

**Contributions à l'étude mathématique et numérique  
de quelques modèles en simulation multi-échelle des matériaux**

**Résumé de l'Habilitation à Diriger des Recherches  
soutenue par Frédéric Legoll le 17 octobre 2011**

La première partie du mémoire résume des travaux en simulation moléculaire. On s'intéresse à des systèmes de particules ponctuelles (représentant typiquement les noyaux des atomes d'un système moléculaire), qui interagissent via une énergie potentielle. Les degrés de liberté du système sont la position et l'impulsion de chaque particule. La complexité du problème vient du nombre de degrés de liberté en jeu : certains systèmes d'intérêt pratique comportent plusieurs centaines de milliers d'atomes, et les plus grands systèmes aujourd'hui simulés sont constitués de plusieurs dizaines de milliards d'atomes.

Une première question est l'échantillonnage de la mesure de Boltzmann-Gibbs associée à l'énergie potentielle du système. De nombreuses méthodes ont été proposées, basées sur des chaînes de Markov, des processus de Markov (solutions d'équations différentielles stochastiques), ou bien des équations différentielles ordinaires. Nous faisons une brève revue de ces méthodes, et présentons nos résultats sur la non-ergodicité de certaines méthodes déterministes proposées dans la littérature (plus précisément, la méthode de Nosé-Hoover). L'utilisation de ces dernières pour échantillonner la mesure de Boltzmann-Gibbs est ainsi discutable.

On s'intéresse ensuite à des questions de dynamique effective. Génériquement, l'énergie potentielle d'un système moléculaire possède de nombreux minima locaux, séparés par de hautes barrières. Cependant, il n'est souvent pas nécessaire de connaître tous les degrés de liberté du système pour déterminer dans quelle conformation le système se trouve : la connaissance d'une *fonction* de ces degrés de liberté suffit. Partant de la description microscopique du système (un vecteur  $X$  en grande dimension), on est donc amené à introduire une description macroscopique, fondée sur la connaissance d'une fonction de l'état microscopique, notée ici  $\xi(X)$ , supposée à valeur scalaire, et qui contient toute l'information qui nous intéresse. Nous proposons une méthode pour obtenir une dynamique approchant la dynamique  $t \mapsto \xi(X_t)$  de la quantité d'intérêt, quand le système complet suit une dynamique  $t \mapsto X_t$  régie par l'équation de Langevin amortie. Sous une hypothèse de séparation des échelles de temps, nous démontrons que la dynamique effective proposée est une bonne approximation de  $t \mapsto \xi(X_t)$ .

Les approches décrites ci-dessus concernent un système à température fixée, et donc non isolé. Nous nous sommes aussi intéressés au cas où le système est isolé. Son évolution est alors gouvernée par les équations de Newton, qui s'écrivent comme une dynamique Hamiltonienne. La simulation numérique de cette dynamique n'est pas simple. Il y a en effet une différence de plusieurs ordres de grandeur entre les temps caractéristiques des mouvements les plus rapides du système (qui se font à l'échelle de la femtoseconde), et les temps de simulation souhaités (qui sont de l'ordre de la micro-, voire de la milliseconde). Il est en pratique très difficile, sur des systèmes moléculaires de grande taille, d'atteindre de tels temps avec un schéma d'intégration usuel, pour lequel le pas de temps est contrôlé par les temps caractéristiques les plus rapides. Cette observation nous a conduit à développer

des schémas numériques adaptés à des Hamiltoniens hautement oscillants (et pour lesquels le pas de temps n'est pas restreint par les mouvements les plus rapides), en suivant une démarche d'homogénéisation en temps. Nous avons aussi proposé une adaptation au contexte Hamiltonien de l'algorithme *pararéel*, permettant d'obtenir la solution d'un problème d'évolution par des méthodes de calcul parallèle.

La seconde partie du mémoire présente des travaux sur la dérivation de modèles à l'échelle du continuum à partir de modèles discrets, pour les solides, et sur le couplage de ces deux modèles, discret et continu. Le modèle fin est donc écrit à la même échelle d'espace que les modèles de la première partie, tandis que le modèle grossier est écrit à une échelle bien plus grande. Une première approche consiste à poser le problème sous forme variationnelle : la configuration recherchée est un minimiseur (parfois unique) d'une certaine énergie. Dans ce cas, nos résultats portent sur des questions de couplage entre un modèle discret et un modèle de continuum, et ont été obtenus durant la thèse. Cette approche correspond à un système à température nulle. Nous nous sommes ensuite intéressés au cas de systèmes à température finie, pour lesquels les quantités d'intérêt macroscopiques sont des moyennes de fonctions dépendant de l'état microscopique du système (la position de tous les atomes) par rapport à la mesure de Boltzmann. Dans ce cas, nous nous sommes intéressés à l'obtention de modèles réduits, macroscopiques, où la température est un paramètre, en suivant des approches de type limite thermodynamique.

Dans la troisième partie du mémoire, on s'intéresse à des questions d'homogénéisation stochastique, pour des équations aux dérivées partielles elliptiques linéaires. Les matériaux sont donc modélisés à l'échelle du continuum (qui est l'échelle des modèles grossiers de la seconde partie). Le constat qui motive notre travail est le fait que, même dans les cas les plus simples sur le plan théorique, les méthodes numériques à ce jour disponibles en homogénéisation stochastique (par exemple pour calculer la matrice effective) conduisent à des calculs très lourds. Notre motivation ici est *pratique* : nous nous sommes intéressés à une équation très simple sur le plan théorique, et avons cherché à améliorer les méthodes numériques dans ce cas. Nous avons travaillé dans deux directions. La première consiste à réduire la variance des quantités calculées. En effet, bien que la matrice homogénéisée *exacte* soit, dans le cas considéré, déterministe, un artefact de la procédure d'approximation numérique est que cette matrice est en pratique approchée par une matrice *aléatoire*. Nous avons développé des méthodes pour réduire la variance de la matrice homogénéisée approchée, afin d'obtenir typiquement un intervalle de confiance plus petit pour les quantités homogénéisées, à coût de calcul fixe. Un second axe de travail est d'étudier le cas de problèmes *faiblement* stochastiques, en partant du constat que les matériaux hétérogènes, rarement périodiques, ne sont pas pour autant systématiquement fortement aléatoires. Le cas d'un matériau aléatoire pour lequel cet aléa n'est qu'une *petite perturbation* autour d'un modèle périodique est donc intéressant. Nous montrons que, dans ce cas, une approche spécifique peut être proposée, pour calculer, au moins aux premiers ordres, le comportement homogénéisé avec un coût bien plus faible que celui des approches générales en homogénéisation stochastique.