

## **A propos des verrous dans la description fine de la structure et mécanique des matériaux aux échelles sub-nanométrique, nanométrique et micrométrique**

**Francisco Chinesta<sup>1</sup> et Amine Ammar<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> LMSP (Laboratoire de Mécanique des Systèmes et des Procédés)  
UMR CNRS - ENSAM - ESEM  
151 Boulevard de l'Hôpital, F-75013 Paris, France  
francisco.chinesta@paris.ensam.fr

<sup>2</sup> Laboratoire de Rhéologie  
UMR CNRS - INPG - UJF  
1301 rue de la piscine, BP 53 Domaine universitaire, F-38041 Grenoble Cedex 9, France  
amine.ammar@ujf-grenoble.fr

**Jeudi 24 Janvier 2008 à 14h00**

INSA Lyon - Amphithéâtre M. Godet  
Bâtiment J. d'Alembert, 18-20 rue des Sciences, Villeurbanne

La description fine des matériaux nécessite de lever un certain nombre de verrous dont plusieurs sont à caractère numérique. Pour s'affranchir de telles descriptions il faudrait sans doute mettre en place des modélisations multi-échelles avec l'établissement de passerelles performantes entre les modèles aux différentes échelles. La description la plus fine a lieu à l'échelle atomique où la mécanique quantique permet, à priori, d'aboutir à la définition des potentiels interatomiques nécessaires pour mettre en place des simulations de type dynamique moléculaire. Aujourd'hui, la résolution de l'équation de Schrödinger, avec son caractère hautement multidimensionnel reste encore un problème ouvert dans des configurations représentatives des systèmes physiques étudiés, même si différentes approches plus ou moins performantes existent. Les simulations de type dynamique moléculaire (simulations discrètes par nature) nécessitent la considération d'un grand nombre d'atomes, de pas de temps très (parfois excessivement) petits et de potentiels d'interaction parfois incertains. Pour alléger les calculs, des modélisations plus grossières ont vu le jour : la méthode DPD où les noyaux de la dynamique moléculaires sont substitués par des ensembles d'atomes ; les méthodes issues de la dynamique Brownienne (Langevin, « Brownian configurations fields » ...) où la simulation se focalise sur certaines entités et l'effet des autres volontairement « oubliées » est pris en compte par des actions aléatoires. A l'échelle au dessus, nous revenons sur le milieu continu, où les entités physiques perdent leurs identités et les modèles résultants deviennent décrits à partir d'une fonction de distribution définie sur l'espace physique (l'espace tridimensionnel traditionnel), l'espace temporel et l'espace des configurations comme par exemple l'espace des vitesses pour les modèles des systèmes composés de particules chargées ou non (Boltzmann, Vlasov-Poisson-Boltzmann) ou les espaces des conformations moléculaires (formalisme de Fokker-Planck). Entre cette échelle microscopique et l'échelle macroscopique, une passerelle doit être définie, celle-ci capable de représenter les extra-contraintes d'origine microscopique. Dans le cas des macromolécules, le fait de négliger les effets d'inertie permet d'aboutir facilement à la définition du tenseur des extra-contraintes (règle de Kramer). Dans d'autres systèmes, le passage est plus délicat et constitue un sujet actuel de recherche. Récemment la description fine des matériaux a connu un véritable progrès à la suite de l'introduction des techniques stochastiques ainsi que des techniques numériques capables de s'affranchir des difficultés liées au caractère multidimensionnel des modèles ou au grand nombre de ddl. Cette avancée pourrait permettre une modélisation allant de l'échelle quantique à l'échelle macroscopique qui n'était, jusqu'à présent, jamais imaginée.