

Simulation de dislocations par l'équation de Weertman

Marc Josien

23 janvier 2017, Cermics



Introduction

Objectif

Approximer numériquement une équation intégro-différentielle de nature diffusive (W) (l'équation de Weertman).

Approche

- 1 construire un système dynamique (W_d) convergeant vers (W),
- 2 simuler (W_d),
- 3 démontrer que (W_d) converge bien vers (W).

Références

Fife & McLeod (1977), Chen (1997), Karlin & al. (2000), Gui & Zhao (2015)[2, 1, 4, 3]

En collaboration avec

- 1 Yves-Patrick Pellegrini, CEA DAM
- 2 Claude le Bris, CERMICS (Directeur de thèse)
- 3 Frédéric Legoll, Navier

Plan

- 1 Contexte physique
- 2 Propriétés de l'équation de Weertman
- 3 Simulation
- 4 Perspectives

Sommaire

- 1 Contexte physique
- 2 Propriétés de l'équation de Weertman
- 3 Simulation
- 4 Perspectives

Les dislocations

Principales responsables de la plasticité des cristaux.

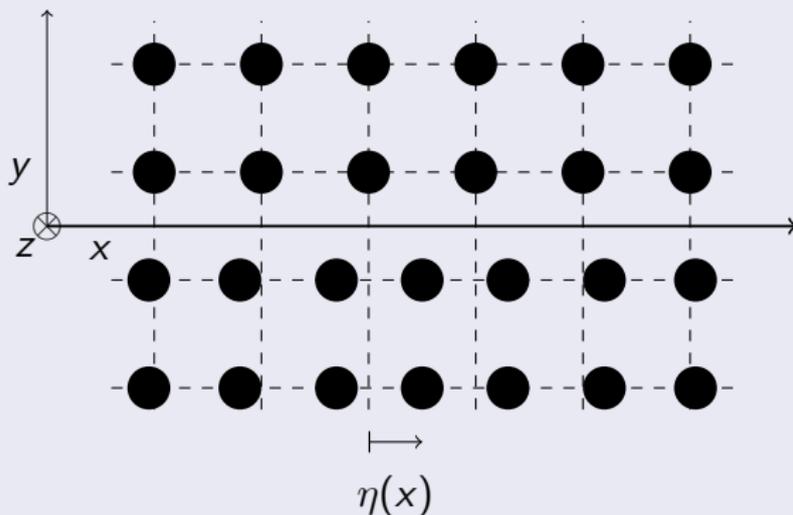
FIGURE : Eprouvettes de tests en traction cylindrique¹



1. Tiré de <http://www.simulationmateriaux.com/>

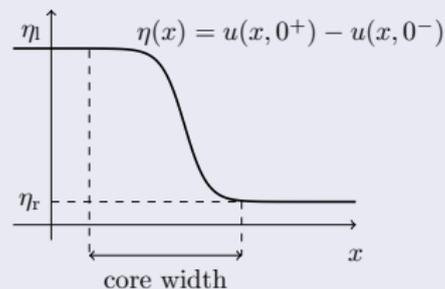
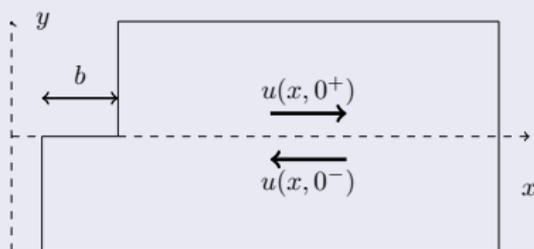
Les dislocations : un double point de vue

Vision atomistique



Les dislocations : un double point de vue

Vision en mécanique des milieux continus



Modèle

- 1 Fonctions de Green de l'élasticité linéaire dans les demi-plans continus
- 2 Force de rappel interatomique F'

Cas statique : équation de Peierls-Nabarro

$$- |\partial_x| \eta(x) = F'_\sigma(\eta(x)) \quad \text{pour } x \in \mathbb{R}, \quad (1)$$

où $- |\partial_x|$ est un opérateur intégro-différentiel diffusif.

Modèle

Cas d'un front progressif : équation de Weertman

On suppose maintenant que la dislocation est décrite par une fonction $\eta(x - ct)$. Alors

$$\begin{cases} -|\partial_x| \eta(x) + c(v) \partial_x \eta(x) = F'(\eta(x)) & \text{pour } x \in \mathbb{R}, \\ \eta(-\infty) = \eta_l \quad \text{et} \quad \eta(+\infty) = \eta_r, \end{cases} \quad (W)$$

où c est une certaine fonction de la vitesse physique v de la dislocation.

Deux inconnues

η **et** c sont des inconnues! (v récupérable par routine externe)

Sommaire

- 1 Contexte physique
- 2 Propriétés de l'équation de Weertman**
- 3 Simulation
- 4 Perspectives

L'opérateur $|\partial_x|$

Plusieurs définitions

$$\begin{aligned}
 |\partial_x| \eta(x) &:= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left(\int_{\epsilon}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{-\epsilon} \right) \frac{\eta'(x-y)}{y} dy \\
 &= \left\{ \text{p.v.} \left(\frac{1}{x} \right) * \partial_x \eta \right\} (x) \\
 &= \mathcal{F}^{-1} (|k| \mathcal{F}\{\eta\}) (x).
 \end{aligned}$$

Donc $|\partial_x|$ est un opérateur symétrique, positif et $|\partial_x|^2 = -\Delta$. Il engendre le semi-groupe contractant

$$K_t * \eta(x) := e^{-t|\partial_x|} \eta(x) = \int_{\mathbb{R}} \left\{ \frac{t}{\pi((x-y)^2 + t^2)} \right\} \eta(y) dy.$$

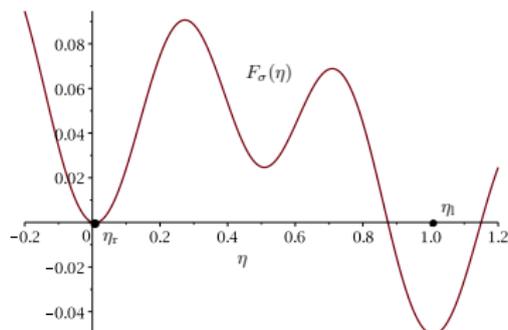
Existence et unicité de la solution de (W)

Modulo des considérations techniques mises de côté :

Théorème de [3]

Si F est bistable, alors (W) a une solution monotone (η, c) , unique à translation près.

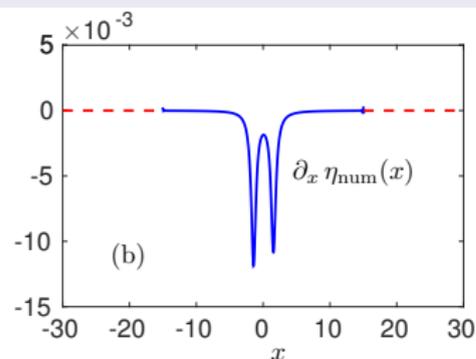
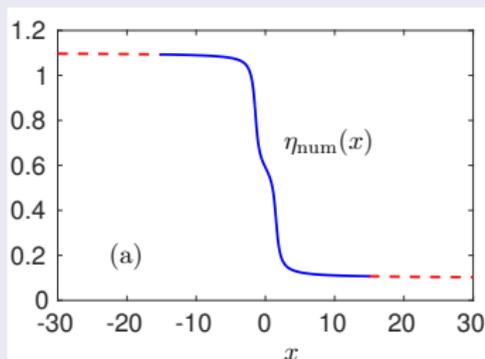
FIGURE : Exemple de potentiel F bistable



Existence et unicité de la solution de (W)

Forme typique de η

FIGURE : Exemple de solution



Ondes progressives de (Wd) et (W)

On introduit *artificiellement* le système dynamique suivant

$$\begin{cases} \partial_t u(t, x) + |\partial_x| u(t, x) = -F'(u(t, x)) & \text{pour } x \in \mathbb{R}, \\ u(t = 0, x) = u_0(x) & \text{pour } x \in \mathbb{R}. \end{cases} \quad (\text{Wd})$$

Si $u(t, x) = \eta(x - ct)$ satisfait (Wd), alors η satisfait (W). Donc

η solution de (W) \iff η onde progressive de (Wd).

Question

Est-ce que les ondes progressives de (Wd) sont des points fixes attracteurs ?

Comprendre (Wd)

Séparation des opérateurs

- 1 Si on enlève $|\partial_x|$ de (Wd), on est face à une ODE

$$\partial_t u(t, x) = -F'(u(t, x)).$$

\implies convergence vers les minima locaux de F .

- 2 Si on enlève $F'(u(t, x))$, on a

$$\partial_t u(t, x) = -|\partial_x| u(t, x),$$

qui en Fourier est une ODE

$$\partial_t \hat{u}(t, k) = -|k| \hat{u}(t, k).$$

\implies convergence vers une fonction constante.

Comprendre (Wd)

Principe de comparaison

Si $\underline{u}(0, \cdot) \leq \bar{u}(0, \cdot)$ et que

$$\partial_t \underline{u} \leq -|\partial_x| \underline{u} - F'(\underline{u}),$$

$$\partial_t \bar{u} \geq -|\partial_x| \bar{u} - F'(\bar{u}),$$

alors

$$\underline{u} \leq \bar{u}.$$

(similaire si on remplace $|\partial_x|$ par $-\Delta$)

Convergence de (Wd) vers (W)

Modulo des conditions techniques mises à part, on montre

Théorème

Si F est bistable, alors, pour tout $u_0 \in L^\infty(\mathbb{R})$ à valeurs dans $[\eta_r, \eta_l]$ et satisfaisant les conditions aux bords

$$u_0(+\infty) = \eta_r \quad \text{and} \quad u_0(-\infty) = \eta_l,$$

le système dynamique (Wd) admet une unique solution faible $u \in L^\infty(\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R})$. En outre, il existe $\xi > 0$, $\kappa > 0$ et $C > 0$ tels que, si (η, c) est solution de (W), alors

$$\|\eta(x - ct - \xi) - u(t, x)\|_{L_x^\infty(\mathbb{R})} \leq C e^{-\kappa t}.$$

(article en cours de rédaction)

Convergence de (Wd) vers (W) : cas simple

Supposons que l'on sait a priori que $c = 0$. On pose la fonctionnelle

$$\mathcal{E}(\eta) := \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} \eta(x) |\partial_x| \eta(x) dx + \int_{\mathbb{R}} F(\eta(x)) dx.$$

Alors l'équation (Wd) s'écrit sous la forme

$$\partial_t u = -\nabla_{\eta} \mathcal{E}(u).$$

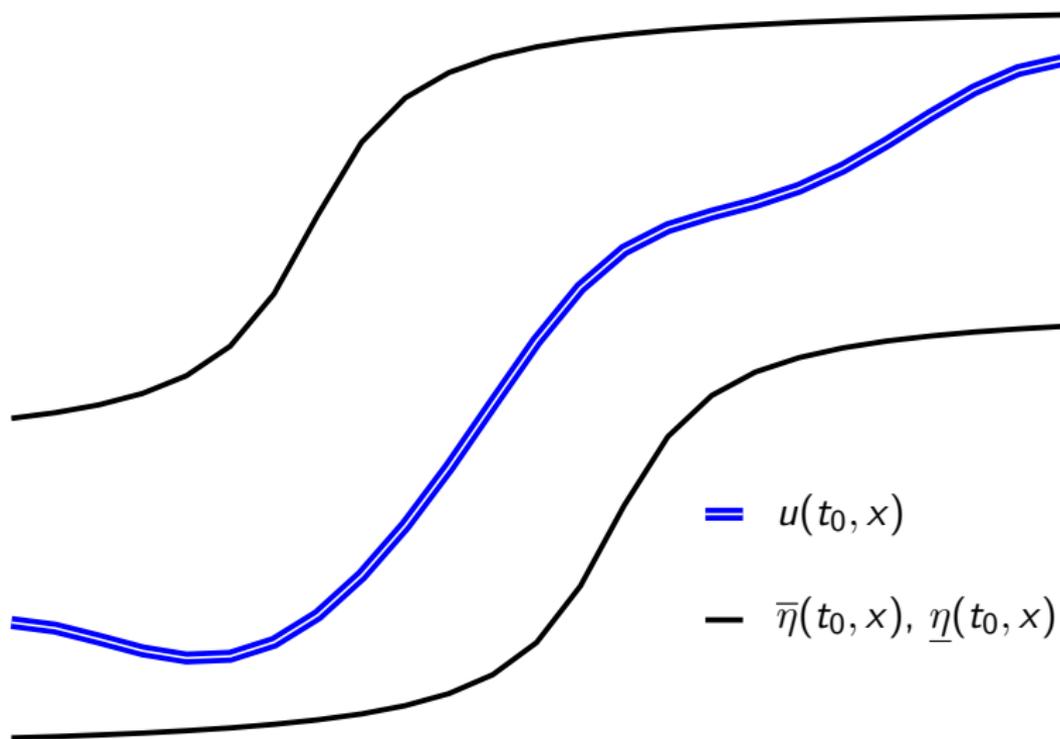
\implies minimisation d'énergie.

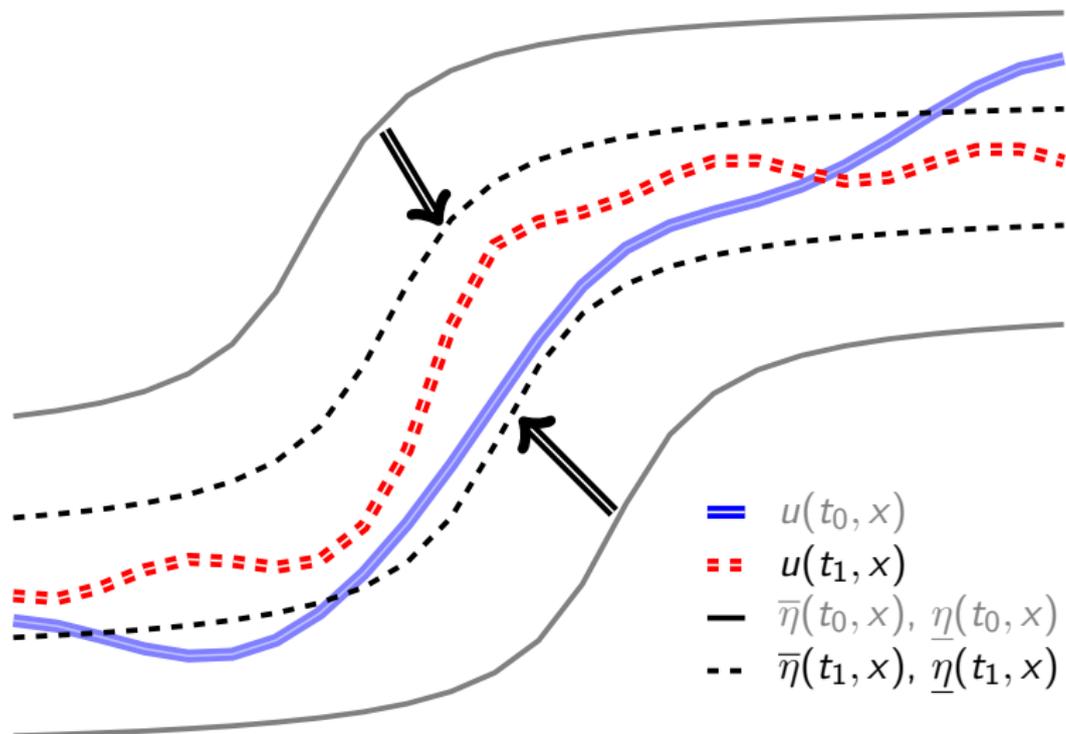
Convergence de (W_d) vers (W) : cas complexe

Dans le cas où $c \neq 0$, l'énergie \mathcal{E} n'est pas définie. Il faut recourir à une technique *de squeezing*, inventée par [2], reprise et améliorée par [1].

Le *squeezing*

Idée : coincer $u(t, x)$ entre une sous-solution $\underline{\eta}(t, x)$ et une sur-solution $\bar{\eta}(t, x)$ construites à partir de la solution η de (W) . Par le principe de comparaison, si $\underline{\eta}(0, \cdot) \leq u(0, \cdot) \leq \bar{\eta}(0, \cdot)$, alors $u(t, \cdot)$ reste entre $\underline{\eta}$ et $\bar{\eta}$. Si on parvient à faire se rapprocher $\underline{\eta}$ et $\bar{\eta}$, alors $u(t, \cdot)$ est étranglé contre une onde progressive...





Sommaire

- 1 Contexte physique
- 2 Propriétés de l'équation de Weertman
- 3 Simulation**
- 4 Perspectives

Stratégie pour simuler (W)

Idée : utiliser (Wd)

Splitting

En pratique, on applique successivement les opérations (*splitting*)

$$\partial_t u(t, x) = -|\partial_x| u(t, x), \quad (2)$$

$$\partial_t u(t, x) = -F'(u(t, x)). \quad (3)$$

- 1 (2) est une ODE en Fourier. Donc on utilise la FFT.
- 2 (3) est une ODE. Donc on utilise un schéma de Runge-Kutta,
- 3 l'onde progressive se déplace. Donc on rajoute une étape d'advection pour recentrer l'onde.

Le splitting de Strang

Principe du splitting de Strang

Quand on veut résoudre

$$\partial_t u = L_1 u + L_2 u, \quad (4)$$

on peut poser

$$u(t + \Delta t) = e^{\frac{\Delta t}{2} L_1} e^{\Delta t L_2} e^{\frac{\Delta t}{2} L_1} u(t),$$

qui est un schéma consistant à l'ordre **2** en Δt .

Morale

Si on sait simuler efficacement séparément $\partial_t - L_1$ et $\partial_t - L_2$, alors on peut simuler efficacement $\partial_t - L_1 - L_2$.

Validation sur un cas simple

Si

$$F'_\sigma(\eta) = \sin(2\pi\eta) - \sigma. \quad (5)$$

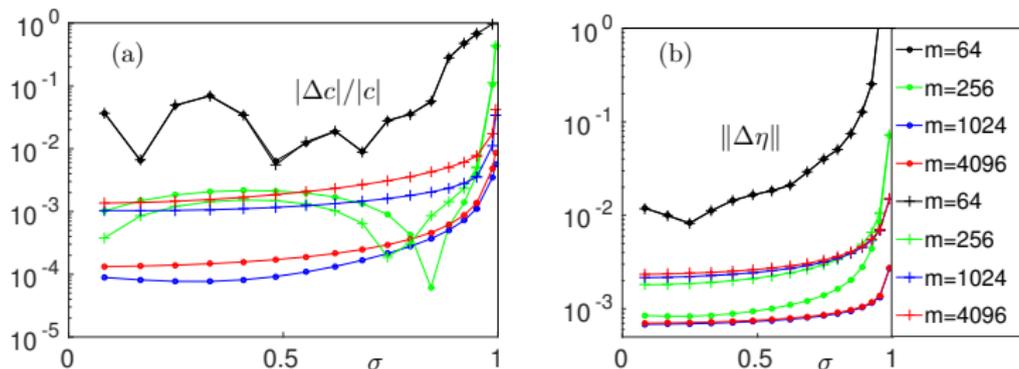
alors, (W) admet les solutions suivantes

$$\eta(x) = \eta_r + \frac{1}{\pi} \left[\frac{\pi}{2} - \arctan\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \right] \quad \text{et} \quad c = \tan(2\pi\eta_r),$$

avec $\eta_r = \arcsin(\sigma)/(2\pi)$, $\eta_l = 1 + \eta_r$, et $a = 1/\cos(2\pi\eta_r)$.

Validation sur un cas simple

FIGURE : Erreur sur les quantités en fonction de σ et du nombre de points de discrétisation m



Sommaire

- 1 Contexte physique
- 2 Propriétés de l'équation de Weertman
- 3 Simulation
- 4 Perspectives**

Cas plus physique : problème 2D

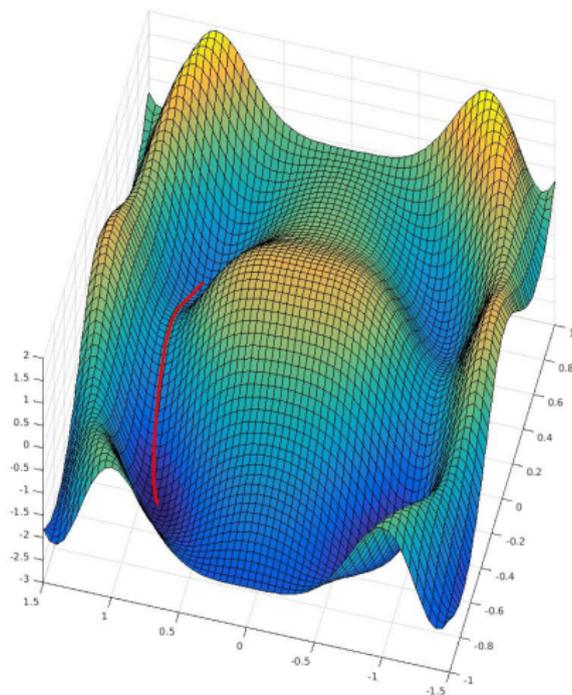
$$\begin{cases} -|\partial_x| \vec{\eta}(x) + cD_1(c)\partial_x \vec{\eta}(x) = D_2(c)\nabla_\eta F(\vec{\eta}(x)), \\ \vec{\eta}(-\infty) = \vec{\eta}_l \quad \text{et} \quad \vec{\eta}(+\infty) = \vec{\eta}_r. \end{cases}$$

où $\vec{\eta} = (\eta_1, \eta_2)$ et F est un potentiel ayant pour minima locaux $\vec{\eta}_l$ et $\vec{\eta}_r$, et D_1 et D_2 sont des matrices diagonales positives. On construit le système dynamique

$$\begin{cases} \partial_t \vec{u} = -|\partial_x| \vec{u} - D_2(c(t))\nabla_\eta F(\vec{u}) + cD_1(c(t))\partial_x \vec{u}, \\ c(t) = c[\vec{u}(t, \cdot)]. \end{cases}$$

Dont on observe empiriquement la convergence.

FIGURE : Tracé de la dislocation sur la surface de potentiel F



Peierls-Nabarro dynamique

Equation de Peierls-Nabarro dynamique

$$\partial_t \hat{\eta}(t, k) = \int_{\mathbb{R}_+} k^2 C(k(t-t')) \hat{\eta}(t', k) dt' - \mathcal{F}(F_{\sigma_a}[\eta])(t, k), \quad (6)$$

Pour étudier la dynamique des dislocations.

Difficultés :

- 1 équation intégral-différentielle semi-linéaire
- 2 équation avec mémoire
- 3 $C(T)$ est une fonction complexe changeant de signe (ressemble à $\text{sinc}(T)$)

Recherche en cours...

Bibliographie

-  X. Chen. Existence, uniqueness, and asymptotic stability of traveling waves in nonlocal evolution equations. *Adv. Differential Equations*, 2(1) :125–160, 1997.
-  P. C. Fife and J. B. McLeod. The approach of solutions of nonlinear diffusion equations to travelling front solutions. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 65(4) :335–361, 1977.
-  C. Gui and M. Zhao. Traveling wave solutions of Allen-Cahn equation with a fractional Laplacian. *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, 32(4) :785–812, 2015.
-  V. Karlin, V. G. Maz'ya, A. B. Movchan, J. R. Willis, and R. Bullough. Numerical solution of nonlinear hypersingular integral equations of the Peierls type in dislocation theory. *SIAM J. Appl. Math.*, 60(2) :664–678, 2000.