

Quelques modèles effectifs pour la modélisation de matériaux à l'échelle atomistique à température finie

F. Legoll ¹

On s'intéresse dans ce travail à la simulation de matériaux à l'échelle atomistique, à température finie, dans le cadre de la physique statistique. Les grandeurs pertinentes à l'échelle macroscopique sont alors des moyennes de certaines quantités (les observables) par rapport à la mesure de Boltzmann (toutes les configurations contribuent à la moyenne macroscopique, mais avec des poids différents en fonction de leur énergie).

Souvent, les observables d'intérêt ne dépendent que d'un petit nombre de particules dans le système. C'est par exemple le cas lorsqu'on s'intéresse à la longueur moyenne d'un matériau mono-dimensionnel soumis à une certaine force. Il est alors intéressant de construire une stratégie numérique permettant de calculer plus efficacement la moyenne de telles observables.

Nous décrivons quelques progrès récents sur ces questions, dans un cadre statique (obtenant ainsi la loi de comportement macroscopique de certains matériaux, à température finie) et dynamique, si le temps le permet. Les résultats obtenus seront illustrés numériquement.

Travail en collaboration avec X. Blanc (Univ. Paris 6), C. Le Bris (ENPC), T. Lelièvre (ENPC) et C. Patz (WIAS).

Références

- [1] X. Blanc, C. Le Bris, F. Legoll et C. Patz, Finite-temperature coarse-graining of one-dimensional models : mathematical analysis and computational approaches, *Journal of Nonlinear Science*, vol. 20 (2), 241-275 (2010).
- [2] F. Legoll et T. Lelièvre, Effective dynamics using conditional expectations, *Nonlinearity*, vol. 23 (9), 2131-2163 (2010).
- [3] F. Legoll et T. Lelièvre, Some remarks on free energy and coarse-graining, arxiv preprint 1008.3792 et HAL 00511221.

¹Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, legoll@lami.enpc.fr