

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

M. Charlotte¹, L. Truskinovsky²

¹ Université de Toulouse, Institut Clément ADER, ISAE, {miguél.charlotte}@isae.fr

² LMS, Ecole Polytechnique, France, trusk@lms.polytechnique.fr

Résumé —

Le comportement dynamique non-trivial d'une simple chaîne monoatomique linéairement élastiques 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 Résumé

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 [2, 4, 8]. 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 macroscopiques, de nombreuses approches numériques (FEM, XFEM, Discrete Galerkin Method, SPH, Quasicontinuum 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 discrete, vue qu'elle n'est supposée traiter que les ondes longues et à basses fréquences. Ainsi, de nombreux effets physiques importants (tels que les micro-instabilités, les oscillations non-compatibles avec l'hypothèse monochamp continu, les lacunes acoustiques, la dispersion, l'amortissement structural et la localisation de mode de vibration, 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.

Dans le but de fournir une illustration théorique 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 [13], nous re-analysons et traduisons en modèles (quasi-)continus le comportement dynamique non-trivial d'une simple chaîne monoatomique linéairement élastique. Ce modèle académique possède certaines propriétés dispersives/dynamiques (violant même l'interprétation de causalité d'Einstein dans le cas d'un domaine non-borné, selon les critères dans [1, 11]) qui sont peu ou mal connues dans la littérature. A la différence des précédentes analyses [2, 6, 8, 9, 10, 11, 15], 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 complète de la solution discrète, de sa réponse impulsionnelle et de ses propriétés spatio-temporelles et spectrales montre, en particulier, que deux formulations d'interpolations continues exactes sont possibles. L'une correspond au quasi-continuum d'Eringen et de Kunin (EKA)[5, 8] qui, basée sur les fonctions d'interpolation de Whittaker-Shannon-Kotel'nikov, n'est valable que pour des domaines non-bornés; l'autre est basée sur une approximation spectrale multi-polaire faible (WMPA, qui est comparable à une approximation de Padé multi-points) développée dans [4]. En termes de couplage numérique [12, 13, 14, 16], la première méthode de continualisation peut être classée dans la catégorie des méthodologies supposant l'existence d'une énergie lagrangienne, et la seconde 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. 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 grossière, correspond à la solution de la EKA (cf. figure 1(a)) qui,

pour les temps croissants, converge vers la solution classique de la théorie des milieux continus élastiques ; l'autre, dite corrective, (cf. figure 1(c)) a pour effet de restreindre les oscillations du premier champ (cf. figure 1(b)) en s'annulant pour les temps croissants. Nous montrons d'autre part qu'une amélioration de l'approximation 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. Nous démontrons 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.

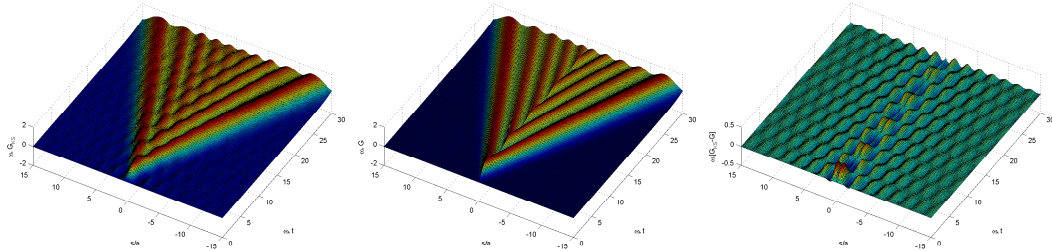


FIGURE 1 – a) La pseudo-réponse impulsionnelle $G_{KS}(s,t)$ de la EKA (gauche); b) la réponse impulsionnelle $G(s,t)$ de la WMPA (centre); c) leur différence $G_{KS}(s,t) - G(s,t)$ (droite).

Références

- [1] 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.
- [2] L. BRILLOUIN, M. PARODI. “Propagation des ondes dans les milieux periodiques”. *Masson, Dunod, Paris*, 1956.
- [3] M. CHARLOTTE and L. TRUSKINOVSKY. “Linear chain with a hyper-pre-stress”. *J. Mech. Phys. Solids*, 50, pages 217-251, 2002.
- [4] M. CHARLOTTE and L. TRUSKINOVSKY. “Towards multi-scale continuum elasticity theory”. *Cont. Mech. Thermodyn.*, 20, pages 133-161, 2008.
- [5] A.C. ERINGEN. “Nonlocal field theories”. In *Continuum Physics* (Edited by A.C. Eringen), Academic press, New York, 4, pages 205-267, 1976.
- [6] 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.
- [7] 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.
- [8] I. KUNIN, 1982, “Elastic media with microstructure, v.I (One dimensional models)”. *Berlin : Springer*.
- [9] A. METRIKINE and H. ASKES. “One-dimensional dynamically consistent gradient elasticity models derived from a discrete microstructure. Part 1 : generic formulation”. *European J. Mech. A/ Solids*, 21, pages 555-572, 2002.
- [10] 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.
- [11] A. METRIKINE “On causality of the gradient elasticity models”. *J. Sound and Vibration*, 297, pages 727-742, 2006.
- [12] 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.
- [13] 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.
- [14] M. ORTIZ, R. PHILIPS and E.B. TADMOR “Quasicontinuum analysis of defects in solids”. *Phil. Mag. A*, vol 73, pages 1529-1563, 1996.
- [15] P. ROSENAU. “Hamiltonian dynamics of dense chains and lattices : or how to correct the continuum”. *Phys. Lett. A*, 311, pages 39-52, 2003.
- [16] 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.