

Dynamique des dislocations et mouvement par courbure moyenne

Nicolas Forcadel

ENPC, CERMICS

Travail en collaboration avec F. Da Lio et R. Monneau

February 9, 2006

Plan

- 1 Motivations physiques
- 2 Description mathématique du problème
- 3 Convergence de la dynamique des dislocations vers le mouvement par courbure moyenne
- 4 Origine variationnelle du mouvement par courbure moyenne anisotrope
- 5 Travaux en cours

Plan

- 1 Motivations physiques
- 2 Description mathématique du problème
- 3 Convergence de la dynamique des dislocations vers le mouvement par courbure moyenne
- 4 Origine variationnelle du mouvement par courbure moyenne anisotrope
- 5 Travaux en cours

Plan

- 1 Motivations physiques
- 2 Description mathématique du problème
- 3 Convergence de la dynamique des dislocations vers le mouvement par courbure moyenne
- 4 Origine variationnelle du mouvement par courbure moyenne anisotrope
- 5 Travaux en cours

Plan

- 1 Motivations physiques
- 2 Description mathématique du problème
- 3 Convergence de la dynamique des dislocations vers le mouvement par courbure moyenne
- 4 Origine variationnelle du mouvement par courbure moyenne anisotrope
- 5 Travaux en cours

Plan

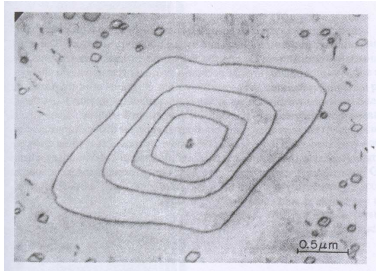
- 1 Motivations physiques
- 2 Description mathématique du problème
- 3 Convergence de la dynamique des dislocations vers le mouvement par courbure moyenne
- 4 Origine variationnelle du mouvement par courbure moyenne anisotrope
- 5 Travaux en cours

Plan

- 1 Motivations physiques
- 2 Description mathématique du problème
- 3 Convergence de la dynamique des dislocations vers le mouvement par courbure moyenne
- 4 Origine variationnelle du mouvement par courbure moyenne anisotrope
- 5 Travaux en cours

Observation des dislocations

Dislocations dans un alliage métallique Al-Mg

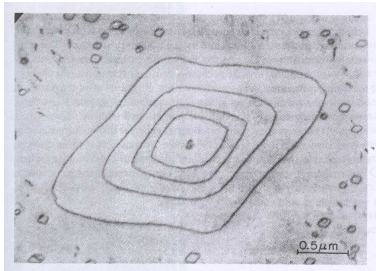


Définition : Une dislocation est une ligne de défauts cristallins.

But : Modélisation du comportement plastique des cristaux.

Observation des dislocations

Dislocations dans un alliage métallique Al-Mg



Définition : Une dislocation est une ligne de défauts cristallins.

But : Modélisation du comportement plastique des cristaux.

Historique

- 1934 : Introduction du concept de dislocation pour expliquer la plasticité [Orowan / Polanyi / Taylor]
- 1956 : Première observation de dislocations
- ~ 1970 : Traité sur l'équilibre des dislocations [Nabarro / Hirth & Lothe,...]
- depuis 1990 : Simulation numérique de la dynamique des dislocations

Historique

- 1934 : Introduction du concept de dislocation pour expliquer la plasticité [Orowan / Polanyi / Taylor]
- 1956 : Première observation de dislocations
- ~ 1970 : Traité sur l'équilibre des dislocations [Nabarro / Hirth & Lothe,...]
- depuis 1990 : Simulation numérique de la dynamique des dislocations

Historique

- 1934 : Introduction du concept de dislocation pour expliquer la plasticité [Orowan / Polanyi / Taylor]
- 1956 : Première observation de dislocations
- ~ 1970 : Traité sur l'équilibre des dislocations [Nabarro / Hirth & Lothe,...]
- depuis 1990 : Simulation numérique de la dynamique des dislocations

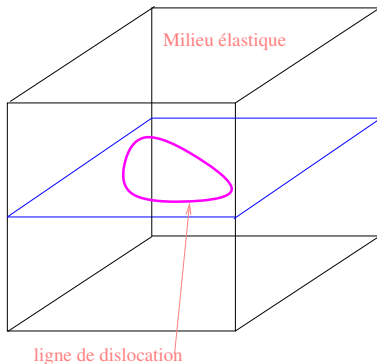
Historique

- 1934 : Introduction du concept de dislocation pour expliquer la plasticité [Orowan / Polanyi / Taylor]
- 1956 : Première observation de dislocations
- ~ 1970 : Traité sur l'équilibre des dislocations [Nabarro / Hirth & Lothe,...]
- depuis 1990 : Simulation numérique de la dynamique des dislocations

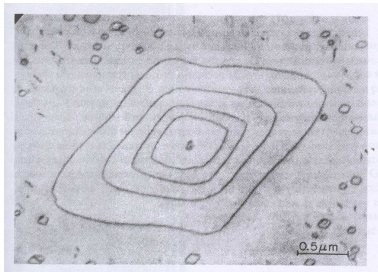
Plan

- 1 Motivations physiques
- 2 Description mathématique du problème
- 3 Convergence de la dynamique des dislocations vers le mouvement par courbure moyenne
- 4 Origine variationnelle du mouvement par courbure moyenne anisotrope
- 5 Travaux en cours

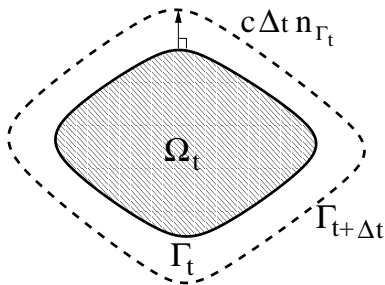
Modèle continue 3D



Modélisation d'une dislocation

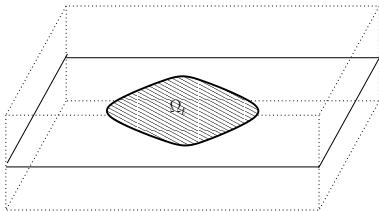


Dynamique d'une dislocation



$$\frac{d\Gamma_t}{dt} = c n_{\Gamma_t} \quad \text{avec} \quad c = c(\Gamma_t)$$

Modélisation d'une dislocation



$$\rho(t, x_1, x_2) = \begin{cases} 1 & \text{si } (x_1, x_2) \in \Omega_t \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Modélisation d'une dislocation

- Vitesse non-locale :

$$\frac{d\Gamma_t}{dt} = c n_{\Gamma_t} \quad \text{avec} \quad c = \bar{c}_0 \star \rho$$

où \bar{c}_0 est un noyau de convolution.

- Equation Level Set :

$$u_t = (\bar{c}_0 \star 1_{\{u>0\}}) |Du|$$

Modélisation d'une dislocation

- Vitesse non-locale :

$$\frac{d\Gamma_t}{dt} = c n_{\Gamma_t} \quad \text{avec} \quad c = \bar{c}_0 \star \rho$$

où \bar{c}_0 est un noyau de convolution.

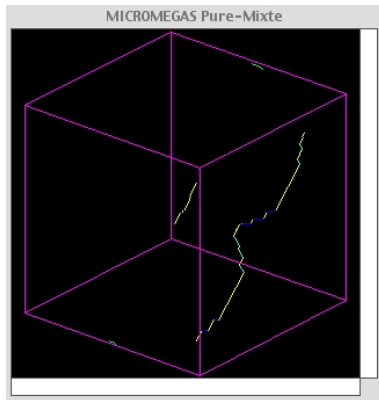
- Equation Level Set :

$$u_t = (\bar{c}_0 \star 1_{\{u>0\}}) |Du|$$

Plan

- 1 Motivations physiques
- 2 Description mathématique du problème
- 3 Convergence de la dynamique des dislocations vers le mouvement par courbure moyenne
- 4 Origine variationnelle du mouvement par courbure moyenne anisotrope
- 5 Travaux en cours

Modélisation d'une dislocation



Noyau particulier

- Hypothèse : la partie négative de \bar{c}_0 est concentrée en un point, *i.e.*

$$\bar{c}_0 = c_0 - \left(\int_{\mathbb{R}^n} \bar{c}_0 \right) \delta_0$$

- Formellement,

$$c = c_0 \star \rho - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^n} c_0$$

- Noyau Particulier :

$$c_0 \in L^\infty(\mathbb{R}^n), \quad \begin{cases} c_0(x) = \frac{1}{|x|^{n+1}} g\left(\frac{x}{|x|}\right) & \text{if } |x| > 1 \\ c_0(-x) = c_0(x) \end{cases}$$

Noyau particulier

- Hypothèse : la partie négative de \bar{c}_0 est concentrée en un point, *i.e.*

$$\bar{c}_0 = c_0 - \left(\int_{\mathbb{R}^n} \bar{c}_0 \right) \delta_0$$

- Formellement,

$$c = c_0 \star \rho - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^n} c_0$$

- Noyau Particulier :

$$c_0 \in L^\infty(\mathbb{R}^n), \quad \begin{cases} c_0(x) = \frac{1}{|x|^{n+1}} g\left(\frac{x}{|x|}\right) & \text{if } |x| > 1 \\ c_0(-x) = c_0(x) \end{cases}$$

Noyau particulier

- Hypothèse : la partie négative de \bar{c}_0 est concentrée en un point, *i.e.*

$$\bar{c}_0 = c_0 - \left(\int_{\mathbb{R}^n} \bar{c}_0 \right) \delta_0$$

- Formellement,

$$c = c_0 \star \rho - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^n} c_0$$

- Noyau Particulier :

$$c_0 \in L^\infty(\mathbb{R}^n), \quad \begin{cases} c_0(x) = \frac{1}{|x|^{n+1}} g\left(\frac{x}{|x|}\right) & \text{if } |x| > 1 \\ c_0(-x) = c_0(x) \end{cases}$$

Rescaling

- Pour $\varepsilon > 0$, on définit

$$\rho^\varepsilon(x, t) = \rho\left(\frac{x}{\varepsilon}, \frac{t}{\varepsilon^2 |\ln \varepsilon|}\right)$$

- Cela implique, par changement de variable:

$$\rho_t^\varepsilon = \left((c_0^\varepsilon \star \rho^\varepsilon)(x) - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^n} c_0^\varepsilon \right) |D\rho^\varepsilon|$$

avec

$$c_0^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^{n+1} |\ln \varepsilon|} c_0\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)$$

Rescaling

- Pour $\varepsilon > 0$, on définit

$$\rho^\varepsilon(x, t) = \rho\left(\frac{x}{\varepsilon}, \frac{t}{\varepsilon^2 |\ln \varepsilon|}\right)$$

- Cela implique, par changement de variable:

$$\rho_t^\varepsilon = \left((c_0^\varepsilon \star \rho^\varepsilon)(x) - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^n} c_0^\varepsilon \right) |D\rho^\varepsilon|$$

avec

$$c_0^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^{n+1} |\ln \varepsilon|} c_0\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)$$

Rescaling

- Pour $\varepsilon > 0$, on définit

$$\rho^\varepsilon(x, t) = \rho\left(\frac{x}{\varepsilon}, \frac{t}{\varepsilon^2 |\ln \varepsilon|}\right)$$

- Cela implique, par changement de variable:

$$\rho_t^\varepsilon = \left((c_0^\varepsilon \star \rho^\varepsilon)(x) - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^n} c_0^\varepsilon \right) |D\rho^\varepsilon|$$

avec

$$c_0^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^{n+1} |\ln \varepsilon|} c_0\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)$$

Formulation Slepčev

- On considère les solutions u^ε de :

$$\begin{cases} u_t^\varepsilon(x, t) = \left((c_0^\varepsilon \star 1_{\{u^\varepsilon(\cdot, t) > u^\varepsilon(x, t)\}}) (x) - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^n} c_0^\varepsilon \right) |Du^\varepsilon| \\ u^\varepsilon(\cdot, 0) = u_0(\cdot) \end{cases}$$

Définition des solutions

Définition

- On dit que u^ε est sous-solution si $u^\varepsilon(\cdot, t=0) \leq u_0$ et pour tout (x_0, t_0) et pour toute fonction test $\Phi \in C^1(\mathbb{R}^n \times (0, T))$, tangente supérieurement à u^ε en (x_0, t_0) , on a :

$$\Phi_t \leq \left((c_0 \star 1_{\{u^\varepsilon(\cdot, t_0) \geq u^\varepsilon(x_0, t_0)\}})(x_0) - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^n} c_0^\varepsilon \right) |D\Phi|$$

Définition des solutions

Définition

- On dit que u^ε est sur-solution si $u^\varepsilon(\cdot, t = 0) \geq u_0$ et pour tout (x_0, t_0) et pour toute fonction test $\Phi \in C^1(\mathbb{R}^n \times (0, T))$, tangente inférieurement à u^ε en (x_0, t_0) , on a :

$$\Phi_t \geq \left((c_0 \star 1_{\{u^\varepsilon(\cdot, t_0) > u^\varepsilon(x_0, t_0)\}})(x_0) - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^n} c_0^\varepsilon \right) |D\Phi|.$$

- On dit que u^ε est une solution si, et seulement si, c'est une sous et une sur-solution.

Définition des solutions

Définition

- On dit que u^ε est sur-solution si $u^\varepsilon(\cdot, t = 0) \geq u_0$ et pour tout (x_0, t_0) et pour toute fonction test $\Phi \in C^1(\mathbb{R}^n \times (0, T))$, tangente inférieurement à u^ε en (x_0, t_0) , on a :

$$\Phi_t \geq \left((c_0 \star 1_{\{u^\varepsilon(\cdot, t_0) > u^\varepsilon(x_0, t_0)\}})(x_0) - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^n} c_0^\varepsilon \right) |D\Phi|.$$

- On dit que u^ε est une solution si, et seulement si, c'est une sous et une sur-solution.

Existence et unicité

Théorème (Da Lio, F, Monneau)

Sous certaines hypothèses de régularité, il existe une unique solution u^ε . De plus, pour $\varepsilon \in (0, \frac{1}{2})$, on a:

$$|Du^\varepsilon| \leq |Du_0|$$

$$|u^\varepsilon(x, t + h) - u^\varepsilon(x, t)| \leq C|Du_0|\sqrt{h} \quad \forall t, h \in \mathbb{R}, \forall x \in \mathbb{R}^n$$

Convergence vers MCM anisotropique

Théorème (Da Lio, F, Monneau)

Sous certaines hypothèses de régularité, quand $\varepsilon \rightarrow 0$, u^ε converge uniformément sur les compacts vers u^0 , l'unique solution du problème limite :

$$\begin{cases} u_t^0 + F(D^2u^0, Du^0) = 0 \\ u^0(\cdot, 0) = u_0 \end{cases}$$

avec

$$F(M, p) = -\text{trace} \left(MA \left(\frac{p}{|p|} \right) \right)$$

$$A \left(\frac{p}{|p|} \right) = \int_{\theta \in \mathbf{S}^{n-1} \cap \{p^\perp\}} \frac{1}{2} g(\theta) \theta \otimes \theta d\theta$$

Résultat similaire

- Garroni, Muller (Gamma convergence, pb stationnaire)
- Algorithme de Merriman, Bence, Osher
- [Evans], [Barles, Georgelin], [Ishii], [Ishii, Pires, Souganidis], [Bellitini, Chambolle, Novaga]

Convergence pour les fonctions tests

Proposition (Da Lio, F, Monneau)

Soit $\varphi \in C^2$ telle que $D\varphi(x_0, t_0) \neq 0$. Si $(x_\varepsilon, t_\varepsilon) \rightarrow (x_0, t_0)$, alors

$$c^\varepsilon |D\varphi| \rightarrow -F(D^2\varphi(x_0, t_0), D\varphi(x_0, t_0))$$

où

$$c^\varepsilon = c_0^\varepsilon \star \{\varphi(\cdot, t_\varepsilon) > \varphi(x_\varepsilon, t_\varepsilon)\} - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^n} c_0^\varepsilon$$

Plan

- 1 Motivations physiques
- 2 Description mathématique du problème
- 3 Convergence de la dynamique des dislocations vers le mouvement par courbure moyenne
- 4 Origine variationnelle du mouvement par courbure moyenne anisotrope
- 5 Travaux en cours

Définition

Définition

Soit $g \in C^0(\mathbb{R}^n \setminus \{0\})$, $g(\lambda p) = \frac{g(p)}{|\lambda|^{n+1}}$. On définit :

$$\langle L_g, \varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} dx \frac{g\left(\frac{x}{|x|}\right)}{|x|^{n+1}} (\varphi(x) - \varphi(0) - x \cdot D\varphi(0) 1_{B_1(0)}(x))$$

Identification du MCM limite

Théorème (Da Lio, F, Monneau)

- Si u est régulier alors

$$\int_{\theta \in \mathbf{S}^{n-1} \cap \{p^\perp\}} \frac{1}{2} g(\theta) \theta \otimes \theta d\theta = D^2 G \left(\frac{p}{|p|} \right)$$

et

$$F(D^2 u, Du) = - \left(\operatorname{div} \nabla G \left(\frac{Du}{|Du|} \right) \right) |Du|$$

avec

$$G := -\frac{1}{2\pi} \hat{L}_g.$$

Identification du MCM limite

Théorème (Da Lio, F, Monneau)

- Si u est régulier alors

$$\int_{\theta \in \mathbf{S}^{n-1} \cap \{p^\perp\}} \frac{1}{2} g(\theta) \theta \otimes \theta d\theta = D^2 G \left(\frac{p}{|p|} \right)$$

et

$$F(D^2 u, Du) = - \left(\operatorname{div} \nabla G \left(\frac{Du}{|Du|} \right) \right) |Du|$$

avec

$$G := -\frac{1}{2\pi} \hat{L}_g.$$

Autres propriétés

Théorème (Da Lio, F, Monneau)

- $n = 2$: $g \geq 0 \iff G$ convexe
- $n \geq 3$: $\exists G$ convexe et $g \not\geq 0$

Autres propriétés

Théorème (Da Lio, F, Monneau)

- $n = 2$: $g \geq 0 \iff G$ convexe
- $n \geq 3$: $\exists G$ convexe et $g \not\geq 0$

Un exemple en 2D

Exemple

$$G(x_1, x_2) = \gamma x_1^2 + x_2^2 \quad \text{avec} \quad \gamma = \frac{1}{1-\nu} \in \left(\frac{1}{2}, 2\right)$$

$$g(x_1, x_2) = (2\gamma - 1)x_1^2 + (2 - \gamma)x_2^2$$

Plan

- 1 Motivations physiques
- 2 Description mathématique du problème
- 3 Convergence de la dynamique des dislocations vers le mouvement par courbure moyenne
- 4 Origine variationnelle du mouvement par courbure moyenne anisotrope
- 5 Travaux en cours

Travaux en cours

- Schéma numérique pour le mouvement par courbure moyenne basé sur la dynamique des dislocations
- Fast Marching Method pour la dynamique des dislocations
- Fast Marching Method pour le mouvement par courbure moyenne

Travaux en cours

- Schéma numérique pour le mouvement par courbure moyenne basé sur la dynamique des dislocations
- Fast Marching Method pour la dynamique des dislocations
- Fast Marching Method pour le mouvement par courbure moyenne

Travaux en cours

- Schéma numérique pour le mouvement par courbure moyenne basé sur la dynamique des dislocations
- Fast Marching Method pour la dynamique des dislocations
- Fast Marching Method pour le mouvement par courbure moyenne