

## Équations aux dérivées partielles et applications

M. Pierre-Louis LIONS, membre de l'Institut  
(Académie des Sciences), professeur

### **COURS : De la Physique Atomique à l'Élasticité non linéaire : une approche mathématique (suite)**

Suite du cours de l'année précédente, le cours de cette année a été consacré à l'étude de la chaîne de modèles mathématiques permettant d'« aller » de la Physique Atomique et Moléculaire jusqu'à l'Élasticité non linéaire et les propriétés mécaniques (macroscopiques) des solides. Après avoir introduit les modèles de type Hartree-Fock pour les cristaux (par exemple) et donné les premiers éléments de leur analyse mathématique, nous avons abordé i) la limite macroscopique c'est-à-dire la convergence de modèles moléculaires vers des modèles de Mécanique des milieux continus, ii) la question de la géométrie des réseaux pour lesquels il est possible de définir la notion d'énergie moyenne (ou par unité de volume) et iii) la modélisation de réseaux aléatoires et l'obtention rigoureuse d'énergie moyenne (ou par unité de volume) dans ce cadre.

#### **1. Modèles de type Hartree-Fock et limite thermodynamique**

Il est possible d'obtenir par limite thermodynamique à partir des modèles moléculaires de type Hartree-Fock des modèles mathématiques pour des réseaux cristallins i.e. périodiques. Cette analyse formelle peut être justifiée rigoureusement pour le modèle dit de Hartree-Fock restreint et certains modèles de Hartree (le cas général restant un problème ouvert). Pour le modèle complet de Hartree-Fock, cette analyse permet d'introduire le problème suivant dans lequel on suppose, pour alléger les notations, que le réseau périodique est  $\mathbf{Z}^3$  et qu'en chaque site du réseau est placée une charge positive unitaire (les adaptations à un réseau périodique quelconque et à un système moléculaire quelconque placé sur chacun des sites sont immédiates).

On introduit l'ensemble  $\kappa$  des opérateurs  $K$  auto-adjoints sur  $L^2(\mathbf{R}^3)$  vérifiant les propriétés suivantes (en notant  $Q = \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)^3$ )

- i)  $0 \leq K \leq 1$  (opérateur unité),
- ii)  $K$  est de trace localement intégrale et  $\int_Q \text{Tr}(K) dx = 1$ ,
- iii)  $K$  commute avec les translations de  $\mathbf{Z}^3$ ,
- iv)  $\nabla \cdot K \nabla$  est de trace localement intégrable.

Et on note  $\rho(x,y)$  ( $x \in \mathbf{R}^3, y \in \mathbf{R}^3$ ) le noyau de  $K$  et  $\rho = \rho(x) = \rho(x,x)$ .

Le problème de Hartree-Fock est alors donné par

$$(1) \quad I^{HF} = \inf\{E^{HF}(K)/K \in \kappa\}$$

où

$$(2) \quad E^{HF}(K) = \int_Q \text{Tr}(\nabla \cdot K \nabla) - \frac{1}{2} G \rho dx + \frac{1}{2} D(\rho, \rho) - \frac{1}{2} \int_Q \int_{\mathbf{R}^3} \frac{|\rho(x,y)|^2}{|x-y|} dx dy$$

$$(3) \quad D(\rho, \rho) = \int_Q \int_Q \rho(x) \rho(y) G(x-y) dx dy,$$

et  $G$  est la solution ( $\mathbf{Z}^3$ -) périodique de

$$(4) \quad -\Delta G = 4\pi \left( \sum_{k \in \mathbf{Z}^3} \delta_k - 1 \right), \int_Q G dx = 0$$

On démontre alors le résultat suivant

**THÉORÈME 1** — *Le problème de Hartree-Fock (1) admet un point de minimum.*

Signalons qu'il est possible de réécrire ce problème en « diagonalisant » les opérateurs  $K$  grâce aux ondes de Bloch et que l'on peut écrire rigoureusement les équations d'Euler-Lagrange associées à (1), qui précisent les équations dites de Hartree-Fock pour les solides bien connues en Physique de la Matière Condensée.

## 2. Limite macroscopique

La limite macroscopique peut être modélisée et établie de façon rigoureuse pour une large classe de modèles moléculaires contenant aussi bien des modèles phénoménologiques (potentiels de paire) que des modèles « quantiques ». Nous la détaillons ici pour les modèles de Thomas-Fermi ou de Thomas-Fermi-von Weizsäcker. On introduit un domaine  $\Omega$  ouvert lipschitzien de  $\mathbf{R}^3$  (configuration de référence du solide), un réseau périodique  $\mathcal{L}$  (typiquement le réseau d'équilibre du cristal) dont la cellule fondamentale est notée  $Q(\mathcal{L})$  et enfin un difféomorphisme  $u$  de classe  $C^1$  sur  $\bar{\Omega}$  (la déformation macroscopique). On normalise  $\mathcal{L}$  de sorte que  $\text{vol}(Q(\mathcal{L})) = 1$  et on suppose, comme dans la section précédente, qu'en chaque site de  $\mathcal{L}$  est placée une charge positive unitaire. L'énergie du réseau déformé est alors donnée par

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}_\varepsilon(u) = & \frac{1}{N} \inf \left\{ \varepsilon^2 \int_{\mathbb{R}^3} c_0 |\nabla \sqrt{\rho}|^2 + \rho^{5/3} dx + \varepsilon \left[ - \sum_{i \in \mathcal{L} \cap (\frac{1}{\varepsilon} \Omega)} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(x)}{|x - u(\varepsilon i)|} dx \right. \right. \\
 (5) \quad & \left. \left. + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(x)\rho(y)}{|x - y|} dx dy \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j \in \mathcal{L} \cap (\frac{1}{\varepsilon} \Omega)} \frac{1}{|u(\varepsilon i) - u(\varepsilon j)|} \right] \rho \geq 0, \int_{\mathbb{R}^3} \rho dx = N \right\}
 \end{aligned}$$

où  $N = \#(\varepsilon \mathcal{L} \cap \Omega)$ ,  $c_0 \geq 0$  ( $c_0 = 0$  correspond au modèle de Thomas-Fermi et  $c_0 > 0$  à celui de Thomas-Fermi-von Weizsäcker). Le petit paramètre  $\varepsilon > 0$  correspond à l'échelle microscopique et il convient d'insister sur le fait que (5) correspond à un choix d'échelles particulier et que d'autres régimes sont possibles et étudiables mathématiquement.

On note enfin pour un réseau périodique  $\mathcal{L}'$  quelconque l'énergie moyenne (déduite rigoureusement de l'énergie moléculaire par limite thermodynamique dans le cours de l'année dernière) donnée par

$$\begin{aligned}
 E(\mathcal{L}') = & \inf \left\{ \int_{Q(\mathcal{L}')} c_0 |\nabla \sqrt{\rho}|^2 + \rho^{5/3} - G_{\mathcal{L}'} \rho dx + \frac{1}{2} \int_{Q(\mathcal{L}')} \int_{Q(\mathcal{L}')} \rho(x) G_{\mathcal{L}'}(x - y) dx dy \right. \\
 (6) \quad & \left. \rho \mathcal{L}' \text{ - périodique, } \rho \geq 0, \int_{Q(\mathcal{L}')} \rho dx = 1 \right\}.
 \end{aligned}$$

On démontre alors le résultat suivant

**THÉORÈME 2** — Si  $\varepsilon$  tend vers 0, l'énergie  $\mathcal{E}_\varepsilon(u)$  converge vers  $\frac{1}{\text{vol}(\Omega)} \int_{\Omega} E[\nabla u(x) \cdot \mathcal{L}] dx$ .

*Remarques :* i) La densité d'énergie de déformation ( $A \rightarrow E[A \cdot \mathcal{L}]$ ) ne possède aucune « bonne » propriété mathématique du point de vue du calcul des variations (en particulier, elle n'est pas quasi-convexe) car elle reflète les invariances et symétries du réseau cristallin sous-jacent.

ii) Il est possible d'obtenir un développement asymptotique en  $\varepsilon$  jusqu'à l'ordre 2 combinant des termes de surface et des termes de volume, qu'il convient également d'analyser mathématiquement.

iii) L'approche précédente peut être modifiée pour aborder rigoureusement les notions d'énergie d'interface (ou d'énergie de défauts...) ainsi que la limite macroscopique pour des poly-cristaux.

### 3. Énergies moyennes et réseaux

La limite macroscopique établie précédemment montre l'importance de l'énergie moyenne (ou par unité de volume) du réseau considéré. Et il est clair que l'hypothèse d'un réseau périodique infini (« cristal parfait ») est très restrictive du point de vue des solides dont on veut étudier les propriétés mécaniques (macroscopiques).

piques). C'est pourquoi il est naturel d'aborder la question de l'obtention d'une énergie moyenne pour des réseaux plus généraux. Plusieurs axes de recherches sont possibles et nous nous contenterons d'en signaler deux.

Tout d'abord, il est possible de **caractériser** les réseaux pour lesquels une notion d'énergie moyenne peut-être obtenue rigoureusement.

D'autre part, une notion naturelle du point de vue mécanique est la notion de réseau aléatoire stationnaire. Il est en fait possible de donner un sens mathématique précis à cette notion et d'obtenir des résultats mathématiques aussi bien sur la limite thermodynamique ce qui permet de définir l'énergie moyenne du réseau (qui est déterministe !), que sur la limite macroscopique.

#### PUBLICATIONS

- *Ergodicity of diffusion processes*. En collaboration avec M. Musiela.
- *Large investor trading impacts on volatility*. En collaboration avec J.-M. Lasry. À paraître dans Paris-Princeton Lectures in Finance.
- *Towards a self-consistent theory of volatility*. En collaboration avec J.-M. Lasry. À paraître dans Paris-Princeton Lectures in Finance.
- *Correlations and bounds for stochastic volatility models*. En collaboration avec M. Musiela. À paraître dans Ann. IHP. Analyse Non Linéaire.
- *Instantaneous self-fulfilling of long-term prophecies on the probabilistic distribution of financial asset values*. En collaboration avec J.-M. Lasry. À paraître dans Paris-Princeton Lectures in Finance.
- *From quantum chemistry to continuum mechanics : a mathematical journey : From atoms to crystals*. En collaboration avec C. Le Bris. À paraître dans Bull. Amer. Math. Soc.
- *Some properties of diffusion processes with singular coefficients*. En collaboration avec M. Musiela. À paraître dans Comm. Appl. Anal.
- *Homogenization of « viscous » Hamilton-Jacobi equations in stationary ergodic media*. En collaboration avec P.E. Souganidis. Comm. PDE, 30 (2005), p. 335-375.
- *On the uniqueness of the solution of the two-dimensional Navier-Stokes equation with a Dirac mass as initial vorticity*. En collaboration avec I. Gallagher et Th. Gallay.
- *Homogenization of the Euler system in a 2D porous medium*. En collaboration avec N. Masmoudi. J. Math. Pures Appl., 84 (2005), p. 1-20.
- *On the homogenization and ergodic problems for fully nonlinear equations in half-space type domains*. En collaboration avec G. Barles, F. Da Lio et P.E. Souganidis.

— *On the energy of some microscopic stochastic lattices*. En collaboration avec X. Blanc et C. Le Bris.

## MISSIONS, INVITATIONS, CONFÉRENCES

- Conférence à l'INRIA, Sophia-Antipolis (28 juin 2004).
- Conférence au Congrès M2NTS, Leuven (6 juillet 2004).
- Conférence au Colloque en l'honneur d'I. Ekeland, Paris (7 juillet 2004).
- Conférence au Colloque en l'honneur de J.-P. Dias, Lisbonne (8 septembre 2004).
- Conférence au Colloque « The Renato Cacciopoli Centenary Conference », Naples (23 septembre 2004).
- Série de trois conférences à l'Université de Minneapolis, Distinguished Ordway Lectures Series (27 septembre - 1<sup>er</sup> octobre 2004).
- Mission à l'Université de Corte (14 décembre 2004).
- Conférence à l'INRIA, Sophia-Antipolis (20 décembre 2004).
- Cours (8 h) à l'Université d'Austin (17-28 janvier 2005).
- Conférence au Colloque « Kinetic models », Austin (4 mars 2005).
- Cours (8 h-suite) à l'Université d'Austin (21 février - 5 mars 2005).
- Mission à Madrid, IMU (11-12 mars 2005).
- Conférence publique « Du Courant-Hilbert aux simulations numériques », Cycle « Un texte, un mathématicien », Bibliothèque Nationale de France, Paris (18 mai 2005).
- Série de trois conférences à l'Université de Rome I La Sapienza (25-26 mai 2005).
- Cours (6 h) au Colloque du GDR « Équations aux Dérivées Partielles, Forges-les-Eaux (8-9 juin 2005).
- Conférence au Colloque en l'honneur de B. Engquist, Stockholm (16-17 juin 2005).

## RESPONSABILITÉS COLLECTIVES ET FONCTIONS DIVERSES

- Professeur à temps partiel à l'École Polytechnique.
- Président de la Commission d'Évaluation (des Projets et Programmes) de l'INRIA.
- Président du Conseil Scientifique du CEA-DAM.
- Président du Conseil Scientifique d'EDF.
- Président du Conseil Scientifique de France-Telecom.

- Président du jury du prix « Science et Défense ».
- Membre du Comité de Programme de ICM 2006.
- Membre du Visiting Committee du CEA.
- Membre du Conseil Scientifique de l'Institut Europlace de Finance.
- Membre du Scientific Advisory Panel de l'European Mathematical Society.
- Membre fondateur du Comité International de l'« International Summer School of Applied Mathematics », Morningside Institute, Chinese Academy of Sciences.
- Administrateur d'Alcatel.
- Conseiller Scientifique auprès de BNP-Paribas, CALYON, EADS-LV.