



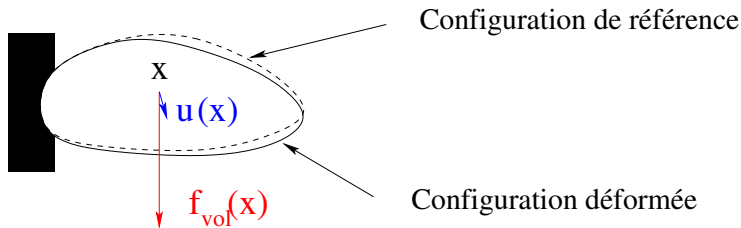
École des Ponts  
ParisTech

# Des modèles atomistiques à la mécanique du continuum

Frédéric Legoll (ENPC)

Cours M2 – Problèmes multiéchelles – 1 décembre 2020

# Modèle du mécanisme du continuum



L'inconnue est le déplacement

$$u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$$

où  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  est la **configuration de référence** (volume occupé par le matériau en l'absence de toute sollicitation).

Par définition,  $\varphi(x) = x + u(x)$  est la position courante (dans la **configuration déformée**) d'un point initialement en  $x$ .

On considère le problème

$$\inf \{E(u), \quad u \text{ assez régulier pour que } E(u) \text{ ait un sens}, \quad u \in V\}$$

où  $E$  est l'énergie du système et  $V$  l'espace dans lequel on minimise:

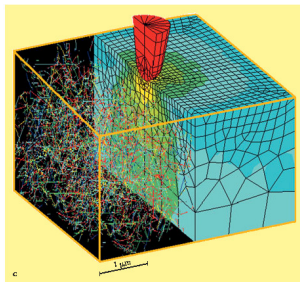
- $V$  prend en compte les conditions aux limites de Dirichlet: par exemple,  $V \subset \{u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d, \quad u = u_0 \text{ sur } \partial\Omega\}$
- l'énergie  $E$  est la somme de l'énergie élastique stockée dans le matériau et de l'énergie potentielle due aux sollicitations:

$$E(u) = \int_{\Omega} W(\nabla u) - b(u)$$

avec par exemple  $b(u) = \int_{\Omega} f \cdot u$ . La fonction  $W : \mathbb{R}^{d \times d} \rightarrow \mathbb{R}$  est la densité d'énergie élastique.

# Limitations

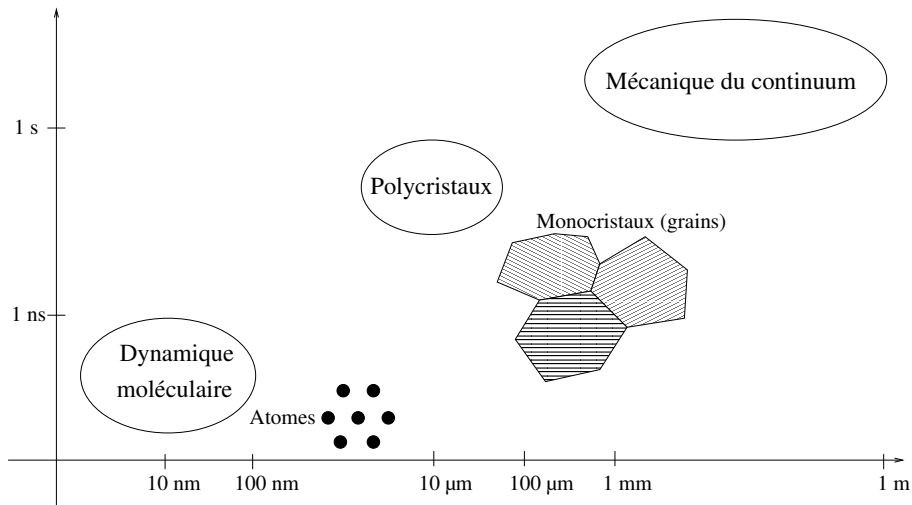
- La description en terme de continuum est mal adaptée pour certains phénomènes: fracture, nanoindentation, ...



- postuler un bon  $W$  n'est pas facile, surtout si on souhaite travailler dans des conditions (de température, de pression, ...) non usuelles. L'intuition a ses limites ...

Comment dériver  $W$  sur la base de modèles plus microscopiques?

# Différentes échelles pour modéliser les matériaux



# Modélisation à l'échelle atomistique

- Le système est composé de  $N$  atomes
- Les degrés de liberté sont les positions  $\varphi_i \in \mathbb{R}^d$  de ces  $N$  atomes ( $1 \leq i \leq N$ )
- On suppose que l'énergie est une somme d'**interaction de paires**:

$$E_\mu = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, j \neq i}^N V(\varphi_j, \varphi_i)$$

Pour des raisons d'invariance par rotation / translation,

$$V(\varphi_j, \varphi_i) = V(|\varphi_j - \varphi_i|)$$

- Pour des raisons de simplicité, on néglige ici les interactions à **trois**

**corps** du type  $\sum_{i=1}^N \sum_{j=1, j \neq i}^N \sum_{k=1, k \neq i, j}^N V(\varphi_k, \varphi_j, \varphi_i)$

- Le cas d'**interaction globale** est beaucoup plus compliqué ...

## Exemple typique de modèle atomistique

$$E_\mu = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, j \neq i}^N V(|\varphi_j - \varphi_i|)$$

avec  $V(r) = V_0 \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$  qui est minimal pour  $r = r_0$ , et  $\inf V = V(r_0) = -V_0 < 0$ .

# Du discret au continu



- On se donne une **configuration de référence**  $\Omega$ , comportant  $N$  atomes

- On se donne une **configuration de référence**  $\Omega$ , comportant  $N$  atomes
- On se donne une **déformation macroscopique**  $\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$  qu'on suppose régulière (pour avoir une chance qu'un modèle de continuum soit pertinent): pas de fracture, ...

- On se donne une **configuration de référence**  $\Omega$ , comportant  $N$  atomes
- On se donne une **déformation macroscopique**  $\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$  qu'on suppose régulière (pour avoir une chance qu'un modèle de continuum soit pertinent): pas de fracture, ...
- On va associer à cette déformation macroscopique des positions  $\varphi_i$  à l'échelle microscopique
- On va en déduire une énergie microscopique  $E_\mu^N(\varphi)$

- On se donne une **configuration de référence**  $\Omega$ , comportant  $N$  atomes
- On se donne une **déformation macroscopique**  $\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$  qu'on suppose régulière (pour avoir une chance qu'un modèle de continuum soit pertinent): pas de fracture, ...
- On va associer à cette déformation macroscopique des positions  $\varphi_i$  à l'échelle microscopique
- On va en déduire une énergie microscopique  $E_\mu^N(\varphi)$
- On passe à la limite  $N \rightarrow \infty$

$$\varphi \rightarrow \{\varphi_i\} \rightarrow E_\mu^N \rightarrow E_M := \lim_{N \rightarrow \infty} E_\mu^N$$

# Scaling - 1

On considère  $N$  atomes dans  $\Omega$ . Pour simplifier, on commence par

- un cas 1D:  $\Omega = (0, 1)$
- des interactions (de paire) à **plus proches voisins**
- les atomes occupent leur position d'équilibre  $x_i$

$$E_\mu = \sum_{i=1}^{N-1} V(x_{i+1} - x_i)$$

# Scaling - 1

On considère  $N$  atomes dans  $\Omega$ . Pour simplifier, on commence par

- un cas 1D:  $\Omega = (0, 1)$
- des interactions (de paire) à **plus proches voisins**
- les atomes occupent leur position d'équilibre  $x_i$

$$E_\mu = \sum_{i=1}^{N-1} V(x_{i+1} - x_i)$$

On suppose que  $V$  admet un **unique minimiseur, qui est la longueur d'équilibre  $r_0$** . A l'équilibre (i.e. au minimum d'énergie), on a  $x_{i+1} - x_i = r_0$ , si bien que le système occupe le volume  $N r_0 = |\Omega| = 1$ .

# Scaling - 1

On considère  $N$  atomes dans  $\Omega$ . Pour simplifier, on commence par

- un cas 1D:  $\Omega = (0, 1)$
- des interactions (de paire) à **plus proches voisins**
- les atomes occupent leur position d'équilibre  $x_i$

$$E_\mu = \sum_{i=1}^{N-1} V(x_{i+1} - x_i)$$

On suppose que  $V$  admet un **unique minimiseur, qui est la longueur d'équilibre  $r_0$** . A l'équilibre (i.e. au minimum d'énergie), on a  $x_{i+1} - x_i = r_0$ , si bien que le système occupe le volume  $N r_0 = |\Omega| = 1$ .

Puisque  $N \gg 1$ , on souhaite **plonger ce modèle** dans une famille de modèles correspondant à des  $N$  de plus en plus grands. Pour que  $\Omega$  reste le même, il faut que  $r_0$  et  $N$  soient liés ...

## Scaling - 2

On introduit le paramètre  $h$  et

$$E_\mu = \sum_{i=1}^{N-1} V \left( \frac{x_{i+1} - x_i}{h} \right)$$

A l'équilibre,  $\frac{x_{i+1} - x_i}{h} = r_0$ , donc  $x_{i+1} - x_i = h r_0$ , si bien que le système occupe le volume  $N h r_0$ . On va choisir  $N$  et  $h$  tels que

$$N h = \text{constante}$$



## Scaling - 2

On introduit le paramètre  $h$  et

$$E_\mu = \sum_{i=1}^{N-1} V\left(\frac{x_{i+1} - x_i}{h}\right)$$

A l'équilibre,  $\frac{x_{i+1} - x_i}{h} = r_0$ , donc  $x_{i+1} - x_i = hr_0$ , si bien que le système occupe le volume  $Nhr_0$ . On va choisir  $N$  et  $h$  tels que

$$Nh = \text{constante}$$

Supposons tous les atomes à leur position d'équilibre:  $\frac{x_{i+1} - x_i}{h} = r_0$ .

Alors l'énergie est

$$E_\mu = \sum_{i=1}^{N-1} V\left(\frac{x_{i+1} - x_i}{h}\right) = NV(r_0)$$

qui diverge quand  $N \rightarrow \infty$ . Ce n'est pas étonnant: l'énergie est une quantité extensive! Il faut travailler avec l'énergie par atome ...

Energie (par atome) pour des particules en  $\{x_i\}$  en **dimension  $d$** :

$$E_\mu = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^{N-1} V\left(\frac{x_j - x_i}{h}\right)$$

avec  $N h^d = \text{constante}$ .

# Déformation micro, déformation macro

On se donne une déformation macroscopique

$$\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$$

Dans un monde continu, un point initialement en  $x$  est déplacé en  $\varphi(x)$ .

Dans le monde atomistique, une particule initialement en  $x_i$  est déplacé en

...

# Déformation micro, déformation macro

On se donne une déformation macroscopique

$$\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$$

Dans un monde continu, un point initialement en  $x$  est déplacé en  $\varphi(x)$ .

Dans le monde atomistique, une particule initialement en  $x_i$  est déplacé en  
...  $\varphi(x_i)$

- on suppose donc que les atomes (à l'échelle **micro**) suivent scrupuleusement la **déformation macro**
- on aurait pu imaginer autre chose ...

# Objectif

- on suppose que, dans la configuration de référence, les atomes sont sur le réseau  $h\mathbb{Z}^d$
- on se donne  $\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$  régulier
- on considère

$$E_\mu^h = h^d \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^{N-1} V \left( \frac{\varphi(x_j) - \varphi(x_i)}{h} \right)$$

où  $x_i$  parcourt  $\Omega \cap h\mathbb{Z}^d$  lorsque  $i$  parcourt  $[1, N]$ :

$$E_\mu^h = \frac{h^d}{2} \sum_{x_i, x_j \in \Omega \cap h\mathbb{Z}^d, x_i \neq x_j} V \left( \frac{\varphi(x_j) - \varphi(x_i)}{h} \right)$$

- $\lim_{h \rightarrow 0} E_\mu^h$ ?

# Résultat général

- On suppose  $V \in C^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$  avec  $|V(x)| \leq \frac{C}{|x|^p}$  et  $p > d$ . Ceci assure la sommabilité de  $E_\mu^h$  quand  $\varphi = \text{Id}$ .
- On suppose  $\nabla V$  borné sur  $\mathbb{R}^d$
- On suppose que  $\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$  est régulière et qu'il existe  $c_1$  et  $c_2$  tels que
  - $|\varphi(x) - \varphi(y)| \leq c_2|x - y|$  (gradient borné)
  - $c_1|x - y| \leq |\varphi(x) - \varphi(y)|$  (injectivité)
- Soit

$$E_\mu^h = \frac{h^d}{2} \sum_{x_i, x_j \in \Omega \cap h\mathbb{Z}^d, x_i \neq x_j} V\left(\frac{\varphi(x_j) - \varphi(x_i)}{h}\right)$$

Alors

$$\lim_{h \rightarrow 0} E_\mu^h = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} W(\nabla \varphi(x)) dx$$

avec

$$W(M) = \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathbb{Z}^d, k \neq 0} V(Mk)$$

- pour  $\varphi$  assez régulière, on est passé d'une énergie atomistique (très chère à calculer car  $N \gg 1$ ) à un modèle moins cher
- il se trouve que le modèle macro est un modèle de mécanique du continuum
- la densité d'énergie élastique  $W$  est donnée comme une fonction du potentiel interatomique  $V$

# Preuve dans un cas simple

On se place en dimension  $d = 1$ , avec  $\Omega = (0, 1)$ , et

$$\text{Support de } V = [-A, A]$$

Dans la configuration de référence, les atomes sont en  $ih$ ,  $0 \leq i \leq N$ , avec  $Nh = 1$ .

$$E_{\mu}^h = \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{j=0, j \neq i}^N V \left( \frac{\varphi(jh) - \varphi(ih)}{h} \right)$$

On a

$$c_1|x - y| \leq |\varphi(x) - \varphi(y)| \leq c_2|x - y|$$



Si  $|j - i| > A/c_1$ , alors

$$\left| \frac{\varphi(jh) - \varphi(ih)}{h} \right| \geq c_1 \left| \frac{jh - ih}{h} \right| \geq A$$

donc  $V \left( \frac{\varphi(jh) - \varphi(ih)}{h} \right) = 0$ .

On a donc

$$\begin{aligned} E_{\mu}^h &= \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{j=0, j \neq i}^N V \left( \frac{\varphi(jh) - \varphi(ih)}{h} \right) \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{j=0, j \neq i, |j-i| \leq A/c_1}^N V \left( \frac{\varphi(jh) - \varphi(ih)}{h} \right) \end{aligned}$$

On a donc

$$\begin{aligned} E_{\mu}^h &= \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{j=0, j \neq i}^N V \left( \frac{\varphi(jh) - \varphi(ih)}{h} \right) \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{j=0, j \neq i, |j-i| \leq A/c_1} V \left( \frac{\varphi(jh) - \varphi(ih)}{h} \right) \end{aligned}$$

Développement de Taylor pour  $|j - i| \leq A/c_1$ :

$$|\varphi(jh) - \varphi(ih) - \varphi'(ih)(jh - ih)| \leq \frac{1}{2} \|\varphi''\|_{L^{\infty}(0,1)} (jh - ih)^2$$

donc

$$\left| \frac{\varphi(jh) - \varphi(ih)}{h} - \varphi'(ih)(j - i) \right| \leq \frac{1}{2} \|\varphi''\|_{L^{\infty}(0,1)} h \frac{A^2}{c_1^2} \leq C h$$

$$\left| \frac{\varphi(jh) - \varphi(ih)}{h} - \varphi'(ih)(j - i) \right| \leq Ch$$

Comme  $V$  est Lipschitz,

$$\left| V \left( \frac{\varphi(jh) - \varphi(ih)}{h} \right) - V(\varphi'(ih)(j - i)) \right| \leq Ch$$

On somme sur  $i$  et  $j$ :

- pour chaque  $i$ , il y a un nb fini de  $j$
- le nombre d'indices  $i$  est  $O(N)$ , mais on redivise par  $N$

$$\left| E_{\mu}^h - \underbrace{\frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{j=0, j \neq i, |j-i| \leq A/c_1}^N V(\varphi'(ih)(j - i))}_{S^N} \right| \leq Ch$$

On change de variable  $k = j - i$ :

$$\begin{aligned}
 S^N &= \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{j=0, j \neq i, |j-i| \leq A/c_1}^N V(\varphi'(ih)(j-i)) \\
 &= \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{k=-i, k \neq 0, |k| \leq A/c_1}^{N-i} V(\varphi'(ih)k)
 \end{aligned}$$

On change de variable  $k = j - i$ :

$$\begin{aligned}
 S^N &= \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{j=0, j \neq i, |j-i| \leq A/c_1}^N V(\varphi'(ih)(j-i)) \\
 &= \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{k=-i, k \neq 0, |k| \leq A/c_1}^{N-i} V(\varphi'(ih)k)
 \end{aligned}$$

donc

$$\begin{aligned}
 S^N &= \underbrace{\frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{k \in \mathbb{Z}, k \neq 0, |k| \leq A/c_1} V(\varphi'(ih)k)}_{S_1^N} \\
 &\quad + \underbrace{\frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{k \in \mathbb{Z} \setminus [-i, N-i], k \neq 0, |k| \leq A/c_1} V(\varphi'(ih)k)}_{S_2^N}
 \end{aligned}$$

On étudie le premier terme:

$$\begin{aligned} S_1^N &= \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{k \in \mathbb{Z}, k \neq 0, |k| \leq A/c_1} V(\varphi'(ih)k) \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{k \in \mathbb{Z}, k \neq 0} V(\varphi'(ih)k) \end{aligned}$$

car, puisque  $|\varphi'(x)| > c_1$ , on a

$$V(\varphi'(ih)k) = 0 \quad \text{dès que } |k| > A/c_1$$

$$S_1^N = \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{k \in \mathbb{Z}, k \neq 0} V(\varphi'(ih)k)$$

On a introduit  $W(M) = \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathbb{Z}, k \neq 0} V(Mk)$ , donc

$$S_1^N = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N W(\varphi'(ih)) = h \sum_{i=0}^N W(\varphi'(ih))$$



$$S_1^N = \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{k \in \mathbb{Z}, k \neq 0} V(\varphi'(ih)k)$$

On a introduit  $W(M) = \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathbb{Z}, k \neq 0} V(Mk)$ , donc

$$S_1^N = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N W(\varphi'(ih)) = h \sum_{i=0}^N W(\varphi'(ih))$$

et donc (somme de Riemann) on obtient

$$\lim_{h \rightarrow 0} S_1^N = \int_0^1 W(\varphi'(x)) dx$$

On étudie le second terme:

$$S_2^N = \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{k \in \mathbb{Z} \setminus [-i, N-i], k \neq 0, |k| \leq A/c_1} V(\varphi'(ih)k)$$

Graphe des valeurs possibles de  $k$ :

$$S_2^N = \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{k \in \mathbb{Z} \setminus [-i, N-i], k \neq 0, |k| \leq A/c_1} V(\varphi'(ih)k)$$

- Si  $i \geq A/c_1$ , le premier ensemble est vide. Donc le premier ensemble ne contribue que pour un **nb fini (i.e. indépendant de  $N$ )** d'indices  $i$  (ceux tels que  $0 \leq i \leq A/c_1$ ), auxquels est systématiquement associé un **nb fini d'indices  $k$** : donc un **nb fini de termes** dans la somme

$$S_2^N = \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{k \in \mathbb{Z} \setminus [-i, N-i], k \neq 0, |k| \leq A/c_1} V(\varphi'(ih)k)$$

- Si  $i \geq A/c_1$ , le premier ensemble est vide. Donc le premier ensemble ne contribue que pour un **nb fini (i.e. indépendant de  $N$ )** d'indices  $i$  (ceux tels que  $0 \leq i \leq A/c_1$ ), auxquels est systématiquement associé un **nb fini d'indices  $k$** : donc un **nb fini de termes** dans la somme
- Si  $N - i \geq A/c_1$ , le deuxième ensemble est vide. Donc les indices  $i$  qui contribuent vérifient  $N - i \leq A/c_1$ , donc  $N - A/c_1 \leq i \leq N$ : encore un **nb fini de termes** dans la somme

$$S_2^N = \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{k \in \mathbb{Z} \setminus [-i, N-i], k \neq 0, |k| \leq A/c_1} V(\varphi'(ih)k)$$

- Si  $i \geq A/c_1$ , le premier ensemble est vide. Donc le premier ensemble ne contribue que pour un **nb fini (i.e. indépendant de  $N$ )** d'indices  $i$  (ceux tels que  $0 \leq i \leq A/c_1$ ), auxquels est systématiquement associé un **nb fini d'indices  $k$** : donc un **nb fini de termes** dans la somme
- Si  $N - i \geq A/c_1$ , le deuxième ensemble est vide. Donc les indices  $i$  qui contribuent vérifient  $N - i \leq A/c_1$ , donc  $N - A/c_1 \leq i \leq N$ : encore un **nb fini de termes** dans la somme
- les termes sont tous bornés car

$$|\varphi'(ih)k| \leq c_2 |k| \leq c_2 A/c_1$$

$$S_2^N = \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^N \sum_{k \in \mathbb{Z} \setminus [-i, N-i], k \neq 0, |k| \leq A/c_1} V(\varphi'(ih)k)$$

- Si  $i \geq A/c_1$ , le premier ensemble est vide. Donc le premier ensemble ne contribue que pour un **nb fini (i.e. indépendant de  $N$ )** d'indices  $i$  (ceux tels que  $0 \leq i \leq A/c_1$ ), auxquels est systématiquement associé un **nb fini d'indices  $k$** : donc un **nb fini de termes** dans la somme
- Si  $N - i \geq A/c_1$ , le deuxième ensemble est vide. Donc les indices  $i$  qui contribuent vérifient  $N - i \leq A/c_1$ , donc  $N - A/c_1 \leq i \leq N$ : encore un **nb fini de termes** dans la somme
- les termes sont tous bornés car

$$|\varphi'(ih)k| \leq c_2 |k| \leq c_2 A/c_1$$

Donc  $|S_2^N| \leq C/N \rightarrow 0$  quand  $h \rightarrow 0$ .

On a utilisé deux outils:

- le développement de Taylor
- les sommes de Riemann

Pas d'obstacle à étendre la preuve en dimension  $d \geq 1$ . Pas d'obstacle non plus à relaxer l'hypothèse “ $V$  à support compact”, pourvu que  $V$  décroisse assez vite à l'infini.

Cette étude:

X. Blanc, C. Le Bris et P.-L. Lions, Convergence de modèles moléculaires vers des modèles de la mécanique des milieux continus, C. R. Acad. Sci. Paris 2001

X. Blanc, C. Le Bris et P.-L. Lions, From molecular models to continuum mechanics, Archive for Rational Mechanics and Analysis 2002



Cette étude:

X. Blanc, C. Le Bris et P.-L. Lions, Convergence de modèles moléculaires vers des modèles de la mécanique des milieux continus, C. R. Acad. Sci. Paris 2001

X. Blanc, C. Le Bris et P.-L. Lions, From molecular models to continuum mechanics, Archive for Rational Mechanics and Analysis 2002

Extensions possibles:

- couplage micro/macro (maintenant que le macro correspondant à un certain micro a été identifié, comment les utiliser simultanément)
- réseaux aléatoires plutôt que sur  $\mathbb{Z}^d$
- passage micro vers macro pour des modèles statistiques (on travaille à température fixée, l'objet de référence n'est plus une énergie mais la mesure de Gibbs)



