

Equation d'Hamilton-Jacobi non-locale modélisant la dynamique des dislocations

Amin Ghorbel* — Régis Monneau*

* CERMICS, Ecole nationale des Ponts et Chaussées,
6 et 8 avenue Blaise Pascal, Cité Descartes,
Champs-sur-Marne, 77455 Marne-la-Vallée Cedex 2
France
ghorbel@cermics.enpc.fr
monneau@cermics.enpc.fr

RÉSUMÉ. On présente ici une très brève introduction aux dislocations et à leur dynamique. On décrit la dynamique de ces dislocations à l'aide d'un modèle simple. Il s'agit d'une équation d'Hamilton-Jacobi avec terme non local. Nous présentons un résultat d'existence et d'unicité de solution de viscosité continue pour cette équation et des simulations numériques montrant le phénomène d'empilement lorsqu'on considère plusieurs dislocations et obstacles.

ABSTRACT. We present here a brief introduction to the dislocations and their dynamics. We modelise the dislocations dynamics by a non-local Hamilton-Jacobi equation. We give a result of existence and uniqueness of a continuous viscosity solution for this equation. We provide some numerical simulations showing essentially the pile-up's phenomenon when we consider several dislocations and obstacles.

MOTS-CLÉS : Dynamique des dislocations, équation de Hamilton-Jacobi, équation non-locale, solution de viscosité continue

KEYWORDS : Dislocations dynamics, Hamilton-Jacobi equation, non-local equation, continuous viscosity solution

1. Modélisation

Dans ce travail on s'intéresse à la dynamique de dislocations dans un matériau cristallin (cf. [5] et [6] pour une description physique). Un cristal parfait en petite déformation est bien décrit par les équations de l'élasticité linéaire. Les cristaux réels comportent en fait certains défauts appelés dislocations. Sous l'effet de contraintes extérieures, ces dislocations peuvent se déplacer. La dynamique de ces dislocations est à l'origine du comportement plastique des métaux cristallins (cf. [2] pour une modélisation de la dynamique des dislocations).

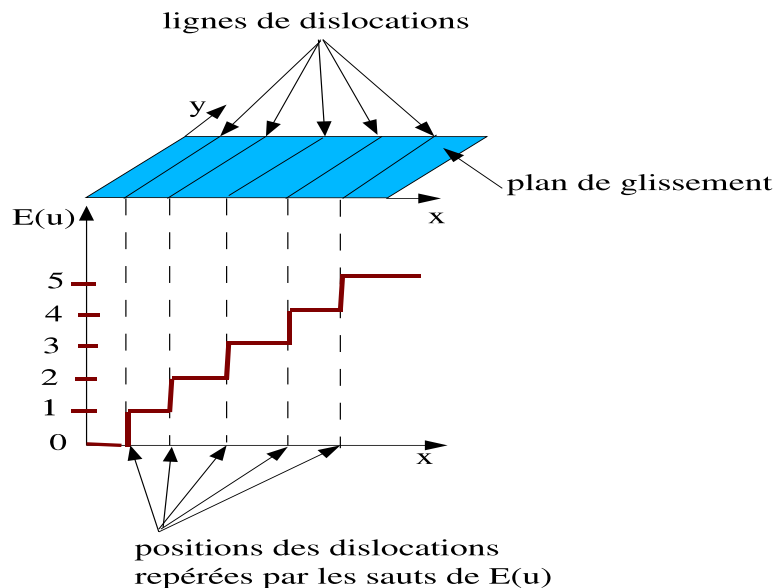


Figure 1. Représentation de plusieurs dislocations par la fonction $E(u)$

On considère ici un modèle simple où les dislocations sont des lignes droites se déplaçant dans un même plan (xy) et parallèles à l'axe des y (voir Fig.1). Ce plan est contenu dans un cristal élastique tridimensionnel. La géométrie très particulière de ce problème permet de se ramener à l'étude d'un problème unidimensionnel donné par l'équation

d'Hamilton-Jacobi non-locale suivante qui modélise la plasticité à l'échelle des dislocations (pour $T > 0$)

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + c(x, t) \left| \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \right| = 0 & \text{dans } \mathbb{R} \times (0, T) \\ c(x, t) = c^{\text{ext}}(x) + c^{\text{int}}(x, t) \\ c^{\text{int}}(x, t) = \int_{\mathbb{R}} c^0(x - x') E(u(x', t)) dx' \end{cases} \quad (1)$$

où la fonction E est la partie entière définie par

$$E(v) = k \quad \text{si } k \leq v < k + 1, \quad k \in \mathbb{Z}.$$

Ici, la fonction scalaire u est non-physique mais est choisie telle que les sauts de $E(u)$ représentent les positions des dislocations (cf. Fig.1). L'introduction de la valeur absolue $\left| \frac{\partial u}{\partial x} \right|$

dans l'équation permet de tenir compte de l'annihilation possible de deux dislocations associées à des sauts de $E(u)$ opposés. Ces dislocations se déplacent à une vitesse c (appelée en physique force de Peach-Kohler résolue, cf. [6]) qui est la somme de deux termes. Le premier terme c^{ext} représente les contraintes externes créées par les obstacles à l'avancement des dislocations (tels que les précipités dans le matériau, d'autres dislocations fixes ou bien d'autres défauts, ...). Le second terme c^{int} est non-local, donné par une convolution, et représente les contraintes internes élastiques créées par toutes les dislocations en mouvement. Ce dernier terme est obtenu par résolution des équations de l'élasticité linéaire et fait apparaître un noyau c^0 qui tient compte des effets élastiques (longue distance) des dislocations. Nous considérons une situation physique où les obstacles à l'avancement des dislocations, modélisés par la vitesse c^{ext} , sont répartis de façon périodique dans l'espace, de période 1. Cela revient à supposer que

$$c^{\text{ext}}(x + 1) = c^{\text{ext}}(x) \quad \text{dans } \mathbb{R} \quad (2)$$

On s'intéresse à une classe particulière de solutions de (1) où la distribution des dislocations (c'est-à-dire des sauts de $E(u)$) est elle aussi spatialement périodique de période 1, chaque période contenant $P \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ dislocations. C'est en particulier le cas si on se restreint à l'étude des solutions u vérifiant

$$u(x + 1, t) = u(x, t) + P \quad \text{dans } \mathbb{R} \times (0, T) \quad (3)$$

2. Existence et unicité de la solution

Nous formulons les hypothèses suivantes sur la fonction c^{ext} et le noyau c^0 :

$$\begin{cases} c^{\text{ext}} \in C^\infty(\mathbb{R}) \\ c^0 \in C_0^\infty(\mathbb{R}) \\ c^0(x) = c^0(-x), \int_{\mathbb{R}} c^0(x) dx = 0 \end{cases} \quad (4)$$

où $C_0^\infty(\mathbb{R})$ désigne l'espace des fonctions C^∞ à support compact. On considère la condition initiale

$$u(x, 0) = Px \quad \text{sur } \mathbb{R} \quad (5)$$

qui signifie qu'initialement les dislocations sont équidistantes les unes des autres. Un cadre naturel pour étudier les solutions de (1) est celui des solutions de viscosité continues. Nous renvoyons à [4] pour cette notion. On a alors le

Théorème 2.1 *Sous les hypothèses (2),(4), Il existe $T > 0$, tel qu'il existe une unique solution u de viscosité continue de (1),(3),(5).*

QUELQUES INDICATIONS POUR LA PREUVE DU THÉORÈME 2.1 Nous prouvons le théorème en temps court en utilisant un argument de type point fixe inspiré de ([1, 2]), pour des solutions de viscosité continues de (1). De façon précise, étant donné $T > 0$ et une fonction v vérifiant (3),(5), on considère la fonction $w = S(v)$ vérifiant (3),(5), solution de

$$w_t + \left(c^{\text{ext}} + c^0 \star E(v) \right) |w_x| = 0 \quad \text{dans } \mathbb{R} \times (0, T)$$

Pour T choisi suffisamment petit, on montre que l'application S est une contraction dans un espace bien choisi, ce qui prouve l'existence d'un unique point fixe $u = S(u)$ qui est donc solution de (1) sur $\mathbb{R} \times (0, T)$. Notons que le cadre des solutions de viscosité continues se prête bien au calcul numérique contrairement aux solutions de viscosité discontinues par exemple considérées dans [1, 2]. \square

3. Simulations numériques

On construit un schéma de type différences-finies d'ordre 1 en espace et en temps, caractérisé par :

- un hamiltonien numérique (on utilisera le schéma de Rouy-Tourin [7]).

- une convolution discrète pour la vitesse non-locale c^{int} .
- un schéma d'Euler explicite en temps.

On note Δx le pas d'espace et Δt le pas de temps. On considère un maillage cartésien $I_d = \{(i\Delta x, n\Delta t); i \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}\}$. On note (x_i, t^n) le noeud du maillage $(i\Delta x, n\Delta t)$ et $v^n = (v_i^n)_{i \in \mathbb{Z}}$ les valeurs de l'approximation numérique de $u(x_i, t^n)$ où u est la solution continue du problème. Le schéma numérique s'écrit :

$$v_i^{n+1} = v_i^n - \Delta t c_i(v^n) \begin{cases} \max(\max(D_x^- v_i^n, 0), \max(-D_x^+ v_i^n, 0)) & \text{si } c_i(v^n) \geq 0 \\ \min(\min(D_x^- v_i^n, 0), \min(-D_x^+ v_i^n, 0)) & \text{si } c_i(v^n) < 0 \end{cases} \quad (6)$$

$$\text{avec } D_x^- v_i^n = \frac{v_i^n - v_{i-1}^n}{\Delta x} \text{ et } D_x^+ v_i^n = \frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{\Delta x}.$$

On choisit $\Delta x = \frac{1}{k}$ où $k \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$. On note $c_i^{\text{ext}} = c^{\text{ext}}(x_i)$ qui vérifie alors $c_{i+k}^{\text{ext}} = c_i^{\text{ext}}$. On s'intéresse à des solutions v_i^n vérifiant $v_{i+k}^n = v_i^n + P$. Ainsi, la vitesse discrète s'écrit :

$$c_i(v^n) = c_i^{\text{ext}} + \sum_{l \in \mathbb{Z}} c_{i-l}^0 E(v_l^n) \Delta x$$

où $c_i^0 = \frac{1}{\Delta x} \int_{I_i} c^0(x) dx$, et $I_i = \left[x_i - \frac{\Delta x}{2}, x_i + \frac{\Delta x}{2} \right]$, et vérifie $c_{i+k}(v^n) = c_i(v^n)$.

Remarque 3.1 Pour obtenir des solutions numériques raisonnables on suppose la condition CFL (Courant-Friedrichs-Levy) satisfaite : $\frac{\Delta t}{\Delta x} < \frac{1}{\sup |c_i^n|}$. Notons néanmoins que le schéma global n'est pas monotone car la vitesse $c_i(v^n)$ dépend de façon non monotone de la solution v^n elle-même, (car certains c_i^0 peuvent être négatifs).

Remarque 3.2 Une façon de calculer la convolution (qui devient intéressante lorsque le nombre de points de discrétisation $k = \frac{1}{\Delta x}$ est grand) consiste simplement, en utilisant la FFT, à prendre la transformée de Fourier inverse du produit des transformées de Fourier.

Dans les figures 2 à 5 l'axe des abscisses représente la position x_i dans l'intervalle $\left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right]$ et l'axe des ordonnées, le temps t^n . Sont ici représentées les trajectoires des dis-

locations repérées par le lieu du saut de $E(v_i^n)$, dans différentes situations. Si $k = 2K + 1$, où $K \in \mathbb{N}$, on a pris,

$$c^0(x) = \begin{cases} -1 & \text{si } i = 0 \\ \frac{1}{2K} & \text{si } |i| \leq K \text{ et } i \neq 0 \\ 0 & \text{si } |i| \geq K + 1 \end{cases} \quad (7)$$

Remarque 3.3 Pour le choix de c_i^0 donné par (7), le schéma global est monotone car seul le coefficient c_0^0 est strictement négatif.

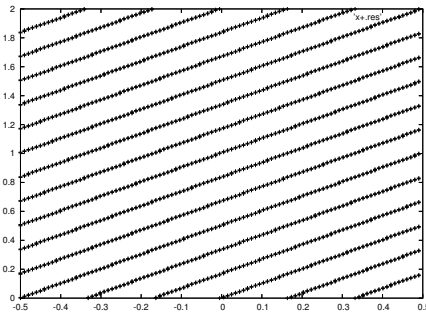


Figure 2. Absence d'obstacles

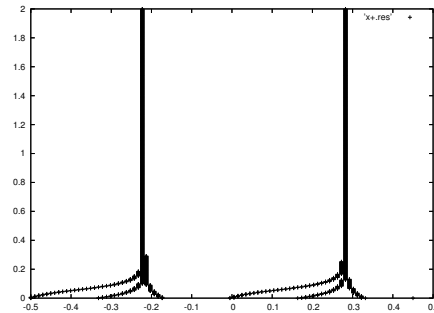


Figure 3. Les dislocations sont piégées par deux obstacles

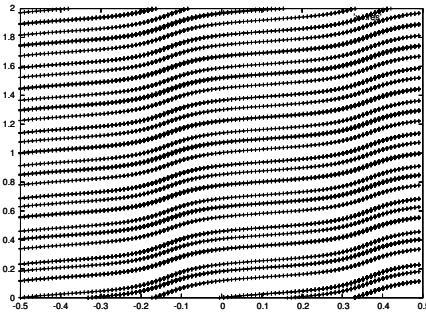


Figure 4. Empilement de dislocations sur deux obstacles

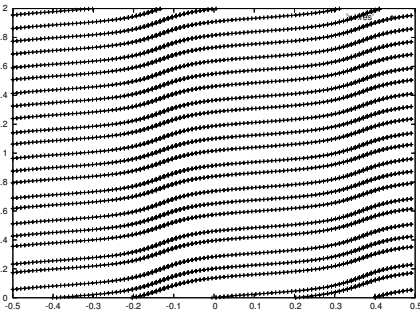


Figure 5. Empilement de dislocations sur deux obstacles

La figure 2 montre que quand il n'y a pas d'obstacles, c'est-à-dire $(c^{\text{ext}})'(x) = 0$, les trajectoires des $P = 6$ dislocations sont des droites. Lorsqu'on rajoute des obstacles suffisamment importants (cf. figure 3), les dislocations sont stoppées par les obstacles (ici $c^{\text{ext}}(x) = 1 + 2 \sin(4\pi x)$). La figure 4 montre que si on augmente c^{ext} d'une constante

suffisante en conservant les obstacles inchangés (en $x \sim -0.1$ et $x \sim 0.4$), on observe un mouvement des dislocations. On constate numériquement qu'ici ce mouvement se périodise au cours du temps. On observe un effet d'empilement des dislocations juste avant chaque obstacle. Si on change légèrement le nombre de dislocations qui passent à $P = 5$, figure 5, on observe ici le même phénomène. On a pris ici $k = 101$, $\Delta x = 9.90 \cdot 10^{-3}$ et $\Delta t = 4.71 \cdot 10^{-3}$ (fig.2), $\Delta t = 1.63 \cdot 10^{-3}$ (fig.3), $\Delta t = 9.84 \cdot 10^{-4}$ (fig.4), $\Delta t = 9.87 \cdot 10^{-4}$ (fig.5).

4. Perspectives

Nous envisageons d'examiner s'il est possible, sous certaines hypothèses, d'étendre en temps long le résultat d'existence et d'unicité du théorème 2.1. Nous nous intéresserons à la convergence du schéma numérique présenté ici en s'inspirant de [3] et aussi à l'étude de l'homogénéisation.

5. Remerciements

Nous remercions O. Alvarez, E. Carlini, A. Finel, P. Hoch, Y. Le Bouar et E. Rouy pour de nombreuses discussions enrichissantes.

6. Bibliographie

- [1] O. ALVAREZ, P. HOCH, Y. LE BOUAR, R. MONNEAU, « Résolution en temps court d'une équation de Hamilton-Jacobi non locale décrivant la dynamique d'une dislocation », *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I* 338 (2004) 679-684,
- [2] O. ALVAREZ, P. HOCH, Y. LE BOUAR, R. MONNEAU, « Dislocation dynamics driven by the self-force : short time existence and uniqueness of the solution », Preprint,
- [3] O. ALVAREZ, E. CARLINI, P. HOCH, Y. LE BOUAR, R. MONNEAU, « Dislocation dynamics described by non-local Hamilton-Jacobi equations », Preprint,
- [4] G. BARLES, « Solutions de viscosité des équations de Hamilton-Jacobi », *Springer-Verlag, Berlin* (1994),
- [5] J.R. HIRTH, L. LOTHE, « Theory of dislocations », *Second Edition, Malabar, Florida : Krieger* (1992),
- [6] D. RODNEY, Y. LE BOUAR, A. FINEL, « Phase field methods and dislocations », *Acta Materialia* 51 (1) (2003) pp. 17-30,
- [7] E. ROUY, A. TOURIN, « A viscosity solutions approach to shape-from-shading », *SIAM J. Numer. Anal.* 29 (3) (1992) pp. 867-884,