

Physique mathématique

Du discret au continu pour des modèles de réseaux aléatoires d'atomes

Xavier Blanc^a, Claude Le Bris^b, Pierre-Louis Lions^{c,d}

^a *Laboratoire J.-L. Lions, université Pierre et Marie Curie, boîte courrier 187, 75252 Paris cedex 05, France*

^b *CERMICS, École nationale des ponts et chaussées, 77455 Champs sur Marne cedex, France*

^c *Collège de France, 11, place Marcelin-Berthelot, 75231 Paris cedex 05, France*

^d *CEREMADE, université Paris Dauphine, place du Maréchal de Lattre de Tassigny, 75775 Paris cedex 16, France*

Reçu le 1^{er} décembre 2005 ; accepté le 7 décembre 2005

Disponible sur Internet le 20 mars 2006

Présenté par Pierre-Louis Lions

Résumé

Nous étudions dans cette Note la limite du continuum pour certains modèles atomistiques de réseaux cristallins. Notre étude fait suite à un précédent travail où nous dérivions des densités d'énergie mécanique macroscopique à partir de modèles microscopiques pour la phase cristalline. Cette fois, le réseau cristallin n'est plus supposé périodique, mais il est supposé être aléatoire, stationnaire ergodique, selon des notions précédemment introduites ailleurs. *Pour citer cet article : X. Blanc et al., C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 342 (2006).*

© 2006 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Abstract

Discrete to continuum limit for some models of stochastic lattices of atoms. We study in this Note the continuum (macroscopic) limit for some atomistic models for crystals. The purpose is to derive densities of mechanical energies from microscopic models. In contrast to the setting of a previous study, where the microscopic structure was assumed to be periodic, it is modelled here by a stochastic lattice, which enjoys some stationarity and ergodicity properties, following notions previously introduced elsewhere. *To cite this article : X. Blanc et al., C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 342 (2006).*

© 2006 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Abridged English version

In the framework of hyperelasticity (see [1,7,12]), the mechanical energy of a crystalline material reads

$$\int_{\mathcal{D}} \mathcal{E}(\nabla u(x)) dx,$$

where u denotes the deformation applied to, and \mathcal{D} denotes the volume occupied by, the material. We wish to investigate here how the density \mathcal{E} of mechanical energy may be derived from the consideration of the energy of atoms at

Adresses e-mail : blanc@ann.jussieu.fr (X. Blanc), lebris@cermics.enpc.fr (C. Le Bris), lions@ceremade.dauphine.fr (P.-L. Lions).

the microscopic scale. The prototypical setting is the case of a pair potential model for the energy (per unit particle) of N atoms located at the points x_i :

$$\frac{1}{N}E(\{x_i\}) = \frac{1}{2N} \sum_{1 \leq i \neq j \leq N} W_0(x_i - x_j).$$

Here, W_0 denotes a reference pair potential (depending only on the distances $r = |x_i - x_j|$). In a prior study [2,3], we have considered the case of a perfect monocrystal, when the atomic sites asymptotically form, as $N \rightarrow +\infty$, a periodic lattice $\{x_i, i \in \mathbb{Z}^d\} = \mathbb{Z}^d$ (d denoting the ambient dimension). A macroscopic given deformation u is applied to the domain \mathcal{D} and we make the assumption that the atomic sites experience the deformation u itself. Then, taking the limit $N \rightarrow +\infty$ and rescaling the distances by $1/N^{1/d}$ for consistency, we have proved in [2,3] that the energy per unit particle of the deformed configuration

$$\frac{1}{2N} \sum_{1 \leq i \neq j \leq N} W_0\left(\frac{u(x_i/N^{1/d}) - u(x_j/N^{1/d})}{1/N^{1/d}}\right)$$

indeed converges to

$$\frac{1}{|\mathcal{D}|} \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0 \in \mathbb{Z}^d} W_0(\nabla u(x)k) dx.$$

This establishes a mathematical connection between the density of mechanical energy \mathcal{E} and the model for the microscopic structure. Let us mention that many alternative approaches have been employed for treating the same problem: see e.g. [6] and the references therein. Such studies allow for a microscopic deformation that implicitly depends on the macroscopic deformation u , but is not necessarily equal to it.

In the present study, we again assume that the deformation u is directly applied to the atomic sites but we consider a microscopic structure that is no longer periodic. The latter consists of a stochastic lattice (see [11] for a related work). We have indeed introduced in [4] a notion of *stationary ergodic stochastic lattices* that we now recall. The space $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ being a probability space, we consider a random variable ℓ valued in $(\mathbb{R}^d)^{\mathbb{Z}^d}$:

$$\ell : \Omega \longrightarrow (\mathbb{R}^d)^{\mathbb{Z}^d},$$

$$\omega \longmapsto \ell(\omega) = \{x_i, i \in \mathbb{Z}^d\}.$$

We also consider a group action $(\tau_k)_{k \in \mathbb{Z}^d}$ on Ω , that preserves \mathbb{P} , and that is assumed to be ergodic:

$$(\tau_k A = A, \forall k \in \mathbb{Z}^d) \text{ implies } \mathbb{P}(A) = 0 \text{ or } 1.$$

The lattice ℓ is said a *stationary ergodic stochastic lattice* if

$$\ell(\tau_k \omega) = \ell(\omega) - k, \quad \forall k \in \mathbb{Z}^d.$$

The techniques of [2,3] (which basically rely upon a Taylor expansion and, implicitly, on the existence of a thermodynamic limit for the energy considered), along with a repeated use of the ergodic theorem, allow us to prove that for such a lattice deformed by a deformation u , the energy per unit particle of the truncated lattice

$$\frac{1}{\#\ell(\omega) \cap \mathcal{D}} \sum_{x_i \in \ell(\omega) \cap N^{1/d} \mathcal{D}} \sum_{x_j \in (\ell(\omega) \cap N^{1/d} \mathcal{D}) \setminus \{x_i\}} W_0\left(\frac{u(x_i/N^{1/d}) - u(x_j/N^{1/d})}{1/N^{1/d}}\right)$$

converges almost surely, in the limit $N \rightarrow +\infty$, to

$$\frac{1}{2\mathbb{E}(\#\ell(\omega) \cap Q)} \frac{1}{|\mathcal{D}|} \int_{\mathcal{D}} \mathbb{E}\left(\sum_{x_i \in \ell(\omega) \cap Q} \sum_{x_j \in \ell(\omega) \setminus \{x_i\}} W_0(\nabla u(x)(x_i - x_j))\right) dx,$$

where $Q = [0, 1]^d$. The precise statement is contained in Theorem 3.1 below. With a view to avoid unnecessary technicalities, we perform in Section 4 below the proof for simplified conditions: we assume a one-dimensional setting, we take the pair potential W_0 as a smooth compactly supported function, and the deformation u as a smooth function.

Various extensions of the above setting may be considered. Some of these are mentioned in the French version.

1. Introduction

Dans le cadre de l'élasticité non linéaire et sous l'hypothèse dite d'hyperélasticité (voir [1,7,12]), l'énergie d'un matériau cristallin est supposée de la forme générale suivante :

$$\int_{\mathcal{D}} \mathcal{E}(\nabla u(x)) dx, \quad (1)$$

où u est la déformation et \mathcal{D} le domaine occupé par le matériau dans l'état de référence. La fonctionnelle \mathcal{E} est dite densité d'énergie mécanique.

Prolongeant un de nos travaux précédents [2,3] où nous avons étudié la limite macroscopique pour des réseaux périodiques d'atomes, et ce pour diverses lois d'interaction, nous désirons ici étudier le lien entre une énergie hyperélastique de type (1) et une énergie atomistique, dans le cas où les positions des atomes sont cette fois *aléatoires*.

Pour simplifier, mais des généralisations sont possibles (voir Section 5), nous supposons que l'énergie atomistique est donnée par un potentiel à deux corps, ne dépendant que de la distance, $W(r) = W_0\left(\frac{r}{\varepsilon}\right)$, où ε est la longueur caractéristique de l'interaction. Ainsi, l'énergie de N atomes de positions x_i est définie par

$$E(\{x_i\}) = \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i \neq j \leq N} W_0\left(\frac{x_i - x_j}{\varepsilon}\right). \quad (2)$$

Comme nous l'avons déjà indiqué dans [2,3], il est naturel, pour obtenir un matériau de densité $O(1)$, que ε soit du même ordre de grandeur que la distance interatomique. Nous supposons donc désormais que $\varepsilon \sim 1/N^{1/d}$ où d est la dimension ambiante.

L'objet de la présente Note est de montrer la convergence de (2) (renormalisée par le nombre d'atomes) vers (1), quand N tend vers l'infini, et pour une structure atomistique qui présente un caractère aléatoire. Un tel travail a déjà été effectué dans [11] pour un modèle différent.

Pour cela, nous rappelons tout d'abord dans la Section 2 une notion de « réseaux stochastiques » que nous avons introduite dans [4]. Puis, dans la Section 3, nous définissons une énergie microscopique correspondante, dans l'esprit de (2), et démontrons ensuite qu'elle converge vers une énergie du type (1) (voir le Théorème 3.1 ci-dessous, et sa preuve, donnée dans la Section 4). Nous étudions dans la Section 5 quelques propriétés de l'énergie (9) ainsi définie. Nous indiquons enfin des extensions possibles du présent travail.

2. Définitions et propriétés de réseaux stochastiques

Nous définissons dans cette section les réseaux stochastiques que nous utiliserons dans la suite. Cette présentation est succincte, et nous renvoyons le lecteur intéressé à [4] pour plus de détails et diverses extensions. Soit $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ un espace probabilisé. On considère ℓ une variable aléatoire à valeurs dans l'ensemble des suites de \mathbb{R}^d :

$$\begin{aligned} \ell : \Omega &\longrightarrow (\mathbb{R}^d)^{\mathbb{Z}^d}, \\ \omega &\longmapsto \ell(\omega) = \{x_i, i \in \mathbb{Z}^d\}. \end{aligned} \quad (3)$$

La variable aléatoire ℓ est appelée « réseau » bien qu'elle ne soit pas nécessairement un réseau périodique. Pour presque tout $\omega \in \Omega$, l'ensemble $\ell(\omega)$ est simplement un ensemble infini discret de points de \mathbb{R}^d . Remarquons également que la définition (3) ne dépend pas de la numérotation particulière utilisée, de même que ce qui suit. Nous allons imposer à ℓ un certain nombre de propriétés. Nous supposons que le groupe \mathbb{Z}^d agit sur Ω en préservant \mathbb{P} . On note $(\tau_k)_{k \in \mathbb{Z}^d}$ cette action, et on dira que ℓ est *stationnaire* si :

$$\ell(\tau_k \omega) = \ell(\omega) - k, \quad \forall k \in \mathbb{Z}^d. \quad (4)$$

Nous supposons de plus que l'action $(\tau_k)_{k \in \mathbb{Z}^d}$ est *ergodique*, c'est-à-dire que

$$(\tau_k A = A, \forall k \in \mathbb{Z}^d) \text{ implique } \mathbb{P}(A) = 0 \text{ or } 1. \quad (5)$$

Un cas particulier explicite de réseaux stationnaires est par exemple le suivant : pour $(X_i)_{i \in \mathbb{Z}^d}$ suite de variables aléatoires indépendantes identiquement distribuées, l'ensemble défini par

$$\ell(\omega) = \{i + X_i(\omega), i \in \mathbb{Z}^d\}$$

peut être réalisé comme un réseau stationnaire au sens de (4)–(5), comme indiqué dans [4].

3. Résultat principal

Nous supposons que la déformation macroscopique u est donnée, et que les atomes subissent eux-mêmes cette déformation u . C'est une hypothèse discutable, voir [10], et des techniques différentes peuvent être appliquées, notamment de type Γ -convergence (voir par exemple [6,8]) pour la contourner. Cependant, nous ne savons mettre en oeuvre la suite de cette étude que sous cette hypothèse. Si dans la configuration de référence les atomes occupent les positions $\varepsilon x_i \in \varepsilon \ell(\omega) \cap \mathcal{D}$, où ℓ est un réseau stochastique stationnaire, c'est-à-dire vérifiant (4)–(5), les atomes de la configuration déformée occupent les positions $u(\varepsilon x_i)$. L'énergie s'écrit donc, en insérant ces valeurs dans (2),

$$E = \frac{1}{2} \sum_{x_i \in \ell(\omega) \cap \varepsilon^{-1} \mathcal{D}} \sum_{x_j \in (\ell(\omega) \cap \varepsilon^{-1} \mathcal{D}) \setminus \{x_i\}} W_0 \left(\frac{u(\varepsilon x_i) - u(\varepsilon x_j)}{\varepsilon} \right).$$

L'énergie étant une quantité extensive, il convient de la renormaliser par le nombre d'atomes présents dans l'échantillon, d'où (8) ci-dessous. Dans la limite $\varepsilon \rightarrow 0$, nous obtenons alors la convergence de cette énergie vers une énergie de type (1) :

Théorème 3.1. *Soit W_0 un potentiel lipschitzien sur $\{x \in \mathbb{R}^d, |x| > R\}$, pour tout $R > 0$, tel que $W_0 \in L^1(\{|x| > R\})$. Soient \mathcal{D} un ouvert régulier borné de \mathbb{R}^d et $u \in W^{1,p}(\mathcal{D}, \mathbb{R}^d)$ pour un certain $p > d$, telle que*

$$\exists \alpha > 0, \forall x, y \in \mathcal{D}, \quad |u(x) - u(y)| \geq \alpha |x - y|. \quad (6)$$

On suppose que, ℓ est un réseau stationnaire ergodique au sens de (4)–(5), tel que

$$\mathbb{E}[(\#\ell(\omega) \cap Q)^2] < +\infty, \quad \text{et} \quad \mathbb{E} \left[\sum_{x_i \in \ell(\omega) \cap Q} \sum_{x_j \in \ell(\omega) \setminus \{x_i\}} |W_0(x_i - x_j)| \right] < +\infty, \quad (7)$$

où bien sûr la notation $\#A$ désigne le cardinal de l'ensemble A et $Q = [0, 1)^d$. Pour tout $\varepsilon > 0$, on définit l'énergie

$$\mathcal{E}_\varepsilon(u) = \frac{1}{2\#\ell(\omega) \cap \varepsilon^{-1} \mathcal{D}} \sum_{x_i \in \ell(\omega) \cap \varepsilon^{-1} \mathcal{D}} \sum_{x_j \in (\ell(\omega) \cap \varepsilon^{-1} \mathcal{D}) \setminus \{x_i\}} W_0 \left(\frac{u(\varepsilon x_i) - u(\varepsilon x_j)}{\varepsilon} \right). \quad (8)$$

Alors

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \mathcal{E}_\varepsilon(u) = \frac{1}{2\mathbb{E}(\#\ell(\omega) \cap Q)} \frac{1}{|\mathcal{D}|} \int_{\mathcal{D}} \mathbb{E} \left(\sum_{x_i \in \ell(\omega) \cap Q} \sum_{x_j \in \ell(\omega) \setminus \{x_i\}} W_0(\nabla u(x)(x_i - x_j)) \right) dx \quad (9)$$

presque sûrement.

Remarque 1. Noter que si $u \in W^{1,p}(\mathcal{D})$ avec $p > d$, alors u est continue et (8) est bien définie.

Remarque 2. D'autre part, étant donné un domaine \mathcal{C} , l'ensemble $\ell(\omega) \cap \mathcal{C}$ peut très bien contenir plusieurs fois le même point (autrement dit il peut arriver que plusieurs x_i se trouvent égaux, pour un ω donné). Dans un tel cas, on compte dans $\#\ell(\omega) \cap \mathcal{C}$ la position en question autant de fois qu'elle apparaît.

4. Schéma de preuve

Nous donnons dans cette section les principales idées de la preuve du Théorème 3.1. Pour éviter des détails techniques fastidieux, nous renforçons les hypothèses et supposons que :

- le potentiel W_0 est de classe C^∞ et à support compact ;
- la dimension est $d = 1$, la maille unité est $Q = [0, 1)$, et le domaine macroscopique est $\mathcal{D} = (-1, 1)$;
- la déformation u est de classe C^∞ ;
- $\varepsilon = \frac{1}{N}$ (et pas seulement d'ordre $\frac{1}{N}$) pour $N \in \mathbb{N}$,

le cas général se déduisant facilement de la preuve qui suit, par des adaptations que nous laissons au lecteur.

On remarque tout d’abord que, presque sûrement, on a

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\#(\varepsilon \ell(\omega) \cap \mathcal{D})}{2N + 1} = \mathbb{E}(\#(\ell(\omega) \cap \mathcal{Q})),$$

où $\mathcal{Q} = [0, 1)$. Ceci est en effet une conséquence du théorème ergodique, car $\#(\varepsilon \ell(\omega) \cap \mathcal{D}) = \#(\ell(\omega) \cap N\mathcal{D}) = \sum_{k=-N}^{N-1} \#(\ell(\omega) \cap [k, k + 1))$, et la variable aléatoire $\#(\ell(\omega) \cap [k, k + 1))$ est stationnaire. Tout revient donc à démontrer (9) pour l’énergie

$$\tilde{\mathcal{E}}_N(u) = \frac{1}{2N + 1} \sum_{x_i \in \ell(\omega) \cap N\mathcal{D}} \sum_{x_j \in (\ell(\omega) \cap N\mathcal{D}) \setminus \{x_i\}} W_0\left(\frac{u(x_i/N) - u(x_j/N)}{1/N}\right). \tag{10}$$

Pour cela, on réécrit (10) sous la forme

$$\tilde{\mathcal{E}}_N(u) = \frac{1}{2N + 1} \sum_{k=-N}^{N-1} \sum_{x_i \in \ell(\omega) \cap [k, k+1)} \sum_{x_j \in (\ell(\omega) \cap [k-A, k+A]) \setminus \{x_i\}} W_0\left(N\left(u\left(\frac{x_i}{N}\right) - u\left(\frac{x_j}{N}\right)\right)\right),$$

où $A > 0$ est tel que $\text{supp}(W_0) \subset [-\alpha A, \alpha A]$. Noter en effet que si $|x_i - x_j| > A$ alors la quantité $W_0(N(u(\frac{x_i}{N}) - u(\frac{x_j}{N})))$ est nulle, à cause de la propriété (6). On utilise ensuite un développement de Taylor de l’argument de W_0 pour obtenir

$$\tilde{\mathcal{E}}_N(u) = \frac{1}{2N + 1} \sum_{k=-N}^{N-1} \sum_{x_i \in \ell(\omega) \cap [k, k+1)} \sum_{x_j \in (\ell(\omega) \cap [k-A, k+A]) \setminus \{x_i\}} W_0\left(u'\left(\frac{k}{N}\right)(x_i - x_j)\right) + R_N^A(\omega),$$

avec

$$|R_N^A(\omega)| \leq C \frac{A^2}{N^2} \sum_{k=-N}^{N-1} \#(\ell(\omega) \cap [k, k + 1)) \#(\ell(\omega) \cap [k - A, k + A]).$$

Le fait que $\#(\ell(\omega) \cap [0, 1)) \in L^2(\Omega)$ et le théorème ergodique impliquent que R_N^A tend vers 0 presque sûrement quand N tend vers l’infini.

Soit maintenant $p \in \mathbb{N}$ fixé. On pose $N = pq + r$, où $q, r \in \mathbb{N}$ et $r \leq p - 1$. Toujours par souci de clarté, on suppose $r = 0$, le cas général pouvant se traiter de la même façon. On a alors, pour $N \geq 1$,

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{E}}_N(u) &= \frac{1}{2pq} \sum_{m=-p}^{p-1} \sum_{n=0}^{q-1} \left[\sum_{x_i \in \ell(\omega) \cap [mq+n, mq+n+1)} \sum_{x_j \in \ell(\omega) \setminus \{x_i\}} W_0\left(u'\left(\frac{mq+n}{pq}\right)(x_i - x_j)\right) \right] + R_N^A(\omega) \\ &= \frac{1}{2p} \sum_{m=-p}^{p-1} \frac{1}{q} \sum_{n=0}^{q-1} \left[\sum_{x_i \in \ell(\omega) \cap [mq+n, mq+n+1)} \sum_{x_j \in \ell(\omega) \setminus \{x_i\}} W_0\left(u'\left(\frac{m}{p}\right)(x_i - x_j)\right) \right] \\ &\quad + S_{p,q}^A(\omega) + R_N^A(\omega), \end{aligned} \tag{11}$$

où le reste $S_{p,q}^A(\omega)$ vérifie presque sûrement

$$\begin{aligned} |S_{p,q}^A(\omega)| &\leq \frac{1}{2pq} \sum_{m=-p}^{p-1} \sum_{n=0}^{q-1} \left[\sum_{x_i \in \ell(\omega) \cap [mq+n, mq+n+1)} \sum_{x_j \in \ell(\omega) \cap [mq+n-A, mq+n+A]} \|W_0'\|_{L^\infty} \|u''\|_{L^\infty} A \frac{n}{pq} \right] \\ &\leq \frac{CA}{2pN} \sum_{k=-N}^{N-1} \#(\ell \cap [k, k + 1)) \#(\ell \cap [k - A, k + A]). \end{aligned}$$

Pour un p fixé, par application du théorème ergodique, on en déduit

$$\text{p.s. } \limsup_{q \rightarrow +\infty} |S_{p,q}^A(\omega)| \leq \frac{CA^2}{p}, \tag{12}$$

pour une certaine constante C indépendante de p . De plus, en posant

$$F_k(\omega) = \sum_{x_i \in \ell(\omega) \cap [k, k+1)} \sum_{x_j \in \ell(\omega) \setminus \{x_i\}} W_0 \left(u' \left(\frac{m}{p} \right) (x_i - x_j) \right),$$

qui est une variable aléatoire stationnaire, on obtient comme expression de (11) :

$$\tilde{\mathcal{E}}_N(u) = \frac{1}{2p} \sum_{m=-p}^{p-1} \left(\frac{1}{q} \sum_{n=0}^{q-1} F_{mq+n}(\omega) \right) + S_{p,q}^A(\omega) + R_N^A(\omega).$$

En introduisant $T_r(\omega) = \sum_{s=0}^r F_s(\omega)$, on obtient

$$\frac{1}{q} \sum_{n=0}^{q-1} F_{mq+n}(\omega) = \frac{1}{q} (T_{mq+q-1}(\omega) - T_{mq-1}(\omega)) = \frac{mq+q-1}{q} \frac{T_{mq+q-1}(\omega)}{mq+q-1} - \frac{mq-1}{q} \frac{T_{mq-1}(\omega)}{mq-1},$$

qui, encore par application du théorème ergodique, converge presque sûrement, pour m fixé, quand q tend vers l'infini, vers $\mathbb{E}(F_0)$. Ainsi,

$$\tilde{\mathcal{E}}_N(u) - S_{p,q}^A(\omega) \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{2p} \sum_{m=-p}^{p-1} \mathbb{E} \left(\sum_{x_i \in \ell(\omega) \cap [0,1)} \sum_{x_j \in \ell(\omega) \setminus \{x_i\}} W_0 \left(u' \left(\frac{m}{p} \right) (x_i - x_j) \right) \right)$$

presque sûrement. En utilisant alors (12) et le fait que le membre de droite est une somme de Riemann, on peut ensuite faire tendre p vers l'infini, et trouver l'intégrale voulue.

5. Remarques et extensions

Nous regroupons dans cette section des extensions naturelles du présent travail ainsi que des remarques sur l'énergie limite obtenue.

Notons tout d'abord que la classe de régularité imposée à W_0 inclut la plupart des potentiels à deux corps utilisés en pratique : Lennard–Jones, Morse, Stillinger–Weber, etc. Remarquons également qu'une étude similaire est possible pour des énergies microscopiques plus complexes, en particulier des modèles de potentiel d'interaction à N corps, d'origine quantique, comme ceux de type Thomas–Fermi. En effet, nous avons déterminé dans [4] la limite thermodynamique de tels modèles. Or nous avons observé sur nos études précédentes que l'existence d'une telle limite thermodynamique est un point clé de la détermination de la limite macroscopique. C'est pourquoi il semble raisonnable d'espérer un résultat similaire pour des réseaux stochastiques. Cette étude sera abordée dans [5].

Intéressons-nous maintenant à une propriété particulière de la densité d'énergie \mathcal{E} figurant dans (1). En théorie, \mathcal{E} est supposée refléter les symétries du cristal à l'échelle microscopique placé au point x macroscopique, donc satisfaire aux propriétés suivantes, où G est le groupe d'invariance du réseau cristallin :

$$\forall M \in \text{GL}_3^+(\mathbb{R}), \forall Q \in G, \forall R \in \text{SO}_3(\mathbb{R}), \quad \mathcal{E}(RMQ) = \mathcal{E}(M). \quad (13)$$

$\text{GL}_3^+(\mathbb{R})$ désigne ici l'ensemble des matrices carrées inversibles de taille 3 dont le déterminant est positif, sur lequel \mathcal{E} est définie. Beaucoup de propriétés mécaniques (et en fait de difficultés mathématiques) sont liés à cette invariance [1,9,13], appelée règle de Cauchy–Born. La propriété (13) impose en fait deux invariances à l'énergie hyperélastique. D'une part, elle impose l'invariance par rotation, qui est effectivement vérifiée par le membre de droite de (9) pour tout potentiel W_0 radial.

D'autre part, (13) impose l'invariance sous l'action du groupe $\text{GL}_3(\mathbb{Z})$. Or cette invariance n'est cette fois pas vérifiée par la densité apparaissant dans (9), sauf dans des cas très particuliers comme celui d'un réseau ℓ périodique déterministe. On peut se convaincre de ceci sur l'exemple d'une perturbation i.i.d du réseau \mathbb{Z}^2 , si par exemple la densité de probabilité de la perturbation est radiale.

Dans le même ordre d'idée, remarquons que même si la position moyenne des atomes est une position de minimum d'énergie, l'énergie macroscopique (9) n'est pas minimale en l'identité. Ceci peut se vérifier là aussi sur le cas de déplacements i.i.d autour d'un réseau périodique. La configuration de référence qu'on utilise implicitement ici n'est donc pas un minimum d'énergie.

Enfin, remarquons que seuls les accroissements $x_i - x_j$ interviennent dans l'énergie microscopique. Il serait donc naturel d'imposer une hypothèse de stationarité sur ces accroissements plutôt que sur le réseau ℓ lui-même. Ceci est exactement équivalent à la propriété

$$\ell(\omega) = \{x_i(\omega), i \in \mathbb{Z}^d\}, \quad \text{avec } \forall i, j \in \mathbb{Z}^d, x_{i+j}(\omega) - x_j(\omega) = x_i(\tau_j\omega) - x_0(\tau_j\omega).$$

Sous cette hypothèse, on peut faire la même étude que ci-dessus, avec comme résultat :

$$\mathcal{E}_\varepsilon(u) = \frac{\varepsilon^d}{2} \sum_{i \in \mathbb{Z}^d, x_i \in \varepsilon^{-1}\mathcal{D}} \sum_{j \in \mathbb{Z}^d \setminus \{i\}, x_j \in \varepsilon^{-1}\mathcal{D}} W_0\left(\frac{u(\varepsilon x_i) - u(\varepsilon x_j)}{\varepsilon}\right),$$

et

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \mathcal{E}_\varepsilon(u) = \frac{1}{|\mathcal{D}|} \mathbb{E} \left(\sum_{j \in \mathbb{Z}^d \setminus \{0\}} W_0(\nabla u(x)(x_0(\omega) - x_j(\omega))) dx \right).$$

On renvoie à [5] pour des travaux dans cette direction.

Références

- [1] J.M. Ball, Convexity conditions and existence theorems in nonlinear elasticity, *Arch. Rational Mech. Anal.* 63 (1977) 337–403.
- [2] X. Blanc, C. Le Bris, P.-L. Lions, Convergence de modèles moléculaires vers des modèles de mécanique des milieux continus, *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I* 332 (2001) 949–956.
- [3] X. Blanc, C. Le Bris, P.-L. Lions, From molecular models to continuum mechanics, *Arch. Rational Mech. Anal.* 164 (4) (2002) 341–381.
- [4] X. Blanc, C. Le Bris, P.-L. Lions, On the energy of some microscopic stochastic lattices, A paraître dans *Arch. Rat. Mech. Anal.*
- [5] X. Blanc, C. Le Bris, P.-L. Lions, en préparation.
- [6] A. Braides, M.S. Gelli, The passage from discrete to continuous variational problems: a nonlinear homogenization process, in: P. Ponte Castaneda (Ed.), *Nonlinear Homogenization and its Applications to Composites, Polycrystals and Smart Materials*, Kluwer, 2004, pp. 45–63.
- [7] P.G. Ciarlet, *Mathematical Elasticity*, Stud. Math. Appl., vol. 20, Elsevier Science Publishers, 1988.
- [8] G. Dal Maso, *An Introduction to Γ -Convergence*, Progr. Nonlinear Differential Equations Appl., vol. 8, Birkhäuser, Boston, MA, 1993.
- [9] I. Fonseca, Variational methods for elastic crystals, *Arch. Rational Mech. Anal.* 97 (1987) 187–220.
- [10] G. Friesecke, F. Theil, Validity and failure of the Cauchy–Born hypothesis in a two-dimensional mass-spring lattice, *J. Nonlinear Sci.* 12 (5) (2002) 445–478.
- [11] O. Iosifescu, C. Licht, G. Michaille, Variational limit of a one-dimensional discrete and statistically homogeneous system of material points, *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I* 332 (2001) 575–580;
O. Iosifescu, C. Licht, G. Michaille, Variational limit of a one-dimensional discrete and statistically homogeneous system of material points, *Asymptotic Anal.* 28 (2001) 309–329.
- [12] A.E.H. Love, *A Treatise on the Mathematical Theory of Elasticity*, Dover Publications, New York, 1944.
- [13] G. Zanzotto, On the material symmetry group of elastic crystals and the Born rule, *Arch. Rational Mech. Anal.* 121 (1992) 1–36.