BERNARD BRIGHI
MICHEL CHIPOT

Densités d'énergie et matériaux cristallins

Annales de la faculté des sciences de Toulouse 6e série, tome 1, nº 1 (1992), p. 15-24
<http://www.numdam.org/item?id=AFST_1992_6_1_1_15_0>

Annales de la Faculté des Sciences de Toulouse Série 6, Vol. I, n° 1, 1992

Densités d'énergie et matériaux cristallins

BERNARD BRIGHI et MICHEL CHIPOT[1]

RÉSUMÉ. — Nous prouvons l'existence de densités d'énergie, associées à des cristaux hyperélastiques, et vérifiant certaines conditions d'invariance. Nous étudions également le problème de minimisation associé.

ABSTRACT. — We show the existence of a stored energy functional having invariance properties consistent with some models in hyperelasticity for crystals and we study the associated problem of minimization.

1. Introduction

Soit Ω un domaine borné de $\mathbb{R}^n$, $\varphi \in W^{1,\infty}(\Omega;\mathbb{R}^n)$. On désigne par $\mathbf{M}^n$ l'ensemble des matrices carrées d'ordre n à coefficients réels et l'on pose :

$$\mathbf{M}^n_+ = \{F \in \mathbf{M}^n \mid \det(F) > 0\}.$$

$$A_\Omega(\varphi) = \{v \in W^{1,\infty}(\Omega;\mathbb{R}^n) \mid \nabla v(x) \in \mathbf{M}^n_+ \text{ p.p. dans } \Omega\,,\ v = \varphi \text{ sur } \partial\Omega\}$$

($\partial\Omega$ désigne la frontière de Ω, ∇v la matrice jacobienne de v, $W^{1,\infty}(\Omega;\mathbb{R}^n) = (W^{1,\infty}(\Omega))^n$, on renvoie le lecteur à [GT] pour une définition des espaces de Sobolev $W^{1,\infty}(\Omega)$).

On s'intéresse ici au problème suivant :

$$(\mathrm{P}) \qquad \begin{cases} \text{trouver } u \in A_\Omega(\varphi) \text{ tel que} \\ u \text{ minimise l'énergie } \displaystyle\int_\Omega W(\nabla v(x))\,dx \text{ sur } A_\Omega(\varphi) \end{cases}$$

où $W : \mathbf{M}^n_+ \to \mathbb{R}$.

[1] Université de Metz, Département de Mathématiques, Ile de Saulcy, 57045 Metz Cedex 01 (France)

On note $\mathbf{O}_+^n$ le groupe spécial orthogonal et $\mathbf{GL}_+(\mathbb{Z}^n)$ le groupe des matrices à coefficients entiers et de déterminant 1.

On suppose que $W : \mathbf{M}_+^n \to \mathbb{R}$ vérifie :

$$W \geq 0 \quad \text{et} \quad W \text{ continue,} \tag{1}$$

$$W(QF) = W(F)\,, \quad \forall\, F \in \mathbf{M}_+^n\,,\ \forall\, Q \in \mathbf{O}_+^n \tag{2}$$

(principe de l'indifférence matérielle, cf. [Ci]),

$$W(I) = 0\,, \quad \text{où } I \text{ est la matrice identité de } \mathbf{M}^n. \tag{3}$$

Pour tenir compte du caractère cristallin du matériau considéré, on suppose de plus que :

$$W(FH) = W(F)\,, \quad \forall\, F \in \mathbf{M}_+^n\,,\ \forall\, H \in \mathbf{H} = L\mathbf{GL}_+(\mathbb{Z}^n)L^{-1} \tag{4}$$

où L est une matrice dont les vecteurs colonnes constituent une base du réseau définissant la structure atomique du cristal. Le cas physiquement intéressant est bien sûr le cas $n = 3$, Ω est alors la configuration de référence du corps considéré (cf. [Ci]). D'un point de vue mathématique le cas général ne présente pas plus de difficulté et c'est pourquoi nous nous sommes placés ici dans ce cadre.

Remarque 1.1.— La condition (4) entraîne que W n'est pas nécessairement rang 1-convexe (cf. [CK]). Ceci exclut les méthodes directes du *Calcul des variations* pour résoudre le problème (P).

Pour $F \in \mathbf{M}_+^n$, notons $\widetilde{F}$ la fonction définie par :

$$\widetilde{F}(x) = Fx\,.$$

Le résultat suivant à été obtenu indépendamment par I. Fonseca [F1] et M. Chipot, D. Kinderleher [CK] :

THÉORÈME 1.2.— *Soit Ω un ouvert borné de $\mathbb{R}^n$ tel que $|\partial\Omega| = 0$, alors*

$$E_\Omega(\widetilde{F}) := \inf_{v \in A_\Omega(\widetilde{F})} \int_\Omega W(\nabla v(x))\, dx = |\Omega| \phi^{**}(\det F)$$

où ϕ est définie pour $t > 0$ par

$$\phi(t) = \inf_{\det G = t} W(G)$$

et ϕ^{**} est l'enveloppe convexe de ϕ. $|\partial\Omega|$ désigne la mesure n-dimensionnelle de $\partial\Omega$.

Démonstration (voir [F1], [CK] ou [C])

Une question d'importance est de savoir s'il existe un élément $v \in A_\Omega(\widetilde{F})$ réalisant l'infimum $E_\Omega(\widetilde{F})$. Il est clair (cf. (2)-(4)) que

$$W(F) = 0\,, \quad \forall\ F = QH\,,\ Q \in \mathbf{O}^n_+\,,\ H \in \mathbf{H}$$

et donc pour

$$\widetilde{F}(x) = QHx$$

$\widetilde{F}$ réalise l'infimum $E_\Omega(\widetilde{F})$ lequel est égal à 0. Supposant

$$W(F) = 0 \Leftrightarrow F = QH \tag{5}$$

il est naturel de se demander si pour

$$\widetilde{F}(x) \neq QHx$$

$E_\Omega(\widetilde{F})$ est atteint. Nous donnerons dans la section 2 une réponse partielle à cette question.

Bien sûr, il importe alors de construire des densités d'énergie vérifiant (1)-(5), c'est ce que nous ferons dans une troisième partie.

2. Existence d'un "minimizer"

Pour ce qui est de l'existence d'un "minimizer", c'est-à-dire d'un élément réalisant l'infimum $E_\Omega(\widetilde{F})$, on a le résultat suivant.

THÉORÈME 2.1.— *Supposons que W vérifie (1)-(5). Soit $F \in \mathbf{M}^n_+$ telle que* $\det F = 1$. *Soit V un ouvert connexe inclus dans Ω et tel que*

$$\partial V \cap \partial\Omega \quad \textit{ne soit pas entièrement contenu dans un hyperplan de } \mathbb{R}^n\,. \tag{6}$$

Si $F \neq QH$ alors il n'existe pas d'élément $u \in A_\Omega(\widetilde{F})$ réalisant l'infimum $E_\Omega(\widetilde{F})$ et qui soit de classe C^1 sur $\overline{V}$.

Démonstration.— Supposons donc que l'on ait :

$$\int_\Omega W(\nabla u(x))\,\mathrm{d}x = E_\Omega(\widetilde{F}) \tag{7}$$

où $u \in A_\Omega(\widetilde{F})$ et où u est de classe C^1 sur $\overline{V}$ avec V vérifiant (6).

Par (3) et par définition de ϕ, on a $\phi(1) = 0$ et comme $\phi \geq 0$ il en résulte que $\phi^{**}(1) = 0$. Puisque det $F = 1$, on a donc $E_\Omega(\widetilde{F}) = 0$. Compte tenu de (1), (5) et (7), on a alors :

$$\nabla u(x) = Q(x)H(x) \text{ p.p. dans } \Omega\,.$$

($Q(x) \in \mathbf{O}_+^n$, $H(x) \in \mathbf{H}$). Il en résulte, si T désigne l'opération transposée,

$$\nabla u(x)^T \nabla u(x) = H(x)^T H(x) \text{ p.p. dans } \Omega\,.$$

La fonction $x \mapsto H(x)^T H(x)$ qui est continue de V dans un groupe discret fermé est alors constante. On a donc pour un certain $H \in \mathbf{H}$

$$\nabla u(x)^T \, \nabla u(x) = H^T H\,, \quad \forall\, x \in \overline{V}\,,$$

d'où

$$\left(\nabla u(x) H^{-1}\right)^T \left(\nabla u(x) H^{-1}\right) = I$$

et donc

$$\nabla u(x) H^{-1} \in \mathbf{O}_+^n\,, \quad \forall\, x \in \overline{V}\,.$$

Ainsi, il existe $Q(x) \in \mathbf{O}_+^n$ tel que

$$\nabla u(x) = Q(x) H\,, \quad \forall\, x \in \overline{V}\,. \tag{8}$$

Soit $v : \widetilde{H}(V) \to \mathbb{R}^n$ la fonction définie par

$$v(y) = u(H^{-1}y)\,.$$

On a

$$\nabla v(y) = Q(H^{-1}y) \in \mathbf{O}_+^n\,.$$

D'où ∇v est constante (cf. [F2], prop. A.1) et donc Q également.

De (8), on tire donc

$$\nabla u(x) = QH\,, \, \forall\, x \in \overline{V} \quad \Leftrightarrow \quad u(x) = QHx + C\,, \, \forall\, x \in \overline{V}$$

où C est une constante de $\mathbb{R}^n$.

Les applications affines $\widetilde{F}$ et u doivent coïncider sur $\partial V \cap \partial\Omega$, donc, d'après (6), en particulier en $n+1$ points non coplanaires. On a donc nécessairement

$$C = 0 \quad \text{et} \quad F = QH$$

ce qui est contraire à nos hypothèses. Ceci termine la démonstration.

Remarque 2.2.— Le théorème 2.1 ne répond pas entièrement à la question de savoir s'il existe ou non, dans $A_\Omega(\widetilde{F})$, une solution de (P) — ne vérifiant aucune condition au voisinage du bord de Ω — lorsque $F \neq QH$.

Néanmoins, on peut affirmer que si le problème (P) admet une solution, alors celle-ci ne saurait être C^1 dans aucun voisinage du bord de Ω vérifiant (6).

À ce jour, nous n'avons pu aller plus loin. Cependant, si l'on supprime l'hypothèse Ω borné, nous pouvons apporter une réponse. Nous avons obtenu l'exemple suivant avec G. Buttazzo. Considérons

$$\mathbf{H} = \mathbf{GL}_+(\mathbb{Z}^2)\,,\ \Omega =]-1\,,1[\times \mathbb{R} \quad \text{et} \quad F = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}.$$

On voit facilement que $F \notin \mathbf{O}_+^2 \cdot \mathbf{H}$ (car si $F = QH$, alors $\mathrm{Tr}(F^T F) = \mathrm{Tr}(H^T H)$ devrait être un entier, ce qui manifestement n'est pas le cas dans notre exemple) et que $\det F = 1$.

Notons ensuite $u : \Omega \to \mathbb{R}^2$, l'application définie par

$$-1 \leq x_1 \leq 0 \quad \Rightarrow \quad u(x) = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_1 + x_2 + \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$0 \leq x_1 \leq 1 \quad \Rightarrow \quad u(x) = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 + \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Il est clair que $u \in A_\Omega(\widetilde{F})$. De plus

$$-1 < x_1 < 0 \quad \Rightarrow \quad \nabla u(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$0 < x_1 < 1 \quad \Rightarrow \quad \nabla u(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

si bien que $\nabla u(x) \in \mathbf{O}_+^2 \cdot \mathbf{H}$ p.p. dans Ω. D'où

$$\int_\Omega W(\nabla u(x))\,\mathrm{d}x = 0$$

qui entraîne, puisque $W \geq 0$, que u est une solution de (P).

Notons que nous ne pouvons, ici, utiliser le théorème 1.2 pour calculer $E_\Omega(\widetilde{F})$, car dans ce théorème, l'hypothèse Ω borné est essentielle.

3. Densités d'énergie ne s'annulant que sur $\mathbf{O}^n_+ \cdot \mathbf{H}$

Dans cette section nous voudrions montrer qu'il existe bien des densités d'énergie vérifiant (1)-(5). Des densités d'énergie vérifiant (1)-(4) ont été exhibées dans [F3]. Nous allons montrer ici qu'il est possible de faire en sorte que les puits ou zéros de W soient exactement réduits aux éléments de l'ensemble $\mathbf{O}^n_+ \cdot \mathbf{H}$.

On a en effet le théorème 3.1.

THÉORÈME 3.1.— *Soit* $\mathbf{O}$ *un sous-groupe compact de* $\mathbf{M}^n_+$ *et* $\mathbf{H}$ *un sous-groupe fermé de* $\mathbf{M}^n_+$. *Alors il existe une fonction* $W : \mathbf{M}^n_+ \to \mathbb{R}$ *telle que :*

a) $W \geq 0$ *et* W *est continue,*

b) $W(QFH) = W(F)$ *pour tout* $F \in \mathbf{M}^n_+$, $Q \in \mathbf{O}$ *et* $H \in \mathbf{H}$,

c) $W(F) = 0 \Leftrightarrow F = QH \in \mathbf{O} \cdot \mathbf{H}$.

Démonstration.— Sur $\mathbf{M}^n_+$ on considère la relation $\mathcal{R}$ définie par

$$F_1 \,\mathcal{R}\, R_2 \Leftrightarrow \exists\, (Q, H) \in \mathbf{O} \times \mathbf{H}\,, \quad F_2 = QF_1H\,.$$

Puisque $\mathbf{O}$ et $\mathbf{H}$ sont des sous-groupes, $\mathcal{R}$ est une relation d'équivalence.

On munit $\mathbf{M}^n_+/\mathcal{R}$ de la topologie quotient.

La surjection canonique $s : \mathbf{M}^n_+ \to \mathbf{M}^n_+/\mathcal{R}$ est alors continue. Le théorème résultera des lemmes suivants.

LEMME 3.1.— *s est ouverte et le graphe $\mathcal{G}$ de $\mathcal{R}$ est fermé. $\mathbf{M}^n_+/\mathcal{R}$ est donc séparé.*

LEMME 3.2.— *$\mathbf{M}^n_+/\mathcal{R}$ est un espace normal.*

LEMME 3.3.— $\forall\, F \in \mathbf{M}^n_+$,

$$\{s(F)\} = \bigcap_{k \geq 1} U_k$$

où U_k est un ouvert de $\mathbf{M}^n_+/\mathcal{R}$.

En effet, utilisant le lemme 3.3, on peut écrire

$$\{s(I)\} = \bigcap_{k \geq 1} U_k\,, \quad \text{où } U_k \text{ est ouvert.}$$

Notons A_k le complémentaire de U_k dans $\mathbf{M}_+^n/\mathcal{R}$.

A_k et $\{s(I)\}$ sont deux fermés disjoints (pour $\{s(I)\}$ cela provient du fait que $\mathbf{M}_+^n/\mathcal{R}$ est séparé, voir lemme 3.1). Ensuite, puisque $\mathbf{M}_+^n/\mathcal{R}$ est normal (voir lemme 3.2) on peut appliquer un des théorèmes de Tietze-Urysohn (cf. [S] T. 2, XXII, 2; 1, p. 345) et conclure à l'existence d'une application $f_k : \mathbf{M}_+^n/\mathcal{R} \to [0, 1]$, continue et telle que :

$$f_k\big(s(I)\big) = 0\,, \quad f_k = 1 \text{ sur } A_k\,.$$

Posons alors :

$$f = \sum_{k\geq 1} \frac{f_k}{2^k}\,.$$

Comme somme d'une série uniformément convergente de fonctions continues, f est continue et vérifie :

$$f \geq 0\,, \quad f\big(s(I)\big) = 0$$

$$\begin{aligned} f\big(s(F)\big) = 0 &\Rightarrow \forall\ k \geq 1\,, \quad f_k\big(s(F)\big) = 0 \\ &\Rightarrow \forall\ k \geq 1\,, \quad s(F) \notin A_k\,, \\ &\Rightarrow \forall\ k \geq 1\,, \quad s(F) \in U_k \end{aligned}$$

et donc

$$s(F) \in \bigcap_{k\geq 1} U_k = \{s(I)\} \quad \text{soit} \quad s(F) = s(I)\,.$$

On vérifie alors sans peine que $W = f \circ s$ est l'application cherchée. Le théorème est ainsi démontré.

Reste à montrer les trois lemmes ci-dessus.

(i) Démonstration du lemme 3.1

Soit U un ouvert de $\mathbf{M}_+^n$; $s^{-1}\big(s(U)\big)$ et le $\mathcal{R}$-saturé de U, c'est-à-dire

$$s^{-1}\big(s(U)\big) = \bigcup_{Q,H} QUH\,.$$

$\mathbf{M}_+^n$ étant un groupe topologique, QUH est ouvert $\forall\ (Q, H) \in \mathbf{O} \times \mathbf{H}$. Il s'ensuit que $s^{-1}\big(s(U)\big)$ est ouvert dans $\mathbf{M}_+^n$ et donc $s(U)$ est un ouvert de $\mathbf{M}_+^n/\mathcal{R}$ par définition de la topologie quotient. Ainsi s est ouverte.

D'autre part,

$$\mathcal{G} = \left\{(F_1, F_2) \in \mathbf{M}_+^n \times \mathbf{M}_+^n \mid F_1 \,\mathcal{R}\, F_2\right\}.$$

Soit (F_1^m, F_2^m) une suite d'éléments de $\mathcal{G}$ qui converge vers (F_1, F_2). On veut montrer que $(F_1, F_2) \in \mathcal{G}$.

On a

$$F_1^m \,\mathcal{R}\, F_2^m, \quad \forall\, m \geq 0.$$

D'où $\exists\ (Q_m, H_m) \in \mathbf{O} \times \mathbf{H}$ tel que :

$$F_2^m = Q_m F_1^m H_m.$$

On a donc

$$H_m = (F_1^m)^{-1} Q_m^T F_2^m$$

de sorte que la suite $\left(H_m\right)$ est bornée, puisque les suites $\left(F_1^m\right)$, $\left(F_2^m\right)$ et $\left(Q_m\right)$ le sont. Il existe alors une sous-suite $m(k)$ telle que

$$H_{m(k)} \to H \in \mathbf{H}, \quad Q_{m(k)} \to Q \in \mathbf{O}.$$

Comme $F_i^{m(k)} \to F_i$, il vient

$$F_2 = \lim_k F_2^{m(k)} = \lim_k Q_{m(k)} F_1^{m(k)} H_{m(k)} = Q F_1 H$$

d'où $(F_1, F_2) \in \mathcal{G}$ qui est donc fermé.

Comme s est ouverte et $\mathcal{G}$ fermé, $\mathbf{M}_+^n/\mathcal{R}$ est séparé (cf. [B], chap. I, § 8, n° 3 prop. 8).

(ii) Démonstration du lemme 3.2

Pour montrer que $\mathbf{M}_+^n/\mathcal{R}$ est un espace normal, on va montrer que $\mathbf{M}_+^n/\mathcal{R}$ est localement compact et dénombrable à l'infini (cf. [S], T. 2, XXII, 5; 2 et 4, p. 357 et 359).

Soit $s(F) \in \mathbf{M}_+^n/\mathcal{R}$. $\mathbf{M}_+^n$ est localement compact, donc il existe un ouvert O et un compact K de $\mathbf{M}_+^n$ tels que

$$F \in O \subset K$$

d'où

$$s(F) \in s(O) \subset s(K).$$

Or s est ouverte donc $s(O)$ est ouvert, s est continue donc $s(K)$ est compact et $s(F)$ possède un voisinage compact.

$\mathbf{M}_+^n/\mathcal{R}$ étant séparé (voir lemme 3.1) il est localement compact.

D'autre part, $\mathbf{M}_+^n$ est dénombrable à l'infini et donc

$$\mathbf{M}_+^n = \bigcup_{m\geq 0} K_m$$

avec K_m compact. D'où :

$$\mathbf{M}_+^n/\mathcal{R} = s\Big(\bigcup_{m\geq 0} K_m\Big) = \bigcup_{m\geq 0} s(K_m)$$

et pour tout $m \geq 0$, $s(K_m)$ est compact. Ceci achève de montrer que $\mathbf{M}_+^n/\mathcal{R}$ est dénombrable à l'infini et le lemme 3.2 en résulte.

(iii) Démonstration du lemme 3.3

Soit $F \in \mathbf{M}_+^n$. Notons B_k la boule ouverte de $\mathbf{M}_+^n$ de centre F, de rayon $1/k$. On a

$$\bigcap_{k\geq 1} B_k = \{F\}$$

d'où

$$s(F) \in s\Big(\bigcap_{k\geq 1} B_k\Big) \subset \bigcap_{k\geq 1} s(B_k)\,.$$

Réciproquement, soit

$$s(G) \in \bigcap_{k\geq 1} s(B_k)\,.$$

Alors pour tout $k \geq 1$, il existe $F^k \in B_k$ tel que $s(F^k) = s(G)$. Or $F^k \to F$ quand $k \to +\infty$, d'où

$$s(G) = s(F^k) \to s(F)$$

et donc

$$s(G) = s(F)\,.$$

Finalement,

$$\{s(F)\} = \bigcap_{k\geq 1} U_k \quad \text{avec } U_k = s(B_k)$$

et chaque U_k est ouvert car B_k l'est et s est ouverte. D'où le lemme.

Remarques 3.2

- On peut définir W par

$$W(F) = (\det F)^{-1} f\big(s(F)\big)$$

de sorte que W vérifie, en outre,

$$\lim_{\det F \to 0} W(F) = +\infty$$

ce qui est physiquement souhaitable.

- Si W_1 et W_2 sont deux fonctions vérifiant les hypothèses a), b) et c) du théorème 2.2, il en est de même pour $\lambda_1 W_1 + \lambda_2 W_2$ pour tout $(\lambda_1, \lambda_2) \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+$, $(\lambda_1, \lambda_2) \neq (0,0)$. L'ensemble de ces fonctions est donc un cône convexe.

- Il serait intéressant de voir s'il est possible d'obtenir une formule explicite pour W (voir par exemple les formules trouvées dans [F3]).

Bibliographie

[B] BOURBAKI (N.) .— *Topologie Générale*, Hermann (1971).

[C] CHIPOT (M.) .— *Hyperelasticity for crystals*, European J. of Applied Mathematics, **1** (1990) pp. 113-129.

[CK] CHIPOT (M.) et KINDERLEHER (D.) .— *Equilibrium configuration of crystals*, Arch. Rat. Mech. Analysis, **103**, 3 (1988) pp. 237-277.

[Ci] CIARLET (P. G.) .— *Elasticité tridimensionnelle*, Masson (1986).

[F1] FONSECA (I.) .— *The lower quasiconvex enveloppe of the stored energy function of an elastic crystal*, J. Math. Pures Appl., **67** (1988) pp. 175-195; **107**, 3 (1989) pp. 195-223.

[F2] FONSECA (I.) .— *Phase transitions of elastic solid materials*, Arch. Rat. Mech. Analysis.

[F3] FONSECA (I.) .— *Variational methods for elastic crystals*, Ph'D Thesis, University of Minnesota (1985).

[GT] GILBARG (D.) et TRUDINGER (N. S.) .— *Elliptic partial differential equations of second order*, Springer Verlag (1985).

[S] SCHWARTZ (L.) .— *Topologie Générale et Analyse Fonctionnelle*, Hermann (1970).