ParisTech
INSTITUT DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES
PARIS INSTITUTE OF TECHNOLOGY
UNIVERSITÉ PARIS-EST

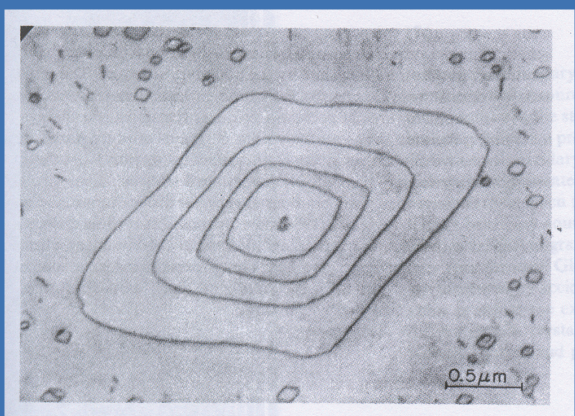
CERMICS

Centre d'enseignement
et de recherche en mathématiques
et calcul scientifique

laboratoire commun
Université Paris-Est / École des ponts
associé à l'INRIA

Nouvelle méthode numérique pour le calcul de la dynamique des dislocations

Au sein du laboratoire de Mathématiques appliquées de l'École des ponts, l'équipe « Équations aux dérivées partielles et matériaux » (EDPM) étudie la dynamique des dislocations [Fig. 1]. Les dislocations, défauts que l'on trouve dans la plupart des métaux, ont la forme de lignes courbes qui peuvent se déplacer au sein du matériau. La dynamique de ces lignes permet de mieux comprendre les propriétés mécaniques des métaux. À première vue, il peut sembler étonnant que les mathématiques aient un rôle à jouer dans l'étude de la dynamique des dislocations qui est un champ de la science des matériaux.
Les mathématiciens peuvent ici jouer un rôle à deux niveaux différents : en proposant de nouveaux algorithmes, ils peuvent améliorer les performances des simulations actuelles. À plus long terme, ils peuvent aussi apporter de nouveaux outils d'analyse avec des répercussions sur la modélisation.
Ce dossier présente le premier niveau et le travail de l'équipe sur une nouvelle méthode numérique appelée "*Generalized Fast Marching Method*" (GFMM) qui permet de calculer numériquement la dynamique de courbes. Cette méthode a des applications immédiates à la dynamique et est en en fait, de portée beaucoup plus générale.



► **[Fig. 1]**
Dislocations dans un alliage Al-Mg, obtenue par microscopie électronique

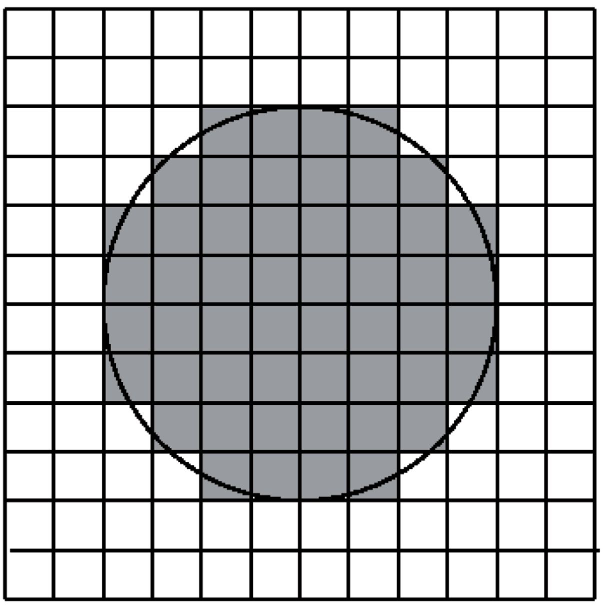
INRIA

CERMICS

http://cermics.enpc.fr/cermics.html

Difficulté de la méthode de « discrétisation »

Pour bien comprendre cette méthode, il convient de présenter les difficultés numériques qui apparaissent lorsque l'on veut simuler l'évolution d'une courbe. La première étape consiste à représenter numériquement la courbe. Pour simplifier, imaginons l'image numérique d'un disque noir sur fond blanc. Une représentation équivalente consiste à représenter le disque noir sur une feuille à petits carreaux où chaque petit carreau est l'analogue d'un pixel de l'image. Chaque petit carreau est donc, ou bien noir ou bien blanc et la courbe (ici le cercle) est simplement l'interface entre la zone noire et la zone blanche [Fig. 2].
Imaginons maintenant que l'on veuille faire grossir le cercle simplement en augmentant son rayon à vitesse constante et en gardant son centre fixe. On dit que le cercle évolue à vitesse normale constante. Cette opération semble très simple à effectuer à la main mais il est bien moins simple de proposer une méthode qui puisse calculer de façon automatique l'évolution du cercle (ou bien d'une courbe en général). Il faut en particulier déterminer quelle case blanche doit devenir noire en premier puis réitérer la procédure.



[Fig. 2]
Discrétisation d'un cercle sur un maillage

Approche naïve

Une approche naïve consiste à choisir comme règle que chaque case blanche au contact d'une seule case noire devient noire après une unité de temps (dt). Or, cela conduit à une mauvaise évolution du cercle dans les directions à 45° par rapport à l'horizontale. On peut tenter de corriger ce défaut en demandant qu'une case blanche ayant une case noire à sa droite et une case noire en dessous, devienne noire après un temps égal non pas à dt, mais à $\frac{dt}{\sqrt{2}}$. Cela corrige ce défaut et permet une bonne propagation dans les directions à 0°, 45°, 90°, etc. Mais la propagation par exemple, dans la direction 22,5° nécessite encore une correction.
La difficulté consiste à trouver une méthode plus systématique qui conserve la bonne forme du cercle (méthode isotrope) malgré la discrétisation sur les petits carreaux (anisotropes).

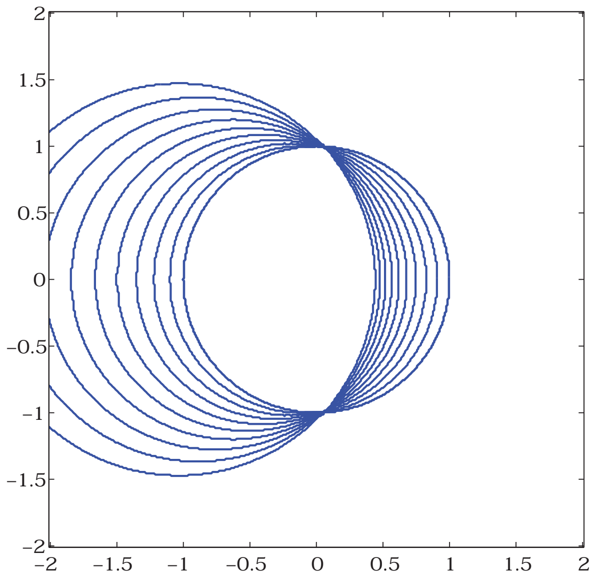
Méthode *"Fast Marching"*

Une bonne méthode pour effectuer cette propagation s'appelle "*Fast Marching Method*" (FMM). Elle a été introduite par Tsitsiklis puis par Sethian au milieu des années 90.
Imaginons que le disque noir sur la feuille à petits carreaux soit rempli d'eau (et si nécessaire ce disque est alimenté en eau en son centre de façon à être toujours rempli) et que les cases noires au bord de la zone remplie d'eau laissent passer de l'eau dans les cases blanches en contact. Ainsi, les cases blanches directement au contact de la zone noire sont partiellement remplies d'eau et constamment en train de se remplir. Dès qu'une case blanche se trouve complètement remplie d'eau, elle devient noire et à son tour elle irrigue les cases blanches directement à proximité.
Pour finir la description, il faut à présent préciser à quelle vitesse une case noire irrigue une case blanche directement à proximité. La règle ici est que le débit d'eau de la case noire vers la case blanche n'est pas constant au cours du temps.
Il est pris ici un débit proportionnel au temps écoulé depuis que cette case est devenue noire. Si une case blanche est au contact de deux cases noires, l'eau contenue dans cette case blanche est simplement le cumul de l'eau provenant de chacune des deux cases noires voisines. La méthode FMM est maintenant complètement décrite et s'adapte facilement aux cas de vitesses normales positives et variables en espace.

CERMICS

Généralisation de la méthode “*Fast Marching*” et applications à la dynamique d’une dislocation

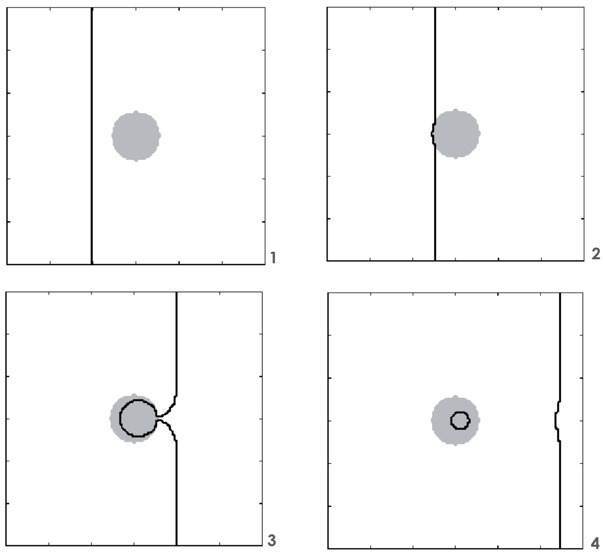
Dans le cas de la dynamique des dislocations, les vitesses normales sont en fait variables en espace-temps et peuvent changer de signe, ce qui complique la situation. L’équipe a été amenée à généraliser la FMM en la méthode que nous avons appelée GFMM.



[Fig. 3]
Calcul par la méthode GFMM de l’évolution d’un cercle à vitesse normale non constante

Avec cette méthode, le disque noir (ou une forme plus générale) peut aussi bien s’agrandir que diminuer suivant la valeur positive ou négative de la vitesse normale en un point de l’espace-temps. Supposons pour simplifier que la vitesse soit indépendante du temps. La GFMM coïncide avec la FMM dans les régions où la vitesse normale est positive.
En revanche dans les régions où la vitesse est négative, la méthode consiste à vider l’eau des cases noires au contact des cases blanches de façon analogue à la FMM.
Ainsi une fois qu’une case noire est complètement vide, elle devient blanche et cette case blanche peut maintenant pomper l’eau des cases noires voisines (pour un exemple, voir [Fig. 3]).

Bien sûr, de nombreux détails ont été omis dans le résumé de la GFMM qui vient d’être proposé afin d’en faciliter la présentation.
Plusieurs simulations ont permis de vérifier que la méthode est correcte. Il a aussi été prouvé un résultat typique d’analyse numérique qui garantit que, quitte à raffiner la description (par exemple en considérant une image à plus haute résolution, c’est-à-dire avec un plus grand nombre de pixels), la solution numérique obtenue est arbitrairement proche de la solution exacte, et ce, pour l’évolution d’une courbe générale à vitesse normale générale.
La méthode GFMM a finalement été appliquée au calcul de la dynamique d’une dislocation, améliorant certains résultats numériques précédemment obtenus [Fig. 4].



[Fig. 4]
Simulation de la progression de la gauche vers la droite d’une ligne de dislocation passant au travers d’un obstacle circulaire

Perspectives

Il est intéressant de souligner que bien que motivée par la dynamique des dislocations, la méthode GFMM que nous avons mise au point, a une portée très générale. Une application de cette méthode à l'imagerie médicale est actuellement en développement.

Plus généralement, le traitement d'images constitue un champ d'application de cette méthode qui, de plus, devrait pouvoir s'adapter à de nombreux problèmes de propagations d'interfaces. L'équipe « EDPM » travaille actuellement à l'extension de cette méthode au cas du transport d'interfaces avec de possibles applications en mécanique des fluides. Cette extension fait l'objet d'un contrat de recherche signé avec le CEA.

L'équipe « EDPM » développe en particulier de nouvelles méthodes numériques qui apparaissent très prometteuses, motivée par l'étude de la dynamique des dislocations. Ces efforts à la fois sur les méthodes numériques, mais aussi sur les aspects de modélisation de la dynamique des dislocations, ont commencé à porter leurs fruits et ouvrent un vaste champ de recherches nouvelles qu'il convient d'explorer.

Remerciements

L'auteur tient à remercier E. Carlini et N. Forcadel pour les simulations et les nombreuses discussions sur la méthode présentée ici.
L'auteur remercie aussi K. Franco-Chambeu pour son aide précieuse dans la mise en place de ce Dossier Recherche.

Université Paris-Est / CERMICS
École des ponts
6/8 av. Blaise Pascal
Cité Descartes - Champs-sur-Marne
77455 Marne-la-Vallée cedex 2
contact : Régis Monneau / 01 64 15 35 80
monneau@cermics.enpc.fr

Pour en savoir plus

http://cermics.enpc.fr/cermics.html

E. Carlini, M. Falcone, N. Forcadel, R. Monneau. *Convergence of a Generalized Fast Marching Method for an Eikonal equation with a Velocity Changing Sign*. In: *SIAM journal on numerical analysis* (à paraître en 2008)

J. A. Sethian. *Level Set Methods and Fast Marching Methods: Evolving Interfaces in Computational Geometry*, Fluid Mechanics, Computer Vision and Materials Science. Cambridge University Press, 1999

J. N. Tsitsiklis. *Efficient algorithms for globally optimal trajectories*. In: IEEE Tran. Automatic. Control, 1995, vol 40, pp. 1528-1538

Le CERMICS

L'activité scientifique du CERMICS recouvre 3 axes de recherche :

- le calcul scientifique,
- l'optimisation,
- les probabilités appliquées.

- Personnels permanents : 14
- Doctorants, post-doctorants et stagiaires : 30