



**HAL**  
open science

# Modélisations quasi-continues du comportement dynamique d'un réseau atomique de simple micro-structure

Miguel Charlotte, Lev Truskinovsky

► **To cite this version:**

Miguel Charlotte, Lev Truskinovsky. Modélisations quasi-continues du comportement dynamique d'un réseau atomique de simple micro-structure. 10e colloque national en calcul des structures, May 2011, Giens, France. 8 p. ; Clé USB. hal-00592816

**HAL Id: hal-00592816**

**<https://hal.science/hal-00592816v1>**

Submitted on 3 May 2011

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# Modélisations quasi-continues du comportement dynamique d'un réseau atomique de simple micro-structure

M. Charlotte<sup>1</sup>, L. Truskinovsky<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Université de Toulouse, Institut Clément ADER, ISAE, {miguel.charlotte}@isae.fr

<sup>2</sup> LMS, Ecole Polytechnique, France, trusk@lms.polytechnique.fr

**Résumé** — Le comportement dynamique non-trivial d'une simple chaîne monoatomique linéairement élastique est homogénéisé/continualisé en tenant compte de ses propriétés dispersives. Celles-ci sont peu ou mal connues et violent l'interprétation de causalité d'Einstein dans le cas d'un domaine non-borné. Nous démontrons que ce comportement "granulaire" peut-être interprété, dans différentes modélisations continues, par la présence de pseudo-forces inertielles post-newtoniennes ignorées des couplages numériques multi-échelles qui se fondent sur une hypothétique décomposition hamiltonienne des énergies.

**Mots clés** — *dynamique de structures élastiques discrètes, modèles quasi-continues/homogénéisation, forces inertielles.*

## 1 Introduction

Avec la miniaturisation des dispositifs d'ingénierie et la précision croissante des instruments de mesures, l'usage de méthodes numériques multi-échelles couplant des modélisations continues —éventuellement généralisées— et atomistiques est de plus en plus nécessaire pour rendre compte et justifier le micro-comportement des structures élastiques. Le comportement dynamique des structures discrètes, même simples, est en réalité déjà très complexe en régime linéaire en raison de la présence de multiple échelles de temps et de longueurs internes [4, 6, 13]. Pour les structures discrètes assimilables à des réseaux atomiques, cette complexité est incorporée dans des relations de dispersion des phonons hautement non-triviales, bien connues pour certaines. Pour décrire le comportement effectif de telles structures à une échelle macroscopique, de nombreuses approches numériques (FEM, XFEM, Discrete Galerkin Method, SPH, Quasicontinuum Method, Bridging Scale Method, etc.) se basent naïvement sur la théorie des milieux continus élastique classique qui est non-dispersive. Or, celle-ci ne donne qu'une description très limitée du comportement singulier de la structure microscopique discrète, vue qu'elle n'est supposée traiter que les ondes de déformation longues et à basses fréquences. Ainsi, de nombreux effets physiques importants (tels que les micro-instabilités [5], les oscillations non-compatibles avec l'hypothèse "monochamp continu", les lacunes acoustiques, la dispersion, l'amortissement structural et la localisation de mode de vibration [4, 14], etc.) lui échappent. Tous ces phénomènes ne sont pas pertinents en effet pour les structures de taille macroscopique, mais deviennent en réalité dominant à l'échelle des microstructures considérées.

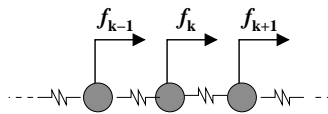


FIGURE 1 – La chaîne monoatomique et son chargement.

Dans le but de fournir une illustration analytique pouvant servir de modèle de comparaison pour de futurs développements de modèles continus généralisés et de méthodes numériques de couplages multi-échelles et/ou multi-modèles [20], cette communication présente succinctement une nouvelle analyse de la question de l'*identification (quasi-)continu* du comportement dynamique non-trivial d'un *modèle discret* "simple" (cf. Fig 1). Historiquement, ce modèle a notamment inspiré les travaux d'Isaac Newton pour son calcul de la vitesse du son dans l'air ainsi que Jean (I) et Daniel Bernoulli pour le développement des méthodes de résolution des systèmes vibrant [4, 14]. Il s'agit d'une chaîne monoatomique linéairement élastique, et dans laquelle les atomes n'ont que des déplacements  $\{u_k(t)\}_{k \in \mathbb{Z}}$  longitudinales (ou sinon transverses à la chaîne) à partir de leurs positions d'équilibre respectives. Par soucis de clarté dans cette étude les collisions sont interdites et chaque atome  $k \in \mathbb{Z}$  est considéré initialement au repos, *i.e.* sans déplacement initial et sans vitesse initiale ; en plus des interactions avec ses plus proches voisins, il est également soumis à une force extérieure  $af_k(t)$ , nulle pour des instants  $t < 0$ , suivant l'axe de mouvement autorisé ; sa dynamique est alors régie par

$$\rho D_t^2 u_k = \frac{\alpha}{a^2} [u_{k+1} + u_{k-1} - 2u_k] + f_k \text{ pour } (k, t) \in \mathbb{Z} \times \omega_* \mathbb{R}^+ . \quad (1)$$

Cette expression fait intervenir l'opérateur  $D_t$  de dérivée particulière par rapport au temps  $t$  et différentes constantes : une longueur  $a > 0$  d'échelle de référence ; la masse  $\rho a$  de chaque atome, définie avec une densité massique linéique  $\rho > 0$  ; la raideur élastique  $\alpha a$  des ressorts de masse nulle, et définie avec le module élastique  $\alpha > 0$ . De ces constantes sont identifiés un temps  $\omega_*^{-1} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{a}{2} \sqrt{\frac{\rho}{\alpha}} = \frac{a}{2c}$  et une vitesse  $c \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{\alpha}{\rho}}$  de propagation d'onde, qui sont caractéristiques selon le point de vue macroscopique de l'"homogénéisation" classique basée sur les grandes longueurs d'ondes de déformation.

## 2 Mouvement du système

### 2.1 Caractérisation spectrale

La résolution de l'Eq.(1) peut être obtenue à l'aide de la transformée temporelle de Laplace et des transformée spatiale de Fourier discrète. La première transformée est définie dans le plan complexe  $\omega_* \mathbb{C}$  comme

$$\tilde{y}(t) \rightarrow \tilde{y}(\omega) = \int_0^{\infty} \tilde{y}(t) e^{-i\omega t} dt, \Im m(\omega) < -\check{\omega}_b \leq 0, \quad (2)$$

où une constante suffisamment grande  $\check{\omega}_b$  est prise pour assurer l'existence de l'intégrale.  $\Re e(\cdot)$  et  $\Im m(\cdot)$  désignent ici respectivement les parties réelle et imaginaire de leurs nombres complexes en argument ;  $i$  est la détermination principale du nombre imaginaire donnant  $i^2 = -1$ . Pour la seconde transformée, nous écrivons dans le plan complexe  $a^{-1} \mathbb{C}$

$$\{y_k\}_{k \in \mathbb{Z}} \rightarrow y(\lambda) = a \sum_{k \in \mathbb{Z}} y_k e^{-ik\lambda a}, \forall \lambda \in \mathbb{K} \stackrel{\text{def}}{=} [-\pi/a, \pi/a], \quad (3)$$

au sens des distributions tempérées sur la première zone de Brillouin  $\mathbb{K}$  du sous-espace (spectrale) réciproque  $a^{-1} \mathbb{R}$ . Les précédentes transformées (2) et (3) ont respectivement pour formules d'inversion

$$\tilde{y}(\omega) \rightarrow \tilde{y}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-i\omega_b - \infty}^{-i\omega_b + \infty} \tilde{y}(\omega) e^{i\omega t} d\omega, \forall \omega_b > \check{\omega}_b \geq 0, \text{ pour } t \in \omega_*^{-1} \mathbb{R}, \quad (4a)$$

$$y(\lambda) \rightarrow y_k = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} y(\lambda) e^{ik\lambda a} d\lambda, \text{ pour } k \in \mathbb{Z}; \quad (4b)$$

ces intégrales étant définies au sens de la valeur principale de Cauchy.

L'application combinée des transformées (2) et (3) sur l'Eq.(1) fournit alors

$$\Phi(\lambda, \omega) u(\lambda, \omega) = f(\lambda, \omega), \quad (5)$$

avec, pour caractériser entièrement les propriétés mécaniques élasto-dynamiques du système matériel discret, la fonction holomorphe de deux variables complexes

$$\Phi(\lambda, \omega) \stackrel{\text{def}}{=} \rho [\omega_*^2 \sin^2(\lambda a/2) - \omega^2], \forall (\lambda, \omega) \in a^{-1} \mathbb{C} \times \omega_* \mathbb{C} \quad (6a)$$

$$\equiv \begin{cases} -\rho \omega^2 \prod_{q \in \mathbb{Z}} \left[ 1 - \frac{\lambda^2}{\lambda_{2q}^2(\omega)} \right] & , \text{ pour } \omega \neq 0 \text{ et } \omega \notin C \stackrel{\text{def}}{=} ]-\infty, -\omega_*] \cup [\omega_*, \infty[ \\ \alpha \lambda^2 \prod_{q \geq 1} \left[ 1 - \frac{\lambda^2}{\lambda_{2q}^2(0)} \right]^2 & , \text{ pour } \omega = 0 \end{cases} . \quad (6b)$$

Pour  $\omega \in \omega_* \mathbb{R}$ , l'équation  $\Phi(\lambda, \omega) = 0$  définit les courbes de dispersion [4] que les racines des factorisations polynomiales de Weierstrass de  $\Phi(\lambda, \omega)$  en (6b) décrivent, ces racines étant définies pour  $\omega \in \omega_* \mathbb{C} \setminus C$  selon [7]

$$\begin{aligned} \lambda_{2q}(\omega) &= \lambda_o(\omega) + 2q\pi/a, \quad \lambda_{2q+1}(\omega) = -\lambda_{2q}(\omega) \\ \lambda_o(\omega) &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{-i}{a} \log \left( 1 - \frac{2\omega^2}{\omega_*^2} - 2i \frac{\omega}{\omega_*} \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{\omega_*^2}} \right), \text{ avec } |\Re e(\lambda_o)| a \leq \pi. \end{aligned}$$

### 2.2 Réponse spatio-temporelle du système

Le modèle académique considéré possède certaines propriétés dispersives/dynamiques qui sont peu ou mal connues dans la littérature. Celles-ci sont exposées dans [4, 7] et s'expriment dans la solution formelle de l'Eq.(1),

$$u_k(t) = \sum_{p \in \mathbb{Z}} \int_0^t G((k-p)a, t-\hat{t}) \frac{f_p(\hat{t})}{\rho} d\hat{t} \equiv \sum_{p \in \mathbb{Z}} \int_0^t G_K((k-p)a, t-\hat{t}) \frac{f_p(\hat{t})}{\rho} d\hat{t} \quad (7)$$

via la solution fondamentale impulsionnelle (ou encore fonction de Green dynamique) qui est interpolée pour  $(s, t) \in a\mathbb{R} \times \omega_*^{-1} \mathbb{R}$  par la fonction suivante

$$G(s, t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2H(t)}{\pi\omega_*} \left\{ \int_0^{\omega_*} \frac{\sin(\omega_r t) \cos\left(\frac{s}{\ell_-}\right)}{\omega_r \sqrt{1 - \frac{\omega_r^2}{\omega_*^2}}} d\omega_r - \sin(|s|\pi/a) \int_{\omega_*}^{+\infty} e^{-\frac{|s|}{\ell_+}} \frac{\sin(\omega_r t)}{\omega_r \sqrt{\frac{\omega_r^2}{\omega_*^2} - 1}} d\omega_r \right\} \quad (8)$$

ou encore plus simplement par la suivante

$$G_K(s, t) \stackrel{\text{def}}{=} H(t) \int_0^{\pi/a} \frac{a \sin(\omega_* t \sin(\lambda a/2)) \cos(\lambda s)}{\omega_* \sin(\lambda a/2) \pi} d\lambda. \quad (9)$$

Ces fonctions sont définies avec celle de Heaviside  $H(t) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} 0 & , \text{ si } t < 0 \\ 1 & , \text{ si } t \geq 0 \end{cases}$ , et les longueurs  $\ell_{\pm}(\omega)$

$$\begin{aligned} \frac{a}{\ell_-(\omega)} &\stackrel{\text{def}}{=} \cos^{-1} \left( 1 - 2 \frac{\omega^2}{\omega_*^2} \right) \in [0, \pi] \quad , \text{ pour } \omega \in [-\omega_*, \omega_*]; \\ \frac{a}{\ell_+(\omega)} &\stackrel{\text{def}}{=} \ln \left[ \frac{2\omega^2}{\omega_*^2} - 1 + \frac{2|\omega|}{\omega_*} \sqrt{\frac{\omega^2}{\omega_*^2} - 1} \right] \geq 0 \quad , \text{ pour } \omega \in \omega_* \mathbb{R} \setminus [-\omega_*, \omega_*], \end{aligned}$$

qui caractérisent les propriétés *dispersives* et *amortissantes* du *milieu périodique granulaire* considéré [4].

Une comparaison graphique des fonctions  $G(s, t)$  et  $G_K(s, t)$  est présentée sur la figure 2, ainsi que leur différence

$$G_K(s, t) - G(s, t) \equiv \frac{2H(t)}{\pi\omega_*} \sin(|s|\pi/a) \int_{\omega_*}^{+\infty} \frac{e^{-\frac{|s|}{t_+}} \sin(\omega_r t)}{\omega_r \sqrt{\frac{\omega_r^2}{\omega_*^2} - 1}} d\omega_r.$$

Ces fonctions sont également reliées via les identités “remarquables” suivantes

$$G(ka, t) \equiv G_K(ka, t) \equiv H(t) \int_0^t J_{2k}(\omega_* \hat{t}) d\hat{t} \quad \text{et} \quad G_K(s, t) \equiv \sum_{q \in \mathbb{Z}} \text{sinc}(s/a - q) G(qa, t),$$

avec les *fonctions de Bessel's de première espèce et d'ordre entier* [1] (découvertes par D. Bernoulli)

$$J_n(\tau) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{a}{\pi} \int_0^{\pi/a} \cos(\tau \sin(\lambda_r a) - \lambda_r n a) d\lambda_r \equiv (-1)^n J_{-n}(\tau), \quad \text{pour } (n, \tau) \in \mathbb{N} \times \mathbb{R}$$

et la fonction *sinus cardinal* [15, 10]

$$\text{sinc}(\eta) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\sin(\pi\eta)}{\pi\eta}, \quad \text{pour } \eta \in \mathbb{R}.$$

D'après la solution (7) et les propriétés de  $G(ka, t) \equiv G_K(ka, t)$ , cette structure granulaire (composée en particulier de *ressorts sans masse* et qui est *sans frontière*) autorise instantanément, à une vitesse infinie, un transfert d'énergie macroscopiquement négligeable de phonons d'ondes transitoires évanescences. Selon[3, 18], ce phénomène viole l'interprétation d'Einstein du critère causalité qui stipulerait qu'*aucun signal ne peut être transmise plus vite que la vitesse de la lumière dans le vide* et qui serait nécessaire à toute *formulation généralisée consistante des milieux continus élastiques*. Usuellement, l'évolution de ces milieux est exprimée par les équations hyperboliques de la mécanique classique qui dans le cas d'une barre ou d'une corde vibrante se résument à celle des ondes élastodynamiques de Jean Le Rond D'Alembert

$$\rho D_t^2 u_c(s, t) - \alpha D_s^2 u_c(s, t) = f(s, t), \quad \text{pour } (s, t) \in a\mathbb{R} \times \omega_*^{-1}\mathbb{R}^+. \quad (10)$$

Ici  $D_s$  est l'opérateur de dérivée partielle spatiale et  $f(s, t)$  une fonction ou distribution de densité de force. L'équation (10) est connue pour être la limite continue du modèle discrete (1). Elle est déductible en effet par des développements de Taylor soit de (1) sous l'hypothèse d'existence d'un champ de déplacement continu  $u_c(k, t) \sim u_k(t)$  à variations spatio-temporelles suffisamment lentes pour être différentiables, limitant  $u_c(\lambda, \omega)$  aux grandes longueurs d'onde  $|\lambda|^{-1} \gg a$  et basses pulsations  $|\omega| \ll \omega_*$  où  $\Phi(\lambda, \omega) \approx \alpha\lambda^2 - \rho\omega^2$ . La solution fondamentale de (10)

$$G_c(s, t) \stackrel{\text{def}}{=} \omega_*^{-1} H(t - |s|/c), \quad (11)$$

qui génère la solution d'ondes progressives de D'Alembert, est illustrée sur la figure 2(d). Elle correspond à l'*asymptote macroscopique* de  $G$  et  $G_K$  quand  $\omega_* t \rightarrow \infty$  (avec  $|s|/\omega_* a t$  fixe) ou quand  $|s|/a \rightarrow \infty$  (avec  $\omega_* a t/|s|$  fixe). Cependant, contrairement à  $G$  et  $G_K$ , la fonction  $G_c$  montre deux fronts de discontinuités, d'équation  $|s| = ct$ , et qui se propage avec la célérité  $c$ . De même, *toute singularité de la solution  $u_c$  se propagera suivant ce schémas*.

### 3 Milieux continus équivalents

#### 3.1 Les critères d'interpolation

Le problème de la *construction d'un modèle de milieux continus équivalent au modèle granulaire* considéré inclut la tâche de formuler un système d'équations intégro-différentielles, des deux variables  $(s, t) \in a\mathbb{R} \times \omega_*^{-1}$ , entre un *champ continu*  $u(s, t)$  interpolant le champ de déplacement discret  $\{u_k(t)\}_{k \in \mathbb{Z}}$  selon

$$u(ka, t) = u_k(t), \quad \text{pour } (k, t) \in \mathbb{Z} \times \omega_*^{-1}\mathbb{R}, \quad (12)$$

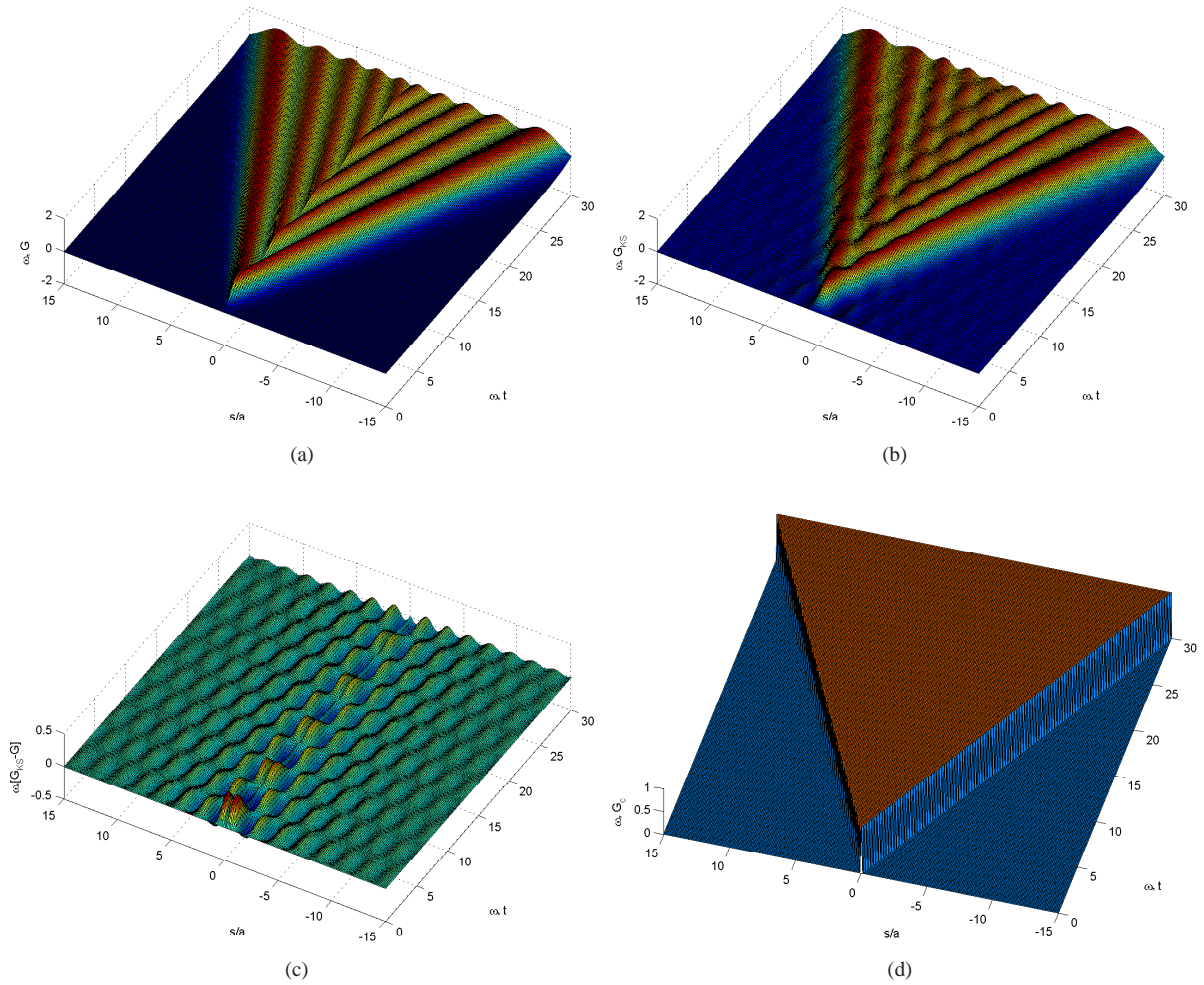


FIGURE 2 – Les fonctions  $G(s,t)$  (a) et  $G_K(s,t)$  (b), leur différence  $G_K(s,t) - G(s,t)$  (c), et leur “asymptote macroscopique” (aux sens temporel et spatial)  $G_c(s,t)$  (d).

et un champ de densité de forces  $f(s,t)$  lié en un certain sens à  $\{f_k(t)\}_{k \in \mathbb{Z}}$ . D’un point de vue spectrale, une étape cruciale selon [6, 7] est le remplacement de l’équation (5) dans l’espace  $a^{-1}\mathbb{C} \times \omega_*\mathbb{C}$  des variables spectrales  $(\lambda, \omega)$  par une équation d’interpolation

$$\Phi^*(\lambda, \omega) u^*(\lambda, \omega) = f^*(\lambda, \omega) \quad (13)$$

qui elle-même permet de substituer la DFT (3) et son inverse (4b) par la transformée de Fourier intégrale et son inverse

$$y(s) \rightarrow y^*(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} y(s) e^{-i\lambda s} d\lambda \quad ; \quad y^*(\lambda) \rightarrow y(s) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} y^*(\lambda) e^{i\lambda s} d\lambda. \quad (14)$$

Les champs d’interpolation  $u(s,t)$  et  $f(s,t)$  sont alors déduites de  $u^*(\lambda, \omega)$  et  $f^*(\lambda, \omega)$  via (2), (4a) et (14).

En dépit de la contrainte (12), un large choix subsiste cependant pour les fonctions  $\Phi^*(\lambda, \omega)$  et  $f^*(\lambda, \omega)$  dont les analogues  $\Phi(\lambda, \omega)$  en (6) et  $f(\lambda, \omega) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} f_k(\omega) e^{-i\lambda k a}$  sont notamment  $2\pi a^{-1}$ -périodiques en  $\lambda \in a^{-1}\mathbb{C}$ .

Pour restreindre le choix, nous imposons en sus une équivalence des impulsions résultantes des forces extérieures

$$\int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} f(s, \hat{t}) ds d\hat{t} \equiv a \sum_{k \in \mathbb{Z}} \int_0^t f_k(\hat{t}) d\hat{t}, \quad (15)$$

et souhaitons préserver en outre une équivalence entre les travaux des forces extérieures

$$\int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} f(s, \hat{t}) D_{\hat{t}} u(s, \hat{t}) ds d\hat{t} \equiv a \sum_{k \in \mathbb{Z}} \int_0^t f_k(\hat{t}) D_{\hat{t}} u_k(\hat{t}) d\hat{t}.$$

Au sens de la théorie des distributions, il existe alors au moins deux choix naturels de champs de chargement  $f(s,t)$

satisfaisant (15) : la distribution *singulière* (de type peigne de Dirac)

$$f(s, t) \equiv \sum_{k \in \mathbb{Z}} f_k(t) \delta(s/a - k) \text{ pour } (s, t) \in a\mathbb{R} \times \omega_*^{-1}\mathbb{R}, \text{ et } \delta(\eta) \stackrel{\text{def}}{=} D_\eta^2 \frac{|\eta|}{2} \text{ pour } \eta \in \mathbb{R} \quad (16)$$

qui satisfait  $\int_{-\beta a}^{\beta a} f(ka + s, t) ds \equiv a f_k(t)$ ,  $\forall \beta \in ]0, 1[$ , et la distribution *régulière* (si cette *série cardinale converge*)

$$f(s, t) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} f_k(t) \text{sinc}(s/a - k), \text{ pour } (s, t) \in a\mathbb{R} \times \omega_*^{-1}\mathbb{R} \quad (17)$$

qui satisfait  $f(ka, t) = f_k(t)$ . Puisque la distribution de force  $f_k(t)$  peut être arbitraire, la propriété d'interpolation (12) désirée peut être reformulée comme une restriction sur la fonction spectrale d'élasticité et d'inertie  $\Phi^*(\lambda, \omega)$  seul. Ainsi, dans le cas du chargement singulier (16) il semble convenable de prendre pour *mesure de concordance*

$$\int_{-i\omega_b - \infty}^{-i\omega_b + \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i(\lambda ka + \omega t)}}{\Phi^*(\lambda, \omega)} d\lambda d\omega \equiv \int_{-i\omega_b - \infty}^{-i\omega_b + \infty} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{e^{i(\lambda ka + \omega t)}}{\Phi(\lambda, \omega)} d\lambda d\omega \quad (18)$$

et dans le cas du chargement régulier (17)

$$\int_{-\pi/a}^{\pi/a} \int_{-i\omega_b - \infty}^{-i\omega_b + \infty} \frac{e^{i(\lambda ka + \omega t)}}{\Phi^*(\lambda, \omega)} d\omega d\lambda \equiv \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \int_{-i\omega_b - \infty}^{-i\omega_b + \infty} \frac{e^{i(\lambda ka + \omega t)}}{\Phi(\lambda, \omega)} d\omega d\lambda. \quad (19)$$

Ces formulations tiennent compte de l'ordre d'application des transformées (2) et (3) sur l'Eq.(1) et qui permettent d'établir les équivalences

$$G(ka, t) \equiv \frac{1}{4\pi^2} \int_{-i\omega_b - \infty}^{-i\omega_b + \infty} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{e^{i(\lambda ka + \omega t)}}{\Phi(\lambda, \omega)} d\lambda d\omega \quad \text{and} \quad G_K(ka, t) \equiv \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \int_{-i\omega_b - \infty}^{-i\omega_b + \infty} \frac{e^{i(\lambda ka + \omega t)}}{\Phi(\lambda, \omega)} d\omega d\lambda.$$

Avant d'exposer dans les sous-sections suivantes les résultats de ces approches d'interpolations continues, il est important de souligner l'influence des choix de chargements (16) et (17) sur l'approximation fournie par l'équation des ondes classiques (10) pour le champ  $u_k(t)$  donnée en (7). En effet, pour des conditions initiales de repos, on a respectivement pour (16) et (17)

$$u_c(s, t) = \sum_{p \in \mathbb{Z}} \int_0^t G_c(s - pa, t - \hat{t}) \frac{f_p(\hat{t})}{\rho} d\hat{t} \quad \text{et} \quad u_c(s, t) = \sum_{p \in \mathbb{Z}} \int_0^t G_c^*(s - pa, t - \hat{t}) \frac{f_p(\hat{t})}{\rho} d\hat{t}$$

avec les fonctions fondamentales impulsionnelle  $G_c$  donnée en (11) et "pseudo-impulsionnelle"

$$G_c^*(s, t) \stackrel{\text{def}}{=} H(t) \int_0^{\pi/a} \frac{2 \sin(\omega_* t \lambda a / 2) \cos(\lambda s)}{\omega_* \lambda \pi} d\lambda \equiv H(t) \int_0^t \frac{\text{sinc}(\frac{\omega_* \hat{t}}{2} + \frac{s}{a}) + \text{sinc}(\frac{\omega_* \hat{t}}{2} - \frac{s}{a})}{2} d\hat{t}.$$

La figure 3 montre que l'adoption du chargement (17) apporte qualitativement une amélioration relative de la solution des ondes classiques, puisque  $G_c^*$  est continue contrairement à  $G_c$ . Il est également montré dans [7] que cette amélioration est aussi constatable énergétiquement. Cependant, ceci résulte en fait de la *nature non-locale* du chargement (17) qui tente de compenser artificiellement la limitation imposée à la propagation des ondes par le milieu élastique décrit par (10).

### 3.2 L'approche spectrale forte

Pour le type de chargement (17), deux types de fonctions spectrales d'élasticité et d'inertie  $\Phi^*(\lambda, \omega)$  satisfaisant (19) sont proposées dans la littérature (e.g. [8, 13, 25]). L'une correspond à

$$\Phi^*(\lambda, \omega) \equiv \Phi(\lambda, \omega), \quad (20)$$

et l'autre à

$$\Phi^*(\lambda, \omega) \equiv 1_{\mathbb{B}_0}(\lambda) \Phi(\lambda, \omega), \text{ avec } \mathbb{B}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \{\lambda \in a^{-1}\mathbb{C}; |\Re(\lambda)a| \leq \pi\}. \quad (21)$$

Ici  $1_{\mathbb{B}_0}$  représente la fonction indicatrice (ou caractéristique) du domaine complexe  $\mathbb{B}_0$ . La formulation (20) correspond à la modélisation quasi-continue retenue par Eringen [9], tandis que (21) est celle choisie par Kunin [13]. Cependant, pour être exactes et ne pas générer de solutions singulières (voir [7]), les fonctions  $u(s, t)$  et  $f(s, t)$  doivent être limitées aux fonctions d'interpolation de Whittaker-Kotel'nikov-Shannon (WKS)[15, 10], qui sont de même nature que (17), et dont les spectres  $u^*(\lambda, \cdot)$  et  $f^*(\lambda, \cdot)$  ont pour support  $\mathbb{K}$  pour  $\lambda \in a^{-1}\mathbb{R}$ .

L'équation élastodynamique correspondant aux fonctions spectrales (20) et (21) est, pour  $(s, t) \in a\mathbb{R} \times \omega_*^{-1}\mathbb{R}^+$ ,

$$f(s, t) = \rho D_t^2 u(s, t) - \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{X}_s\left(\frac{s - \check{s}}{a}\right) D_{\check{s}}^2 u(\check{s}, t) d\check{s} \quad \Leftrightarrow \quad f(s, t) = \rho D_t^2 u(s, t) + \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{L}_s\left(\frac{s - \check{s}}{a}\right) u(\check{s}, t) d\check{s} \quad (22)$$

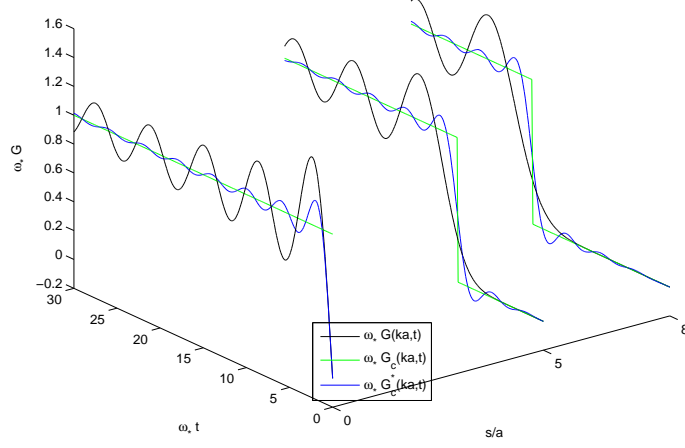


FIGURE 3 – Comparaison des fonctions  $G(ka, t)$ ,  $G_c(ka, t)$  et  $G_c^*(ka, t)$  pour  $(k, t) \in \mathbb{Z} \times \omega_*^{-1} \mathbb{R}^+$ .

avec (17) et les fonctions d'élasticité

$$\mathcal{X}_s(\eta) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Phi^*(\lambda, 0)}{\lambda^2} e^{i\eta\lambda a} d\lambda \quad \text{et} \quad \mathcal{L}_s(\eta) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(\lambda, 0) e^{i\lambda\eta a} d\lambda.$$

L'extension (20) conduit alors aux fonctions d'élasticité suivants pour  $\eta \in \mathbb{R}$

$$\mathcal{X}_s(\eta) = \frac{\alpha}{a} \frac{|\eta+1| + |\eta-1| - 2|\eta|}{2} \equiv \frac{\alpha}{a} \mathbf{H}(1-|\eta|) [1-|\eta|] \quad (23a)$$

$$\mathcal{L}_s(\eta) = \frac{\alpha}{a^3} [2\delta(\eta) - \delta(\eta+1) - \delta(\eta-1)]. \quad (23b)$$

En fait, l'équation intrégo-différentielle (22) doté du noyau d'élasticité (23b) s'exprime plus simplement selon

$$f(s, t) = \rho D_t^2 u(s, t) - \alpha \frac{u(s+a, t) + u(s-a, t) - 2u(s, t)}{a^2}.$$

A l'instar des modèles de même type développés dans [28, 29], l'absence de la différentiation spatiale  $D_s u(s; t)$  dans cette équation entraîne que ses solutions  $u(s; t)$  sont continues seulement si les chargements  $f(s, t)$ , ainsi que les conditions initiales et de frontière, sont suffisamment réguliers ; de ce fait, ceci exclut notamment les champs de force du type (16).

L'extension (21), quant à elle, conduit aux fonctions d'élasticité suivants pour  $\eta \in \mathbb{R}$

$$\mathcal{X}_s(\eta) = \frac{\alpha}{a} \left[ (\eta+1)\tilde{\text{Si}}(\eta+1) + (\eta-1)\tilde{\text{Si}}(\eta-1) - 2\eta\tilde{\text{Si}}(\eta) - \frac{4\cos(\eta\pi)}{\pi^2} \right] \quad \text{avec} \quad \tilde{\text{Si}}(\eta) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^\eta \text{sinc}(\tilde{\eta}) d\tilde{\eta} \quad (24a)$$

$$\mathcal{L}_s(\eta) = \frac{4\alpha}{a^3} \frac{\eta^2 - 1/2}{\eta^2 - 1} \text{sinc}(\eta). \quad (24b)$$

L'utilisation de l'équation intrégo-différentielle (22) avec les noyaux (24) implique des domaines d'intégration infinis, et de ce fait n'est variationnellement valable que pour des domaines non-bornés.

Pour le chargement (17) et des conditions initiales de repos, la solution formelle de l'équation dynamique (22) s'exprime pour les deux choix de  $\Phi^*(\lambda, \omega)$  selon

$$u(s, t) \equiv \sum_{p \in \mathbb{Z}} \int_0^t G_K(s - pa, t - \hat{t}) \frac{f_p(\hat{t})}{\rho} d\hat{t}$$

avec  $G_K$  donnée en (9) pour solution fondamentale "pseudo-impulsionnelle".

### 3.3 L'approche spectrale faible

La seconde formulation (16) et (18) est basée sur une approximation spectrale multi-polaire faible (WMPA, qui est comparable à une approximation de Padé multi-points) développée dans [6, 7] en s'inspirant de la décomposition fractionnaire de Mittag-Leffler de la fonction méromorphe  $[\Phi(\lambda, \omega)]^{-1}$  dans  $a^{-1}\mathbb{C} \times \omega_*\mathbb{C}$ . Le résultat finale donne la fonction suivante pour approximation faible [7]

$$\Phi^*(\lambda, \omega) = \alpha [\lambda^2 - \lambda_o^2] \text{sinc}(\lambda_o a / \pi), \quad \forall (\lambda, \omega) \in a^{-1}\mathbb{C} \times \omega_*\mathbb{C} \setminus \mathbb{C}. \quad (25)$$

Par transformations inverses de l'équation spectrale (13) avec ce noyau, l'équation du mouvement dynamique s'exprime finalement de la manière suivante pour  $(s, t) \in a\mathbb{R} \times \omega_*^{-1}\mathbb{R}^+$

$$\begin{aligned} f(s, t) = & \Upsilon_1(0^+) D_t^2 u(s, t) - \Upsilon_2(0^+) D_s^2 u(s, t) + \left[ 1 + \frac{1}{\omega_*^2} D_t^2 \right] \int_0^t D_t \Upsilon_1(t - \hat{t}) D_{\hat{t}}^2 u(s, \hat{t}) d\hat{t} \\ & + D_t \int_0^t \Upsilon_2(t - \hat{t}) \left[ 1 + \frac{1}{\omega_*^2} D_{\hat{t}}^2 \right] D_s^2 u(s, \hat{t}) d\hat{t}. \end{aligned} \quad (26a)$$

avec

$$\Upsilon_1(t) \equiv \tilde{\Upsilon}_1(\omega_* t) \stackrel{\text{def}}{=} \rho \left\{ 1 - \int_{\omega_*}^{\infty} \frac{\omega_* \cos(\omega_r t)}{\omega_r^2 \sqrt{\frac{\omega_r^2}{\omega_*^2} - 1}} d\omega_r \right\}, \quad (26b)$$

$$\Upsilon_2(t) \equiv \tilde{\Upsilon}_2(\omega_* t) \stackrel{\text{def}}{=} \alpha \left\{ 1 - \int_{\omega_*}^{\infty} \frac{4 \cos(\omega_r t) d\omega_r}{\omega_* \left[ \frac{a^2}{l_+^2} + \pi^2 \right] \sqrt{\frac{\omega_r^2}{\omega_*^2} - 1}} \right\}. \quad (26c)$$

L'équation élastodynamique classique (10) se déduit de (26) en notant que  $\tilde{\Upsilon}_1(+\infty) \equiv \rho$ ,  $\tilde{\Upsilon}_2(+\infty) \equiv \alpha$  et en passant à la limite avec  $(a, \omega_*^{-1}) \rightarrow (0, 0)$  et tout en conservant  $\omega_* a = 2c$  fini. Le modèle continu régi par (26) possède une inertie interne et une élasticité complexe rappelant plus ou moins la modélisation de *milieux continus enrichis en propriétés héréditaires* proposée dans [21]. Cependant à l'instar du modèle discret, ce modèle continu reste spatialement local (ce qui sous-entend que les conditions aux limites le seront également) et ne requiert seulement que les conditions initiales classiques. De ce fait, une comparaison analytique entre les prédictions de ce modèle dynamique et de celles d'une chaîne finie sous différentes conditions de chargement est possible et sera présentée dans une publication ultérieure. Enfin, contrairement à ceux de la sous-section 3.2, le modèle (26) admet les chargements singuliers. En particulier, pour le chargement (16) et des conditions initiales de repos, la solution formelle de l'équation dynamique (26) s'exprime selon

$$u(s, t) \equiv \sum_{p \in \mathbb{Z}} \int_0^t G(s - pa, t - \hat{t}) \frac{f_p(\hat{t})}{\rho} d\hat{t}$$

avec  $G(s, t)$  donnée en (8) pour solution fondamentale impulsionnelle.

## 4 Discussion

Nous avons proposé une analyse du mouvement d'un modèle discret, de sa réponse impulsionnelle et de ses propriétés spatio-temporelles et spectrales. A la différence des précédentes analyses [4, 11, 13, 16, 17, 18, 26], la nôtre repose sur une utilisation précise des outils mathématiques d'analyses (spectrales de Fourier et Laplace, complexe, et des distributions tempérées) des milieux continus. Notre analyse montre en particulier que *différentes formulations d'interpolations continues exactes sont possibles, mais avec des avantages et des inconvénients*.

En termes de couplage numérique [19, 20, 22, 23, 24, 30, 27], la méthode de continualisation (nonlocale en espace) d'Eringen et de Kunin (EKA) sur l'espace des fonctions d'interpolation de WKS peut être classée dans la catégorie des méthodologies supposant l'existence d'une énergie lagrangienne (cf. [7]), et la méthode de continualisation WMPA (nonlocale en temps) dans la catégorie basée sur les efforts (et les puissances virtuelles). Toutes deux font intervenir cependant différentes échelles de longueurs ou de temps non-arbitraires, liées aux propriétés dispersives et d'atténuation structurelles des interactions atomiques [4]. Pour un domaine non-borné (qui est assimilable à un domaine énergétiquement ouvert), le champ de déplacement du modèle générique discret est interpolable, selon la WMPA, en superposant deux contributions cinématiques : l'une, dite *prédictive* (qui ne tient compte que des basses pulsations  $\omega \leq \omega_*$ ), correspond à la solution de la EKA (cf. figure 2(b)) qui, pour les temps croissants, converge vers la solution classique de la théorie des milieux continus élastiques ; l'autre, dite *corrective*, (cf. figure 2(a)) a pour effet de restreindre les oscillations du premier champ (cf. figure 2(c)) en s'annulant pour les temps croissants. Il est montré ici d'autre part qu'une *amélioration de l'approximation grossière de la théorie de l'élasticité classique est possible en prenant en compte artificiellement la simultanéité de la réponse atomique*, associée à la violation de la causalité d'Einstein. Il apparait de plus que ce comportement non-trivial peut-être interprété dans une modélisation continue par la *présence de forces inertielles et pseudo-dissipatives post-newtoniennes* ignorées par certaines méthodes de couplage numérique multi-échelle. Pour finir, il est à rappeler qu'en général le couplage numérique entre milieux discrets ou moléculaires et ceux continus modélisés par la mécanique classique reste une tâche non-triviale : *les hautes fréquences des mouvements dynamiques ne peuvent être représentées par la discrétisation des équations de la mécanique classique* ; les modes de hautes fréquences issus des milieux discrets ne pourront éviter d'être réfléchis par les interfaces mobiles (comme les fronts de discontinuité) ou fixes (telles celles qui les séparent de domaines modélisés par la mécanique classique des milieux continus) au lieu d'être transmis [2, 23, 24, 30]. D'où la *nécessité d'un enrichissement des milieux continus*.



## Références

- [1] M. ABRAMOWITZ and I. A. STEGUN. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, New York : Dover Publications, ISBN 978-0-486-61272-0, eds. 1972.
- [2] S.A. ADELMAN, J.D. DOLL. *Generalized Langevin equation approach for atom/solid-surface scattering : General formulation for classical scattering off harmonic solids*, J. Chem. Phys. , 64(4), pages 2375-2388, 1976.
- [3] H. ASKES, A.V. METRIKINE, A.V. PICHUGIN and T. BENNETT. *Four simplified gradient elasticity models for the simulation of dispersive wave propagation*, Philosophical Magazine, vol 88(28-29), pages 3415-3443, 2008.
- [4] L. BRILLOUIN, M. PARODI. *Propagation des ondes dans les milieux périodiques*, Masson, Dunod, Paris, 1956.
- [5] M. CHARLOTTE and L. TRUSKINOVSKY. *Linear chain with a hyper-pre-stress*, J. Mech. Phys. Solids, 50, pages 217-251, 2002.
- [6] M. CHARLOTTE and L. TRUSKINOVSKY. *Towards multi-scale continuum elasticity theory*, Cont. Mech. Thermodyn., 20, pages 133-161, 2008.
- [7] M. CHARLOTTE and L. TRUSKINOVSKY. *Lattice dynamics from a continuum viewpoint*, Soumis en Janvier 2011.
- [8] A.C. ERINGEN. *Linear theory of nonlocal elasticity and dispersion of plane waves*, Int. J. Eng. Sci., 10, pages 425-435, 1972.
- [9] A.C. ERINGEN. *Nonlocal field theories*, In Continuum Physics (Edited by A.C. Eringen), Academic press, New York, 4, pages 205-267, 1976.
- [10] J.R. HIGGINS. *Sampling Theory in Fourier and Signal Analysis. Foundations*, Clarendon Press, Oxford, 1996.
- [11] J.D. KAPLUNOV and A.V. PICHUGIN. *On rational boundary conditions for higher-order long-wave models*, IUTAM Symposium on Scaling in Solid Mechanics, IUTAM Bookseries, Vol 10, pages 81-90, 2009.
- [12] P.G. KEVREKIDIS, I.G. KEVREKIDIS, A.R. BISHOP and E.S. TITI. *Continuum approach to discreteness*, Phys. Rev. E, Nonlinear Soft Matter Phys., vol 65, No4, 046613.1-046613.13, 2002.
- [13] I. KUNIN. *Elastic media with microstructure, v.I (One dimensional models)*. Berlin : Springer, 1982.
- [14] A.A. MARADUDIN, E.W. MONTROLL, G.H. WEISS and I.P. IPATOVA. *Theory of lattice dynamics in the harmonic approximation*. Academic Press, New-York, 1971.
- [15] R. J. II MARKS. *Introduction to Shannon Sampling and Interpolation Theory*. Springer-Verlag, New York, 1991.
- [16] A. METRIKINE and H. ASKES. *One-dimensional dynamically consistent gradient elasticity models derived from a discrete microstructure, Part1 : generic formulation*. European J. Mech. A/ Solids, 21, pages 555-572, 2002.
- [17] A. METRIKINE and H. ASKES. *One-dimensional dynamically consistent gradient elasticity models derived from a discrete microstructure, Part2 : static and dynamic response*. European J. Mech. A/ Solids, 21, pages 573-588, 2002.
- [18] A. METRIKINE. *On causality of the gradient elasticity models*, J. Sound and Vibration, 297, pages 727-742, 2006.
- [19] R.E. MILLER and E.B. TADMOR. *The quasi-continuum method : overview, applications and current directions*. J. Computer-Aided Materials Design, 9, pages 203-239, 2002.
- [20] R. MILLER and E.B. TADMOR. *A unified framework and performance benchmark of fourteen multiscale atomistic/continuum coupling methods*. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., vol 17, n5, 2009.
- [21] MILTON G.W. and WILLIS J.R., 2007, "On modifications of Newton's second law and linear continuum elastodynamics". *Proc. R. Soc. A* ,463, 855-880
- [22] M. ORTIZ, R. PHILIPS and E.B. TADMOR. *Quasicontinuum analysis of defects in solids*, Phil. Mag. A, vol 73, pages 1529-1563, 1996.
- [23] H.S. PARK, W.K. LIU. *An introduction and tutorial on multi-scale analysis in solids*, Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg., 193, pages 1733-1772, 2004.
- [24] PARK H.S., KARPOV E.G., LIU W.K. and KLEIN P.A.. *The bridging scale for two-dimensional atomistic/continuum coupling*, Philosophical Magazine, Taylor & Francis, Vol. 85, No. 1, 1, pages 79-113, 2005.
- [25] D. ROGULA. *Introduction to nonlocal theory of material media in : Nonlocal theory of elastic media*, CISM Courses, Springer, Berlin, 268, 123-222, 1982.
- [26] P. ROSENAU. *Hamiltonian dynamics of dense chains and lattices : or how to correct the continuum*, Phys. Lett. A, 311, pages 39-52, 2003.
- [27] V. B. SHENOY, R. MILLER, E.B. TADMOR, D. RODNEY, R. PHILLIPS, and M. ORTIZ. *An adaptive methodology for atomic scale mechanics : The quasicontinuum method*, J. Mech. Phys. Sol., 47, pages 611-642, 1999.
- [28] S.A. SILLING. *Reformulation of elasticity theory for discontinuities and long-range forces*, J. Mech. Phys. Solids, 48, pages 175-209, 2000.
- [29] S.A. SILLING. *Peridynamic Theory of Solid Mechanics*, Advanced in Applied Mech., vol. 44, pages 73-168, 2010.
- [30] S. TANG , T.Y. HOU and W.K. LIU. *A mathematical framework of the bridging scale method*, Int. J. Numer. Meth. Engrg., 65, pages 1688-1713, 2006.