

Errata et Addenda du livre
Systèmes multiéchelles : modélisation et simulation
Janvier 2006

Claude Le Bris

CERMICS, École Nationale des Ponts et Chaussées,
6 & 8, avenue Blaise Pascal, 77455 Marne-La-Vallée Cedex 2

Je remercie Xavier Blanc, Antoine Gloria, Frédéric Legoll, Tony Lelièvre, Gabriel Stoltz pour leur relecture renouvelée du livre. Plusieurs des erreurs mentionnées ici, et des compléments indiqués, leur sont dus.

Chapitre 1

- Page 4, ligne 3, lire : *ce chapitre*.
- Page 7 et suivantes, lire partout : \mathbf{Z} au lieu de \mathbf{Z} , et \mathbb{R} au lieu de \mathbf{R} .
- Page 8, première ligne, lire : *(on part de la configuration de référence, qui est une configuration d'équilibre et qu'on déformera ensuite sous l'effet de certaines forces)*.
- Page 8, formule (1.11): la deuxième somme court sur les sites $x_j \neq x_i$.
- Page 8, formule (1.13): il est plus clair de lire

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N^3} \sum_{\substack{(j_1, j_2, j_3) \in \mathbf{Z}^3, \\ -P \leq j_1, j_2, j_3 \leq P}} \frac{1}{2} \sum_{\substack{(k_1, k_2, k_3) \neq 0 \in \mathbf{Z}^3 \\ -P \leq k_1, k_2, k_3 \leq P}} V(\nabla\varphi(\frac{j}{N}) \cdot k).$$

- Page 9, Remarque 1.4: omettre (1.16)-(1.17) et lire tout simplement *Supposons que la maille du réseau à l'équilibre est le cube de côté a . Alors, à la place de (1.15) la densité d'énergie est*

$$W(F)(x) = W(\nabla\varphi(x)) = \frac{1}{a^3} \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0 \in \mathbf{Z}^3} V(\nabla\varphi(x) \cdot k a). \quad (1.18)$$

- Page 10, Exercice 1.6 : Rajouter *On rappelle que le potentiel d'interaction $V(r)$ ne dépend de r que via $|r|$.*

- Page 11, formule (1.23): la sommation commence à $i = 2$.
- Page 13, légende de la Figure 1.5: rajouter à *impensable* la note de bas de page suivante *Il existe pourtant certaines approches de la littérature de mécanique qui emploient alors une approche purement macroscopique.*
- Page 15, rajouter en-dessous de la formule (1.29) la remarque suivante :

Remarque 1.12⁻: En fait, la seconde intégrale de (1.29), qui porte sur la zone Ω_{sing} où la déformation est attendue singulière, peut même être remplacée par une sommation discrète *explicite* sur les sites atomiques de Ω_{sing}

$$\frac{1}{2} \sum_{x_j \neq x_i \in \Omega_{sing}} V(\varphi(x_j) - \varphi(x_i)).$$

Le modèle obtenu couple alors explicitement une description continue et une description atomistique du matériau. Pour l'analyse mathématique et l'analyse numérique d'une mise en oeuvre simple monodimensionnelle d'un tel modèle, on peut renvoyer le lecteur à la référence *X. Blanc, C. Le Bris, F. Legoll, Analysis of a prototypical multiscale method coupling atomistic and continuum mechanics, Mathematical Modelling and Numerical Analysis (M²AN), Vol. 39 No. 4, pp 797-826, 2005.*

- Page 18, dernier paragraphe, lire: ξ_j et $\xi_j + \varepsilon k$ au lieu de ζ_j et $\zeta_j + \varepsilon n$, respectivement.
- Page 20, ligne -3: lire *et éventuellement* $\frac{\partial E}{\partial \varphi}(\varphi^k)$ *voire* $\frac{\partial^2 E}{\partial \varphi^2}(\varphi^k)$.
- Page 23, énoncé de la proposition 1.17, ajouter: *respectivement converge faiblement-** si $q = +\infty$ dans les deux alinéas (i) et (ii).
- Page 24, ajouter :

Remarque 1.24 bis Il n'est pas inutile de dire l'origine du résultat de compacité contenu dans la Proposition 1.23. Un tel résultat provient essentiellement du Théorème d'Ascoli, qui stipule qu'une suite de fonctions f_n continues sur un compact K telle que $|f_n(x+h) - f_n(x)|$ est petit uniformément en n et en x dès que h est assez petit converge à extraction près. En combinant ce théorème avec le fait que $|f_n(x+h) - f_n(x)|$ est essentiellement contrôlé par ∇f_n (penser aux accroissements finis), on obtient la Proposition 1.23.

- Page 25, ligne -11, lire : *la changent en elle-même et il est donc exclus...*
- Page 26, ligne 6, lire : *et un peu du point de vue numérique.*
- Page 28, formule (1.56): il y a une parenthèse en trop dans l'intégrale, lire

$$\int_0^1 (\varphi'(x)^2 - 1)^2 dx.$$

Cette erreur se reproduit page 29, à la formule (1.57) et aux deux formules qui la suivent.

- Page 28, ligne 15, lire: *précisément de*
- Page 28, rajouter dans la note de bas de page 4 : *D'ailleurs, la question de la condition aux limites pour le problème variationnel est aussi une question délicate et ouverte pour le problème purement atomistique au niveau microscopique. Par exemple, imposer le déplacement du premier et du dernier atome d'une chaîne monodimensionnelle d'atomes n'a pas beaucoup de sens physique. Il faudrait trouver mieux.*
- Page 30, Exercice 1.29, rajouter à la fin de l'énoncé : *On rappelle qu'une fonction f est dite semi-continue inférieurement si, pour toute suite x_n convergeant vers x , on a $\liminf f(x_n) \geq f(x)$.*

- Page 31, ligne précédant la figure 1.11, lire : *Que s'est il donc passé ?*
- Page 31, dernière ligne, lire : *devraient être bornées inférieurement*
- Page 32, note de bas de page 5, rajouter: *Celà dit, ceci n'est pas toujours facile à réaliser. Notamment le réglage des paramètres pour obtenir une largeur de transition de phase compatible avec l'observation expérimentale est délicat.*
- Page 36, Exercice 1.36, lire: *normalisé de sorte que son minimum soit atteint en $r = 1$, c'est-à-dire $\frac{1}{r^{12}} - \frac{2}{r^6}$.*
- Page 37, lire *La version "actuelle" est un peu différente à la fois dans son esprit et dans sa réalisation. Elle est plus axée sur une notion de renormalisation, c'est-à-dire d'élimination de degrés de liberté au niveau discret (un peu dans la veine des Remarques 1.7 et 1.12⁻).*

Chapitre 2

- Page 43:

Remarque 2.5 bis. Une autre façon de comprendre ce coefficient homogénéisé est la suivante. Lorsque l'équation (2.1) modélise un phénomène de conduction électrique dans un conducteur monodimensionnel, le coefficient a désigne la conductivité électrique du matériau. Or, le lecteur sait depuis longtemps que si on place bout à bout des matériaux de conductivité différente, ce sont les *résistances* qui s'ajoutent, c'est-à-dire *les inverses des conductivités*. On retrouve donc bien la conductivité globale $\frac{1}{\langle \frac{1}{a} \rangle}$.
- Page 44, avant l'Exercice 2.6., rajouter:

Remarque 2.6⁻ En fait, dans ce cadre monodimensionnel, on pourrait procéder autrement pour prouver la Proposition 2.3. On pourrait déterminer u^ε en intégrant l'équation (2.1) explicitement à la main, et calculer la limite de cette expression quand $\varepsilon \rightarrow 0$, pour trouver u^* , et donc, en dérivant deux fois, l'équation homogénéisée (2.6). L'expression explicite de u^ε est fournie plus loin dans ce chapitre, formules (2.54)-(2.55). Ici, on a procédé *comme si* on ne pouvait pas intégrer complètement (2.1) à la main, afin de se rapprocher le plus possible de la généralité. Voir par exemple comment la stratégie de preuve de la Proposition 2.11 ressemble à celle employée pour la Proposition 2.3.
- Page 48, numéroter (2.17bis) la première formule de la page.
- Page 48, rajouter en note de bas de page, pour la Proposition 2.12: *Cette proposition est issue de la théorie de la H-convergence, due à François Murat et Luc Tartar dans les années 1970. Cette théorie généralise une théorie similaire, dite de la G-convergence et dûe à S. Spagnolo, qui ne traite que des cas d'opérateurs différentiels symétriques.*
- Page 49, rajouter:

Remarque 2.12 bis La preuve de la Proposition 2.12 repose essentiellement sur la technique dite de *compacité par compensation* et le résultat connu sous le nom de *div-curl Lemma*, dûs à Murat et Tartar. Ce lemme est le résultat suivant: *On suppose que les suites de vecteurs \mathbf{u}^ε et \mathbf{v}^ε convergent faiblement dans $(L^2(\Omega))^N$, respectivement vers \mathbf{u} et \mathbf{v} . On suppose de plus que la suite $\text{div } \mathbf{u}^\varepsilon$ est compacte dans $H^{-1}(\Omega)$ et que la suite $\text{curl } \mathbf{v}^\varepsilon$ est compacte dans $(H^{-1}(\Omega))^N$. Alors, la suite des produits scalaires $\mathbf{u}^\varepsilon \cdot \mathbf{v}^\varepsilon$ converge (au*

sens des distributions au moins) vers le produit scalaire $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$. Ce résultat est évidemment non trivial en ce qu'on ne peut en général rien dire sur le produit de deux suites qui convergent faiblement (cf. la Proposition 1.17, alinea (ii)). On ne peut dire quelque chose que si l'une des suites au moins converge fortement, et pour cela il faut contrôler la suite des dérivées. Or ici, on ne contrôle aucune des deux suites $\nabla \mathbf{u}^\varepsilon$, $\nabla \mathbf{v}^\varepsilon$. Ce sont deux combinaisons très particulières de dérivées partielles que l'on contrôle, respectivement la divergence et le rotationnel (le "curl" en anglais). Pourtant cela suffit pour affirmer la convergence du produit scalaire vers la bonne limite. Plus surprenant, on peut en fait montrer que, génériquement, le produit scalaire est en fait, dans ces conditions, la *seule* fonction non linéaire de \mathbf{u}^ε , \mathbf{v}^ε qui passe correctement à la limite. On renvoie pour ceci à la bibliographie. Dans la démonstration de la Proposition 2.12, l'utilisation du div-curl Lemma permet de pallier l'absence, en toute généralité, de l'astuce qui nous a permis en (2.17bis) de montrer que la suite convergeait. On parvient ainsi à démontrer une convergence sur un *produit* du type de celui de (2.17bis).

- Page 49, remplacer l'expression "convergence à deux échelles" par "développement à deux échelles". Faire de même pages 52 (titre de la section), 53, 62, 68, 69 (trois fois), 87.

- Page 55:

Remarque 2.19 bis. Le problème (2.36) s'appelle aussi *le problème du correcteur* (nous verrons le pourquoi de cette appellation à la section 2.3.4). La coutûme est d'écrire ce problème

$$-\operatorname{div}(A(y)(p + \nabla w)) = 0,$$

pour p un vecteur fixé dans \mathbb{R}^N . La question de savoir si le problème du correcteur est bien posé, c'est-à-dire s'il admet une solution, unique, dans un espace de fonctions bien choisies, est un problème central de la théorie de l'homogénéisation, qui dépasse largement le cadre périodique présenté ici.

- Page 61, formule non numérotée suivant (2.46) : il manque une grande parenthèse ouvrante après le inf.

- Page 61, formule (2.27) la borne inférieure sur v porte sur les v tels que $\langle \nabla v \rangle = \nabla u(x)$ et aussi tels que ∇v est périodique.

- Page 61 :

Remarque 2.25. bis Toujours à propos de généralisation du cadre de l'homogénéisation périodique traitée ici, signalons que la question de connaître la classe de fonctions la plus générale permettant de développer une théorie de l'homogénéisation est encore ouverte. Un point identifié cependant est qu'une propriété qui semble cruciale est la propriété d'une fonction d'être *sous-linéaire* à l'infini, c'est-à-dire $\lim_{|x| \rightarrow +\infty} \frac{u(x)}{1 + |x|} = 0$.

On vérifiera facilement que ceci est par exemple le cas pour des fonctions périodiques, ou des fonctions aléatoires stationnaires. Cette condition est liée au caractère bien posé pour le problème du correcteur (existence d'une unique solution).

- Page 69, dans la Remarque 2.34, lire : *De même, (2.66) généralise (2.50) et aussi (2.39)-(2.40).* au lieu de (2.39)-(2.39).

- Page 69, deux lignes après la Remarque 2.34, lire : *nous obtiendrons, pour toute fonction f ...*

- Page 70, au milieu, lire : *le rôle des fonctions $\varepsilon w_i(\frac{\cdot}{\varepsilon})$* au lieu de $w_i(\frac{\cdot}{\varepsilon})$.

- Page 78, formule (2.77): il y a un exposant 2 qui doit être ignoré en toute fin de formule.

- Page 78, ligne -6, lire : $\frac{\partial u_2^0}{\partial x_2}(x_1, 0) = -\frac{\partial u_1^0}{\partial x_1}(x_1, 0) = 0$.
- Page 87, lire
le développement à deux échelles peuvent être lues dans la référence historique [12] , dans le premier chapitre...
- Page 87, lire Le développement à deux échelles peut être démontré de plusieurs manières. Une possibilité est d'utiliser des techniques de compacité (dans l'esprit de la Proposition 2.12 et de la Remarque 2.12bis), une autre est la technique de la convergence à deux échelles, initialement introduite dans [61] et complétée dans l'article G. Allaire [4]

Chapitre 3

- Page 94, légende de la Figure 3.1, ajouter : *On schématise en haut à droite les transitions possibles des électrons entre niveaux, lesquelles sont traitées explicitement dans le modèle non adiabatique.*
- Page 96, ligne 4, lire : *les diagrammes de phase qui indiquent....*
- Page 96, légende de la Figure 3.2, ajouter: *On schématise en haut à droite l'état électronique fondamental, lequel est recalculé à chaque pas de temps dans le modèle adiabatique.*
- Page 97, formule (3.17), première ligne, lire $\psi_e(t)$ au lieu de $\Psi_e(t)$.
- Page 97, formule (3.17), deuxième ligne, rajouter en note de bas de page *La notation F désigne la différentielle de la fonctionnelle d'énergie E , plus la différentielle des contraintes.*
- Page 100, formule (3.26) : le dernier terme du membre de gauche doit être

$$-\sum_{i=1}^N \left(\phi_i^* \bullet \star \frac{1}{|x|} \right) \phi_i.$$

- Page 101, première formule centrée, lire

$$\int_{\mathbf{R}^3} \phi_i \cdot \phi_j^* = \delta_{ij}$$

- Page 101, formule (3.28), le dernier terme doit être

$$-\sum_{i=1}^N \left(\phi_j^* \bullet \star \frac{1}{|x|} \right) \phi_j.$$

- Page 102, formule (3.31) et la formule deux lignes après, lire partout \mathcal{D}_Φ au lieu de \mathcal{D} . De même à la première formule de la page 103.
- Page 104, ligne 14, rajouter: *La notation : utilisée ci-dessus et plus loin désigne le produit contracté de tenseurs.*
- Page 104, ligne avant la formule (3.37), lire : *i.e.* au lieu de *ie*.

- Page 106, ligne 15, lire : *du fait que rien n' assure...*
- Page 110, ligne 4, lire : $\mathcal{V}_\Psi(t) = \dots$ au lieu de $\mathcal{V}(t)_\Psi(t) = \dots$
- Page 110, formules après (3.47), lire Ψ_t au lieu de $\Psi(t)$, deux fois.
- Page 110, dernière formule centrée de la page, il y a une barre verticale | en trop après $\frac{d}{dt}$.
- Page 117, Remarque 3.18, lire: *plus quelques tirages au sort (d'où la dénomination Monte-Carlo cinétique).*
- Page 117, ajouter:

Remarque 3.18 bis. Le modèle (utilisant la Loi d'Arrhénius) que nous avons employé ci-dessus pour obtenir une estimation du temps de passage à partir de la hauteur énergétique de la barrière est issu de la *Théorie de l'Etat de Transition* (TST pour Transition State Theory, en anglais). En fait, il s'agit plus précisément de l'*approximation harmonique* au sein de cette théorie. Si on ne souhaite pas faire ces deux approximations successives, on peut développer des méthodes qui suivent *explicitement* les trajectoires passant les cols. La remarque 3.18 est alors encore plus vraie !
- Page 127, ligne 10, ajouter : méthodes d'accélération de la dynamique moléculaire est présenté dans A. Voter [83], *et aussi, du même auteur, Introduction to the Kinetic Monte Carlo Method, preprint.*

Chapitre 4

- Page 129 et suivantes: la vitesse \mathbf{u} et la force volumique \mathbf{f} doivent être en caractères gras, partout où elles ne le sont pas.
- Page 130, avant la formule (4.6), lire *d est le tenseur des taux de déformation linéarisé*
- Page 131, après la formule (4.11), lire simplement *où on a noté.*
- Page 133, ligne 11, lire : *en fonction de la dynamique des microstructures du fluide.*
- Page 134, ligne -9 : ici et plus loin le point générique x de l'espace physique doit être noté \mathbf{x} en caractères gras.
- Page 135, ligne 4, ajouter : *qu'on regarde dans ce chapitre, vu la disproportion des échelles de temps.*
- Page 137, ligne -1, lire : *La probabilité qu'il ait précisément la valeur \mathbf{r} à $d\mathbf{r}$ près est $P(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ avec:*
- Page 139 : partout, remplacer la notation de la Constante de Boltzmann k par k_B .
- Page 139, deux lignes après la formule (4.23), rajouter : *reliées par un ressort hookéen de raideur κ .*
- Page 140, dernier paragraphe : partout, \mathbf{n} et non n désigne le vecteur normal unitaire.
- Page 140, dernière ligne, lire: *formule de Kramers*.
- Page 141, ligne 5, ignorer la parenthèse: *(avec un léger abus de notation...).*
- Page 143, formule (4.29): pour la consistance avec (4.26), permuter les deux lignes.
- Page 143, rajouter:

Remarque 4.5bis : Nous avons présenté ci-dessus la modélisation multiéchelle des solutions de polymères *flexibles*. Un autre domaine qui se prête au même type de modélisation, similaire dans le principe mais différent dans le détail, est le domaine des *cristaux liquides*. Brièvement dit, il s'agit de simuler le mouvement de segments rigides plutôt que de chaînes articulées.
- Page 143, section 4.3. : dans toute cette section, pour la consistance avec les sections précédentes, lire partout (t, x, y) à la place de (x, y, t) . De même, lire (t, y) , ...

- Page 145, première ligne de (4.33): lire p au lieu de p^* .
- Page 145, après (4.33), ajouter : où $\sigma^2 = 2k_B T \zeta$.
- Page 145, au milieu, lire : μ est la viscosité dynamique du solvant
- Page 146, Exercice 4.8, lire: Montrer alors que, sous une bonne hypothèse sur la donnée initiale, l'équation (4.36)...
- Page 146, ligne -2 : ignorer la parenthèse (cf. Annexe A pour des rappels de base).
- Page 147, et suivantes: pour la consistance des notations, lire partout $\frac{\partial u}{\partial y}$ au lieu de $\partial_y u$ et les formules analogues.
- Page 149, formule (4.46) dernière ligne, lire :

$$\left(\frac{\partial}{\partial y} \left(\sum_{j=1}^{N-1} (u^h)_j^{n+1} \varphi_j(y) + \varphi_N(y) \right), \partial_y \varphi_i \right)_{L^2}$$

- Page 152, Exercice 4.13, lire au début de l'énoncé : *On fixe $a > 0$.* De même pour l'énoncé de l'Exercice 4.14 page suivante.
- Page 154, ligne 3, lire : *et se reporter directement à la page 159.* Comme d'habitude dans ce cours, on insiste sur le fait que ces rappels ne se substituent pas à...
- Page 154, ligne 12, lire : *est une fonction de \mathcal{A} dans $\mathbb{R}_+ \cup \{+\infty\}$* au lieu de *de Ω dans $\mathbb{R}_+ \cup \{+\infty\}$.*
- Page 154, première formule centrée non numérotée: l'intégrale porte sur la droite réelle \mathbb{R} .
- Page 156, six lignes avant la formule (4.61), lire : *appelée dispersion, ou diffusion.*
- Page 156, deux lignes avant la formule (4.61), lire : *étant uniformes.*
- Page 158, ligne 6, lire : *(telles que \tilde{Y}_j est \mathcal{F}_{s_j} -mesurable et $\mathbb{E}(|\tilde{Y}_j|) < +\infty$),*
- Page 160, ligne 4, lire: *On admettra (ce qui se montre simplement par un raisonnement utilisant le Théorème de convergence dominée) que ceci entraîne...*
- Page 161, au milieu, lire : *ou un champ de contraintes.*
- Page 161, dans la formule avant l'Exercice 4.21, lire plutôt, pour la consistance des notations:

$$\mathbf{P} \left(\frac{1}{J} \sum_{j=1}^J X_j, \dots \right)$$

- Page 161, Exercice 4.21, dernière ligne, lire :

$$\mathbb{E} \left(\left(\frac{1}{J} \sum_{i=1}^J X_i - \mathbb{E}(X) \right)^2 \right) = \frac{\sigma^2}{J}.$$

- Page 163, alinea 2, lire : *en chaque intervalle $1 \leq i \leq N$ de longueur Δy .*
- Page 163, alinea 2.1, lire : *réalisations des processus browniens*
- Page 163, alinea 2.3, lire : *moyenne empirique (4.74) (ou (4.77) si on utilise une méthode de réduction de variance).*

- Page 164, fin de la Remarque 4.24, lire : *il faudra, pour obtenir la même précision et en faisant abstraction des questions de variance du résultat, ...*
- Page 166, formule (4.81) et dans la ligne suivante : remplacer $\mathcal{N}(0, 1)$ par G .
- Page 167, dans la formule (4.84) et dans la formule deux lignes après (4.85), remplacer dt par Δt .
- Page 168, au milieu, lire : *qui est une loi de dérivation des fonctions composées...*
- Page 168, dans les formules avant (4.88), lire X_{t_n} au lieu de X_n . De plus la dernière ligne de la formule avant (4.88) doit se lire

$$= \sigma(X_{t_n})(B_{t_{n+1}} - B_{t_n}) + \frac{1}{2} \sigma(X_{t_n})\sigma'(X_{t_n})((B_{t_{n+1}} - B_{t_n})^2 - \Delta t).$$

- Page 169, ligne 2, lire :
La convergence forte mesure l'écart entre simulation numérique et solution exacte pour chaque trajectoire (et ceci est fait en termes d'espérance, c'est-à-dire en moyenne). Elle a ...
 puis, remplacer la ligne avant la Définition 4.26 par
On peut être moins exigeant que la convergence forte, et demander de contrôler l'écart sur les moyennes, plutôt que sur chaque trajectoire. On introduit donc la.
- Page 170, ligne 2, lire : *nous allons introduire au Chapitre 5, Définition 5.12, au lieu de nous avons introduit.*
- Page 170, formule (4.93), lire :

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \mathbb{E}(|X_t|^2) = 0 \quad \text{si et seulement si} \quad \operatorname{Re}(\lambda) + \frac{1}{2} |\mu|^2 < 0.$$

De même pour (4.95) lire

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E}(|X_n|^2) = 0 \quad \text{si et seulement si} \quad |1 + \Delta t \lambda|^2 + \Delta t |\mu|^2 < 1.$$

- Page 171, ligne 7, rajouter à la fin du paragraphe. *Aussi, les centres d'intérêt dans ce domaine sont un peu différents de ceux du domaine déterministe.*

Chapitre 6

- Page 202, lire: *l'immense champ de l'homogénéisation stochastique défriché par G. Papanicolaou et S.R.S. Varadhan dans G. Papanicolaou, S.R.S. Varadhan, Boundary value problems with rapidly oscillating random coefficients. Random fields. Rigorous results in statistical mechanics and quantum field theory, Esztergom 1979, Colloq. Math. Soc. Janos Bolyai 27 (1981) 835-873.*
- Page 203, ligne 6, ajouter après *milieu mal connu*: Nous aurions aussi pu parler d'homogénéisation d'équations *non linéaires* pour lesquelles, au moins quand l'opérateur est elliptique monotone (ou bien dérive d'une énergie), la majeure partie de l'analyse faite dans le cas linéaire s'applique. Une particularité sur le plan numérique est alors qu'on ne peut pas *pré-calculer* les coefficients homogénéisés.
- Page 203, ligne -5, rajouter après [34] : Nous aurions pu aussi mentionner la modélisation multiéchelle naissante pour les *matériaux granulaires*.

Bibliographie

Ref. 20, lire: E. Cancès, C. Le Bris, Y. Maday, **Méthodes mathématiques en Chimie Quantique: une introduction**, *Mathématiques et Applications*, Vol. 53, Springer, 2006.

Ref. 52, lire: C. Le Bris (Editeur), **Handbook of numerical analysis, Special volume: computational chemistry**, North-Holland, 2003.

Ref. 60, lire: F. Murat et L. Tartar, *H-convergence*, dans le livre **Topics in the mathematical modelling of composite materials**, Cherkaev, Andrej (ed.) et al., Birkhuser. Prog. Nonlinear Differ. Equ. Appl. 31, 21-43, 1997.

Ref. 61, lire: G. Nguetseng