été réalisés à titre systématique ; pour certains enfants, un enregistrement des paramètres électriques cardiaques sur 24 heures (Holter) a été effectué, ainsi qu'un bilan des principaux marqueurs cardiaques plasmatiques.

Une arythmie cardiaque a ainsi été diagnostiquée sur 2 526 enfants sur l'ensemble de la population. Dans les territoires contaminés, la prévalence brute d'arythmie est ainsi de 13,3 % et de 15,2 % dans les territoires non contaminés. Par ailleurs, la prévalence est de 14,5 % pour les enfants présentant une contamination corporelle, et de 14,2 % pour les enfants non contaminés, sans différence statistiquement significative. Ainsi, en croisant les données sur le territoire de vie, la contamination corporelle et le diagnostic d'arythmie, les résultats de l'étude ne permettent pas d'établir une association entre contamination chronique par le césium 137 et arythmie cardiaque. Le fait de vivre sur un territoire contaminé ne constitue donc pas un facteur de risque supplémentaire à développer un trouble du rythme cardiaque.



L'oblast de Bryansk, en Russie, est situé au nord-est de la centrale nucléaire de Tchernobyl. Une partie de ses territoires a été contaminée par des dépôts en césium 137 suite à l'accident. L'étude EPICE a porté sur la zone entourée en violet.

© UNSCEAR - Cartographie des dépôts en césium 137 consécutifs à l'accident de Tchernobyl

 Centre de diagnostic clinique de Bryansk et Medical Radiation Research Center (MRRC) à Obninsk (uniquement pour l'étude pilote) en Russie

CONTACTS

Jean-René Jourdain
jean-rene.jourdain@irsn.fr

Direction des affaires internationales - DAI

Géraldine Landon
geraldine.landon@irsn.fr

Laboratoire de recherche en radiochimie, spéciation et imagerie - LRSI

⁽¹⁾ Acronyme pour Évaluation des pathologies potentiellement induites par une contamination chronique au césium.

PUBLICATION

• Jourdain J-R, Landon G, Clero E, et al.
« Is exposure to ionising radiation associated with childhood cardiac arrhythmia in the Russian territories contaminated by the Chernobyl fallout? A cross-sectional population based study. » *British Medical Journal Open* 2018 ; 8:e019031.



P²REMICS, modèles à l'état de l'art et schémas numériques originaux POUR SIMULER LA DÉFLAGRATION

 Institut de mathématiques de Marseille (I2M)

CONTACT

Jean-Claude Latché
jean-claude.latche@irsn.fr

Service des agressions internes et des risques industriels - SA2I

PUBLICATIONS

• Gastaldo L., Babik F., Duval F., Lapuerta C. and Latché J.-C. « Simulation of accelerated deflagrations using the P²REMICS software », *17th International Topic Meeting on Nuclear Reactor Thermalhydraulics, China, 2017.*

• Grapsas D., Herbin R., Kheriji W. and Latché J.-C. « An unconditionally stable staggered pressure correction scheme for the compressible Navier-Stokes equations », *SMAI Journal of Computational Mathematics, 2:51-97, 2016.*



L'explosion de gaz ou de poussière constitue un risque majeur pour le confinement des matières radioactives. Son évaluation par l'IRSN s'appuie essentiellement sur des outils de simulation validés sur des essais à diverses échelles. L'Institut s'est doté de son propre outil de simulation, le logiciel P²REMICS, pour mieux maîtriser la complexité des phénomènes modélisés et la pertinence des calculs réalisés. La première version traite la déflagration d'atmosphères gazeuses ou de poussières. Son développement a nécessité la mise au point de modèles et leur validation, mais aussi la construction de schémas numériques^{GL0} pour la résolution des équations de bilan ainsi obtenues... un travail porté par des avancées théoriques ayant valu à R. Herbin (I2M) la médaille de l'innovation du CNRS en 2017.

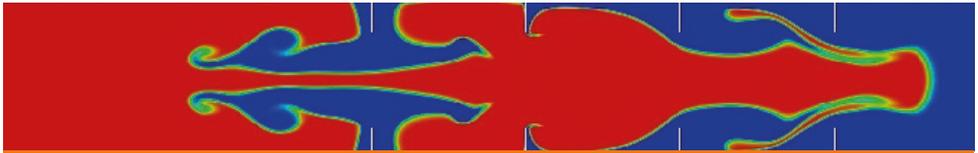
Sept ans après l'accident survenu à la centrale de Fukushima Daiichi, le caractère dévastateur d'une explosion d'hydrogène dans l'enceinte d'un réacteur nucléaire à eau légère marque encore les esprits. De fait, les risques d'explosion sont réels dans les installations nucléaires : génération d'hydrogène dans les accidents de fusion de cœur, mais aussi foudres de frittage fonctionnant avec une atmosphère d'hydrogène, circuits d'hydrogène dans le circuit tertiaire des réacteurs, suspensions de poussières lors des opérations de démantèlement ou dans certains scénarios d'accidents pouvant survenir dans le réacteur de fusion ITER...

Pour évaluer les conséquences d'une explosion, l'IRSN fonde sa démarche sur la modélisation. Après des travaux menés avec le CEA (développement du logiciel TONUS) et en parallèle à une période de transition marquée par l'utilisation de logiciels du commerce (FLACS, FLUENT), l'IRSN a décidé de se doter d'un outil développé en propre, dénommé P²REMICS (pour Partially PREMixed Combustion Solver). La première version de ce logiciel a été finalisée à l'automne 2017. Dans cette première étape, l'accent a été mis sur la modélisation des déflagrations turbulentes, avec des choix de modèles permettant une résolution numérique robuste et efficace : ce type d'écoulement se caractérisant par la progression d'un front de flamme dans l'atmosphère explosive, il a été

opté pour un calcul explicite de la position de ce dernier (transport d'une fonction caractéristique de la zone brûlée), ce qui a pour effet de reporter l'essentiel de la physique du phénomène sur un seul paramètre, la vitesse de flamme turbulente^{GL0}. Cette dernière résulte du produit de la vitesse de flamme laminaire^{GL0} et de la surface de réaction, dont la topologie est extrêmement complexe. Son évaluation se fait alors par des lois de fermeture^{GL0} empiriques, un certain nombre étant disponible dans la littérature internationale comme dans P²REMICS.

Écoulements à grande échelle

Une campagne de validation de cette version a été réalisée. Elle s'est fondée sur des expériences de la littérature, ainsi que sur des programmes menés chez des partenaires et auxquels l'IRSN participe : déflagration d'hydrogène dans un tube d'accélération de flamme (essais dans l'installation ENACCEF2 du laboratoire CNRS ICARE à Orléans, voir *Aktis* n°23 et n°5), dans un jet turbulent (programme EXJET, en collaboration avec l'Ineris) ou dans des géométries plus proches de locaux (programmes internationaux dans l'installation allemande THAI avec Becker Technologies GmbH, voir *Aktis* n°23)... Dans ces installations sont généralement étudiés des écoulements dits « à grande échelle », c'est-à-dire de dimension spatiale caractéristique aussi voisine que possible de celle des installations nucléaires :



Simulation d'une expérience ENACCEF 2: flamme se développant dans un tube fermé en présence d'obstacles (rouge: zone brûlée, bleu: gaz frais). La structure complexe du front est due aux changements de sens de l'écoulement engendrés par les réflexions d'ondes de choc sur les extrémités fermées du tube.

© IRSN

échelle d'environ 1/10 pour ENACCEF2 et THAI, 1 pour EXJET. Malgré une dispersion assez importante des valeurs de vitesses de flamme données par les lois de fermeture, l'accord entre calcul et expériences est raisonnable et suffisant pour offrir la possibilité de réaliser des calculs, en prenant des valeurs majorantes, pour des études de sûreté : dès 2017, l'évaluation a pu être réalisée sur les conséquences de la déflagration d'un nuage d'hydrogène localisé dans un compartiment du bâtiment réacteur de l'EPR. Ces programmes se poursuivent et seront utilisés pour les versions ultérieures de P²REMICS.

Lois spécifiques à l'explosion

Le développement du logiciel P²REMICS a bénéficié pleinement des potentialités d'optimisation (en termes d'efforts de développement) offertes par les techniques informatiques modernes (ici, programmation orientée objet en C++). Le code source du logiciel peut s'imaginer sous la forme de couronnes concentriques : au cœur, la plate-forme PELICANS⁽⁴⁾, qui fournit les fonctionnalités de base telles que lecture et gestion du maillage, gestion de l'assemblage et résolution de systèmes linéaires, post-traitement, etc. ; ensuite, la librairie CALIF³S, qui résout les équations de bilan de la mécanique des fluides ; enfin, P²REMICS, qui regroupe essentiellement les lois physiques spécifiques à l'explosion. La librairie CALIF³S est née, il y a quelques années, de la partition du logiciel ISIS développé par l'IRSN pour simuler les incendies en un logiciel de dynamique des fluides (Computational Fluid Dynamics – CFD) générique CALIF³S et une partie spécifique à l'incendie. ISIS ne traitant que les écoulements (quasi) incompressibles, un effort important a été réalisé pour étendre ses

schémas numériques au cadre compressible, celui de l'explosion. Essentiellement théorique, ce travail mené avec le laboratoire I2M du CNRS a conduit à la naissance d'une classe spécifique de schémas numériques, à la fois stables et efficaces, qui permettent le traitement de tous les régimes d'écoulement, de l'incompressible jusqu'aux ondes de choc. Pour ce faire, ils utilisent la discrétisation en espace dite « à mailles décalées » peu usuelle pour les systèmes hyperboliques (dont les équations d'Euler, régissant les écoulements compressibles où les effets de viscosité peuvent être négligés) mais classique pour les écoulements incompressibles. En outre, ils sont basés sur l'équation de bilan d'énergie interne, ce qui est également l'usage en incompressible mais a nécessité de surmonter des problèmes techniques difficiles pour assurer la convergence vers les solutions comportant des ondes de choc. Ce travail a été jugé par la communauté scientifique suffisamment novateur pour mériter à Raphaèle Herbin (I2M) la médaille de l'innovation du CNRS en 2017.

Les développements à venir sont nombreux. En particulier, une meilleure appréhension du caractère multi-échelle du phénomène de déflagration turbulente sera obtenue grâce à la mise en œuvre de modélisations plus fines, de type simulation des grandes échelles, en s'appuyant sur des collaborations académiques (laboratoire EM2C du CNRS, rattaché à l'Ecole Centrale de Paris). Au titre des bénéfices attendus, citons une meilleure maîtrise des modèles de vitesse de flamme, et donc une réduction des marges d'incertitudes dans les études, ainsi qu'une meilleure maîtrise des effets d'échelle, permettant une utilisation plus fiable des expériences à échelle réduite, bien sûr moins coûteuses que les expériences à « grande échelle ».

⁽⁴⁾ PELICANS est une librairie, développée par l'IRSN, de composants logiciels, qui permettent de développer des algorithmes de résolution des équations aux dérivées partielles. Elle est utilisée à l'IRSN en mécanique des fluides (logiciels SYLVIA, ISIS, P²REMICS, CROCO) et mécanique du solide (logiciel XPER).

➕ Voir une vidéo de la simulation



SIMULATION des effets précoces d'un RAYONNEMENT alpha ou PROTON sur l'ADN

 Nombreux partenaires.
Voir <http://geant4-dna.org>

CONTACT

Carmen Villagrasa
carmen.villagrasa@irsn.fr

Laboratoire de dosimétrie des rayonnements ionisants - LDRI

⁽¹⁾ Le programme Rosiris s'attache à comprendre les mécanismes biologiques à l'origine des complications des radiothérapies, telles que par exemple le syndrome gastro-intestinal.

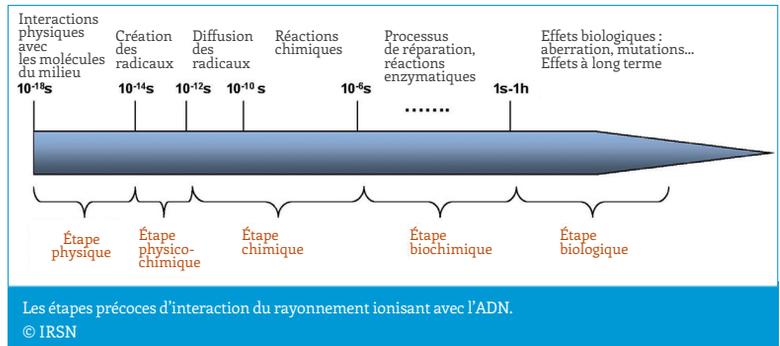
⁽²⁾ La particule peut aussi faire des dommages aux bases, ou transférer des charges à la molécule, ce qui la déstabilise. Seules les doubles cassures sont modélisées ici. Les cassures simples et autres modifications de la chaîne d'ADN sont supposées être plus facilement réparées par l'ADN et avoir potentiellement moins de conséquences sur le devenir cellulaire.

⁽³⁾ La cassure double brin est repérée à l'aide des protéines cellulaires qui se modifient ou se relocalisent autour pour la réparer. Une des protéines utilisées par les biologistes de l'IRSN est l'histone H2AX qui est phosphorylée (H2AX-pSER139) à proximité d'une cassure double brin et dont la modification peut être visualisée par immunofluorescence.

Comment mieux identifier et prévenir les effets secondaires consécutifs à une radiothérapie, l'une des principales techniques de traitement du cancer ? Ce traitement délivre des doses importantes de rayonnements ionisants à la tumeur tout en épargnant au mieux les tissus sains présents dans le champ de l'irradiation. Les réactions se produisant dans les tissus sains néanmoins touchés peuvent entraîner des complications et affecter de manière importante la qualité de vie des patients. L'IRSN a lancé en 2009 un ambitieux programme de recherche dont l'objectif est d'acquérir de nouvelles connaissances fondamentales qui contribueront, in fine, à mieux prédire ces effets et contribuer à réduire les possibles séquelles des radiothérapies. Le programme Rosiris vise à comprendre les principaux mécanismes physiques et biologiques à l'origine de ces complications. Le principe est de relier, étape par étape, les événements initiaux du transfert de l'énergie du rayonnement dans les molécules aux effets biologiques les plus tardifs. Dans ce travail de recherche multidisciplinaire, plusieurs résultats ont récemment été obtenus notamment dans l'étude des effets très précoces pour le cas des irradiations avec des ions légers sur la molécule d'ADN. Cette étude doit être étendue à tous les types de rayonnements.

Quel est le lien entre le transfert de l'énergie des rayonnements ionisants aux molécules biologiques et les effets biologiques précoces sur les cellules, puis ceux tardifs sur les organes ? Pour répondre à cette question, l'un des axes de recherche du programme Rosiris ⁽¹⁾ se concentre sur la modélisation des effets immédiats des particules ionisantes sur les molécules biologiques. Les travaux s'intéressent à la molécule d'ADN ayant un rôle important sur le devenir cellulaire.

Dans un récent article paru dans les Scientific Reports, l'équipe de scientifiques de l'IRSN expose une importante étape franchie dans ce projet avec le code Geant4 : la modélisation numérique complète des cassures double brin radio-induites de l'ADN. Les chercheurs ont choisi de modéliser cet événement précoce en raison de son impact sur la survie cellulaire et parce que son observation indirecte in situ est techniquement possible ⁽²⁾⁽³⁾. La cassure double brin de l'ADN est définie dans ce travail par un minimum de deux cassures simples sur le squelette (constitué de sucres liés à des

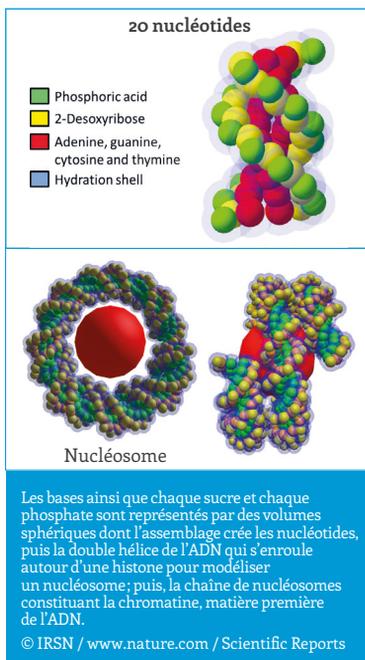


phosphates) de chaque brin d'ADN, séparées par moins de 10 paires de bases, soit moins de 3,4 nanomètres. La modélisation prend en compte, selon une approche mécanistique, à la fois les effets directs et les effets indirects que la trace d'un ion (protons ou alphas) peut provoquer sur les molécules d'ADN. Les effets directs correspondent à ceux produits par les interactions physiques entre le rayonnement et la molécule d'ADN présentes dans la cellule lorsque celui-ci traverse le noyau cellulaire. Ces collisions ionisent ou excitent la molécule d'ADN et peuvent entraîner des cassures de brin. Les effets indirects sont, quant à eux, produits sur l'ADN par les espèces chimiques radicalaires très réactives que le rayonnement crée par radiolyse de l'eau^{GL0}.

À l'échelle nanométrique

La modélisation vise à calculer le nombre, la complexité et la localisation des cassures double brin générées sur l'ADN en combinant les effets directs et indirects du rayonnement ; son résultat sera ensuite comparé avec les données qui peuvent être obtenues expérimentalement à partir du dénombrement des cassures doubles brin détectées quelques minutes après l'irradiation. Dans le travail des chercheurs de l'IRSN, la simulation de ces effets précoces repose notamment sur le logiciel de calcul Geant4-DNA au développement duquel ils participent. Ce logiciel utilise la méthode Monte Carlo^{GL0} pour simuler la trajectoire des particules dans la cellule et leur interaction avec l'ADN (pour les effets directs) ou les molécules d'eau (pour les effets indirects) à l'échelle nanométrique. Afin d'utiliser une description réaliste de la géométrie de l'ADN lors de cette simulation, il a été nécessaire de modéliser une structure détaillée de celle-ci à l'échelle nanométrique à l'aide d'un logiciel (DNAFabric) qui a été développé par Sylvain Meylan durant sa thèse. Ce logiciel permet de générer, visualiser et modifier facilement des géométries complexes, constituées d'un nombre très élevé de volumes et avec des organisations dépendantes des échelles, comme c'est le cas de la molécule d'ADN.

Dans ce modèle géométrique de l'ADN, les bases ainsi que chaque sucre et chaque phosphate sont représentés par des volumes sphériques dont l'assemblage crée la double hélice. Les structures plus complexes de l'ADN dans les cellules sont également prises en compte, du nucléotide



jusqu'aux chromosomes (voir schéma). Le modèle comprend par ailleurs une structure intermédiaire fictive, le « voxel », qui est un volume cubique de 50 nm de côté contenant un fragment de fibre de chromatine constituée de 23 nucléosomes. Pour la simulation, DNAFabric génère une structure représentant le contenu en ADN des 46 chromosomes (soit environ $6,4 \cdot 10^9$ paires de nucléotides, c'est-à-dire $38,4 \cdot 10^9$ volumes sphériques) d'une cellule humaine qui est ensuite utilisée dans Geant4-DNA.

Effets directs, effets indirects

Pour les effets directs (voir aussi Aktis n°20), ce modèle permet de calculer l'énergie déposée par les interactions des $6,4 \cdot 10^9$ paires de nucléotides avec la particule primaire et les électrons secondaires. Le logiciel Geant4-DNA calcule alors le nombre et la position des cassures simple brin d'ADN, avec l'hypothèse que toute énergie déposée de plus de 17,5 eV sur un groupe sucre-phosphate entraîne une cassure.

Pour les effets indirects, la position de chaque constituant de l'ADN est prise en compte afin d'évaluer les réactions chimiques possibles entre

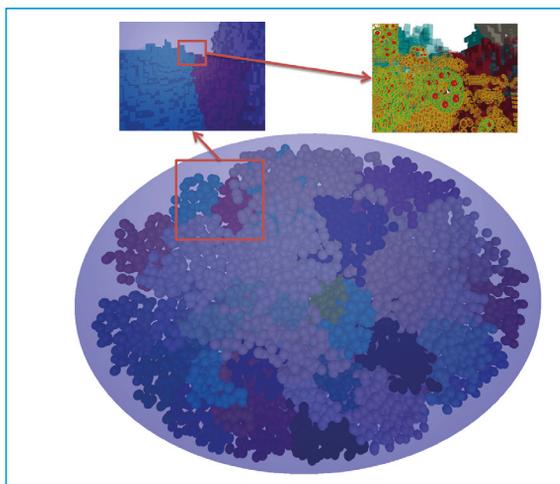
PUBLICATIONS

• Sylvain Meylan S. et al. « Simulation of early DNA damage after the irradiation of a fibroblast cell nucleus using Geant4-DNA » www.nature.com/Scientific Reports, 7: 11 923.



• Meylan S. et al. « Geant4-DNA simulations using complex DNA geometries generated by the DnaFabric tool » *Comput. Phys. Commun.* 204 (2016) 159-169.

• *Développement d'un outil de simulation multi-échelle adapté au calcul des dommages radioinduits précoces dans des cellules exposées à des irradiations d'ions légers (proton et alpha)*, thèse soutenue par Sylvain Meylan le 21 octobre 2016 à Fontenay-aux-Roses.



Noyau de cellule.
Les trois vues
représentent les trois
échelles : en haut
à droite, les molécules
d'ADN dans les voxels ;
en haut à gauche,
les cubes de voxels ;
en bas, le noyau
de la cellule rempli
des chromosomes
constitués à partir
des voxels.

© IRSN/
[www.nature.com/
Scientific Reports](http://www.nature.com/Scientific Reports)

eux et les espèces radicalaires produites par radiolyse de l'eau et localisées autour de l'ADN. Néanmoins, et compte tenu du nombre important de radicaux générés lors de la simulation et de la complexité que représenterait la prise en compte réaliste de toutes leurs interactions avec toutes les biomolécules dans le noyau cellulaire, plusieurs limites ont été définies pour diminuer l'ampleur des calculs. Ainsi, le choix a été fait de limiter la durée de la simulation de l'étape chimique à 2,5 ns. Cette durée correspond, dans la simulation présente, au laps de temps moyen avant qu'un radical OH[•] ne réagisse chimiquement avec une molécule (soit une distance de 5 nm) dans une cellule réelle. Ce délai permet de prendre en compte, indirectement, les interactions chimiques entre les radicaux et les molécules autres que l'ADN (scavenging). Ainsi, la simulation de cette étape se déroule uniquement dans les voxels présents sur la trace de la particule et non pas sur le volume du noyau complet, ce qui optimise grandement le temps de calcul. Autre intérêt du voxel, les calculs sur chacun de ces volumes élémentaires peuvent être réalisés en parallèle dans différents cœurs de calcul, optimisant aussi les temps de calcul.

Dans cette modélisation, le nombre retenu pour les cassures simples par effets indirects correspond à 40 % de toutes les réactions chimiques entre OH[•] et les sucres calculées par la simulation. En effet, les taux de réactions utilisés dans le code proviennent de données expérimentales qui utilisent du sucre isolé et non pas lié au phosphate. Dans la réalité,

seulement 40 % de ces réactions conduiraient à la rupture de la chaîne sucre-phosphate. Lors de la simulation avec Géant4-DNA, le rayonnement d'un faisceau est simulé par de nombreuses traces de particules. Dans le cas présent, il s'agit de protons ou de rayonnement alpha dont la balistique permet de les considérer comme indépendantes : les cassures créées le sont par une seule trace initiale.

Entre 1 000 et 3 000 particules

Une fois l'ensemble des cassures simples localisées (qu'elles soient induites par effets directs qui représentent 20 à 30 % des dommages en moyenne, ou par effets indirects), un logiciel dit de clusterisation^{GLD} identifie leurs positions les unes par rapport aux autres pour définir les cassures double brin pour chaque trajectoire de particule. Un nombre de particules initiales, entre 1 000 et 3 000 (pour obtenir une incertitude inférieure à 5 %), fournit le nombre moyen de cassures double brin pour le type de particule et d'énergie considérées. Pour le moment, la modélisation a été validée en comparant les résultats obtenus aux données expérimentales, en faible nombre, existant dans la littérature pour des irradiations par proton. Néanmoins, ces données présentent des incertitudes et variabilités importantes et les techniques expérimentales utilisées ne permettent pas d'aller plus loin dans la validation de la simulation. La mise en fonctionnement du microfaisceau MIRCOM à l'IRSN permettra d'obtenir des données expérimentales bien plus adaptées pour la validation des modèles.

Caractérisation DU SÉISME POUR l'étude DES BÂTIMENTS, LES BIAIS des méthodes de calcul

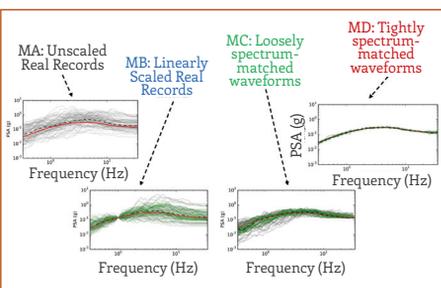
Pour étudier le comportement des bâtiments sur toute la durée d'un séisme de référence, les simulations numériques exploitent des enregistrements de mouvements du sol générés par des séismes réels similaires. Ces enregistrements sont modifiés afin de limiter les temps de calcul. Un doctorant de l'IRSN a évalué l'impact de ces modifications sur les résultats fournis par la simulation.



CONTACT

Maria Lancieri
maria.lancieri@irsn.fr

Bureau d'évaluation des risques sismiques pour la sûreté des installations - BERSIS



À gauche, un jeu d'accélérogrammes non simplifiés, et le même jeu après application des 3 méthodes de simplification étudiées durant la thèse.

© IRSN

Parmi les méthodes de modification existantes, le doctorant en a choisi trois fournissant des accélérogrammes avec des variabilités d'amplitude plus ou moins grandes par rapport au mouvement de référence. Il a appliqué ces méthodes à environ soixante-dix accélérogrammes, et en a extrait plusieurs jeux de cinq⁽¹⁾. Puis il a étudié l'impact de deux types de variabilités sur l'analyse des structures : la variabilité entre les enregistrements au sein de chaque jeu, et celle existant entre les jeux pour chaque méthode. À cette fin, le doctorant a effectué des tests à la fois sur des modèles simples de bâtiment (i.e. représentés par un ressort) et des modèles plus complexes (représentés par une géométrie en étages). Le résultat obtenu pour chaque modèle a été comparé au résultat obtenu avec les accélérogrammes réels, non modifiés.

⁽¹⁾ Cinq est en pratique le nombre d'accélérogrammes souvent utilisé pour réaliser une évaluation vis-à-vis du risque sismique car il correspond au minimum recommandé par l'Autorité de sûreté nucléaire (guide ASN/2/01 du 2006 Prise en compte du risque sismique à la conception des ouvrages de génie civil d'installations nucléaires de base à l'exception des stockages à long terme des déchets radioactifs).

Plusieurs jeux

Pour dimensionner un bâtiment nucléaire en regard des sollicitations sismiques, les ingénieurs du génie civil évaluent en général son comportement par rapport aux mouvements maximums du sol provoqués par le séisme de référence de la zone géographique où il se trouve. Mais, de plus en plus souvent, ils l'évaluent en considérant l'ensemble des mouvements générés au cours du temps par ce séisme. Ceci suppose d'utiliser des enregistrements des mouvements résultant de séismes réels, ou accélérogrammes^{GL0}, cohérents avec le séisme de référence. Pour un séisme de référence il existe, dans les bases de données internationales, une multitude d'accélérogrammes qui présentent inévitablement une certaine variabilité. Diverses méthodes de modification sont donc appliquées pour les rapprocher de la référence et limiter ainsi les temps du calcul de comportement du bâtiment. Durant sa thèse, Levent İsbiliroğlu a évalué l'impact de ces choix de modification sur le résultat final concernant la réponse du bâtiment.

De cet important ensemble de simulations effectuées, le doctorant a tiré plusieurs enseignements. Parmi ceux-ci, il conclut que, quelle que soit la méthode utilisée, si le choix est fait d'un nombre limité d'enregistrements (par exemple 5), alors il faut en utiliser plusieurs jeux pour une évaluation fiable. S'il faut aussi évaluer l'incertitude associée au résultat, alors les enregistrements non modifiés doivent être privilégiés. Si l'utilisation d'une méthode de modification est inévitable, cette thèse indique le biais induit sur la réponse moyenne de la structure aux sollicitations sismiques et sa variabilité en fonction de la méthode sélectionnée. Ces travaux représentent le début d'une réflexion concernant la pratique courante de sélection/modification d'accélérogrammes compatibles avec l'aléa sismique. Ils seront suivis par d'autres études qui permettront de collecter les éléments nécessaires à l'évolution de telle pratique.

PUBLICATION

- Élaboration de stratégies de sélection de signaux accélérométriques pour le calcul du comportement des structures, thèse soutenue par Levent İsbiliroğlu le 1^{er} mars 2017 à l'Institut des Sciences de la Terre (ISTerre) à Saint Martin d'Hères (Isère, France).



Vers une ÉVALUATION plus fine des transferts SOL-PLANTES du CÉSIIUM

Région PACA, arnaud.martin-garin@irsn.fr

CONTACT

Arnaud Martin-Garin
arnaud.martin-garin@irsn.fr

Laboratoire de recherche sur les transferts des radionucléides dans les écosystèmes terrestres - LR2T

Pour mieux évaluer les conséquences dans le temps et dans l'espace d'une contamination radioactive, l'IRSN cherche à réduire les incertitudes associées aux modèles utilisés pour prédire les transferts de radionucléides, notamment entre le sol et les plantes. Une thèse a contribué à ce travail pour le césium.

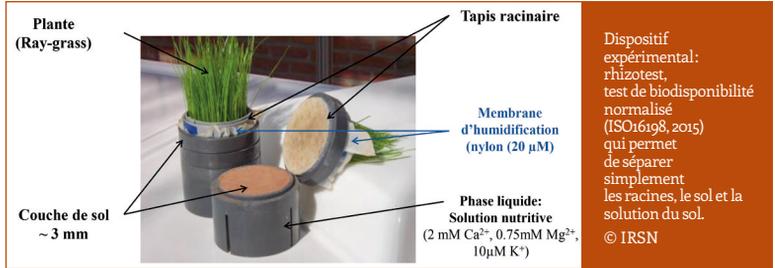
⁽¹⁾ Notamment, les coefficients de distribution liquide-solide (K_d)^{pl} ou le facteur de transfert racinaire (F_r)^{pl} considérés constants sous l'hypothèse d'équilibre entre les compartiments.

⁽²⁾ Illite, montmorillonite et kaolinite.

⁽³⁾ Parmi les matériaux argileux les plus couramment rencontrés dans la littérature: argile MX-80, matériaux argileux du Callovo-Oxfordien, argile FEBEX, argile de Boom.

PUBLICATIONS

• *Modélisation dynamique de la (bio) disponibilité des radionucléides dans les sols: approche comparative modèles-expériences appliquée au transfert de césium dans la rhizosphère.* Thèse Aix-Marseille Université, 2017, 264 p.



L'évaluation des conséquences sanitaires et environnementales d'une contamination repose en grande partie sur la modélisation des transferts des radionucléides au sein des écosystèmes. Ceux-ci sont habituellement décrits sur la base d'un petit nombre de paramètres radioécologiques considérés comme constants⁽¹⁾, qui agrègent les différents processus impliqués. Cette simplification conduit à de fortes incertitudes (parfois plusieurs ordres de grandeur) dans les résultats. La thèse menée par Mohamed Amine Cherif visait à les réduire dans le cas du transfert du césium (Cs) aux plantes. Le doctorant a comparé ces approches simplifiées avec des modèles numériques, dits mécanistes, qui explicitent les processus de transfert de Cs entre les compartiments concernés, soit du sol vers l'eau présente dans le sol ou vers le système racinaire des végétaux.

Nombre moindre de paramètres

Une analyse critique des modèles disponibles pour simuler l'adsorption du césium sur les minéraux argileux, principal processus contrôlant la répartition de cet élément entre le sol et l'eau, a été réalisée. Elle a débouché sur l'élaboration d'un modèle alternatif aux modèles existants, qui tire le meilleur parti d'approches mécanistes représentant l'adsorption des ions à la surface des solides.

Celui-ci a été construit à partir des données décrivant l'adsorption du Cs sur trois minéraux argileux purs⁽²⁾. Des simulations ont ensuite été conduites dans une large gamme de concentrations en Cs et de conditions physico-chimiques, et leurs résultats ont été confrontés aux données observées sur des matériaux argileux naturels⁽³⁾. Ce modèle, qui utilise un nombre moindre de paramètres que les modèles mécanistes existants, s'est avéré robuste. Il permet de rendre compte avec une bonne précision des différentes interactions du Cs avec les matériaux argileux testés, sans avoir besoin de réajuster ses paramètres.

Le modèle géochimique a ensuite été couplé à des modèles de transport de l'eau et un modèle d'adsorption racinaire du Cs. Les résultats de ces nouvelles simulations ont été confrontés à une série de données expérimentales obtenues sur un sol naturel de prairie contaminé par des solutions de Cs, de compositions physico-chimiques variées, en présence d'herbe ou non. Les transferts observés entre le sol, l'eau du sol et la plante ont pu être reproduits avec une très bonne précision à partir des outils développés.

La modélisation proposée par M. A. Cherif est aujourd'hui appliquée dans le cadre d'une nouvelle thèse afin d'en élargir le domaine de validation. Les résultats du modèle de prédiction des transferts de Cs seront confrontés aux observations réalisées sur d'autres combinaisons de sols naturels et de plantes.

ÉVALUATION DE LA RECHERCHE

LE RAPPORT DU HCÉRES POUR L'IRSN

Le Hcéres vient de publier le rapport d'évaluation de l'Institut en tant qu'établissement de recherche, lequel porte sur sa stratégie, son organisation et sa gouvernance mises au service de la recherche. Les points forts relevés par le Hcéres concernent en particulier l'identité de l'IRSN, bien marquée à l'interne comme à l'externe, sa forte visibilité et sa reconnaissance à l'international ainsi que sa participation active à la construction de la recherche européenne. Le Haut Conseil a par ailleurs souligné la politique d'ouverture à la société menée par l'Institut et le climat de confiance que cette dernière contribuait à instaurer.

L'évaluation met également en lumière un certain nombre de sujets considérés comme autant de priorités pour l'IRSN en sa qualité d'établissement conduisant des recherches, parmi lesquels les partenariats avec le monde académique, un positionnement institutionnel qui pourrait s'inscrire de manière plus affirmée dans l'espace national et international de la recherche et une gouvernance renforcée des activités menées dans ce domaine. Les conclusions de l'évaluation du Hcéres viennent ainsi conforter l'Institut dans son engagement en matière de recherche mais également dans les réflexions qu'il a entamées et les pistes d'évolution qu'il est en train de construire concernant ses orientations stratégiques, son organisation et ses modes de fonctionnement.

PROGRAMME DE RECHERCHE

PREMIER ESSAI DU PROGRAMME CIP SUR LA NOUVELLE BOUCLE À EAU DU RÉACTEUR DE RECHERCHE CABRI



L'IRSN et le CEA ont réalisé avec succès, lundi 16 avril 2018 à Cadarache, le premier essai du programme international Cabri (CIP) dans la nouvelle configuration du réacteur Cabri. Cette expérience, réalisée sur une nouvelle

boucle à eau sous pression, constitue la première étape du programme de recherche international CIP dédié à l'amélioration des connaissances sur le comportement du combustible des réacteurs à eau sous pression (REP), lors d'une situation accidentelle correspondant à une augmentation soudaine de puissance du réacteur (accidents d'insertion de réactivité ou IRIA).

PRIX

NADIA BENABDALLAH REMPORTE LE PRIX DE L'ÉCOLE DOCTORALE PHENICS

Nadia Benabdallah a remporté, lundi 28 mai 2018, le prix de l'école doctorale PHENICS (Particules, Hadrons, Énergie, Noyau, Instrumentation, Imagerie, Cosmos et Simulation) dans laquelle sa thèse était inscrite, pour son travail « Optimisation de la dosimétrie en alphanéoplasie par approche multi-échelle : application au traitement des métastases osseuses par le Ra-223 » soutenu le 21 décembre 2017.

COLLABORATIONS

RENOUVELLEMENT DE LA CHAIRE RESOH

La chaire industrielle de recherche et d'enseignement consacrée à l'influence des relations interorganisationnelles (relations de sous-traitance et mode projet) sur la construction collective d'une « performance industrielle sûre », ou chaire RESOH, vient d'être prolongée pour 5 ans. L'Agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs (ANDRA) se joint, dans cette nouvelle phase de la chaire, aux partenaires historiques de la chaire que sont l'Institut Mines-Télécom Atlantique (IMT Atlantique), Orano (ex Areva), Naval Group (ex DCNS) et l'IRSN.

PUBLICATIONS

MÉMOIRES DE HDR DE JEAN DESQUINES, D'ÉRIC BLANCHARDON ET DE HUGUES PRÉTEL

La collection HDR de l'IRSN s'enrichit de trois nouveaux mémoires d'habilitation à diriger des recherches : *Étude de la dynamique des incendies en milieu confiné et mécaniquement ventilé*, HDR soutenue en 2016 par Hugues Prétel ; *Contribution à l'analyse des composants mécaniques polycristallins*, soutenue par Jean Desquines en 2015 ; et *Développement et application de méthodes pour l'évaluation de la dose de rayonnement résultant d'une contamination radioactive interne*, soutenue par Éric Blanchardon en 2012.

PARUTION D'UN OUVRAGE SUR LES QUESTIONS DE SÛRETÉ ET DE RADIOPROTECTION DANS LES RÉACTEURS NUCLÉAIRES DE FUSION

L'IRSN publie un nouvel ouvrage dans la Collection documents de références, intitulé *Réacteurs nucléaires de fusion // considérations sur les questions de sûreté et de radioprotection des réacteurs de démonstration après l'installation ITER*.

Il constitue un premier référentiel pour les projets de développement des réacteurs nucléaires de fusion concernant les questions de sûreté et de radioprotection propres à ces réacteurs et pourrait contribuer à une étape préparatoire dans la conception des futurs réacteurs de fusion de démonstration qui succéderont à l'installation expérimentale ITER.

Lire les actualités



Étude de la dynamique des incendies en milieu confiné et mécaniquement ventilé, HDR soutenue en 2016 par Hugues Prétel ; *Contribution à l'analyse des composants mécaniques polycristallins*, soutenue par Jean Desquines en 2015 ; et *Développement et application de méthodes pour l'évaluation de la dose de rayonnement résultant d'une contamination radioactive interne*, soutenue par Éric Blanchardon en 2012.



ACCÉLÉROGRAMME :

Enregistrement des accélérations du sol durant un séisme.

CLUSTERISATION :

Méthode d'analyse des données qui vise à les regrouper en sous-ensembles partageant des caractéristiques communes, qui correspondent le plus souvent à des critères de proximité.

COEFFICIENTS**DE DISTRIBUTION****LIQUIDE-SOLIDE (K_p) :**

Rapport de la concentration totale de l'élément associé à la phase solide à sa concentration totale dans la phase liquide.

FACTEUR DE TRANSFERT

RACINAIRE (F_r) : Rapport de la concentration totale de l'élément dans la plante à sa concentration totale dans le sol.

FLAMME LAMINAIRE :

Flamme lente, consistant en un front de réaction de géométrie régulière se propageant dans un écoulement laminaire avec une vitesse de l'ordre du mètre par seconde.

FLAMME TURBULENTE :

Flamme accélérée par des instabilités hydrodynamiques et la turbulence créée notamment par les effets de cisaillement dus à la présence d'obstacles. La flamme accélérée peut transiter vers la détonation, caractérisée par une vitesse de l'ordre du kilomètre par seconde.

LOI DE FERMETURE :

Relation algébrique permettant d'exprimer une quantité physique (propriété de transport, coefficient d'échange, etc.) en fonction des inconnues du problème. Ici, la vitesse de flamme est fonction de la température, la pression, la composition du mélange et les caractéristiques locales de la turbulence.

MÉTHODE MONTE CARLO :

Ensemble d'algorithmes visant à estimer une valeur numérique en utilisant des techniques probabilistes.

PRÉVALENCE :

Fréquence de personnes atteintes d'une maladie au sein d'une population à un moment donné.

RADIOLYSE DE L'EAU :

La radiolyse de l'eau est la dissociation chimique de l'eau sous l'effet d'un rayonnement énergétique intense en hydrogène et hydroxyle, respectivement sous forme de radicaux H^\bullet et OH^\bullet .

SCHEMA NUMERIQUE :

Un schéma numérique est un algorithme, conçu pour résoudre des équations aux dérivées partielles.

L'Institut de radioprotection et de sûreté nucléaire (IRSN) est un organisme public d'expertise et de recherche pour la sûreté et la sécurité nucléaires et la radioprotection. Il intervient comme expert en appui aux autorités publiques. Il exerce également des missions de service public qui lui sont confiées par la réglementation. Il contribue notamment à la surveillance radiologique du territoire national et des travailleurs, à la gestion des situations d'urgence et à l'information du public. Il met son expertise à la disposition de partenaires et de clients français ou étrangers.

Pour consulter la version numérique d'Aktis, accéder aux publications scientifiques et aux informations complémentaires en ligne, et pour s'abonner, rendez-vous sur le site Internet de l'IRSN : www.irsn.fr/aktis

**SIÈGE SOCIAL**

31 avenue de la Division Leclerc
92260 Fontenay-aux-Roses
France
RCS Nanterre B 440 546 018

TÉLÉPHONE

+33 (0)1 58 35 88 88

COURRIER

BP 17 - 92262 Fontenay-aux-Roses
Cedex - France

SITE INTERNET

www.irsn.fr